



دانشگاه تهران

پردیس دانشکدگان فنی

دانشکده مهندسی عمران

مدل سازی چندمقیاسی فرآیندهای حرارتی - هیدرومکانیکی - شیمیایی

در محیط های متخلخل ناهمگن

پایان نامه یا رساله برای دریافت درجه کارشناسی ارشد

در رشته مهندسی عمران گرایش سازه

نام دانشجو:

علیرضا محمودیون

استاد راهنما:

دکتر سعید سعیدمنیر

استاد مشاور:

دکتر سهیل محمدی

شهریورماه ۱۴۰۴

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

دانشگاه تهران
پردیس دانشکده‌های فنی
دانشکده مهندسی عمران

گواهی دفاع از پایان‌نامه کارشناسی ارشد

هیأت داوران پایان‌نامه کارشناسی ارشد آقای علیرضا محمودیون به شماره دانشجویی ۸۱۰۲۰۱۱۳۰ در رشته عمران گرایش سازه را در تاریخ ۱۴۰۴/۰۷/۱۲ با عنوان "مدل‌سازی چندمقیاسی فرآیندهای حرارتی- هیدرومکانیکی- شیمیایی در محیط‌های متخلخل ناهمگن"

به عدد به حروف

--	--

با نمره نهایی

ارزیابی کرد.

و درجه

ردیف	مشخصات هیئت داوران	نام و نام خانوادگی	مرتبه دانشگاهی	دانشگاه	امضاء
۱	استاد راهنما	دکتر سعید سعیدمنیر	استادیار	دانشگاه تهران	
۲	استاد مشاور	دکتر سهیل محمدی	استاد	دانشگاه تهران	
۳	استاد مدعو	دکتر علیرضا صادقی‌راد	استادیار	دانشگاه امیرکبیر	
۴	داور و نماینده شورای تحصیلات تکمیلی	دکتر مزده سجادی	استادیار	دانشگاه تهران	

نام و نام خانوادگی معاون آموزشی و تحصیلات تکمیلی
پردیس دانشکده‌های فنی:
تاریخ و امضاء:

نام و نام خانوادگی معاون آموزشی و تحصیلات تکمیلی
دانشکده مهندسی عمران:
تاریخ و امضاء:



به نام خدا



گواهی اصالت اثر

اینجانب علیرضا محمودیون دانشجوی مقطع کارشناسی ارشد رشته مهندسی عمران گرایش سازه دانشکده مهندسی عمران دانشگاه تهران گواهی می‌دهم که:

- ۱- مطالب این پایان‌نامه حاصل کار پژوهشی اینجانب است؛
- ۲- محتوای این پایان‌نامه پیش از این برای دریافت هیچ مدرکی ارائه نشده است؛
- ۳- در انجام پژوهش و تهیه این پایان‌نامه، همه موازین اخلاق پژوهش رعایت شده است؛
- ۴- ارائه هرگونه دستاورد علمی یا صنعتی، همچون انتشار مقاله، چاپ کتاب، ثبت اختراع و مشابه آن، که برگرفته از این پایان‌نامه باشد، منوط به تایید استاد راهنما، رعایت حقوق مالکیت مادی و معنوی دانشگاه تهران (مطابق مقررات دانشگاه) و ذکر وابستگی به دانشگاه تهران است.

نام و نام خانوادگی دانشجو:

علیرضا محمودیون

امضاء:

تقدیم به

پدر و مادر مهربانم که با مهر و صبر خود چراغ راه من بوده‌اند و به خواهرم عزیزم که با همراهی و دلگرمی،
مسیر تلاش‌هایم را روشن کرده است.

تشکر و قدردانی

اکنون که به یاری خدا این پژوهش به پایان رسید، بر خود لازم می‌دانم مراتب تشکر و قدردانی خود را از همه کسانی که من را در این مسیر یاری نمودند ابراز دارم. پیش از همه از صمیم قلب از اساتید گرامی خودم جناب آقای دکتر سعیدمنیر و جناب آقای دکتر محمدی بابت همراهی، راهنمایی‌های ارزشمند و حمایت بی‌دریغشان در طول انجام این پایان‌نامه تشکر می‌کنم. راهنمایی‌های علمی و فنی ایشان زمینه‌ساز پیشرفت این پژوهش بوده و بدون حمایت‌هایشان، رسیدن به این مرحله امکان‌پذیر نبود. این موفقیت را مدیون لطف و پشتیبانی شما می‌دانم. شاگردی شما افتخار بزرگی در زندگی من بوده و بهترین آرزوها را برای شما دارم.

از روحیه همکاری و دلسوزی دوستان محترم آزمایشگاه محاسبات سریع، مخصوصاً مسئولیت محترم آزمایشگاه، سرکار خانم کاظمی، سپاس‌گزارم که فضای مناسبی برای رشد علمی و تحقیقاتی فراهم آوردند. و در آخر از هم‌داوران و اساتید محترم خانم دکتر مژده سجادی و آقای دکتر صادقی‌راد کمال تشکر و قدردانی را دارم.

چکیده

در سال‌های اخیر تحلیل محیط‌های چند فیزیکی به دلیل کاربردهای گسترده در علوم مهندسی از جمله بافت‌های بیولوژیکی، ذخیره‌سازی کربن دی‌اکسید، تحلیل تورم در خاک‌های واکنش دهنده، دفن زباله‌های هسته‌ای و بسیاری دیگر از زمینه‌ها مورد توجه مهندسان قرار گرفته است. در بسیاری از موارد لزوم لحاظ اثرات مکانیکی، هیدرولیکی، گرمایی و شیمیایی با توجه به عوامل محرک و فیزیک مسئله، اجتناب ناپذیر است. از طرفی فرض همگنی در محیط‌های چند فیزیکی در واقعیت باعث بروز خطای غیر قابل قبول در نتایج می‌شود. لحاظ اثرات ناهمگنی در تحلیل‌های عددی به صورت مستقیم، مستلزم متحمل شدن هزینه‌های محاسباتی زیاد و مشخصاً در روش اجزای محدود، مستلزم استفاده از مش‌بندی بسیار ریز می‌شود که در بسیاری از موارد با رایانه‌های موجود، این کار امکان پذیر نیست و یا هزینه‌های زیادی دارد. در تحقیق حاضر تلاش شده است که اثرات ناهمگنی در این نوع محیط با بکارگیری روش چندمقیاسی وارد تحلیل شده و با استفاده از همگن‌سازی مرتبه اول، ابتدا اثرات ناهمگنی در مقیاس میکرو لحاظ و معادلات مکانیکی-هیدرولیکی-گرمایی-شیمیایی به صورت کاملاً هم‌پسته در فرم ضعیف، حل شوند و سپس با استفاده از اصل میانگین‌گیری، پارامترهای ماکرو محاسبه شوند. برای برقراری سازگاری انرژی بین دو مقیاس از اصل هیل-مندل تعمیم‌یافته، برای گسسته‌سازی در دامنه از روش اجزای محدود و برای گسسته‌سازی در زمان از روش نیومارک تعمیم‌یافته استفاده شده است. پس از گسسته‌سازی، با استفاده از روش نیوتون-رافسون معادلات خطی‌سازی می‌شوند. در مسائل حل شده در این تحقیق، تلاش شده است با تغییر اندازه مش‌بندی در ماکرو و مقایسه آن با نتایج تحلیل مستقیم، کارایی روش چندمقیاسی، ارزیابی شود.

کلید واژه: محیط متخلخل ناهمگن، تحلیل چندمقیاسی، روش اجزای محدود، خاک‌های واکنش دهنده

فهرست مطالب

فصل ۱: مقدمه	۱
۱-۱ پیش گفتار	۱
۲-۱ تعریف مسئله	۳
۳-۱ اهداف تحقیق	۴
۴-۱ ساختار پایان نامه	۴
فصل ۲: مروری بر مطالعات پیشین	۵
۲-۱ مقدمه	۵
۲-۲ محیط های متخلخل واکنش دهنده با لحاظ اثرات گرمایی	۵
۳-۲ روش چندمقیاسی	۱۳
فصل ۳: فیزیک حاکم بر مسئله خاک های اشباع با اثرات گرمایی و شیمیایی	۱۷
۳-۱ مقدمه	۱۷
۳-۲ آشنایی با رفتار خاک های اشباع	۱۷
۳-۳ معادلات حاکم بر مسئله	۲۰
۳-۳-۱ معادله بقای جرم سیال	۲۱
۳-۳-۲ معادله بقای جرم اسکلت جامد	۲۴
۳-۳-۳ معادله تعادل غلظت حل شونده	۲۵
۳-۳-۴ معادله تعادل مکانیکی محیط	۲۶

۳-۳-۵	معادله تعادل انرژی داخلی:	۲۶
۳-۳-۶	فرم نهایی معادلات و شرایط مرزی	۲۸
فصل ۴: تئوری چندمقیاسی		
۴-۱	مقدمه	۳۰
۴-۲	کلیات روش همگن سازی محاسباتی	۳۰
۴-۳	تئوری همگن سازی محاسباتی	۳۱
۴-۴	معادلات حاکم بر دو مقیاس	۳۴
۴-۴-۱	فرم ضعیف معادلات در مقیاس ماکرو	۳۴
۴-۴-۲	فرم ضعیف معادلات در مقیاس میکرو	۳۶
۴-۶	اصل هیل - مندل تعمیم یافته	۳۷
۴-۷	فرمول بندی روش اجزا محدود، برای حل مسئله ماکرو:	۴۰
۴-۸	فرمول بندی روش اجزا محدود، برای حل مسئله میکرو:	۴۹
۴-۸-۱	گسسته سازی در مکان	۵۰
۴-۸-۲	گسسته سازی زمانی	۵۲
۴-۸-۳	شرط مرزی خطی	۵۵
۴-۸-۴	شرط مرزی تناوبی	۵۹
فصل ۵: نتایج مدل سازی عددی		
۵-۱	مقدمه	۷۱
۵-۲	انتقال حرارت با سازوکار همرفت و رسانش (TH)	۷۱
۵-۳	مسئله تحکیم ابوستیت (THM)	۷۴

۷۸	 ۵-۴ ستون الاستیک ناهمگن (HMC و THMC)
۸۶	 ۵-۵ محیط الاستیک دوبعدی با اثرات گرمایی (THMC)
۹۹	 فصل ۶: نتیجه گیری و ارائه پیشنهادها
۹۹	 ۶-۱ نتیجه گیری
۱۰۱	 ۶-۲ پیشنهادها و تحقیقات پیش رو
۱۰۲	 مراجع

فهرست اشکال و جدول‌ها

جدول ۱-۳ شرایط مرزی دیریکله و نیومن برای معادلات حاکم در این پژوهش.....	۲۸
شکل ۱-۴ مدل شماتیک روش همگن‌سازی محاسباتی.....	۳۱
شکل ۲-۴ توصیف نفاذ گرهی در شرط مرزی تناوبی.....	۵۹
شکل ۱-۵ هندسه و شرایط مرزی مسئله همرفت رسانش.....	۷۱
جدول ۱-۵ مشخصات محیط در مسئله انتقال حرارت همرفت-رسانش.....	۷۲
شکل ۲-۵ مش‌بندی مسئله انتقال حرارت همرفت-رسانش (الف) مش‌بندی مدل‌سازی DNS (ب) مش‌بندی مدل‌سازی MS.....	۷۳
شکل ۳-۵ توزیع دما در ارتفاع برای مسئله انتقال حرارت همرفت-رسانش.....	۷۳
جدول ۲-۵ مشخصات محیط در مسئله ستون خاک اشباع.....	۷۴
شکل ۴-۵ هندسه و مش‌بندی مسئله ابوسیت (الف) مش‌بندی مدل DNS (ب) مش‌بندی مدل MS.....	۷۵
شکل ۵-۵ توزیع دما در زمان برای مسئله تحکیم در ستون خاک اشباع.....	۷۶
شکل ۶-۵ توزیع فشار در زمان برای مسئله تحکیم در ستون خاک اشباع.....	۷۷
شکل ۷-۵ مقادیر مطلق جابجایی در زمان برای مسئله تحکیم در ستون خاک اشباع.....	۷۸
شکل ۸-۵ هندسه، مش‌بندی و شرایط مرزی مسئله ستون خاک ناهمگن (الف) مدل DNS (ب) مدل MS ..	۷۹
جدول ۳-۵ مشخصات محیط در مسئله ستون خاک ناهمگن.....	۸۰
شکل ۹-۵ تغییرات پارامترهای ماکرو بر حسب زمان در نقطه A، مقایسه نتایج مطالعه مرجع با مدل‌سازی DNS و MS (الف) جابجایی قائم، (ب) فشار آب حفره‌ای، (ج) دما، (د) غلظت ماده حل‌شونده.....	۸۲
شکل ۱۰-۵ میانگین جابجایی قائم، فشار حفره‌ای، دما و غلظت حل‌شونده در بلوک میانی بر حسب زمان به تفکیک ماتریس و ذره، مقایسه مدل DNS و MS.....	۸۴
شکل ۱۱-۵ مقایسه نتایج مدل DNS و MS-LBC و MS-PBC برای پارامترهای میدان‌های جابجایی، فشار حفره‌ای، دما و غلظت حل‌شونده در بلوک میانی.....	۸۵
شکل ۱۲-۵ هندسه، مش‌بندی و شرایط مرزی مسئله دوبعدی (الف) مدل DNS (ب) مدل MS.....	۸۷
جدول ۴-۵ مشخصات فیزیکی محیط در مسئله دو بعدی.....	۸۸
شکل ۱۳-۵ مقایسه نتایج نمودار (الف) فشار حفره‌ای، (ب) دما، (ج) غلظت حل‌شونده، بر حسب زمان در نقطه‌ی A در مدل DNS و MS.....	۸۹

- شکل ۱۴-۵ مقایسه نتایج نمودار (الف) تغییر مکان افقی، (ب) فشار حفره‌ای، (ج) دما، (د) غلظت حل‌شونده، بر حسب زمان در نقطه‌ی B در مدل DNS و MS ۹۰
- شکل ۱۵-۵ مقایسه نتایج مدل DNS و MS با شرط مرزی خطی و تناوبی برای میانگین حجمی جابجایی قائم در (الف) ماتریس و (ب) ذره برای بلوک مورد نظر در دامنه مسئله ۹۱
- شکل ۱۶-۵ مقایسه نتایج مدل DNS و MS با شرط مرزی خطی و تناوبی برای میانگین حجمی (الف) و (ب) فشار حفره‌ای، (ج) و (د) دما، (ه) و (و) غلظت حل‌شونده، در ماتریس و ذره برای بلوک هدف، در دامنه مسئله ۹۲
- شکل ۱۷-۵ مقایسه نتایج مدل DNS و MS برای شار قائم معادله مکانیکی (تنش قائم) در بلوک هدف برای (الف) ماتریس و (ب) ذره ۹۳
- شکل ۱۸-۵ مقایسه نتایج مدل DNS و MS برای شار قائم معادله سیال (سرعت قائم سیال) در بلوک هدف برای (الف) ماتریس و (ب) ذره ۹۴
- شکل ۱۹-۵ مقایسه نتایج مدل DNS و MS برای شار قائم معادله بالانس انرژی در بلوک هدف برای (الف) ماتریس و (ب) ذره ۹۴
- شکل ۲۰-۵ مقایسه نتایج مدل DNS و MS برای شار قائم معادله تعادل غلظت حل‌شونده در بلوک هدف برای (الف) ماتریس و (ب) ذره ۹۵
- شکل ۲۱-۵ مقایسه نتایج مدل DNS و MS برای میدان تنش موثر قائم، فشار، دما و غلظت در لحظه پایدار ۹۶
- شکل ۲۲-۵ بردار سرعت در دامنه مسئله در حالت پایدار نهایی (الف) در مدل DNS، (ب) در مدل MS .. ۹۷

فصل ۱: مقدمه

۱-۱ پیش گفتار

محیط‌های متخلخل^۱ یکی از پیچیده‌ترین و در عین حال پراستفاده‌ترین سیستم‌ها در علوم مهندسی و زمین‌شناسی به شمار می‌روند. این محیط‌ها متشکل از یک فاز جامد هستند که درون آن فضاها خالی یا منافذی وجود دارد که می‌توانند با یک یا چند فاز سیال پر شوند. به بیان دیگر، محیط متخلخل ساختاری است که در آن یک اسکلت جامد (معمولاً شامل ذرات یا دانه‌ها) در کنار منافذی با اشکال، اندازه‌ها و توزیع‌های مختلف قرار گرفته است. این ویژگی باعث می‌شود محیط‌های متخلخل رفتار بسیار متنوع و وابسته به مقیاس از خود نشان دهند. خاک‌ها، سنگ‌های رسوبی، بسترهای آبرفتی، مصالح ساختمانی مانند بتن و بافت‌های زیستی نمونه‌هایی از محیط‌های متخلخل هستند که در طبیعت یا کاربردهای مهندسی به‌طور گسترده مشاهده می‌شوند.

تخلخل^۲، نفوذپذیری، توزیع اندازه حفرات، و خصوصیات سطحی فاز جامد از جمله مهم‌ترین ویژگی‌های فیزیکی این محیط‌ها محسوب می‌شوند. اما آنچه باعث پیچیدگی تحلیل این سامانه‌ها می‌شود، درگیر بودن آن‌ها با مجموعه‌ای از فرآیندهای هم‌زمان و جفت شده است که به‌طور متقابل بر یکدیگر اثر می‌گذارند. در بسیاری از کاربردهای عملی، محیط‌های متخلخل نه تنها تحت تأثیر جریان سیال (فرآیند هیدرولیکی) هستند، بلکه هم‌زمان پدیده‌هایی مانند انتقال حرارت، تغییر شکل مکانیکی و حتی واکنش‌های شیمیایی نیز در آن‌ها رخ می‌دهد. این نوع از پدیده‌های چندفیزیکی که به‌صورت توأم در یک محیط متخلخل اتفاق می‌افتند، در ادبیات علمی با عنوان پدیده‌های THMC شناخته می‌شوند که به اختصار معرف Thermal-Hydraulic-Mechanical-Chemical هستند.

مدل‌سازی دقیق این پدیده‌های THMC همواره یکی از چالش‌های عمده در مهندسی محیط‌های متخلخل بوده است. این مدل‌ها باید قادر باشند رفتار هم‌زمان و برهم‌کنشی چند فرآیند فیزیکی را در شرایط پیچیده، ناپایدار و اغلب غیرخطی بازنمایی کنند. از سوی دیگر، اهمیت چنین مدل‌سازی‌هایی زمانی برجسته می‌شود که به کاربردهای متنوع و حیاتی آن‌ها در شاخه‌های مختلف مهندسی و علوم زمین توجه کنیم.

¹ Porous Media

² Porosity

یکی از مهم‌ترین کاربردهای محیط‌های متخلخل در مهندسی ژئوتکنیک است، جایی که رفتار لایه‌های خاک تحت بارگذاری، تغییرات دما، نشت آب و واکنش‌های شیمیایی باید به‌دقت پیش‌بینی شود. به‌ویژه در طراحی سازه‌های زیرزمینی مانند تونل‌ها، سدهای خاکی، دیوارهای حائل و پی‌های عمیق، نیاز است که پایداری محیط متخلخل در برابر تغییرات THMC ارزیابی شود. برای مثال، در سدهای خاکی، جریان تراوش، تغییر شکل‌های ناشی از نشت، افزایش دمای داخلی در اثر فرایندهای گرمایی، و خوردگی یا هوازگی مصالح خاکی، به‌صورت هم‌زمان رخ می‌دهند.

در حوزه نفت و گاز، محیط‌های متخلخل به‌عنوان مخازن هیدروکربنی شناخته می‌شوند. مدل‌سازی دقیق رفتار این مخازن، به‌ویژه در فرآیندهای تزریق آب، گاز یا بخار مانند (EOR – Enhanced Oil Recovery)، به‌شدت به فهم درست از برهم‌کنش‌های THMC وابسته است. گرادیان‌های دما و فشار، انبساط حرارتی سنگ، حل شدن املاح یا تشکیل رسوبات معدنی در منافذ، همه عواملی هستند که می‌توانند بهره‌برداری از یک مخزن را دچار چالش کنند. همچنین در ذخیره‌سازی زیرزمینی گاز طبیعی یا CO_2 نیز تحلیل رفتار محیط متخلخل به‌شکل THMC امری حیاتی است.

در مهندسی ژئوترمال، بهره‌برداری از منابع انرژی زمین‌گرمایی نیازمند درک دقیق انتقال حرارت و حرکت سیال در محیط‌های متخلخل گرم و فشرده است. تغییرات شدید دما می‌تواند باعث انبساط یا ترک‌خوردگی سازه‌های سنگی شده و خواص مکانیکی آن را تغییر دهد. از طرفی، ورود یا خروج سیال در دماهای بالا ممکن است باعث تغییرات شیمیایی در ساختار سنگ گردد. این پدیده‌ها در کنار هم، تنها با مدل‌های THMC قابل تحلیل دقیق هستند.

در حوزه محیط‌زیست و منابع آب نیز مدل‌سازی THMC نقش مهمی ایفا می‌کند. آلودگی آب‌های زیرزمینی در اثر نشت مواد شیمیایی از منابع سطحی یا دفن‌گاه‌های زباله، نیازمند بررسی هم‌زمان فرآیندهای نفوذ، جذب سطحی، تبادل یونی، تجزیه شیمیایی و انتقال گرماست. به‌ویژه در پروژه‌های دفع زباله‌های هسته‌ای، محیط‌های متخلخل مانند خاک‌های رس یا سنگ‌های رسی به‌عنوان مانع طبیعی برای جلوگیری از نشت رادیونوکلیدها¹ به کار می‌روند. در این موارد، باید اطمینان حاصل شود که در بلندمدت، ترکیب فرآیندهای THMC باعث تضعیف عملکرد این مانع نخواهد شد.

در مهندسی عمران و ساخت‌وساز نیز مصالحی مانند بتن به‌عنوان محیط‌های متخلخل پیچیده در نظر گرفته می‌شوند. در تحلیل رفتار بتن در شرایط شدید مانند آتش‌سوزی، پدیده‌هایی مانند تبخیر آب درون حفرات، انتقال

¹ Radionuclides

حرارت، انبساط حرارتی، ترک خوردگی و واکنش‌های شیمیایی (مانند هیدراسیون^۱ یا واکنش‌های سولفاتی) به‌طور هم‌زمان رخ می‌دهند. تحلیل این رفتارها بدون در نظر گرفتن چارچوب THMC ممکن نیست. با توجه به موارد فوق، روشن است که مدل‌سازی محیط‌های متخلخل تحت شرایط THMC نه تنها یک نیاز پژوهشی، بلکه یک ضرورت مهندسی در پروژه‌های زیرزمینی، انرژی، محیط زیست و زیرساخت‌های عمرانی است.

۲-۱ تعریف مسئله

یکی از اصلی‌ترین چالش‌ها در مدل‌سازی محیط‌های متخلخل، ناهمگنی ذاتی^۲ آن‌ها در مقیاس‌های مختلف است. این ناهمگنی‌ها می‌توانند منجر به رفتارهای مؤثر بسیار متفاوتی در مقیاس بزرگ شوند؛ به‌طوری که صرف استفاده از مقادیر متوسط یا خواص تجربی، منجر به عدم دقت یا حتی اشتباه در تحلیل مهندسی خواهد شد. رویکردهای کلاسیک مدل‌سازی، که اغلب مبتنی بر فرض همگن بودن خواص در مقیاس ماکرو هستند، قادر به بازنمایی تأثیر دقیق این ناهمگنی‌ها نیستند. برای لحاظ اثرات ناهمگنی راه اول، انجام آزمایش بر روی نمونه‌ای از محیط می‌باشد که اولاً خطای زیادی دارد و دوماً یک مدل جامع ارائه نمی‌دهد و صرفاً در یک مسئله خاص کاربرد دارد. راه حل دوم استفاده از روش تحلیل مستقیم است که با استفاده از مش‌بندی بسیار کوچک اثرات ناهمگنی را لحاظ می‌کند که این خود هزینه محاسباتی را به طور قابل ملاحظه‌ای افزایش داده و هم‌چنین در مدل‌های با ریزساختار پیچیده عملاً امکان این کار وجود ندارد. در مقابل، مدل‌سازی چندمقیاسی^۳ به کمک روش‌هایی نظیر همگن‌سازی ریاضی^۴ یا همگن‌سازی محاسباتی^۵ این امکان را فراهم می‌آورد تا با حل یک مسئله ریزمقیاس در (RVE^۶) در هر نقطه از دامنه ماکروسکوپی^۷، تأثیر ساختار ناهمگن بر خواص مؤثر به‌صورت پویا و مکان‌مند لحاظ شود.

^۱ Hydration

^۲ Intrinsic Heterogeneity

^۳ Multi-Scale Modeling

^۴ Asymptotic Homogenization

^۵ Computational Homogenization

^۶ Representative volume element

^۷ Macroscopic

۳-۱ اهداف تحقیق

هدف اصلی این پژوهش استفاده از مدل‌های چندمقیاسی در تحلیل محیط‌های متخلخل تحت شرایط THMC، لحاظ دقیق اثرات ناهمگنی ریزساختار و انتقال آن به مدل در مقیاس بزرگ است. این رویکرد نه تنها باعث افزایش دقت تحلیل می‌شود، بلکه امکان پیش‌بینی پدیده‌های مکانیزمی جدید مانند تمرکز کرنش^۱، رفتار غیرخطی مؤثر، یا گسترش ناپیوستگی‌ها را فراهم می‌کند که در مدل‌های همگن سنتی به‌طور کامل گم می‌شوند. با بررسی تحقیقات گذشته، روشن می‌شود که تا به حال از روش همگن‌سازی محاسباتی برای محیط‌های متخلخل با لحاظ اثرات گرمایی-هیدرولیکی-مکانیکی-شیمیایی استفاده نشده است. هدف این پژوهش، توسعه چارچوبی برای مدل‌سازی عددی محیط‌های متخلخل اشباع با در نظر گرفتن هم‌زمان اثرات THMC و انتقال اطلاعات بین مقیاس‌ها با استفاده از تکنیک همگن‌سازی محاسباتی و سپس صحت‌سنجی نتایج با روش تحلیل مستقیم (DNS)^۲ است. در این راستا، معادلات حاکم در مقیاس میکرو استخراج شده، با استفاده از فرآیند همگن‌سازی، مدل ماکروسکوپی حاصل شده و در نهایت با پیاده‌سازی عددی آن، قابلیت مدل در بازنمایی رفتار واقعی محیط مورد ارزیابی قرار می‌گیرد.

۴-۱ ساختار پایان‌نامه

این پژوهش در شش فصل تنظیم شده که بعد از فصل اول و ارائه مقدمات، در فصل دوم مروری بر مطالعات انجام گرفته در گذشته در حوزه‌ی محیط‌های متخلخل و روش‌های چندمقیاسی به‌طور جداگانه ارائه خواهد شد. در فصل سوم با معرفی فیزیک مسئله به بررسی معادلات حاکم در فرم قوی پرداخته می‌شود. سپس در فصل چهارم با ارائه روش چندمقیاسی مورد نظر، به توسعه روابط در دو مقیاس میکرو و ماکرو و همچنین نحوه اعمال شرایط مرزی در این دو مقیاس پرداخته می‌شود. در فصل پنجم با ارائه مثال‌های عددی و مقایسه نتایج این پژوهش با دیگر تحقیقات، به صحت‌سنجی کد و فواید روش همگن‌سازی محاسباتی، پرداخته می‌شود. در نهایت در فصل ششم با توجه به نتایج به‌دست آمده در مورد این روش نتیجه‌گیری ارائه خواهد شد و خلاهای باقی‌مانده به عنوان پیشنهاد تحقیقات آینده ارائه خواهند شد.

¹ Strain Concentration

² Direct Numerical Simulation

فصل ۲: مروری بر مطالعات پیشین

۱-۲ مقدمه

در این فصل مروری بر مطالعات انجام گرفته در موضوع پژوهش انجام خواهد شد. برای سهولت دسترسی خوانندگان این بخش به دو قسمت، شامل مطالعات انجام گرفته بر روی محیط‌های متخلخل واکنش‌دهنده با لحاظ اثرات گرمایی و همچنین شامل مطالعات انجام گرفته در روش چندمقیاسی خواهد بود. مرور تحقیقات گذشته برای هر کدام از این بخش‌ها به طور جداگانه ارائه خواهد شد.

۲-۲ محیط‌های متخلخل واکنش‌دهنده با لحاظ اثرات گرمایی

به عنوان اولین مطالعه در حوزه محیط‌های متخلخل می‌توان از تحقیق ترزاقی [۱] نام برد که با ارائه مفهوم تنش موثر^۱، برای اولین بار تحکیم یک بعدی را مدل کرد. گرچه مدل‌های او عمدتاً برای شرایط ساده‌شده توسعه یافتند، اما اصول پایه‌ای آنها همچنان در پژوهش‌های امروزی، به‌ویژه در تحلیل جفت‌شده THMC، کاربرد دارد. در ادامه تحقیقات بيو [۲] منجر به توسعه مدل تحکیم سه بعدی شد که با لحاظ اثرات برهم‌کنش هیدرولیکی مکانیکی اثرات تغییر شکل اسکلت جامد بر رابطه تنش و فشار آب حفره‌ای را با ضریبی به نام ضریب بيو وارد روابط کرد.

در تحقیق بعدی مورلند [۳] یک نظریه ساده بر اساس نظریه مخلوط‌ها برای توصیف رفتار اجسام متخلخل اشباع از سیال ارائه می‌دهد که در آن هر جزء (جامد و سیال) میدان سرعت و تنش مؤثر خود را دارد و تغییر شکل کل، به شکل ضریبی تجزیه می‌شود. روابط سازگاری برای هر جزء با استفاده از توابع مقیاس‌بندی ساده بیان شده و تعامل بین کرنش سیال و جامد به صورت مؤثر مدل می‌شود. این مدل برای مواد الاستیک و الاستوپلاستیک اشباع شده کاربرد دارد و با داده‌های آزمایش فشردگی ایزوتروپ اعتبارسنجی شده است.

گودمن و کواین [۴] جز اولین کسانی بودند که فیزیک محیط‌های دانه‌ای را بر اساس تئوری مخلوط‌ها توسعه دادند. نتایج این تحقیق با ارائه یک چارچوب ترمودینامیکی-مکانیکی، رفتار مواد دانه‌ای را به عنوان یک محیط پیوسته با ساختار داخلی توصیف می‌کند. نویسندگان با در نظر گرفتن اثرات تخلخل و توزیع ذرات، معادلات بنیادینی را برای تحلیل تنش، تغییر شکل و جریان در محیط‌های دانه‌ای فرمول‌بندی کردند. این کار پیشگامانه،

^۱ Effective stress

مبانی نظری لازم برای مدل‌سازی مواد دانه‌ای در شرایط مختلف بارگذاری را فراهم ساخت و راه را برای توسعه نظریه‌های مدرن مخلوط‌ها در مکانیک خاک و ژئوتکنیک هموار کرد.

تحقیق بعدی نیز بر پایه تئوری مخلوط‌ها اثرات غیرقابل اختلاط بودن سیالات و تغییر کسر حجمی اجزاء، توسط بوون [۵] انجام شده است. کسرهای حجمی به عنوان متغیرهای حالت داخلی در نظر گرفته شده‌اند که از معادلات نرخ پیروی می‌کنند. این مقاله نشان می‌دهد که چگونه مدل‌های کلاسیک محیط‌های متخلخل (مانند مدل بیو) به عنوان موارد خاصی از این فرمول‌بندی کلی به دست می‌آیند.

ویتاکر [۶] با لحاظ اثرات گرمایی و انتقال جرم در محیط متخلخل تلاش کرد با معرفی میانگیری حجمی، تئوری مخلوط‌ها را گسترش دهد. در محیط‌های متخلخل (مثل خاک، سنگ، سرامیک، چوب و...) درون هر واحد حجم، بخش‌هایی جامد، مایع و گاز وجود دارد که در مقیاس‌های بسیار کوچک به صورت نامنظم پراکنده‌اند. اما مدل‌سازی بر اساس تئوری مخلوط‌ها نیازمند معادلات و پارامترهایی در مقیاس بزرگ‌تر و یکنواخت‌تر هست. به طوریکه به جای جزئیات هر منفذ رفتار متوسط ماده مورد نظر است. توسعه تئوری میانگین‌گیری در محیط‌های چندفازی نیز در کارهای حسنی زاده و گری [۷-۹] انجام شده است.

مراحل میانگین‌گیری به این صورت است که ابتدا معادلات بقای جرم، انرژی و مومنتوم برای هر فاز (جامد، مایع، گاز) در مقیاس نقطه‌ای یا ریز نوشته می‌شوند. سپس کمیت‌هایی مانند دما، فشار یا چگالی در این حجم بر حسب متوسط فضایی‌شان بیان می‌شوند (مثلاً متوسط دما در فاز جامد یا متوسط چگالی در بخش مایع). تبادلات بین‌فازی (مانند انتقال گرما یا جرم از مایع به گاز) به عنوان ترم‌هایی در معادلات ماکروسکوپی ظاهر می‌شوند. این ترم‌ها با پارامترهایی مثل هدایت‌پذیری مؤثر، نفوذپذیری مؤثر و ... بیان می‌شوند. به این وسیله معادلات ماکروسکوپی به دست می‌آیند که قابل حل در مقیاس فنی و عملی‌اند و پارامترهای مؤثرشان عمدتاً تابع خصوصیات ریزساختاری محیط هستند.

تحقیقات برونل و همکاران [۱۰] جز اولین مطالعات انجام شده بر روی مخازن زمین گرمایی هست. در این پژوهش، معادلات تکانه خطی و معادلات پیوستگی مورد بررسی قرار گرفت. همچنین اثرات تنش‌های محیطی بر تغییرات تخلخل و نفوذپذیری وارد معادلات شد.

ارتکین [۱۱] در تحقیق خود، اثر دمای آب تزریقی بر میدان نفتی را بررسی کرد. در این تحقیق جابجایی فاز جامد و انتقال گرما و همچنین تکانه خطی سیال با روش عددی تفاضل محدود، مورد ارزیابی قرار گرفت. نتایج این پژوهش نشان می‌دهد که حفظ دمای بالای سیال موجود در محیط باعث افزایش بهره‌وری میدان نفتی می‌شود. از پژوهش‌های بسیار مهم و مرجع در زمینه تحلیل عددی رفتار محیط‌های متخلخل اشباع می‌توان به زینکوویچ و همکاران [۱۲] اشاره کرد. هدف اصلی آنها ارائه یک چارچوب ریاضی و عددی برای تحلیل دقیق رفتار مکانیکی

خاک‌های اشباع در شرایط ایستا^۱ و پویا^۲ است. نویسندگان با تکیه بر نظریه‌ی بیو و مفهوم تنش مؤثر، معادلات حاکم بر رفتار محیط اشباع را تدوین کردند. در ادامه، روش اجزای محدود برای گسسته‌سازی دامنه معادلات استفاده شده و برای راستی‌آزمایی از داده‌های تجربی استفاده شده است.

از دیگر پژوهش‌های مرجع و مشهور می‌توان به لوئیس و شرفلر [۱۳] اشاره کرد. در این کتاب تلاش شده است یک رویکرد کلاسیک برای حل معادلات هم‌بسته ترمو-هیدرو-مکانیکی با استفاده از روش اجزا محدود با تمرکز بر مسائل پرکاربرد مهندسی از جمله مهندسی نفت، ژئوتکنیک و علوم زیستی ارائه شود. همچنین کاربردهایی برای تحلیل مسائل استاتیکی، دینامیکی، تحکیم و ... ارائه شده است.

سنگ‌های جاذب آب مانند شیل‌ها و خاک‌های رسی، به دلیل ساختار بلوری خاص خود و حضور فیلوسیلیکات‌ها^۳، توانایی جذب آب و تورم ناشی از آن را دارند. این پدیده در بسیاری از مسائل مهندسی ژئوتکنیک، مانند پایداری چاه‌های نفتی و طراحی مخازن دفن زباله‌های هسته‌ای، اهمیت فراوانی دارد. هیداک و وانگ [۱۴] مدلی ترمودینامیکی برای توصیف تورم ناشی از هیدراتاسیون در این نوع سنگ‌ها ارائه دادند که بر پایه بسط تئوری بیو در پروالاستیسیته و قانون دارسی^۴ برای جریان سیال بنا شده است. این مدل با استفاده از اصول ترمودینامیک غیرتعادلی^۵ توسعه یافته و فرض اصلی آن حفظ تعادل فیزیکوشیمیایی موضعی (با فرض سریع بودن واکنش‌های هیدراتاسیون در مقایسه با نرخ تغییرات هیدرولیکی) است. مدل پیشنهادی، با استفاده از یک فرمول‌بندی پیوسته^۶ سنگ-سیال به عنوان یک محیط منفرد، رفتار سنگ متخلخل تحت بارگذاری مکانیکی و شیمیایی را توصیف می‌کند. تعادل انرژی آزاد هلمهولتز^۷، همراه با معادلات جرم و تعادل مکانیکی، بنیان نظری مدل را تشکیل می‌دهد. نیروهای محرک ترمودینامیکی به صورت گرادیان فشار و پتانسیل شیمیایی یا الکتروشیمیایی وارد معادلات می‌شوند و نرخ تولید آنتروپی به عنوان معیاری برای فرآیندهای نابرابر^۸ مورد استفاده قرار می‌گیرد.

در انرژی‌های زمین‌گرمایی و تزریق دی‌اکسیدکربن حاصل از فعالیت‌های صنعتی به لایه‌های زمین، تحلیل گرمایی، هیدرولیکی، مکانیکی و شیمیایی بسیار حائز اهمیت است. برای مثال شونده‌بین و همکاران [۱۵] به مدل‌سازی عددی تزریق دی‌اکسیدکربن در سازه‌های زیرزمینی با روش المان محدود پرداختند. پژوهشگران یک مدل جامع

¹ Static Conditions

² Dynamic Conditions

³ Phyllosilicates

⁴ Darcy Laws

⁵ Non-equilibrium Thermodynamics

⁶ continuum

⁷ Helmholtz Free Energy

⁸ Irreversible Processes

را ارائه کردند که تغییرات تنش، فشار، دما و غلظت شیمیایی را در اطراف چاه تزریق بررسی میکند. در بخشی از این تحقیق، تزریق آب اشباع شده با دی اکسید کربن به یک لایه سنگ آهکی شبیه سازی شده است. نتایج نشان می دهد، عوامل حرارتی و شیمیایی تأثیر مهمی بر تغییرات تنش و فشار اطراف چاه دارند. انحلال مواد معدنی باعث افزایش تخلخل و نفوذپذیری می شود، درحالی که تغییرات دما می تواند احتمال شکست هیدرولیکی را افزایش دهد. همچنین چنگ چانگ و گانگ لئو^[۱۶] به بررسی فرآیندهای زمین شناسی مؤثر در تشکیل ذخیره ی معدنی پورفیری^۱ پرداختند. پژوهشگران با استفاده از مدل سازی عددی، تعامل بین عوامل حرارتی، هیدرولیکی، مکانیکی و شیمیایی را در سیستم های هیدروترمال^۲ تحلیل کرده اند. مطالعه موردی روی ذخیره معدنی پورفیری جاما در تبت نشان می دهد که چگونه تغییرات دما و فشار سیالات زیرزمینی می تواند منجر به تشکیل ذخایر معدنی ارزشمند شود. نتایج تحقیق نشان می دهد که حفظ دمای بالا در توده های ماگمایی^۳ برای مدت طولانی، نقش تعیین کننده ای در تشکیل کانسارهای غنی دارد. این شرایط خاص باعث ایجاد فشارهای بالای سیال، تشکیل شبکه های گسترده از شکستگی ها و تمرکز فلزات معدنی در مناطق خاص می شود. همچنین، الگوی جریان سیالات گرمایی از ماگما به سمت بیرون در مراحل اولیه و بازگشت آن در مراحل پایانی، از یافته های کلیدی این پژوهش است.

ژانگ و همکاران^[۱۷] نیز ذخیره سازی گاز CO₂ در سفره های آب شور را مدل کردند. آن ها با استفاده از روش جفت شده ترتیبی، تعاملات پیچیده بین جریان سیال، انتقال حرارت، مکانیک سنگ و واکنش های شیمیایی را مدل سازی نمودند. این مدل قابلیت پیش بینی تغییرات تخلخل، نفوذپذیری و مکانیسم های مختلف به دام اندازی CO₂ را دارد. نویسندگان در بخش دیگر مقاله به تحلیل نتایج شبیه سازی یک مدل دوبعدی ناهمگن می پردازند که شامل چهار لایه سنگ مختلف است. نتایج نشان می دهد که افزایش فشار تزریق CO₂ باعث تغییرات تنش مؤثر و تغییر شکل سنگ می شود، همچنین نفوذ گاز به لایه های فوقانی و ایجاد شکاف ها مورد بررسی قرار گرفته است. تأثیر واکنش های شیمیایی بر کاهش pH و تشکیل کانی های جدید نیز به طور مفصل تحلیل شده است. نتایج نشان می دهد که در بلندمدت، به دام اندازی معدنی به دلیل تشکیل کانی های پایدار مانند دولومیت^۴ و دوسونیت^۵، نقش غالب را ایفا می کند.

¹ Porphyry Deposit

² Hydro-Thermal

³ Magmatic Body

⁴ Dolomite

⁵ Dawsonite

لیژانگ و همکاران [۱۸] به توسعه یک مدل سه بعدی کاملاً پیوسته برای شبیه‌سازی فرآیند تفکیک هیدرات گاز طبیعی (NGH^۱) پرداختند. مدل پیشنهادی با نام DEHydrate، از روش المان محدود ضمنی کامل برای حل معادلات استفاده می‌کند و قادر است پارامترهای مختلفی مانند فشار، دما، جابجایی و تنش در مخزن را پیش‌بینی کند. مدل DEHydrate در یک مطالعه موردی در منطقه شن‌چو چین به کار گرفته شد. نتایج نشان داد که در مراحل اولیه، نرخ تفکیک هیدرات به ۲۰۶۷۲ کیلوگرم بر روز می‌رسد، اما پس از ۱.۳ روز به ۱۱/۶۴ کیلوگرم بر روز کاهش می‌یابد. تنها ۳۵.۶ درصد از گاز تولیدی پس از ۱۰۰ روز در چاه جمع‌آوری می‌شود و مابقی در مخزن باقی می‌ماند. هم‌چنین، تغییرات مکانیکی مخزن شامل حرکت افقی به سمت چاه و تغییرات عمودی پیچیده در بالا و پایین چاه مشاهده شد. مدل DEHydrate ابزاری مؤثر برای پیش‌بینی رفتار مخزن در طول تفکیک هیدرات گاز طبیعی ارائه می‌دهد و می‌تواند برای بهینه‌سازی روش‌های استخراج و کاهش خطرات زیست‌محیطی مورد استفاده قرار گیرد. این مدل با در نظر گرفتن تمامی اثرات پیوسته، دقت بالاتری نسبت به مدل‌های سنتی دارد و می‌تواند به بهبود فرآیندهای تجاری‌سازی استخراج هیدرات گاز طبیعی کمک کند.

روژو و همکاران [۱۹] نیز در پژوهش خود به توسعه یک مدل کاملاً جفت شده (THMC) برای شبیه‌سازی رفتار رسوبات حاوی هیدرات گازی در چارچوب تئوری ترمودینامیک دانه‌ای پرداختند. مدل ارائه‌شده با استفاده از مفاهیم جدیدی مانند دمای دانه‌ای، آنتروپی دانه‌ای و جریان‌های اتلافی، روابط پیچیده بین میدان‌های مکانیکی، هیدرولیکی، حرارتی و شیمیایی را در طول فرآیند تفکیک هیدرات توصیف می‌کند. این مدل قادر است پدیده‌هایی مانند نرم‌شوندگی کرنش، اتساع و مسیرهای تنش را تحت شرایط مختلف زه‌کشی پیش‌بینی کند و هم‌چنین تغییرات کرنش حجمی، تولید گاز متان و تبادل حرارت ناشی از تفکیک هیدرات را شبیه‌سازی نماید.

ژیانتو و همکاران [۲۰] به توسعه یک مدل کاملاً جفت شده (THMC) برای بررسی رفتار پرکننده‌های سیمانی در شرایط ژئوترمال پرداختند. مدل ارائه‌شده با در نظر گرفتن انبساط حرارتی آب منفذی و انقباض شیمیایی ناشی از هیدراتاسیون سیمان، به بررسی تعاملات پیچیده بین این فرآیندها می‌پردازد. نتایج نشان می‌دهد که رفتار غیرخطی پرکننده‌ها ناشی از رقابت بین این فرآیندهاست و فشار منفذی تحت تأثیر ترکیبی از انقباض شیمیایی، انبساط حرارتی آب و مهاجرت سیال قرار دارد. این پژوهش هم‌چنین تأثیر دماهای اولیه و محیطی مختلف بر عملکرد پرکننده‌ها را بررسی می‌کند. نتایج نشان می‌دهند که دمای متوسط برای پایداری سیستم پرکننده‌ها بهینه است، در حالی که دمای بالا یا پایین می‌تواند منجر به فشارهای نامطلوب و ناپایداری شود. به ویژه، گرمایش محیطی در معادن گرم می‌تواند پس از یک دوره نهفتگی، خطرانی برای پایداری پرکننده‌ها ایجاد کند. برای کاهش این اثرات، راهکارهایی مانند بهبود سیستم زه‌کشی، کنترل نرخ پرکردن و تأخیر در فرآیند پرکردن پیشنهاد شده‌اند.

^۱ Natural Gas Hydrate

ماجد و همکاران [۲۱] به بررسی پایداری چاه در سازه‌های شیمیایی-فعال و ناهمسان‌گرد^۱ تحت تأثیر بارهای حرارتی، هیدرولیکی، مکانیکی و شیمیایی پرداختند. نویسندگان با توسعه معادلات حاکم برای محیط‌های پوروشیمی-حرارتی-کشسان ناهمسان‌گرد، یک مدل عددی مبتنی بر روش المان محدود ارائه داده‌اند که توزیع فشار منفذی، دما، غلظت محلول و تنش را در اطراف چاه مورب شبیه‌سازی می‌کند. این مدل شامل انتقال حرارت غیرخطی (هدایت و جابجایی) و انتقال محلول (انتشار و جابجایی) است و برای سازه‌های با نفوذپذیری بالا و پایین قابل استفاده است. نتایج نشان می‌دهد که ناهمسان‌گردی الاستیک و حرارتی تأثیر قابل توجهی بر توزیع تنش‌های مؤثر در اطراف چاه دارد و استفاده از مدل‌های ایزوتروپ یا ناهمسان‌گردی شرطی می‌تواند به خطاهای قابل توجهی در تخمین تنش‌ها منجر شود. همچنین، تأثیر گرادیان حرارتی و غلظت محلول بر فشار منفذی و تنش‌ها بررسی شده است، به‌طوری که تزریق سیال سرد با غلظت بالاتر از سیال اولیه، اثر تثبیت‌کننده‌ای بر ناحیه اطراف چاه دارد. این مدل برای تحلیل پایداری چاه در حین و پس از حفاری به‌کار می‌رود و می‌تواند بهینه‌سازی فشار سیال حفاری را تسهیل کند.

اگرچه فرآیندهای مکانیکی نقش اصلی را در تغییرات تخلخل و نفوذپذیری مخزن دارند، اما برای پیشبینی دقیق رفتار بلندمدت مخازن ژئوترمال، در نظر گرفتن اثرات ترکیبی مکانیکی، حرارتی و شیمیایی ضروری است. ژن‌پنگ‌کوی و همکاران [۲۲] به بررسی اثرات توسعه هیدروترمال بر نفوذپذیری مخازن متخلخل با استفاده از مدلسازی THMC پرداختند.

محققان با استفاده از مدل عددی تغییرات دما، فشار سیال، تنش مؤثر و محتوای معدنی را در یک مخزن فرضی طی ۳۰ سال بهره‌برداری شبیه‌سازی کردند. نتایج نشان داد که تغییرات تنش مؤثر ناشی از فشار سیال و تنش حرارتی، همراه با انحلال و رسوب معدنی، به‌طور مشترک بر تخلخل و نفوذپذیری مخزن تأثیر می‌گذارند. در مراحل اولیه بهره‌برداری (تا ۳.۵ سال)، اثرات مکانیکی ناشی از فشار سیال غالب بود و باعث افزایش سریع تخلخل شد. با ادامه تزریق، تنش حرارتی نقش پررنگ‌تری ایفا کرد و منجر به کاهش تخلخل در مناطق سرد شده اطراف چاه تزریق شد. اثرات شیمیایی نیز با تأخیر و به‌صورت تدریجی ظاهر شدند و تنها در محدوده نزدیک به چاه تزریق، رسوب معدنی (تا ۰.۰۶٪) مشاهده شد. پس از ۲۰ سال، با تثبیت میدان دما، فشار سیال دوباره بر روند تغییرات تخلخل غالب شد.

شرط عدم اشباع و تغییرات درجه اشباع در بسیاری از مسائل محیط‌های متخلخل، دغدغه مهندسان بوده است. اثر گرادیان حرارتی و شیمیایی بر انحلال مواد حل‌شونده در محیط، می‌تواند درجه اشباع را تغییر داده و رفتار سیستم را تحت تأثیر قرار دهد. سیتارم و همکاران [۲۳] با توسعه معادلات گرمایی، هیدرولیکی، مکانیکی و شیمیایی

¹ Anisotropic

برای شرایط غیر اشباع و اصلاح ضرایب معادلات برای حالت کلی تر، سعی در پوشش اینگونه مسائل داشتند. آنها برای ارزیابی مدل خود، چهار مثال یک بعدی با درجات آزادی مختلف را مورد بررسی قرار دادند. نتایج نشان داد که مدل قادر به شبیه سازی دقیق رفتار خاک تحت تأثیر فرآیندهای جفت شده با معادلات جدید است. به ویژه اینکه، مدل توانست پدیده هایی مانند خشک شدن و اشباع شدن مجدد، اثرات حرارتی بر انحلال مواد معدنی، و تغییرات تنش های مکانیکی ناشی از تغییرات رطوبت و دما را به خوبی پیش بینی کند.

شیانگ ژو و یدازانگ [۲۴] به توسعه و تأیید یک المان تعریف شده توسط کاربر (UEL)^۱ برای مدلسازی فرآیندهای جفت شده (THMC) در محیط های زمین شناسی اشباع پرداختند. نویسندگان با استفاده از نرم افزار اجزای محدود آباکوس^۲، یک حلگر ضمنی برای مسائل پیچیده THMC ایجاد کردند. این مدل به صورت مرحله ای توسعه یافته و در هر مرحله با مقایسه نتایج شبیه سازی با راه حل های تحلیلی بسته، اعتبارسنجی شده است. در نهایت، مدل برای شبیه سازی یک آزمایش گرمایش در محل در یک مرکز تحقیقاتی زیرزمینی در بلژیک به کار گرفته شد و نتایج آن با داده های تجربی مقایسه شد که قرابت خوبی را نشان می داد.

وقتی زباله های هسته ای در عمق زمین دفن می شوند، یک لایه محافظ به نام بافر^۳ از جنس بنتونیت^۴ دور آنها قرار می گیرد. این بافر با جذب آب از سنگ های اطراف، متورم می شود و به دیواره های سنگ فشار می آورد. این فشار می تواند شکستگی های اطراف را ببندد و از نشت مواد رادیواکتیو جلوگیری کند. کیونگ وون چانگ و همکاران [۲۵] با استفاده از مدل سازی عددی به مطالعه تاثیر این فشار بر رفتار نفوذپذیری سنگ های اطراف ارائه کردند. نتایج نشان می دهد که اگر سنگ میزبان (شیل) نفوذپذیری کمی داشته باشد، آب دیرتر به بافر می رسد و فرآیند تورم کندتر پیش می رود. همچنین، فشار ناشی از تورم بافر می تواند شکستگی های سنگ را ببندد و از حرکت مواد رادیواکتیو جلوگیری کند.

محمدنژاد و خویی [۲۶] به مقایسه دو مدل دوفازی و سه فازی برای تحلیل جریان سیال چندفازی در محیط های متخلخل تغییر شکل پذیر پرداختند. نویسندگان از یک مدل جفت شده برای شبیه سازی تعامل بین تغییر شکل خاک و جریان سیالات (آب و هوا) در شرایط اشباع نشده استفاده کرده اند. نتایج نشان می دهد که در نظر گرفتن فاز گاز به عنوان یک فاز مستقل (مدل سه فازی) تأثیر قابل توجهی بر رفتار خاک اشباع نشده دارد و مدل دوفازی با فرض ساکن بودن هوا ممکن است به نتایج نادرست منجر شود..

¹ User defined element

² Abaqus

³ Buffer

⁴ Bentonite

مرتضوی و خویی [۲۷] به توسعه یک مدل عددی مبتنی بر روش المان محدود توسعه یافته (XFEM)^۱ برای شبیه سازی فرآیندهای (THMC) در سنگ های سیلیکاتی^۲ شکسته پرداختند. محققان در این مدل به بررسی تأثیرات حل شدگی آزاد سطح (FF)^۳ و حل شدگی تحت فشار (PS)^۴ بر تغییرات تخلخل و شکاف در محیط های متخلخل پرداخته و برای اعتبارسنجی، نتایج را با راه حل های تحلیلی و داده های آزمایشگاهی مقایسه کرده اند. از جمله کاربردهای این مدل، مطالعه سیستم های زمین گرمایی تقویت شده (EGS)^۵ و درک بهتر تأثیرات دما، تنش و جریان سیال بر رفتار شیمیایی-مکانیکی سنگ ها است. مدل ارائه شده توانسته است با دقت بالا رفتار پیچیده سنگ های شکسته را تحت شرایط مختلف دما و تنش شبیه سازی کند. نتایج نشان می دهند که PS در محیط های با تنش بالا و دمای زیاد نقش کلیدی در کاهش نفوذپذیری شکاف ها ایفا می کند، در حالی که FF بیشتر در محیط های با تنش کم مؤثر است. هم چنین، تأثیرات متقابل شکاف های مجاور و نفوذپذیری محیط بر نرخ PS مورد بررسی قرار گرفته و نشان داده شده که افزایش نفوذپذیری محیط می تواند منجر به افزایش نرخ PS شود. قوانین کلاسیک مانند قانون دارسی برای جریان آب، قانون فیک برای انتشار شیمیایی و قانون فوریه برای انتقال حرارت، در محیط های متخلخل با نفوذپذیری بسیار کم (کمتر از 10^{-11} متر بر ثانیه) به دلیل جفت شدگی قوی بین فازهای مختلف (آب، حرارت و مواد شیمیایی) کارایی خود را از دست می دهند. چن و همکاران [۲۸] با استفاده از اصول ترمودینامیک غیر تعادلی و نظریه جفت شدگی مخلوط، یک مدل عمومی توسعه داده اند که تمامی اثرات جفت شدگی را در نظر می گیرد و به یک ماتریس ساده و قوی برای توصیف این پدیده ها منجر می شود. این پژوهش نشان می دهد که در محیط های متخلخل غشایی، جریان آب نه تنها تحت تأثیر گرادیان فشار، بلکه توسط گرادیان غلظت مواد شیمیایی و گرادیان دما نیز هدایت می شود. این جفت شدگی ها در قالب یک ماتریس 3×3 ارائه شده اند که روابط متقابل بین جریان آب، حرارت و مواد شیمیایی را توصیف می کند. چن و هیک [۲۹] یک مدل ترکیبی (HMC) برای مواد متخلخل غیر اشباع ارائه داده اند که اثرات جریان اسمزی را در نظر می گیرد. این مدل بر اساس تئوری اصلاح شده مخلوط و ترمودینامیک غیر تعادلی توسعه یافته و از معادلات دارسی و بیوت با در نظر گرفتن پتانسیل شیمیایی استفاده شده است. مدل ارائه شده برای تحلیل انتقال شیمیایی و اثرات اسمزی در سنگ های کم نفوذ مانند سنگ های نمکی مورد استفاده در دفع زباله های رادیواکتیو به کار گرفته شده است. نتایج عددی نشان می دهند که جریان اسمزی بر توزیع فشار آب، درجه اشباع و تنش مؤثر در ماده تأثیر قابل توجهی دارد.

¹ Extended Finite Element

² Silicate Rocks

³ Free Face

⁴ Pressure Solution

⁵ Enhanced Geothermal Systems

همچنین یوما و همکاران [۳۰] با استفاده از اصول ترمودینامیک غیرتعادلی، قانون داریسی را گسترش دادند تا جریان اسمزی ناشی از گرادیان‌های شیمیایی و حرارتی را نیز در بر بگیرد. این مدل برای تحلیل رفتار مکانیکی سنگ‌های اشباع نشده در شرایط مختلف مورد استفاده قرار گرفته است. نتایج شبیه‌سازی عددی نشان می‌دهد که اسمز شیمیایی و حرارتی تأثیر قابل توجهی بر جهت جریان آب، تغییرات فشار، اشباع و تغییر شکل مکانیکی مواد دارند. به‌ویژه، اسمز شیمیایی باعث کاهش فشار آب و اشباع می‌شود، در حالی که اسمز حرارتی اثر معکوس دارد. همچنین، تغییرات دما سریع‌تر از تغییرات غلظت شیمیایی به تعادل می‌رسد. این یافته‌ها اهمیت در نظر گرفتن اثرات متقابل این پدیده‌ها را در مدل‌سازی محیط‌های متخلخل تأکید می‌کنند.

۲-۳ روش چندمقیاسی

در اغلب مسائل واقعی مهندسی محیط‌های متخلخل دارای ریز ساختار غیرهمگن می‌باشند که برای لحاظ اثرات این ناهمگنی بایستی در روش‌های مستقیم از مش‌بندی بسیار ریز استفاده کرد که هزینه محاسباتی بالا و محدودیت‌های سخت‌افزاری، این روش را غیرکارا می‌کند. اما با استفاده از یکی از روش‌های چند مقیاسی می‌توان با وجود محدودیت‌های سخت‌افزاری، لحاظ اثرات ناهمگنی را ممکن ساخت. یکی از روش‌های چند مقیاسی، روش همگن سازی است که کارایی آن در تجارب مختلف به اثبات رسیده است.

یکی از گام‌های مهم در توسعه مدل‌های چندمقیاسی برای محیط‌های ناهمگن، به‌ویژه در شرایط غیرخطی مانند رفتار پلاستیک، استفاده از نظریه‌های همگن‌سازی ریاضی است. در این زمینه، فیش و همکاران [۳۱] روشی کارآمد برای تحلیل سازه‌های کامپوزیتی با رفتار الاستوپلاستیک ارائه دادند که در آن نظریه همگن‌سازی کلاسیک برای محیط‌های ناهمگن به گونه‌ای تعمیم یافته است که کرنش‌های ذاتی^۱ نیز در آن لحاظ می‌شوند. آن‌ها با معرفی الگوریتمی موسوم به میانگین‌گیری دو نقطه‌ای، توانستند هزینه محاسباتی را به طور قابل توجهی کاهش داده و در عین حال دقت بالایی در بازسازی میدان‌های میکروسکوپی حفظ کنند. همچنین فیش و رانگ [۳۲] به توسعه یک مدل که بتواند ناهمگنی‌ها غیر تناوبی و همچنین تغییر شکل‌های بزرگ را مدل کند، پرداختند. آن‌ها با معرفی یک پیکربندی ماکرو تغییر شکل یافته کمکی و شرایط مرزی مختلط، روشی را ارائه دادند که قادر به مدل‌سازی تغییر شکل‌های بزرگ در سلول‌های واحد غیرتناوبی است.

در تحقیقات تمیز [۳۳] و جی‌چیانگ‌یانگ و همکاران [۳۴]، از چارچوب همگن‌سازی دوفازی برای تحلیل رفتار ترموالاستیک مواد ناهمگن در شرایط تغییر شکل‌های بزرگ استفاده شده است. نویسندگان با بهره‌گیری از روش

^۱ Eigenstrain

همگن سازی ریاضی، یک رویکرد کارآمد را پیشنهاد کردند که در آن مسائل مکانیکی و حرارتی به صورت جداگانه و متوالی در مقیاس میکروسکوپی حل می شوند. این روش از یک سو با حذف اثرات اندازه کاذب^۱، (بدون توجه به سایز RVE) سازگاری با فرض تفکیک مقیاس ها را تضمین می کند و از سوی دیگر با حفظ جفت شدگی ترمودینامیکی در مقیاس ماکروسکوپی، دقت لازم را در پیش بینی رفتار مواد ارائه می دهد. نتایج عددی این پژوهش نشان داد که این چارچوب نه تنها قادر به مدل سازی دقیق ناهمسانگردی حرارتی ناشی از تغییر شکل است، بلکه از نظر محاسباتی نیز نسبت به روش های جفت شده کامل، کارآمدتر می باشد.

یانگ و همکاران [۳۵] و همچنین آمین و همکاران [۳۶] به بررسی محدودیت های همگن سازی مرتبه اول در پیش بینی رفتار مواد مرکب با جدایی مقیاس کم (وقتی اندازه ریزساختار (l) نزدیک به ابعاد کلی سازه (L) است) پرداختند. با استفاده از شبیه سازی های عددی دقیق و مقایسه با روش های همگن سازی ریاضی، نشان داده می شود که روش های کلاسیک تنها برای نسبت های مقیاس بزرگ دقیق هستند، اما در نسبت های کوچک خطای قابل توجهی دارند. برای بهبود دقت، از همگن سازی ریاضی مرتبه بالاتر استفاده شده که با افزودن جمله های اصلاحی به معادلات، اثرات ریزساختار را بهتر مدل سازی می کند. نتایج نشان می دهد که این روش حتی در نسبت های مقیاس بسیار کوچک و اختلاف سختی های شدید (تا ۱۰۰۰ برابر بین ذرات و ماتریس) دقت قابل قبولی دارد و خطا را به کمتر از ۵ درصد کاهش می دهد.

مرور جامعی بر روش های همگن سازی ریاضی را می توان در بنسوسان و همکاران [۳۷] مشاهده کرد. گیرز و همکاران [۳۸] با تمرکز بر محدودیت های همگن سازی مرتبه اول مانند عدم توانایی تحلیل موضعی و اثرات اندازه، پیشنهاداتی مانند همگن سازی مرتبه دوم و همگن سازی پیوسته- ناپیوسته را برای مواد آسیب پذیر و محیط های چند فیزیکی مطرح کردند. همچنین کارایی روش را برای پوسته ها و تیرها و نواحی چسبنده مورد ارزیابی قرار گرفت.

کوزنت سوا و همکاران [۳۹] به بررسی تأثیر توزیع فضایی ناهمگنی ها در مواد مرکب، بر رفتار مکانیکی کلان آن ها پرداختند. رفتار مواد متخلخل با ماتریس فلزی تحت بارگذاری های مختلف شامل کشش و خمش تحلیل شده است. نتایج نشان می دهند که برای رفتار الاستیک، تفاوت بین ساختارهای منظم و تصادفی ناچیز است، اما در مواردی مانند رفتار الاستو-ویسکو-پلاستیک با سخت شدن یا نرم شدن، این تفاوت ها قابل توجه تا ۱۰٪ می شوند. همچنین، در بارگذاری خمشی، تأثیر تصادفی بودن توزیع حفره ها از حالت کشش کمتر است.

^۱ Spurious Size Effect

ماتسوبارا و همکاران [۴۰] در پژوهش خود برای رفع پدیده Locking در تحلیل چند مقیاسی مواد کامپوزیتی پیشنهاد کرده‌اند که سلول واحد به چند قسمت مجزا تقسیم شده و بین آن‌ها شرط مرزی تناوبی اعمال شود. نتایج آن‌ها نشان از بهبود عملکرد مدل‌سازی از جهت پدیده قفل شدگی دارد.

میه و بایروتر [۴۱] با بررسی مواد ناهمگن تحت شرایط کرنش پلاستیک و مقایسه روش‌های اعمال شرط مرزی از جمله روش خطی، دوره‌ای و تنش یکنواخت به بررسی کارآمدی روش همگن‌سازی محاسباتی پرداختند. همچنین میه و همکاران [۴۲] از روش همگن‌سازی محاسباتی برای مواد پولیکریستال استفاده کردند که نتایج آن‌ها حاکی از کارآمدی روش در پیشبینی تکامل کریستال‌ها است.

نگوین و همکاران [۴۳] به بررسی روش همگن‌سازی محاسباتی برای مدل‌سازی ترک‌های چسبنده در مواد با ریزساختار ناهمگن پرداختند. آن‌ها، خواص ماکروسکوپی ترک‌ها را از طریق تحلیل رفتار غیرخطی در مقیاس میکروسکوپی، که شامل تغییر شکل‌های غیرالاستیک در یک نوار موضعی است، محاسبه کردند. این روش با ارائه جزئیات پیاده‌سازی، حل مسائل بارگذاری چرخه‌ای، انتشار ترک، و تحلیل هم‌گرایی، نشان می‌دهد که می‌تواند برای شبیه‌سازی رشد ترک در مواد شبه-شکونده با ریزساختار پیچیده و تصادفی به کار رود.

پریک و همکاران [۴۴] با مقایسه نتایج اعمال شرط مرزی در حل مسئله مقدار مرزی میکرو، به بررسی مقایسه نتایج پرداختند و نشان دادند که استفاده از روش‌های مختلف، تاثیر قابل توجهی بر نتایج دارد. آن‌ها همچنین با تصادفی کردن توزیع ناهمگنی‌ها نشان دادند که با افزایش این توزیع تصادفی، اثرات روش‌های اعمال شرایط مرزی کاهش می‌یابد.

سونینگ و همکاران [۴۵] یک روش جدید برای شبیه‌سازی ترک‌خوردگی و شکست در مواد جامد ارائه دادند. آن‌ها با استفاده از روش چندمقیاسی تلاش کردند بتواند مراحل مختلف شکست، از شروع ترک‌های ریز تا تشکیل ترک‌های بزرگ، را دقیق‌تر مدل‌سازی کنند. وقتی ترک‌های ریز در مقیاس میکرو به حدی برسند که باعث نرم‌شدگی ماده شوند، یک ترک بزرگ در مدل ماکرو ایجاد می‌شود. برای مدل کردن ترک‌های بزرگ از XFEM استفاده شده است. سونینگ و همکاران [۴۶] همچنین به بررسی رشد ترک در مواد ناهمگن پرداختند. به طوری که ترک‌های ریز ابتدا در مقیاس ریز تشکیل شده و سپس با توجه به معیار نرم‌شوندگی، به مقیاس درشت می‌آیند.

خویی و سعادت [۴۷] به ارائه یک روش همگن‌سازی محاسباتی برای مواد شبه شکونده با رفتار نرم‌شونده پرداختند. هدف اصلی، استخراج پارامترهای مدل آسیب از طریق تحلیل چندمقیاسی و رفع مشکلات حساسیت به مش‌بندی

در مقیاس ماکرو و وابستگی به RVE است. برای این منظور، از کرنش غیرمحلّی ماکروسکوپی استفاده شده و شرایط مرزی دوره‌ای اصلاح شده MPBC¹ برای بهبود دقت نتایج معرفی شده است.

سو و همکاران [۴۸] به بررسی همگن سازی محاسباتی برای مسائل تراکم هیدرومکانیکی در محیط‌های متخلخل ناهمگن پرداختند. در این تحقیق از روش همگن سازی مرتبه اول با استفاده از المان‌های نماینده حجم RVE در نقاط گاوس ماکروسکوپی استفاده شده است. این روش برای تحلیل تغییرات فشار منفذی در بتن آسفالتی با نفوذپذیری و ضرایب ذخیره سازی غیرخطی به کار رفته است. نتایج نشان می‌دهد که روش پیشنهادی با حل تک‌مقیاسی که بر روی یک شبکه بسیار ریز محاسبه شده، مطابقت خوبی دارد. هم‌چنین، مشخص شد که اندازه و آرایش ذرات در RVE تأثیر قابل توجهی بر دقت نتایج دارد.

میه [۴۹] به روش چندمقیاسی در چند مثال عددی از جمله تغییر شکل الاستیک-پلاستیک کامپوزیت‌ها، توسعه بافت در مواد پلی کریستالی نشان داده شده است. نتایج نشان می‌دهند که شرایط مرزی مختلف، پاسخ‌های ماکروسکوپی متفاوتی را تولید می‌کنند که می‌توانند به عنوان کران‌های بالا و پایین برای خواص همگن شده در نظر گرفته شوند. مقاله هم‌چنین به مسائل پایداری در انتقال میکرو به ماکرو اشاره می‌کند و نشان می‌دهد که چگونه ناپایداری‌های موضعی در مقیاس میکرو می‌توانند بر پاسخ ماکروسکوپی تأثیر بگذارند. این روش‌ها به صورت گسترده‌ای برای مواد مختلف از جمله کامپوزیت‌ها، پلی کریستال‌ها و مواد دانه‌ای قابل استفاده هستند.

¹ Modify Periodic Boundary Condition

فصل ۳: فیزیک حاکم بر مسئله خاک های اشباع با اثرات گرمایی و شیمیایی

۱-۳ مقدمه

در این فصل ابتدا رفتار خاک های اشباع توضیح داده می شود و سپس به ارائه معادلات حاکم بر محیط های متخلخل پرداخته می شود، بدین صورت که با استفاده از مفاهیم ساده فیزیکی معادله تعادل مکانیکی، معادله تکانه خطی سیال، معادله تعادل حرارتی و معادله تعادل شیمیایی بیان شده و به اثرات متقابل این معادلات بر یکدیگر پرداخته می شود.

۲-۳ آشنایی با رفتار خاک های اشباع

خاک های اشباع محیط هایی پیچیده و پویا هستند که رفتار آنها تحت تأثیر عوامل متعددی قرار دارد. این خاک ها که در بسیاری از پروژه های عمرانی و پدیده های طبیعی مشاهده می شوند، از ذرات جامد و آب منفذی تشکیل شده اند و گاهی حاوی حباب های گاز نیز هستند. درک کامل رفتار این خاک ها نیازمند بررسی همزمان عوامل مکانیکی، هیدرولیکی، گرمایی و شیمیایی است. این عوامل به صورت پیچیده ای با یکدیگر در تعامل هستند و تغییر در هر یک می تواند اثرات قابل توجهی بر سایر جنبه های سیستم داشته باشد.

اساس رفتار مکانیکی خاک های اشباع بر مفهوم تنش مؤثر استوار است. هنگامی که بار خارجی به این خاک ها اعمال می شود، در لحظه اول این بار توسط آب موجود در منافذ تحمل می شود. این پدیده که به اصل ترزاقی معروف است، نشان می دهد که فشار آب منفذی در ابتدا افزایش یافته و سپس به تدریج با خروج آب از منافذ، بار به اسکلت خاک منتقل می شود. این فرآیند که تحکیم نام دارد، در بسیاری از پدیده های ژئوتکنیکی مانند نشست پی ها و تغییر شکل تونل ها نقش اساسی ایفا می کند. سرعت این فرآیند به نفوذپذیری خاک بستگی دارد که خود تابعی از تخلخل و ویژگی های سیال است. در خاک های رسی با نفوذپذیری پایین، فرآیند تحکیم ممکن

است سال‌ها به طول بی‌انجامد، در حالی که در ماسه‌های ساحلی این فرآیند معمولاً در مدت زمان کوتاهی انجام می‌پذیرد.

همچنین تغییرات دما می‌تواند اثرات عمیقی بر رفتار خاک‌های اشباع داشته باشد. مکانیسم‌های انتقال حرارت در خاک‌های اشباع از دو فرآیند اصلی تشکیل شده است. هدایت گرمایی^۱ یا رسانش که در آن انرژی حرارتی از طریق تماس مستقیم بین ذرات جامد خاک و آب منفذی منتقل می‌شود، عمدتاً به خواص حرارتی ذرات خاک و آب بستگی دارد. در مقابل، انتقال گرمایی^۲ یا همرفت توسط جریان سیال که در آن حرکت آب در منافذ خاک باعث انتقال حرارت می‌شود، در شرایط وجود جریان آب زیرزمینی اهمیت ویژه‌ای پیدا می‌کند. این دو مکانیسم در محیط‌های مختلف با نسبت‌های متفاوتی ظاهر می‌شوند؛ در خاک‌های متراکم با نفوذپذیری پایین مانند رس‌ها، هدایت گرمایی غالب است، در حالی که در خاک‌های درشت‌دانه مانند ماسه‌های ساحلی که جریان آب فعالی دارند، انتقال حرارت عمدتاً از طریق رسانش صورت می‌گیرد.

از طرف دیگر، افزایش دما باعث انبساط حرارتی هم آب منفذی و هم ذرات خاک می‌شود. در شرایط محدود شده، این انبساط می‌تواند منجر به افزایش قابل توجه فشار منفذی گردد. در پروژه‌های خطوط لوله زیرزمینی، این پدیده می‌تواند باعث ایجاد تنش‌های اضافی در سیستم شود. از سوی دیگر، افزایش دما ویسکوزیته آب را کاهش داده و در نتیجه نفوذپذیری خاک را افزایش می‌دهد. این ویژگی در پروژه‌های مرتبط با انرژی ژئوترمال مانند سیستم‌های تبادل گرمایی با زمین اهمیت ویژه‌ای پیدا می‌کند. در مقابل، کاهش دما و یخ‌زدگی آب منفذی می‌تواند باعث افزایش حجم و ایجاد تنش‌های کششی در ساختار خاک شود. این مکانیزم در مناطق سردسیر مانند کانادا و سیبری عامل اصلی آسیب به سازه‌های سطحی و زیرساخت‌ها محسوب می‌شود.

واکنش‌های شیمیایی بین آب منفذی و ذرات خاک لایه دیگری از پیچیدگی را به سیستم می‌افزاید. در خاک‌های رسی، تبادل یونی می‌تواند منجر به تغییر در ساختار دانه‌بندی و رفتار تورم‌پذیری خاک شود. برخی کانی‌های رسی مانند مونت‌موریونیت^۳ در تماس با آب خاصیت تورم‌پذیری شدیدی از خود نشان می‌دهند که می‌تواند مشکلات جدی در پایداری سازه‌ها ایجاد کند. از سوی دیگر، در خاک‌های حاوی مواد سیمانی طبیعی مانند آهک، واکنش‌های انحلال و رسوب می‌تواند به مرور زمان مقاومت خاک را تغییر دهد. این پدیده در تشکیل غارهای آهکی به خوبی قابل مشاهده است.

در فرآیند‌های شیمیایی خاک‌های واکنش دهنده پدیده فشار اسمزی یکی از اتفاقات رایج است. این پدیده زمانی ایجاد می‌شود که اختلاف غلظت یون‌ها در محیط خاک وجود داشته باشد و به ویژه در خاک‌های رسی که دارای

¹ Conduction

² Advection

³ Montmorillonite

خاصیت نیمه تراوایی هستند، اهمیت ویژه‌ای پیدا می‌کند. ضریب بازتاب غشای تراوا که قابلیت خاک در عبور انتخابی یون‌ها را نشان می‌دهد، در اینجا به عنوان معیاری کلیدی برای پیش‌بینی رفتار مهاجرت آلاینده‌ها و طراحی سیستم‌های محافظتی عمل می‌کند. این ضریب که بین صفر (کاملاً تراوا) و یک (کاملاً ناتراوا) تغییر می‌کند، در خاک‌های مختلف مقادیر متفاوتی دارد و تأثیر مستقیمی بر رفتار هیدرولیکی و شیمیایی خاک می‌گذارد.

اندازه‌گیری و پیش‌بینی رفتار خاک‌های اشباع نیازمند درک عمیق از روابط متقابل بین این عوامل است. تغییر در ترکیب شیمیایی آب منفذی می‌تواند بر نفوذپذیری خاک تأثیر بگذارد که این خود بر توزیع فشار منفذی و در نهایت تنش‌های مؤثر تأثیر می‌گذارد. به همین ترتیب، تغییرات دما می‌تواند هم بر سرعت واکنش‌های شیمیایی و هم بر ویژگی‌های فیزیکی سیستم اثر بگذارد. این پیچیدگی‌ها باعث شده است که مدل‌سازی عددی این سیستم‌ها به یکی از چالش‌برانگیزترین حوزه‌های مکانیک خاک تبدیل شود.

در محیط‌های طبیعی، این اندرکنش‌ها در مقیاس‌های زمانی مختلف رخ می‌دهند. برخی فرآیندها مانند تحکیم مکانیکی ممکن است در مقیاس زمانی چند ساله اتفاق بیفتند، در حالی که برخی واکنش‌های شیمیایی ممکن است دهه‌ها یا حتی قرن‌ها به طول بیانجامند. این تفاوت در مقیاس‌های زمانی، پیش‌بینی رفتار بلندمدت خاک‌ها را با دشواری‌های زیادی مواجه می‌سازد. در پروژه‌های مهندسی، عدم توجه به این اثرات متقابل می‌تواند منجر به بروز مشکلات جدی در عملکرد سازه‌ها شود. به عنوان مثال، در ساخت سدهای خاکی، گرم‌زایی بتن می‌تواند باعث تغییر در ویژگی‌های هیدرولیکی خاک‌های اطراف شده و در درازمدت بر پایداری سازه تأثیر بگذارد.

یکی از بارزترین نمودهای تعاملات THMC در خاک‌های اشباع، پدیده تورم در خاک‌های رسی است که به سه شکل متمایز ظاهر می‌شود. تورم درون کریستالی که خاص کانی‌های رسی مانند مونت‌موریونیت است، سریع‌ترین و شدیدترین نوع تورم را ایجاد می‌کند. این نوع تورم ناشی از جذب آب به داخل ساختار کریستالی کانی‌های رسی است و می‌تواند تا چندین برابر حجم اولیه افزایش یابد. تورم اسمزی که ناشی از اختلاف پتانسیل شیمیایی بین آب منفذی و آب موجود در ساختار کانی‌هاست، دامنه اثر گسترده‌تری دارد اما به زمان بیشتری نیازمند است. تورم حرارتی نیز که محصول انبساط اجزای خاک در اثر افزایش دماست، در محیط‌های گرم یا پروژه‌های ژئوترمال اهمیت ویژه‌ای پیدا می‌کند.

در نهایت، رفتار خاک‌های اشباع را می‌توان به عنوان یک سیستم دینامیک و خودسازمان‌ده در نظر گرفت که دائماً در حال تعدیل و تطابق با شرایط محیطی است. این ویژگی باعث می‌شود که پیش‌بینی رفتار این خاک‌ها در بلندمدت نیازمند رویکردی باشد که همزمان جنبه‌های مکانیکی، هیدرولیکی، گرمایی و شیمیایی را در نظر بگیرد. پیشرفت‌های اخیر در علوم مواد و روش‌های محاسباتی این امکان را فراهم کرده‌اند که بتوان این سیستم‌های پیچیده را با دقت بیشتری مدل‌سازی و تحلیل کرد.

۳-۳ معادلات حاکم بر مسئله

در این بخش ابتدا معادله‌ی بقای جرم برای سیال و غلظت حل شونده و همچنین معادله بقای انرژی داخلی، از پنجره اسکلت جامد بیان شده و سپس با استفاده از تبدیل رینولدز، به دستگاه عمومی منتقل می‌شود. سپس معادله تعادل مکانیکی در حالت دینامیکی با حضور نیروهای بدنه بیان شده و به تبیین تنش با استفاده از قانون بیهو اصلاح شده پرداخته می‌شود. همچنین در این معادلات برای شار سیال از قانون دارسی اصلاح شده، برای شار حرارت از قانون فوریه و برای شار شیمیایی از قانون فیک استفاده می‌شود.

برقراری فرض پیوستگی در محیط‌های متخلخل بیان میدارد که، نرخ تغییرات یک پارامتر دلخواه مثل چگالی جرم^۱ یا غلظت مولی^۲ در یک فاز مشخص در یک حجم دیفرانسیلی با نرخ تغییرات منبع احتمالی موجود، برابر است. به عبارت دیگر:

$$\frac{D^\alpha}{Dt} \int_{\Omega} \varepsilon d\Omega = \int_{\Omega} \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} d\Omega + \int_{\partial\Omega} (\varepsilon \mathbf{v}_\alpha) \cdot \mathbf{n} d\Gamma = \int_{\Omega} \dot{r}_\alpha d\Omega \quad (3-1)$$

که در آن $\frac{D^\alpha}{Dt}$ مشتق ذره‌ای زمانی از دیدگاه اسکلت جامد، $\dot{r}$ پارامتر مورد مطالعه و r منبع خارجی است. به طوریکه داریم:

$$\frac{D^\alpha}{Dt} (.) = \frac{d(.)}{dt} + \mathbf{v}_\alpha \cdot \nabla (.) \quad (3-2)$$

که در آن $\mathbf{v}_\alpha$ سرعت فاز α و $\nabla (.)$ عملگر گرادیان در مختصات کلی است. در این مطالعه از تغییرات جرم و تبدیل بین فازها صرف نظر شده است بنابراین $\dot{r}_\alpha = 0$ است. برای پیاده سازی به روش المان محدود نیاز است تا معادلات حاکم از منظر حرکت اسکلت جامد بیان شوند بنابراین با اعمال قضیه دیورژوانس روی معادله (۳-۱) در فرم محلی داریم:

¹ Mass Density

² Mollar Concentration

$$\frac{d\xi}{dt} + \nabla \cdot (\mathbf{v}_\alpha \xi) = 0 \quad (3-3)$$

با فرض:

$$\mathbf{v}_\alpha = (\mathbf{v}_\alpha - \mathbf{v}_s) + \mathbf{v}_s \quad (3-4)$$

داریم:

$$\begin{aligned} & \frac{d\xi}{dt} + \nabla \cdot (\xi(\mathbf{v}_\alpha - \mathbf{v}_s) + \mathbf{v}_s) \\ &= \frac{d\xi}{dt} + \nabla \cdot (\xi(\mathbf{v}_\alpha - \mathbf{v}_s)) + \xi \nabla \cdot \mathbf{v}_s + \mathbf{v}_s \cdot \nabla \xi \\ &= \frac{D^s \xi}{Dt} + \nabla \cdot (\xi(\mathbf{v}_\alpha - \mathbf{v}_s)) + \xi \nabla \cdot \mathbf{v}_s = 0 \end{aligned} \quad (3-5)$$

۱-۳-۳ معادله بقای جرم سیال

اگر در معادله (۳-۵)، پارامتر ξ را جرم سیال موجود در واحد حجم لحاظ کنیم، ($\xi = n\rho_f$) داریم:

$$\rho_f \frac{D^s n}{Dt} + n \frac{D^s \rho_f}{Dt} + n\rho_f \nabla \cdot \mathbf{v}_s + \nabla \cdot \mathbf{q}_f = 0 \quad (3-6)$$

که در آن n تخلخل اویلری^۱ و ρ_f چگالی ذاتی^۲ سیال است. همچنین:

$$\mathbf{q}_f = (n\rho_f(\mathbf{v}_f - \mathbf{v}_s)) \quad (3-7)$$

¹ Eulerian Porosity

² Intrinsic Density

برای توصیف رفتار ماده، نیاز است که یک رابطه برای تغییر شکل ماده تحت تنش، فشار سیال، تغییر دما و تغییر غلظت و همچنین مجموعه‌ای از قوانین هدایت^۱ را برای توصیف جریان سیال، انتقال شیمیایی و انتقال حرارت مشخص کنیم. در اینجا از نظریه ترموپروالاستیک^۲ که توسط کاوشی [۵۰] توسعه داده شده، استفاده می‌شوند. بر اساس این مدل براساس فرض کرنش‌های کوچک داریم:

$$\phi - \phi_0 = \alpha_{ij} \varepsilon_{ij} + \frac{P_f - P_{f0}}{N} - \beta_T (T - T_0) + \lambda_b c_c R T c \quad (۳-۸)$$

که در آن $\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}(\partial u_i / \partial x_j + \partial u_j / \partial x_i)$ تانسور کرنش‌های کوچک^۳، ϕ تخلخل لاگرانژی^۴، α ضریب بيو، β_T ضریب انبساط حرارتی، λ_b ضریب بازتاب هیدرولیکی شیمیایی، c_c ضریبی بدون بعد که با رابطه $\alpha / K_B c$ بیان می‌شود، R ثابت جهانی گازها و N مدول مماسی بيو که تغییرات فشار و تخلخل را به هم مرتبط می‌سازد. ضریب بيو تاثیر تغییر شکل فاز جامد تحت فشار سیال را نشان می‌دهد و از رابطه $\alpha = 1 - \frac{K_T}{K_S}$ محاسبه می‌شود که در آن K_T و مدول بالک مخلوط و K_S مدول بالک جامد است. α_μ نیز خود تابعی از ضریب بيو بوده و بیان گر تاثیر فشار اسمزی بر فاز جامد است. این ضریب به صورت $\alpha_\mu = \lambda_a R T_0$ تعریف می‌شود که در آن λ_a ضریب بازتاب مکانیکی شیمیایی خاک است که از داده‌های آزمایشگاهی استخراج می‌گردد. همچنین برای سازگاری با معادلات اصلی، لازم است تخلخل لاگرانژی به تخلخل اویلری تبدیل شود. برای تغییر شکل‌های کوچک برای این تبدیل داریم:

$$\phi = J n = (1 + \varepsilon_v) n \quad (۳-۹)$$

که در آن J دترمینان گرادیان تغییر شکل و ε_v کرنش حجمی است. بر اساس رابطه (۳-۹) داریم:

$$d\phi = dn + dn\varepsilon_v + d\varepsilon_v n = dn + d\varepsilon_v n \quad (۳-۱۰)$$

¹ Conduction Laws

² Thermoporoelastic Theory

³ Infinitesimal Strain Tensor

⁴ Lagrangian Porosity

در رابطه (۳-۱۰) از جمله $dn\varepsilon_v$ به علت اینکه تقریب مرتبه دوم است و مقدار بسیار کوچکی در برابر ترم‌های دیگر دارد، صرف نظر شده است. با در نظر گرفتن جمله اول بسط تیلور برای رابطه تخلخل لاگرانژی داریم:

$$n = \frac{\phi}{1 + \varepsilon_v} \approx \phi(1 - \varepsilon_v) \quad (۳-۱۱)$$

با جایگذاری رابطه (۳-۹) در معادله (۳-۸) می‌توان نوشت:

$$\begin{aligned} n - n_0 &= \alpha_{ij}\varepsilon_{ij} + \frac{P_f - P_{f0}}{N} - \beta_{Ts}(T - T_0) - n\varepsilon_v - \lambda_b c_c RT_0 c \\ &= (\alpha - n)\varepsilon_v + \frac{P_f - P_{f0}}{N} - \beta_T(T - T_0) - \lambda_b c_c RT_0 c \end{aligned} \quad (۳-۱۲)$$

با اصلاح قانون تراوش دارسی و در نظر گرفتن اثر شتاب فاز جامد و همچنین اثر گرادیان فشار اسمزی، می‌توان رابطه سرعت سیال را استخراج کرد:

$$\mathbf{w}_f = n\rho_f(\mathbf{v}_f - \mathbf{v}_s) = -\frac{\mathbf{k}}{\mu} \left((\nabla P - \rho_f \mathbf{b} + \rho_f \ddot{\mathbf{u}}) + \lambda RT \nabla c \right) \quad (۳-۱۳)$$

که در آن $\mathbf{k}$ ماتریس نفوذپذیری ذاتی محیط، μ ویسکوزیته دینامیکی سیال، λ ضریب بازتاب و R_0 ثابت جهانی گازها است. برای سادگی از این پس $\frac{\mathbf{k}}{\mu}$ با $\mathbf{k}_f$ و همچنین $\lambda R_0 T$ با $\kappa_{pc}(T)$ نمایش داده خواهد شد. با فرض تاثیر فشار و دما بر فشردگی فاز سیال داریم:

$$\begin{aligned} \frac{D}{Dt} \rho_f &= \frac{\partial \rho_f}{\partial \dot{P}_f} \dot{P}_f + \frac{\partial \rho_f}{\partial \dot{T}} \dot{T} + \frac{\partial \rho_f}{\partial \dot{c}} \dot{c} \\ &= \frac{\rho_f}{K_f} \dot{P}_f - \rho_f \beta_{Tf} \dot{T} + \rho_f \frac{\alpha'_c \alpha'_\mu}{nK} \dot{c} \end{aligned} \quad (۳-۱۴)$$

که در آن K_f مدول بالک فاز سیال و α'_c مشابه ضریب بيو تعريف می‌شود با این تفاوت که α'_c نسبت تغییر حجم سیال به تغییر حجم کل تحت شرایط زهکشی شده و غلظت ثابت است. با جایگذاری روابط (۳-۱۲) و (۳-۱۳) در معادله (۳-۶) داریم:

$$\begin{aligned}
& \rho_f \frac{D^s n}{Dt} + n \frac{D^s \rho_f}{Dt} + n \rho_f \nabla \cdot \mathbf{v}_s + \nabla \cdot \mathbf{q}_f \\
& = \rho_f \left((\alpha - n) \varepsilon_v + \frac{\dot{P}_f}{N} - \beta_{Ts}(\dot{T}) - \lambda_b c_c R T_0 \dot{c} \right) \\
& \quad + n \left(\frac{\rho_f}{K_f} \dot{P}_f - \rho_f \beta_{Tf} \dot{T} + \rho_f \frac{\alpha'_c \alpha_\mu}{nK} \dot{c} \right) + n \rho_f \varepsilon_v + \nabla \cdot \mathbf{q}_f \\
& = \alpha \varepsilon_v + \left(\frac{1}{N} + \frac{n}{K_f} \right) \dot{P}_f - (\beta_{Ts} + n \beta_{Tf}) \dot{T} - (\lambda_b c_c R T_0 - \frac{\alpha'_c \alpha_\mu}{K}) \dot{c} + \frac{1}{\rho_f} \nabla \cdot \mathbf{q}_f
\end{aligned} \tag{۳-۱۵}$$

بنابراین فرم نهایی معادله بقای جرم سیال را می‌توان به این صورت نوشت:

$$\alpha \nabla \cdot \dot{\mathbf{u}} + \nabla \cdot \mathbf{w}_f + \frac{\dot{P}}{Q} - \beta_T \dot{T} - \beta_c \dot{c} = 0$$

$$\mathbf{w}_f = [\mathbf{k}_f (-\nabla P + \rho_f \mathbf{b} - \rho_f \ddot{\mathbf{u}}) + \kappa_{pc} \nabla c]$$

$$Q = \frac{1}{N} + \frac{n}{K_f} \tag{۳-۱۶}$$

$$\beta_T = \beta_{Ts} + n \beta_{Tf}$$

$$\beta_c = \lambda_b c_c R T_0 - \frac{\alpha'_c \alpha_\mu}{K}$$

۳-۳-۲ معادله بقای جرم اسکلت جامد

اگر در معادله (۳-۵)، پارامتر ξ را جرم اسکلت جامد موجود در واحد حجم لحاظ کنیم، $((1-n)\rho_s)$ داریم:

$$-\rho_s \frac{D^s n}{Dt} + (1-n) \frac{D^s \rho_s}{Dt} + (1-n) \rho_s \nabla \cdot \mathbf{v}_s = 0 \tag{۳-۱۷}$$

که در آن ρ_s چگالی ذاتی اسکلت جامد است. با توجه به عدم تبادل جرم بین فازها و همچنین عدم انتقال جرم در فاز جامد، معادله بقای جرم اسکلت جامد برقرار بوده و نیاز به در نظر گرفتن آن نیست.

۳-۳-۳ معادله تعادل غلظت حل شونده

اگر در معادله (۳-۵)، پارامتر ξ را غلظت مولی حل شونده (nc) فرض کنیم، داریم:

$$\frac{D^s}{Dt}(nc) + nc\nabla \cdot \mathbf{v}_s + \nabla \cdot ((\mathbf{v}_c - \mathbf{v}_s)nc) = 0 \quad (۳-۱۸)$$

از تعریف جریان مولی حل شونده نسبت به جریان کل داریم:

$$\mathbf{J}_c = (\mathbf{v}_c - \mathbf{v}_f)nc \quad (۳-۱۹)$$

بنابراین از معادله (۳-۱۸) و (۳-۱۹) میتوان نتیجه گرفت:

$$\begin{aligned} & \frac{D^s}{Dt}(nc) + nc\nabla \cdot \mathbf{v}_s + \nabla \cdot ((\mathbf{v}_c - (\mathbf{v}_s - \mathbf{v}_f) - \mathbf{v}_f)nc) \\ &= n \frac{D^s}{Dt}(c) + c \frac{D^s}{Dt}(n) + nc\nabla \cdot \mathbf{v}_s + \nabla \cdot \mathbf{J}_c + \nabla \cdot \left(\frac{c}{\rho_f} \mathbf{q}_f\right) = 0 \end{aligned} \quad (۳-۲۰)$$

در این معادله از تغییرات تخلخل و ترم کرنش فاز جامد و همچنین تغییرات سرعت سیال در دامنه، صرف نظر می‌شود. بنابراین فرم نهایی معادله تعادل غلظت حل شونده را می‌توان به این صورت نوشت:

$$\begin{aligned} & \nabla \cdot \mathbf{J}_c + n\dot{c} + \mathbf{w}_f \cdot \nabla c = 0 \\ & \mathbf{J}_c = (\kappa_{cp} \nabla P - (1 - \lambda)D_c \nabla c) \end{aligned} \quad (۳-۲۱)$$

$$\kappa_{cp} = (1 - \lambda)c_0 k_f$$

که در آن c_0 غلظت مولی اولیه حل شونده است و طبق رابطه $\rho_f x_s^0 / (x_s^0 m_s + x_w^0 m_w)$ محاسبه می‌شود که x_s^0 و x_w^0 به ترتیب نسبت جرمی حل شونده و حلال درون، m_s و m_w جرم مولی حلال و حل شونده هستند. همچنین D_c ضریب انتشار جرمی محیط است.

۳-۳-۴ معادله تعادل مکانیکی محیط

معادله تعادل مکانیکی محیط را با فرض تعادل نیرویی در یک حجم دیفرانسیلی میتوان به فرم زیر استخراج کرد:

$$\nabla \cdot \sigma - \rho \ddot{\mathbf{u}} + \rho \mathbf{b} = 0 \quad (3-22)$$

که در آن σ تانسور تنش کوشی^۱ و $\mathbf{b}$ نیروهای بدنه^۲ هستند و همچنین:

$$\rho = (1 - n)\rho_s + n\rho_f \quad (3-23)$$

بر اساس تئوری ترموپوروالاستیک تنش اسکلت جامد تحت تاثیر تنش فاز جامد، فشار آب حفره‌ای، تنش گرمایی و تنش ناشی از تغییرات غلظت (فشار اسمزی) است. بر این اساس داریم:

$$\begin{aligned} \sigma &= \sigma' - \alpha p \mathbf{I} + \alpha_\mu \mathbf{m} c \\ \sigma' &= \mathbf{D}(\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_T) \end{aligned} \quad (3-24)$$

که در آن σ' تنش موثر، $\mathbf{m}$ دلتای کرونگر^۳ و $\boldsymbol{\varepsilon}_T$ کرنش حرارتی است. بنابراین فرم نهایی معادله تعادل مکانیکی را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$\nabla \cdot (\mathbf{D}(\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_T) - \alpha p \mathbf{I} + \alpha_\mu c \mathbf{I}) - \rho \ddot{\mathbf{u}} + \rho \mathbf{b} = 0 \quad (3-25)$$

۳-۳-۵ معادله تعادل انرژی داخلی:

تغییرات انرژی داخلی ناشی از تبدلات گرمایی در داخل حجم دیفرانسیلی، برابر با جمع برداری انرژی ورودی و خروجی به حجم دیفرانسیلی مذکور است:

¹ Cauchy Stress Tensor

² Body Force

³ Kronecker Delta

$$\begin{aligned} & \frac{D^s}{Dt} \int_{\Omega} [(1-n)\rho_s c_s T + n\rho_f c_f T] d\Omega \\ &= - \int_{\Gamma} n\rho_f c_f T (\mathbf{v}_f - \mathbf{v}_s) \cdot \mathbf{n} d\Gamma - \int_{\Gamma} \mathbf{J}_T \cdot \mathbf{n} d\Gamma \end{aligned} \quad (3-26)$$

سمت چپ این معادله تغییرات انرژی گرمایی در داخل دامنه، ترم اول سمت راست تغییرات انرژی گرمایی ناشی از اثرات همرفت و ترم دوم سمت راست، تغییرات انرژی گرمایی ناشی از اثرات رسانش است. با اعمال قضیه دیورژوانس و همچنین تبدیل رینولدز بر معادله (3-26) داریم:

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dt} [(1-n)\rho_s c_s T + n\rho_f c_f T] + \nabla \cdot [(1-n)\rho_s c_s T + n\rho_f c_f T] \mathbf{v}_s \\ &= -\nabla \cdot (n\rho_f c_f T (\mathbf{v}_f - \mathbf{v}_s)) - \nabla \cdot \mathbf{J}_T \end{aligned} \quad (3-27)$$

هم چنین با جای گذاری رابطه (3-7) در معادله (3-27) داریم:

$$\begin{aligned} & \frac{D}{Dt} [(1-n)\rho_s c_s T + n\rho_f c_f T] + [(1-n)\rho_s c_s T + n\rho_f c_f T] \nabla \cdot \mathbf{v}_s \\ &+ \nabla \cdot (\rho_f c_f T \mathbf{w}_f) + \nabla \cdot \mathbf{J}_T = 0 \end{aligned} \quad (3-28)$$

با فرض ثابت بودن c_s و c_f معادله (3-28) تبدیل می شود به:

$$\begin{aligned} & [(1-n)\rho_s c_s + n\rho_f c_f] \frac{DT}{Dt} \\ &+ T \left[\rho_s c_s \frac{D(1-n)}{Dt} + c_s (1-n) \frac{D\rho_s}{Dt} + \rho_f c_f \frac{Dn}{Dt} + c_f n \frac{D\rho_f}{Dt} \right] \\ &+ [(1-n)\rho_s c_s T + n\rho_f c_f T] \nabla \cdot \mathbf{v}_s + \nabla \cdot (\rho_f c_f T \mathbf{w}_f) + \nabla \cdot \mathbf{J}_T = 0 \end{aligned} \quad (3-29)$$

در این معادله از تغییرات تداخل، چگالی سیال، چگالی اسکلت جامد در طول زمان صرف نظر می کنیم و هم چنین ترم $[(1-n)\rho_s c_s T + n\rho_f c_f T] \nabla \cdot \mathbf{v}_s$ در برابر دیگر ترم ها به خاطر کرنش های کوچک را می توان در نظر نگرفت. به علاوه به دلیل فرض جریان آرام در محیط تغییرات سرعت سیال بسیار اندک بوده و قابل صرف نظر کردن است. بنابراین معادله (3-29) به فرم زیر در می آید:

$$(\rho c)_{ave} \dot{T} + \rho_f c_f \mathbf{w}_f \cdot \nabla T + \nabla \cdot \mathbf{J}_T = 0$$

$$(\rho c)_{ave} = (1 - n)(\rho c)_s + n(\rho c)_f \quad (3-30)$$

$$\mathbf{J}_T = -\kappa \nabla T$$

که در آن κ ضریب رسانش گرمایی محیط است.

۳-۳-۶ فرم نهایی معادلات و شرایط مرزی

در این پژوهش چهار معادله بدست آمده در قسمت قبل به صورت هم بسته حل خواهند شد. این معادلات عبارت اند از:

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} - \rho \ddot{\mathbf{u}} + \rho \mathbf{b} = 0$$

$$\nabla \cdot \mathbf{w}_f + \alpha \nabla \cdot \dot{\mathbf{u}} + \frac{\dot{P}}{Q} - \beta_T \dot{T} - \beta_c \dot{c} = 0 \quad (3-31)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{J}_T + (\rho c)_{ave} \dot{T} + \rho_f c_f \mathbf{w}_f \cdot \nabla T = 0$$

$$\nabla \cdot \mathbf{J}_c + n \dot{c} + \mathbf{w}_f \cdot \nabla c = 0$$

برای حل این دستگاه معادلات نیاز است شروط مرزی هر معادله از نوع دیریکله^۱ و نیومن^۲ مشخص شود. در جدول ۳-۱ برای هر معادله، شروط مرزی به تفکیک بیان شده است.

جدول ۳-۱ شرایط مرزی دیریکله و نیومن برای معادلات حاکم در این پژوهش

Equations	Dirichlet B.C	Neumann B.C
Mechanical	$\mathbf{u} = \hat{\mathbf{u}} \quad \mathbf{u} \in \Gamma_u$	$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}_\Gamma = \hat{\mathbf{t}} \quad \mathbf{u} \in \Gamma_t$
Hydraulic	$p = \hat{p} \quad p \in \Gamma_p$	$\mathbf{w} \cdot \mathbf{n}_\Gamma = -\hat{q}_f \quad p \in \Gamma_{q_f}$
Thermal	$T = \hat{T} \quad T \in \Gamma_T$	$\mathbf{J}_T \cdot \mathbf{n}_\Gamma = -\hat{q}_T \quad T \in \Gamma_{q_T}$

¹ Dirichlet Boundary Condition

² Neumann Boundary Condition

Chemical

$$c = \hat{c} \quad c \in \Gamma_c$$

$$\mathbf{J}_c \cdot \mathbf{n}_r = -\hat{q}_c \quad c \in \Gamma_{q_c}$$

فصل ۴: تئوری چندمقیاسی

۴-۱ مقدمه

در این فصل ابتدا تئوری چندمقیاسی با رویکرد همگن سازی محاسباتی بیان شده و سپس با توجه به معادلات به دست آمده در فصل سوم، فرم ضعیف معادلات مقیاس ماکرو و مقیاس میکرو به دست می آید. سپس با استفاده از اصل هیل مندل تعمیم یافته و برقراری سازگاری انرژی در دو مقیاس، ارتباط بین کمیت های ماکرو و میکرو به دست می آید. در ادامه با توجه به تئوری همگن سازی محاسباتی، محاسبات بر اساس دو شرط مرزی خطی و تناوبی برای مقیاس میکرو انجام شده و مسئله مقدار مرزی مقیاس کوچک، حل و کمیت های ماکرو بر اساس آن استخراج خواهند شد.

۴-۲ کلیات روش همگن سازی محاسباتی

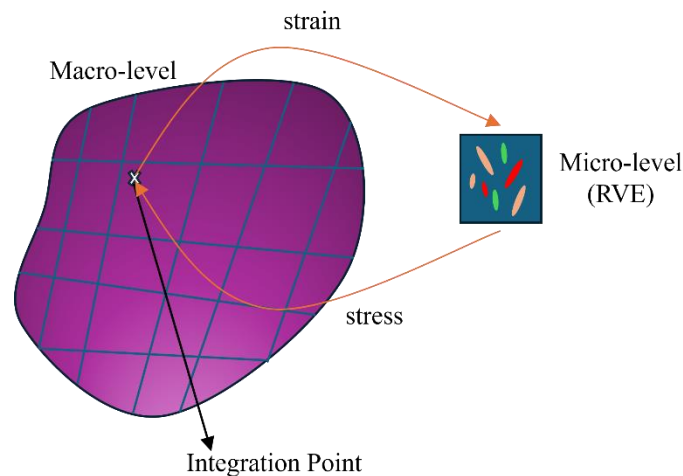
روش همگن سازی محاسباتی بر پایه ایده ایجاد یک ارتباط سیستماتیک بین مقیاس ماکرو (رفتار کلی سازه یا دامنه) و مقیاس میکرو (ساختار ریز ماده) استوار است. در این رویکرد، فرض می شود که محیط مورد مطالعه از تکرار یک حجم مشخص با ویژگی های هندسی و فیزیکی تقریباً مشابه، موسوم به المان حجمی نمونه (RVE)^۱ تشکیل شده است. این RVE کوچک ترین حجم آماری است که می تواند ویژگی های ماکروسکوپی ماده را به طور میانگین بازتاب دهد.

در همگن سازی محاسباتی، به جای تعیین روابط بسته تحلیلی برای خواص مؤثر ماده، این خواص از طریق حل مستقیم یک مسأله میکروسکوپی بر روی RVE و سپس میانگین گیری پارامترها استخراج می شوند. بدین ترتیب، در هر نقطه انتگرالی از المان دامنه ماکروسکوپی، یک مسأله میکروسکوپی موازی در RVE متناظر حل می شود. این فرآیند به صورت دوطرفه انجام می گیرد به طوری که پارامترهای ماکرو به عنوان شرط مرزی به مسأله میکرو اعمال شده و پس از حل آن، تنش ها و سایر پارامترهای مؤثر به مقیاس ماکرو بازگردانده می شوند.

برای تعریف شرایط مرزی در RVE، بسته به نوع مسئله و فرضیات همگن سازی، روش های مختلفی به کار می روند که در این پژوهش از دو روش رایج شرط مرزی خطی و شرط مرزی تناوبی استفاده می شود که در ادامه جزئیات این دو روش به طور مفصل بیان خواهد شد.

¹ Representative Volume Element

در شکل ۴-۱ روش همگن سازی محاسباتی برای یک دامنه ناهمگن به طور شماتیک نشان داده شده است که بر اساس آن ابتدا یک دامنه ماکروسکوپی مشابه هندسه مسئله ولی به صورت همگن تعریف شده و در هر نقطه انتگرالی با تعریف المان حجمی نمونه که متشکل از ناهمگنی های مسئله است، مسئله مقدار مرزی حل می شود. سپس با استفاده از اصل میانگین گیری پارامترهای ماکرو محاسبه می شود.



شکل ۴-۱ مدل شماتیک روش همگن سازی محاسباتی

۴-۳ تئوری همگن سازی محاسباتی

در تئوری همگن سازی محاسباتی سه فرض اساسی وجود دارد:

- ۱- سائز المان حجمی نمونه در مقیاس میکرو، بسیار کوچکتر از ابعاد مقیاس ماکرو است.
 - ۲- مقادیر هر پارامتر مسئله در مقیاس ماکرو، برابر میانگین آن پارامتر در مقیاس میکرو در RVE متناظر آن نقطه ماکرو است.
 - ۳- مقدار انرژی در هر نقطه ماکرو برابر مقدار میانگین انرژی در RVE متناظر آن نقطه در مقیاس میکرو است.
- مقدار هر پارامتر در میدان میکرو را می توان با استفاده از رابطه همگن سازی مرتبه اول به این صورت نوشت:

$$\mathbf{u}_m = \bar{\mathbf{u}} + \mathbf{H}^T \bar{\mathbf{V}} \bar{\mathbf{u}} + \tilde{\mathbf{u}} \quad (۴-۱)$$

$$\mathbf{p}_m = \bar{\mathbf{p}} + \mathbf{x}^T \bar{\mathbf{V}} \bar{\mathbf{p}} + \tilde{\mathbf{p}} \quad (۴-۲)$$

$$T_m = \bar{T} + \mathbf{x}^T \bar{\nabla} \bar{T} + \tilde{T} \quad (\xi-3)$$

$$c_m = \bar{c} + \mathbf{x}^T \bar{\nabla} \bar{c} + \tilde{c} \quad (\xi-4)$$

که در آن $\bar{\mathbf{x}} \in \bar{\Omega}$ مختصات یک نقطه در مقیاس ماکرو و $\mathbf{x} \in \Omega$ مختصات یک نقطه از RVE متناظر با آن نقطه است. همچنین $\bar{\mathbf{u}}$ و $\bar{p}$ و $\bar{T}$ و $\bar{c}$ ، به ترتیب میدان جابجایی، فشار، دما و غلظت، $\bar{\nabla} \bar{\mathbf{u}}$ و $\bar{\nabla} \bar{p}$ و $\bar{\nabla} \bar{T}$ و $\bar{\nabla} \bar{c}$ گرادیان جابجایی (کرنش)، گرادیان فشار، گرادیان دما و گرادیان غلظت در میدان ماکرو هستند. $\tilde{\mathbf{u}}$ و $\tilde{p}$ و $\tilde{T}$ و $\tilde{c}$ نیز میدان نوسانات جابجایی، فشار، دما و غلظت هستند که از حل مسئله مقدار مرزی در میکرو به دست می آیند. عملگر $\mathbf{H}$ و $\mathbf{x}$ نیز تابع مختصات میکرو هستند و به این صورت تعریف می شوند:

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} x_1 & 0 \\ 0 & x_2 \\ 1 & 1 \\ \frac{1}{2}x_2 & \frac{1}{2}x_1 \end{bmatrix} \quad \mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \quad (\xi-5)$$

بر اساس فرض شماره ۱ همگن سازی، واضح است که پارامترهای ماکرو در میدان میکرو ثابت هستند، به عبارتی:

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{u}}}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial \bar{p}}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial \bar{T}}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial \bar{c}}{\partial \mathbf{x}} = 0 \quad (\xi-6)$$

مفروضات گفته شده در همگن سازی محاسباتی، در واقع نتایج و دستاوردهای همگن سازی ریاضی در یک مدل مکانیکی ساده در شرایط الاستیک خطی است که در همگن سازی محاسباتی برای تمام حالت ها و برای تمام معادلات به عنوان فرض در نظر گرفته می شود. از بسط سری تیلور در همگن سازی ریاضی اثبات می شود که جمله اول بسط صرفاً تابع مختصات ماکرو است و همچنین جمله دوم با گرادیان پارامتر ماکرو در ارتباط است. به عبارتی با فرض بسط تیلور برای پارامتر جابجایی در همگن سازی ریاضی داریم:

$$\mathbf{u}^\varepsilon(\mathbf{x}_M) = \mathbf{u}_0(\mathbf{x}_M, \mathbf{x}_\mu) + \varepsilon \mathbf{u}_1(\mathbf{x}_M, \mathbf{x}_\mu) + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \quad (\xi-7)$$

که در روش همگن سازی ریاضی، موارد زیر اثبات می شود:

$$\mathbf{u}_0(\mathbf{x}_M, \mathbf{x}_\mu) = \mathbf{u}_0(\mathbf{x}_M)$$

$$\varepsilon \mathbf{U}_1(\mathbf{x}_M, \mathbf{x}_\mu) = \mathbf{x}_\mu \nabla \mathbf{u}$$

(۴-۸)

$$\mathcal{O}(\varepsilon^2) = \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}_\mu, t)$$

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}_M) = \int_{\Omega_\mu} \mathbf{u}^\varepsilon(\mathbf{x}_M, \mathbf{x}_\mu) d\mathbf{y}$$

این نتایج اثبات شده در روش ریاضی، مشابه با فرضیات روش محاسباتی است با این تفاوت که در روش ریاضی با فرض الاستیک خطی این نتایج به اثبات رسید ولی در روش محاسباتی این نتایج با تقریب، برای هر شرایطی، پذیرفته می‌شود. لازم به ذکر است که پارامتر میدان نوسانات در روش محاسباتی، ترمی است که نقش جملات مرتبه بالا در بسط تیلور را ایفا می‌کند.

از فرض دوم همگن‌سازی می‌دانیم که مقدار کرنش ماکرو با میانگین کرنش در میکرو، برابر است. به عبارتی:

$$\begin{aligned} \bar{\varepsilon} &= \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu} \varepsilon_\mu(\mathbf{x}, t) dV = \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu} (\bar{\varepsilon} + \tilde{\varepsilon}_\mu(\mathbf{x}, t)) dV \\ &= \bar{\varepsilon} + \frac{1}{V_\mu} \int_{\Omega_\mu} \tilde{\varepsilon}_\mu(\mathbf{x}, t) dV \end{aligned} \quad (۴-۹)$$

از معادله (۴-۹) میتوان نتیجه گرفت:

$$\int_{\Omega_\mu} \tilde{\varepsilon}_\mu(\mathbf{x}, t) dV = \int_{\Omega_\mu} \nabla \tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{x}, t) dV = 0 \quad (۴-۱۰)$$

با اعمال قضیه دیورژوانس روی معادله (۴-۱۰) داریم:

$$\int_{\Omega_\mu} \nabla \tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{x}, t) dV = \int_{\Gamma_\mu} \tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{n} ds = 0 \quad (۴-۱۱)$$

با تکرار این روند بر روی سه معادله دیگر می‌توان نتیجه گرفت:

$$\int_{\Omega_\mu} \nabla \tilde{p}_\mu(\mathbf{x}, t) dV = \int_{\Gamma_\mu} \tilde{p}_\mu(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{n} ds = 0 \quad (4-12)$$

$$\int_{\Omega_\mu} \nabla \tilde{T}_\mu(\mathbf{x}, t) dV = \int_{\Gamma_\mu} \tilde{T}_\mu(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{n} ds = 0 \quad (4-13)$$

$$\int_{\Omega_\mu} \nabla \tilde{c}_\mu(\mathbf{x}, t) dV = \int_{\Gamma_\mu} \tilde{c}_\mu(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{n} ds = 0 \quad (4-14)$$

معادلات (4-11) تا (4-14) به عنوان شرط مرزی اول در نظر گرفته می‌شوند که در حل مسئله مقدار مرزی میکرو بایستی ارضا گردند. به این معادلات در بخش اعمال شرط مرزی دوباره اشاره خواهد شد.

4-4 معادلات حاکم بر دو مقیاس

برای حل معادلات ارائه شده به روش اجزا محدود و همچنین برقراری اصل هیل-مندل لازم است معادلات بدست آمده در فصل قبل، که به فرم قوی ارائه شده بودند، به فرم ضعیف تبدیل شوند. در این بخش برای دو مقیاس میکرو و ماکرو، فرم ضعیف معادلات به طور مجزا ارائه می‌شوند.

4-4-1 فرم ضعیف معادلات در مقیاس ماکرو

به منظور استخراج فرم ضعیف معادلات در مقیاس ماکرو با استفاده از معادلات بدست آمده در فصل قبلی لازم است ابتدا تابع آزمون در هر معادله ضرب شده و سپس با استفاده از قانون مشتق زنجیره‌ای و اعمال قضیه دیورژوانس، فرم ضعیف معادلات به دست آید. با توجه به اینکه پارامترهای تنش، سرعت سیال، شار حرارتی و شار شیمیایی، از حل مسئله مقدار مرزی میکرو بدست می‌آیند، بنابراین نیاز به باز کردن این پارامترها در این مقیاس نیست و معادلات در فرم کلی‌تر نوشته می‌شوند. برای این منظور با توجه به معادلات (3-31) با ضرب تابع آزمون مناسب در فرم قوی معادلات و همچنین انتگرال گیری روی دامنه، داریم:

$$\int_{\Omega} \delta \bar{u} [\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \bar{f}_l^u] d\Omega = 0 \quad (4-15)$$

$$\int_{\Omega} \delta p [\nabla \cdot \mathbf{w}_f + \bar{f}_l^p] d\Omega = 0 \quad (4-16)$$

$$\int_{\Omega} \delta T [\nabla \cdot \mathbf{J}_T + \bar{f}_I^T] d\Omega = 0 \quad (۴-۱۷)$$

$$\int_{\Omega} \delta c [\nabla \cdot \mathbf{J}_c + \bar{f}_I^c] d\Omega = 0 \quad (۴-۱۸)$$

با انتگرال گیری جزیه جز بر ترم اول معادلات (۴-۱۵) تا (۴-۱۸) و اعمال قضیه دیورژوانس بر آن‌ها، فرم ضعیف معادلات مقیاس ماکرو بدست می‌آید:

$$\int_{\bar{\Omega}} ((\bar{\nabla} \delta \bar{\mathbf{u}})) : \bar{\boldsymbol{\sigma}} d\bar{\Omega} - \int_{\bar{\Omega}} \delta \bar{\mathbf{u}} \bar{\mathbf{f}}_I^u d\bar{\Omega} - \int_{\bar{\Gamma}_t} \delta \bar{\mathbf{u}} \bar{\mathbf{t}} d\bar{\Gamma}_t = 0 \quad (۴-۱۹)$$

$$- \int_{\bar{\Omega}} (\bar{\nabla} \delta \bar{p}) \cdot \bar{\mathbf{w}}_f d\bar{\Omega} + \int_{\bar{\Omega}} \delta \bar{p} \bar{\mathbf{f}}_I^p d\bar{\Omega} - \int_{\bar{\Gamma}_p} \delta \bar{p} \bar{q} d\bar{\Gamma}_p = 0 \quad (۴-۲۰)$$

$$- \int_{\bar{\Omega}} \delta \bar{\nabla}(\bar{T}) \cdot \bar{\mathbf{J}}_T d\bar{\Omega} + \int_{\bar{\Omega}} \delta \bar{T} \bar{\mathbf{f}}_I^T d\bar{\Omega} - \int_{\bar{\Gamma}_T} \delta \bar{T} \bar{g} d\bar{\Gamma}_T = 0 \quad (۴-۲۱)$$

$$- \int_{\bar{\Omega}} \delta \bar{\nabla}(\bar{c}) \cdot \bar{\mathbf{J}}_c d\bar{\Omega} + \int_{\bar{\Omega}} \delta \bar{c} \bar{\mathbf{f}}_I^c d\bar{\Omega} - \int_{\bar{\Gamma}_c} \delta \bar{c} \bar{y} d\bar{\Gamma}_c = 0 \quad (۴-۲۲)$$

در معادلات (۴-۱۹) تا (۴-۲۲) $\bar{\Omega}$ دامنه مسئله در مقیاس ماکرو، $\bar{\Gamma}_t$ و $\bar{\Gamma}_p$ و $\bar{\Gamma}_T$ و $\bar{\Gamma}_c$ به ترتیب مرز اعمال بارگذاری نیرو، فشار، دما و غلظت در مقیاس ماکرو است. $\bar{\mathbf{t}}$ و $\bar{q}$ و $\bar{g}$ و $\bar{y}$ نیز به ترتیب، بردار نیرو، نرخ جریان هیدرولیکی، نرخ جریان دمایی، نرخ جریان شیمیایی است، به طوری که:

$$\bar{\mathbf{t}} = \bar{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \bar{\mathbf{n}}_{\Gamma_t} \quad (۴-۲۳)$$

$$\bar{q} = -\bar{\mathbf{w}}_f \cdot \bar{\mathbf{n}}_{\Gamma_p} \quad (۴-۲۴)$$

$$\bar{g} = -\bar{\mathbf{J}}_T \cdot \bar{\mathbf{n}}_{\Gamma_T} \quad (۴-۲۵)$$

$$\bar{y} = -\bar{\mathbf{J}}_c \cdot \bar{\mathbf{n}}_{\Gamma_c} \quad (۴-۲۶)$$

۴-۴-۲ فرم ضعیف معادلات در مقیاس میکرو

در مقیاس میکرو با توجه به حضور اثرات ویژگی‌های ماده، لازم است معادلات (۳-۳۱) با تمام جزئیات بررسی شوند. برای بدست آوردن فرم ضعیف معادلات در این مقیاس با ضرب تابع آزمون در فرم قوی و انتگرال گیری روی دامنه داریم:

$$\int_{\Omega} \delta \mathbf{u} [\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} - \rho \ddot{\mathbf{u}} + \rho \mathbf{b}] d\Omega = 0 \quad (۴-۲۷)$$

$$\int_{\Omega} \delta p [\nabla \cdot \mathbf{w}_f + \alpha'_c \nabla \cdot \dot{\mathbf{u}} + \frac{\dot{P}}{Q} - \beta_T \dot{T} - \beta_\varepsilon \dot{c}] d\Omega = 0 \quad (۴-۲۸)$$

$$\int_{\Omega} \delta T [\nabla \cdot (-\kappa \nabla T) + (\rho c)_{ave} \dot{T} + (\rho_f c_f \mathbf{w}_f \cdot \nabla T)] d\Omega = 0 \quad (۴-۲۹)$$

$$\int_{\Omega} \delta c [\nabla \cdot \mathbf{J}_c + n \dot{c} + \mathbf{w}_f \cdot \nabla c] d\Omega = 0 \quad (۴-۳۰)$$

مانند قسمت قبل در اینجا هم با انتگرال گیری جزء به جزء روی ترم اول معادلات (۴-۲۷) تا (۴-۳۰) و سپس اعمال قضیه دیورژوانس، فرم ضعیف معادلات در مقیاس میکرو بدست می‌آید:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} (\nabla \delta \mathbf{u}) : (\mathbf{D}(\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_T) - \alpha p \mathbf{I} + \alpha_\mu c \mathbf{I}) d\Omega - \int_{s_u} (\delta \mathbf{u} \cdot \mathbf{t}) ds + \int_{\Omega} \delta \mathbf{u} \cdot \rho \ddot{\mathbf{u}} d\Omega \\ - \int_{\Omega} \delta p \rho \mathbf{b} d\Omega = 0 \end{aligned} \quad (۴-۳۱)$$

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \delta p \alpha'_c \nabla \cdot \dot{\mathbf{u}} d\Omega - \int_{\Omega} (\nabla \delta p) [\mathbf{k}_f (-\nabla P + \rho_f \mathbf{b} - \rho_f \dot{\mathbf{u}}) + \kappa_{pc} \nabla c] d\Omega \\ - \int_{s_p} \delta p \bar{q}_p ds + \int_{\Omega} \delta p \frac{\dot{P}}{Q} d\Omega - \int_{\Omega} \delta p \beta_T \dot{T} d\Omega - \int_{\Omega} \delta p \beta_\varepsilon \dot{c} d\Omega = 0 \end{aligned} \quad (۴-۳۲)$$

$$\int_{\Omega} \delta T (\rho c)_{ave} \dot{T} d\Omega + \int_{\Omega} \delta T \rho_f c_f \mathbf{w}_f \cdot \nabla T d\Omega - \int_{\Omega} \delta \nabla T \cdot \kappa (-\nabla T) d\Omega - \int_{s_T} \delta T q_T dS = 0 \quad (۴-۳۳)$$

$$- \int_{\Omega} \nabla(\delta c) (\kappa_{c_p} \nabla P - (1 - \lambda) D_c \nabla c) d\Omega - \int_{s_c} \delta c q_c dS + \int_{\Omega} \delta c n \dot{c} d\Omega + \int_{\Omega} \delta c \mathbf{w}_f \cdot \nabla c d\Omega = 0 \quad (۴-۳۴)$$

که مقادیر $\mathbf{t}$ و $\bar{q}_p$ و q_T و q_c به ترتیب برابر $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}_{\Gamma_t}$ و $-\mathbf{w}_f \cdot \mathbf{n}_{\Gamma_p}$ و $-\mathbf{J}_T \cdot \mathbf{n}_{\Gamma_T}$ و $-\mathbf{J}_c \cdot \mathbf{n}_{\Gamma_c}$ هستند که بیانگر بردار نیرو، نرخ جریان هیدرولیکی، نرخ جریان گرمایی و نرخ جریان شیمیایی در مرز RVE هستند.

۴-۵ اصل هیل - مندل تعمیم یافته

در برقراری ارتباط بین مقایس‌ها سازگاری انرژی‌ها بین دو مقیاس، یک قانون بنیادی تلقی می‌شود به طوری‌که میانگین حجمی انرژی ناشی از کار مجازی در مقیاس میکرو باید با انرژی در نقطه متناظر با این RVE در مقیاس ماکرو برابر باشد. برای معادلات THMC این اصل را می‌توان این گونه بیان کرد:

$$\begin{aligned} \langle \delta W_{\mu}^u \rangle &= \delta \bar{W}_M^u \\ \langle \delta W_{\mu}^p \rangle &= \delta \bar{W}_M^p \\ \langle \delta W_{\mu}^T \rangle &= \delta \bar{W}_M^T \\ \langle \delta W_{\mu}^c \rangle &= \delta \bar{W}_M^c \end{aligned} \quad (۴-۳۵)$$

با توجه به معادلات (۴-۱۹) تا (۴-۲۲)، انرژی در یک نقطه ماکرو را میتوان به صورت زیر تعریف کرد:

$$\delta \bar{W}_M^u = \delta(\bar{\nabla} \bar{\mathbf{u}}) : \bar{\boldsymbol{\sigma}} - \delta \bar{\mathbf{u}} \cdot \bar{\mathbf{f}}_I^u \quad (۴-۳۶)$$

$$\delta \bar{W}_M^p = -\delta(\bar{\nabla} p) \cdot \bar{\mathbf{w}}_f + \delta p \bar{f}_I^p \quad (۴-۳۷)$$

$$\delta \bar{W}_M^T = -\delta(\bar{\nabla} T) \cdot \bar{\mathbf{J}}_T + \delta T \bar{f}_I^T \quad (۴-۳۸)$$

$$\delta \bar{W}_M^c = -\delta(\bar{\nabla} c) \cdot \bar{\mathbf{J}}_c + \delta c \bar{f}_I^c \quad (۴-۳۹)$$

همچنین برای محاسبه میانگین حجمی انرژی در RVE، با توجه به معادلات (۳۱-۴) تا (۳۴-۴) داریم:

$$\begin{aligned}\langle \delta W_\mu^u \rangle &= \frac{1}{|\Omega_\mu|} \left(\int_\Omega (\nabla \delta \mathbf{u}) : \boldsymbol{\sigma} d\Omega + \int_\Omega \delta \mathbf{u} \cdot \rho \ddot{\mathbf{u}} d\Omega - \int_\Omega \delta \mathbf{u} \cdot \rho \mathbf{b} d\Omega \right) \\ &= \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{s_u} (\delta \mathbf{u} \cdot \mathbf{t}) ds\end{aligned}\quad (۴-۴۰)$$

$$\begin{aligned}\langle \delta W_\mu^p \rangle &= \frac{1}{|\Omega_\mu|} \left(\int_\Omega \delta p \alpha'_c \nabla \cdot \dot{\mathbf{u}} d\Omega - \int_\Omega (\nabla \delta p) \cdot \mathbf{w}_f d\Omega + \int_\Omega \delta p \frac{\dot{P}}{Q} d\Omega \right. \\ &\quad \left. - \int_\Omega \delta p \beta_T \dot{T} d\Omega - \int_\Omega \delta p \beta_\varepsilon \dot{c} d\Omega \right) = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{s_p} \delta p q ds\end{aligned}\quad (۴-۴۱)$$

$$\begin{aligned}\langle \delta W_\mu^T \rangle &= \frac{1}{|\Omega_\mu|} \left(\int_\Omega \delta T (\rho c)_{\text{ave}} \dot{T} d\Omega + \int_\Omega \delta T \rho_f c_f \mathbf{w}_f \cdot \nabla T d\Omega - \int_\Omega \nabla(\delta T) \cdot \mathbf{J}_T d\Omega \right) \\ &= \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{s_T} \delta T g ds\end{aligned}\quad (۴-۴۲)$$

$$\begin{aligned}\langle \delta W_\mu^c \rangle &= -\frac{1}{|\Omega_\mu|} \left(\int_\Omega \nabla(\delta c) \cdot (\kappa_{c_p} \nabla P - (1 - \lambda) D_c \nabla c) d\Omega \right) + \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_\Omega \delta c n \dot{c} d\Omega + \\ &\quad \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_\Omega \delta c \mathbf{w}_f \cdot \nabla c d\Omega = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{s_c} \delta c y dc\end{aligned}\quad (۴-۴۳)$$

با جایگزینی طرف راست معادلات (۴۰-۴) تا (۴۳-۴) در رابطه همگن سازی مرتبه اول معادلات (۱-۴) تا (۴-۴) و همچنین برابر قرار دادن انرژی ماکرو و میکرو طبق معادله (۳۵-۴) داریم:

$$\begin{aligned}\delta(\bar{\nabla} \bar{\mathbf{u}}) : \bar{\boldsymbol{\sigma}} - \delta \bar{\mathbf{u}} \cdot \bar{\mathbf{f}}_I^u &= \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{s_u} (\delta \bar{\mathbf{u}}) \cdot \mathbf{t} ds + \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{s_u} (\delta(\mathbf{H}^T \bar{\nabla} \bar{\mathbf{u}})) \cdot \mathbf{t} ds \\ &+ \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{s_u} (\delta \bar{\mathbf{u}}) \cdot \mathbf{t} ds\end{aligned}\quad (۴-۴۴)$$

$$\begin{aligned}
-\delta(\nabla p) \cdot \mathbf{w}_f + \delta p \bar{f}_I^p &= \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{s_p} (\delta \bar{p}) q \, ds + \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{s_p} \delta(\mathbf{x}^T \bar{\nabla} \bar{p}) q \, ds \\
&+ \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{s_p} \delta(\tilde{p}) q \, ds
\end{aligned} \tag{۴-۴۵}$$

$$\begin{aligned}
-\delta \nabla(T) \cdot \bar{\mathbf{J}}_T + \delta T \bar{f}_I^T &= \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{s_T} (\delta \bar{T}) g \, dS + \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{s_T} \delta(\mathbf{x}^T \bar{\nabla} \bar{T}) g \, dS \\
&+ \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{s_T} \delta(\tilde{T}) g \, dS
\end{aligned} \tag{۴-۴۶}$$

$$\begin{aligned}
-\delta \nabla(c) \cdot \bar{\mathbf{J}}_c + \delta c \bar{f}_I^c &= \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{s_c} \delta(\bar{c}) y \, dS + \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{s_c} \delta(\mathbf{x}^T \bar{\nabla} \bar{c}) y \, dS \\
&+ \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{s_c} \delta(\tilde{c}) y \, dS
\end{aligned} \tag{۴-۴۷}$$

با مساوی قرار دادن ترم‌های حاضر در دو طرف معادلات (۴-۴۴) تا (۴-۴۷) نتایج زیر بدست می‌آید:

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{s_u} \mathbf{H} \cdot \mathbf{t} \, ds \tag{۴-۴۸}$$

$$\bar{\mathbf{f}}_I^u = - \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{s_u} \mathbf{t} \, ds \tag{۴-۴۹}$$

$$\mathbf{w}_f = - \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{s_p} \mathbf{x} \bar{q}_p \, ds \tag{۴-۵۰}$$

$$\bar{f}_I^p = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{s_p} \bar{q}_p \, ds \tag{۴-۵۱}$$

$$\bar{\mathbf{J}}_T = - \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{s_T} \mathbf{x} q_T \, ds \tag{۴-۵۲}$$

$$\bar{f}_I^T = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{s_T} q_T \, ds \tag{۴-۵۳}$$

$$\bar{\mathbf{J}}_c = - \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{s_c} \mathbf{x} q_c \, dS \tag{۴-۵۴}$$

$$\bar{f}_I^c = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{s_c} q_c \, dS \tag{۴-۵۵}$$

بنابر آنچه از معادلات (۴-۴۸) تا (۴-۵۵) بدست آمد می توان نتیجه گرفت که ترم آخر سمت راست معادلات (۴-۴۴) تا (۴-۴۷) می بایست برابر صفر باشند، به عبارتی:

$$\int_{s_u} (\delta \tilde{\mathbf{u}}) \mathbf{t} ds = 0 \quad (۴-۵۶)$$

$$\int_{s_p} \delta(\tilde{p}) \bar{q}_p ds = 0 \quad (۴-۵۷)$$

$$\int_{s_T} \delta(\tilde{T}) q_T dS = 0 \quad (۴-۵۸)$$

$$\int_{s_c} \delta(\tilde{c}) q_c dS = 0 \quad (۴-۵۹)$$

معادلات (۴-۵۶) تا (۴-۵۹) به عنوان شرط مرزی دوم در کنار شرط مرزی اول، (معادلات (۴-۱۱) تا (۴-۱۴)) که قبلا بدست آمد) می بایست در حل مسئله مقدار مرزی در مقیاس میکرو، ارضا گردند.

۴-۶ فرمول بندی روش اجزا محدود، برای حل مسئله ماکرو:

در این بخش، فرم ضعیف معادلات ارائه شده برای مقیاس ماکرو مطابق معادلات (۴-۱۹) تا (۴-۲۲) با استفاده از روش اجزا محدود حل خواهند شد. بنابر آنچه گفته شد داریم:

$$\begin{aligned} \bar{\Psi}_u &= \int_{\Omega} (\nabla \delta \mathbf{u}) \bar{\sigma} d\Omega - \int_{\Omega} \delta \bar{\mathbf{u}} \bar{\mathbf{f}}_I^u d\Omega - \int_{s_u} \delta \bar{\mathbf{u}} \cdot \bar{\mathbf{t}} ds = 0 \\ \bar{\mathbf{f}}_I^u &= \int_{\Omega} \delta \mathbf{u} \rho \mathbf{b} d\Omega - \int_{\Omega} \delta \mathbf{u} \rho \ddot{\mathbf{u}} d\Omega \end{aligned} \quad (۴-۶۰)$$

$$\begin{aligned} \bar{\Psi}_p &= \int_{\Omega} -\delta(\nabla p) \bar{\mathbf{w}}_f d\Omega + \int_{\Omega} \delta p \bar{f}_I^p d\Omega - \int_{s_p} \delta p \bar{q}_p ds \\ \bar{f}_I^p &= \int_{\Omega} \delta p \alpha'_c \nabla \cdot \dot{\mathbf{u}} d\Omega + \int_{\Omega} \delta p \frac{\dot{P}}{Q} d\Omega - \int_{\Omega} \delta p \beta_T \dot{T} d\Omega - \int_{\Omega} \delta p \beta_\varepsilon \dot{c} d\Omega \end{aligned} \quad (۴-۶۱)$$

$$\begin{aligned} \bar{\Psi}_T &= - \int_{\Omega} \delta \nabla(T) \bar{\mathbf{J}}_T d\Omega + \int_{\Omega} \delta T \bar{f}_I^T d\Omega - \int_{s_T} \delta T q_T dS = 0 \\ \bar{f}_I^T &= \int_{\Omega} \delta T (\rho c)_{ave} \dot{T} d\Omega + \int_{\Omega} \delta T \rho_f c_f \mathbf{w}_f \cdot \nabla T d\Omega \end{aligned} \quad (۴-۶۲)$$

$$\bar{\Psi}_c = - \int_{\Omega} \delta \nabla(c) \bar{J}_c d\Omega + \int_{\Omega} \delta c \bar{f}_I^c d\Omega - \int_{s_c} \delta c q_c dS = 0 \quad (۴-۶۳)$$

$$\bar{f}_I^c = \int_{\Omega} \delta c n \dot{c} d\Omega + \int_{\Omega} \delta c \mathbf{w}_f \cdot \nabla c d\Omega$$

برای حل معادلات (۴-۶۰) تا (۴-۶۳) به روش اجزا محدود، نیاز است که مجهولات اصلی مسئله در دامنه گسسته سازی شوند سپس با به دست آمدن مقادیر گرهی مجهولات، می توان مجهول مورد نظر را در کل دامنه درونیابی کرد. برای این منظور داریم:

$$\bar{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t) \approx \bar{\mathbf{u}}^h(\mathbf{x}, t) = \sum \bar{N}_i^u \bar{u}_i(t)$$

$$\nabla \bar{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t) \approx (\bar{\mathbf{L}}_u \bar{\mathbf{N}}_u) \bar{\mathbf{U}} = \sum \bar{B}_i^u \bar{u}_i(t)$$

$$\bar{p}(\mathbf{x}, t) \approx \bar{p}^h(\mathbf{x}, t) = \sum \bar{N}_i^p \bar{p}_i(t)$$

$$\nabla \bar{p}(\mathbf{x}, t) \approx (\bar{\mathbf{L}}_p \bar{\mathbf{N}}_p) \bar{P} = \sum \bar{B}_i^p \bar{p}_i(t) \quad (۴-۶۴)$$

$$\bar{T}(\mathbf{x}, t) \approx \bar{T}_n^h(\mathbf{x}, t) = \sum \bar{N}_i^T \bar{T}_{n_i}(t)$$

$$\nabla \bar{T}(\mathbf{x}, t) \approx (\bar{\mathbf{L}}_T \bar{\mathbf{N}}_T) \bar{T}_n = \sum \bar{B}_i^T \bar{T}_{n_i}(t)$$

$$\bar{c}(\mathbf{x}, t) \approx \bar{c}^h(\mathbf{x}, t) = \sum \bar{N}_i^c \bar{c}_i(t)$$

$$\nabla \bar{c}(\mathbf{x}, t) \approx (\bar{\mathbf{L}}_c \bar{\mathbf{N}}_c) \bar{c} = \sum \bar{B}_i^c \bar{c}_i(t)$$

که در آن $\bar{\mathbf{u}}$ و $\bar{p}$ و $\bar{T}_n$ و $\bar{c}$ مقادیر گرهی تغییرمکان، فشار، دما و غلظت، $\bar{\mathbf{N}}_u$ و $\bar{\mathbf{N}}_p$ و $\bar{\mathbf{N}}_T$ و $\bar{\mathbf{N}}_c$ توابع شکل لاگرانژی برای المان ماکرو هستند. همچنین $\bar{\mathbf{L}}_u$ و $\bar{\mathbf{L}}_p$ و $\bar{\mathbf{L}}_T$ و $\bar{\mathbf{L}}_c$ عملگر گرادیان ماکرو برای تغییرمکان، فشار، دما و غلظت هستند و از رابطه زیر محاسبه میشوند:

$$\bar{\mathbf{L}}_u = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial \bar{x}} & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial \bar{y}} \\ \frac{\partial}{\partial \bar{y}} & \frac{\partial}{\partial \bar{x}} \end{bmatrix} \quad \bar{\mathbf{L}}_p = \bar{\mathbf{L}}_T = \bar{\mathbf{L}}_c = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial \bar{x}} \\ \frac{\partial}{\partial \bar{y}} \end{bmatrix} \quad (۴-۶۵)$$

معادلات (۴-۶۰) تا (۴-۶۳) کاملاً هم‌بسته هستند و می‌بایست از یکی از روش‌های حل معادلات غیرخطی برای حل آن‌ها استفاده کرد. در این پژوهش برای حل این معادلات هم‌چنین حل معادلات مقیاس میکرو، از روش نیوتون-رافسون استفاده می‌شود، بنابراین نیاز است که مشتق هر کدام از معادلات را نسبت به هر چهار پارامتر مجهول محاسبه کنیم و سپس در هر گام زمانی این مقادیر را به‌روز رسانی نماییم.

$$\begin{bmatrix} \bar{\Psi}_{U_{n+1}}^{i+1} \\ \bar{\Psi}_{P_{n+1}}^{i+1} \\ \bar{\Psi}_{T_{n+1}}^{i+1} \\ \bar{\Psi}_{c_{n+1}}^{i+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{\Psi}_{U_{n+1}}^i \\ \bar{\Psi}_{P_{n+1}}^i \\ \bar{\Psi}_{T_{n+1}}^i \\ \bar{\Psi}_{c_{n+1}}^i \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{\partial \bar{\Psi}_U}{\partial \bar{U}} & \frac{\partial \bar{\Psi}_U}{\partial \bar{P}} & \frac{\partial \bar{\Psi}_U}{\partial \bar{T}} & \frac{\partial \bar{\Psi}_U}{\partial \bar{C}} \\ \frac{\partial \bar{\Psi}_P}{\partial \bar{U}} & \frac{\partial \bar{\Psi}_P}{\partial \bar{P}} & \frac{\partial \bar{\Psi}_P}{\partial \bar{T}} & \frac{\partial \bar{\Psi}_P}{\partial \bar{C}} \\ \frac{\partial \bar{\Psi}_T}{\partial \bar{U}} & \frac{\partial \bar{\Psi}_T}{\partial \bar{P}} & \frac{\partial \bar{\Psi}_T}{\partial \bar{T}} & \frac{\partial \bar{\Psi}_T}{\partial \bar{C}} \\ \frac{\partial \bar{\Psi}_c}{\partial \bar{U}} & \frac{\partial \bar{\Psi}_c}{\partial \bar{P}} & \frac{\partial \bar{\Psi}_c}{\partial \bar{T}} & \frac{\partial \bar{\Psi}_c}{\partial \bar{C}} \end{bmatrix}^t \begin{bmatrix} d\bar{U}_n^i \\ d\bar{P}_n^i \\ d\bar{T}_n^i \\ d\bar{C}_n^i \end{bmatrix} = 0 \quad (۴-۶۶)$$

در اینجا لازم است هر کدام از درایه‌های ماتریس (۴-۶۶) به طور جداگانه محاسبه شوند. در برخی از این درایه‌ها، پارامترهای صورت به طور مستقیم به پارامترهای مخرج، مرتبط نیستند، بنابراین لازم است با استفاده از پارامترهای واسطه که در فرم قوی معادلات ارائه شدند، این مشتق‌گیری‌ها انجام شوند. در این بخش منظور از $\bar{u}$ و $\bar{p}$ و $\bar{T}$ و $\bar{c}$ مقادیر تغییرمکان، فشار، دما و غلظت در میدان مسئله هستند.

بر اساس قاعده مشتق زنجیره‌ای داریم:

$$\bar{\sigma} = \bar{\sigma}(\bar{\varepsilon}(\bar{u}(\bar{U}))) \quad \frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial \bar{U}} = \frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial \bar{u}} \frac{\partial \bar{u}}{\partial \bar{U}} + \frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial \bar{\varepsilon}} \frac{\partial \bar{\varepsilon}}{\partial \bar{U}} \quad \frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial \bar{u}} = 0 \quad \frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial \bar{U}} = \frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial \bar{\varepsilon}} \frac{\partial \bar{\varepsilon}}{\partial \bar{U}} \quad (۴-۶۷)$$

$$\bar{f}_l^u = \bar{f}_l^u(\bar{U})$$

$$\bar{\sigma} = \bar{\sigma}(\bar{p}(\bar{P})) \quad \frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial \bar{P}} = \frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial \bar{p}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial \bar{P}} \quad \bar{f}_l^u \neq \bar{f}_l^u(\bar{P}) \quad (۴-۶۸)$$

$$\bar{\sigma} = \bar{\sigma}(\bar{T}(\bar{T}_n)) \quad \frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial \bar{T}_n} = \frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial \bar{T}} \frac{\partial \bar{T}}{\partial \bar{T}_n} \quad \bar{\mathbf{f}}_I^u \neq \bar{\mathbf{f}}_I^u(\bar{T}) \quad (\text{㉚-㉚})$$

$$\bar{\sigma} = \bar{\sigma}(\bar{c}(\bar{C})) \quad \frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial \bar{C}} = \frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial \bar{c}} \frac{\partial \bar{c}}{\partial \bar{C}} \quad \bar{\mathbf{f}}_I^u \neq \bar{\mathbf{f}}_I^u(\bar{c}) \quad (\text{㉚-㉚})$$

$$\bar{\mathbf{w}}_f = \bar{\mathbf{w}}_f(\bar{\mathbf{u}}(\bar{\mathbf{U}})) \quad \frac{\partial \bar{\mathbf{w}}_f}{\partial \bar{\mathbf{U}}} = \frac{\partial \bar{\mathbf{w}}_f}{\partial \bar{\mathbf{u}}} \frac{\partial \bar{\mathbf{u}}}{\partial \bar{\mathbf{U}}} \quad \frac{\partial \bar{f}_I^p}{\partial \bar{\mathbf{U}}} = \frac{\partial \bar{f}_I^p}{\partial \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}} \frac{\partial \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}}{\partial \bar{\mathbf{U}}} \quad (\text{㉚-㉚})$$

$$\bar{\mathbf{w}}_f = \bar{\mathbf{w}}_f(\nabla \bar{p}(\bar{P})) \quad \frac{\partial \bar{\mathbf{w}}_f}{\partial \bar{P}} = \frac{\partial \bar{\mathbf{w}}_f}{\partial \nabla \bar{p}} \frac{\partial \nabla \bar{p}}{\partial \bar{P}} \quad \bar{f}_I^p = \bar{f}_I^p(\bar{p}) \quad (\text{㉚-㉚})$$

$$\bar{\mathbf{w}}_f \neq \bar{\mathbf{w}}_f(\bar{T}) \quad \frac{\partial \bar{\mathbf{w}}_f}{\partial \bar{T}_n} = 0 \quad \bar{f}_I^p = \bar{f}_I^p(\bar{T}) \quad (\text{㉚-㉚})$$

$$\bar{\mathbf{w}}_f = \bar{\mathbf{w}}_f(\nabla \bar{c}(\bar{C})) \quad \frac{\partial \bar{\mathbf{w}}_f}{\partial \bar{C}} = \frac{\partial \bar{\mathbf{w}}_f}{\partial \nabla \bar{c}} \frac{\partial \nabla \bar{c}}{\partial \bar{C}} \quad \bar{f}_I^p = \bar{f}_I^p(\bar{C}) \quad (\text{㉚-㉚})$$

$$\bar{\mathbf{J}}_T \neq \bar{\mathbf{J}}_T(\bar{\mathbf{u}}) \quad \frac{\partial \bar{\mathbf{J}}_T}{\partial \bar{\mathbf{U}}} = 0 \quad \bar{f}_I^T = \bar{f}_I^T(\bar{\mathbf{U}}) \quad (\text{㉚-㉚})$$

$$\bar{\mathbf{J}}_T \neq \bar{\mathbf{J}}_T(\bar{p}) \quad \frac{\partial \bar{\mathbf{J}}_T}{\partial \bar{P}} = 0 \quad \bar{f}_I^T = \bar{f}_I^T(\nabla \bar{P}) \quad (\text{㉚-㉚})$$

$$\bar{\mathbf{J}}_T = \bar{\mathbf{J}}_T(\nabla \bar{T}(\bar{T}_{nodal})) \quad \frac{\partial \bar{\mathbf{J}}_T}{\partial \bar{\mathbf{T}}_n} = \frac{\partial \bar{\mathbf{J}}_T}{\partial \nabla \bar{T}} \frac{\partial \nabla \bar{T}}{\partial \bar{\mathbf{T}}_n} \quad \bar{f}_I^T = \bar{f}_I^T(\nabla \bar{T}(\bar{T}_n)) \quad (\text{㉚-㉚})$$

$$\bar{\mathbf{J}}_T \neq \bar{\mathbf{J}}_T(\bar{c}) \quad \frac{\partial \bar{\mathbf{J}}_T}{\partial \bar{C}} = 0 \quad \bar{f}_I^T = \bar{f}_I^T(\nabla \bar{C}) \quad (\text{㉚-㉚})$$

$$\bar{\mathbf{J}}_c \neq \bar{\mathbf{J}}_c(\bar{\mathbf{u}}) \quad \frac{\partial \bar{\mathbf{J}}_c}{\partial \bar{\mathbf{U}}} = 0 \quad \bar{f}_I^c = \bar{f}_I^c(\bar{\mathbf{U}}) \quad (\text{㉚-㉚})$$

$$\bar{\mathbf{J}}_c = \bar{\mathbf{J}}_c(\nabla \bar{p}(\bar{P})) \quad \frac{\partial \bar{\mathbf{J}}_c}{\partial \bar{P}} = \frac{\partial \bar{\mathbf{J}}_c}{\partial \nabla \bar{p}} \frac{\partial \nabla \bar{p}}{\partial \bar{P}} \quad \bar{f}_I^c = \bar{f}_I^c(\nabla \bar{P}) \quad (۴-۸۰)$$

$$\bar{\mathbf{J}}_c \neq \bar{\mathbf{J}}_c(\bar{T}_n) \quad \frac{\partial \bar{\mathbf{J}}_c}{\partial \bar{T}_n} = 0 \quad \bar{f}_I^c \neq \bar{f}_I^c(\bar{T}_n) \quad (۴-۸۱)$$

$$\bar{\mathbf{J}}_c = \bar{\mathbf{J}}_c(\nabla \bar{c}(\bar{C})) \quad \frac{\partial \bar{\mathbf{J}}_c}{\partial \bar{C}} = \frac{\partial \bar{\mathbf{J}}_c}{\partial \nabla \bar{c}} \frac{\partial \nabla \bar{c}}{\partial \bar{C}} \quad \bar{f}_I^c = \bar{f}_I^c(\nabla \bar{C}) \quad (۴-۸۲)$$

برای محاسبه $\frac{\partial \bar{\Psi}_U}{\partial \bar{U}}$ با جایگذاری رابطه (۴-۶۷) در معادله (۴-۶۰) داریم:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\Psi}_U}{\partial \bar{U}} &= \int_{\Omega} (\nabla \delta \mathbf{u}) : \frac{\partial \bar{\boldsymbol{\sigma}}}{\partial \bar{U}} d\Omega - \int_{\Omega} \delta \bar{\mathbf{u}} \frac{\partial \bar{\mathbf{f}}_I^u}{\partial \bar{U}} d\Omega - \int_{s_u} \delta \bar{\mathbf{u}} \frac{\partial \bar{\mathbf{t}}}{\partial \bar{U}} ds \\ &= \int_{\Omega} (\nabla \delta \mathbf{u}) : \frac{\partial \bar{\boldsymbol{\sigma}}}{\partial \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}} \frac{\partial \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}}{\partial \bar{U}} d\Omega - \int_{\Omega} \delta \bar{\mathbf{u}} \frac{\partial \bar{\mathbf{f}}_I^u}{\partial \bar{\mathbf{u}}} \frac{\partial \bar{\mathbf{u}}}{\partial \bar{U}} d\Omega - \int_{s_u} \delta \bar{\mathbf{u}} \frac{\partial \bar{\mathbf{t}}}{\partial \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}} \frac{\partial \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}}{\partial \bar{U}} ds \\ &= \int_{\Omega} (\delta \mathbf{u}) \bar{\mathbf{B}}_u^T \frac{\partial \bar{\boldsymbol{\sigma}}}{\partial \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}} \bar{\mathbf{B}}_u d\Omega - \int_{\Omega} (\delta \mathbf{u}) \bar{\mathbf{N}}_u^T \frac{\partial \bar{\mathbf{f}}_I^u}{\partial \bar{\mathbf{u}}} \bar{\mathbf{N}}_u d\Omega - 0 = \bar{\mathbf{K}} - \bar{\mathbf{M}} \end{aligned} \quad (۴-۸۳)$$

به همین ترتیب برای محاسبه دیگر درایه‌های ماتریس (۴-۶۶) خواهیم داشت:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\Psi}_U}{\partial \bar{P}} &= \int_{\Omega} (\nabla \delta \mathbf{u}) : \frac{\partial \bar{\boldsymbol{\sigma}}}{\partial \bar{P}} d\Omega - \int_{\Omega} \delta \bar{\mathbf{u}} \frac{\partial \bar{\mathbf{f}}_I^u}{\partial \bar{P}} d\Omega - \int_{s_u} \delta \bar{\mathbf{u}} \frac{\partial \bar{\mathbf{t}}}{\partial \bar{P}} ds \\ &= \int_{\Omega} (\nabla \delta \mathbf{u}) : \frac{\partial \bar{\boldsymbol{\sigma}}}{\partial \bar{p}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial \bar{P}} d\Omega - \int_{\Omega} \delta \bar{\mathbf{u}} \frac{\partial \bar{\mathbf{f}}_I^u}{\partial \bar{p}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial \bar{P}} d\Omega - \int_{s_u} \delta \bar{\mathbf{u}} \frac{\partial \bar{\mathbf{t}}}{\partial \bar{p}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial \bar{P}} ds \\ &= \int_{\Omega} (\delta \mathbf{u}) \bar{\mathbf{B}}_u^T \frac{\partial \bar{\boldsymbol{\sigma}}}{\partial \bar{p}} \bar{\mathbf{N}}_p d\Omega - \mathbf{0} - \mathbf{0} = \bar{\mathbf{Q}}_1 \end{aligned} \quad (۴-۸۴)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\Psi}_U}{\partial \bar{T}_n} &= \int_{\Omega} (\nabla \delta \mathbf{u}) : \frac{\partial \bar{\boldsymbol{\sigma}}}{\partial \bar{T}_n} d\Omega - \int_{\Omega} \delta \bar{\mathbf{u}} \frac{\partial \bar{\mathbf{f}}_I^u}{\partial \bar{T}_n} d\Omega - \int_{s_u} \delta \bar{\mathbf{u}} \frac{\partial \bar{\mathbf{t}}}{\partial \bar{T}_n} ds \\ &= \int_{\Omega} (\nabla \delta \mathbf{u}) \frac{\partial \bar{\boldsymbol{\sigma}}}{\partial \bar{T}} \frac{\partial \bar{T}}{\partial \bar{T}_n} d\Omega - \int_{\Omega} \delta \bar{\mathbf{u}} \frac{\partial \bar{\mathbf{f}}_I^u}{\partial \bar{T}} \frac{\partial \bar{T}}{\partial \bar{T}_n} d\Omega - \int_{s_u} \delta \bar{\mathbf{u}} \frac{\partial \bar{\mathbf{t}}}{\partial \bar{T}} \frac{\partial \bar{T}}{\partial \bar{T}_n} ds = \end{aligned} \quad (۴-۸۵)$$

$$\int_{\Omega} (\delta \mathbf{u}) \bar{\mathbf{B}}_u^T \frac{\partial \bar{\boldsymbol{\sigma}}}{\partial \bar{T}} \bar{\mathbf{N}}_T d\Omega - \mathbf{0} - \mathbf{0} = \bar{\mathbf{W}}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\Psi}_U}{\partial \bar{C}} &= \int_{\Omega} (\nabla \delta \mathbf{u}) : \frac{\partial \bar{\boldsymbol{\sigma}}}{\partial \bar{C}} d\Omega - \int_{\Omega} \delta \bar{\mathbf{u}} \frac{\partial \bar{\mathbf{f}}_I^u}{\partial \bar{C}} d\Omega - \int_{s_u} \delta \bar{\mathbf{u}} \frac{\partial \bar{\mathbf{t}}}{\partial \bar{C}} ds = \\ &\int_{\Omega} (\nabla \delta \mathbf{u}) \frac{\partial \bar{\boldsymbol{\sigma}}}{\partial \bar{C}} \frac{\partial \bar{c}}{\partial \bar{C}} d\Omega - \int_{\Omega} \delta \bar{\mathbf{u}} \frac{\partial \bar{\mathbf{f}}_I^u}{\partial \bar{C}} \frac{\partial \bar{c}}{\partial \bar{C}} d\Omega - \int_{s_u} \delta \bar{\mathbf{u}} \frac{\partial \bar{\mathbf{t}}}{\partial \bar{C}} \frac{\partial \bar{c}}{\partial \bar{C}} ds \\ &= \int_{\Omega} (\delta \mathbf{u}) \bar{\mathbf{B}}_u^T \frac{\partial \bar{\boldsymbol{\sigma}}}{\partial \bar{C}} \bar{\mathbf{N}}_c d\Omega - 0 - 0 = \bar{\mathbf{A}}_1 \end{aligned} \quad (\text{I-86})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\Psi}_P}{\partial \bar{\mathbf{U}}} &= \int_{\Omega} -\delta(\nabla p) \frac{\partial \bar{\mathbf{w}}_f}{\partial \bar{\mathbf{U}}} d\Omega + \int_{\Omega} \delta p \frac{\partial \bar{\mathbf{f}}_I^p}{\partial \bar{\mathbf{U}}} d\Omega + \int_{s_p} \delta p \frac{\partial \bar{q}_p}{\partial \bar{\mathbf{U}}} ds = \\ &\int_{\Omega} -\delta(\nabla p) \frac{\partial \bar{\mathbf{w}}_f}{\partial \bar{\mathbf{u}}} \frac{\partial \bar{\mathbf{u}}}{\partial \bar{\mathbf{U}}} d\Omega + \int_{\Omega} \delta p \frac{\partial \bar{\mathbf{f}}_I^p}{\partial \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}} \frac{\partial \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}}{\partial \bar{\mathbf{U}}} d\Omega + \int_{s_p} \delta p \frac{\partial \bar{q}_p}{\partial \bar{\mathbf{u}}} \frac{\partial \bar{\mathbf{u}}}{\partial \bar{\mathbf{U}}} ds = \\ &\int_{\Omega} -(\delta p) \bar{\mathbf{B}}_p^T \frac{\partial \bar{\mathbf{w}}_f}{\partial \bar{\mathbf{u}}} \bar{\mathbf{N}}_u d\Omega + \int_{\Omega} (\delta p) \bar{\mathbf{N}}_p^T \frac{\partial \bar{f}_I^p}{\partial \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}} \bar{\mathbf{B}}_u d\Omega + 0 = -\bar{\mathbf{Q}}_2 + \bar{\mathbf{H}} \end{aligned} \quad (\text{I-87})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\Psi}_P}{\partial \bar{P}} &= \int_{\Omega} -\delta(\nabla p) \frac{\partial \bar{\mathbf{w}}_f}{\partial \bar{P}} d\Omega + \int_{\Omega} \delta p \frac{\partial \bar{f}_I^p}{\partial \bar{P}} d\Omega + \int_{s_p} \delta p \frac{\partial \bar{q}_p}{\partial \bar{P}} ds = \\ &\int_{\Omega} -\delta(\nabla p) \frac{\partial \bar{\mathbf{w}}_f}{\partial \nabla \bar{P}} \frac{\partial \nabla \bar{P}}{\partial \bar{P}} d\Omega + \int_{\Omega} \delta p \frac{\partial \bar{f}_I^p}{\partial \bar{p}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial \bar{P}} d\Omega + \int_{s_p} \delta p \frac{\partial \bar{q}_p}{\partial \bar{p}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial \bar{P}} ds = \\ &\int_{\Omega} -(\delta p) \bar{\mathbf{B}}_p^T \frac{\partial \bar{\mathbf{w}}_f}{\partial \nabla \bar{P}} \bar{\mathbf{B}}_p d\Omega + \int_{\Omega} (\delta p) \bar{\mathbf{N}}_p^T \frac{\partial \bar{f}_I^p}{\partial \bar{p}} \bar{\mathbf{N}}_p d\Omega + 0 = -\bar{\mathbf{E}} + \bar{\mathbf{F}} \end{aligned} \quad (\text{I-88})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\Psi}_P}{\partial \bar{T}_n} &= \int_{\Omega} -\delta(\nabla p) \frac{\partial \bar{\mathbf{w}}_f}{\partial \bar{T}_n} d\Omega + \int_{\Omega} \delta p \frac{\partial \bar{f}_I^p}{\partial \bar{T}_n} d\Omega + \int_{s_p} \delta p \frac{\partial \bar{q}_p}{\partial \bar{T}_n} ds = \\ 0 + \int_{\Omega} \delta p \frac{\partial \bar{f}_I^p}{\partial \bar{T}} \frac{\partial \bar{T}}{\partial \bar{T}_n} d\Omega + \int_{s_p} \delta p \frac{\partial \bar{q}_p}{\partial \bar{T}} \frac{\partial \bar{T}}{\partial \bar{T}_n} ds &= \end{aligned} \quad (\text{I-89})$$

$$\int_{\Omega} (\delta p) \bar{\mathbf{N}}_p^T \frac{\partial \bar{f}_I^p}{\partial \bar{T}} \bar{\mathbf{N}}_T d\Omega + 0 = \bar{\mathbf{R}}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\Psi}_P}{\partial \bar{C}} &= \int_{\Omega} -\delta(\nabla p) \frac{\partial \bar{\mathbf{w}}_f}{\partial \bar{C}} d\Omega + \int_{\Omega} \delta p \frac{\partial \bar{f}_I^p}{\partial \bar{C}} d\Omega + \int_{s_p} \delta p \frac{\partial \bar{q}_p}{\partial \bar{C}} ds = \\ &\int_{\Omega} -\delta(\nabla p) \frac{\partial \bar{\mathbf{w}}_f}{\partial \nabla \bar{c}} \frac{\partial \nabla \bar{c}}{\partial \bar{C}} d\Omega + \int_{\Omega} \delta p \frac{\partial \bar{f}_I^p}{\partial \bar{c}} \frac{\partial \bar{c}}{\partial \bar{C}} d\Omega + \int_{s_p} \delta p \frac{\partial \bar{q}_p}{\partial \nabla \bar{c}} \frac{\partial \nabla \bar{c}}{\partial \bar{C}} ds = \\ &\int_{\Omega} -(\delta p) \bar{\mathbf{B}}_p^T \frac{\partial \bar{\mathbf{w}}_f}{\partial \nabla \bar{c}} \bar{\mathbf{B}}_c d\Omega + \int_{\Omega} (\delta p) \bar{\mathbf{N}}_c^T \frac{\partial \bar{f}_I^p}{\partial \bar{c}} \bar{\mathbf{N}}_c d\Omega + 0 = -\bar{\mathbf{S}} + \bar{\mathbf{Z}} \end{aligned} \quad (\text{I-90})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\Psi}_T}{\partial \bar{\mathbf{U}}} &= - \int_{\Omega} \delta \nabla(T) \frac{\partial \bar{\mathbf{J}}_T}{\partial \bar{\mathbf{U}}} d\Omega + \int_{\Omega} \delta T \frac{\partial \bar{f}_I^T}{\partial \bar{\mathbf{U}}} d\Omega - \int_{s_T} \delta T \frac{\partial q_T}{\partial \bar{\mathbf{U}}} dS \\ &= -0 + \int_{\Omega} \delta(T) \frac{\partial \bar{f}_T}{\partial \bar{\mathbf{U}}} \frac{\partial \bar{\mathbf{U}}}{\partial \bar{\mathbf{u}}} d\Omega + 0 - 0 = \\ &\int_{\Omega} (\delta T) \bar{\mathbf{N}}_T^T \frac{\partial \bar{f}_T}{\partial \bar{\mathbf{U}}} \bar{\mathbf{N}}_U d\Omega = \bar{\mathbf{L}} \end{aligned} \quad (\text{I-91})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\Psi}_T}{\partial \bar{P}} &= - \int_{\Omega} \delta \nabla(T) \frac{\partial \bar{\mathbf{J}}_T}{\partial \bar{P}} d\Omega + \int_{\Omega} \delta T \frac{\partial \bar{f}_I^T}{\partial \bar{P}} d\Omega - \int_{s_T} \delta T \frac{\partial q_T}{\partial \bar{P}} dS \\ &= -0 + \int_{\Omega} \delta T \frac{\partial \bar{f}_I^T}{\partial \nabla \bar{p}} \frac{\partial \nabla \bar{p}}{\partial \bar{P}} d\Omega + 0 = \\ &\int_{\Omega} (\delta T) \bar{\mathbf{N}}_T^T \frac{\partial \bar{f}_I^T}{\partial \nabla \bar{p}} \bar{\mathbf{B}}_p d\Omega - 0 = \bar{\mathbf{C}} \end{aligned} \quad (\text{I-92})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\Psi}_T}{\partial \bar{T}_n} &= - \int_{\Omega} \delta \nabla(T) \frac{\partial \bar{\mathbf{J}}_T}{\partial \bar{T}_n} d\Omega + \int_{\Omega} \delta T \frac{\partial \bar{f}_I^T}{\partial \bar{T}_n} d\Omega - \int_{s_T} \delta T \frac{\partial q_T}{\partial \bar{T}_n} dS = \\ &- \int_{\Omega} \delta \nabla(T) \frac{\partial \bar{\mathbf{J}}_T}{\partial \nabla \bar{T}} \frac{\partial \nabla \bar{T}}{\partial \bar{T}_n} d\Omega + \int_{\Omega} \delta T \frac{\partial \bar{f}_I^T}{\partial \nabla \bar{T}} \frac{\partial \nabla \bar{T}}{\partial \bar{T}_n} d\Omega + \int_{\Omega} \delta T \frac{\partial \bar{f}_I^T}{\partial \bar{T}} \frac{\partial \bar{T}}{\partial \bar{T}_n} - 0 = \end{aligned} \quad (\text{I-93})$$

$$\begin{aligned}
& - \int_{\Omega} (\delta T) \mathbf{B}_T^T \frac{\partial \bar{J}_T}{\partial \nabla \bar{T}} \mathbf{B}_T d\Omega + \int_{\Omega} (\delta T) \bar{\mathbf{N}}_T^T \frac{\partial \bar{f}_I^T}{\partial \nabla \bar{T}} \bar{\mathbf{B}}_T d\Omega + \int_{\Omega} (\delta T) \bar{\mathbf{N}}_T^T \frac{\partial \bar{f}_I^T}{\partial \bar{T}} \bar{\mathbf{N}}_T d\Omega - 0 \\
& = -\bar{\mathbf{G}}_1 + \bar{\mathbf{G}}_2 + \bar{\mathbf{G}}_3
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \bar{\Psi}_T}{\partial \bar{C}} &= - \int_{\Omega} \delta \nabla(T) \frac{\partial \bar{J}_T}{\partial \bar{C}} d\Omega + \int_{\Omega} \delta T \frac{\partial \bar{f}_I^T}{\partial \bar{C}} d\Omega - \int_{s_T} \delta T \frac{\partial q_T}{\partial \bar{C}} dS = \\
& 0 + \int_{\Omega} \delta T \frac{\partial \bar{f}_I^T}{\partial \nabla \bar{C}} \frac{\partial \nabla \bar{C}}{\partial \bar{C}} d\Omega + 0 - 0 dS = \int_{\Omega} (\delta T) \bar{\mathbf{N}}_T^T \frac{\partial \bar{f}_I^T}{\partial \nabla \bar{C}} \bar{\mathbf{B}}_c d\Omega - 0 = \bar{\mathbf{O}}
\end{aligned} \tag{1-94}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \bar{\Psi}_c}{\partial \bar{\mathbf{U}}} &= - \int_{\Omega} \delta \nabla(c) \frac{\partial \bar{J}_c}{\partial \bar{\mathbf{U}}} d\Omega + \int_{\Omega} \delta c \frac{\partial \bar{f}_I^c}{\partial \bar{\mathbf{U}}} d\Omega - \int_{s_c} \delta c \frac{\partial q_c}{\partial \bar{\mathbf{U}}} dS \\
&= 0 + \int_{\Omega} \delta C \mathbf{N}_c^T \frac{\partial \bar{f}_I^c}{\partial \bar{\mathbf{u}}} \bar{\mathbf{N}}_u d\Omega = \bar{\mathbf{A}}_2
\end{aligned} \tag{1-95}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \bar{\Psi}_c}{\partial \bar{P}} &= - \int_{\Omega} \delta \nabla(c) \frac{\partial \bar{J}_c}{\partial \bar{P}} d\Omega + \int_{\Omega} \delta c \frac{\partial \bar{f}_I^c}{\partial \bar{P}} d\Omega - \int_{s_c} \delta c \frac{\partial q_c}{\partial \bar{P}} dS = \\
& - \int_{\Omega} \delta \nabla(c) \frac{\partial \bar{J}_c}{\partial \nabla \bar{p}} \frac{\partial \nabla \bar{p}}{\partial \bar{P}} d\Omega + \int_{s_c} \delta c \frac{\partial \bar{f}_I^c}{\partial \nabla \bar{p}} \frac{\partial \nabla \bar{p}}{\partial \bar{P}} dS - \int_{s_c} \delta c \frac{\partial q_c}{\partial \nabla \bar{p}} \frac{\partial \nabla \bar{p}}{\partial \bar{P}} dS \\
&= - \int_{\Omega} (\delta c) \mathbf{B}_c^T \frac{\partial \bar{J}_c}{\partial \nabla \bar{p}} \mathbf{B}_p d\Omega + \int_{s_c} \delta c \mathbf{N}_c^T \frac{\partial \bar{f}_I^c}{\partial \nabla \bar{p}} \mathbf{B}_p dS - 0 = -\bar{\mathbf{N}}_1 + \bar{\mathbf{N}}_2
\end{aligned} \tag{1-96}$$

$$\frac{\partial \bar{\Psi}_c}{\partial \bar{T}_n} = - \int_{\Omega} \delta \nabla(c) \frac{\partial \bar{J}_c}{\partial \bar{T}_n} d\Omega + \int_{\Omega} \delta c \frac{\partial \bar{f}_I^c}{\partial \bar{T}_n} d\Omega - \int_{s_c} \delta c \frac{\partial q_c}{\partial \bar{T}_n} dS = 0 \tag{1-97}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \bar{\Psi}_c}{\partial \bar{C}} &= - \int_{\Omega} \delta \nabla(c) \frac{\partial \bar{J}_c}{\partial \bar{C}} d\Omega + \int_{\Omega} \delta c \frac{\partial \bar{f}_I^c}{\partial \bar{C}} d\Omega - \int_{s_c} \delta c \frac{\partial q_c}{\partial \bar{C}} dS = \\
& - \int_{\Omega} \delta \nabla(c) \frac{\partial \bar{J}_c}{\partial \nabla \bar{c}} \frac{\partial \nabla \bar{c}}{\partial \bar{C}} d\Omega + \int_{\Omega} \delta c \frac{\partial \bar{f}_I^c}{\partial \bar{c}} \frac{\partial \bar{c}}{\partial \bar{C}} d\Omega + \int_{\Omega} \delta c \frac{\partial \bar{f}_I^c}{\partial \nabla \bar{c}} \frac{\partial \nabla \bar{c}}{\partial \bar{C}} d\Omega \\
& - \int_{s_c} \delta c \frac{\partial q_c}{\partial \nabla \bar{c}} \frac{\partial \nabla \bar{c}}{\partial \bar{C}} dS =
\end{aligned} \tag{1-98}$$

$$\begin{aligned}
& - \int_{\Omega} (\delta c) \mathbf{B}_c^T \frac{\partial \bar{\mathbf{J}}_c}{\partial \nabla \bar{c}} \mathbf{B}_c \, d\Omega + \int_{\Omega} (\delta c) \bar{\mathbf{N}}_c^T \frac{\partial \bar{f}_I^c}{\partial \bar{c}} \bar{\mathbf{N}}_c \, d\Omega + \int_{\Omega} (\delta c) \bar{\mathbf{N}}_c^T \frac{\partial \bar{f}_I^c}{\partial \nabla \bar{c}} \bar{\mathbf{B}}_c \, d\Omega - 0 \\
& = -\bar{\mathbf{X}} + \bar{\mathbf{I}}_1 + \bar{\mathbf{I}}_2
\end{aligned}$$

بنابراین ماتریس ژاکوبین ماکرو را میتوان به صورت زیر تشکیل داد:

$$\bar{\mathbf{J}} = \begin{bmatrix} \bar{\mathbf{K}} - \bar{\mathbf{M}} & \bar{\mathbf{Q}}_1 & \bar{\mathbf{W}} & \bar{\mathbf{A}}_1 \\ \bar{\mathbf{H}} - \bar{\mathbf{Q}}_2 & \bar{\mathbf{F}} - \bar{\mathbf{E}} & \bar{\mathbf{R}} & \bar{\mathbf{Z}} - \bar{\mathbf{S}} \\ \bar{\mathbf{L}} & \bar{\mathbf{C}} & -\bar{\mathbf{G}}_1 + \bar{\mathbf{G}}_2 + \bar{\mathbf{G}}_3 & \bar{\mathbf{O}} \\ \bar{\mathbf{A}}_2 & -\bar{\mathbf{N}}_1 + \bar{\mathbf{N}}_2 & \mathbf{0} & -\bar{\mathbf{X}} + \bar{\mathbf{I}}_1 + \bar{\mathbf{I}}_2 \end{bmatrix} \quad (۹-۹۹)$$

که در آن:

$$\bar{\mathbf{K}} = \int_{\Omega} (\delta \mathbf{u}) \bar{\mathbf{B}}_u^T \frac{\partial \bar{\boldsymbol{\sigma}}}{\partial \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}} \bar{\mathbf{B}}_u \, d\Omega \quad \bar{\mathbf{M}} = \int_{\Omega} (\delta \mathbf{u}) \bar{\mathbf{N}}_u^T \frac{\partial \bar{\mathbf{f}}_I^u}{\partial \bar{\mathbf{u}}} \bar{\mathbf{N}}_u \, d\Omega \quad \bar{\mathbf{Q}}_1 = \int_{\Omega} (\delta \mathbf{u}) \bar{\mathbf{B}}_u^T \frac{\partial \bar{\boldsymbol{\sigma}}}{\partial \bar{p}} \bar{\mathbf{N}}_p \, d\Omega$$

$$\bar{\mathbf{W}} = \int_{\Omega} (\delta \mathbf{u}) \bar{\mathbf{B}}_u^T \frac{\partial \bar{\boldsymbol{\sigma}}}{\partial \bar{T}} \bar{\mathbf{N}}_T \, d\Omega \quad \bar{\mathbf{A}}_1 = \int_{\Omega} (\delta \mathbf{u}) \bar{\mathbf{B}}_u^T \frac{\partial \bar{\boldsymbol{\sigma}}}{\partial \bar{c}} \bar{\mathbf{N}}_c \, d\Omega \quad \bar{\mathbf{Q}}_2 = \int_{\Omega} (\delta p) \bar{\mathbf{B}}_p^T \frac{\partial \bar{\mathbf{w}}_f}{\partial \bar{\mathbf{u}}} \bar{\mathbf{N}}_u \, d\Omega$$

$$\bar{\mathbf{H}} = \int_{\Omega} (\delta p) \bar{\mathbf{N}}_p^T \frac{\partial \bar{f}_I^p}{\partial \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}} \bar{\mathbf{B}}_u \, d\Omega \quad \bar{\mathbf{E}} = \int_{\Omega} (\delta p) \bar{\mathbf{B}}_p^T \frac{\partial \bar{\mathbf{w}}_f}{\partial \nabla \bar{p}} \bar{\mathbf{B}}_p \, d\Omega \quad \bar{\mathbf{F}} = \int_{\Omega} (\delta p) \bar{\mathbf{N}}_p^T \frac{\partial \bar{f}_I^p}{\partial \bar{p}} \bar{\mathbf{N}}_p \, d\Omega$$

$$\bar{\mathbf{R}} = \int_{\Omega} (\delta p) \bar{\mathbf{N}}_p^T \frac{\partial \bar{f}_I^p}{\partial \bar{T}} \bar{\mathbf{N}}_T \, d\Omega \quad \bar{\mathbf{S}} = \int_{\Omega} (\delta p) \bar{\mathbf{B}}_p^T \frac{\partial \bar{\mathbf{w}}_f}{\partial \nabla \bar{c}} \bar{\mathbf{B}}_c \, d\Omega \quad (۹-۱۰۰)$$

$$\bar{\mathbf{Z}} = \int_{\Omega} (\delta p) \bar{\mathbf{N}}_c^T \frac{\partial \bar{\mathbf{f}}_I^p}{\partial \bar{c}} \bar{\mathbf{N}}_c \, d\Omega \quad \bar{\mathbf{L}} = \int_{\Omega} (\delta T) \bar{\mathbf{N}}_T^T \frac{\partial \bar{f}_T}{\partial \bar{\mathbf{U}}} \bar{\mathbf{N}}_U \, d\Omega \quad \bar{\mathbf{G}}_1 = \int_{\Omega} (\delta T) \bar{\mathbf{B}}_T^T \frac{\partial \bar{\mathbf{J}}_T}{\partial \nabla \bar{T}} \bar{\mathbf{B}}_T \, d\Omega$$

$$\bar{\mathbf{G}}_2 = \int_{\Omega} (\delta T) \bar{\mathbf{N}}_T^T \frac{\partial \bar{f}_I^T}{\partial \nabla \bar{T}} \bar{\mathbf{B}}_T \, d\Omega \quad \bar{\mathbf{G}}_3 = \int_{\Omega} (\delta T) \bar{\mathbf{N}}_T^T \frac{\partial \bar{f}_I^T}{\partial \bar{T}} \bar{\mathbf{N}}_T \, d\Omega \quad \bar{\mathbf{O}} = \int_{\Omega} (\delta T) \bar{\mathbf{N}}_T^T \frac{\partial \bar{f}_I^T}{\partial \nabla \bar{c}} \bar{\mathbf{B}}_c \, d\Omega$$

$$\bar{\mathbf{A}}_2 = \int_{\Omega} \delta c \, \mathbf{N}_c^T \frac{\partial \bar{f}_I^c}{\partial \bar{\mathbf{u}}} \bar{\mathbf{N}}_u \, d\Omega \quad \bar{\mathbf{N}}_1 = \int_{\Omega} (\delta c) \mathbf{B}_c^T \frac{\partial \bar{\mathbf{J}}_c}{\partial \nabla \bar{p}} \mathbf{B}_p \, d\Omega \quad \bar{\mathbf{N}}_2 = \int_{s_c} \delta c \, \mathbf{N}_c^T \frac{\partial \bar{f}_I^c}{\partial \nabla \bar{p}} \mathbf{B}_p \, dS$$

$$\bar{\mathbf{X}} = \int_{\Omega} (\delta c) \mathbf{B}_c^T \frac{\partial \bar{\mathbf{J}}_c}{\partial \nabla \bar{c}} \mathbf{B}_c d\Omega \quad \bar{\mathbf{I}}_1 = \int_{\Omega} (\delta c) \bar{\mathbf{N}}_c^T \frac{\partial \bar{f}_I^c}{\partial \bar{c}} \bar{\mathbf{N}}_c d\Omega \quad \bar{\mathbf{I}}_2 = \int_{\Omega} (\delta c) \bar{\mathbf{N}}_c^T \frac{\partial \bar{f}_I^c}{\partial \nabla \bar{c}} \bar{\mathbf{B}}_c$$

هر یک از انتگرال‌های فوق با روش عددی گاوس، به این صورت که مقادیر انتگرال در چند نقطه از المان محاسبه شده و سپس به صورت وزن‌دار با هم جمع می‌شوند، محاسبه می‌شود. همچنین به منظور محاسبه مقادیر داخل انتگرال، لازم است مسئله مقدار مرزی میکرو حل شده و سپس مقادیر مشتق موجود در انتگرال‌های (۱۰۰-۴) در این حل به دست آید که در بخش‌های بعدی به آن‌ها پرداخته خواهد شد.

۴-۷ فرمول بندی روش اجزا محدود، برای حل مسئله میکرو:

در این قسمت معادلات میکرو در فرم ضعیف با استفاده از اجزا محدود در مکان و با استفاد از روش نیومارک اصلاح شده در زمان، گسسته سازی شده و با اعمال شرط مرزی خطی یا تناوبی مسئله مقدار مرزی در RVE حل شده و مقادیر پارامترهای ماکرو و گرادیان‌های آن‌ها همگن می‌شود. سپس درایه‌های ماتریس ژاکوبین که روابط آن‌ها قبلاً استخراج شد، از مقادیر حل میکرو به دست می‌آیند.

بر اساس فرم ضعیف معادلات بدست آمده برای مقیاس میکرو بر اساس معادلات (۳۱-۴) تا (۳۴-۴) داریم:

$$\begin{aligned} \Psi_u = & \int_{\Omega} (\nabla \delta \mathbf{u}) : (\mathbf{D}(\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_T) - \alpha p \mathbf{I} + \alpha_{\mu} c \mathbf{I}) d\Omega - \int_{s_u} (\delta \mathbf{u} \mathbf{t}) ds + \int_{\Omega} \delta \mathbf{u} \rho \ddot{\mathbf{u}} d\Omega \\ & - \int_{\Omega} \delta \mathbf{u} \rho \mathbf{b} d\Omega = 0 \end{aligned} \quad (۱۰۱-۴)$$

$$\begin{aligned} \Psi_p = & \int_{\Omega} \delta p \alpha'_c \nabla \cdot \dot{\mathbf{u}} d\Omega - \int_{\Omega} (\nabla \delta p) [\mathbf{k}_f (-\nabla P + \rho_f \mathbf{b} - \rho_f \ddot{\mathbf{u}}) + \kappa_{pc} \nabla c] d\Omega \\ & - \int_{s_p} \delta p \bar{q}_p ds + \int_{\Omega} \delta p \frac{\dot{P}}{Q} d\Omega - \int_{\Omega} \delta p \beta_T \dot{T} d\Omega - \int_{\Omega} \delta p \beta_{\varepsilon} \dot{c} d\Omega = 0 \end{aligned} \quad (۱۰۲-۴)$$

$$\begin{aligned} \Psi_T = & \int_{\Omega} \delta T (\rho c)_{ave} \dot{T} d\Omega + \int_{\Omega} \delta T \rho_f c_f [\mathbf{k}_f (-\nabla P + \rho_f \mathbf{b} - \rho_f \ddot{\mathbf{u}}) + \kappa_{pc} \nabla c] \nabla T d\Omega \\ & + \int_{\Omega} \nabla (\delta T) \kappa \nabla T d\Omega - \int_{s_T} \delta T q_T dS = 0 \end{aligned} \quad (۱۰۳-۴)$$

$$\begin{aligned} \Psi_c = & - \int_{\Omega} \nabla(\delta c) (\kappa_{cp} \nabla P - (1 - \lambda) D_c \nabla c) d\Omega - \int_{s_c} \delta c q_c dS + \int_{\Omega} \delta c n \dot{c} d\Omega \\ & + \int_{\Omega} \delta c \mathbf{w}_f \cdot \nabla c d\Omega = 0 \end{aligned} \quad (۱۰۴-۴)$$

۴-۷-۱ گسسته‌سازی در مکان

برای این منظور لازم است پارامترهای اصلی و گرادیان‌های آنها با استفاده از توابع لاگرانژی، گسسته‌سازی شوند. مانند مقیاس ماکرو برای گسسته‌سازی مکانی در این مقیاس داریم:

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \approx \mathbf{u}^h(\mathbf{x}, t) = \sum N_i^u u_i(t)$$

$$\nabla \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \approx (\mathbf{L}_u \mathbf{N}_u) \mathbf{U} = \sum B_i^u u_i(t)$$

$$p(\mathbf{x}, t) \approx p^h(\mathbf{x}, t) = \sum N_i^p p_i(t)$$

$$\nabla p(\mathbf{x}, t) \approx (\mathbf{L}_p \mathbf{N}_p) P = \sum B_i^p p_i(t)$$

$$T(\mathbf{x}, t) \approx T_n^h(\mathbf{x}, t) = \sum N_i^T T_{n_i}(t) \quad (۱۰۵-۴)$$

$$\nabla T(\mathbf{x}, t) \approx (\mathbf{L}_T \mathbf{N}_T) T_n = \sum B_i^T T_{n_i}(t)$$

$$c(\mathbf{x}, t) \approx c^h(\mathbf{x}, t) = \sum N_i^c c_i(t)$$

$$\nabla c(\mathbf{x}, t) \approx (\mathbf{L}_c \mathbf{N}_c) c = \sum B_i^c c_i(t)$$

که در آن $\mathbf{L}_u$ و $\mathbf{L}_p$ و $\mathbf{L}_T$ و $\mathbf{L}_c$ عملگر گرادیان میکرو برای جابجایی، فشار، دما و غلظت هستند و رابطه آنها به صورت زیر است:

$$\mathbf{L}_u = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial x} \end{bmatrix} \quad \mathbf{L}_p = \mathbf{L}_T = \mathbf{L}_c = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \end{bmatrix} \quad (۱۰۶-۴)$$

با جایگذاری روابط (۱۰۵-۴) در معادلات (۱۰۱-۴) تا (۱۰۴-۴) فرم ماتریسی معادلات میکرو به دست می‌آید:

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{u}} + \mathbf{K}\mathbf{u} - \mathbf{Q}_1\mathbf{p} - \mathbf{W}\mathbf{T} + \mathbf{A}\mathbf{c} - \mathbf{f}_{\text{ext}} = 0$$

$$\mathbf{Q}_2\dot{\mathbf{u}} + \mathbf{H}\mathbf{p} + \mathbf{E}\ddot{\mathbf{u}} - \mathbf{F}\mathbf{c} + \mathbf{S}\dot{\mathbf{p}} - \mathbf{R}\dot{\mathbf{T}} - \mathbf{Z}\dot{\mathbf{c}} - \mathbf{q}_{\text{ext}} = 0 \quad (\xi-1.7)$$

$$\mathbf{L}\dot{\mathbf{T}} + \mathbf{C}\mathbf{T} - \mathbf{g}_{\text{ext}} = 0$$

$$\mathbf{I}\dot{\mathbf{c}} + \mathbf{X}\mathbf{c} - \mathbf{N}\mathbf{P} - \mathbf{Y}_{\text{ext}} = 0$$

که در آنها:

$$\mathbf{M} = \int_{\Omega} \mathbf{N}_u^T \rho \mathbf{N}_u \, d\Omega \quad \mathbf{K} = \int_{\Omega} \mathbf{B}^T \mathbf{D} \mathbf{B} \, d\Omega \quad \mathbf{Q}_1 = \int_{\Omega} \mathbf{B}^T \alpha \mathbf{m} \mathbf{N}_p \, d\Omega$$

$$\mathbf{Q}_2 = \int_{\Omega} \mathbf{N}_p^T \alpha'_c \mathbf{m}' \mathbf{B} \, d\Omega \quad \mathbf{W} = \int_{\Omega} \mathbf{B}^T \mathbf{D} \alpha \mathbf{m} \mathbf{N}_p \, d\Omega = \int_{\Omega} \mathbf{B}^T \mathbf{D} \frac{1}{3} \beta \mathbf{m} \mathbf{N}_p \, d\Omega$$

$$\mathbf{A} = \int_{\Omega} \mathbf{B}^T a_{\mu} \mathbf{m} \mathbf{N}_c \, d\Omega \quad \mathbf{f}_{\text{ext}} = \int_{\Omega} \mathbf{N}_u^T p \mathbf{b} \, d\Omega + \int_{s_u} \mathbf{N}_u^T \mathbf{t} ds$$

$$\mathbf{H} = \int_{\Omega} \nabla \mathbf{N}_p^T \mathbf{k}_f \nabla \mathbf{N}_p \, d\Omega \quad \mathbf{E} = \int_{\Omega} \nabla \mathbf{N}_p^T \mathbf{k}_f \rho_f \mathbf{N}_u \, d\Omega \quad \mathbf{F} = \int_{\Omega} \nabla \mathbf{N}_p^T \kappa_{pc} \nabla \mathbf{N}_c \, d\Omega$$

$$\mathbf{S} = \int_{\Omega} \mathbf{N}_p^T \frac{1}{Q} \mathbf{N}_p \, d\Omega \quad \mathbf{R} = \int_{\Omega} \mathbf{N}_p^T \beta_T \mathbf{N}_T \, d\Omega \quad \mathbf{Z} = \int_{\Omega} \mathbf{N}_p^T \beta_{\varepsilon} \mathbf{N}_c \, d\Omega \quad (\xi-1.8)$$

$$\mathbf{q}_{\text{ext}} = \int_{\Omega} \nabla \mathbf{N}_p^T \mathbf{k}_f \rho_f \mathbf{b} \, d\Omega + \int_{\Gamma} \mathbf{N}_p^T \bar{\mathbf{q}}_p \, d\Gamma \quad \mathbf{L} = \int_{\Omega} \mathbf{N}_T^T (\rho c)_{\text{ave}} \mathbf{N}_T \, d\Omega$$

$$\mathbf{C} = \int_{\Omega} \mathbf{N}_T^T \rho_f c_f \mathbf{w}_f \mathbf{N}_T \, d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{B}_T^T \kappa \mathbf{B}_T \, d\Omega \quad \mathbf{g}_{\text{ext}} = \int_{s_T} \mathbf{N}_T^T \mathbf{q}_T dS$$

$$\mathbf{N} = \int_{\Omega} \nabla \mathbf{N}_c^T \kappa_{cp} \nabla \mathbf{N}_p \, d\Omega \quad \mathbf{X} = \int_{\Omega} \nabla \mathbf{N}_c^T (1 - \lambda) D_c \nabla \mathbf{N}_c \, d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{N}_c^T \mathbf{w}_f \nabla \mathbf{N}_c \, d\Omega$$

$$\mathbf{I} = \int_{\Omega} \mathbf{N}_c^T n \mathbf{N}_c \, d\Omega \quad \mathbf{Y}_{\text{ext}} = \int_{s_c} \mathbf{N}_c^T \mathbf{q}_c dS$$

ماتریس‌های فوق که پارامترهای آن‌ها ویژگی‌های محیط متخلخل هستند با استفاده از روش انتگرال‌گیری گاوس به صورت عددی حل می‌شوند. مانند مقیاس ماکرو، در این مقیاس هم برای محاسبه این انتگرال‌ها مقادیر داخل انتگرال در نقاط گاوس المان‌های RVE محاسبه شده و به صورت وزن‌دار با هم جمع می‌شوند.

۲-۷-۴ گسسته سازی زمانی

با توجه به معادلات (۱۰۷-۴) به دلیل حضور ترم‌های مشتق زمانی در همه پارامترهای مسئله، نیاز به گسسته‌سازی زمانی، اجتناب ناپذیر است. در این پژوهش از روش نیومارک تعمیم‌یافته برای گسسته‌سازی در زمان استفاده می‌شود. به دلیل حضور مشتق مرتبه دوم تغییر مکان و مشتق مرتبه اول فشار، دما و غلظت از روش نیومارک GN22 برای تغییر مکان و از روش GN11 برای فشار، دما و غلظت استفاده می‌شود. بر اساس این روش مشتق زمانی هر پارامتر در هر گام زمانی را می‌توان بر اساس مشتق این پارامتر و مقدار خود پارامتر در گام قبل و مقدار پارامتر در گام فعلی، طبق رابطه زیر محاسبه کرد:

$$\ddot{\mathbf{u}}_{n+1} = \frac{1}{\beta \Delta t^2} (\mathbf{u}_{n+1} - \mathbf{u}_n) - \frac{1}{\beta \Delta t} \dot{\mathbf{u}}_n - \left(\frac{1}{2\beta} - 1 \right) \ddot{\mathbf{u}}_n$$

$$\dot{\mathbf{u}}_{n+1} = \frac{\gamma}{\beta \Delta t} (\mathbf{u}_{n+1} - \mathbf{u}_n) - \left(\frac{\gamma}{\beta} - 1 \right) \dot{\mathbf{u}}_n - \Delta t \left(\frac{\gamma}{2\beta} - 1 \right) \ddot{\mathbf{u}}_n$$

$$\dot{p}_{n+1} = \frac{1}{\theta \Delta t} (p_{n+1} - p_n) - \left(\frac{1}{\theta} - 1 \right) \dot{p}_n \quad (۱۰۹-۴)$$

$$\dot{T}_{n+1} = \frac{1}{\theta \Delta t} (T_{n+1} - T_n) - \left(\frac{1}{\theta} - 1 \right) \dot{T}_n$$

$$\dot{c}_{n+1} = \frac{1}{\theta \Delta t} (c_{n+1} - c_n) - \left(\frac{1}{\theta} - 1 \right) \dot{c}_n$$

که در آن β و γ و θ پارامترهای نیومارک هستند که مقادیری بین ۰ و ۱ دارند و برای پایداری حل لازم است شروط $\theta, \gamma > 0.5$ و $\beta > 0.25(0.5 + \gamma)^2$ برقرار باشد. در این پژوهش این پارامترها به ترتیب 0.6 و 0.8 و 0.75 لحاظ شده‌اند. در روابط (۱۰۹-۴) اندیس $n+1$ نشان دهنده پارامترهای مجهول و اندیس n نشان دهنده پارامترهای معلوم هستند. با چایگذاری روابط (۱۰۹-۴) در معادلات (۱۰۷-۴) و جداسازی پارامترهای معلوم و مجهول خواهیم داشت:

$$\Psi_{\mathbf{U}_{n+1}} = \mathbf{M} \left(\frac{1}{\beta \Delta t^2} (\mathbf{U}_{n+1}) \right) + \mathbf{K} \mathbf{U}_{n+1} - \mathbf{Q} p_{n+1} - \mathbf{W} T_{n+1} + \mathbf{A} c_{n+1} - \mathbf{G}_{\mathbf{U}_{n+1}} = 0 \quad (\xi-110)$$

$$\mathbf{G}_{\mathbf{U}_{n+1}} = \mathbf{M} \left(\frac{1}{\beta \Delta t} \dot{\mathbf{U}}_n + \left(\frac{1}{2\beta} - 1 \right) \ddot{\mathbf{U}}_n + \frac{1}{\beta \Delta t^2} \mathbf{U}_n \right) + \mathbf{f}_{n+1}^{ext}$$

$$\begin{aligned} \Psi_{p_{n+1}} = & \mathbf{Q}^T \left(\frac{\gamma}{\beta \Delta t} (\mathbf{U}_{n+1}) \right) + \mathbf{H} p_{n+1} + \mathbf{E} \left(\frac{1}{\beta \Delta t^2} (\mathbf{U}_{n+1}) \right) - \mathbf{F} c_{n+1} \\ & + \mathbf{S} \left(\frac{1}{\theta \Delta t} (P_{n+1}) \right) - \mathbf{R} \left(\frac{1}{\theta \Delta t} (T_{n+1}) \right) - \mathbf{Z} \left(\frac{1}{\theta \Delta t} (c_{n+1}) \right) - \mathbf{G}_{P_{n+1}} \end{aligned} \quad (\xi-111)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_{P_{n+1}} = & \mathbf{Q}^T \left(\frac{\gamma}{\beta \Delta t} \mathbf{U}_n + \left(\frac{\gamma}{\beta} - 1 \right) \dot{\mathbf{U}}_n + \Delta t \left(\frac{\gamma}{2\beta} - 1 \right) \ddot{\mathbf{U}}_n \right) \\ & + \mathbf{E} \left(\frac{1}{\beta \Delta t^2} \mathbf{U}_n + \frac{1}{\beta \Delta t} \dot{\mathbf{U}}_n + \left(\frac{1}{2\beta} - 1 \right) \ddot{\mathbf{U}}_n \right) \\ & + \mathbf{S} \left(\frac{1}{\theta \Delta t} P_n + \left(\frac{1}{\theta} - 1 \right) \dot{P}_n \right) - \mathbf{R} \left(\frac{1}{\theta \Delta t} T_n + \left(\frac{1}{\theta} - 1 \right) \dot{T}_n \right) \\ & - \mathbf{Z} \left(\frac{1}{\theta \Delta t} c_n + \left(\frac{1}{\theta} - 1 \right) \dot{c}_n \right) + \mathbf{q}_{n+1}^{ext} \end{aligned}$$

$$\Psi_{T_{n+1}} = \mathbf{L} \left(\frac{1}{\theta \Delta t} (T_{n+1}) \right) + \mathbf{C} T_{n+1} - \mathbf{G}_{T_{n+1}} \quad (\xi-112)$$

$$\mathbf{G}_{T_{n+1}} = \mathbf{L} \left(\frac{1}{\theta \Delta t} T_n + \left(\frac{1}{\theta} - 1 \right) \dot{T}_n \right) + \mathbf{g}_{ext}$$

$$\Psi_{c_{n+1}} = \mathbf{I} \left(\frac{1}{\theta \Delta t} (c_{n+1}) \right) + \mathbf{X} c_{n+1} - \mathbf{N} p_{n+1} - \mathbf{G}_{c_{n+1}} \quad (\xi-113)$$

$$\mathbf{G}_{c_{n+1}} = \mathbf{I} \left(\frac{1}{\theta \Delta t} c_n + \left(\frac{1}{\theta} - 1 \right) \dot{c}_n \right) + \mathbf{Y}_{ext}$$

که در آن‌ها روابط Ψ مقادیر مجهول در گام $n+1$ و روابط $\mathbf{G}$ مقادیر معلوم در گام n هستند. برای حل دستگاه معادلات فوق، لازم است از یکی از روش‌های تکراری حل معادلات غیرخطی استفاده شود که در این جا هم مانند مقیاس ماکرو، از روش نیوتون-رافسون استفاده می‌شود. در این روش با استفاده از دو جمله اول بسط تیلور، دستگاه معادلات خطی‌سازی شده و در هر گام زمانی ماتریس ژاکوبین محاسبه می‌شود و حل تا رسیدن به هم‌گرایی در هر گام زمانی، ادامه می‌یابد. فرم خطی شده دستگاه معادلات با در نظر گرفتن دو جمله اول بسط تیلور به صورت زیر است:

$$\begin{bmatrix} \Psi_{U_{n+1}}^{i+1} \\ \Psi_{P_{n+1}}^{i+1} \\ \Psi_{T_{n+1}}^{i+1} \\ \Psi_{C_{n+1}}^{i+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Psi_{U_{n+1}}^i \\ \Psi_{P_{n+1}}^i \\ \Psi_{T_{n+1}}^i \\ \Psi_{C_{n+1}}^i \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{\partial \Psi_U}{\partial U} & \frac{\partial \Psi_U}{\partial P} & \frac{\partial \Psi_U}{\partial T} & \frac{\partial \Psi_U}{\partial C} \\ \frac{\partial \Psi_P}{\partial U} & \frac{\partial \Psi_P}{\partial P} & \frac{\partial \Psi_P}{\partial T} & \frac{\partial \Psi_P}{\partial C} \\ \frac{\partial \Psi_T}{\partial U} & \frac{\partial \Psi_T}{\partial P} & \frac{\partial \Psi_T}{\partial T} & \frac{\partial \Psi_T}{\partial C} \\ \frac{\partial \Psi_C}{\partial U} & \frac{\partial \Psi_C}{\partial P} & \frac{\partial \Psi_C}{\partial T} & \frac{\partial \Psi_C}{\partial C} \end{bmatrix}^i \begin{bmatrix} dU_n^i \\ dP_n^i \\ dT_n^i \\ dC_n^i \end{bmatrix} = 0 \quad (۴-۱۱۴)$$

برای ماتریس ژاکوبین در رابطه (۴-۱۱۴) با توجه به روابط

(۴-۱۱۰) تا (۴-۱۱۳) داریم:

$$J = \begin{bmatrix} \frac{\partial \Psi_U}{\partial U} & \frac{\partial \Psi_U}{\partial P} & \frac{\partial \Psi_U}{\partial T} & \frac{\partial \Psi_U}{\partial C} \\ \frac{\partial \Psi_P}{\partial U} & \frac{\partial \Psi_P}{\partial P} & \frac{\partial \Psi_P}{\partial T} & \frac{\partial \Psi_P}{\partial C} \\ \frac{\partial \Psi_T}{\partial U} & \frac{\partial \Psi_T}{\partial P} & \frac{\partial \Psi_T}{\partial T} & \frac{\partial \Psi_T}{\partial C} \\ \frac{\partial \Psi_C}{\partial U} & \frac{\partial \Psi_C}{\partial P} & \frac{\partial \Psi_C}{\partial T} & \frac{\partial \Psi_C}{\partial C} \end{bmatrix}^i \quad (۴-۱۱۵)$$

$$= \begin{bmatrix} M \frac{1}{\beta \Delta t^2} + K & -Q_1 & -W & A \\ Q_2 \frac{\gamma}{\beta \Delta t} + E \frac{1}{\beta \Delta t^2} & H + S \frac{1}{\theta \Delta t} & -R \frac{1}{\theta \Delta t} & -F - Z \frac{1}{\theta \Delta t} \\ 0 & 0 & L \frac{1}{\theta \Delta t} + C & 0 \\ 0 & -N & 0 & X + I \frac{1}{\theta \Delta t} \end{bmatrix}^i$$

برای حل دستگاه معادلات به دست آمده در مقیاس میکرو لازم است دو شرطی که در روابط (۴-۱۱) تا (۴-۱۴) و روابط (۴-۵۶) تا (۴-۵۹) به عنوان شرط اول و دوم، به دست آمد در کنار دستگاه معادلات به دست آمده، ارضا شوند. دو شرط مرزی خطی و تناوبی در این پژوهش برای ارضای این شروط به کار گرفته خواهند شد، که در ادامه به فرمول بندی آنها پرداخته می شود.

۳-۷-۴ شرط مرزی خطی

در شرط مرزی خطی، میدان نوسانات جابجایی، فشار، دما و غلظت در تمام مرز RVE صفر لحاظ می‌شود تا شرط اول و دوم ارضا گردد. با تقسیم گره‌های حاضر در RVE به گره‌های مرزی (B) و گره‌های داخلی (I) و همچنین تقسیم ماتریس ژاکوبین ماکرو بر این اساس، خواهیم داشت:

$$\begin{bmatrix} J_{UU}^{II} & J_{UP}^{II} & J_{UT}^{II} & J_{UC}^{II} & J_{UU}^{IB} & J_{UP}^{IB} & J_{UT}^{IB} & J_{UC}^{IB} \\ J_{UU}^{II} & J_{UP}^{II} & J_{UT}^{II} & J_{UC}^{II} & J_{UU}^{IB} & J_{UP}^{IB} & J_{UT}^{IB} & J_{UC}^{IB} \\ J_{PU}^{II} & J_{PP}^{II} & J_{PT}^{II} & J_{PC}^{II} & J_{PU}^{IB} & J_{PP}^{IB} & J_{PT}^{IB} & J_{PC}^{IB} \\ J_{PU}^{II} & J_{PP}^{II} & J_{PT}^{II} & J_{PC}^{II} & J_{PU}^{IB} & J_{PP}^{IB} & J_{PT}^{IB} & J_{PC}^{IB} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta X_U^I \\ \delta X_P^I \\ \delta X_T^I \\ \delta X_C^I \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (۴-۱۱۶)$$

$$\begin{bmatrix} J_{TU}^{BI} & J_{TP}^{BI} & J_{TT}^{BI} & J_{TC}^{BI} & J_{TU}^{BB} & J_{TP}^{BB} & J_{TT}^{BB} & J_{TC}^{BB} \\ J_{TU}^{BI} & J_{TP}^{BI} & J_{TT}^{BI} & J_{TC}^{BI} & J_{TU}^{BB} & J_{TP}^{BB} & J_{TT}^{BB} & J_{TC}^{BB} \\ J_{CU}^{BI} & J_{CP}^{BI} & J_{CT}^{BI} & J_{CC}^{BI} & J_{CU}^{BB} & J_{CP}^{BB} & J_{CT}^{BB} & J_{CC}^{BB} \\ J_{CU}^{BI} & J_{CP}^{BI} & J_{CT}^{BI} & J_{CC}^{BI} & J_{CU}^{BB} & J_{CP}^{BB} & J_{CT}^{BB} & J_{CC}^{BB} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta X_U^B \\ \delta X_P^B \\ \delta X_T^B \\ \delta X_C^B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \delta F_U^B \\ \delta F_P^B \\ \delta F_T^B \\ \delta F_C^B \end{bmatrix}$$

در رابطه (۴-۱۱۶) بالانویس‌ها برای تقسیم درایه‌ها به مرزی یا داخلی و اندیس‌ها برای تقسیم درایه‌ها برای پارامترهای تغییر مکان، فشار، دما و غلظت هستند. با توجه به اینکه در گره‌های داخلی نیروی گرهی نداریم درایه‌های نیروی مربوط به گره‌های داخلی، صفر در نظر گرفته شده است. از رابطه (۴-۱۱۶) به طور خلاصه خواهیم داشت:

$$\begin{bmatrix} J^{II} & J^{IB} \\ J^{BI} & J^{BB} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta X^I \\ \delta X^B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \delta F^B \end{bmatrix} \quad (۴-۱۱۷)$$

از رابطه (۴-۱۱۷) داریم:

$$J^{II} \delta X^I + J^{IB} \delta X^B = 0 \quad \Rightarrow \quad \delta X^I = -[J^{II}]^{-1} J^{IB} \delta X^B \quad (۴-۱۱۸)$$

$$J^{BI} \delta X^I + J^{BB} \delta X^B = \delta F^B \quad (۴-۱۱۹)$$

با جایگذاری رابطه (۴-۱۱۸) در رابطه (۴-۱۱۹)، داریم:

$$\mathbf{J}^* \delta \mathbf{X}^B = \delta \mathbf{F}^B \quad (4-120)$$

که در آن:

$$\mathbf{J}^* = (\mathbf{J}^{BB} - \mathbf{J}^{BI} [\mathbf{J}^{II}]^{-1} \mathbf{J}^{IB}) \quad (4-121)$$

با توجه به اینکه در شرط مرزی خطی، میدان نوسانات روی گره‌های مرزی صفر است، می‌توان نوشت:

$$\delta \mathbf{X}^B = \begin{bmatrix} \delta \mathbf{X}_U^B \\ \delta \mathbf{X}_P^B \\ \delta \mathbf{X}_T^B \\ \delta \mathbf{X}_C^B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{I}^T \delta \bar{\mathbf{u}} + \mathbf{H}_B^T \delta \bar{\boldsymbol{\epsilon}} \\ \mathbf{1}_{4 \times 1} \delta \bar{\mathbf{p}} + \mathbf{G}_B^T \delta \nabla \bar{\mathbf{p}} \\ \mathbf{1}_{4 \times 1} \delta \bar{\mathbf{T}} + \mathbf{G}_B^T \delta \nabla \bar{\mathbf{T}} \\ \mathbf{1}_{4 \times 1} \delta \bar{\mathbf{c}} + \mathbf{G}_B^T \delta \nabla \bar{\mathbf{c}} \end{bmatrix} \quad (4-122)$$

با جایگذاری رابطه (4-122) در (4-120) داریم:

$$\delta \mathbf{F}^B = \begin{bmatrix} \delta \mathbf{F}_U^B \\ \delta \mathbf{F}_P^B \\ \delta \mathbf{F}_T^B \\ \delta \mathbf{F}_C^B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{J}_{UU}^* & \mathbf{J}_{UP}^* & \mathbf{J}_{UT}^* & \mathbf{J}_{UC}^* \\ \mathbf{J}_{PU}^* & \mathbf{J}_{PP}^* & \mathbf{J}_{PT}^* & \mathbf{J}_{PC}^* \\ \mathbf{J}_{TU}^* & \mathbf{J}_{TP}^* & \mathbf{J}_{TT}^* & \mathbf{J}_{TC}^* \\ \mathbf{J}_{CU}^* & \mathbf{J}_{CP}^* & \mathbf{J}_{CT}^* & \mathbf{J}_{CC}^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{I}^T \delta \bar{\mathbf{u}} + \mathbf{H}_B^T \delta \bar{\boldsymbol{\epsilon}} \\ \mathbf{1}_{M \times 1} \delta \bar{\mathbf{p}} + \mathbf{G}_B^T \delta \nabla \bar{\mathbf{p}} \\ \mathbf{1}_{M \times 1} \delta \bar{\mathbf{T}} + \mathbf{G}_B^T \delta \nabla \bar{\mathbf{T}} \\ \mathbf{1}_{M \times 1} \delta \bar{\mathbf{c}} + \mathbf{G}_B^T \delta \nabla \bar{\mathbf{c}} \end{bmatrix} \quad (4-123)$$

بر اساس اصل هیل-مندل تعمیم یافته و سازگاری انرژی بین دو مقیاس، روابط (4-124) تا (4-127) به دست آمد. در این قسمت فرم برداری این روابط بازنویسی می‌شود:

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{s_u} \mathbf{H} \mathbf{t} ds = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \sum_{i \in \Gamma} H_i t_i = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{H}_B \mathbf{F}_U^B \quad (4-124)$$

$$\bar{\mathbf{f}}_I^u = - \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{s_u} \mathbf{t} ds = \frac{-1}{|\Omega_\mu|} \sum_{i \in \Gamma} t_i = \frac{-1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I}^T \mathbf{F}_U^B \quad (4-125)$$

$$\bar{\mathbf{w}}_f = - \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{s_p} \mathbf{x} \bar{\mathbf{q}}_p ds = - \frac{1}{|\Omega_\mu|} \sum_{i \in \Gamma} X_i q_i^p = - \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{x}_B \mathbf{F}_P^B \quad (4-126)$$

$$\bar{f}_I^p = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{s_p} \bar{\mathbf{q}}_p ds = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \sum_{i \in \Gamma} q_i^p = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \mathbf{F}_P^B \quad (4-127)$$

$$\bar{\mathbf{J}}_T = -\frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{s_T} \mathbf{x} \mathbf{q}_T dS = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \sum_{i \in \Gamma} X_i q_i^T = -\frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{X}_B \mathbf{F}_T^B \quad (\text{ع-۱۲۸})$$

$$\bar{f}_I^T = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{s_p} \bar{\mathbf{q}}_T ds = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \sum_{i \in \Gamma} q_i^T = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \mathbf{F}_T^B \quad (\text{ع-۱۲۹})$$

$$\bar{\mathbf{J}}_C = -\frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{s_c} \mathbf{x} \mathbf{q}_C dS = -\frac{1}{|\Omega_\mu|} \sum_{i \in \Gamma} X_i q_i^C = -\frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{X}_B \mathbf{F}_C^B \quad (\text{ع-۱۳۰})$$

$$\bar{f}_I^C = \int_{s_c} \mathbf{q}_C dS = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \sum_{i \in \Gamma} q_i^C = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \mathbf{F}_C^B \quad (\text{ع-۱۳۱})$$

با توجه به روابط (ع-۱۲۴) تا (ع-۱۳۱) و همچنین رابطه (ع-۱۲۳) می‌توان درایه‌های ماتریس ژاکوبین ماکرو را که در رابطه (ع-۱۰۰) بدست آمد، محاسبه کرد. برای این منظور داریم:

$$\frac{\partial \bar{\boldsymbol{\sigma}}}{\partial \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}} = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{H}_B \frac{\partial \mathbf{F}_U^B}{\partial \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}} = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{H}_B \mathbf{J}_{UU}^* \mathbf{H}_B^T \quad (\text{ع-۱۳۲})$$

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{f}}_I^u}{\partial \bar{\mathbf{u}}} = \frac{-1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I}^T \frac{\partial \mathbf{F}_U^B}{\partial \bar{\mathbf{u}}} = \frac{-1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \mathbf{J}_{UU}^* \mathbf{I}^T \quad (\text{ع-۱۳۳})$$

$$\frac{\partial \bar{\boldsymbol{\sigma}}}{\partial \bar{p}} = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{H}_B \frac{\partial \mathbf{F}_U^B}{\partial \bar{p}} = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{H}_B \mathbf{J}_{UP}^* \mathbf{1}_{M \times 1} \quad (\text{ع-۱۳۴})$$

$$\frac{\partial \bar{\boldsymbol{\sigma}}}{\partial \bar{T}} = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{H}_B \frac{\partial \mathbf{F}_U^B}{\partial \bar{T}} = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{H}_B \mathbf{J}_{UT}^* \mathbf{1}_{M \times 1} \quad (\text{ع-۱۳۵})$$

$$\frac{\partial \bar{\boldsymbol{\sigma}}}{\partial \bar{C}} = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{H}_B \frac{\partial \mathbf{F}_U^B}{\partial \bar{C}} = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{H}_B \mathbf{J}_{UC}^* \mathbf{1}_{M \times 1} \quad (\text{ع-۱۳۶})$$

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{w}}_f}{\partial \bar{\mathbf{u}}} = -\frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{X}_B \frac{\partial \mathbf{F}_P^B}{\partial \bar{\mathbf{u}}} = -\frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{X}_B \mathbf{J}_{PU}^* \mathbf{I}^T \quad (\text{ع-۱۳۷})$$

$$\frac{\partial \bar{f}_I^p}{\partial \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}} = \frac{\mathbf{1}}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \frac{\partial \mathbf{F}_P^B}{\partial \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}} = \frac{\mathbf{1}}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \mathbf{J}_{PU}^* \mathbf{H}_B^T \quad (\text{ع-۱۳۸})$$

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{w}}_f}{\partial \bar{\mathbf{v}}_p} = -\frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{X}_B \frac{\partial \mathbf{F}_p^B}{\partial \bar{\mathbf{v}}_p} = -\frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{X}_B \mathbf{J}_{PP}^* \mathbf{G}_B^T \quad (\text{E-139})$$

$$\frac{\partial \bar{f}_I^p}{\partial \bar{p}} = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \frac{\partial \mathbf{F}_p^B}{\partial \bar{p}} = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \mathbf{J}_{PP}^* \mathbf{1}_{M \times 1} \quad (\text{E-140})$$

$$\frac{\partial \bar{f}_I^p}{\partial \bar{T}} = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \frac{\partial \mathbf{F}_p^B}{\partial \bar{T}} = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \mathbf{J}_{PT}^* \mathbf{1}_{M \times 1} \quad (\text{E-141})$$

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{w}}_f}{\partial \bar{\mathbf{v}}_{\bar{c}}} = -\frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{X}_B \frac{\partial \mathbf{F}_p^B}{\partial \bar{\mathbf{v}}_{\bar{c}}} = -\frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{X}_B \mathbf{J}_{PC}^* \mathbf{G}_B^T \quad (\text{E-142})$$

$$\frac{\partial \bar{f}_I^p}{\partial \bar{c}} = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \frac{\partial \mathbf{F}_p^B}{\partial \bar{c}} = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \mathbf{J}_{PC}^* \mathbf{1}_{M \times 1} \quad (\text{E-143})$$

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{J}}_T}{\partial \bar{\mathbf{v}}_{\bar{T}}} = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{X}_B \frac{\partial \mathbf{F}_T^B}{\partial \bar{\mathbf{v}}_{\bar{T}}} = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{X}_B \mathbf{J}_{TT}^* \mathbf{G}_B^T \quad (\text{E-144})$$

$$\frac{\partial \bar{f}_I^T}{\partial \bar{\mathbf{u}}} = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \frac{\partial \mathbf{F}_T^B}{\partial \bar{\mathbf{u}}} = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \mathbf{J}_{TU}^* \mathbf{I}^T \quad (\text{E-145})$$

$$\frac{\partial \bar{f}_I^T}{\partial \bar{\mathbf{v}}_p} = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \frac{\partial \mathbf{F}_T^B}{\partial \bar{\mathbf{v}}_p} = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \mathbf{J}_{TP}^* \mathbf{G}_B^T \quad (\text{E-146})$$

$$\frac{\partial \bar{f}_I^T}{\partial \bar{T}} = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \frac{\partial \mathbf{F}_T^B}{\partial \bar{T}} = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \mathbf{J}_{TT}^* \mathbf{I}^T \quad (\text{E-147})$$

$$\frac{\partial \bar{f}_I^T}{\partial \bar{\mathbf{v}}_{\bar{T}}} = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \frac{\partial \mathbf{F}_T^B}{\partial \bar{\mathbf{v}}_{\bar{T}}} = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \mathbf{J}_{TT}^* \mathbf{G}_B^T \quad (\text{E-148})$$

$$\frac{\partial \bar{f}_I^T}{\partial \bar{\mathbf{v}}_{\bar{c}}} = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \frac{\partial \mathbf{F}_T^B}{\partial \bar{\mathbf{v}}_{\bar{c}}} = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \mathbf{J}_{TC}^* \mathbf{G}_B^T \quad (\text{E-149})$$

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{J}}_c}{\partial \bar{\mathbf{v}}_p} = -\frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{X}_B \frac{\partial \mathbf{F}_c^B}{\partial \bar{\mathbf{v}}_p} = -\frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{X}_B \mathbf{J}_{CP}^* \mathbf{G}_B^T \quad (\text{E-150})$$

$$\frac{\partial \bar{J}_c}{\partial \nabla \bar{c}} = - \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{X}_B \frac{\partial \mathbf{F}_C^B}{\partial \nabla \bar{c}} = - \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{X}_B \mathbf{J}_{CC}^* \mathbf{G}_B^T \quad (4-151)$$

$$\frac{\partial \bar{f}_I^c}{\partial \bar{\mathbf{u}}} = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \frac{\partial \mathbf{F}_C^B}{\partial \bar{\mathbf{u}}} = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \mathbf{J}_{CU}^* \mathbf{1}_{M \times 1} \quad (4-152)$$

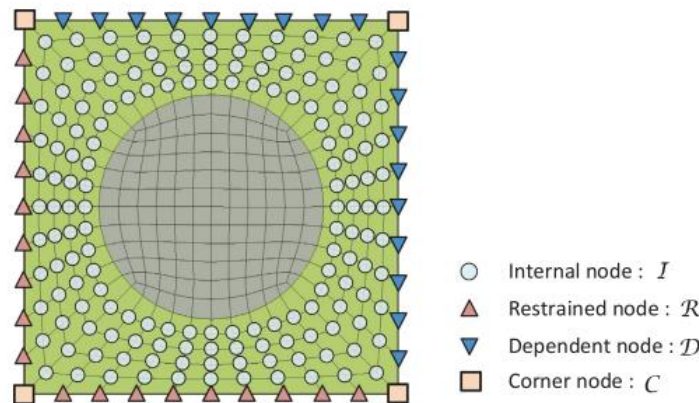
$$\frac{\partial \bar{f}_I^c}{\partial \nabla \bar{p}} = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \frac{\partial \mathbf{F}_C^B}{\partial \nabla \bar{p}} = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \mathbf{J}_{CP}^* \mathbf{G}_B^T \quad (4-153)$$

$$\frac{\partial \bar{f}_I^c}{\partial \bar{c}} = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \frac{\partial \mathbf{F}_C^B}{\partial \bar{c}} = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \mathbf{J}_{CC}^* \mathbf{1}_{M \times 1} \quad (4-154)$$

$$\frac{\partial \bar{f}_I^c}{\partial \nabla \bar{c}} = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \frac{\partial \mathbf{F}_C^B}{\partial \nabla \bar{c}} = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \mathbf{J}_{CC}^* \mathbf{G}_B^T \quad (4-155)$$

۴-۷-۴ شرط مرزی تناوبی

در شرط مرزی تناوبی، میدان نوسان هر نقطه روی مرز RVE (به استثناء نقاط گوشه) با میدان نوسان نقطه متناظر خود در مرز روبه‌رو باید برابر باشد. برای پایداری محیط، نقاط گوشه، گیردار در نظر گرفته می‌شوند. برای این منظور مرز چپ و مرز پایین را نقاط مهارشده (Γ_-) ، و مرز راست و مرز بالا را نقاط وابسته (Γ_+) می‌نامیم. یک توصیف از نقاط RVE در این نوع شرط مرزی در شکل ۲-۴ ارائه شده است.



شکل ۲-۴ توصیف نقاط گرهی در شرط مرزی تناوبی [۵۰]

¹ Restrained Nodes

² Dependent Nodes

بنابر آنچه گفته شد، میدان نوسانات در هر نقطه از مرز مهار شده با نقطه متناظر آن در مرز وابسته برابر است. بنابراین طبق روابط (۴-۱) تا (۴-۴) داریم:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_m(\mathbf{x}^+) - \mathbf{u}_m(\mathbf{x}^-) &= \hat{\mathbf{H}}^T \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} & \mathbf{t}(\mathbf{x}^+) &= -\mathbf{t}(\mathbf{x}^-) \\ p_m(\mathbf{x}^+) - p_m(\mathbf{x}^-) &= \hat{\mathbf{X}}^T \bar{\nabla} \bar{p} & \bar{q}_p(\mathbf{x}^+) &= -\bar{q}_p(\mathbf{x}^-) \\ T_m(\mathbf{x}^+) - T_m(\mathbf{x}^-) &= \hat{\mathbf{X}}^T \bar{\nabla} \bar{T} & \bar{q}_T(\mathbf{x}^+) &= -\bar{q}_T(\mathbf{x}^-) \\ c_m(\mathbf{x}^+) - c_m(\mathbf{x}^-) &= \hat{\mathbf{X}}^T \bar{\nabla} \bar{c} & \bar{q}_c(\mathbf{x}^+) &= -\bar{q}_c(\mathbf{x}^-) \end{aligned} \quad (۴-۱۵۶)$$

که در آنها:

$$\hat{\mathbf{H}} = \begin{bmatrix} x_1^+ - x_1^- & 0 \\ 0 & x_2^+ - x_2^- \\ \frac{1}{2}(x_2^+ - x_2^-) & \frac{1}{2}(x_1^+ - x_1^-) \end{bmatrix} \quad \hat{\mathbf{X}} = \begin{bmatrix} x_1^+ - x_1^- \\ x_2^+ - x_2^- \end{bmatrix} \quad (۴-۱۵۷)$$

با توجه به معادلات (۴-۱۵۶) رابطه بین درجات آزادی مستقل و وابسته را می توان به صورت زیر نوشت:

$$\mathbf{X}_D = \mathbf{X}_R + \mathbf{g} \quad \mathbf{g}_i = \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{H}}_i^T \delta \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \\ \hat{\mathbf{G}}_i^T \delta \nabla \bar{p} \\ \hat{\mathbf{G}}_i^T \delta \nabla \bar{T} \\ \hat{\mathbf{G}}_i^T \delta \nabla \bar{c} \end{bmatrix} \quad \mathbf{g} = [\mathbf{g}_1^T, \mathbf{g}_1^T, \mathbf{g}_1^T, \dots, \mathbf{g}_{N_R}^T] \quad (۴-۱۵۸)$$

که در آن $\mathbf{X}_j^T = [\mathbf{u}_i^T, p_i^T, T_i^T, c_i^T]$ بردار مجهولات مسئله است. اگر متغیرهای وابسته را بر حسب متغیرهای مستقل بنویسیم خواهیم داشت:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{X}_R \\ \mathbf{X}_D \\ \mathbf{X}_I \\ \mathbf{X}_C \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{I}_{N_R} & 0 & 0 \\ \mathbf{I}_{N_D} & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{I}_{N_I} & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{I}_{N_C} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{X}_R \\ \mathbf{X}_I \\ \mathbf{X}_C \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ \mathbf{g} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (۴-۱۵۹)$$

که N_D و N_R به ترتیب تعداد نقاط گرهی روی مرز Γ_+ و Γ_- به جز نقاط گوشه و N_I و N_C به ترتیب تعداد نقاط داخلی و نقاط گوشه هستند.

با افراز ماتریس ژاکوبین به درجات آزادی مربوط به نقاط وابسته، مستقل، داخلی و گوشه و جایگذاری رابطه (۴-۱۵۹) در آن، خواهیم داشت:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{J}_{RR} & \mathbf{J}_{RD} & \mathbf{J}_{RI} & \mathbf{J}_{RC} \\ \mathbf{J}_{DR} & \mathbf{J}_{DD} & \mathbf{J}_{DI} & \mathbf{J}_{DC} \\ \mathbf{J}_{IR} & \mathbf{J}_{ID} & \mathbf{J}_{II} & \mathbf{J}_{IC} \\ \mathbf{J}_{CR} & \mathbf{J}_{CD} & \mathbf{J}_{CI} & \mathbf{J}_{CC} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{I}_{N_R} & 0 & 0 \\ \mathbf{I}_{N_D} & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{I}_{N_I} & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{I}_{N_C} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{X}_R \\ \mathbf{X}_I \\ \mathbf{X}_C \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ \mathbf{g} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \delta \mathbf{F}_R \\ \delta \mathbf{F}_D \\ \delta \mathbf{F}_I \\ \delta \mathbf{F}_C \end{bmatrix} \quad (۴-۱۶۰)$$

با فرض:

$$\mathbf{T}\mathbf{T} = \begin{bmatrix} \mathbf{I}_{N_R} & 0 & 0 \\ \mathbf{I}_{N_D} & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{I}_{N_I} & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{I}_{N_C} \end{bmatrix} \quad (۴-۱۶۱)$$

و با پیش ضرب $\mathbf{T}\mathbf{T}^T$ (ضرب از سمت چپ) در معادله (۴-۱۶۰) داریم:

$$\begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{J}}_{RR} & \tilde{\mathbf{J}}_{RI} & \tilde{\mathbf{J}}_{RC} \\ \tilde{\mathbf{J}}_{IR} & \tilde{\mathbf{J}}_{II} & \tilde{\mathbf{J}}_{IC} \\ \tilde{\mathbf{J}}_{CR} & \tilde{\mathbf{J}}_{CI} & \tilde{\mathbf{J}}_{CC} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta \mathbf{X}_R \\ \delta \mathbf{X}_I \\ \delta \mathbf{X}_C \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{J}_{RD} + \mathbf{J}_{DD} \\ \mathbf{J}_{ID} \\ \mathbf{J}_{CD} \end{bmatrix} \delta \mathbf{g} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \delta \mathbf{F}_C \end{bmatrix} \quad (۴-۱۶۲)$$

با حل دستگاه معادلات (۴-۱۶۲) بر حسب $\delta \mathbf{X}_R$ و $\delta \mathbf{X}_I$ ، داریم:

$$\begin{bmatrix} \delta \mathbf{X}_R \\ \delta \mathbf{X}_I \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{J}}_{RR} & \tilde{\mathbf{J}}_{RI} \\ \tilde{\mathbf{J}}_{IR} & \tilde{\mathbf{J}}_{II} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{J}}_{RC} \delta \mathbf{X}_C + (\mathbf{J}_{RD} + \mathbf{J}_{DD}) \delta \mathbf{g} \\ \tilde{\mathbf{J}}_{IC} \delta \mathbf{X}_C + \mathbf{J}_{ID} \delta \mathbf{g} \end{bmatrix} \quad (۴-۱۶۳)$$

با فرض:

$$\mathbf{A}_{2 \times 2} = \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{J}}_{RR} & \tilde{\mathbf{J}}_{RI} \\ \tilde{\mathbf{J}}_{IR} & \tilde{\mathbf{J}}_{II} \end{bmatrix}^{-1} \quad (۴-۱۶۴)$$

داریم:

$$\delta \mathbf{X}_R = \mathbf{A}_1: * \begin{bmatrix} -\tilde{\mathbf{J}}_{RC} \delta \mathbf{X}_C - (\mathbf{J}_{RD} + \mathbf{J}_{DD}) \delta \mathbf{g} \\ -\tilde{\mathbf{J}}_{IC} \delta \mathbf{X}_C - \mathbf{J}_{ID} \delta \mathbf{g} \end{bmatrix} \quad (\text{ع-۱۶۵})$$

$$= -\mathbf{A}_{11}(\tilde{\mathbf{J}}_{RC} \delta \mathbf{X}_C + (\mathbf{J}_{RD} + \mathbf{J}_{DD}) \delta \mathbf{g}) - \mathbf{A}_{12}(\tilde{\mathbf{J}}_{IC} \delta \mathbf{X}_C + \mathbf{J}_{ID} \delta \mathbf{g})$$

$$\delta \mathbf{X}_I = \mathbf{A}_2: * \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{J}}_{RC} \delta \mathbf{X}_C + (\mathbf{J}_{RD} + \mathbf{J}_{DD}) \delta \mathbf{g} \\ \tilde{\mathbf{J}}_{IC} \delta \mathbf{X}_C + \mathbf{J}_{ID} \delta \mathbf{g} \end{bmatrix} \quad (\text{ع-۱۶۶})$$

$$= -\mathbf{A}_{21}(\tilde{\mathbf{J}}_{RC} \delta \mathbf{X}_C + (\mathbf{J}_{RD} + \mathbf{J}_{DD}) \delta \mathbf{g}) - \mathbf{A}_{22}(\tilde{\mathbf{J}}_{IC} \delta \mathbf{X}_C + \mathbf{J}_{ID} \delta \mathbf{g})$$

با جایگذاری روابط (ع-۱۶۵) و (ع-۱۶۶) در (ع-۱۶۰) خواهیم داشت:

$$\begin{aligned} & -\mathbf{J}_{RR} \mathbf{A}_{11}(\tilde{\mathbf{J}}_{RC} \delta \mathbf{X}_C + (\mathbf{J}_{RD} + \mathbf{J}_{DD}) \delta \mathbf{g}) - \mathbf{J}_{RR} \mathbf{A}_{12}(\tilde{\mathbf{J}}_{IC} \delta \mathbf{X}_C + \mathbf{J}_{ID} \delta \mathbf{g}) \\ & -\mathbf{J}_{RD} \mathbf{A}_{11}(\tilde{\mathbf{J}}_{RC} \delta \mathbf{X}_C + (\mathbf{J}_{RD} + \mathbf{J}_{DD}) \delta \mathbf{g}) - \mathbf{J}_{RD} \mathbf{A}_{12}(\tilde{\mathbf{J}}_{IC} \delta \mathbf{X}_C + \mathbf{J}_{ID} \delta \mathbf{g}) + \mathbf{J}_{RD} \delta \mathbf{g} \\ & -\mathbf{J}_{RI} \mathbf{A}_{21}(\tilde{\mathbf{J}}_{RC} \delta \mathbf{X}_C + (\mathbf{J}_{RD} + \mathbf{J}_{DD}) \delta \mathbf{g}) - \mathbf{J}_{RI} \mathbf{A}_{22}(\tilde{\mathbf{J}}_{IC} \delta \mathbf{X}_C + \mathbf{J}_{ID} \delta \mathbf{g}) + \mathbf{J}_{RC} \delta \mathbf{X}_C \\ & = \delta \mathbf{F}_R \end{aligned} \quad (\text{ع-۱۶۷})$$

$$\begin{aligned} & -\mathbf{J}_{DR} \mathbf{A}_{11}(\tilde{\mathbf{J}}_{RC} \delta \mathbf{X}_C + (\mathbf{J}_{RD} + \mathbf{J}_{DD}) \delta \mathbf{g}) - \mathbf{J}_{DR} \mathbf{A}_{12}(\tilde{\mathbf{J}}_{IC} \delta \mathbf{X}_C + \mathbf{J}_{ID} \delta \mathbf{g}) \\ & -\mathbf{J}_{DD} \mathbf{A}_{11}(\tilde{\mathbf{J}}_{RC} \delta \mathbf{X}_C + (\mathbf{J}_{RD} + \mathbf{J}_{DD}) \delta \mathbf{g}) - \mathbf{J}_{DD} \mathbf{A}_{12}(\tilde{\mathbf{J}}_{IC} \delta \mathbf{X}_C + \mathbf{J}_{ID} \delta \mathbf{g}) + \\ & \mathbf{J}_{DD} \delta \mathbf{g} - \mathbf{J}_{DI} \mathbf{A}_{21}(\tilde{\mathbf{J}}_{RC} \delta \mathbf{X}_C + (\mathbf{J}_{RD} + \mathbf{J}_{DD}) \delta \mathbf{g}) - \mathbf{J}_{DI} \mathbf{A}_{22}(\tilde{\mathbf{J}}_{IC} \delta \mathbf{X}_C + \mathbf{J}_{ID} \delta \mathbf{g}) \\ & + \mathbf{J}_{DC} \delta \mathbf{X}_C = \delta \mathbf{F}_D \end{aligned} \quad (\text{ع-۱۶۸})$$

$$\begin{aligned} & -\mathbf{J}_{IR} \mathbf{A}_{11}(\tilde{\mathbf{J}}_{RC} \delta \mathbf{X}_C + (\mathbf{J}_{RD} + \mathbf{J}_{DD}) \delta \mathbf{g}) - \mathbf{J}_{IR} \mathbf{A}_{12}(\tilde{\mathbf{J}}_{IC} \delta \mathbf{X}_C + \mathbf{J}_{ID} \delta \mathbf{g}) \\ & -\mathbf{J}_{ID} \mathbf{A}_{11}(\tilde{\mathbf{J}}_{RC} \delta \mathbf{X}_C + (\mathbf{J}_{RD} + \mathbf{J}_{DD}) \delta \mathbf{g}) - \mathbf{J}_{ID} \mathbf{A}_{12}(\tilde{\mathbf{J}}_{IC} \delta \mathbf{X}_C + \mathbf{J}_{ID} \delta \mathbf{g}) + \mathbf{J}_{ID} \delta \mathbf{g} \\ & -\mathbf{J}_{II} \mathbf{A}_{21}(\tilde{\mathbf{J}}_{RC} \delta \mathbf{X}_C + (\mathbf{J}_{RD} + \mathbf{J}_{DD}) \delta \mathbf{g}) - \mathbf{J}_{II} \mathbf{A}_{22}(\tilde{\mathbf{J}}_{IC} \delta \mathbf{X}_C + \mathbf{J}_{ID} \delta \mathbf{g}) + \mathbf{J}_{IC} \delta \mathbf{X}_C = \delta \mathbf{F}_I \end{aligned} \quad (\text{ع-۱۶۹})$$

$$\begin{aligned} & -\mathbf{J}_{CR} \mathbf{A}_{11}(\tilde{\mathbf{J}}_{RC} \delta \mathbf{X}_C + (\mathbf{J}_{RD} + \mathbf{J}_{DD}) \delta \mathbf{g}) - \mathbf{J}_{CR} \mathbf{A}_{12}(\tilde{\mathbf{J}}_{IC} \delta \mathbf{X}_C + \mathbf{J}_{ID} \delta \mathbf{g}) \\ & -\mathbf{J}_{CD} \mathbf{A}_{11}(\tilde{\mathbf{J}}_{RC} \delta \mathbf{X}_C + (\mathbf{J}_{RD} + \mathbf{J}_{DD}) \delta \mathbf{g}) - \mathbf{J}_{CD} \mathbf{A}_{12}(\tilde{\mathbf{J}}_{IC} \delta \mathbf{X}_C + \mathbf{J}_{ID} \delta \mathbf{g}) + \mathbf{J}_{CD} \delta \mathbf{g} \\ & -\mathbf{J}_{CI} \mathbf{A}_{21}(\tilde{\mathbf{J}}_{RC} \delta \mathbf{X}_C + (\mathbf{J}_{RD} + \mathbf{J}_{DD}) \delta \mathbf{g}) - \mathbf{J}_{CI} \mathbf{A}_{22}(\tilde{\mathbf{J}}_{IC} \delta \mathbf{X}_C + \mathbf{J}_{ID} \delta \mathbf{g}) + \mathbf{J}_{CC} \delta \mathbf{X}_C \\ & = \delta \mathbf{F}_C \end{aligned} \quad (\text{ع-۱۷۰})$$

با مرتب کردن دو معادله (ع-۱۶۷) و (ع-۱۷۰) داریم:

$$\mathbf{F}_R = \mathbf{J}_{RR}^* \delta \mathbf{g} + \mathbf{J}_{RC}^* \delta \mathbf{X}_C \quad (\text{ع-۱۷۱})$$

$$\mathbf{F}_C = \mathbf{J}_{CR}^* \delta \mathbf{g} + \mathbf{J}_{CC}^* \delta \mathbf{X}_C \quad (\text{ع-۱۷۲})$$

که در آن:

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_{RR}^* &= -\mathbf{J}_{RR}A_{11}(\mathbf{J}_{RD} + \mathbf{J}_{DD}) - \mathbf{J}_{RR}A_{12}\mathbf{J}_{ID} - \mathbf{J}_{RD}A_{11}(\mathbf{J}_{RD} + \mathbf{J}_{DD}) - \mathbf{J}_{RD}A_{12}\mathbf{J}_{ID} \\ &+ \mathbf{J}_{RD} - \mathbf{J}_{RI}A_{21}(\mathbf{J}_{RD} + \mathbf{J}_{DD}) - \mathbf{J}_{RI}A_{22}\mathbf{J}_{ID} \\ &= -[\mathbf{J}_{RR} + \mathbf{J}_{RD} \quad \mathbf{J}_{RI}] \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{J}_{RD} + \mathbf{J}_{DD} \\ \mathbf{J}_{ID} \end{bmatrix} + \mathbf{J}_{RD} \end{aligned} \quad (\xi-173)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_{RC}^* &= -\mathbf{J}_{RR}A_{11}\tilde{\mathbf{J}}_{RC} - \mathbf{J}_{RR}A_{12}\tilde{\mathbf{J}}_{IC} - \mathbf{J}_{RD}A_{11}\tilde{\mathbf{J}}_{RC} - \mathbf{J}_{RD}A_{12}\tilde{\mathbf{J}}_{IC} - \mathbf{J}_{RI}A_{21}\tilde{\mathbf{J}}_{RC} \\ &- \mathbf{J}_{RI}A_{22}\tilde{\mathbf{J}}_{IC} + \mathbf{J}_{RC} \\ &= -[\mathbf{J}_{RR} + \mathbf{J}_{RD} \quad \mathbf{J}_{RI}] \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{J}}_{RC} \\ \tilde{\mathbf{J}}_{IC} \end{bmatrix} + \mathbf{J}_{RC} \end{aligned} \quad (\xi-174)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_{CR}^* &= -\mathbf{J}_{CR}A_{11}(\mathbf{J}_{RD} + \mathbf{J}_{DD}) - \mathbf{J}_{CR}A_{12}\mathbf{J}_{ID} - \mathbf{J}_{CD}A_{11}(\mathbf{J}_{RD} + \mathbf{J}_{DD}) - \mathbf{J}_{CD}A_{12}\mathbf{J}_{ID} \\ &+ \mathbf{J}_{CD} - \mathbf{J}_{CI}A_{21}(\mathbf{J}_{RD} + \mathbf{J}_{DD}) - \mathbf{J}_{CI}A_{22}\mathbf{J}_{ID} \\ &= -[\mathbf{J}_{CR} + \mathbf{J}_{CD} \quad \mathbf{J}_{CI}] \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{J}_{RD} + \mathbf{J}_{DD} \\ \mathbf{J}_{ID} \end{bmatrix} + \mathbf{J}_{CD} \end{aligned} \quad (\xi-175)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_{CC}^* &= -\mathbf{J}_{CR}A_{11}\tilde{\mathbf{J}}_{RC} - \mathbf{J}_{CR}A_{12}\tilde{\mathbf{J}}_{IC} - \mathbf{J}_{CD}A_{11}\tilde{\mathbf{J}}_{RC} - \mathbf{J}_{CD}A_{12}\tilde{\mathbf{J}}_{IC} - \mathbf{J}_{CI}A_{21}\tilde{\mathbf{J}}_{RC} \\ &- \mathbf{J}_{CI}A_{22}\tilde{\mathbf{J}}_{IC} + \mathbf{J}_{CC} \\ &= -[\mathbf{J}_{CR} + \mathbf{J}_{CD} \quad \mathbf{J}_{CI}] \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{J}}_{RC} \\ \tilde{\mathbf{J}}_{IC} \end{bmatrix} + \mathbf{J}_{CC} \end{aligned} \quad (\xi-176)$$

بر اساس اصل هیل-مندل تعمیم یافته و سازگاری انرژی بین دو مقیاس، روابط (۴-۴۸) تا (۴-۵۵) به دست آمد. در این قسمت فرم برداری این روابط با جایگذاری روابط (۴-۱۷۱) و (۴-۱۷۲) در آن‌ها بازنویسی می‌شود:

$$\begin{aligned} \bar{\boldsymbol{\sigma}} &= \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{s_u} \mathbf{H} \mathbf{t} ds = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \sum_{i \in I} H_i t_i = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{H}_B \mathbf{F}_{uB} \\ &= \frac{1}{|\Omega_\mu|} \sum_{i \in D} H_i F_i^u + \frac{1}{|\Omega_\mu|} \sum_{i \in R} H_i F_i^u + \frac{1}{|\Omega_\mu|} \sum_{i \in C} H_i F_i^u \\ &= \frac{1}{|\Omega_\mu|} (\mathbf{H}_D \mathbf{F}_D^u + \mathbf{H}_R \mathbf{F}_R^u + \mathbf{H}_C \mathbf{F}_C^u) \end{aligned} \quad (\xi-177)$$

از آنجایی که می‌دانیم $\mathbf{F}_D^u + \mathbf{F}_R^u = 0$ بنابراین داریم:

$$\begin{aligned}
\bar{\sigma} &= \frac{1}{|\Omega_\mu|} (\mathbf{H}_D(-\mathbf{F}_R^u) + \mathbf{H}_R \mathbf{F}_R^u + \mathbf{H}_C \mathbf{F}_C^u) = \frac{1}{|\Omega_\mu|} (\mathbf{F}_R^u (\mathbf{H}_R - \mathbf{H}_D) + \mathbf{H}_C \mathbf{F}_C^u) \\
&= \frac{1}{|\Omega_\mu|} (-\mathbf{F}_R^u \hat{\mathbf{H}}_R + \mathbf{H}_C \mathbf{F}_C^u) = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \hat{\mathbf{H}}_u \mathbf{F}_u
\end{aligned} \tag{۱۷۸}$$

که در آن $\hat{\mathbf{H}}_u = [-\hat{\mathbf{H}}_R \quad \mathbf{H}_C]$ و $\mathbf{F}_u^T = [\mathbf{F}_R^u \quad \mathbf{F}_C^u]$ است. همچنین برای دیگر پارامترها داریم:

$$\begin{aligned}
\bar{\mathbf{f}}_I^u &= -\frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{s_u} \mathbf{t} ds = \frac{-1}{|\Omega_\mu|} \sum_{i \in \Gamma} t_i = \frac{-1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I}^T \mathbf{F}_u = \frac{-1}{|\Omega_\mu|} (\mathbf{F}_R^u + \mathbf{F}_D^u + \mathbf{F}_C^u) \\
&= \frac{-1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I}(\mathbf{F}_C^u)
\end{aligned} \tag{۱۷۹}$$

$$\begin{aligned}
\bar{\mathbf{w}}_f &= -\frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{s_p} \mathbf{x} \bar{q}_p ds = -\frac{1}{|\Omega_\mu|} \sum_{i \in \Gamma} X_i q_i^p = -\frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{X}_B \mathbf{F}_{pB} \\
&= -\frac{1}{|\Omega_\mu|} \sum_{i \in D} X_i F_i^{pB} - \frac{1}{|\Omega_\mu|} \sum_{i \in R} X_i F_i^{pB} - \frac{1}{|\Omega_\mu|} \sum_{i \in C} X_i F_i^{pB} \\
&= -\frac{1}{|\Omega_\mu|} (\mathbf{X}_D \mathbf{F}_D^p + \mathbf{X}_R \mathbf{F}_R^p + \mathbf{X}_C \mathbf{F}_C^p) = -\frac{1}{|\Omega_\mu|} (\mathbf{X}_D (-\mathbf{F}_R^p) + \mathbf{X}_R \mathbf{F}_R^p + \mathbf{X}_C \mathbf{F}_C^p) \\
&= -\frac{1}{|\Omega_\mu|} (-\mathbf{F}_R^p (\mathbf{X}_D - \mathbf{X}_R) + \mathbf{X}_C \mathbf{F}_C^p) = -\frac{1}{|\Omega_\mu|} \hat{\mathbf{X}}_p \mathbf{F}_p
\end{aligned} \tag{۱۸۰}$$

که در آن $\hat{\mathbf{X}}_p = [-\hat{\mathbf{X}}_R \quad \mathbf{X}_C]$ و $\mathbf{F}_p^T = [\mathbf{F}_R^p \quad \mathbf{F}_C^p]$ است. همچنین:

$$\begin{aligned}
\bar{f}_I^p &= \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{s_p} \bar{q}_p d\mathbf{s} = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \sum_{i \in \Gamma} q_i^p = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \mathbf{F}_{pB} \\
&= \frac{1}{|\Omega_\mu|} \sum_{i \in D} F_i^{pB} + \frac{1}{|\Omega_\mu|} \sum_{i \in R} F_i^{pB} + \frac{1}{|\Omega_\mu|} \sum_{i \in C} F_i^{pB} = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} (\mathbf{F}_D^p + \mathbf{F}_R^p + \mathbf{F}_C^p) \\
&= \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \mathbf{F}_C^p
\end{aligned} \tag{۱۸۱}$$

$$\begin{aligned}
\bar{\mathbf{J}}_T &= -\frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{s_T} \mathbf{x} \mathbf{q}_T d\mathbf{s} = -\frac{1}{|\Omega_\mu|} \sum_{i \in \Gamma} \mathbf{x}_i \mathbf{q}_i^T = -\frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{X}_B \mathbf{F}_{TB} \\
&= -\frac{1}{|\Omega_\mu|} \sum_{i \in D} X_i F_i^{TB} - \frac{1}{|\Omega_\mu|} \sum_{i \in R} X_i F_i^{TB} - \frac{1}{|\Omega_\mu|} \sum_{i \in C} X_i F_i^{TB}
\end{aligned} \tag{۱۸۲}$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{1}{|\Omega_\mu|} (\mathbf{X}_D \mathbf{F}_D^T + \mathbf{X}_R \mathbf{F}_R^T + \mathbf{X}_C \mathbf{F}_C^T) = -\frac{1}{|\Omega_\mu|} (\mathbf{X}_D (-\mathbf{F}_R^T) + \mathbf{X}_R \mathbf{F}_R^T + \mathbf{X}_C \mathbf{F}_C^T) \\
&= -\frac{1}{|\Omega_\mu|} (-\mathbf{F}_R^T (\mathbf{X}_D - \mathbf{X}_R) + \mathbf{X}_C \mathbf{F}_C^T) = -\frac{1}{|\Omega_\mu|} \hat{\mathbf{X}}_p \mathbf{F}_T
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\bar{f}_I^T &= \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{s_p} \bar{q}_T ds = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \sum_{i \in \Gamma} q_i^T = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \mathbf{F}_{TB} \\
&= \frac{1}{|\Omega_\mu|} \sum_{i \in D} F_i^{TB} + \frac{1}{|\Omega_\mu|} \sum_{i \in R} F_i^{TB} + \frac{1}{|\Omega_\mu|} \sum_{i \in C} F_i^{TB} = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} (\mathbf{F}_D^T + \mathbf{F}_R^T + \mathbf{F}_C^T) \\
&= \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \mathbf{F}_C^T
\end{aligned} \tag{۱۸۳}$$

$$\begin{aligned}
\bar{J}_c &= -\frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{s_c} \mathbf{x} q_c dS = -\frac{1}{|\Omega_\mu|} \sum_{i \in \Gamma} X_i q_i^c = -\frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{X}_B \mathbf{F}_{cB} \\
&= -\frac{1}{|\Omega_\mu|} \sum_{i \in D} X_i F_i^{cB} - \frac{1}{|\Omega_\mu|} \sum_{i \in R} X_i F_i^{cB} - \frac{1}{|\Omega_\mu|} \sum_{i \in C} X_i F_i^{cB} \\
&= -\frac{1}{|\Omega_\mu|} (\mathbf{X}_D \mathbf{F}_D^c + \mathbf{X}_R \mathbf{F}_R^c + \mathbf{X}_C \mathbf{F}_C^c) = -\frac{1}{|\Omega_\mu|} (\mathbf{X}_D (-\mathbf{F}_R^c) + \mathbf{X}_R \mathbf{F}_R^c + \mathbf{X}_C \mathbf{F}_C^c) \\
&= -\frac{1}{|\Omega_\mu|} (-\mathbf{F}_R^c (\mathbf{X}_D - \mathbf{X}_R) + \mathbf{X}_C \mathbf{F}_C^c) = -\frac{1}{|\Omega_\mu|} \hat{\mathbf{X}}_p \mathbf{F}_c
\end{aligned} \tag{۱۸۴}$$

$$\begin{aligned}
\bar{f}_I^c &= \int_{s_c} q_c dS = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \sum_{i \in \Gamma} q_i^c = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \mathbf{F}_{cB} \\
&= \frac{1}{|\Omega_\mu|} \sum_{i \in D} F_i^{cB} + \frac{1}{|\Omega_\mu|} \sum_{i \in R} F_i^{cB} + \frac{1}{|\Omega_\mu|} \sum_{i \in C} F_i^{cB} = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} (\mathbf{F}_D^c + \mathbf{F}_R^c + \mathbf{F}_C^c) \\
&= \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \mathbf{F}_C^c
\end{aligned} \tag{۱۸۵}$$

با استفاده از روابط (۱۷۸) تا (۱۸۵) می‌توان درایه‌های ماتریس ژاکوبین که در رابطه (۱۰۰) به دست آمد را محاسبه کرد:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}} &= \frac{1}{|\Omega_\mu|} \hat{\mathbf{H}}_u \frac{\partial \mathbf{F}_u}{\partial \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}} = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \hat{\mathbf{H}}_u \left[\frac{\partial \mathbf{F}_R^u}{\partial \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}} \right] \\
&= \frac{1}{|\Omega_\mu|} \hat{\mathbf{H}}_u \left[\frac{\partial (\mathbf{J}_{RR}^* \hat{\mathbf{H}}_R^T \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \mathbf{J}_{RC}^* (\mathbf{I}^T \bar{\mathbf{u}} + \mathbf{H}_c^T \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}))}{\partial \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}} \right] = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \hat{\mathbf{H}}_u \left[\begin{array}{c} (\mathbf{J}_{RR}^* \hat{\mathbf{H}}_R^T + \mathbf{J}_{RC}^* \mathbf{H}_c^T) \\ \mathbf{J}_{CR}^* \hat{\mathbf{H}}_R^T + \mathbf{J}_{CC}^* \mathbf{H}_c^T \end{array} \right] \\
&= \frac{1}{|\Omega_\mu|} \hat{\mathbf{H}}_u \left[\begin{array}{cc} \mathbf{J}_{RR}^* & \mathbf{J}_{RC}^* \\ \mathbf{J}_{CR}^* & \mathbf{J}_{CC}^* \end{array} \right] \left[\begin{array}{c} \hat{\mathbf{H}}_R^T \\ \mathbf{H}_c^T \end{array} \right]
\end{aligned} \tag{E-186}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \bar{\mathbf{f}}_I^u}{\partial \bar{\mathbf{u}}} &= -\frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I}^T \frac{\partial \mathbf{F}_c^u}{\partial \bar{\mathbf{u}}} = -\frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I}^T \frac{\partial (\mathbf{J}_{CR}^* \hat{\mathbf{H}}_R^T \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \mathbf{J}_{CC}^* (\mathbf{I}^T \bar{\mathbf{u}} + \mathbf{H}_c^T \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}))}{\partial \bar{\mathbf{u}}} \\
&= -\frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{J}_{CC}^{*u} \mathbf{I}^T
\end{aligned} \tag{E-187}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial \bar{p}} &= \frac{1}{|\Omega_\mu|} \hat{\mathbf{H}}_u \frac{\partial \mathbf{F}_u}{\partial \bar{p}} = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \hat{\mathbf{H}}_u \left[\frac{\partial (\mathbf{J}_{RR}^* \hat{\mathbf{G}}_R^T \delta \mathbf{V} \bar{p} + \mathbf{J}_{RC}^* (\mathbf{1}_{4 \times 1} \delta \bar{p} + \mathbf{G}_c^T \delta \mathbf{V} \bar{p}))}{\partial \bar{p}} \right] \\
&= \frac{1}{|\Omega_\mu|} \hat{\mathbf{H}}_u \left[\begin{array}{c} \mathbf{J}_{RC}^{*u} \\ \mathbf{J}_{CC}^{*u} \end{array} \right] \mathbf{I}^T
\end{aligned} \tag{E-188}$$

$$\frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial \bar{T}} = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \hat{\mathbf{H}}_u \left[\frac{\partial (\mathbf{J}_{RR}^* \hat{\mathbf{G}}_R^T \delta \mathbf{V} \bar{T} + \mathbf{J}_{RC}^* (\mathbf{1}_{4 \times 1} \delta \bar{T} + \mathbf{G}_c^T \delta \mathbf{V} \bar{T}))}{\partial \bar{T}} \right] = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \hat{\mathbf{H}}_u \left[\begin{array}{c} \mathbf{J}_{RC}^* \\ \mathbf{J}_{CC}^* \end{array} \right] \mathbf{I}^T \tag{E-189}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial \bar{c}} &= \frac{1}{|\Omega_\mu|} \hat{\mathbf{H}}_u \left[\frac{\partial (\mathbf{J}_{RR}^* \hat{\mathbf{G}}_R^T \delta \mathbf{V} \bar{c} + \mathbf{J}_{RC}^* (\mathbf{1}_{4 \times 1} \delta \bar{c} + \mathbf{G}_c^T \delta \mathbf{V} \bar{c}))}{\partial \bar{c}} \right] \\
&= \frac{1}{|\Omega_\mu|} \hat{\mathbf{H}}_u \left[\begin{array}{c} \mathbf{J}_{RC}^* \\ \mathbf{J}_{CC}^* \end{array} \right] (\mathbf{1}_{4 \times 1})
\end{aligned} \tag{E-190}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \bar{\mathbf{w}}_f}{\partial \bar{\mathbf{u}}} &= -\frac{1}{|\Omega_\mu|} \hat{\mathbf{X}}_p \left[\frac{\partial \mathbf{F}_R}{\partial \bar{\mathbf{u}}} \right] = -\frac{1}{|\Omega_\mu|} \hat{\mathbf{X}}_p \left[\frac{\partial (\mathbf{J}_{RR}^* \hat{\mathbf{H}}_R^T \bar{\boldsymbol{\epsilon}} + \mathbf{J}_{RC}^* (\mathbf{I}^T \bar{\mathbf{u}} + \mathbf{H}_c^T \bar{\boldsymbol{\epsilon}}))}{\frac{\partial \bar{\mathbf{u}}}{\partial \bar{\mathbf{u}}}} \right] \\
&= -\frac{1}{|\Omega_\mu|} \hat{\mathbf{X}}_p \begin{bmatrix} \mathbf{J}_{RC}^{*p} \\ \mathbf{J}_{CC}^{*p} \end{bmatrix} \mathbf{I}^T
\end{aligned} \tag{E-191}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \bar{f}_I^p}{\partial \bar{\boldsymbol{\epsilon}}} &= \mathbf{I} \frac{\partial \mathbf{F}_C^p}{\partial \bar{\boldsymbol{\epsilon}}} = \frac{\partial}{\partial \bar{\boldsymbol{\epsilon}}} \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \mathbf{F}_C^p = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \left[\frac{\partial (\mathbf{J}_{CR}^* \hat{\mathbf{H}}_R^T \bar{\boldsymbol{\epsilon}} + \mathbf{J}_{CC}^* (\mathbf{I}^T \bar{\mathbf{u}} + \bar{\boldsymbol{\epsilon}}))}{\partial \bar{\boldsymbol{\epsilon}}} \right] \\
&= \frac{1}{|\Omega_\mu|} \begin{bmatrix} \mathbf{J}_{CR}^* & \mathbf{J}_{CC}^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{H}}_R^T \\ \mathbf{H}_c^T \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{E-192}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \bar{\mathbf{w}}_f}{\partial \nabla \bar{P}} &= -\frac{1}{|\Omega_\mu|} \hat{\mathbf{X}}_p \left[\frac{\frac{\partial (\mathbf{J}_{RR}^* \hat{\mathbf{G}}_R^T \delta \nabla \bar{p} + \mathbf{J}_{RC}^* (\mathbf{I}^T \delta \bar{p} + \mathbf{G}_c^T \delta \nabla \bar{p}))}{\partial \nabla \bar{P}}}{\frac{\partial (\mathbf{J}_{CR}^* \hat{\mathbf{G}}_R^T \delta \nabla \bar{p} + \mathbf{J}_{CC}^* (\mathbf{I}^T \delta \bar{p} + \mathbf{G}_c^T \delta \nabla \bar{p}))}{\partial \nabla \bar{P}}} \right] \\
&= -\frac{1}{|\Omega_\mu|} \hat{\mathbf{X}}_p \begin{bmatrix} \mathbf{J}_{RR}^* & \mathbf{J}_{RC}^* \\ \mathbf{J}_{CR}^* & \mathbf{J}_{CC}^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{G}}_R^T \\ \mathbf{G}_c^T \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{E-193}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \bar{f}_I^p}{\partial \bar{p}} &= \mathbf{I} \frac{\partial \mathbf{F}_C^p}{\partial \bar{p}} = \frac{\partial}{\partial \bar{p}} \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \mathbf{F}_C^p = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \left[\frac{\partial (\mathbf{J}_{CR}^* \hat{\mathbf{G}}_R^T \delta \nabla \bar{p} + \mathbf{J}_{CC}^* (\mathbf{I}^T \delta \bar{p} + \mathbf{G}_c^T \delta \nabla \bar{p}))}{\partial \bar{p}} \right] \\
&= \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \mathbf{J}_{CC}^* \mathbf{I}^T
\end{aligned} \tag{E-194}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \bar{f}_I^p}{\partial \bar{T}} &= \mathbf{I} \frac{\partial \mathbf{F}_C^p}{\partial \bar{T}} = \frac{\partial}{\partial \bar{T}} \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \mathbf{F}_C^p = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \left[\frac{\partial (\mathbf{J}_{CR}^* \hat{\mathbf{G}}_R^T \delta \nabla \bar{T} + \mathbf{J}_{CC}^* (\mathbf{I}^T \delta \bar{T} + \mathbf{G}_c^T \delta \nabla \bar{T}))}{\partial \bar{T}} \right] \\
&= \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \mathbf{J}_{CC}^* \mathbf{I}^T
\end{aligned} \tag{E-195}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \bar{\mathbf{w}}_f}{\partial \bar{\mathbf{v}}\bar{c}} &= -\frac{1}{|\Omega_\mu|} \hat{\mathbf{X}}_p \left[\frac{\partial (\mathbf{J}_{RR}^* \hat{\mathbf{G}}_R^T \delta \bar{\mathbf{v}}\bar{c} + \mathbf{J}_{RC}^* (\mathbf{1}_{4 \times 1} \delta \bar{c} + \mathbf{G}_c^T \delta \bar{\mathbf{v}}\bar{c}))}{\partial \bar{\mathbf{v}}\bar{c}} \right] \\
&= -\frac{1}{|\Omega_\mu|} \hat{\mathbf{X}}_p \begin{bmatrix} \mathbf{J}_{RR}^* & \mathbf{J}_{RC}^* \\ \mathbf{J}_{CR}^* & \mathbf{J}_{CC}^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{G}}_R^T \\ \mathbf{G}_c^T \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{xi-196}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \bar{f}_I^p}{\partial \bar{c}} &= \frac{\partial \mathbf{I} \mathbf{F}_C^p}{\partial \bar{c}} = \frac{\partial}{\partial \bar{c}} \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \mathbf{F}_C^p = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \left[\frac{\partial (\mathbf{J}_{CR}^* \hat{\mathbf{G}}_R^T \delta \bar{\mathbf{v}}\bar{c} + \mathbf{J}_{CC}^* (\mathbf{I}^T \delta \bar{c} + \mathbf{G}_c^T \delta \bar{\mathbf{v}}\bar{c}))}{\partial \bar{c}} \right] \\
&= \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \mathbf{J}_{CC}^* \mathbf{I}^T
\end{aligned} \tag{xi-197}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \bar{\mathbf{J}}_T}{\partial \bar{\mathbf{v}}\bar{T}} &= -\frac{\partial}{\partial \bar{\mathbf{v}}\bar{T}} \frac{1}{|\Omega_\mu|} \hat{\mathbf{X}}_p \mathbf{F}_T \\
&= -\frac{1}{|\Omega_\mu|} \hat{\mathbf{X}}_p \left[\frac{\partial (\mathbf{J}_{RR}^* \hat{\mathbf{G}}_R^T \delta \bar{\mathbf{v}}\bar{T} + \mathbf{J}_{RC}^* (\mathbf{1}_{4 \times 1} \delta \bar{T} + \mathbf{G}_c^T \delta \bar{\mathbf{v}}\bar{T}))}{\partial \bar{\mathbf{v}}\bar{T}} \right] \\
&= -\frac{1}{|\Omega_\mu|} \hat{\mathbf{X}}_p \begin{bmatrix} \mathbf{J}_{RR}^* & \mathbf{J}_{RC}^* \\ \mathbf{J}_{CR}^* & \mathbf{J}_{CC}^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{G}}_R^T \\ \mathbf{G}_c^T \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{xi-198}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \bar{f}_I^T}{\partial \bar{\mathbf{u}}} &= \frac{\partial \mathbf{I} \mathbf{F}_C^T}{\partial \bar{\mathbf{u}}} = \frac{\partial}{\partial \bar{\mathbf{u}}} \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \mathbf{F}_C^T = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \left[\frac{\partial (\mathbf{J}_{CR}^* \hat{\mathbf{H}}_R^T \bar{\boldsymbol{\epsilon}} + \mathbf{J}_{CC}^* (\mathbf{1}_{4 \times 1} \bar{\mathbf{u}} + \mathbf{H}_c^T \bar{\boldsymbol{\epsilon}}))}{\partial \bar{\mathbf{u}}} \right] \\
&= \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \mathbf{J}_{CC}^* \mathbf{I}^T
\end{aligned} \tag{xi-199}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \bar{f}_I^T}{\partial \bar{\mathbf{v}}\bar{p}} &= \frac{\partial \mathbf{I} \mathbf{F}_C^T}{\partial \bar{\mathbf{v}}\bar{p}} = \frac{\partial}{\partial \bar{\mathbf{v}}\bar{p}} \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \mathbf{F}_C^T \\
&= \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \left[\frac{\partial (\mathbf{J}_{CR}^* \hat{\mathbf{G}}_R^T \delta \bar{\mathbf{v}}\bar{p} + \mathbf{J}_{CC}^* (\mathbf{1}_{4 \times 1} \delta \bar{p} + \mathbf{G}_c^T \delta \bar{\mathbf{v}}\bar{p}))}{\partial \bar{\mathbf{v}}\bar{p}} \right] = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \begin{bmatrix} \mathbf{J}_{CR}^* & \mathbf{J}_{CC}^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{G}}_R^T \\ \mathbf{G}_c^T \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{xi-200}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \bar{f}_I^T}{\partial \bar{T}} &= \frac{\partial \mathbf{I} \mathbf{F}_C^T}{\partial \bar{T}} = \frac{\partial}{\partial \bar{T}} \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \mathbf{F}_C^T = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \left[\frac{\partial (\mathbf{J}_{CR}^* \hat{\mathbf{G}}_R^T \delta \mathbf{V} \bar{T} + \mathbf{J}_{CC}^* (\mathbf{1}_{4 \times 1} \delta \bar{T} + \mathbf{G}_c^T \delta \mathbf{V} \bar{T}))}{\partial \bar{T}} \right] \\
&= \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \mathbf{J}_{CC}^* \mathbf{I}^T
\end{aligned} \tag{ξ-2.1}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \bar{f}_I^T}{\partial \mathbf{V} \bar{T}} &= \frac{\partial \mathbf{I} \mathbf{F}_C^T}{\partial \mathbf{V} \bar{T}} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{V} \bar{T}} \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \mathbf{F}_C^T \\
&= \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \left[\frac{\partial (\mathbf{J}_{CR}^* \hat{\mathbf{G}}_R^T \delta \mathbf{V} \bar{T} + \mathbf{J}_{CC}^* (\mathbf{1}_{4 \times 1} \delta \bar{T} + \mathbf{G}_c^T \delta \mathbf{V} \bar{T}))}{\partial \mathbf{V} \bar{T}} \right] = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \begin{bmatrix} \mathbf{J}_{CR}^* & \mathbf{J}_{CC}^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{G}}_R^T \\ \mathbf{G}_c^T \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{ξ-2.2}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \bar{f}_I^T}{\partial \mathbf{V} \bar{c}} &= \frac{\partial \mathbf{I} \mathbf{F}_C^T}{\partial \mathbf{V} \bar{c}} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{V} \bar{c}} \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \mathbf{F}_C^T \\
&= \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \left[\frac{\partial (\mathbf{J}_{CR}^* \hat{\mathbf{G}}_R^T \delta \mathbf{V} \bar{c} + \mathbf{J}_{CC}^* (\mathbf{1}_{4 \times 1} \delta \bar{c} + \mathbf{G}_c^T \delta \mathbf{V} \bar{c}))}{\partial \mathbf{V} \bar{c}} \right] = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \begin{bmatrix} \mathbf{J}_{CR}^* & \mathbf{J}_{CC}^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{G}}_R^T \\ \mathbf{G}_c^T \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{ξ-2.3}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \bar{J}_c}{\partial \mathbf{V} \bar{p}} &= - \frac{\partial}{\partial \mathbf{V} \bar{p}} \frac{1}{|\Omega_\mu|} \hat{\mathbf{X}}_p \mathbf{F}_c = - \frac{1}{|\Omega_\mu|} \hat{\mathbf{X}}_p \left[\frac{\partial (\mathbf{J}_{RR}^* \hat{\mathbf{G}}_R^T \delta \mathbf{V} \bar{p} + \mathbf{J}_{RC}^* (\mathbf{1}_{4 \times 1} \delta \bar{p} + \mathbf{G}_c^T \delta \mathbf{V} \bar{p}))}{\partial \mathbf{V} \bar{p}} \right] \\
&= - \frac{1}{|\Omega_\mu|} \hat{\mathbf{X}}_p \begin{bmatrix} \mathbf{J}_{RR}^* & \mathbf{J}_{RC}^* \\ \mathbf{J}_{CR}^* & \mathbf{J}_{CC}^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{G}}_R^T \\ \mathbf{G}_c^T \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{ξ-2.4}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \bar{J}_c}{\partial \mathbf{V} \bar{c}} &= - \frac{\partial}{\partial \mathbf{V} \bar{c}} \frac{1}{|\Omega_\mu|} \hat{\mathbf{X}}_p \mathbf{F}_c = - \frac{1}{|\Omega_\mu|} \hat{\mathbf{X}}_p \left[\frac{\partial (\mathbf{J}_{RR}^* \hat{\mathbf{G}}_R^T \delta \mathbf{V} \bar{c} + \mathbf{J}_{RC}^* (\mathbf{1}_{4 \times 1} \delta \bar{c} + \mathbf{G}_c^T \delta \mathbf{V} \bar{c}))}{\partial \mathbf{V} \bar{c}} \right] \\
&= - \frac{1}{|\Omega_\mu|} \hat{\mathbf{X}}_p \begin{bmatrix} \mathbf{J}_{RR}^* & \mathbf{J}_{RC}^* \\ \mathbf{J}_{CR}^* & \mathbf{J}_{CC}^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{G}}_R^T \\ \mathbf{G}_c^T \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{ξ-2.5}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \bar{f}_I^c}{\partial \bar{\mathbf{u}}} &= \frac{\partial}{\partial \bar{\mathbf{u}}} \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \mathbf{F}_C^c = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \left[\frac{\partial (\mathbf{J}_{\text{CR}}^* \hat{\mathbf{H}}_R^T \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \mathbf{J}_{\text{CC}}^* (\mathbf{1}_{4 \times 1} \bar{\mathbf{u}} + \mathbf{H}_c^T \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}))}{\partial \bar{\mathbf{u}}} \right] \\
&= \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \mathbf{J}_{\text{CC}}^* \mathbf{I}^T
\end{aligned} \tag{3-2.6}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \bar{f}_I^c}{\partial \nabla \bar{p}} &= \frac{\partial}{\partial \nabla \bar{p}} \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \mathbf{F}_C^T \\
&= \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \left[\frac{\partial (\mathbf{J}_{\text{CR}}^* \hat{\mathbf{G}}_R^T \delta \nabla \bar{p} + \mathbf{J}_{\text{CC}}^* (\mathbf{1}_{4 \times 1} \delta \bar{p} + \mathbf{G}_c^T \delta \nabla \bar{p}))}{\partial \nabla \bar{p}} \right] = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} [\mathbf{J}_{\text{CR}}^* \quad \mathbf{J}_{\text{CC}}^*] \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{G}}_R^T \\ \mathbf{G}_c^T \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{3-2.7}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \bar{f}_I^c}{\partial \bar{c}} &= \frac{\partial}{\partial \bar{c}} \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \mathbf{F}_C^c = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \left[\frac{\partial (\mathbf{J}_{\text{CR}}^* \hat{\mathbf{G}}_R^T \delta \nabla \bar{c} + \mathbf{J}_{\text{CC}}^* (\mathbf{1}_{4 \times 1} \delta \bar{c} + \mathbf{G}_c^T \delta \nabla \bar{c}))}{\partial \bar{c}} \right] \\
&= \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \mathbf{J}_{\text{CC}}^* \mathbf{I}^T
\end{aligned} \tag{3-2.8}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \bar{f}_I^c}{\partial \nabla \bar{c}} &= \frac{\partial}{\partial \nabla \bar{c}} \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \mathbf{F}_C^T = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} \left[\frac{\partial (\mathbf{J}_{\text{CR}}^* \hat{\mathbf{G}}_R^T \delta \nabla \bar{c} + \mathbf{J}_{\text{CC}}^* (\mathbf{1}_{4 \times 1} \delta \bar{c} + \mathbf{G}_c^T \delta \nabla \bar{c}))}{\partial \nabla \bar{c}} \right] \\
&= \frac{1}{|\Omega_\mu|} \mathbf{I} [\mathbf{J}_{\text{CR}}^* \quad \mathbf{J}_{\text{CC}}^*] \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{G}}_R^T \\ \mathbf{G}_c^T \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{3-2.9}$$

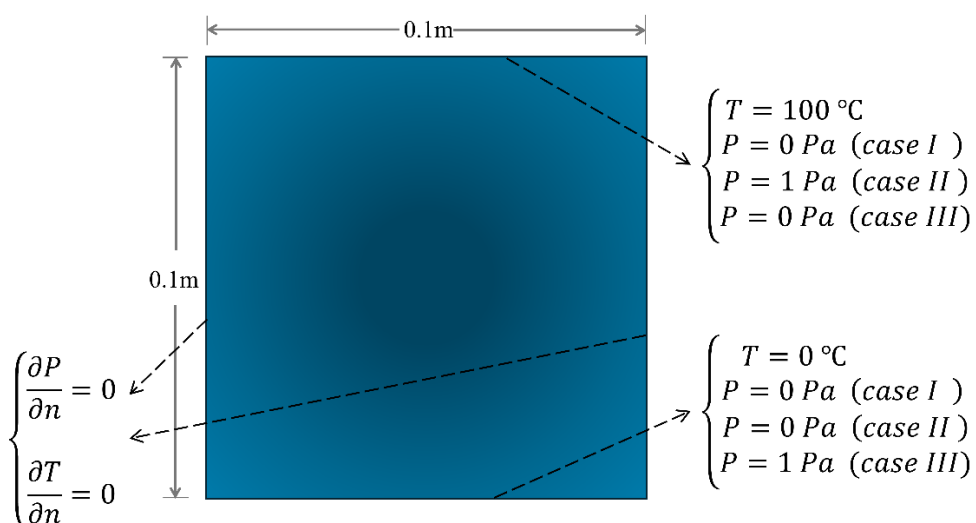
فصل ۵: نتایج مدل سازی عددی

۵-۱ مقدمه

در این فصل با ارائه چهار مثال، کد رایانه‌ای تهیه شده ارزیابی می‌شود. معیار ارزیابی، نتایج تحقیقات مرجع و همچنین نتایج مدل DNS است. در مثال اول انتقال حرارت تحت شرایط همرفت و رسانش در یک محیط مربعی همگن بررسی می‌شود. در مثال دوم یک مسئله تحکیم تحت تاثیر اثرات گرمایی، در ستون خاک همگن بررسی می‌شود. در مثال سوم یک ستون خاک ناهمگن تحت شرایط غیرگرمایی و همچنین گرمایی بررسی می‌شود و در مثال چهارم یک محیط دو بعدی تحت شار سیال و گرادیان غلظت و دما مورد ارزیابی قرار می‌گیرد.

۵-۲ انتقال حرارت با سازوکار همرفت و رسانش (TH)

به عنوان اولین مثال، برای صحت سنجی کد رایانه‌ای، مسئله انتقال حرارت یک بعدی که با استفاده از سازوکار همرفت و رسانش به طور هم‌زمان انجام می‌گیرد، بررسی می‌شود. در این مثال یک محیط متخلخل با هندسه مربعی و فرض همگن با ابعاد 0.1 در 0.1 در نظر گرفته می‌شود. دمای اولیه محیط $T_0 = 0$ و دما در مرز بالا 100 است. مسئله در سه شرایط مختلف اعم از رسانش به تنهایی (case I)، رسانش و همرفت هم جهت (case II) و رسانش و همرفت در جهت مخالف (case III) بررسی می‌شود. هندسه و شرایط مرزی مسئله در شکل ۵-۱ نمایش داده شده است.



شکل ۵-۱ هندسه و شرایط مرزی مسئله همرفت رسانش

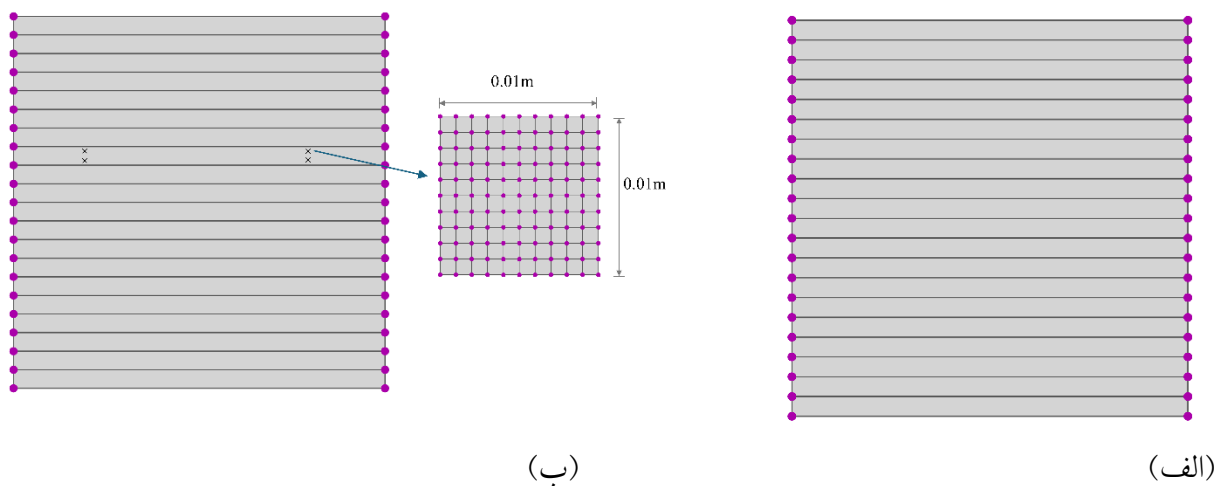
برای مسئله رسانش تنها (case I)، شرط مرزی دیریکله فشار صفر برای مرز بالا لحاظ می‌شود. همچنین برای مسئله رسانش و همرفت هم جهت (case II) فشار در مرز بالا $1Pa$ و برای مسئله رسانش و همرفت در خلاف جهت (case III) فشار در مرز پایین $1Pa$ در نظر گرفته می‌شود. شرط مرزی نیومن در هر سه حالت $\bar{q} = 0$ و $\bar{g} = 0$ برای مرزهای جانبی در نظر گرفته شده است. جدول ۱-۵ مشخصات ماده تشکیل دهنده را نشان می‌دهد.

جدول ۱-۵ مشخصات محیط در مسئله انتقال حرارت همرفت-رسانش

مشخصات ماده	مقدار
نفوذ پذیری ذاتی	$k = 1.98 \times 10^{-5} Pa$
ضریب بيو	$\alpha = 1$
نسبت تخلخل	$n = 0.5$
گرانروی دینامیکی سیال	$\mu_f = 10^{-3} Pa.s$
چگالی سیال	$\rho_f = 1000 kg / m^3$
چگالی اسکلت جامد	$\rho_s = 2000 kg / m^3$
ضریب هدایت حرارتی	$\kappa = 2.6 J / sm^{\circ}C$
ظرفیت گرمایی ویژه سیال	$c_f = 0.201 J / kg^{\circ}C$
ظرفیت گرمایی ویژه جامد	$c_s = 0.201 J / kg^{\circ}C$

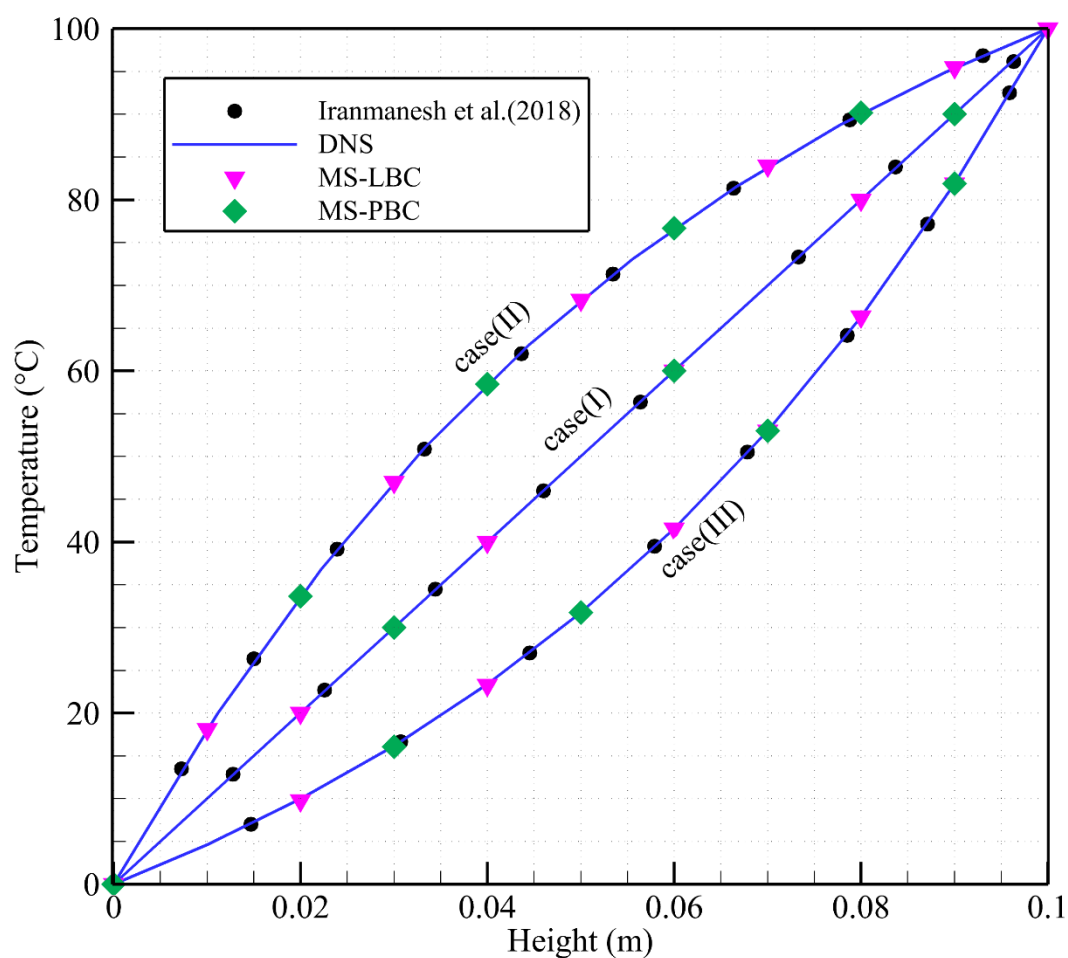
در این مسئله از جابجایی فاز جامد و اثرات گرانش صرف نظر شده است و همچنین فرض اولیه، مبنی بر تعادل شیمیایی در تمام محیط است. برای مدل DNS ۲۰ المان، ۴ گرهی و برای مدل MS همین تعداد المان برای ماکرو و تعداد ۱۰۰ المان ۴ گرهی برای RVE لحاظ شده است. شکل ۲-۵ مش‌بندی در هر دو مدل را نشان می‌دهد. در این مسئله سائز RVE ۰.۰۱ در ۰.۰۱ در نظر گرفته شده است و همچنین مسئله در شرایط کرنش مسطح^۱ حل می‌شود.

^۱ Plain Strain



شکل ۵-۲ مش‌بندی مسئله انتقال حرارت همرفت-رسانش (الف) مش‌بندی مدل‌سازی DNS (ب) مش‌بندی مدل‌سازی MS

شکل ۵-۳ نتیجه مدل‌سازی عددی، توزیع دما در ارتفاع را بعد از رسیدن به حالت پایدار نهایی، نشان می‌دهد.



شکل ۵-۳ توزیع دما در ارتفاع برای مسئله انتقال حرارت همرفت-رسانش

همان‌طور که ملاحظه می‌شود، نتایج مدل DNS و MS در هر دو شرط مرزی خطی و تناوبی، تطابق خوبی با مطالعه‌ی مرجع دارند. بر اساس شکل ۳-۵ در شرایط رسانش به تنهایی (case I)، توزیع دما در ارتفاع به صورت خطی است اما با حضور ترم همرفت هم‌جهت با رسانش (case II)، شیب توزیع دما در نواحی پایینی محیط زیاد شده و دما سریع‌تر افزایش می‌یابد که این نشان می‌دهد که با حضور ترم همرفت گرمای بیشتری انتقال می‌یابد. همچنین وقتی ترم همرفت در خلاف جهت رسانش اعمال می‌شود (case III) این روند معکوس شده و دما در نواحی پایینی مقادیر کمتری به خود می‌گیرد.

۳-۵ مسئله تحکیم ابوستیت^۱ (THM)

دومین مسئله مورد بررسی، مسئله تحکیم در یک ستون خاک اشباع در شرایط غیر هم‌دما خواهد بود که پیش از این توسط ابوستیت [۵۱] و همچنین توسط لوئیس و شرفلر [۱۳] مورد بررسی قرار گرفته است. در این مثال یک ستون خاک به ارتفاع ۷ متر و عرض ۲ متر در نظر گرفته شده است. تغییر مکان، دما و فشار اولیه محیط به ترتیب $u_0 = 0$ و $T_0 = 0^\circ\text{C}$ و $P_0 = 0$ هستند. در مرز بالا دمای 50°C و همچنین فشار معادل 1000Pa اعمال شده است و زهکشی از این مرز انجام می‌شود. در مرزهای جانبی تغییر مکان افقی مهار شده و شار حرارت، صفر است. در مرز پایینی نیز تغییر مکان افقی و قائم مهار شده و شار حرارت صفر است. همچنین مرزهای جانبی و پایینی نفوذناپذیر در نظر گرفته شده‌اند. در این مسئله تعادل شیمیایی در محیط برقرار است. جدول ۲-۵ مشخصات محیط را نشان می‌دهد.

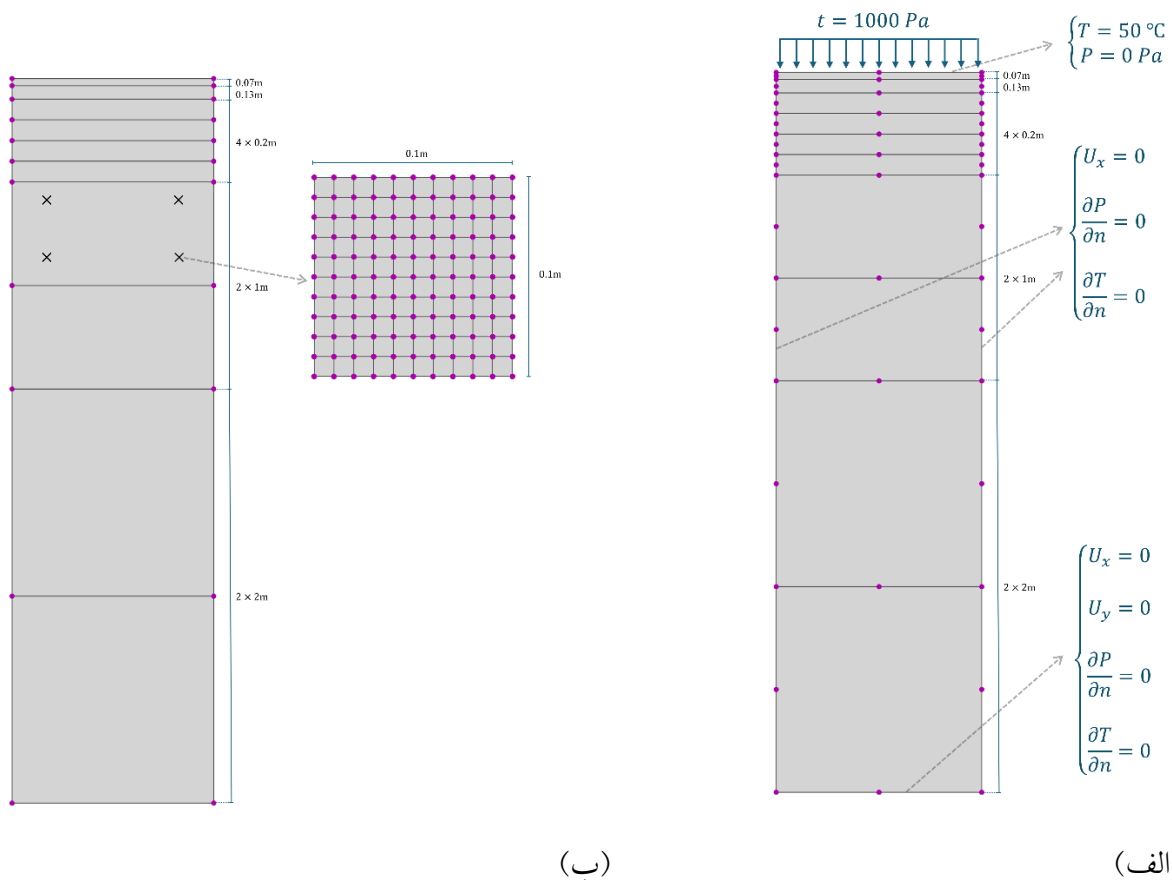
جدول ۲-۵ مشخصات محیط در مسئله ستون خاک اشباع

مشخصات ماده	مقدار
مدول الاستیسیته	$E = 6 \times 10^6 \text{Pa}$
ضریب پواسون	$\nu = 0.4$
نسبت تخلخل	$n = 0.5$
ضریب بیو	$\alpha = 1$
نفوذپذیری ذاتی	$k = 4.64 \times 10^{-17} \text{m}^2$
گرانروی دینامیکی سیال	$\mu_w = 1.157 \times 10^{-8} \text{Pa} \cdot \text{day}$

¹ Aboustit

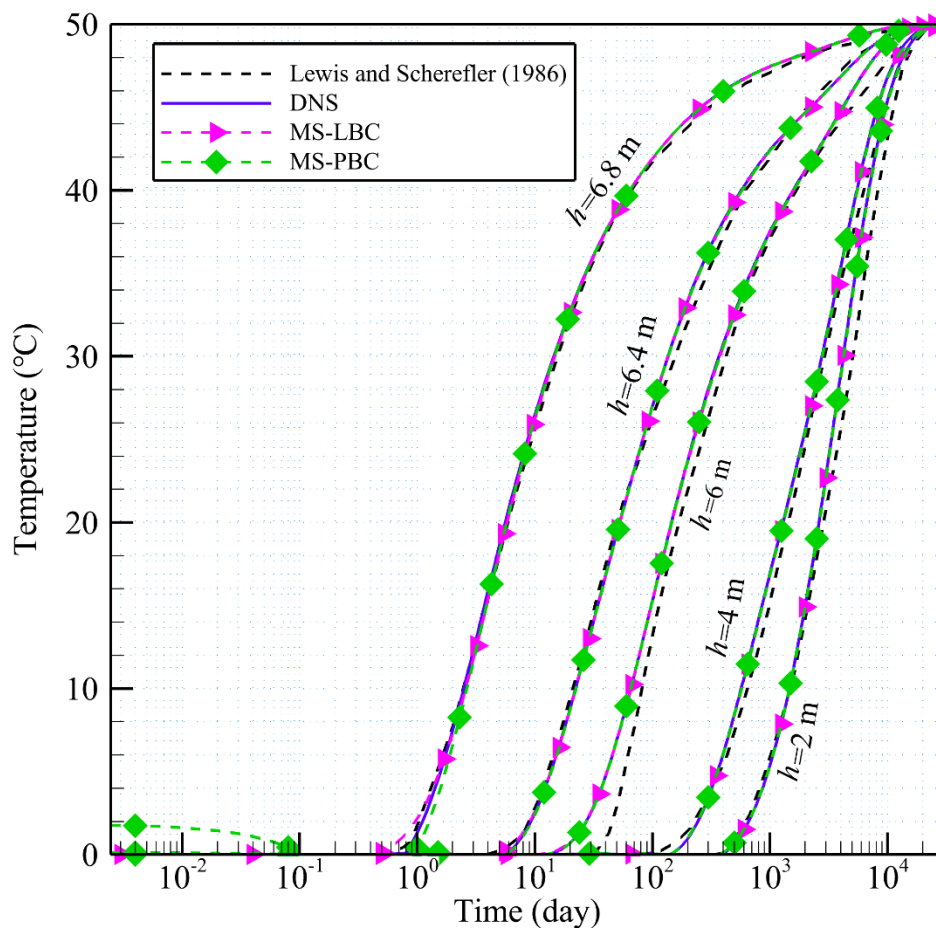
$\rho_s = 2000 \text{ kg / m}^3$	چگالی جامد
$\rho_f = 1000 \text{ kg / m}^3$	چگالی سیال
$\kappa = 836.8 \text{ J / (day} \cdot \text{m}^\circ\text{C)}$	ظرفیت هدایت گرمایی موثر
$(\rho c)_{\text{ave}} = 167360 \text{ J / (m}^\circ\text{C)}$	ظرفیت گرمایی حجمی متوسط
$\beta_s = 9 \times 10^{-7} \text{ 1 / }^\circ\text{C}$	ضریب انبساط حجمی جامد
$\beta_f = 0 \text{ 1 / }^\circ\text{C}$	ضریب انبساط حجمی سیال

در مدل DNS ۱۰ المان مربعی در نظر گرفته شده است. در این مدل، برای تغییر مکان، از المان هشت گرهی و برای فشار و دما از المان چهارگره‌ای استفاده شده است. در مدل MS ۱۰ المان چهارگره‌ای برای ماکرو و ۱۰۰ المان چهارگره‌ای برای میکرو در نظر گرفته شده است. شکل ۴-۵ توزیع المان و شرایط مرزی را در دو مدل نشان می‌دهد.



شکل ۴-۵ هندسه و مش‌بندی مسئله ابوستیت (الف) مش‌بندی مدل DNS (ب) مش‌بندی مدل MS

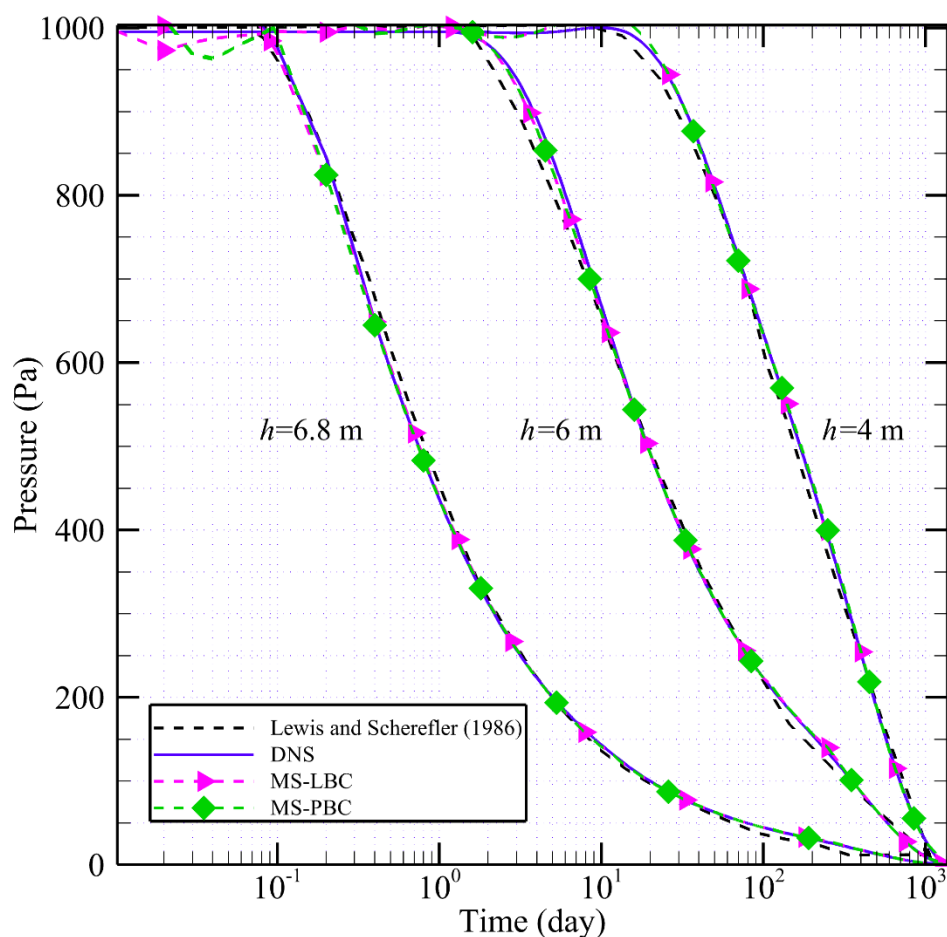
توزیع دما بر حسب زمان در چند ارتفاع در شکل ۵-۵ ارائه شده است. همانطور که ملاحظه می‌شود، نتایج دو مدل DNS و MS تطابق مناسبی با پژوهش مرجع دارد.



شکل ۵-۵ توزیع دما در زمان برای مسئله تحکیم در ستون خاک اشباع

بر اساس شکل ۵-۵ به علت وجود گرادیان حرارتی در محیط، دما از نقاط بالایی شروع به افزایش می‌کند و به تدریج اثر این گرادیان به نقاط با ارتفاع کمتر می‌رسد. این روند تا جایی ادامه می‌یابد که دما در تمام محیط به تعادل رسیده و همه نقاط هم‌دما شوند.

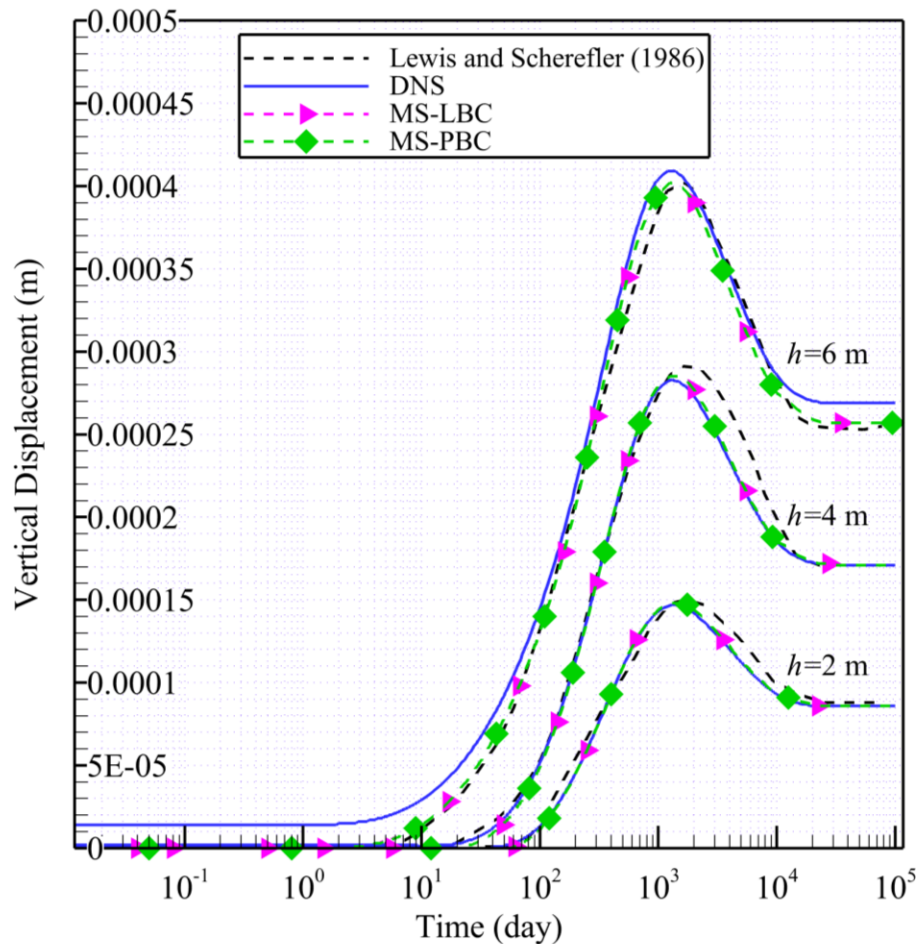
در شکل ۵-۶ نتایج تاریخچه زمانی فشار در چند ارتفاع قابل مشاهده است.



شکل ۵-۶ توزیع فشار در زمان برای مسئله تحکیم در ستون خاک اشباع

مطابق شکل ۵-۶ با اعمال نیروی 1000 Pa در مرز بالایی، فشار آب حفره‌ای در تمام نقاط دامنه به یکباره به 1000 Pa می‌رسد، سپس با گذشت زمان به علت زهکشی مرز بالا، فشار کاهش می‌یابد تا به مقدار اولیه صفر برسد. این نکته واضح است که نقاط نزدیکتر به مرز زهکشی (مرز بالا) زودتر کاهش فشار را تجربه می‌کنند. بنابراین مطابق نتایج به دست آمده، فشار در نقطه‌ای با ارتفاع بیشتر در زمان کوتاه‌تری کاهش می‌یابد. همچنین تطابق نتایج مدل DNS و MS با نتایج پژوهش مرجع، قابل قبول است.

نتایج جابجایی در زمان‌های مختلف برای چند ارتفاع مشخص در شکل ۵-۷ ارائه شده است. لازم به توضیح است که در پژوهش مرجع، معادله تعادل مکانیکی در فرم شبه استاتیکی حل شده در حالی که در این پژوهش مطابق معادله‌ی (۲۵-۳) فرم دینامیکی این معادله لحاظ شده است. بر این اساس اختلاف کمی در نتایج جابجایی ملاحظه می‌شود. همچنین مطابق مقاله مرجع مقادیر مطلق جابجایی (بدون علامت) در اینجا گزارش شده است.



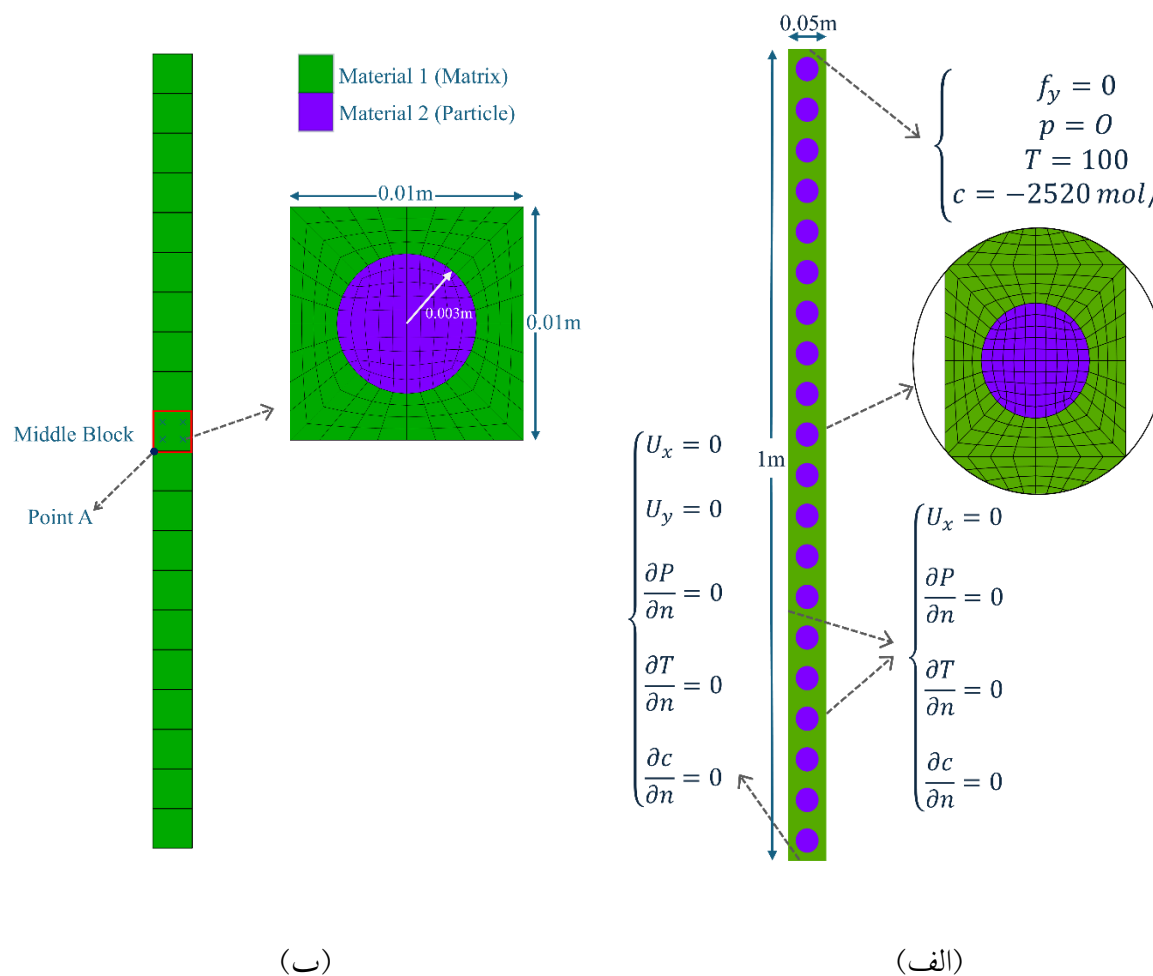
شکل ۷-۵ مقادیر مطلق جابجایی در زمان برای مسئله تحکیم در ستون خاک اشباع

مطابق شکل ۷-۵ افزایش مقدار مطلق جابجایی ناشی از اعمال نیرو در مرز بالایی اتفاق می افتد ولی در زمان 10^3 که دما در این نقاط افزایش محسوسی می یابد تاثیر کرنش حرارتی زیاد شده و جابجایی کاهش می شود تا جایی که بعد از به تعادل رسیدن دما، این کاهش میزان جابجایی نیز متوقف شده و محیط به شرایط پایدار می رسد. هم چنین تطابق نتایج مدل DNS و MS در جابجایی نیز قابل قبول ارزیابی می شود.

۴-۵ ستون الاستیک ناهمگن (HMC و THMC)

در این مثال یک ستون الاستیک ناهمگن به ابعاد ۱ در ۰.۰۵ متر مدل می شود. در دامنه این ستون دوایری به شعاع $m \cdot 0.15$ به صورت منظم توزیع شده است که ویژگی های ماده در داخل و خارج این دایره ها با هم متفاوت

هستند که ناهمگنی مسئله را تشکیل می‌دهند. ماده خارج از دایره‌ها با عنوان ذره^۱ و ماده داخل دایره‌ها با عنوان ماتریس^۲، عنوان می‌شوند. این مسئله در حالت اول با یک بارگزاری شیمیایی در مرز بالایی و بدون در نظر گرفتن اثرات حرارتی حل می‌شود که در گذشته توسط سعیدمنیر و همکاران [۵۲] انجام شده است و در حالت دوم با اضافه شدن اثرات حرارتی و اعمال گرادیان دما در مرز بالایی مدل می‌شود که تاثیر وجود پارامتر حرارت، مشاهده شود. هندسه و شرایط مرزی مسئله در شکل ۵-۸ قابل مشاهده است.



شکل ۵-۸ هندسه، مش‌بندی و شرایط مرزی مسئله ستون خاک ناهمگن (الف) مدل DNS (ب) مدل MS

¹ Particle

² Matrix

ابعاد RVE در این مثال ۰.۰۱ در ۰.۰۱ متر در نظر گرفته شده است که ناهمگنی به صورت دایره‌ای به شعاع ۰.۰۰۳ متر مطابق شکل ۸-۵ (ب) در مقیاس میکرو وجود دارد. تلاش شده است مش‌بندی دو مدل DNS و MS با هم هماهنگ باشند تا از خطای احتمالی مش‌بندی جلوگیری شود. بنابراین مدل DNS شامل ۲۰ بلوک که هر بلوک با ۲۲۴ المان چهارگره‌ای گسسته‌سازی شده است. هم‌چنین در مدل MS در مقیاس ماکرو با ۲۰ المان چهارگره‌ای و در در مقیاس میکرو با ۲۲۴ المان چهارگره‌ای مدل شده است.

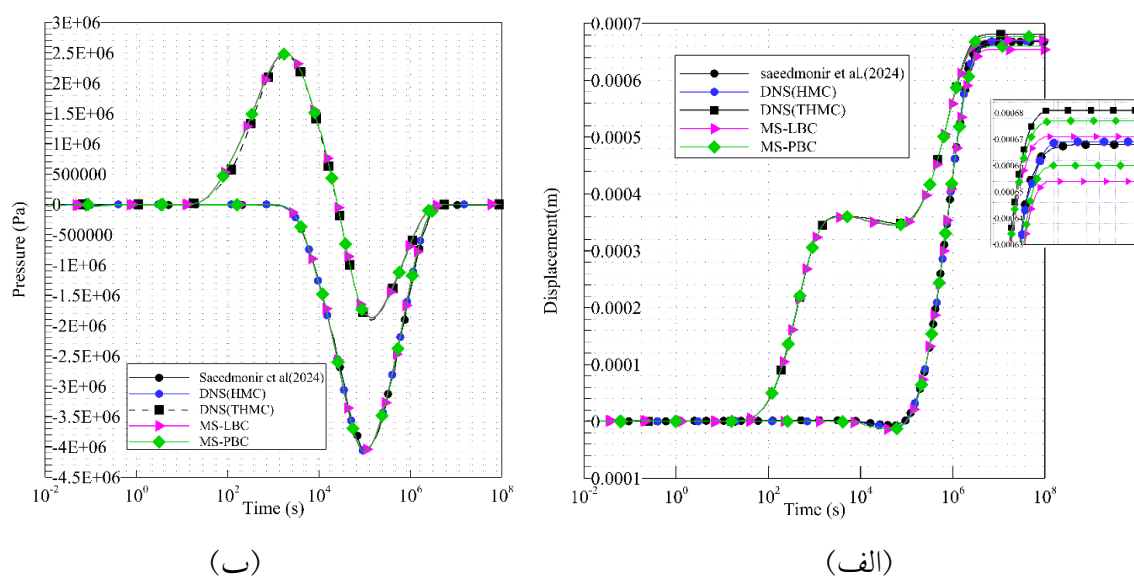
مشخصات فیزیکی مسئله در جدول ۳-۵ ارائه شده است. در این مسئله در زمان $t = 0s$ بارگذاری شیمیایی معادل $c = -2520 \text{ mol} / \text{m}^3$ و بارگذاری حرارتی معادل $T = 100^\circ \text{C}$ در مرز بالایی اعمال می‌شود و حل تا رسیدن به یک حالت پایدار ادامه می‌یابد. صحت سنجی این مثال در حالت اول (بدون اثرات حرارتی) با توجه به نتایج مطالعه مرجع و در حالت دوم (با لحاظ اثرات حرارتی) با مدل DNS انجام شده است.

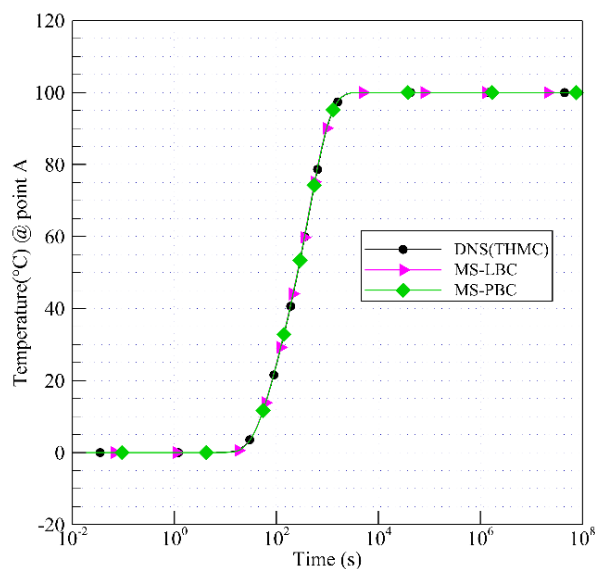
جدول ۳-۵ مشخصات محیط در مسئله ستون خاک ناهمگن

مشخصات ماده	ذره	ماتریس
مدول الاستیسیته $E (Pa)$	1.85×10^{12}	1.85×10^9
ضریب پواسون ν	0.22	0.22
نسبت تخلخل n	0.1	0.3
مدول بالک $K_c (Pa)$	1.1×10^{12}	1.1×10^9
ضریب بازتاب λ	0.4	0.3
ضریب انتشار محیط $D_c (m^2 / s)$	6×10^{-8}	6×10^{-6}
نفوذپذیری $k (m^3 . s / kg)$	3.33×10^{-18}	3.33×10^{-16}
چگالی جامد $(\rho_s) kg / m^3$	20000	2000
چگالی سیال $(\rho_f) kg / m^3$	1100	1100
کسر جرمی حل‌شونده x_s^0	0.1	0.1
کسر جرمی حلال x_w^0	0.9	0.9
جرم مولی حل‌شونده $m_s (kg / mol)$	0.0585	0.0585
جرم مولی حلال $m_w (kg / mol)$	0.018	0.018
ضریب بيو α	0.8	0.95
ضریب بيو تحت شرایط غلظت ثابت α_c	0.9	0.968
ضریب بازتاب مکانیکی-شیمیایی λ_a	0.7	0.8
ضریب فشار حفره‌ای اسکمپتون B_C	0.915	0.876
ضریب بازتاب هیدرولیکی-شیمیایی λ_b	0.7	0.8

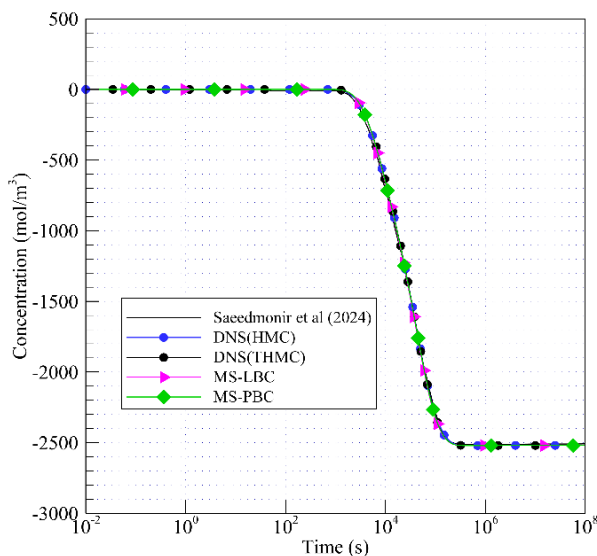
0.201	0.301	ظرفیت گرمایی ویژه جامد $c_s (J/kg \text{ } ^\circ C)$
0.201	0.201	ظرفیت گرمایی ویژه سیال $c_f (J/kg \text{ } ^\circ C)$
2.6	0.26	ضریب هدایت گرمایی موثر $\kappa (W/m \text{ } ^\circ C)$
0.9×10^{-6}	0.3×10^{-6}	ضریب انبساط حجمی جامد $\beta_s (1/^\circ C)$
1×10^{-5}	1×10^{-5}	ضریب انبساط حجمی سیال $\beta_f (1/^\circ C)$

شکل ۹-۵ نتایج تغییرات پارامترهای اصلی ماکرو بر حسب زمان در نقطه A که موقعیت آن در شکل ۸-۵ (ب) مشخص شده است، را نشان می‌دهد.





(د)



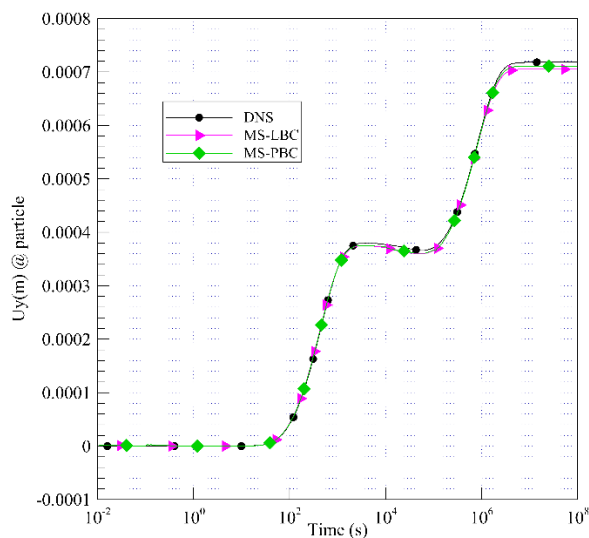
(ج)

شکل ۹-۵ تغییرات پارامترهای ماکرو بر حسب زمان در نقطه A، مقایسه نتایج مطالعه مرجع با مدل سازی DNS و MS (الف) جابجایی قائم، (ب) فشار آب حفره‌ای، (ج) دما، (د) غلظت ماده حل شونده

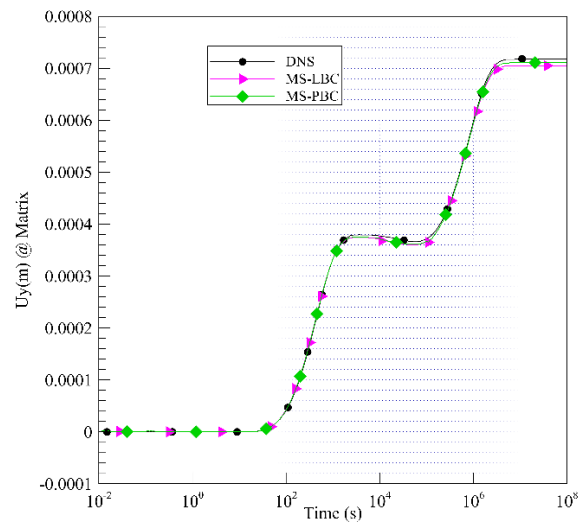
در حالتی که اثرات گرمایی وجود ندارد، در اثر اختلاف غلظت ماده حل شونده در مرز بالا، یک جریان اسمزی از غلظت کمتر (خارج از دامنه) به غلظت بیشتر (داخل دامنه) ایجاد می‌شود. این فشار در زمان حدودی $10^4 s$ بر اساس شکل ۹-۵(ج) به نقطه A می‌رسد که باعث تورم در این نقطه می‌شود. این تورم یا به عبارتی تغییر مکان مثبت با نتایج مدل عددی در شکل ۹-۵(الف) انطباق دارد. در حالت دوم با حضور اثرات گرمایی اختلاف دما باعث ایجاد شار حرارتی در دامنه می‌شود که این شار بر اساس شکل ۹-۵(د) در زمان حدودی $10^2 s$ به نقطه A می‌رسد. افزایش دما در این نقطه باعث ایجاد کرنش حرارتی می‌شود افزایش تغییر مکان در این محدوده‌ی زمانی حاکی از این کرنش حرارتی است. بعد از پایداری دما در نقطه A افزایش تغییر مکان متوقف شده تا در محدوده‌ی $10^4 s$ ، فشار اسمزی به این نقطه برسد و جابجایی دوباره افزایشی شود. بنابراین افزایش تغییر مکان در این محدوده ناشی از فشار اسمزی است. مطابق شکل ۹-۵(الف) شرط مرزی تناوبی تطابق بیشتری با نتایج مدل DNS دارد.

مطابق شکل ۹-۵(ب) در محدوده‌ی زمانی $10^2 s$ به دلیل ایجاد تغییر مکان مثبت ناشی از کرنش حرارتی، فشار سیال نیز افزایش می‌یابد، سپس با ایجاد فشار اسمزی منفی در محدوده‌ی $10^4 s$ و با توجه به ثابت بودن تغییر مکان در لحظات اولیه، برای حفظ تعادل، فشار حفره‌ای نزولی می‌شود. بعد از به تعادل رسیدن غلظت در خارج و داخل دامنه، و ایجاد تنش در محیط، فشار حفره‌ای افزایشی شده تا به مقدار تعادلی صفر برسد.

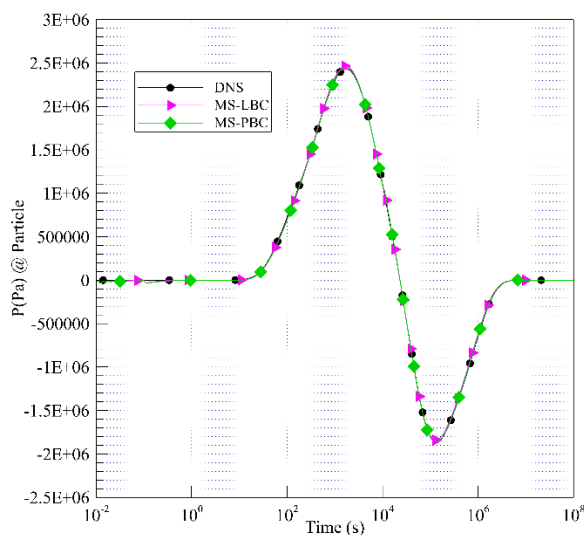
همانطور که قبلاً بیان شد، در پژوهش مرجع در معادله تعادل غلظت حل شونده، اثر ترم همرفت لحاظ نشده است در حالی که در پژوهش حاضر به دلیل اینکه این ترم در معادله تعادل انرژی داخلی لحاظ شده است، برای هماهنگی بین معادلات، در معادله شیمیایی نیز اثر این ترم در نظر گرفته شده است. با توجه به شکل ۹-۵ (ج) مشاهده می‌شود که حضور ترم همرفت در این مسئله تاثیر قابل ملاحظه‌ای نسبت به نتایج پژوهش مرجع ندارد که این نشان می‌دهد فرض جریان آرام و سرعت پایین سیال در این پژوهش، در نتایج تغییرات غلظت قابل مشاهده است.



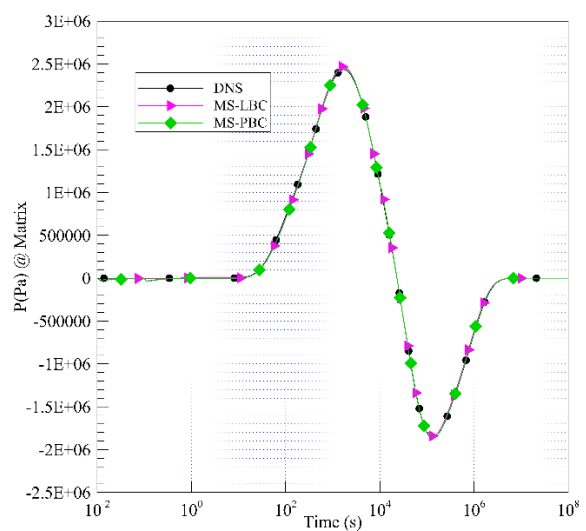
(ب)



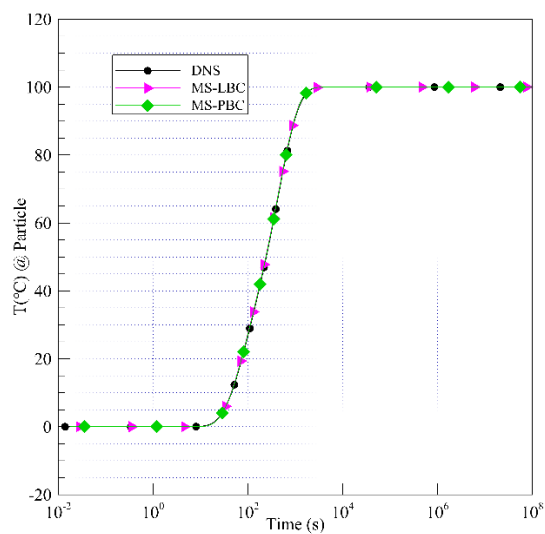
(الف)



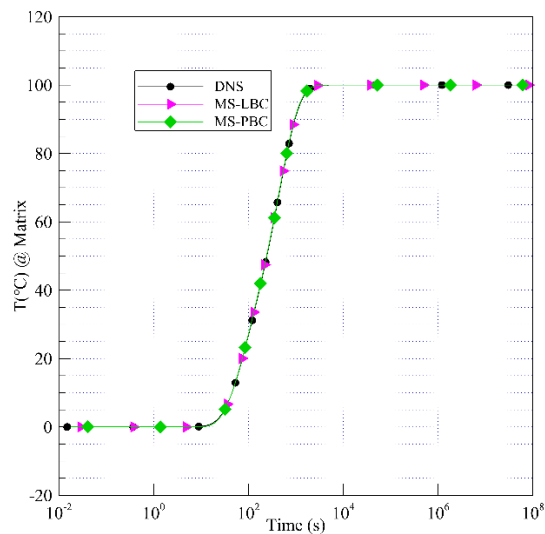
(د)



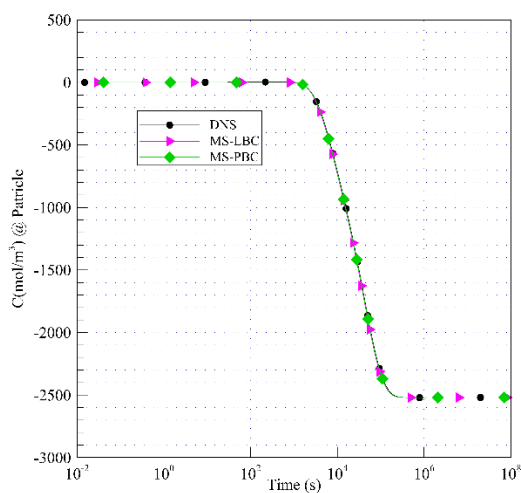
(ج)



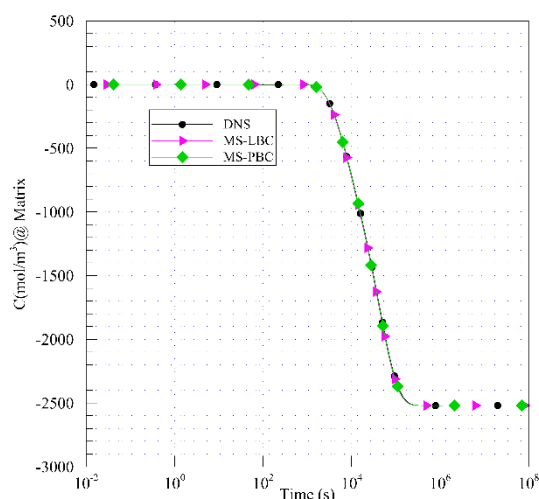
(و)



(ه)



(ح)

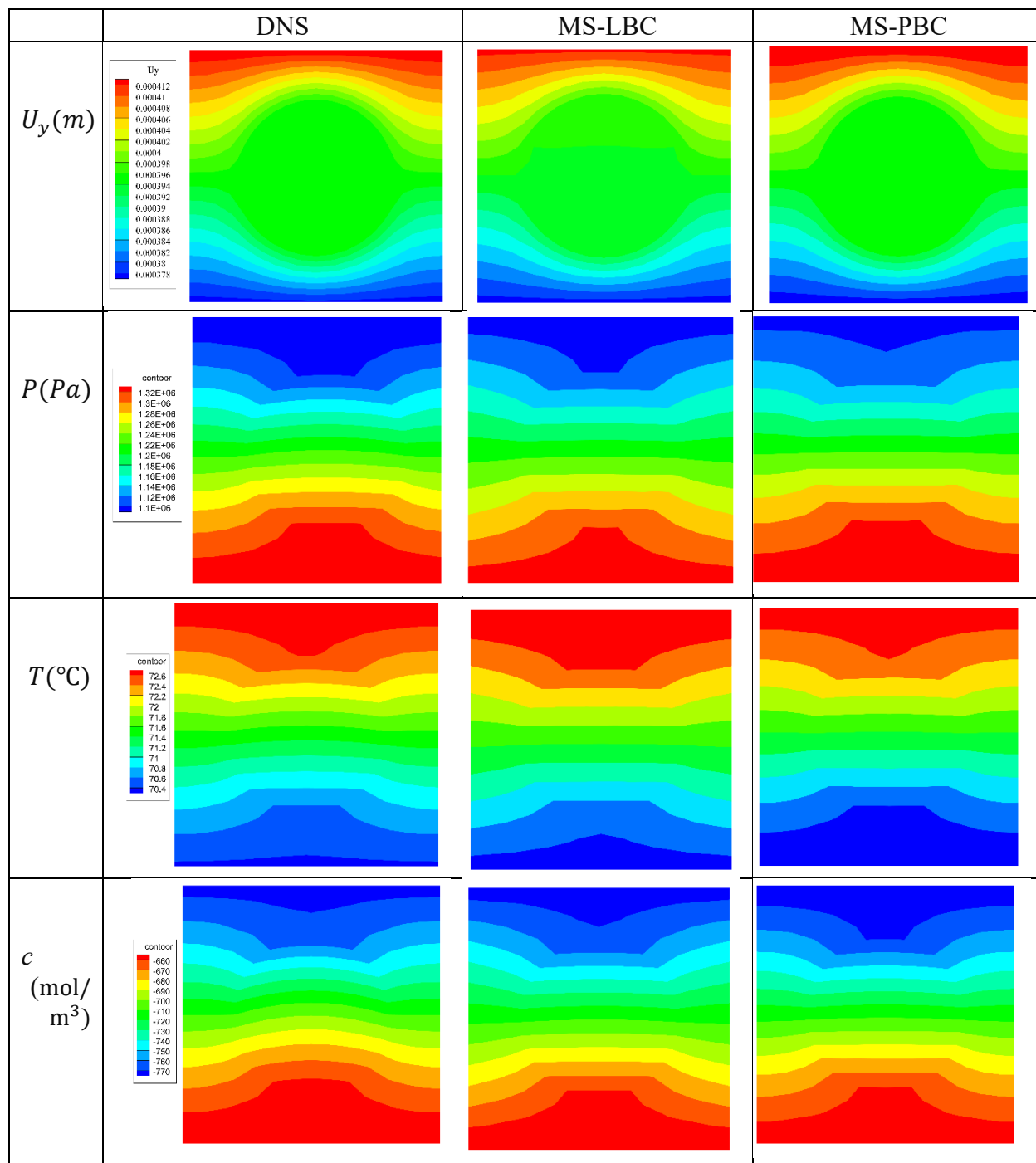


(ز)

شکل ۵-۱۰ میانگین جابجایی قائم، فشار حفره‌ای، دما و غلظت حل‌شونده در بلوک میانی بر حسب زمان به تفکیک ماتریس و ذره، مقایسه مدل DNS و MS

شکل ۵-۱۰ میانگین تغییر مکان، فشار حفره‌ای، دما و غلظت حل‌شونده در بلوک میانی در دو مدل DNS و MS است. محل این بلوک در دامنه مسئله در شکل ۸-۵ (ب) مشخص شده است. میانگین پارامترهای ماکرو در مدل DNS به صورت میانگین مقادیر در نقاط گرهی در بلوک مذکور به تفکیک ماتریس و ذره انجام شده است و در مدل MS به صورت میانگین پارامترها در نقاط گرهی RVE مربوط به این بلوک است. مقایسه نتایج دو مدل نشان از تطابق مناسب نتایج دارد. هم‌چنین مشاهده می‌شود که نتایج ماتریس و ذره برای پارامترهای اصلی

ماکرو یکسان است که از این تساوی نتایج می‌توان نتیجه گرفت، مسئله تحت تاثیر ناپیوستگی‌های ضعیف بین ماتریس و ذره قرار نگرفته است.

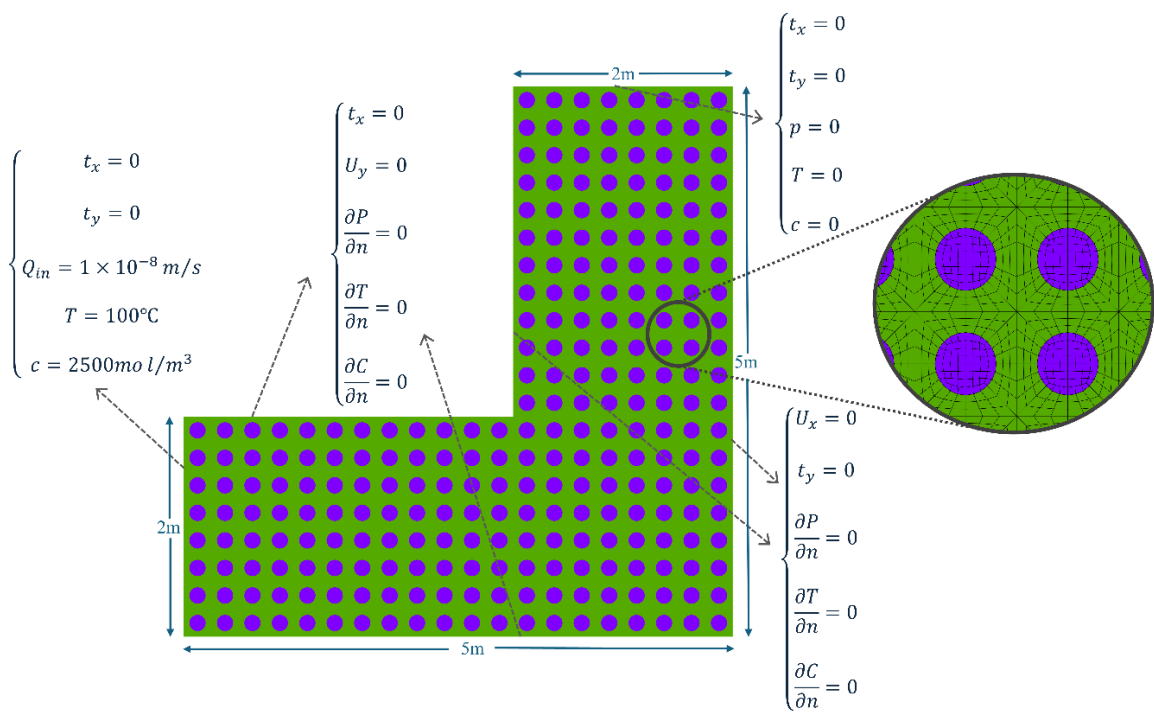


شکل ۱۱-۵ مقایسه نتایج مدل DNS و MS-LBC و MS-PBC برای پارامترهای میدان‌های جابجایی، فشار حفره‌ای، دما و غلظت حل‌شونده در بلوک میانی

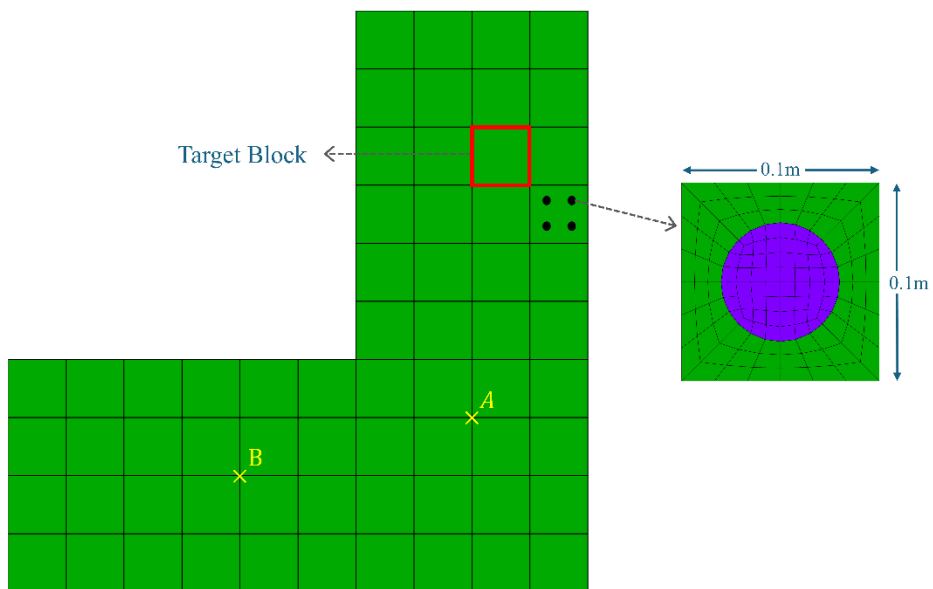
در شکل ۵-۱۱ بررسی میدان جابجایی، فشار حفره‌ای و غلظت حل شونده در بلوک میانی در زمان $10^4 s$ و دما در زمان $5 \times 10^2 s$ انجام شده است. با توجه به نتایج به دست آمده مشاهده می‌شود که نتایج مدل MS با شرط مرزی تناوبی تطابق بهتری با مدل DNS دارد. همچنین وجود ناهمگنی در مسئله خصوصاً در میدان جابجایی مشهود است.

۵-۵ محیط الاستیک دوبعدی با اثرات گرمایی (THMC)

به عنوان آخرین مثال، یک محیط دو بعدی مدل شده است تا کارایی کد رایانه‌ای در یک مسئله نزدیک‌تر به واقعیت و پیچیده‌تر مدل شود. در این مثال، یک محیط L شکل فرض گردیده است که شار سیال از مرز سمت چپ مطابق شکل ۵-۱۲ وارد شده و از مرز بالایی خارج می‌گردد و همچنین گرادیان حرارت و غلظت بین دو مرز چپ و بالایی اعمال شده است که نشان می‌دهد سیال ورودی خالص نبوده و با محیط اختلاف غلظت و همچنین اختلاف دما دارد. در این مثال شار و گرادیان در دامنه در جهت x وارد شده و از جهت y خارج می‌گردد. همان‌طور که گفته شد هندسه‌ی این مثال یک محیط L شکل به ابعاد خارجی ۵ در ۵ متر و ابعاد داخلی ۳ در ۳ متر است. دامنه دارای ناهمگنی‌های به شعاع ۰.۰۷۵ متر است که مطابق شکل ۵-۱۲ توزیع شده است. مرز پایینی و مرز میانی افقی برای جابجایی قائم و مرز سمت راست و مرز میانی عمودی برای جابجایی افقی بسته شده‌اند. تمام مرزها غیر از مرز سمت چپ و مرز بالایی، نفوذ ناپذیر و عایق فرض شده‌اند. در این مثال نیز صحت سنجی تحلیل چندمقیاسی به وسیله تحلیل مستقیم انجام شده است. هندسه، شرایط مرزی مسئله و مش‌بندی مدل DNS و همچنین مش‌بندی مدل MS در شکل ۵-۱۲ نشان داده شده است. در مدل DNS، ۲۵۶ بلوک شامل ۱۳۲ المان چهارگره‌ای لحاظ شده است و در مدل MS در مقیاس ماکرو ۶۴ المان و در مقیاس میکرو ۱۳۲ المان برای گسسته‌سازی دامنه، استفاده شده است. سائز RVE در این مسئله ۰.۱ در ۰.۱ متر با شعاع ناهمگنی ۰.۰۳ در نظر گرفته شده است.



(الف)



(ب)

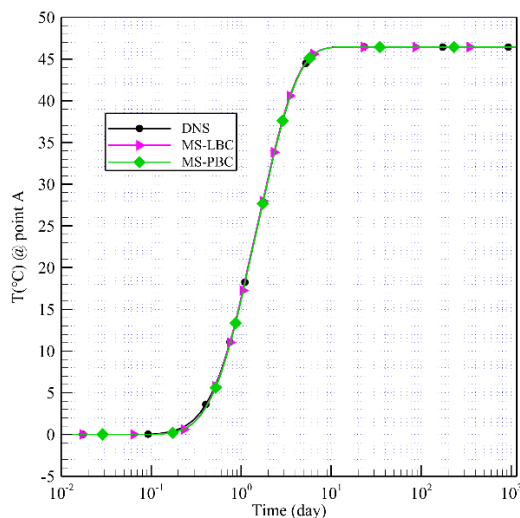
شکل ۱۲-۵ هندسه، مش بندی و شرایط مرزی مسئله دوبعدی (الف) مدل DNS (ب) مدل MS

مسئله در شرایط کرنش مسطح حل شده است و ویژگی‌های محیط در جدول ۴-۵ ارائه گردیده است.

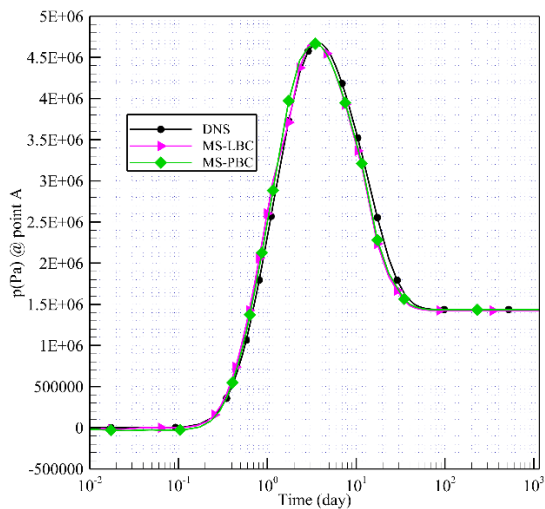
جدول ۴-۵ مشخصات فیزیکی محیط در مسئله دو بعدی

مشخصات ماده	ذره	ماتریس
مدول الاستیسیته $E (Pa)$	3×10^{12}	3×10^8
ضریب پواسون ν	0.3	0.3
نسبت تخلخل n	0.1	0.3
مدول بالک $K_c (Pa)$	2.5×10^{12}	2.5×10^8
ضریب بازتاب λ	0.4	0.3
ضریب انتشار محیط $D_c (m^2 / s)$	6×10^{-9}	6×10^{-6}
نفوذپذیری $k (m^3 \cdot s / kg)$	1×10^{-16}	1×10^{-13}
چگالی جامد $(\rho_s) kg / m^3$	20000	2000
چگالی سیال $(\rho_f) kg / m^3$	1100	1100
کسر جرمی حل‌شونده x_s^0	0.1	0.1
کسر جرمی حلال x_w^0	0.1	0.9
جرم مولی حل‌شونده $m_s (kg / mol)$	0.0585	0.0585
جرم مولی حلال $m_w (kg / mol)$	0.018	0.018
ضریب بيو α	0.8	0.95
ضریب بيو تحت شرایط غلظت ثابت α_c	0.9	0.968
ضریب بازتاب مکانیکی-شیمیایی λ_a	0.7	0.8
ضریب فشار حفره‌ای اسکمپتون B_c	0.915	0.876
ضریب بازتاب هیدرولیکی-شیمیایی λ_b	0.7	0.8
ظرفیت گرمایی ویژه جامد $c_s (J / kg ^\circ C)$	1369.7	878
ظرفیت گرمایی ویژه سیال $c_f (J / kg ^\circ C)$	4180	4180
ضریب هدایت گرمایی موثر $\kappa (W / m ^\circ C)$	16.74	837
ضریب انبساط حجمی جامد $\beta_s (1 / ^\circ C)$	3×10^{-5}	9×10^{-5}
ضریب انبساط حجمی سیال $\beta_f (1 / ^\circ C)$	1×10^{-4}	1×10^{-4}

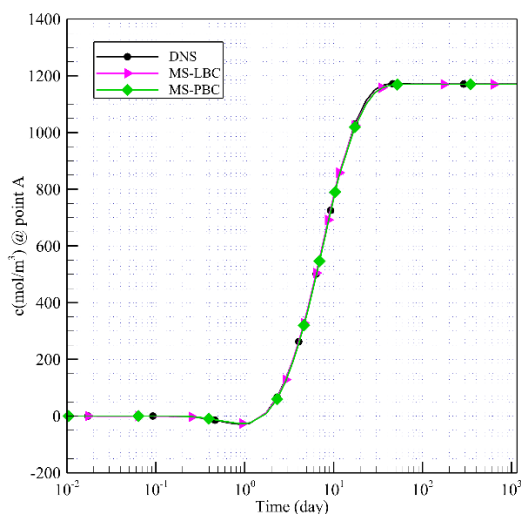
نتایج مقایسه‌ای پارامترهای اصلی ماکرو در نقاط A و B و بلوک هدف که محل آن‌ها در شکل ۱۲-۵ (ب) مشخص شده است، به تفکیک ارائه می‌شود. در شکل ۱۳-۵ تغییرات فشار آب حفره‌ای، دما و غلظت در نقطه‌ی A ارائه شده است.



(ب)



(الف)

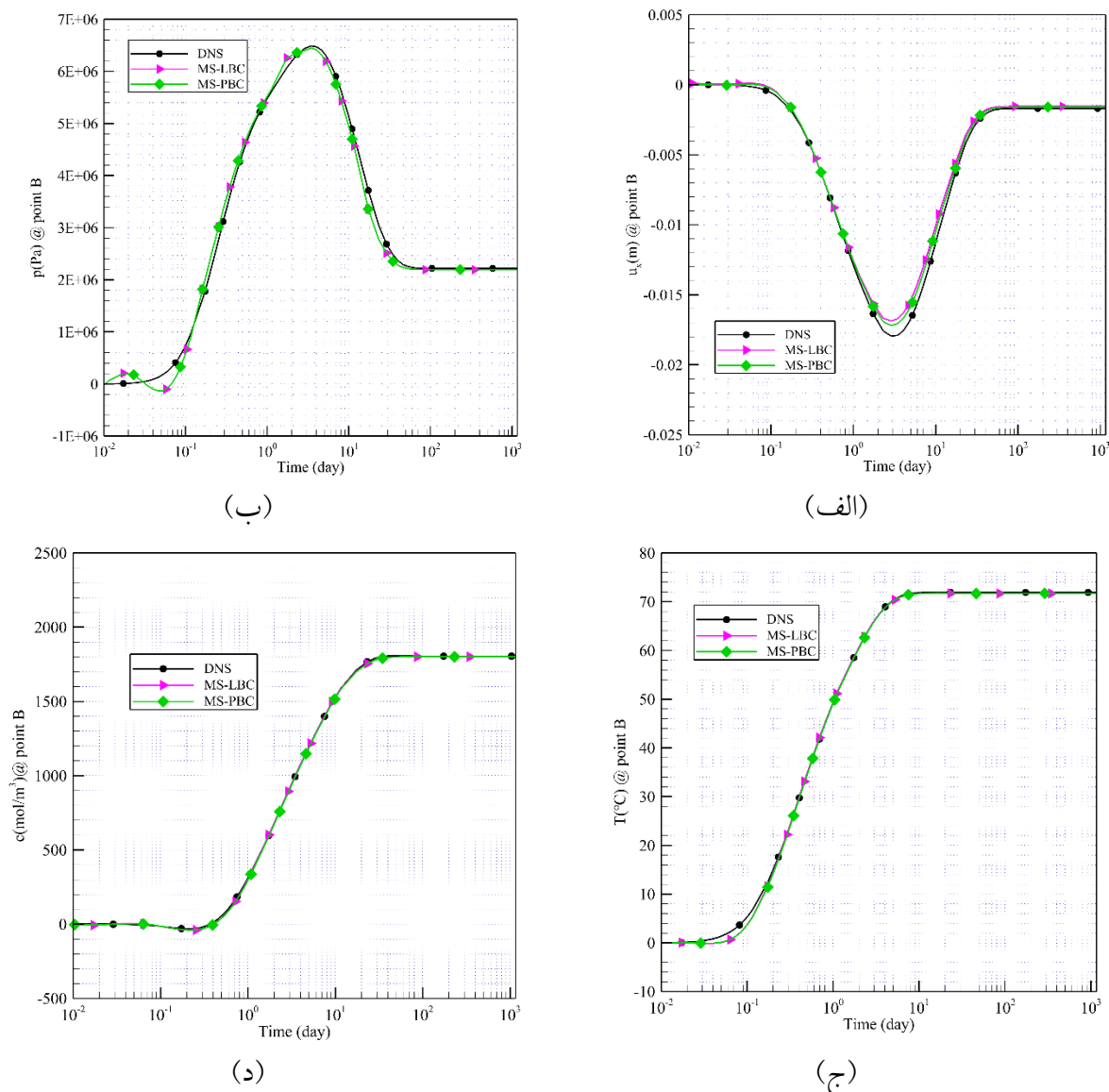


(ج)

شکل ۱۳-۵ مقایسه نتایج نمودار (الف) فشار حفره‌ای، (ب) دما، (ج) غلظت حل‌شونده، بر حسب زمان در نقطه‌ی A در مدل DNS و MS

بر اساس شکل ۱۳-۵ با ورود شار سیال از مرز چپ به محیط و همچنین افزایش دما در محدوده‌ی زمانی $10^{-1}d$ باعث افزایش فشار در این محدوده‌ی زمانی می‌شود. همچنین به علت گرادیان مثبت غلظت ماده‌ی حل‌شونده در مرز چپ، برای برقراری تعادل، خروج ماده حل‌شونده از محیط شروع می‌شود. این امر باعث کاهش فشار در محیط شده که در شکل ۱۳-۵(الف) در محدوده‌ی زمانی 10^1d این اتفاق مشهود است. به علت شار دائمی سیال در این نقطه، فشار به زهکشی کامل نمی‌رسد و به مقدار اولیه صفر بر نمی‌گردد که این نیز در شکل ۱۳-۵(الف)

قابل مشاهده است. تطابق نتایج مدل DNS و MS با هر دو شرط مرزی خطی و تناوبی در نتایج این نقطه، قابل قبول است.

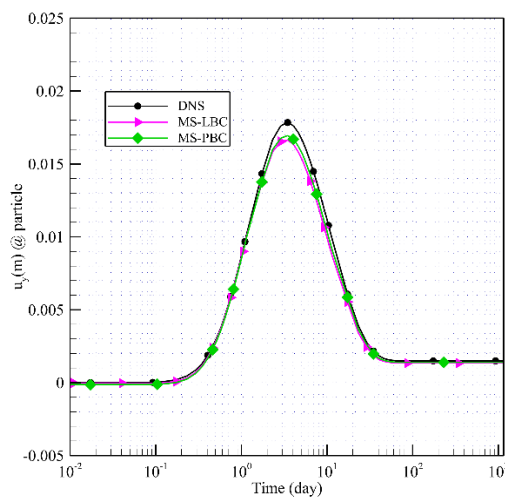


شکل ۱۴-۵ مقایسه نتایج نمودار (الف) تغییر مکان افقی، (ب) فشار حفره‌ای، (ج) دما، (د) غلظت حل‌شونده، بر حسب زمان در نقطه‌ی B در مدل DNS و MS

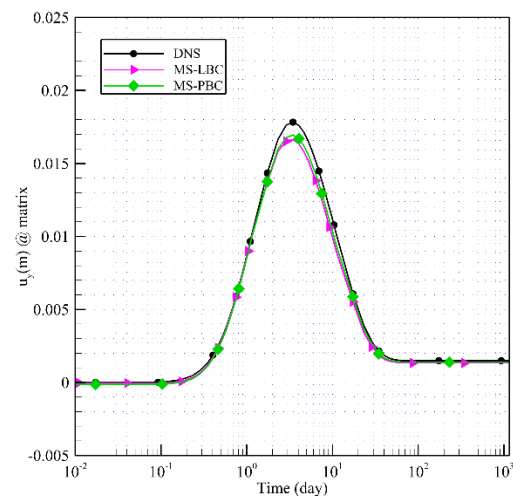
بر اساس شکل ۱۴-۵ (د) افزایش غلظت ماده‌ی حل‌شونده در نقطه‌ی B باعث افزایش فشار اسمزی شده و تغییر مکان منفی ایجاد می‌شود. کاهش تغییر مکان در محدوده‌ی زمانی $10^0 d$ در شکل ۱۴-۵ (الف) و افزایش فشار حفره‌ای در همین محدوده‌ی زمانی مطابق شکل ۱۴-۵ (ب) ناشی از این افزایش فشار اسمزی است.

با به تعادل رسیدن غلظت در این نقطه، بر اثر رسیدن دما به بیشینه مقدار خود، مطابق شکل ۱۴-۵ (ج)، کرنش حرارتی نیز به بیشینه مقدار خود رسیده و تغییر مکان مثبت ایجاد می‌شود و هم چنین با توجه به گذشت زمان نسبتاً طولانی، و زهکشی محیط، در محدوده‌ی زمانی $10^1 d$ مطابق شکل ۱۴-۵ (ب) فشار کاهشی شده و تغییر مکان مطابق شکل ۱۴-۵ (الف) همین محدوده‌ی زمانی، افزایش می‌یابد. اختلاف فشار در ابتدای حل و انتهای حل (حالت پایدار نهایی) با توجه به وجود شار دائمی سیال، مورد انتظار است که در شکل ۱۴-۵ (ب) قابل مشاهده است.

در ادامه نتایج میانگین حجمی پارامترهای اصلی مسئله شامل تغییر مکان، فشار حفره‌ای، دما و غلظت در بلوک مورد نظر که محل این بلوک در شکل ۱۲-۵ مشخص شده است، برای ماتریس و ذره به صورت جداگانه، در مدل DNS و MS با دو شرط مرزی خطی و تناوبی با هم مقایسه شده‌اند. همان‌طور که گفته شد، در مدل DNS میانگین حجمی گره‌های حاضر در بلوک مورد نظر محاسبه شده است و در مدل MS میانگین حجمی این مقادیر در چهار RVE المان ماکرو این بلوک به صورت مجزا محاسبه شده و میانگین‌گیری شده است.



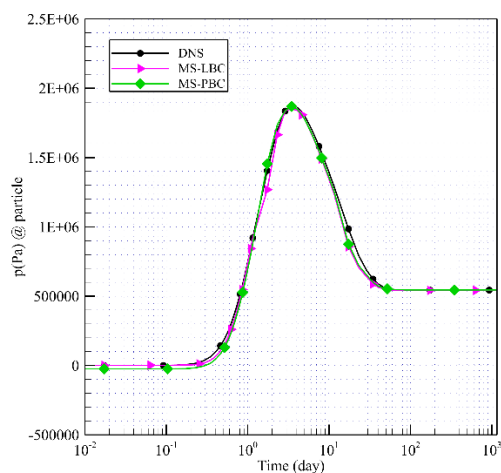
(ب)



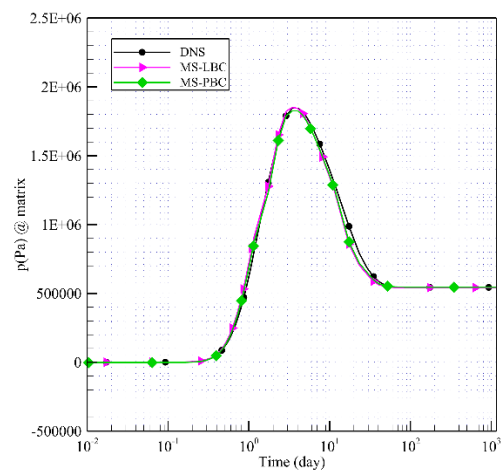
(الف)

شکل ۱۵-۵ مقایسه نتایج مدل DNS و MS با شرط مرزی خطی و تناوبی برای میانگین حجمی جابجایی قائم در (الف) ماتریس و (ب) ذره برای بلوک مورد نظر در دامنه مسئله

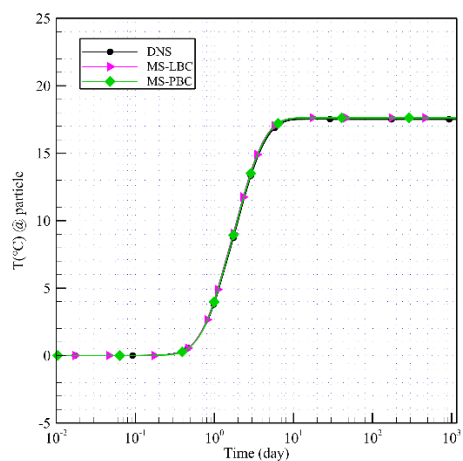
شکل ۱۵-۵ میانگین حجمی جابجایی قائم در ماتریس و ذره در بلوک هدف را نشان می‌دهد. مشاهده می‌شود که نتایج شرط مرزی تناوبی تطابق بهتری با نتایج تحلیل مستقیم دارد. هم چنین به علت پیوستگی ماتریس و ذره مقادیر تغییر مکان در این دو ناحیه کاملاً مطابق هم هستند.



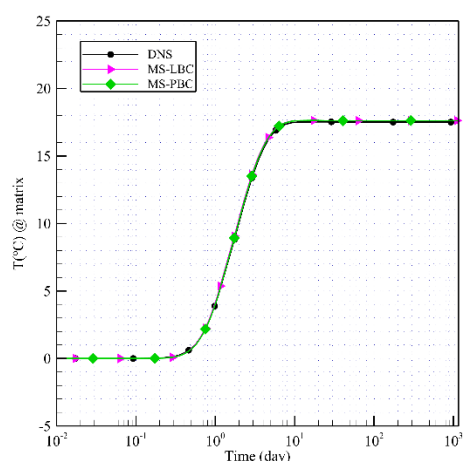
(ب)



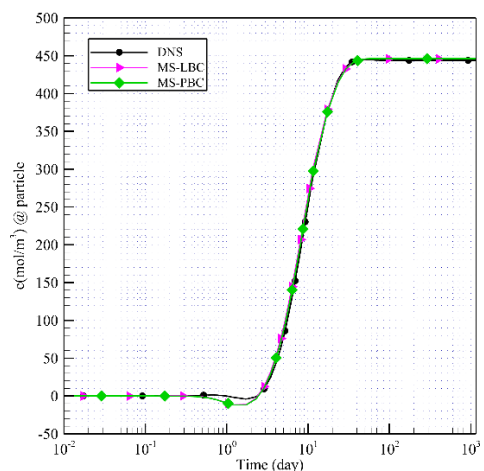
(الف)



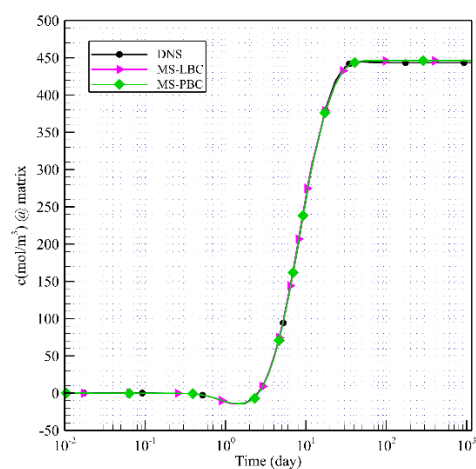
(د)



(ج)



(و)

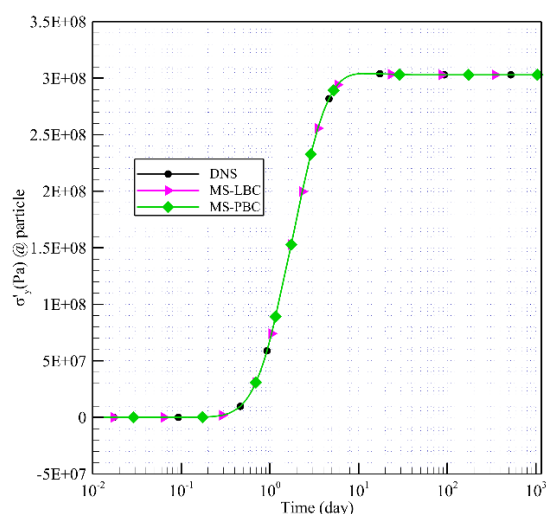


(ه)

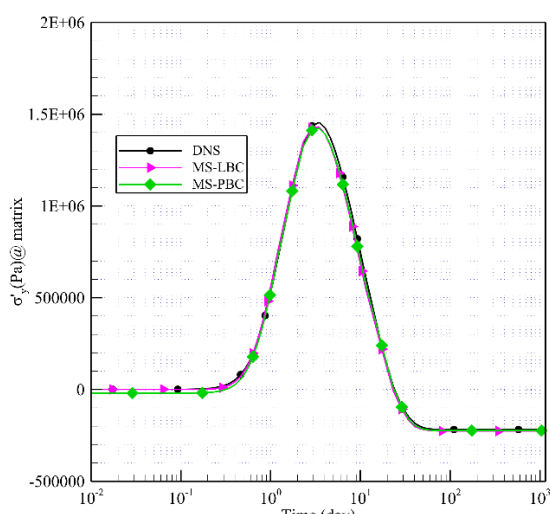
شکل ۱۶-۵ مقایسه نتایج مدل DNS و MS با شرط مرزی خطی و تناوبی برای میانگین حجمی (الف) و (ب) فشار حفره‌ای، (ج) و (د) دما، (ه) و (و) غظت حل‌شونده، در ماتریس و ذره برای بلوک هدف، در دامنه مسئله

در شکل ۱۶-۵ میانگین حجمی برای فشار حفره‌ای، دما و غلظت در بلوک هدف برای ماتریس و ذره به صورت مجزا رسم شده است. مطابق انتظار این نتایج برای همه‌ی پارامترهای اصلی ماکرو، در ماتریس و ذره منطبق هستند که نشان از پیوستگی این دو ناحیه دارد. همچنین تطابق نتایج مدل MS با دو شرط مرزی خطی و تناوبی با نتایج مدل DNS مناسب ارزیابی می‌شود.

در این قسمت نتایج شار برای هر چهار معادله حاکم مسئله در بلوک هدف و به صورت مجزا برای ماتریس و ذره رسم شده است. در اینجا نیز مانند نمودار قبل، در مدل DNS میانگین حجمی برای بلوک هدف به صورت مجزا برای ماتریس و ذره و در مدل MS به صورت میانگین حجمی در RVE های متناظر المان ماکرو در این بلوک، انجام شده است. با توجه به تفاوت محسوس بین ویژگی‌های ماده در دو ناحیه ماتریس و ذره، شار هر چهار معادله نیز در این نواحی متفاوت هستند این نشان می‌دهد که ناهمگنی بر روی شارها تاثیر زیادی دارند.



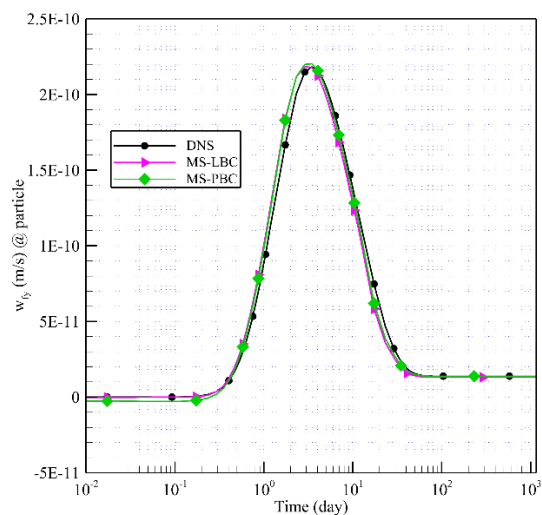
(ب)



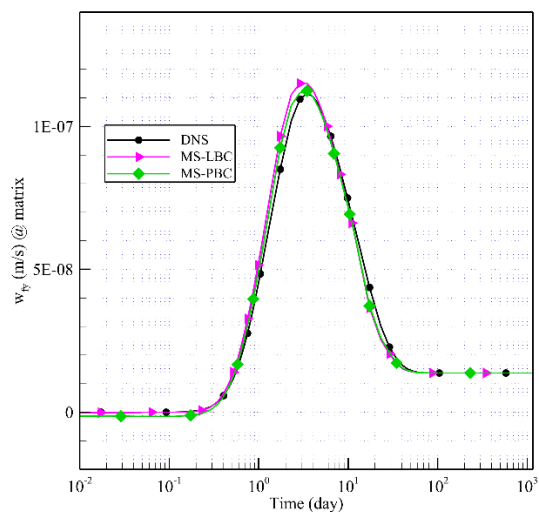
(الف)

شکل ۱۷-۵ مقایسه نتایج مدل DNS و MS برای شار قائم معادله مکانیکی (تنش قائم) در بلوک هدف برای (الف) ماتریس و (ب) ذره

شکل ۱۷-۵ نتایج شار قائم معادله مکانیکی یا به عبارت دیگر تنش قائم در ماتریس و ذره را در بلوک هدف نشان می‌دهد. همان طور که مشاهده می‌شود، رفتار تنش قائم در این دو ناحیه به علت تفاوت در ویژگی‌های ماده کاملاً هم در رفتار و هم در اوردن تغییرات، متفاوت بوده است.



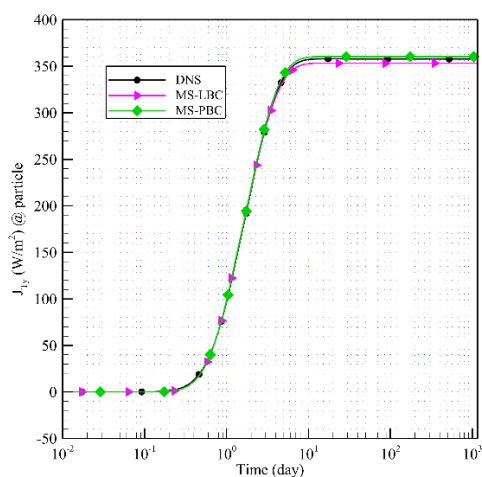
(ب)



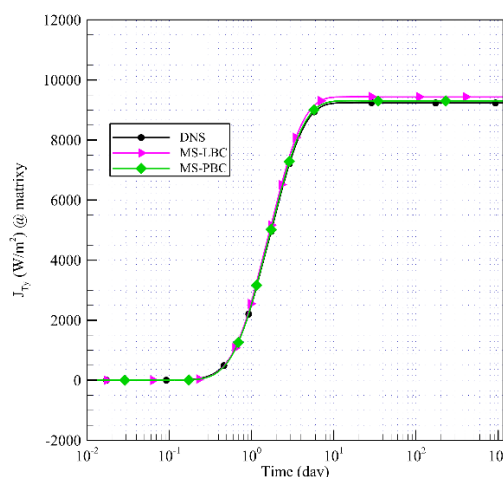
(الف)

شکل ۵-۱۸ مقایسه نتایج مدل DNS و MS برای شار قائم معادله سیال (سرعت قائم سیال) در بلوک هدف برای (الف) ماتریس و (ب) ذره

شکل ۵-۱۸ نتایج مدل DNS و MS برای شار قائم معادله سیال یا به عبارتی سرعت سیال در راستای قائم رسم شده است. همانطور مشاهده می شود سرعت در ماتریس تقریباً ۵۰۰ برابر پارتیکل است که با توجه به اینکه نفوذپذیری پارتیکل بسیار کمتر از ماتریس است، منطقی می باشد.



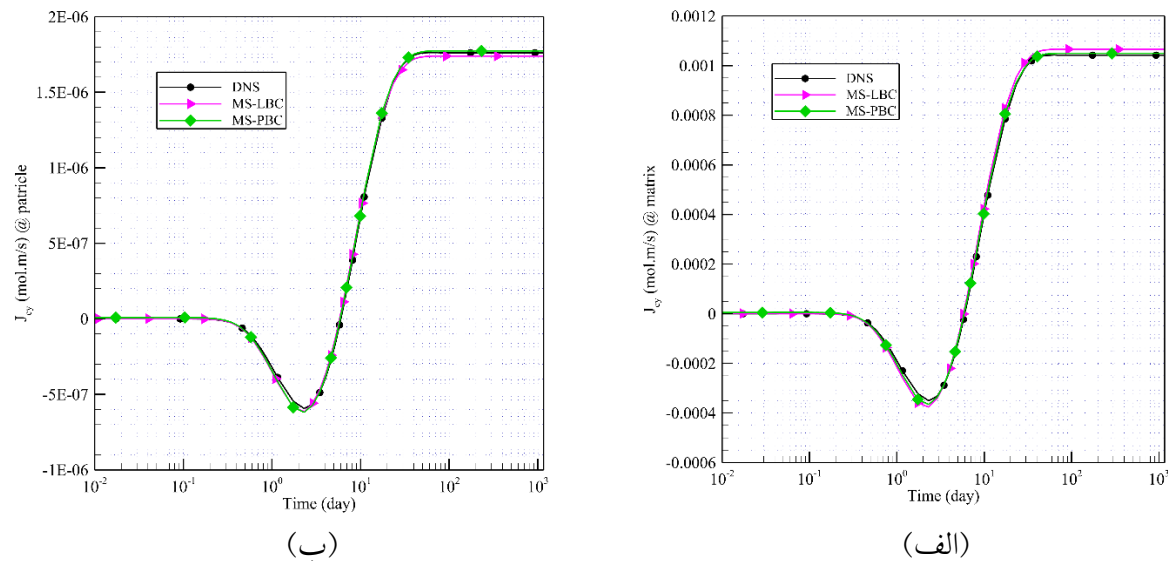
(ب)



(الف)

شکل ۵-۱۹ مقایسه نتایج مدل DNS و MS برای شار قائم معادله بالانس انرژی در بلوک هدف برای (الف) ماتریس و (ب) ذره

در شکل ۱۹-۵ نتایج میانگین حجمی شار قائم معادله بالانس انرژی داخلی ارائه شده است. در اینجا نیز به علت اختلاف در ضریب هدایت گرمایی در دو ناحیه ماتریس و ذره، این دو نمودار در اوردر تغییرات با هم تفاوت دارند.

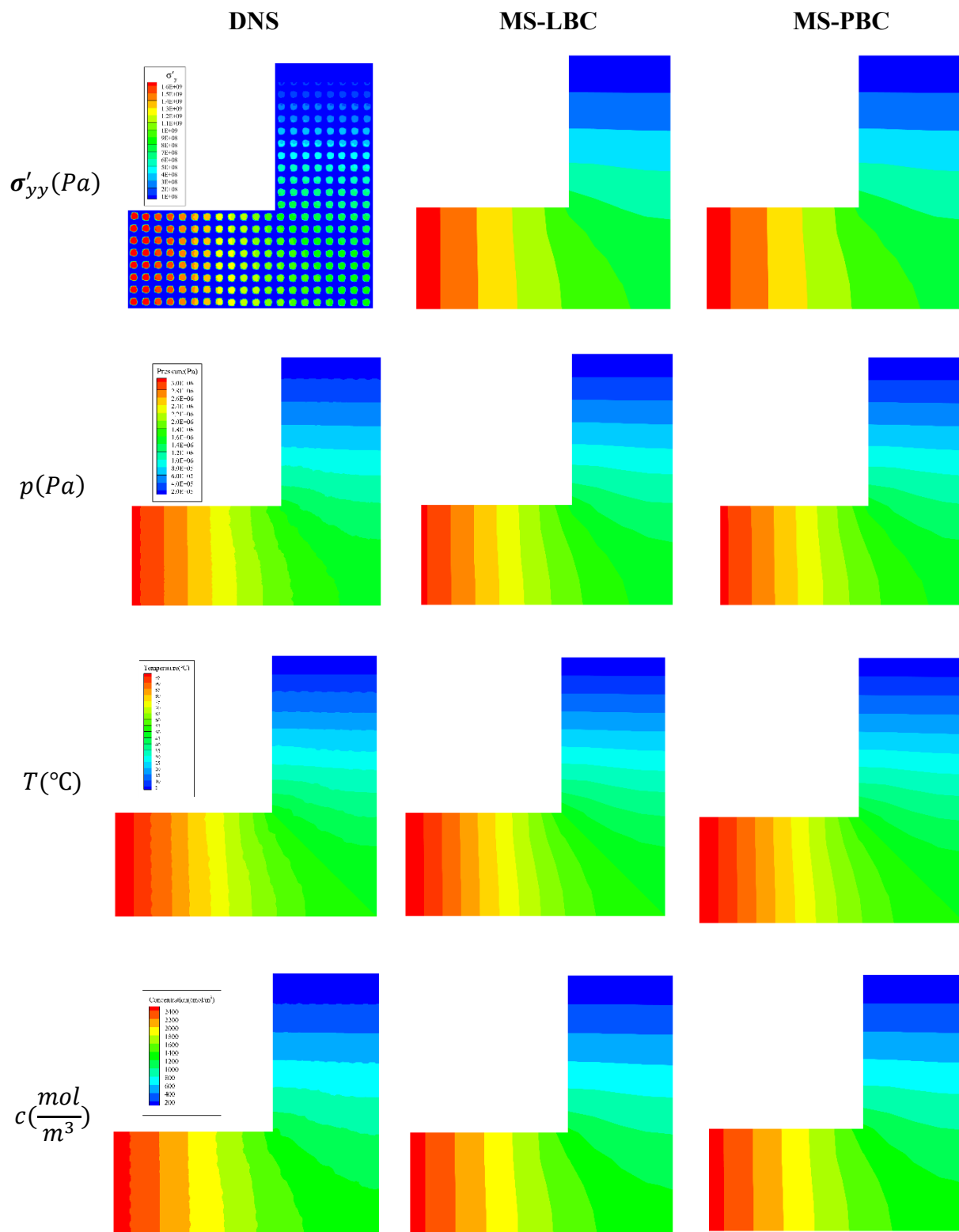


شکل ۲۰-۵ مقایسه نتایج مدل DNS و MS برای شار قائم معادله تعادل غلظت حل شونده در بلوک هدف برای (الف) ماتریس و (ب) ذره

شکل ۲۰-۵ مقایسه نتایج شار قائم معادله تعادل غلظت حل شونده برای ماتریس و ذره را در بلوک هدف نشان می‌دهد. در این نمودار نیز به علت تفاوت در ضریب هدایت شیمیایی و همچنین نفوذپذیری و ضریب بازتاب، شار شیمیایی در پارتیکل بسیار کمتر از ماتریس است.

در نمودارهای ارائه شده در این قسمت، علت افزایش خطا این است که مقادیر شار از مشتق پارامترهای اصلی در دامنه، محاسبه شده‌اند که این عملیات عددی، باعث افزایش خطا شده است. هم چنین در این نمودارها مشاهده شد که تطابق نتایج شرط مرزی تناوبی با حل مستقیم بیشتر است و شرط مرزی تناوبی خطای کمتری نسبت به شرط مرزی خطی دارد.

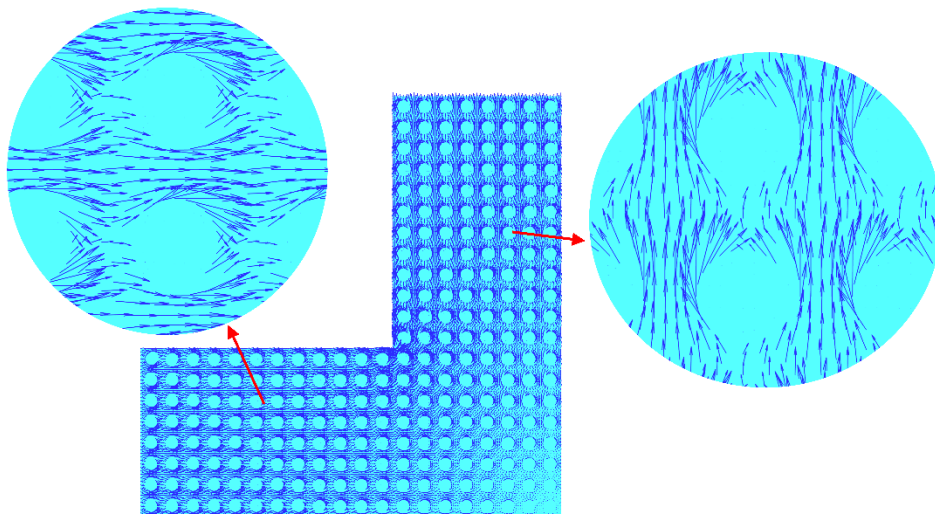
در شکل ۲۱-۵ میدان‌های تنش موثر قائم، فشار، دما و غلظت برای کل دامنه در حالت پایدار نهایی رسم شده است. در حالیکه تغییرات تنش موثر قائم در دامنه در مدل DNS بیانگر اثرات ناهمگنی است این میدان در مدل MS اینگونه نیست چرا که در مدل MS در ماکرو یک دامنه همگن فرض و حل می‌شود. با این حال روند تغییرات تنش موثر قائم در دو مدل یکسان بوده و با هم همخوانی دارد.



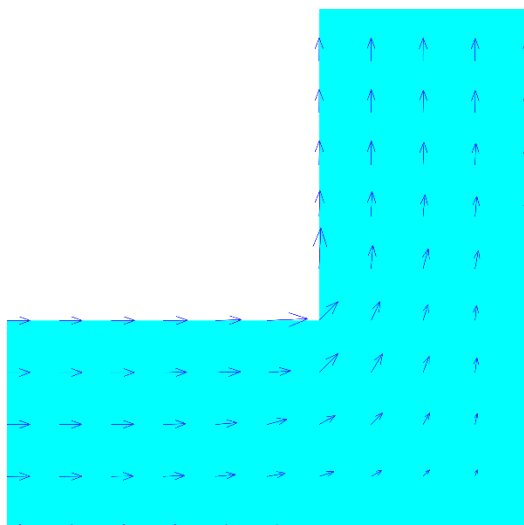
شکل ۲۱-۵ مقایسه نتایج مدل DNS و MS برای میدان تنش موثر قائم، فشار، دما و غلظت در لحظه پایدار

مطابق شکل ۵-۲۱ نتایج میدان فشار، دما و غلظت در دو مدل DNS و MS تطابق مناسبی دارد و خطا در شرط مرزی تناوبی کمتر است.

در شکل ۵-۲۲ میدان سرعت در کل دامنه در دو مدل DNS و MS رسم شده است. در مدل DNS اثرات ناهمگنی در میدان سرعت مشهود است و در مدل MS مطابق با حل یک میدان همگن در مقیاس ماکرو، اثرات ناهمگنی در سرعت در این مقیاس مشاهده نمی‌شود که با فرض روش چندمقیاسی مطابقت دارد.



(الف)



(ب)

شکل ۵-۲۲ بردار سرعت در دامنه مسئله در حالت پایدار نهایی (الف) در مدل DNS، (ب) در مدل MS

در شکل ۲۲-۵(الف) مشاهده می‌شود که به علت نفوذ پذیری بسیار پایین در پارتیکل، سیال کمتری موفق به نفوذ به این ناحیه شده و در برخورد با مرز پارتیکل‌ها، سیال دور می‌زند. هم‌چنین در نتایج هر دو مدل تغییر جهت سرعت در بال‌های افقی و عمودی دامنه مشهود بوده که با توجه به هندسه و شرایط مرزی مسئله، منطقی است.

فصل ۶: نتیجه گیری و ارائه پیشنهادها

۶-۱ نتیجه گیری

در این پژوهش کارایی روش چندمقیاسی در فرآیندهای حرارتی، هیدرومکانیکی و شیمیایی در محیط‌های متخلخل ناهمگن مورد بررسی قرار گرفت. در ابتدا کاربرد و اهمیت این گونه از فرآیندها در زمینه‌های مختلف اعم از محیط‌های بایولوژی، دفن زباله‌های هسته‌ای، بافت‌های زمین و ... مورد توجه قرار گرفت. سپس با ارائه معادلات حاکم بر مسئله پرداخته شد. این معادلات شامل معادله تعادل مکانیکی، تکانه خطی سیال، بالانس انرژی داخلی و تعادل غلظت حل شونده هستند. برای اسکلت جامد فرض الاستیک و تغییر شکل‌های کوچک و برای سیال فرض جریان آرام و در انتقال حرارت و غلظت حل شونده، دو فرآیند همرفت و رسانش در محیط در نظر گرفته شد. تنش کل در این پژوهش شامل تنش موثر مربوط به اسکلت جامد، تنش ناشی از کرنش حرارتی، فشار آب حفره‌ای و فشار اسمزی ناشی از تفاوت غلظت حل شونده در محیط است. قانون دارسی برای سرعت سیال با توجه به اثرات گرادیان غلظت، اصلاح شد.

برای لحاظ اثرات ناهمگنی در محیط از روش همگن‌سازی مرتبه اول که از دسته روش‌های چندمقیاسی است، استفاده شد. در این روش در مقیاس ماکرو یک محیط همگن مدل شده و با المان‌های درشت گسسته‌سازی می‌شود و ناهمگنی‌ها صرفاً در مقیاس میکرو دیده می‌شوند. با حل مسئله مقدار مرزی در مقیاس میکرو، پارامترهای ماکرو محاسبه می‌شوند. ذکر این نکته ضروری است که در این پژوهش ناهمگنی‌های نسبتاً درشت در دامنه لحاظ شد تا بتوان مسئله‌ها را با روش مستقیم حل کرد تا زمینه برای صحت سنجی نتایج چندمقیاسی فراهم باشد. این در صورتی است که با فرض ناهمگنی‌های ریز در مسائل واقعی، عملاً امکان حل مسئله به روش مستقیم وجود ندارد و نیاز به روش‌های چندمقیاسی بسیار ضروری می‌شود.

فرم ضعیف معادلات حاکم در دو مقیاس با استفاده از روش گالرکین استخراج شد. گسسته‌سازی دامنه در هر دو مقیاس با استفاده از روش المان محدود انجام گرفت، گسسته‌سازی زمانی با روش نیومارک اصلاح شده انجام شد و خطی‌سازی معادلات با استفاده از روش نیوتون-رافسون انجام گرفت. نحوه اعمال شرط مرزی خطی و تناوبی، در مقیاس میکرو به طور مفصل مورد بحث قرار گرفت و استخراج روابط ماتریس ژاکوبین ماکرو از پارامترهای میکرو با جزییات کامل مورد بررسی قرار گرفت. سپس روابط به‌دست آمده رو نرم افزار متلب پیاده‌سازی شد.

صحت‌سنجی کد رایانه‌ای روش چندمقیاسی، در چهار مثال، با استفاده از نتایج تحلیل مستقیم و همچنین نتایج پژوهش‌های دیگر انجام شد. در مثال اول فرآیند انتقال حرارت با سازوکار همرفت و رسانش در یک محیط همگن بررسی شد. مشاهده شد که نتایج تحلیل مستقیم و پژوهش مرجع با نتایج تحلیل چند مقیاسی تطابق مناسبی دارند. در این مثال مشاهده شد که با حضور ترم همرفت در جهت رسانش، انتقال حرارت با سرعت بیشتری انجام شده و شیب تغییرات دما در مرز نزدیک به گرادیان فشار، افزایش می‌یابد. در مقابل با اعمال جریان همرفت در جهت مخالف رسانش، این شیب کم شده و تغییرات دما در مرز بالایی کاهش می‌یابد.

در مثال دوم، مسئله تحکیم غیر هم‌دما در یک ستون خاک بررسی شد. در مرز بالایی این ستون نیرو گسترده اعمال شد و همچنین مرز بالایی دارای اختلاف دما با محیط فرض شد. نتایج توزیع دما در چند نقطه با ارتفاع مختلف تطابق خوبی با پژوهش مرجع و مدل DNS داشت. هم چنین نمودار فشار حاکی از این بود که با اعمال نیرو در ابتدای حل، فشار آب حفره‌ای افزایش یافته و به مرور زمان این فشار زهکشی شده و مقادیر، به مقدار اولیه صفر برمی‌گردند. در این نمودار نیز تطابق مناسبی بین نتایج مشاهده شد. همچنین مشاهده شد که اثر کرنش حرارتی باعث افزایش تغییر مکان در ابتدای حل شده و سپس با کامل شدن زهکشی، فشار آب حفره‌ای مثبت، باعث تغییر مکان منفی می‌شود. مانند دیگر نمودارها، در نمودار تغییر مکان نیز تطابق مناسبی وجود داشت.

در مثال سوم یک ستون خاک ناهمگن، مطابق با پژوهش مرجع، مدل شد. در ابتدا برای صحت‌سنجی کد رایانه‌ای تحلیل بدون لحاظ اثرات گرمایی انجام گرفت که نتایج پارامترهای چابجایی، فشار و غلظت تطابق خوبی با پژوهش مرجع داشت. سپس با هدف بررسی اثرات گرمایی، گرادیان حرارت به این مسئله اضافه شد. مشاهده شد که تغییر رفتار فشار و تغییر مکان در نقطه‌ی میانی ستون به دلیل ایجاد کرنش حرارتی بسیار زیاد است به طوری که فشار بر خلاف رفتار قبلی خود، به دلیل ایجاد کرنش حرارتی و تغییر مکان مثبت، ابتدا افزایشی شده و سپس با رسیدن جبهه‌ی فشار اسمزی بر نقطه‌ی میانی ستون، روند کاهشی به خود می‌گیرد. هم چنین تغییر مکان در زمان سریع‌تری شروع به افزایش کرده و سپس با هم‌دما شدن نقطه‌ی میانی و مرز بالایی، این افزایش تغییر مکان متوقف می‌شود. سپس با رسیدن فشار اسمزی، با تغییر مکان روند افزایشی به خود گرفته تا محیط به حالت پایدار نهایی برسد. در این مثال با بررسی نمودارهای ارائه شده و هم چنین با رسم کانتور پارامترهای اصلی مسئله در بلوک میانی مشاهده شد که شرط مرزی تناوبی در شرایط ناهمگن، تطابق بیشتری با مدل DNS دارد.

در مثال چهارم یک محیط ناهمگن L شکل مدل شد تا کارایی کد در یک هندسه‌ی دو بعدی نیز بررسی شود. در این مثال، جریان سیال از مرز سمت چپ دامنه وارد شده و از مرز بالایی خارج می‌شود و همچنین بین این دو مرز گرادیان حرارت و گرادیان غلظت حضور دارد. مشاهده شد که فشار تحت تاثیر جبهه‌ی وردی سیال و هم چنین گرادیان حرارت افزایش می‌یابد و بعد از اینکه کرنش حرارتی به بیشینه مقدار خود رسید، فشار تحت

تأثیر افزایش غلظت و خروج ماده‌ی حل شونده از محیط، کاهش می‌یابد. نتایج برای پارامترهای اصلی مسئله در دو نقطه رسم و با نتایج مدل DNS مقایسه شد که شرط مرزی تناوبی، خطای کمتری را از خود نشان داد. سپس با انتخاب یک بلوک در دامنه مسئله، نتایج میانگین حجمی پارامترهای اصلی در دو ناحیه ماتریس و پارتیکل در مدل DNS و MS با هم مقایسه شد. اولاً به علت پیوستگی این دو ناحیه مشاهده شد که رفتار پارامترهای اصلی در این دو یکسان هستند و دوماً تطابق خوبی بین نتایج دو مدل مشاهده شد. همین مقایسه برای میدان شار چهار معادله حاکم مسئله در این دو ناحیه انجام شد که به علت تفاوت در ویژگی‌های فیزیکی این دو ناحیه، تفاوت در رفتار و مقیاس عددی برای شارها مشاهده شد. با رسم کانتورهای پارامترهای اصلی در دو مدل تطابق مناسب مشاهده شد و همچنین دقت بالاتر شرط مرزی تناوبی در این قسمت نیز مشهود بود. سپس با رسم بردار سرعت در دامنه مسئله مشاهده شد که به علت نفوذ پذیری بسیار کم در ناحیه پارتیکل، سیال این ناحیه را دور زده و به مسیر خود ادامه داده است.

۲-۶ پیشنهادها و تحقیقات پیش‌رو

موضوعات زیر خلاءهای باقی مانده به عنوان پیشنهادها و تحقیقات پیش‌رو ارائه می‌شود:

- ۱- در این تحقیق سیال فشرده ناپذیر فرض شد. میتوان در تحقیقات آینده اثرات فشرده پذیری سیال را لحاظ کرد.
- ۲- در این تحقیق فرض جریان آرام برای سیال در نظر گرفته شد. لحاظ جریان آشفته میتواند کاربردها و شمول این مدل را گسترش دهد.
- ۳- اثرات ناهمگنی هندسی از جمله ترک، در این تحقیق لحاظ نشده است که می‌تواند موضوع مهمی در ادامه این تحقیق باشد.
- ۴- در این تحقیق فقط از دو روش اعمال شرط مرزی خطی و تناوبی در RVE استفاده شد. استفاده از روش‌های دیگر و ارزیابی کارایی و دقت آنها می‌تواند مفید باشد.
- ۵- در این تحقیق فرض تغییر شکل‌های کوچک در نظر گرفته شد که با فرض تغییر شکل‌های بزرگ می‌توان مدل را ارتقا داد.

1. Terzaghi K. Theoretical soil mechanics 1943.
2. Biot MA. General theory of three-dimensional consolidation. Journal of applied physics. 1941;12(2):155–64.
3. Morland L. A simple constitutive theory for a fluid-saturated porous solid. Journal of geophysical research. 1972;77(5):890–900.
4. Goodman M, Cowin S. A continuum theory for granular materials. Archive for Rational Mechanics and Analysis. 1972;44(4):249–66.
5. Bowen RM. Compressible porous media models by use of the theory of mixtures. International Journal of Engineering Science. 1982;20(6):697–735.
6. Whitaker S. Simultaneous heat, mass, and momentum transfer in porous media: a theory of drying. Advances in heat transfer. 13: Elsevier; 1977. p. 119–203.
7. Hassanizadeh M, Gray WG. General conservation equations for multi-phase systems: 2. Mass, momenta, energy, and entropy equations. Advances in water resources. 1979;2:191–203.
8. Hassanizadeh M, Gray WG. General conservation equations for multi-phase systems: 1. Averaging procedure. Advances in water resources. 1979;2:131–44.
9. Hassanizadeh M, Gray WG. General conservation equations for multi-phase systems: 3. Constitutive theory for porous media flow. Advances in water resources. 1980;3(1):25–40.
10. Brownell Jr D, Garg S, Pritchett J. Governing equations for geothermal reservoirs. Water Resources Research. 1977;13(6):929–34.
11. Ertekin T. NUMERICAL SIMULATION OF THE COMPACTION-SUBSIDENCE PHENOMENA IN A RESERVOIR FOR TWO-PHASE NONISOTHERMAL FLOW: The Pennsylvania State University; 1978.
12. Zienkiewicz OC, Chan A, Pastor M, Paul D, Shiomi T. Static and dynamic behaviour of soils: a rational approach to quantitative solutions. I. Fully saturated problems. Proceedings of the Royal Society of London A Mathematical and Physical Sciences. 1990;429(1877):285–309.
13. Lewis R, Schrefler B. The Finite Element Method in the Static and Dynamic Deformation and Consolidation in Porous Media 1998.
14. Heidug W, Wong SW. Hydration swelling of water-absorbing rocks: a constitutive model. International journal for numerical and analytical methods in geomechanics. 1996;20(6):403–30.
15. Yin S, Dusseault MB, Rothenburg L. Coupled THMC modeling of CO₂ injection by finite element methods. Journal of Petroleum Science and Engineering. 2011;80(1):53–60.

- 16.Chang C, Luo G. The Coupled THMC finite-element modeling of hydrothermal systems: Insights into the Jiama porphyry metallogenic system. *Ore Geology Reviews*. 2021;138:104404.
- 17.Zhang R, Winterfeld PH, Yin X, Xiong Y, Wu Y-S. Sequentially coupled THMC model for CO₂ geological sequestration into a 2D heterogeneous saline aquifer. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*. 2015;27:579–615.
- 18.Zhang L, Wu B, Li Q, Hao Q, Zhang H, Nie Y. A fully coupled thermal–hydro–mechanical–chemical model for simulating gas hydrate dissociation. *Applied Mathematical Modelling*. 2024;129:88–111.
- 19.Zhou R, Bai B, Cai G, Chen X. Thermo-Hydro-Mechanic-Chemical coupling model for hydrate-bearing sediment within a unified granular thermodynamic theory. *Computers and Geotechnics*. 2024;167:106057.
- 20.Tao J, Yang X-G, Ding P-P, Li X-L, Zhou J-W, Lu G-D. A fully coupled thermo-hydro-mechanical-chemical model for cemented backfill application in geothermal conditions. *Engineering Geology*. 2022;302:106643.
- 21.Kanfar MF, Chen Z, Rahman S. Analyzing wellbore stability in chemically-active anisotropic formations under thermal, hydraulic, mechanical and chemical loadings. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*. 2017;41:93–111.
- 22.Cui Z, Feng B, Duan X, Cao Y, Yan Y. Numerical analysis on the effects of hydrothermal development on the permeability of porous reservoir based on coupled THMC modeling. *Geoenery Science and Engineering*. 2024;240:213048.
- 23.Seetharam S, Thomas H, Cleall P. Coupled thermo/hydro/chemical/mechanical model for unsaturated soils—Numerical algorithm. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*. 2007;70:1480–511.
- 24.Zhou X, Zhang Y. Implementation and verification of a user-defined element (UEL) for coupled thermal-hydraulic-mechanical-chemical (THMC) processes in saturated geological media. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*. 2023;47(11):2153–90.
- 25.Chang KW, Nole M, Stein ER. Reduced-order modeling of near-field THMC coupled processes for nuclear waste repositories in shale. *Computers and Geotechnics*. 2021;138:104326.
- 26.Khoei A, Mohammadnejad T. Numerical modeling of multiphase fluid flow in deforming porous media: A comparison between two-and three-phase models for seismic analysis of earth and rockfill dams. *Computers and Geotechnics*. 2011;38(2):142–66.
- 27.Mortazavi S, Khoei A. Coupled Thermo-Hydro-Mechanical and Chemical (THMC) simulation of silicate rocks with an enriched–FEM model. *Computers and Geotechnics*. 2024;173:106575.

- 28.Chen X, Wang M, Hicks MA, Thomas HR. A new matrix for multiphase couplings in a membrane porous medium. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*. 2018;42(10):1144–53.
- 29.Chen X, Hicks MA. Unsaturated hydro-mechanical-chemo coupled constitutive model with consideration of osmotic flow. *Computers and Geotechnics*. 2013;54:94–103.
- 30.Ma Y, Chen X, Hosking LJ, Yu H-S, Thomas HR. THMC constitutive model for membrane geomaterials based on Mixture Coupling Theory. *International Journal of Engineering Science*. 2022;171:103605.
- 31.Fish J, Shek K, Pandheeradi M, Shephard MS. Computational plasticity for composite structures based on mathematical homogenization: Theory and practice. *Computer methods in applied mechanics and engineering*. 1997;148(1-2):53–73.
- 32.Fish J, Fan R. Mathematical homogenization of nonperiodic heterogeneous media subjected to large deformation transient loading. *International Journal for numerical methods in engineering*. 2008;76(7):1044–64.
- 33.Temizer I. On the asymptotic expansion treatment of two-scale finite thermoelasticity. *International Journal of Engineering Science*. 2012;53:74–84.
- 34.Yang Z, Cui J, Sun Y, Liang J, Yang Z. Multiscale analysis method for thermo-mechanical performance of periodic porous materials with interior surface radiation. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*. 2016;105(5):323–50.
- 35.Yang Z, Sun Y, Liu Y, Cui J. Prediction on nonlinear mechanical performance of random particulate composites by a statistical second-order reduced multiscale approach. *Acta Mechanica Sinica*. 2021;37(4):570–88.
- 36.Ameen MM, Peerlings RHJ, Geers MGD. A quantitative assessment of the scale separation limits of classical and higher-order asymptotic homogenization. *European Journal of Mechanics - A/Solids*. 2018;71:89–100.
- 37.Bensoussan A, Lions J-L, Papanicolaou G. *Asymptotic analysis for periodic structures*: American Mathematical Soc.; 2011.
- 38.Geers MGD, Kouznetsova VG, Brekelmans WAM. Multi-scale computational homogenization: Trends and challenges. *Journal of Computational and Applied Mathematics*. 2010;234(7):2175–82.
- 39.Kouznetsova V, Brekelmans W, Baaijens F. An approach to micro-macro modeling of heterogeneous materials. *Computational mechanics*. 2001;27(1):37–48.
- 40.Matsubara S, Nishi SN, Terada K. On the treatments of heterogeneities and periodic boundary conditions for isogeometric homogenization analysis. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*. 2017;109(11):1523–48.
- 41.Miehe C, Bayreuther C. On multiscale FE analyses of heterogeneous structures: from homogenization to multigrid solvers. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*. 2007;71(10):1135–80.

42. Miehe C, Schröder J, Schotte J. Computational homogenization analysis in finite plasticity simulation of texture development in polycrystalline materials. *Computer methods in applied mechanics and engineering*. 1999;171(3-4):387–418.
43. Nguyen VP, Lloberas-Valls O, Stroeve M, Sluys LJ. Computational homogenization for multiscale crack modeling. Implementational and computational aspects. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*. 2012;89(2):192–226.
44. Perić D, de Souza Neto E, Feijóo R, Partovi M, Molina AC. On micro-to-macro transitions for multi-scale analysis of non-linear heterogeneous materials: unified variational basis and finite element implementation. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*. 2011;87(1-5):149–70.
45. Svenning E, Larsson F, Fagerström M. A two-scale modeling framework for strain localization in solids: XFEM procedures and computational aspects. *Computers & Structures*. 2019;211:43–54.
46. Svenning E, Fagerström M, Larsson F. On computational homogenization of microscale crack propagation. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*. 2016;108(1):76–90.
47. Khoei AR, Saadat MA. A nonlocal computational homogenization of softening quasi-brittle materials. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*. 2019;119(8):712–36.
48. Su F, Larsson F, Runesson K. Computational homogenization of coupled consolidation problems in micro-heterogeneous porous media. *International journal for numerical methods in engineering*. 2011;88(11):1198–218.
49. Miehe C. Computational micro-to-macro transitions for discretized micro-structures of heterogeneous materials at finite strains based on the minimization of averaged incremental energy. *Computer methods in applied mechanics and engineering*. 2003;192(5-6):559–91.
50. Khoei A, Saeedmonir S. Computational homogenization of fully coupled multiphase flow in deformable porous media. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. 2021;376:113660.
51. Aboustit B, Advani S, Lee J. Variational principles and finite element simulations for thermo-elastic consolidation. *International journal for numerical and analytical methods in geomechanics*. 1985;9(1):49–69.
52. Saeedmonir S, Adeli M, Khoei A. A multiscale approach in modeling of chemically reactive porous media. *Computers and Geotechnics*. 2024;165:105818.

Abstract

In recent years, the analysis of multiphysical media has attracted significant attention due to its wide range of applications in engineering sciences, including biological tissues, carbon dioxide storage, swelling analysis in reactive soils, nuclear waste disposal, and many other fields. In many practical problems, considering the coupled effects of mechanical, hydraulic, thermal, and chemical processes is unavoidable, depending on the driving forces and the underlying physics of the problem. On the other hand, assuming homogeneity in multiphysical media leads to unacceptable errors in the numerical results. Directly incorporating heterogeneity into numerical analyses requires considerable computational costs and, particularly in the finite element method, necessitates the use of extremely fine meshes, which is often computationally prohibitive or very expensive with available computing resources.

In the present study, the effects of heterogeneity are incorporated into the analysis through a multiscale modeling framework. By employing first-order homogenization, the influence of heterogeneity is first captured at the microscale, where the fully coupled thermo-hydro-mechanical-chemical (THMC) governing equations are solved in weak form. Subsequently, macroscopic parameters are obtained using averaging principles. Energy consistency between the two scales is ensured through the generalized Hill–Mandel principle. Spatial discretization is performed using the finite element method, while time discretization is carried out using the generalized Newmark scheme. After discretization, the governing equations are linearized using the Newton–Raphson method. In the numerical examples presented in this study, the efficiency and accuracy of the proposed multiscale approach are evaluated by varying the macroscopic mesh size and comparing the results with those obtained from direct numerical simulations.

Keywords: Porous Media, Finite Element Method, Multiscale Modeling, Reactive Soils



University of Tehran
College of Engineering
School of Civil Engineering



Multi-Scale Modelling of Thermo-Hydro-Mechanical-Chemical Processes in Heterogenous Porous Media

A thesis submitted to the Graduate Studies Office in partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science in Civil Engineering

By:
Alireza Mahmoudioun

Supervisor:
Dr. Saeed Saeedmonir

Advisor:
Prof. Soheil Mohammadi

September. 2025

