

УДК 519.6:539.3

РОЗПАРАЛЕЛЕННЯ АЛГОРИТМУ ЧИСЕЛЬНОГО ДОСЛІДЖЕННЯ ЗАДАЧІ ГІПЕРПРУЖНОГО ДЕФОРМУВАННЯ

І. Дияк, М. Копитко, А. Стягар

*Львівський національний університет імені Івана Франка,
вул. Університетська, 1, Львів, 79000,
e-mail: ivan.dyjak@lnu.edu.ua*

Для дослідження двовимірних задач гіперпружного деформування використовується ізопараметричний метод скінченних елементів з біквадратичною апроксимацією на чотирикутних елементах. Лінеаризацію варіаційного рівняння виконано на підставі методу Ньютона-Рафсона. Записано ітераційний алгоритм на основі покрокового навантаження та ітераційного процесу методу Ньютона-Рафсона. Розроблений алгоритм реалізовано у вигляді програмного комплексу мовою C++ з використанням бібліотеки функцій MPI.

Ключові слова: гіперпружне деформування, метод скінченних елементів, метод Ньютона-Рафсона, паралелізація обчислень.

1. ВСТУП

Гіперпружні матеріали є важливими елементами в конструкціях багатьох виробів і широко використовуються на практиці: від амортизаторів у машинобудуванні до імплантів у медицині. Створюються нові полімерні матеріали та розробляються моделі деформування живих тканин [4,7,9,12]. Це зумовлено тим, що у цих випадках допускаються великі деформації, зберігаючи пружні властивості. Дослідженню їхніх властивостей та розробці різних методів розрахунку реальних конструкцій присвячено багато досліджень [10,11]. З погляду механіки твердого деформівного тіла, йдеться про нелінійно пружні середовища, під час деформування яких треба враховувати геометричну нелінійність у рамках скінченних деформацій.

У більшості випадків для розв'язування таких задач використовується метод скінченних елементів (МСЕ) [5,9,11,13], який дає змогу створювати моделі довільної геометричної складності зі заданою точністю. Це зумовлює появу розрахункових задач великої та надвеликої розмірності, тому доцільно є застосовувати паралельні обчислення і кластери.

Відомо, що найзатратнішим (за часом обчислень і за використаною пам'яттю) елементом розв'язування задач методом скінченних елементів є розв'язування систем лінійних алгебричних рівнянь (СЛАР), порядок яких у двовимірному випадку становить сотні тисяч рівнянь. Тому ефективність алгоритму розв'язування задач визначається розробкою високопродуктивного методу паралельного розв'язування СЛАР. Вирішенню цієї проблеми присвячена значна кількість досліджень, в яких виконується та чи інша модифікація прямих чи ітераційних методів паралельного розв'язування СЛАР. Ми розробили алгоритм розв'язування СЛАР на основі паралельного методу спряжених градієнтів (МСГ).

Варто зауважити, що лінійна задача розв'язується у вихідній системі координат від початку до кінця. Оскільки як основне варіаційне рівняння для розв'язування нелінійної задачі вибрано варіаційне рівняння принципу віртуальних

потужностей, інтегрування в якому виконується за об'ємом в актуальному (деформованому) стані, то необхідно відзначити специфіку реалізації алгоритму МСЕ саме для такого випадку. Використовується підхід, в якому сітка МСЕ будується тільки для початкової геометрії, але під час деформування вузли та елементи назавжди прикріплені до частинок матеріалу, з якими вони були спочатку пов'язані. Використання ізопараметричних скінченних елементів, специфікою яких є подання координат і шуканих функцій тими самими функціями форми (визначеними на стандартному квадраті) [3] дає змогу, маючи вузлові значення в початковому або деформованому стані, зображати залежність шуканих функцій від координат у початковому або деформованому стані. Побудова ж алгоритму розв'язування задачі гіперпружного деформування з використанням інших типів скінченних елементів досить проблематична.

Лінеаризацію варіаційного рівняння виконано на підставі методу Ньютона-Рафсона. Записано ітераційний алгоритм на підставі покрокового навантаження та ітераційного процесу методу Ньютона-Рафсона. Розроблений алгоритм реалізований у вигляді програмного комплексу мовою C++ з використанням бібліотеки функцій MPI, що допомагає розпаралелювати обчислювання [8]. Числові експерименти проводили на кластері Львівського національного університету імені Івана Франка.

2. ФОРМУЛЮВАННЯ ЗАДАЧІ ДЕФОРМУВАННЯ ГІПЕРПРУЖНИХ МАТЕРІАЛІВ

2.1. КІНЕМАТИКА СКІНЧЕННИХ ДЕФОРМАЦІЙ

Теорія деформації вивчає механічну зміну взаємного розміщення точок суцільного середовища, яка приводить до зміни форми та розміру тіла. Для опису деформації тіла використовують відносні видовження та зсуви. Вони пов'язані між собою певними диференціальними залежностями, які виражають умову того, що за умови малих переміщень, деформації визначаються тензором малих деформацій. Для випадку великих переміщень визначаються тензори скінченних деформацій: E_{ij} Коші-Гріна, правий C_{ij} і лівий B_{ij} тензори Коші-Гріна [1, 6].

У глобальній нерухомій системі координат з ортами $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3$ (рис. 1) розглянемо положення досліджуваного деформівного тіла, які реалізуються у моменти часу t_0 і t . У початковий момент часу тіло займає об'єм V_0 і має густину ρ_0 . Це положення називаємо початковим або недеформованим станом. Через $\vec{r} = x_i \vec{e}_i$ позначимо радіус-вектор довільної матеріальної точки M у недеформованому стані. У біжучий момент часу тіло займає об'єм V і має густину ρ . Цей стан називаємо актуальним або деформованим. Через $\vec{R} = y_i(x_1, x_2, x_3) \vec{e}_i$ позначимо радіус-вектор цієї ж точки M' у деформованому стані (рис. 1).

Вектор переміщень визначається як

$$\mathbf{u} = \vec{R} - \vec{r} = u_i(x_1, x_2, x_3) \vec{e}_i,$$

вектор швидкості як

$$\mathbf{v} = \dot{\mathbf{u}} = \dot{\vec{R}} = v_i(x_1, x_2, x_3, t) \vec{e}_i.$$

Введемо оператори Гамільтона стосовно початкової геометрії

$$\nabla_x = \vec{e}_j \frac{\partial}{\partial x_j}$$

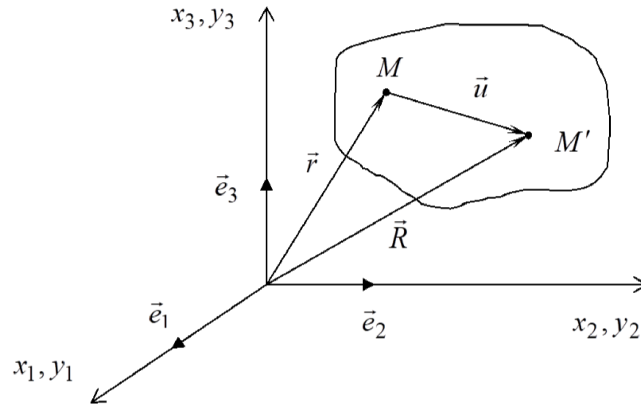


Рис. 1. Вектори точки тіла до і після деформації

і актуального (деформованого) стану

$$\nabla_y = \bar{e}_j \frac{\partial}{\partial y_j}.$$

Базовим тензором, який відіграє ключову роль у кінематиці скінченних деформацій, є тензор градієнта деформації

$$(F) = (\nabla_x \vec{R})^T = (\vec{R} \nabla_x) = \frac{\partial y_i}{\partial x_j} (\bar{e}_i \bar{e}_j). \quad (1)$$

Градієнт деформації містить повну інформацію про локальне зміщення і повороти тіла. Через нього можна записати співвідношення між початковим і кінцевим об'ємом тіла

$$\frac{dV}{dV_0} = \frac{\rho_0}{\rho} = \det(F) = J. \quad (2)$$

У випадку $J = 1$ маємо нестисливе тіло.

Через градієнт деформації визначаються тензори деформації: правий тензор Коші-Гріна

$$(C) = (F)^T (F) = \frac{\partial y_m}{\partial x_i} \frac{\partial y_m}{\partial x_j} (\bar{e}_i \bar{e}_j) = C_{ij} (\bar{e}_i \bar{e}_j); \quad (3)$$

лівий тензор Коші-Гріна

$$(B) = (F)(F)^T = \frac{\partial y_i}{\partial x_m} \frac{\partial y_j}{\partial x_m} (\bar{e}_i \bar{e}_j) = B_{ij} (\bar{e}_i \bar{e}_j); \quad (4)$$

тензор деформації Коші-Гріна

$$(E) = \frac{1}{2} [(F)^T (F) - (I)] = \frac{1}{2} [(C) - (I)] = E_{ij} (\bar{e}_i \bar{e}_j), \quad (5)$$

де компоненти E_{ij} набувають вигляду

$$E_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \frac{\partial u_k}{\partial x_j} \right);$$

просторовий градієнт швидкості

$$(h) = \left(\nabla_y \dot{R} \right)^T = \frac{\partial v_i}{\partial y_j} (\vec{e}_i \vec{e}_j) = \left(\dot{F} \right) \cdot (F^{-1}); \quad (6)$$

тензор деформації швидкості

$$(d) = \frac{1}{2} [(h) + (h)^T] = \frac{1}{2} \left[\left(\dot{F} \right) \cdot (F^{-1}) + (F^{-1})^T \cdot \left(\dot{F} \right)^T \right] = d_{ij} (\vec{e}_i \vec{e}_j). \quad (7)$$

2.2. ФІЗИЧНІ СПІВВІДНОШЕННЯ ДЛЯ ГІПЕРПРУЖНИХ ТІЛ

У літературі відомі три основні моделі гіперпружних матеріалів: неогукова, Муні-Рівліна, Мурнагана. Для неогуків матеріалу функцію потенціальної енергії можна записати у вигляді [6]

$$\Psi = \frac{\mu}{2} (I_{1C} - 3) - \mu \ln J + \frac{\lambda}{2} (\ln J)^2, \quad (8)$$

де μ, λ – коефіцієнти матеріалу; $I_{1C} = \text{tr}(C) = C_{11} + C_{22} + C_{33}$. Для цього матеріалу тензор напружень Коші обчислюється за формулою

$$(\Sigma) = \frac{\mu}{J} (B - I) + \frac{\lambda}{J} (\ln J) I. \quad (9)$$

2.3. ВАРІАЦІЙНЕ РІВНЯННЯ

Основними рівняннями, які використовують для числової реалізації, є варіаційні рівняння принципу віртуальних переміщень і принципу віртуальних потужностей. Перше з них має вигляд [5, 6]

$$\delta U = \delta A, \quad (10)$$

де δU – робота внутрішніх напружень на можливих деформаціях, яка для пружних матеріалів є варіацією потенціальної енергії деформації; δA – робота зовнішніх масових і поверхневих сил. Вираз для δU можна подати у різних виглядах, а саме

$$\begin{aligned} \delta U &= \frac{1}{2} \int_{V_0} (S) : (\delta C) dV_0 = \int_{V_0} (S) : (\delta E) dV_0 = \\ &= \int_{V_0} (P) : (\delta F) dV_0 = \int_V (\Sigma) : (\delta d) dV. \end{aligned} \quad (11)$$

У формулі (11) використано тензори напружень: симетричний тензор напружень Коші (Σ) , який є тензором істинних напружень; тензор напружень Лагранжа (транспонований до нього називається першим тензором Піоли-Кірхгофа)

$$(P) = J (F^{-1}) \cdot (\Sigma),$$

другий (симетричний) тензор Піоли-Кірхгофа

$$(S) = J (F^{-1}) \cdot (\Sigma) \cdot (F^{-1})^T.$$

Роботу зовнішніх сил запишемо у вигляді

$$\delta A = \int_V \mathbf{f} \cdot \delta \mathbf{v} dV + \int_{S^\sigma} \mathbf{t} \cdot \delta \mathbf{v} dS,$$

де \mathbf{f} – масові сили; \mathbf{t} – поверхневі сили, задані на частині границі Γ_q . На іншій частині границі Γ_u задані кінематичні граничні умови і для неї $\delta \mathbf{v} = 0$. Як основне варіаційне рівняння використовується варіаційне рівняння принципу віртуальних потужностей [1]

$$\delta W = \int_V (\Sigma) : (\delta d) dV - \int_V \mathbf{f} \cdot \delta \mathbf{v} dV - \int_{S^\sigma} \mathbf{t} \cdot \delta \mathbf{v} dS = 0. \quad (12)$$

3. ЧИСЕЛЬНА СХЕМА НА ОСНОВІ МЕТОДУ СКІНЧЕННИХ ЕЛЕМЕНТІВ

3.1. АПРОКСИМАЦІЯ КІНЕМАТИЧНИХ СПІВВІДНОШЕНЬ З ВИКОРИСТАННЯМ КВАДРАТИЧНИХ ІЗОПАРАМЕТРИЧНИХ СКІНЧЕННИХ ЕЛЕМЕНТІВ

Для розв'язування задачі використовуються скінченні елементи. Сітка МСЕ будується в початковій конфігурації. Варто зауважити, що під час деформування вузли та елементи назавжди прикріплені до частинок матеріалу, з якими вони були спочатку пов'язані.

На скінченному елементі e для апроксимації координат початкової конфігурації використовуються формули

$$x_i = \sum_{a=1}^8 N_a(\xi_1, \xi_2) x_i^a. \quad (13)$$

Тут $N_a(\xi_1, \xi_2)$ – функції форми, x_i^a – координати вузлів. Координати в час t у термінах поточного (деформованого) положення вузлів $y_i^a(t)$ також подаються через ті ж самі функції форми

$$y_i = \sum_{a=1}^8 N_a(\xi_1, \xi_2) y_i^a. \quad (14)$$

Диференціюючи рівняння (14) за часом, отримуємо інтерполяцію компонент вектора швидкості і варіації швидкості

$$v_i = \sum_{a=1}^8 N_a v_i^a, \quad \delta v_i = \sum_{a=1}^8 N_a \delta v_i^a. \quad (15)$$

Тензор градієнта деформації отримується шляхом диференціювання (14) за координатами початкового стану x_i

$$F = \sum_{a=1}^8 y^a \otimes \nabla_0 N_a, \quad (16)$$

де $\nabla_0 N_a = \frac{\partial N_a}{\partial x}$ можна перетворити до $\nabla_\xi N_a = \frac{\partial N_a}{\partial \xi}$ стандартно

$$\frac{\partial N_a}{\partial x} = \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \right)^{-T} \frac{\partial N_a}{\partial \xi}, \quad \frac{\partial x}{\partial \xi} = \sum_{a=1}^8 x^a \otimes \nabla_\xi N_a.$$

Використовуючи формулу (15), можна отримати правий і лівий тензори деформації Коші-Гріна, тензор деформації швидкості, його варіації.

3.2. ДИСКРЕТИЗАЦІЯ ВАРІАЦІЙНОГО РІВНЯННЯ

Використовуючи формули (7), (15), рівняння (12) на скінченному елементі e для вузла a запишеться як

$$\begin{aligned} \delta W^e(\phi, N_a \delta v_a) &= \int_{V^e} (\Sigma) : (\delta v_a \otimes \nabla N_a) dV - \\ &- \int_{V^e} \mathbf{f} \cdot (N_a \delta v_a) dV - \int_{S^\sigma} \mathbf{t} \cdot (N_a \delta v_a) dS. \end{aligned} \quad (17)$$

Враховуючи, що $\Sigma : (u \otimes v) = u \cdot \Sigma v$, рівняння (17) перепишеться у вигляді

$$\delta W^e(\phi, N_a \delta v_a) = \delta v_a \cdot \left(\int_{V^e} \Sigma \nabla N_a dV - \int_{V^e} N_a \mathbf{f} dV - \int_{S^\sigma} N_a \mathbf{t} dS \right). \quad (18)$$

Віртуальну роботу на елементі e для вузла a можна записати у термінах внутрішньої і зовнішньої вузлової сили T_a^e і F_a^e як

$$\delta W^e(\phi, N_a \delta v_a) = \delta v_a \cdot (T_a^e - F_a^e). \quad (19)$$

Загальний внесок у віртуальну роботу з усіх вузлів N набуде вигляду

$$\delta W(\phi, \delta v) = \sum_{a=1}^N \delta W(\phi, N_a \delta v_a) = \sum_{a=1}^N \delta v_a \cdot (T_a - F_a) = 0. \quad (20)$$

Оскільки (20) виконується для довільного δv_a , то отримуємо

$$R_a = T_a - F_a = 0, \quad a = 1, 2, \dots, N. \quad (21)$$

3.3. ЛІНЕАРИЗАЦІЯ ВАРІАЦІЙНОГО РІВНЯННЯ

Рівняння (21) є нелінійними стосовно невідомих вузлових значень y_i . Для їх розв'язання використовується ітераційна процедура методу Ньютона-Рафсона. Процедура така. Збільшуючи пробний розв'язок ϕ на деякий приріст $u(\phi + u)$, запишемо

$$\delta W(\varphi, \delta v) + D\delta W(\varphi, \delta v)[u] = 0, \quad (22)$$

де $D\delta W(\varphi, \delta v)[u]$ -похідна від віртуальної роботи по ϕ в напрямі u . Її можна записати через похідні від внутрішньої та зовнішньої робіт

$$D\delta W(\varphi, \delta v)[u] = D\delta W_{\text{int}}(\varphi, \delta v)[u] - D\delta W_{\text{ext}}(\varphi, \delta v)[u]. \quad (23)$$

Тут похідна від внутрішньої роботи набуває вигляду

$$\begin{aligned} D\delta W_{\text{int}}(\varphi, \delta v)[u] &= D\delta W_C(\varphi, \delta v)[u] + D\delta W_\sigma(\varphi, \delta v)[u] = \\ &= \int_V \delta d : C : \varepsilon dV + \int_V \Sigma : [(\nabla u)^T \nabla v] dV. \end{aligned} \quad (24)$$

Лінеаризацію рівняння (19) у напрямі $N_b u_b$, враховуючи, що $N_a \delta v_a$ залишається постійним, можна записати як

$$\begin{aligned} D\delta W^e(\phi, N_a \delta v_a)[N_b u_b] &= D(\delta v_a \cdot (T_a^e - F_a^e))[N_b u_b] = \\ &= \delta v_a \cdot D(T_a^e - F_a^e)[N_b u_b] = \delta v_a \cdot K_{ab}^e u_b. \end{aligned} \quad (25)$$

Взаємозв'язок між змінами сил у вузлі a як наслідок змін у поточній позиції вузла b надається матрицею дотичної жорсткості K_{ab}^e .

$$K_{ab}^e = K_{C,ab}^e + K_{\sigma,ab}^e - K_{p,ab}^e, \quad (26)$$

де компоненти матриці дотичної жорсткості, яка зв'язує вузол a з вузлом b на елементі e , можна записати у вигляді

$$[K_{C,ab}^e]_{ij} = \int_{V^e} \sum_{k,l=1}^3 \frac{\partial N_a}{\partial y_k} C_{ijkl}^{\text{sym}} \frac{\partial N_b}{\partial y_l} dV, \quad i, j = 1, 2, 3, \quad (27)$$

$$[K_{\sigma,ab}^e]_{ij} = \int_{V^e} \sum_{k,l=1}^3 \frac{\partial N_a}{\partial y_k} \sum_{kl} \frac{\partial N_b}{\partial y_l} \delta_{ij} dV, \quad i, j = 1, 2, 3, \quad (28)$$

$$[K_{p,ab}^e]_{ij} = \sum_{k=1}^3 \varepsilon_{ijk} [k_{p,ab}^e]_k. \quad (29)$$

Підсумувавши матриці (26) по всіх елементах сітки і ввівши вектор вузлових переміщень $\mathbf{u}^T = [\mathbf{u}_1^T, \mathbf{u}_2^T, \dots, \mathbf{u}_n^T]$, можемо записати

$$D\delta W(\phi, \delta v)[u] = \delta v^T \mathbf{K} \mathbf{u}, \quad (30)$$

де \mathbf{K} – матриця дотичної жорсткості.

3.4. АЛГОРИТМ РОЗВ'ЯЗУВАННЯ ЗАДАЧІ З ВИКОРИСТАННЯМ ПАРАЛЕЛЬНИХ ОБЧИСЛЕНЬ

Розглянемо двовимірну область Ω з границею Γ , яка є перерізом деформівного твердого гіперпружного тіла (рис. 2).

Побудова алгоритму розв'язування задачі МСЕ з використанням n_p процесів така. Область Ω подається як об'єднання n_p підобластей (рис. 2), тобто $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2 \cup \dots \cup \Omega_{n_p}$, $\Omega_i \cap \Omega_j = \emptyset$, $i \neq j$, $i, j = 1, n_p$. У кожній підобласті Ω_i будується сітка МСЕ з використанням i -го процесу. Кожна підобласть Ω_i містить N_i вузлів і M_i елементів. Загальна кількість елементів в області Ω становить $M = \sum_{i=1}^{n_p} M_i$ і вузлів $N < \sum_{i=1}^{n_p} N_i$.

Позначимо через \tilde{A}_i матрицю жорсткості (для лінійної задачі), \tilde{x}_i – вектор невідомих, \tilde{b}_i – вектор правих частин підобласті Ω_i без вкладів з сусідніх підобластей,

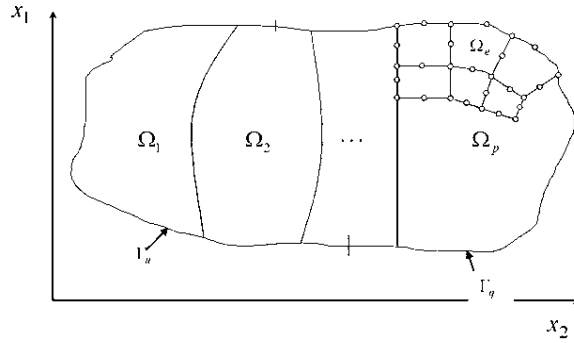


Рис. 2. Область розв'язування задачі

а через $\bar{A}_i, \bar{x}_i, \bar{b}_i$, ті ж величини, але з вкладками з сусідніх підобластей у глобально розподіленому форматі. Також допустимо, що нумерація невідомих в підобласті виконана від 1 до n_i . Глобальну матрицю жорсткості \mathbf{A} можна подати, використовуючи булеву матрицю $C_i \in Z^{n_i \times N}$ (матрицю зв'язності), формулою

$$\mathbf{A} = \sum_{i=1}^{n_p} C_i^T \tilde{A}_i C_i. \quad (31)$$

Аналогічно глобальні вектори \mathbf{x} і \mathbf{b} можна подати через глобально розподілені вектори $\bar{\mathbf{x}}_i$ і $\bar{\mathbf{b}}_i$

$$\bar{\mathbf{x}}_i = C_i \mathbf{x}, \quad \bar{\mathbf{b}}_i = C_i \mathbf{b}, \quad (32)$$

або через локально розподілені вектори $\tilde{\mathbf{x}}_i$ і $\tilde{\mathbf{b}}_i$

$$\mathbf{x} = \sum_{i=1}^{n_p} C_i^T \tilde{\mathbf{x}}_i, \quad \mathbf{b} = \sum_{i=1}^{n_p} C_i^T \tilde{\mathbf{b}}_i. \quad (33)$$

Відповідно, локально розподілені вектори $\tilde{\mathbf{x}}_i$ і $\tilde{\mathbf{b}}_i$, використовуючи формули (32), (33), можна перетворити у глобально розподілені вектори $\bar{\mathbf{x}}_i$ і $\bar{\mathbf{b}}_i$ за формулами

$$\bar{\mathbf{x}}_i = C_i \sum_{i=1}^{n_p} C_i^T \tilde{\mathbf{x}}_i, \quad \bar{\mathbf{b}}_i = C_i \sum_{i=1}^{n_p} C_i^T \tilde{\mathbf{b}}_i. \quad (34)$$

Треба зазначити, що саме обчислення за формулами (34) потребують комунікації між процесами, тобто виконання обміну між процесами частинами векторів $\tilde{\mathbf{x}}_i$ і $\tilde{\mathbf{b}}_i$, які необхідні для обчислення $\bar{\mathbf{x}}_i$ і $\bar{\mathbf{b}}_i$. Позначимо процедуру перетворення $\tilde{\mathbf{x}}_i$ у $\bar{\mathbf{x}}_i$ і $\tilde{\mathbf{b}}_i$ у $\bar{\mathbf{b}}_i$ як

$$\bar{\mathbf{x}}_i \equiv \sum_{\rightleftharpoons}^{\partial \Omega_i} \tilde{\mathbf{x}}_i, \quad \bar{\mathbf{b}}_i \equiv \sum_{\rightleftharpoons}^{\partial \Omega_i} \tilde{\mathbf{b}}_i. \quad (35)$$

Детально алгоритм розв'язування системи лінійних рівнянь на підставі паралельного методу спряжених градієнтів наведено в [2].

1. Першим кроком алгоритму розв'язування нелінійної задачі є отримання розв'язку лінійної задачі для заданого кроку навантаження. Саме цей розв'язок є початковим наближенням методу Ньютона-Рафсона. Що більше навантаження (для кожного прикладу своє), то гіршим початковим наближенням є розв'язок лінійної задачі, і метод Ньютона-Рафсона розбігається.

2. Наступним, другим кроком, є отримання нових вузлових значень координат сітки у деформованому стані $y_{k+1} = y_k + u$, де k – номер ітерації методу Ньютона-Рафсона, y_0 – значення координат вузлів сітки МСЕ у початковому стані, u – вектор значень переміщень у вузлах (розв'язок системи лінійних рівнянь $Ku = -R$ на першій ітерації лінійної задачі).

3. На третьому кроці обчислюються компоненти тензора градієнта деформації за формулою (16). Враховуючи подання (16), обчислення похідних зводиться до обчислення похідних від функцій форми на стандартному скінченному елементі за відомими формулами.

4. Четвертий крок, алгоритму – обчислення лівого тензора деформації, відносно зміни об'єму, для неогуківського матеріалу нових констант матеріалу, компонентів тензора напружень Коші.

5. На п'ятому кроці алгоритму визначаємо вектор внутрішніх сил. Обчислюємо новий вектор правої частини системи лінійних рівнянь $R = F - T$. Якщо $\|R\|/[F] \geq \epsilon$, то переходимо до наступної ітерації методу Ньютона-Рафсона, до кроку 6 алгоритму. у протилежному випадку переходимо до наступного кроку за навантаженням або обчислюємо, аналогічно до пункту 4 алгоритму, лівий тензор деформації і тензор напружень Коші, які і є розв'язком задачі у вузлах сітки МСЕ.

6. Шостий крок алгоритму полягає в обчисленні матриці системи лінійних рівнянь для наступної ітерації, тобто матриці дотичної жорсткості за формулами (27)-(29). Маючи матрицю і вектор системи лінійних рівнянь, переходимо до кроку 2 алгоритму для обчислення наступного наближення.

4. РЕЗУЛЬТАТИ РОЗВ'ЯЗУВАННЯ ТЕСТОВОГО ПРИКЛАДУ ГІПЕРПРУЖНОГО ДЕФОРМУВАННЯ ЗГИНУ ШАРНІРНО ОПЕРТОЇ СМУГИ

Розглянемо задачу про плоску деформацію нескінченної в напрямі x_3 смуги (рис. 3), матеріал якої описується неогуківим законом вигляду

$$(\Sigma) = \frac{\mu}{2} (I_{1C} - 3) + \frac{K}{2} (J - 1)^2, \quad (36)$$

де $\mu = 0.4225 \text{ MPa}$ – модуль зсуву, $K = 5 \text{ MPa}$ – модуль об'ємного розширення. Параметр Ляме для недеформованого стану, який використовується у формулі (36), визначається через μ і

$$K : \lambda = K - \frac{2}{3}\mu, \lambda = 4,71 \text{ MPa}.$$

Такі характеристики матеріалу властиві для певного типу гум (полімерів). Смуга навантажена на верхній границі рівномірним тиском q . На вертикальних краях смуги задані переміщення $u_2 = 0$. Оскільки задача має вісь симетрії, то у дослідженні розглядали тільки половину смуги. Для еталонного розв'язку цієї задачі було обрано результати, отримані у пакеті Comsol Multiphysics на сітці 100×50 квадратичних елементів.

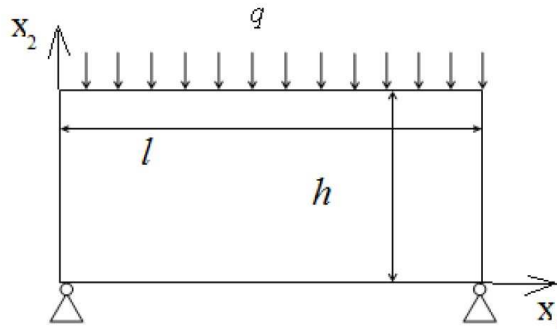
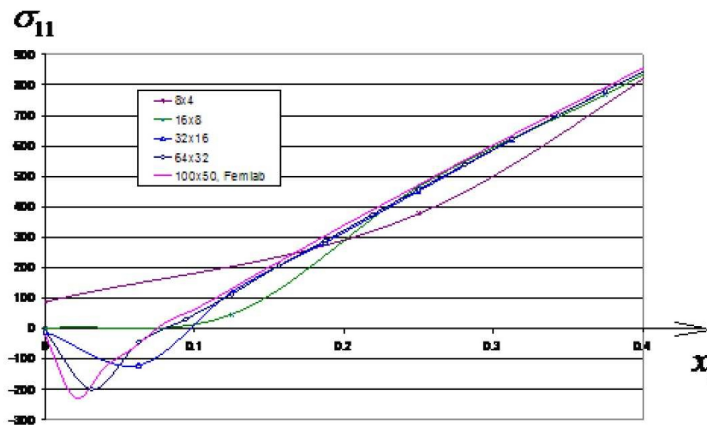


Рис. 3. Згинання шарнірно опертої смуги

Рис. 4. Значення напруження σ_{11} (Pa) при $x_2 = 0$ для $x_1 < 0,4$

Задача розв'язувалась для різних значень відношення ширини смуги l до її товщини h і для різних величин навантаження q . Треба одразу ж зауважити, що саме від цих параметрів залежить ступінь нелінійності задачі і складність отримання розв'язку.

Спочатку було досліджено збіжність чисельного розв'язку задачі від сітки МСЕ при $l/h = 8$, $q = -100$ Pa. Початок системи координат x_1, x_2 вибирали у нижньому лівому куті смуги. На (рис. 4) зображено графіки напруження σ_{11} (Pa) при $x_2 = 0$ в залежності від x_1 залежно від сітки МСЕ.

Для розв'язування нелінійних задач ітераційними методами, зокрема методом Ньютона-Рафсона, важливим є зменшення кількості ітерацій методу і часу виконання однієї ітерації. Для прикладу, на якому проводили тестування програми і методу, у табл. 1 наведено значення кількості ітерацій залежно від відношення ширини смуги l до її товщини h і для різних величин навантаження q . Як видно з результатів (див. табл. 1), що менша відносна товщина смуги і що більше навантаження, то більша кількість ітерацій. Ба більше, ця залежність зовсім не є лінійною (див. останній рядок табл. 1). Для кожної задачі є значення параметрів, за яких відбувається різке

виявлення гіперпружних властивостей матеріалу.

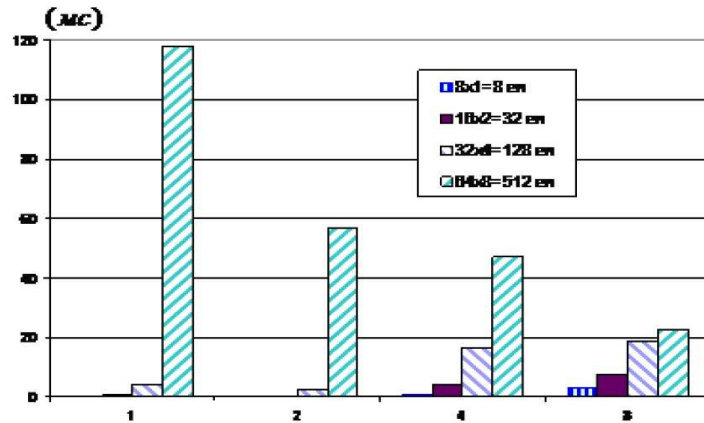


Рис. 5. Значення часу розв'язування задачі з використанням 1, 2, 4 і 8 процесів для різних сіток МСЕ

Таблиця 1

Кількість ітерацій методу Ньютона-Рафсона

q (Pa)	$l/h=4$	$l/h=8$
-100	2	4
-300	3	7
-500	3	9
-700	4	19

Цю задачу використовували також для тестування розробленого алгоритму з використанням паралельних обчислень для розв'язування гіперпружного деформування. Обчислення проводили для різних розбиттів області Ω на скінченні елементи та на підобласті. Кількість підобластей збігалася з кількістю задіяних процесів обчислень. Для розв'язування задачі використовували кластер Львівського національного університету імені Івана Франка.

Дослідження проводили на одному (послідовний алгоритм), двох, чотирьох і вісьмох вузлах. Для цього область Ω розбивалась на відповідну кількість підобластей. Розбиття всієї області і кожної підобласті відбувалось так, щоб розмірність СЛАР була однаковою у всіх випадках, тобто для послідовного і паралельного алгоритмів. На (рис. 5) зображено час розв'язування задачі з використанням 1, 2, 4 і 8 процесів і для різних сіток МСЕ. Як видно з діаграми, для малих сіток МСЕ (близько 100 квадратичних елементів) використання паралельних обчислень зовсім не доцільно. При використанні сітки з 512 елементів вже спостерігається значний виграш у часі. Що більше процесів, то менший час розв'язування задачі.

5. ВИСНОВКИ

На модельному прикладі досліджено задачу гіперпружного деформування нескінченної смуги з неогуківського матеріалу. Доведено збіжність чисельного розв'язку від сітки методу скінченних елементів. Розв'язуючи нелінійні задачі ітераційними методами, зокрема методом Ньютона-Рафсона, важливо зменшити кількість ітерацій методу і часу виконання однієї ітерації. Проведено дослідження значення кількості ітерацій залежно від відносної товщини смуги і різних величин навантаження. Отримані результати виявили, що чим менша відносна товщина смуги і чим більше навантаження, тим більша кількість ітерацій. Ба більше, ця залежність зовсім не є лінійною. Для кожної задачі існує значення параметрів, за яких відбувається різке виявлення гіперпружних властивостей матеріалу. З отриманих результатів можна зробити висновок, що початкове наближення у вигляді розв'язку лінійної задачі за певних параметрів задачі приводить до розбіжності методу Ньютона-Рафсона.

Розроблений паралельний алгоритм розв'язування задач гіперпружного деформування дає змогу ефективно поєднувати метод розбиття області на підобласті з паралельними обчисленнями на довільній кількості процесорів. Використання модифікованого методу спряжених градієнтів для розв'язування СЛАР не потребує формування глобальної матриці жорсткості для всієї області, що значно скорочує загальний час обчислення задачі. Як видно з результатів тестового прикладу, залежно від розміру задачі покращення часу обчислень становило до 2,5 разів.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Голованов А. Математические модели вычислительной нелинейной механики деформируемых сред / А. Голованов, Л. Султанов. – Казань: Казан. гос. ун-т, 2009. – 465 с.
2. Дияк І. Паралельний алгоритм розв'язування задач теорії пружності // І. Дияк, К. Гомон, М. Копитко // Вісник національного університету "Львівська політехніка", № 872. – Серія: Інформаційні системи та мережі. – 2017. – С. 101–110.
3. Дияк І. Комп'ютерне моделювання локально нелінійних задач на основі методу декомпозиції області / І. Дияк, І. Макар // Фізико-математичне моделювання та інформаційні технології. – 2009. – Вип. 9. – С. 55–66.
4. Кантор Б. Биомеханика гиперупругих тел вращения / Б. Кантор, А. Кунделев, Е. Мишюра. – Харьков: Форт, 2006. – 191 с.
5. Bonet J. Nonlinear Continuum Mechanics for Finite Element Analysis (2nd ed.) / J. Bonet, R. Wood. – Cambridge: Cambridge University Press, 2008. – 279 p. doi: 10.1017/CBO9780511755446
6. Crisfield M. Vol. 2. Non-linear Finite Element Analysis of Solids and Structures. Advanced Topics / M. Crisfield // Essentials, 1996. – 509 p.
7. Dobrynin A. Комп'ютерне моделювання локально нелінійних задач на основі методу декомпозиції області / А. Dobrynin, J.-M. Carrillo // Macromolecules, – 2011. – Vol. 44. – P. 140–146. doi:10.1021/ma102154u
8. Gropp W. Using MPI Portable Parallel Programming with the Message-Passing Interface / W. Gropp, E. Lusk, A. Skjellum // Scientific and engineering computation. – 2014. – 371 p.
9. Khodaei H. Simulation of active skeletal muscle tissue with a transversely isotropic viscohy-perelastic continuum material model / H. Khodaei, S. Mostofizadeh, K. Brodin, H. Johansson, J. Osth // J. Engineering in Medicine. – 2013. – Vol. 227 (5). – P. 571–580

10. Liu D. Nonlinear elastic load-displacement relation for spherical indentation on rubberlike materials / D. Liu, Z. Dzag, L. Sun // Journal of Materials Research. – 2010. – Vol. 25. – № 11. – P. 2197–2202. doi:10.1557/JMR.2010.0285
11. Madireddy S. Bayesian calibration of hyperelastic constitutive models of soft tissue / S. Madireddy, B. Sista, K. Vemaganti // Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials. – 2016. – Vol. 59. – P. 108–127. doi:10.1016/j.jmbbm.2015.10.025
12. Wex C. Isotropic incompressible hyperelastic models for modelling the mechanical behaviour of biological tissues: a review / C. Wex, S. Arndt, A. Stoll, C. Bruns, Y. Kupriyanova // Biomed. Eng.-Biomed. Tech. – 2015. – Vol. 60, Is. 6. – 16 p. doi:10.1515/bmt-2014-0146
13. Zhang Q. Effects of large deformation and material nonlinearity on spherical indentation of hyperelastic soft materials / Q. Zhang, Q.-S. Yang // Mechanics Research Communications. – 2017. – Vol. 84. – P. 55-59. doi:10.1016/j.mechrescom.2017.06.003

Стаття: надійшла до редколегії 08.09.2021

доопрацьована 03.11.2021

прийнята до друку 24.11.2021

PARALLELIZATION OF THE ALGORITHM FOR THE NUMERICAL SOLUTION TO THE HYPERELASTIC DEFORMATION PROBLEM

I. Dyyak, M. Kopytko, A. Styahar

*Ivan Franko National University of Lviv,
Universytetska str., 1, Lviv, 79000,
e-mail: ivan.dyyak@lnu.edu.ua*

We consider the numerical solution to the two-dimensional hyperelasticity problems by isoparametric finite element method with biquadratic approximations on quadliquadrilateral elements. We present the linearization of the variational equation on the basis of the Newton-Raphson method. The iterational algorithm based on step by step load and the Newton-Raphson iteration process is stated. The proposed algorithm is implemented as a software in C++ using the functions from MPI library.

Key words: hyperelastic deformation, finite element method, Newton-Raphson method, parallelization of computations.