

Научная статья

## Конечно-элементное моделирование нелинейных задач упругости в абсолютных узловых координатах на неструктурированных шестигранных сетках

А.С. Караваев, С.П. Копысов

Удмуртский государственный университет, Ижевск, Российская Федерация

Рассматривается конечно-элементная формулировка задачи теории упругости в абсолютных узловых координатах (Absolute Nodal Coordinate Formulation — ANCF), то есть большие перемещения тела описываются в глобальной системе отсчета без использования каких-либо локальных координат. Основной особенностью такого представления является отсутствие гироскопических эффектов и, как следствие, постоянство матрицы масс и вектора обобщенной силы тяжести. В отличие от традиционного ANCF подхода наборы узловых степеней свободы конечного элемента формируются только на основе абсолютных координат узлов. Вследствие этого становится возможным решение задачи, в том числе на неструктурированных шестигранных сетках. Для построения матрицы жесткости применяется алгоритм автоматического дифференцирования второго порядка, гарантированно обеспечивающий ее симметричный вид (матрица Гессе) и обладающий аналитической точностью вычисления производной. Указанный подход позволяет также проводить вычисления для моделей гиперупругих материалов без привлечения соответствующего тензора Пиолы–Кирхгофа. В рамках дискретизации уравнения движения наряду с известной схемой численного интегрирования Ньюмарка показана возможность применения НТТ- $\alpha$  схемы, являющейся безусловно устойчивой, второго порядка точности и диссипативной для высоких частот. Рассмотрены примеры решения статических и динамических задач упругости для сжимаемых и несжимаемых моделей гиперупругих материалов, функции плотности внутренней энергии тела которых задаются через градиент деформации.

*Ключевые слова:* абсолютные узловые координаты, неструктурированная шестигранная сетка, автоматическое дифференцирование второго порядка, матрица Гессе, НТТ- $\alpha$  схема, гиперупругая модель материала

*Получение:* 18.04.2024 / *Публикация онлайн:* 22.07.2024

УДК 519.63

### 1. Введение

Анализ напряженно-деформированного состояния (НДС) движущихся конструкций удобно проводить в связанной с ними подвижной системе координат. Такая координатная система, в отличие от неподвижной, не инерциальна, вследствие чего, как показано в работе [1], в динамических уравнениях, моделирующих нестационарные деформации, появляются дополнительные составляющие. Авторы работы рассматривают конечно-элементные уравнения динамики свободного упругого объекта в общем виде и варианты частных случаев движения, допускающих некоторые упрощения, а также приводят ряд способов задания систем подвижных координат, связанных с конструкцией, для описания свободных пространственных перемещений и разворотов с целью сокращения вычислительных затрат. Все известные подходы отличаются сильной нелинейностью слагаемых, входящих в уравнения движения.

В работе Шабаны [2] предложена формулировка метода конечных элементов (МКЭ) в терминах абсолютных узловых координат (Absolute Nodal Coordinate Formulation — ANCF) для моделирования произвольного пространственного движения упругих тел и их больших упругих перемещений и вращений. В ANCF большие перемещения тела представляются в глобальной системе отсчета без обращения к какой-либо локальной системе, а абсолютные координаты узлов и их пространственные производные выступают в качестве наборов узловых степеней свободы конечного элемента. Вращательные степени свободы не рассматриваются, и форма элемента описывается на основе глобальных наклонов. Неиспользование локальных систем отсчета в ANCF означает отсутствие гироскопических эффектов. Следовательно, матрица масс как в линейных, так и нелинейных задачах и вектор обобщенной силы тяжести постоянны, а центробежные и кориолисовы силы инерции исчезают. Однако вектор упругих сил остается нелинейным даже при линейных соотношениях деформация–перемещение. В этом случае выражения, определяющие вектор упругих сил, становятся сложными и громоздкими и почти все члены уравнений движения сохраняют постоянство (кроме обобщенных сил), в отличие от других подходов.

Насколько удалось выяснить из обзорных публикаций, большинство исследований, в которых рассматриваются конечные элементы в ANCF терминах с наклонами, относится к задачам определения НДС балок, пластин и оболочек с выраженной геометрией, позволяющей использовать небольшое число КЭ [3, 4]. В частности, в

работах [5, 6] описаны твердотельные элементы сплошных тел: шестигранный с 96-ю степенями свободы и четырехгранный с 16-ю степенями свободы.

Исходя из метода разделения переменных, поле перемещений элемента может быть представлено как произведение одного набора функций, зависящих только от пространственных координат, и другого набора функций, зависящих только от времени. Таким образом, поле перемещений записывается далее в абсолютных координатах, применяется разделение переменных и предполагается, что континуум состоит из большого числа конечных элементов. Положение произвольной точки в трехмерном элементе определяется глобальным вектором  $\mathbf{x}$ , вычисляемым при помощи функций формы элемента и вектора узловых координат.

В работах Дмитроченко О.Н. [7, 8] предложен способ описания элементов (как с наклонами, так и без них) непрерывным и единообразным набором параметров. Для обозначения конечных элементов вводится базовая трехразрядная номенклатура  $dnc$ , содержащая следующие целые параметры:  $d$  — размерность элемента;  $n$  — число узлов элемента;  $c$  — параметр, указывающий число и структуру координат в каждом узле.

Традиционный шестигранный элемент (параллелепипед) в терминах ANCF имеет тип 3843 так как является 3-мерным, имеет 8 узлов, в каждом узле содержится 4 вектора с 3-мя компонентами: один вектор — это абсолютные координаты узла, другой — производные абсолютных координат по  $x$ , третий — производные по  $y$ , четвертый — производные по  $z$ . Элемент считается полностью параметризованным, и это подразумевает, что полный градиент деформации представлен в выбранных узловых координатах, то есть в элементе используются все три пространственных вектора наклона в каждом узле. Данная работа нацелена на исследование применимости МКЭ в терминах ANCF с элементами типа 3813, где  $d = 3$ ,  $n = 3$ ,  $c = 13$  (то есть используется только вектор абсолютных координат), для моделирования динамики объемных тел, обладающих свойствами высокоэластичных гиперупругих материалов и описываемых неструктурированными шестигранными сетками произвольной формы.

## 2. Формулировки задачи теории упругости в терминах трехмерных абсолютных узловых координат

Рассмотрим однородное изотропное линейно-упругое тело, в начальном, не деформированном, состоянии, занимающее область пространства  $\Omega$ . Пусть  $\mathbf{X} = (x, y, z)^T$  и  $\mathbf{x}(\mathbf{X})$  — абсолютные (глобальные) координаты материальной точки в отсчетной и текущей конфигурациях области  $\Omega$ . При использовании абсолютных узловых координат решение задачи теории упругости сводится к нахождению неизвестной векторной функции абсолютных координат  $\mathbf{x}$ , аппроксимируемой в рамках конечно-элементного анализа в виде линейной комбинации базисных функций.

В традиционной формулировке ANCF для трехмерного случая при элементе типа 3843 в число степеней свободы каждого узла сетки  $\mathbf{r}_i$  включается сама позиция узла и ее производные по каждой координате:

$$\mathbf{r}_i = \left\{ \mathbf{x}^T \begin{pmatrix} \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial x} \\ \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial y} \\ \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial z} \end{pmatrix}^T \right\}^T. \quad (1)$$

Неизвестный вектор координат точки внутри прямоугольной шестигранный ячейки конечно-элементной расчетной сетки определяется как  $\mathbf{x} = \mathbf{N}\mathbf{r}$ , где  $\mathbf{r}$  — вектор степеней свободы узлов элементарного параллелепипеда,  $\mathbf{N}$  — матрица функций формы ячейки, имеющая вид:

$$\mathbf{N} = (N_{1,1}\mathbf{I}, N_{1,2}\mathbf{I}, N_{1,3}\mathbf{I}, N_{1,4}\mathbf{I}, \dots, N_{8,1}\mathbf{I}, N_{8,2}\mathbf{I}, N_{8,3}\mathbf{I}, N_{8,4}\mathbf{I}), \quad (2)$$

при этом  $\mathbf{I}$  — единичная матрица. Функции формы ячейки вычисляются следующим образом:

$$\begin{aligned} cN_{i,1} &= \frac{1}{16} (1 \pm \xi)(1 \pm \eta)(1 \pm \zeta)(2 \pm \xi \pm \eta \pm \zeta - \xi^2 - \eta^2 - \zeta^2), \\ N_{i,2} &= \pm \frac{1}{32} a(1 - \xi^2)(1 \pm \xi)(1 \pm \eta)(1 \pm \zeta), \\ N_{i,3} &= \pm \frac{1}{32} b(1 - \eta^2)(1 \pm \xi)(1 \pm \eta)(1 \pm \zeta), \\ N_{i,4} &= \pm \frac{1}{32} A(1 - \zeta^2)(1 \pm \xi)(1 \pm \eta)(1 \pm \zeta), \end{aligned} \quad (3)$$

где  $a, b, c$  — длины сторон ячейки,  $\xi, \eta, \zeta$  — локальные координаты точки внутри ячейки.

В состоянии движения, согласно принципу Даламбера–Лагранжа, сумма виртуальных работ активных сил и сил инерции тела равняется нулю:

$$\delta W_m + \delta W_\varepsilon + \delta W_b + \delta W_p = 0. \quad (4)$$

Здесь  $\delta W_m$  — виртуальная работа сил инерции тела;  $\delta W_\varepsilon$  — виртуальная работа внутренних сил деформации тела;  $\delta W_b, \delta W_p$  — виртуальные работы внешних объемных и поверхностных сил. В терминах абсолютных узловых координат слагаемое  $\delta W_m$  представляется в следующем виде:

$$\delta W_m = -\ddot{\mathbf{r}}^T \int_{\Omega} \rho \mathbf{N}^T \mathbf{N} d\Omega \cdot \delta \mathbf{r} = -\ddot{\mathbf{r}}^T \mathbf{M} \cdot \delta \mathbf{r}, \quad (5)$$

при этом  $\rho$  — функция плотности,  $\mathbf{M}$  — матрица масс,  $\ddot{\mathbf{r}}$  — вектор ускорения. Вариация энергии деформации выражается через внутреннее произведение второго тензора напряжений Пиолю–Кирхгофа  $\mathbf{S}$  и тензора деформаций Грина–Лагранжа  $\boldsymbol{\varepsilon}$ :

$$\delta W_\varepsilon = \int_{\Omega} \mathbf{S} : \delta \boldsymbol{\varepsilon} d\Omega = \int_{\Omega} \mathbf{S} : \frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}{\partial \mathbf{r}} d\Omega \cdot \delta \mathbf{r}, \quad (6)$$

где  $\boldsymbol{\varepsilon}$  представляется через градиент деформации  $\mathbf{F} = \partial \mathbf{x} / \partial \mathbf{X}$  следующим образом:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2} (\mathbf{F} \mathbf{F}^T - \mathbf{I}). \quad (7)$$

В частном случае линейно-упругого материала вариация  $\delta W_\varepsilon$  выглядит следующим образом:

$$\delta W_\varepsilon = \int_{\Omega} \boldsymbol{\varepsilon}^T \mathbf{D} \frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}{\partial \mathbf{r}} d\Omega \cdot \delta \mathbf{r}. \quad (8)$$

Вариации потенциалов внешних объемных и поверхностных сил записываются так:

$$\delta W_b = \int_{\Omega} \mathbf{b} \cdot \delta \mathbf{x} d\Omega = \int_{\Omega} \mathbf{N}^T \mathbf{b} d\Omega \cdot \delta \mathbf{r}, \quad \delta W_p = \int_{\Gamma} \mathbf{p} \cdot \delta \mathbf{x} d\Gamma = \int_{\Gamma} \mathbf{N}^T \mathbf{p} d\Gamma \cdot \delta \mathbf{r}. \quad (9)$$

Таким образом, общий вид уравнения движения тела принимает вид:

$$\mathbf{M} \ddot{\mathbf{r}} = \int_{\Omega} \mathbf{S} : \frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}{\partial \mathbf{r}} d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{N}^T \mathbf{b} d\Omega + \int_{\Gamma} \mathbf{N}^T \mathbf{p} d\Gamma. \quad (10)$$

Описанный выше подход, в сравнении с решением задачи в перемещениях, приводит к увеличению числа степеней свободы каждой ячейки сетки. В частности, для шестигранной ячейки типа 3843, имеющей 8 узлов, общее число степеней свободы составит 96:

$$\mathbf{r} = \{ \mathbf{r}_1^T \ \mathbf{r}_2^T \ \mathbf{r}_3^T \ \mathbf{r}_4^T \ \mathbf{r}_5^T \ \mathbf{r}_6^T \ \mathbf{r}_7^T \ \mathbf{r}_8^T \}^T, \quad (11)$$

где  $\mathbf{r}_i^T$  — степени свободы  $i$ -го узла шестигранника.

Функции формы  $\mathbf{N}$  ячейки типа 3843 должны обладать условиями непрерывности вместе со своими производными, что реализуется достаточно просто для структурированных сеток из шестигранных ячеек прямоугольного вида, но, с точки зрения формы расчетной области, существенно ограничивает класс решаемых задач. Большинство исследований посвящено применению формулировки МКЭ в терминах ANCF для расчета НДС прямоугольных стержневых элементов, пластин, канатов и другого.

Применимость ANCF с ячейками 3813 тестировались только в одной работе — [9], для линейно-упругого материала и двумерных элементов в простых областях, при этом основное внимание уделялось повышению вычислительной эффективности при введении несовместных мод по аналогии с постановками задач в перемещениях и представлением получаемой системы уравнений в пространстве меньшей размерности. Абсолютные координаты в качестве степеней свободы узла принимались в виде  $\mathbf{r}_i = \{ \mathbf{x} \}$ .

Запишем матрицу функций формы в виде, используемом при решении задачи в перемещениях:

$$\mathbf{N} = (N_1 \mathbf{I}, N_2 \mathbf{I}, \dots, N_8 \mathbf{I}), \quad (12)$$

где

$$N_i = \frac{1}{8} (1 \pm \xi)(1 \pm \eta)(1 \pm \zeta). \quad (13)$$

С учетом того, что ячейки 3813 не обеспечивают непрерывности вращательных компонент перемещения, они дают точность решения меньшую, чем ячейки типа 3843. Применение более мелкой расчетной сетки, а также наложение дополнительных условий на поля деформаций и напряжений [9, 10] позволяют повысить точность получаемых решений. Кроме того, дискретная формулировка уравнения (10) может приводить к несимметрии матрицы жесткости в задачах для объектов из гиперупругих материалов. Также в этом случае необходимо аналитически вычислять второй симметричный тензор Пиолы–Киргофа  $\mathbf{S}$  для каждой модели гиперупругого материала.

Для ячеек типа 3813 рассмотрим альтернативный подход, гарантированно обеспечивающий формирование симметричной матрицы жесткости.

Согласно второму закону Ньютона уравнение движения тела имеет вид:

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{r}} = \mathbf{F}_\varepsilon + \mathbf{F}_b + \mathbf{F}_p, \tag{14}$$

где  $\mathbf{F}_\varepsilon$  — вектор упругих сил,  $\mathbf{F}_b$  и  $\mathbf{F}_p$  — векторы внешних объемных и поверхностных сил. Запишем их через производные потенциалов внешних объемных ( $E_b$ ) и поверхностных ( $E_p$ ) сил:

$$\mathbf{F}_b = \frac{\partial E_b}{\partial \mathbf{r}} = \frac{\partial \left( \int_{\Omega} \mathbf{b} \cdot \mathbf{x} \, d\Omega \right)}{\partial \mathbf{r}} = \int_{\Omega} \mathbf{N}^T \mathbf{b} \, d\Omega, \quad \mathbf{F}_p = \frac{\partial E_p}{\partial \mathbf{r}} = \frac{\partial \left( \int_{\Gamma} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x} \, d\Gamma \right)}{\partial \mathbf{r}} = \int_{\Gamma} \mathbf{N}^T \mathbf{p} \, d\Gamma. \tag{15}$$

Вектор  $\mathbf{F}_\varepsilon$  представим через производную энергии деформации тела  $E_\varepsilon$ :

$$\mathbf{F}_\varepsilon = \frac{\partial E_\varepsilon}{\partial \mathbf{r}} = \frac{\partial \left( \int_{\Omega} \omega \, d\Omega \right)}{\partial \mathbf{r}} = \int_{\Omega} \frac{\partial \omega}{\partial \mathbf{r}} \, d\Omega, \tag{16}$$

где функция  $\omega$  — плотность энергии деформации  $E_\varepsilon$ .

Искомое в данной работе поле текущих абсолютных узловых координат  $\mathbf{r}$  должно удовлетворять уравнению:

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{r}} = \int_{\Omega} \frac{\partial \omega}{\partial \mathbf{r}} \, d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{N}^T \mathbf{b} \, d\Omega + \int_{\Gamma} \mathbf{N}^T \mathbf{p} \, d\Gamma. \tag{17}$$

При этом в некоторых зонах расчетной области могут накладываться условия на координаты и скорость:

$$\mathbf{r} = \bar{\mathbf{r}}, \quad \mathbf{v} = \bar{\mathbf{v}}. \tag{18}$$

Отметим, что результирующий вид уравнения движения совпадает с (10), за исключением слагаемого, определяющего силы упругости тела. В случае линейно-упругого материала указанные уравнения идентичны,

$$\text{так как } \omega = \boldsymbol{\varepsilon}^T \mathbf{D} \boldsymbol{\varepsilon} / 2 \text{ и } \mathbf{F}_\varepsilon = \int_{\Omega} \frac{\partial (\boldsymbol{\varepsilon}^T \mathbf{D} \boldsymbol{\varepsilon} / 2)}{\partial \mathbf{r}} \, d\Omega = \int_{\Omega} \boldsymbol{\varepsilon}^T \mathbf{D} \frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}{\partial \mathbf{r}} \, d\Omega.$$

### 3. Дискретная формулировка динамической задачи теории упругости

Первоначально рассмотрим квазистатическую задачу теории упругости. Вектор  $\mathbf{F}_\varepsilon$  можно представить в линеаризованном виде через касательную матрицу жесткости:

$$\mathbf{F}_\varepsilon(\mathbf{r}) = \mathbf{K}(\mathbf{r}_0)(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) + \mathbf{F}_\varepsilon(\mathbf{r}_0) = \mathbf{K}(\mathbf{r}_0)\mathbf{r} + \mathbf{F}_\varepsilon(\mathbf{r}_0), \tag{19}$$

где  $\mathbf{r}_0$  — выбранная точка линеаризации.

В случае уравнения (10) вычисление матрицы жесткости в точке  $\mathbf{r}_0$  происходит путем однократного дифференцирования интегрального множителя из выражения (6) по абсолютным узловым координатам:

$$\mathbf{K} = \int_{\Omega} \frac{\partial \left( \mathbf{S} : \frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}{\partial \mathbf{r}} \right)}{\partial \mathbf{r}} \, d\Omega. \tag{20}$$

Для уравнения (17) матрица  $\mathbf{K}$  имеет симметричный вид матрицы Гессе и получается путем двукратного дифференцирования энергии деформации тела

$$\mathbf{K} = \int_{\Omega} \frac{\partial^2 \omega}{\partial \mathbf{r} \partial \mathbf{r}} d\Omega. \quad (21)$$

Поскольку аналитическое нахождение производных в выражениях (20), (21) является затруднительным, в большинстве случаев используются различные численные методы. Наиболее предпочтительным среди них является автоматическое дифференцирование, обладающее точностью, сравнимой с аналитическим расчетом вплоть до погрешностей машинных вычислений, которое будет рассмотрено дальше.

Приведем две схемы численного интегрирования уравнения движения в ANCF терминах:  $\beta$ -схему Ньюмарка и обобщенную НТТ- $\alpha$  схему [11].

В схеме Ньюмарка дискретизация уравнения движения выглядит так:

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{r}}^{t+\Delta t} + \mathbf{F}_{\varepsilon}(\mathbf{r}^{t+\Delta t}) = \mathbf{F}_{ext}^{t+\Delta t} = \mathbf{F}_b^{t+\Delta t} + \mathbf{F}_p^{t+\Delta t}, \quad (22)$$

при этом

$$\dot{\mathbf{r}}^{t+\Delta t} = \frac{1}{\beta \Delta t^2} \Delta \mathbf{r} - \frac{1}{\beta \Delta t} \dot{\mathbf{r}}^t - \left( \frac{1}{2\beta} - 1 \right) \ddot{\mathbf{r}}^t, \quad \mathbf{r}^{t+\Delta t} = \mathbf{r}^t + \Delta t(1-\gamma)\dot{\mathbf{r}}^t + \gamma \Delta t \dot{\mathbf{r}}^{t+\Delta t}, \quad (23)$$

где  $\Delta \mathbf{r}$  — приращение абсолютных координат,  $\Delta t$  — шаг по времени, параметры имеют значения:  $\gamma \geq 0.5$ ,  $\beta \geq 0.25(0.5 + \gamma)^2$ . С учетом (19) получим:

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{r}}^{t+\Delta t} + \mathbf{K}(\mathbf{r}^t) \Delta \mathbf{r} + \mathbf{F}_{\varepsilon}(\mathbf{r}^t) = \mathbf{F}_{ext}^{t+\Delta t}. \quad (24)$$

Выразив ускорение на следующем шаге через приращение  $\Delta \mathbf{r}$ , запишем систему алгебраических уравнений:

$$\left( \frac{1}{\beta \Delta t^2} \mathbf{M} + \mathbf{K}(\mathbf{r}^t) \right) \Delta \mathbf{r} = \mathbf{F}_{ext}^{t+\Delta t} - \mathbf{F}_{\varepsilon}(\mathbf{r}^t) + \mathbf{M} \left( \frac{1}{\beta \Delta t} \dot{\mathbf{r}}^t + \left( \frac{1}{\beta \alpha} - 1 \right) \ddot{\mathbf{r}}^t \right). \quad (25)$$

Далее рассмотрим НТТ- $\alpha$  схему, которая является безусловно устойчивой, второго порядка точности и диссипативной при высоких частотах, что, в частности, делает ее более предпочтительной для удаления нефизических осцилляций в задачах динамического контактного взаимодействия [12]. В данном случае уравнение движения примет вид:

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{r}}^{t+\Delta t} + (1+\alpha)\mathbf{F}_{\varepsilon}(\mathbf{r}^{t+\Delta t}) - \alpha\mathbf{F}_{\varepsilon}(\mathbf{r}^t) = (1+\alpha)\mathbf{F}_{ext}^{t+\Delta t} - \alpha\mathbf{F}_{ext}^t, \quad (26)$$

где  $\alpha$  — диссипативный параметр с диапазоном значений от  $-1/3$  до  $0$ . При этом ускорение  $\ddot{\mathbf{r}}^{t+\Delta t}$  и скорость  $\dot{\mathbf{r}}^{t+\Delta t}$  вычисляются по формулам (23). Причем наиболее часто величины  $\gamma$  и  $\beta$  определяются через параметр  $\alpha$ :  $\gamma = 0.5 - \alpha$  и  $\beta = 0.25(1 - \alpha)^2$ .

С учетом (19) получим

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{r}}^{t+\Delta t} + (1+\alpha)\mathbf{K}(\mathbf{r}^t) \Delta \mathbf{r} + (1+\alpha)\mathbf{F}_{\varepsilon}(\mathbf{r}^t) - \alpha\mathbf{F}_{\varepsilon}(\mathbf{r}^t) = (1+\alpha)\mathbf{F}_{ext}^{t+\Delta t} - \alpha\mathbf{F}_{ext}^t. \quad (27)$$

Выразив ускорение на следующем шаге через приращение  $\Delta \mathbf{r}$ , запишем систему алгебраических уравнений:

$$\left( \frac{1}{\beta \Delta t^2} \mathbf{M} + (1+\alpha)\mathbf{K}(\mathbf{r}^t) \right) \Delta \mathbf{r} = (1+\alpha)\mathbf{F}_{ext}^{t+\Delta t} - \alpha\mathbf{F}_{ext}^t - \mathbf{F}_{\varepsilon}(\mathbf{r}^t) + \mathbf{M} \left( \frac{1}{\beta \Delta t} \dot{\mathbf{r}}^t + \left( \frac{1}{\beta \alpha} - 1 \right) \ddot{\mathbf{r}}^{t+\Delta t} \right). \quad (28)$$

#### 4. Двойное автоматическое дифференцирование для гиперупругих материалов

Методы автоматического дифференцирования (АД) известны уже несколько десятилетий, но их использование в МКЭ стало развиваться относительно недавно [13–15]. Под АД понимается набор подходов, позволяющих одновременно осуществлять процедуры вычисления в точке функции и ее производной.

Пусть  $\bar{U} : R \rightarrow R$  — множество функций, имеющих производную в некоторой точке  $x_0 \in R$ . Рассмотрим множество  $Z_{x_0}^{\bar{U}}$  двумерных векторов вида  $\mathbf{z}_{x_0}^u = (u(x_0)u_x(x_0))^T \in R^2$ , где  $u(x_0)$  — значение функции  $u \in \bar{U}$ ,

$u_x(x_0)$  — значение ее производной в этой точке. Определим для двух произвольных значений  $\mathbf{z}_{x_0}^u, \mathbf{z}_{x_0}^v \in Z_{x_0}^{\bar{U}}$  базовые арифметические операции сложения, вычитания, умножения и деления:

$$\begin{aligned} \mathbf{z}_{x_0}^u + \mathbf{z}_{x_0}^v &= \begin{pmatrix} u(x_0) \\ u_x(x_0) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} v(x_0) \\ v_x(x_0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u(x_0) + v(x_0) \\ u_x(x_0) + v_x(x_0) \end{pmatrix}, \\ \mathbf{z}_{x_0}^u - \mathbf{z}_{x_0}^v &= \begin{pmatrix} u(x_0) \\ u_x(x_0) \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} v(x_0) \\ v_x(x_0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u(x_0) - v(x_0) \\ u_x(x_0) - v_x(x_0) \end{pmatrix}, \\ \mathbf{z}_{x_0}^u \mathbf{z}_{x_0}^v &= \begin{pmatrix} u(x_0) \\ u_x(x_0) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v(x_0) \\ v_x(x_0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u(x_0)v(x_0) \\ u_x(x_0)v(x_0) + u(x_0)v_x(x_0) \end{pmatrix}, \\ \mathbf{z}_{x_0}^u / \mathbf{z}_{x_0}^v &= \begin{pmatrix} u(x_0) \\ u_x(x_0) \end{pmatrix} / \begin{pmatrix} v(x_0) \\ v_x(x_0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u(x_0)/v(x_0) \\ (u_x(x_0)v(x_0) - u(x_0)v_x(x_0))/v^2(x_0) \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{29}$$

Множество  $Z_{x_0}^{\bar{U}}$  и выражения (29) позволяют одновременно вычислять в точке  $x_0$  значение и производную функции  $f = f(x) \in \bar{U}$ , состоящую из произвольной комбинации ее переменной и констант, связанных арифметическими операциями вида (29).

Например, определим в точке  $x_0 \neq 1$  значение и производную функции

$$f(x) = 2x/(x-1). \tag{30}$$

Представим функцию  $f$  в виде цепочки выражений, состоящих из функций  $w_i$ , следующего вида

$$f(x) = 2x/(x-1) = w_1 w_2 / (w_3 - w_4) = w_5 / w_6 = w_7, \tag{31}$$

где  $w_1(x) = 2, w_2(x) = x, w_3(x) = x, w_4(x) = 1, w_5(x) = w_1 w_2, w_6(x) = w_3 - w_4, w_7(x) = w_5 / w_6$ . Поменяв в (31) значения функций  $w_i(x_0)$  на соответствующие векторы  $\mathbf{z}_{x_0}^{w_i} \in Z_{x_0}^{\bar{U}}$ , получим:

$$\frac{\mathbf{z}_{x_0}^{w_1} \mathbf{z}_{x_0}^{w_2}}{(\mathbf{z}_{x_0}^{w_3} - \mathbf{z}_{x_0}^{w_4})} = \frac{\mathbf{z}_{x_0}^{w_5}}{\mathbf{z}_{x_0}^{w_6}} = \mathbf{z}_{x_0}^{w_7}, \tag{32}$$

где

$$\mathbf{z}_{x_0}^{w_1} = \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{z}_{x_0}^{w_2} = \begin{pmatrix} x_0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{z}_{x_0}^{w_3} = \begin{pmatrix} x_0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{z}_{x_0}^{w_4} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{33}$$

Используя (29) и (31), можно вычислить  $\mathbf{z}_{x_0}^{w_7}$ , то есть значение функции с ее производной:

$$\begin{pmatrix} f(x_0) \\ f_x(x_0) \end{pmatrix} = \mathbf{z}_{x_0}^{w_7}. \tag{34}$$

Представленное выше описание соответствует так называемому прямому ходу автоматического дифференцирования, когда значения функции и производной вычисляются параллельно при движении по алгоритму от начала к концу. В рамках программной реализации осуществляется кодирование алгоритма определения функции  $f(x_0)$ , при этом производная  $f_x(x_0)$  находится автоматически через перегрузку соответствующих математических операторов по формулам (29).

Очевидно, что метод легко обобщается на случай отыскания частной производной функции нескольких аргументов, так как при этом все переменные функции рассматриваются как константы за исключением одной, по которой выполняется дифференцирование. Кроме того, существует возможность расширения перечня арифметических операций (29) с целью расчета производных функций  $f$ , содержащих процедуры возведения в степень, взятия логарифма и другое.

Автоматическое дифференцирование функций, выраженных программным кодом, носит аналитический характер, позволяет получить точное (вплоть до ошибок округления) значение производной и избежать неустраняемых погрешностей счета, характерных для приближенных методик численного дифференцирования на основе конечных разностей.

Далее рассмотрим расширение подхода на случай вычисления производной второго порядка функции двух переменных.

Пусть  $\bar{U} : R^2 \rightarrow R$  есть множество функций, имеющих частные производные второго порядка в некоторой точке  $(x_0, y_0) \in R^2$ . Возьмем множество  $Z_{(x_0, y_0)}^{\bar{U}}$  четырехмерных векторов вида

$\mathbf{z}_{(x_0, y_0)}^u = (u(x_0, y_0)u_x(x_0, y_0)u_y(x_0, y_0)u_{xy}(x_0, y_0))^T \in R^4$ , где  $u(x_0, y_0)$  — значение функции  $u \in \tilde{U}$  в точке  $(x_0, y_0) \in R^2$ ,  $u_x(x_0, y_0)$ ,  $u_y(x_0, y_0)$ ,  $u_{xy}(x_0, y_0)$  — значения ее частных производных в этой же точке. По аналогии с (29) определим для двух произвольных значений  $\mathbf{z}_{(x_0, y_0)}^u, \mathbf{z}_{(x_0, y_0)}^v \in Z_{(x_0, y_0)}^{\tilde{U}}$  базовые арифметические операции (сложение, вычитание, умножение, деление), при этом для сокращения записи опустим аргумента  $(x_0, y_0)$  у функций  $u$  и  $v$ :

$$\begin{aligned} \mathbf{z}_{(x_0, y_0)}^u + \mathbf{z}_{(x_0, y_0)}^v &= \begin{pmatrix} u \\ u_x \\ u_y \\ u_{xy} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} v \\ v_x \\ v_y \\ v_{xy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u+v \\ u_x+v_x \\ u_y+v_y \\ u_{xy}+v_{xy} \end{pmatrix}, \\ \mathbf{z}_{(x_0, y_0)}^u - \mathbf{z}_{(x_0, y_0)}^v &= \begin{pmatrix} u \\ u_x \\ u_y \\ u_{xy} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} v \\ v_x \\ v_y \\ v_{xy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u-v \\ u_x-v_x \\ u_y-v_y \\ u_{xy}-v_{xy} \end{pmatrix}, \\ \mathbf{z}_{(x_0, y_0)}^u \mathbf{z}_{(x_0, y_0)}^v &= \begin{pmatrix} u \\ u_x \\ u_y \\ u_{xy} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v \\ v_x \\ v_y \\ v_{xy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} uv \\ u_xv+uv_x \\ u_yv+uv_y \\ u_{xy}v+u_xv_y+u_yv_x+uv_{xy} \end{pmatrix}, \\ \mathbf{z}_{(x_0, y_0)}^u / \mathbf{z}_{(x_0, y_0)}^v &= \begin{pmatrix} u \\ u_x \\ u_y \\ u_{xy} \end{pmatrix} / \begin{pmatrix} v \\ v_x \\ v_y \\ v_{xy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u/v \\ (u_xv-uv_x)/v^2 \\ (u_yv-uv_y)/v^2 \\ ((u_{xy}v+u_xv_y-u_yv_x-uv_{xy})v^2 - (u_xv-uv_x)2vv_y)/v^4 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (35)$$

Множество  $Z_{(x_0, y_0)}^{\tilde{U}}$  четырехмерных векторов и выражения (35) позволяют одновременно вычислять в точке  $(x_0, y_0)$  значения и частные производные до второго порядка функции  $f = f(x, y) \in \tilde{U}$ , состоящей из произвольной комбинации ее переменных и констант, связанных арифметическими операциями вида (35).

Например, определим в точке  $(x_0, y_0)$ ,  $y_0 \neq 3$  значение и производную функции

$$f(x, y) = xy/(x-3). \quad (36)$$

По аналогии с предыдущими рассуждениями представим  $f$  в виде цепочки выражений, состоящих из функций  $w_i$ , следующего вида

$$f(x, y) = xy/(x-3) = w_1w_2/(w_3-w_4) = w_5/w_6 = w_7, \quad (37)$$

где  $w_1(x, y) = x$ ,  $w_2(x, y) = y$ ,  $w_3(x, y) = x$ ,  $w_4(x, y) = 3$ ,  $w_5(x, y) = w_1w_2$ ,  $w_6(x, y) = w_3 - w_4$ ,  $w_7(x) = w_5/w_6$ .

Поменяв в (37) значения функций  $w_i(x_0, y_0)$  на соответствующие векторы  $\mathbf{z}_{(x_0, y_0)}^{w_i} \in Z_{(x_0, y_0)}^{\tilde{U}}$ , получим:

$$\frac{\mathbf{z}_{(x_0, y_0)}^{w_1} \mathbf{z}_{(x_0, y_0)}^{w_2}}{(\mathbf{z}_{(x_0, y_0)}^{w_3} - \mathbf{z}_{(x_0, y_0)}^{w_4})} = \frac{\mathbf{z}_{(x_0, y_0)}^{w_5}}{\mathbf{z}_{(x_0, y_0)}^{w_6}} = \mathbf{z}_{(x_0, y_0)}^{w_7}. \quad (38)$$

Определив

$$\mathbf{z}_{(x_0, y_0)}^{w_1} = \begin{pmatrix} x_0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{z}_{(x_0, y_0)}^{w_2} = \begin{pmatrix} y_0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{z}_{(x_0, y_0)}^{w_3} = \begin{pmatrix} x_0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{z}_{(x_0, y_0)}^{w_4} = \begin{pmatrix} 3 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (39)$$

найдем:

$$\begin{pmatrix} f(x_0, y_0) \\ f_x(x_0, y_0) \\ f_y(x_0, y_0) \\ f_{xy}(x_0, y_0) \end{pmatrix} = \mathbf{z}_{(x_0, y_0)}^{w_7}. \quad (40)$$

Если при этом задать

$$\mathbf{z}_{(x_0,y_0)}^{w_1} = \begin{pmatrix} x_0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{z}_{(x_0,y_0)}^{w_2} = \begin{pmatrix} y_0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{z}_{(x_0,y_0)}^{w_3} = \begin{pmatrix} x_0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{z}_{(x_0,y_0)}^{w_4} = \begin{pmatrix} 3 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (41)$$

то

$$\begin{pmatrix} f(x_0,y_0) \\ f_x(x_0,y_0) \\ f_x(x_0,y_0) \\ f_{xx}(x_0,y_0) \end{pmatrix} = \mathbf{z}_{(x_0,y_0)}^{w_7}. \quad (42)$$

Аналогично представление

$$\mathbf{z}_{(x_0,y_0)}^{w_1} = \begin{pmatrix} x_0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{z}_{(x_0,y_0)}^{w_2} = \begin{pmatrix} y_0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{z}_{(x_0,y_0)}^{w_3} = \begin{pmatrix} x_0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{z}_{(x_0,y_0)}^{w_4} = \begin{pmatrix} 3 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (43)$$

приводит к выражению:

$$\begin{pmatrix} f(x_0,y_0) \\ f_y(x_0,y_0) \\ f_y(x_0,y_0) \\ f_{yy}(x_0,y_0) \end{pmatrix} = \mathbf{z}_{(x_0,y_0)}^{w_7}. \quad (44)$$

Рассмотрим гиперупругую модель Сен-Венана–Кирхгофа, функция плотности энергии деформации  $\omega(\boldsymbol{\epsilon})$  которой имеет вид:

$$\omega = \frac{\lambda}{2}(\text{tr } \boldsymbol{\epsilon})^2 + \mu \text{tr}(\boldsymbol{\epsilon}^2). \quad (45)$$

Локальная матрица жесткости шестигранного элемента 3813 вычисляется с помощью квадратурных формул Гаусса:

$$\mathbf{k}^e = \int_{\Omega^e} \frac{\partial^2 \omega}{\partial \mathbf{r} \partial \mathbf{r}} d\Omega = \sum_i \sum_j \sum_k W_i W_j W_k \frac{\partial^2 \omega(\xi_i, \eta_j, \zeta_k)}{\partial^2 \mathbf{r}(\xi_i, \eta_j, \zeta_k)} \det(J(\xi_i, \eta_j, \zeta_k)), \quad (46)$$

где  $\xi_i, \eta_j, \zeta_k$  — координаты текущей локальной точки интегрирования,  $J(\xi_i, \eta_j, \zeta_k)$  — матрица Якоби шестигранной ячейки,  $W_i, W_j, W_k$  — весовые коэффициенты. При этом глобальная матрица жесткости определяется суммированием локальных матриц жесткости конечных элементов:  $\mathbf{K} = \sum_e \mathbf{k}^e$ .

Алгоритм двойного численного дифференцирования для нахождения компоненты матрицы  $\mathbf{k}^e$  в локальной точке интегрирования  $(\xi_i, \eta_j, \zeta_k)$  для модели Сен-Венана–Кирхгофа (45) включает следующие шаги:

1. Цикл по  $i = 1, \dots, 24$ .
2. Цикл по  $j = 1, \dots, 24$ .
3. Вычисление матриц производных функций формы  $\mathbf{B}_x, \mathbf{B}_y, \mathbf{B}_z \in R^{3 \times 24}$  в глобальных координатах:

$$\mathbf{B}_x = \begin{pmatrix} \frac{\partial N_1}{\partial x} & 0 & 0 & & \frac{\partial N_8}{\partial x} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial N_1}{\partial x} & 0 & \dots & 0 & \frac{\partial N_8}{\partial x} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial N_1}{\partial x} & & 0 & 0 & \frac{\partial N_8}{\partial x} \end{pmatrix}, \dots,$$

$$\mathbf{B}_z = \begin{pmatrix} \frac{\partial N_1}{\partial z} & 0 & 0 & & \frac{\partial N_8}{\partial z} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial N_1}{\partial z} & 0 & \dots & 0 & \frac{\partial N_8}{\partial z} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial N_1}{\partial z} & & 0 & 0 & \frac{\partial N_8}{\partial z} \end{pmatrix},$$



$$\text{где } \begin{pmatrix} \partial N_s / \partial x \\ \partial N_s / \partial y \\ \partial N_s / \partial z \end{pmatrix} = J^{-1}(\xi, \eta, \zeta) \begin{pmatrix} \partial N_s / \partial \xi \\ \partial N_s / \partial \eta \\ \partial N_s / \partial \zeta \end{pmatrix}, \quad s = 1, \dots, 8.$$

4. Инициализация матриц  $\mathbf{B}_x, \mathbf{B}_y, \mathbf{B}_z \in \mathbb{R}^{3 \times 24}$  в рамках множества  $Z_{(x_0, y_0)}^{\tilde{U}}$ , то есть присвоение матрицам начального значения:

$$\tilde{\mathbf{B}}_\alpha \in \left( Z_{(x_0, y_0)}^{\tilde{U}} \right)^{3 \times 24}, \quad \tilde{b}_{mn} = \begin{pmatrix} b_{mn} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

где  $\alpha = x, y, z$ ,  $\tilde{b}_{mn}$  и  $b_{mn}$ , соответственно, элементы  $\tilde{\mathbf{B}}_\alpha$  и  $\mathbf{B}_\alpha$ .

5. Инициализация вектора  $\mathbf{r}$  абсолютных узловых координат ячейки и определение степеней ее свободы в рамках множества  $Z_{(x_0, y_0)}^{\tilde{U}}$ :

$$\tilde{\mathbf{r}} \in \left( Z_{(x_0, y_0)}^{\tilde{U}} \right)^{24 \times 1}, \quad \tilde{\mathbf{r}}_i = \begin{pmatrix} r_i \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \tilde{\mathbf{r}}_j = \begin{pmatrix} r_j \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \tilde{\mathbf{r}}_m = \begin{pmatrix} r_m \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad m \neq i, j,$$

где  $\tilde{r}_m, r_m$  — элементы векторов  $\tilde{\mathbf{r}}$  и  $\mathbf{r}$ .

6. Вычисление вектора производных абсолютных узловых координат по каждому направлению:

$$\frac{\partial \tilde{\mathbf{x}}}{\partial x} = \tilde{\mathbf{B}}_x \tilde{\mathbf{r}}, \quad \frac{\partial \tilde{\mathbf{x}}}{\partial y} = \tilde{\mathbf{B}}_y \tilde{\mathbf{r}}, \quad \frac{\partial \tilde{\mathbf{x}}}{\partial z} = \tilde{\mathbf{B}}_z \tilde{\mathbf{r}}, \quad \frac{\partial \tilde{\mathbf{x}}}{\partial x}, \frac{\partial \tilde{\mathbf{x}}}{\partial y}, \frac{\partial \tilde{\mathbf{x}}}{\partial z} \in \left( Z_{(x_0, y_0)}^{\tilde{U}} \right)^{1 \times 3}.$$

7. Инициализация градиента деформации  $\tilde{\mathbf{F}} \in \left( Z_{(x_0, y_0)}^{\tilde{U}} \right)^{3 \times 3}$ :

$$\tilde{\mathbf{F}} = \frac{\partial \tilde{\mathbf{x}}}{\partial \mathbf{X}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \tilde{\mathbf{x}}}{\partial x} & \frac{\partial \tilde{\mathbf{x}}}{\partial y} & \frac{\partial \tilde{\mathbf{x}}}{\partial z} \end{pmatrix}^T.$$

8. Вычисление тензора деформации Грина–Лагранжа  $\tilde{\boldsymbol{\epsilon}} \in \left( Z_{(x_0, y_0)}^{\tilde{U}} \right)^{3 \times 3}$ :

$$\tilde{\boldsymbol{\epsilon}} = \frac{1}{2} \left( \tilde{\mathbf{F}} \tilde{\mathbf{F}}^T - \mathbf{I} \right).$$

9. Расчет плотности энергии деформации по модели Сен-Венана–Киргхофа  $\tilde{\boldsymbol{\omega}} \in Z_{(x_0, y_0)}^{\tilde{U}}$ :

$$\tilde{\boldsymbol{\omega}} = \left( \omega \frac{\partial \omega}{\partial r_i} \frac{\partial \omega}{\partial r_j} \frac{\partial^2 \omega}{\partial r_i \partial r_j} \right)^T = \frac{\lambda}{2} (\text{tr} \tilde{\boldsymbol{\epsilon}})^2 + \mu \text{tr}(\tilde{\boldsymbol{\epsilon}}^2).$$

10. Нахождение значения элемента  $k_{ij}^e$  матрицы жесткости в точке  $(\xi, \eta, \zeta)$ :

$$k_{ij}^e = k_{ij}^e + \frac{\partial^2 \omega}{\partial r_i \partial r_j} W_\xi W_\eta W_\zeta \det(J(\xi, \eta, \zeta)),$$

где  $\frac{\partial^2 \omega}{\partial r_i \partial r_j} = \tilde{\omega}_4$ .

11. Конец цикла по  $j$ .

12. Конец цикла по  $i$ .

Описанный подход позволяет реализовать алгоритм и программу автоматического двойного численного дифференцирования функций плотности энергии деформации  $\omega$ , зависящих от градиента деформации  $\mathbf{F}$ . При этом возможность кодирования той или иной функции  $\omega$  в пункте 9 алгоритма зависит от перечня определенных в (35) арифметических операций.

## 5. Используемые модели материалов

В настоящей статье наряду с линейно-упругой моделью материала

$$\omega = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon}^T \mathbf{D} \boldsymbol{\varepsilon}, \tag{47}$$

рассмотрены модели гиперупругих материалов, плотность энергии деформации которых является функцией тензоров деформации Грина–Лагранжа  $\boldsymbol{\varepsilon}$  или Коши–Грина  $\mathbf{C}$ , которые в свою очередь выражаются через градиент деформации  $\mathbf{F}$

$$\mathbf{C} = \mathbf{F} \mathbf{F}^T, \quad \boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2} (\mathbf{F} \mathbf{F}^T - \mathbf{I}). \tag{48}$$

Гиперупругие модели используются для описания эластичных свойств материалов, подвергающихся в процессе моделирования значительным деформациям от 100% и более.

Среди сжимаемых моделей рассмотрен неогукков материал

$$\omega = \frac{\mu}{2} (\text{tr } \mathbf{C} - 3) - \mu \ln \sqrt{\det \mathbf{C}} + \frac{\lambda}{2} \left( \ln \sqrt{\det \mathbf{C}} \right)^2 \tag{49}$$

и модель Сен-Венана–Кирхгофа (45), где  $\lambda, \mu$  — константы Ламе.

Механическое поведение различных резин и полимеров, а также биологических тканей и органов более близко описывается практически несжимаемыми гиперупругими моделями, имеющими коэффициент Пуассона близкий к 0.5. Функция плотности энергии деформации таких материалов разделяется на объемную и девиаторную части, которые определяют ответ материала на сдвиговые и объемные нагрузки.

Девиаторная составляющая функции  $\omega$  вычисляется из первого  $I_1(\bar{\mathbf{C}})$  и второго  $I_2(\bar{\mathbf{C}})$  инвариантов девиаторной составляющей тензора Коши–Грина

$$I_1(\bar{\mathbf{C}}) = \text{tr } \bar{\mathbf{C}}, \quad I_2(\bar{\mathbf{C}}) = \frac{1}{2} \left( (\text{tr } \bar{\mathbf{C}})^2 + \text{tr } \bar{\mathbf{C}}^2 \right), \tag{50}$$

где

$$\bar{\mathbf{C}} = \bar{\mathbf{F}} \bar{\mathbf{F}}^T, \quad \mathbf{F} = J^{1/3} \bar{\mathbf{F}}, \quad J = \det \mathbf{F}. \tag{51}$$

Объемная часть зависит от определителя  $J$  градиента деформации, а также некоторого параметра штрафа, задающего степень несжимаемости материала. В расчетах использованы два варианта несжимаемого неогуккового материала с различными объемными частями:

$$\omega = c_{10} (I_1(\bar{\mathbf{C}}) - 3) + G (J - 1)^2 \tag{52}$$

и

$$\omega = \frac{\mu}{2} (I_1(\bar{\mathbf{C}}) - 3) + \frac{\kappa}{4} \left( (J - 1)^2 + (\ln J)^2 \right), \tag{53}$$

где  $\kappa$  — объемный модуль,  $c_{10}$  — постоянная материала,  $G$  — безразмерный параметр штрафа.

Также рассмотрена экспоненциальная несжимаемая модель:

$$\omega = \frac{\alpha}{2\gamma} \left( e^{\gamma(I_1(\bar{\mathbf{C}}) - 3)} - 1 \right) + \frac{\kappa}{4} \left( (J - 1)^2 + (\ln J)^2 \right), \tag{54}$$

где  $\alpha, \gamma$  — постоянные, задающие свойства материала.

## 6. Тестовые примеры

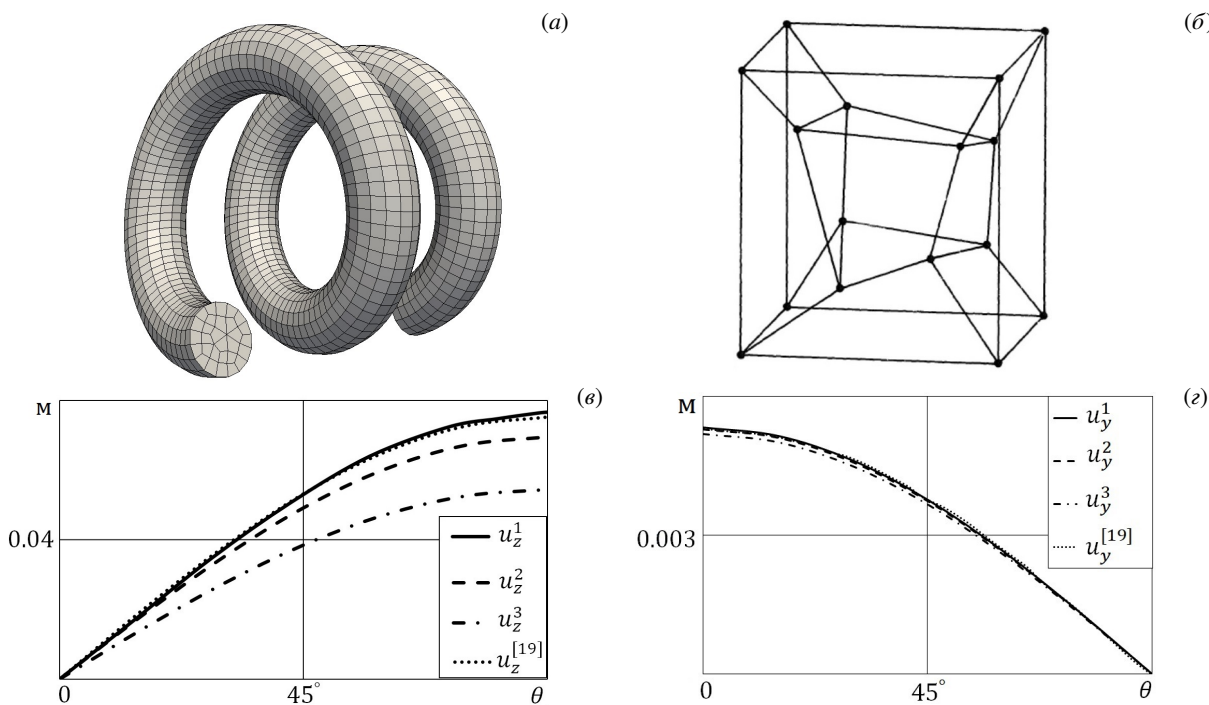
Главным преимуществом ячеек типа 3814, в сравнении с 3834, является возможность их применения для конечно-элементных вычислений на неструктурированных шестигранных сетках. Таким образом, появляется возможность решения задач с геометрией неортогональной формы, примером которой может служить пружина, изображенная на рисунке 1а. Далее представим ряд примеров, демонстрирующих возможности разработанного метода и шестигранных ячеек типа 3814, построенных на основе подходов, изложенных в [16, 17].

*Пример 1.* Рассмотрим задачу деформирования куба, применяемую для обязательного первоначального тестирования методов конечно-элементного анализа [18]. Эталонная шестигранная сетка, используемая в тесте, изображена на рисунке 1б. В таблице 1 для всех шестигранников сетки представлены числа узлов  $N$  и ячеек

**Таблица 1.** Характеристики сеток, используемых в тестовых задачах

Параметр	Куб	Тест Принстон	Стержень	Пружина	Маятник	Цилиндр
$N$	16	11200/4800	6400	6042	24/81	1440/9792
$M$	7	19185/8153	8181	4582	5/32	1024/8192
$Q_J^{\min}$	-0.13	0.53/0.72	1	0.8	0/0	0.99/0.99
$Q_s^{\max}$	0.6	0.45/0.34	0	0.4	1/1	0.06/0.06
$Q_a^{\max}$	2.8	3.7/1.96	4	1.9	1/1.25	25/25

$M$ , а также минимальное значение нормированного якобиана  $Q_J^{\min}$ , максимальные значения скошенности  $Q_s^{\max}$  и аспектного соотношения  $Q_a^{\max}$ . Особенностью теста является наличие в сетке вырожденных элементов, о чем свидетельствует отрицательная мера минимального нормированного Якобиана  $Q_J = -0.13$ . Заданные параметры линейно-упругого материала  $E = 1$  МПа,  $\nu = 0.25$  и наложенные в пределах малых деформаций граничные условия на перемещения, описанные в [18], обеспечивают следующие теоретические значения полей деформаций  $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \varepsilon_{zz} = 2\varepsilon_{xy} = 2\varepsilon_{xz} = 2\varepsilon_{yz} = 10^{-3}$  и напряжений  $\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \sigma_{zz} = 2000$  Па,  $\sigma_{xy} = \sigma_{xz} = \sigma_{yz} = 400$  Па. Значения деформаций и напряжений, полученные в результате расчета разработанным методом МКЭ в терминах ANCF на основе ячеек типа 3813 совпали с вышеуказанными теоретическими значениями вплоть до 99.7%.



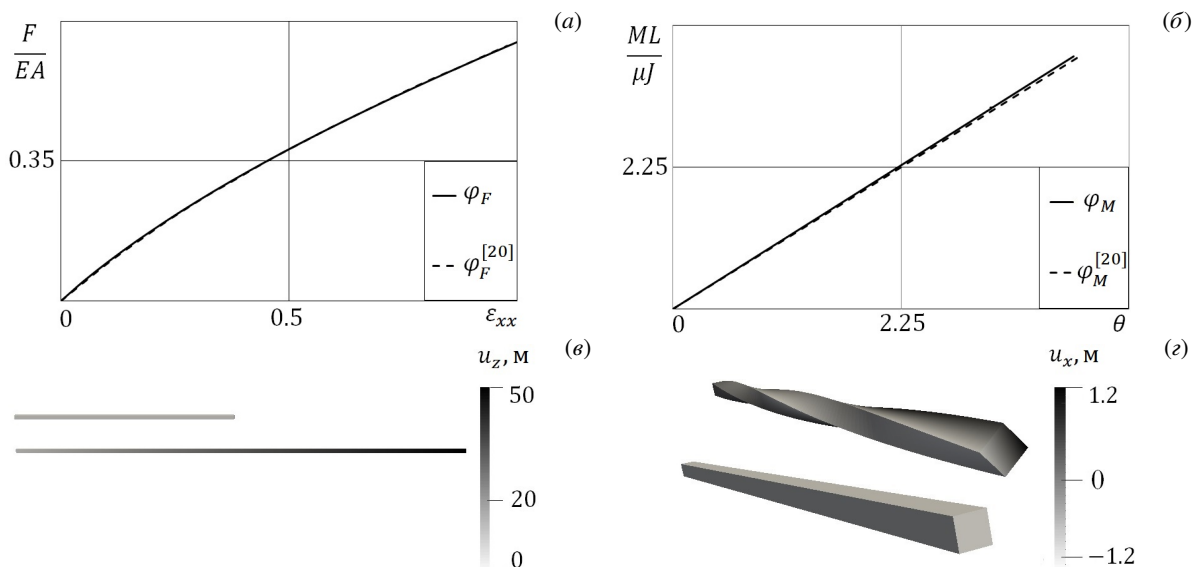
**Рис. 1.** Неструктурированные шестигранные сетки для модели пружины и пневматического актуатора (в том числе в разрезе) (а), эталонная шестигранный для задачи деформирования куба (б), перемещения вдоль осей  $Oz$  и  $Oy$  для теста Принстон (в, з)

**Пример 2.** Перейдем к тесту, осуществленному в Принстонском университете, США (далее тест Принстон) [10, 19] о деформировании прямоугольной балки длиной  $0.508$  м вдоль оси  $Ox$ , шириной  $3.2024 \times 10^{-3}$  м вдоль  $Oy$  и высотой  $12.377 \times 10^{-3}$  м вдоль  $Oz$ . Параметры линейно-упругого материала  $E = 2.07 \times 10^{11}$  Па,  $\nu = 0.3$ . Балка закреплена с одного конца, а на другой конец подается начальная нагрузка вдоль оси ординат  $F_y = 4.448$  Н. Осуществляется пошаговый поворот вектора нагрузки на  $90^\circ$  вдоль оси  $Ox$ , на каждом шаге текущий угол наклона вектора нагрузки относительно оси  $Oy$  обозначается через  $\theta$ . Особенностью теста являются возникающие в его ходе эффекты сдвигового запирания. Как уже было сказано, одним из способов удаления эффектов сдвигового запирания при использовании шестигранных элементов типа 3813, является применение мелкой расчетной сетки.

На рисунке 1в представлены результаты перемещения конца балки вдоль оси  $Oz$ , где присутствует наибольшая жесткость конструкции на изгиб и, как следствие, наиболее явно проявляются эффекты сдвигового запирания. При расчетной шестигранный сетке, содержащей 700 слоев ячеек вдоль оси  $Ox$  (где каждый слой состоит из 8

ячеек, равномерно распределенных в плоскости  $Oyz$ ), расхождение полученных МКЭ в терминах ANCF значений  $u_z^1$  с данными  $u_z^{[19]}$ , представленными в статье [19] (на основе ячеек типа 3843 и других элементов более высокого порядка), не превышает 1.5%. Для сетки, состоящей из 300 слоев, расхождение значений  $u_z^2$  с данными  $u_z^{[19]}$  не превышает 12%, при этом для 150 слоев максимальное отличие в результатах  $u_z^3$  достигает 40%. Отметим, что для перемещений вдоль оси  $Oy$  расхождение составляет не более 2% для всех сеток (Рис. 1з). Кроме того, для разработанного метода расчеты проведены в том числе на сетках, содержащих неортогональные ячейки ( $Q_J^{\min} < 1$ ), которые получены из ортогональных путем движения узлов. При этом результаты расчетов на ортогональных сетках и сетках, содержащих неортогональные ячейки, совпадают до 99% (при условии равного в них числа ячеек).

**Пример 3.** Рассмотрим моделирование растяжения (Рис. 2а, в) и скручивания (Рис. 2б, з) прямоугольного стержня размерами  $1 \times 1 \times 50$  м, состоящего из гиперупругого сжимаемого материала неогукта вида (48). Параметры материала  $E = 100$  Па и  $\nu = 0.3$ , где  $\mu = E/2(1 + \nu)$  и  $\lambda = E\nu/((1 + \nu)(1 - 2\nu))$ . В случае растяжения один конец стержня закреплен, а на другой последовательно подается увеличивающаяся по модулю растягивающая нагрузка  $F$ . Распределение значений компоненты перемещения  $u_z$  в начальном и деформированном состояниях стержня изображено на рисунке 2в. На рисунке 2а представлен график зависимости безразмерной величины  $\varphi_F = F/(EA)$  от значения деформации балки вдоль направления растяжения  $\varepsilon_{zz}$ , где  $A$  — площадь сечения балки. Расхождение результатов, полученных МКЭ в терминах ANCF  $\varphi_F$ , с данными  $\varphi_F^{[20]}$  из статьи [20] практически не фиксируется.



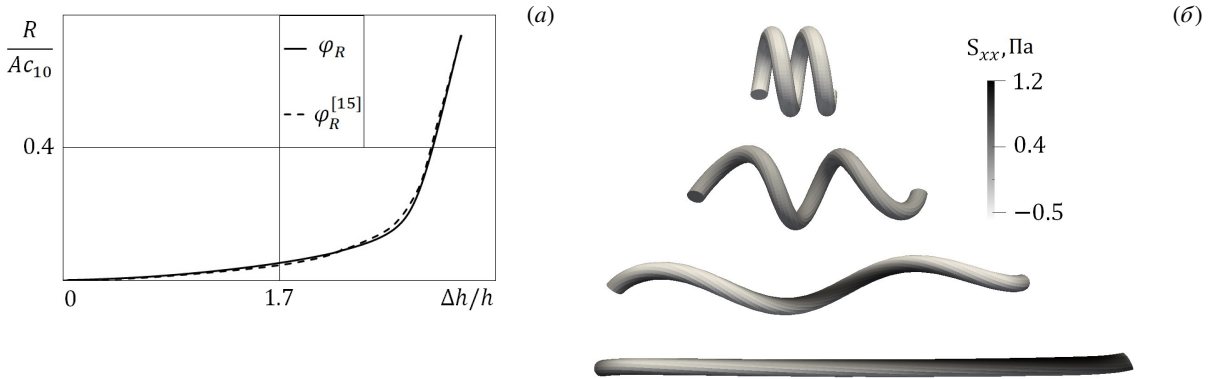
**Рис. 2.** Распределение величин  $\varphi_F$  (а) и  $\varphi_M$  (б), начальное и конечная форма стержня при растяжении (в) и скручивании (з)

При скручивании на свободный конец стержня поэтапно подается увеличивающийся по модулю момент силы  $M$ . Распределение значений компоненты перемещения  $u_x$  в начальном и деформированном состояниях стержня содержит рисунок 2з. На рисунке 2б показан график зависимости безразмерной величины  $\varphi_M = ML/(\mu J)$  от значения угла скручивания  $\theta$ , где  $L$  — длина стержня,  $J \approx 2.25a^4$  — постоянная кручения стержня ( $a$  — половина длины стороны квадратного сечения). Расхождение авторских результатов  $\varphi_M$ , с данными  $\varphi_M^{[20]}$  из статьи [20] не превысило 1.5%. При моделировании задачи использовалась шестигранная сетка, состоящая из ячеек прямоугольной формы (Табл. 1).

**Пример 4.** На рисунке 3 представлены результаты решения задачи на растяжение пружины с нешлифованными опорными витками и следующими параметрами: индексом пружины  $c = D/d = 4$  (отношение диаметра прутка  $D$  к среднему диаметру поверхности витка  $d$ ), шагом витка  $h = D/2$ , числом рабочих витков  $n = 2$ . При нахождении НДС пружины полагалось, что оно происходит в соответствии с несжимаемой моделью материала неогукта вида (52) с параметром  $c_{10} = 1$  Па. Используемая в расчетах шестигранная сетка изображена на рисунке 1а. На оба конца пружины в противоположные стороны пошагово накладываются кинематические граничные условия, обеспечивающие ее поэтапное (на величину  $\Delta h$ ) растяжение вдоль оси  $Ox$  (Рис. 3б) при сохранении плоскостности сечений левого и правого витков.

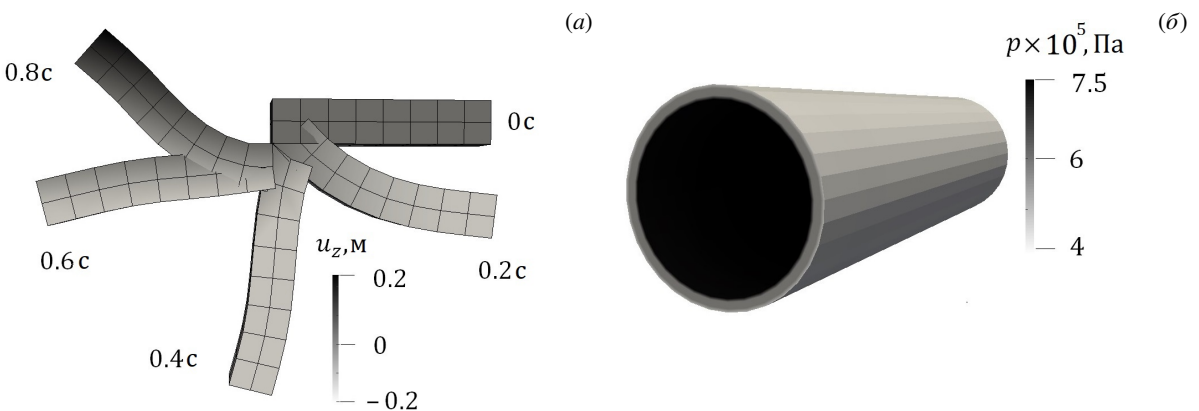
На рисунке 3а представлен график зависимости безразмерной величины  $\varphi_F = R/(Ac_{10})$  от значения

относительного удлинения  $\Delta h/h$  пружины вдоль направления растяжения, где  $A$  — площадь сечения пружины,  $R$  — сила ее реакции на растяжение. Расхождение результатов  $\varphi_R$ , полученных авторами, с данными  $\varphi_R^{[15]}$  из статьи [15] составляют менее 2%.



**Рис. 3.** Задача на растяжение пружины: график величины  $\varphi_R$  (а) и распределение компоненты  $S_{xx}$  напряжения для различных этапов растяжения (б)

**Пример 5.** Разработанный метод применен для решения динамической задачи о колебании линейно-упругого ( $E = 5 \times 10^5$  Па,  $\nu = 0.3$ ,  $\rho = 7800$  кг/м<sup>3</sup>) прямоугольного маятника размерами  $0.5 \times 0.1 \times 0.1$  м под действием силы тяжести (Рис. 4а). На рисунке 5а, б представлены графики перемещения во времени конца маятника вдоль осей  $Ox$  и  $Oz$ , полученные при расчетах с помощью  $\beta$ -схемы Ньюмарка ( $u_x^\beta, u_z^\beta$ ) с параметрами  $\gamma = 0.5$ ,  $\beta = 0.25$  и НТТ- $\alpha$  схемы ( $u_x^\alpha, u_z^\alpha$ ) с параметрами  $\alpha = -0.2$ ,  $\gamma = 0.7$ ,  $\beta = 0.36$ . Также на графиках изображены результаты решения задачи из [9], где использована схема численного интегрирования Ньюмарка для двух типов ячеек: 3813 ( $u_x^{[9]}, u_z^{[9]}$ ) и 3843 ( $u_x^{[9]}, u_z^{[9]}$ ). Элементы типа 3843 имеют большую точность решения ввиду хранения не только абсолютных координат узлов, но также их наклонов. Расчеты, выполненные авторским методом для  $\beta$ -схемы Ньюмарка, дают хорошее совпадение с данными из работы [9], представленными для ячеек типа 3813. При этом распределение значений для НТТ- $\alpha$  схемы более близко к результатам из [9] для ячеек типа 3843. Как и в [9], при моделировании тестировались две сетки — мелкая и более грубая, состоящие из 5 и 32 ячеек соответственно; на каждой из них результаты согласуются с данными из [9].



**Рис. 4.** Положение колеблющегося маятника в различные периоды времени (а) и распределение гидростатического давления для материала Сен-Венана–Кирхгофа в максимальный момент деформации цилиндра (б)

**Пример 6.** В следующем примере для тестирования и сравнения возможностей различных моделей материалов решена динамическая задача о расширении полого цилиндра, являющегося упрощенным фрагментом сосуда более сложной формы с имеющимися локальными изменениями стенок (Рис. 4б). Величина однородного давления на внутренние стенки цилиндра в момент времени  $t$  вычислялась по формуле:  $p_{in} = 260000 \sin(40\pi t)$ . На рисунке 5в, г представлены значения модуля перемещения внутренней стенки цилиндра ( $u = \|\mathbf{u}\|$ ) в различные моменты времени, полученные авторским методом и в работе [21], для следующих моделей материалов:

- линейно-упругой ( $u_{lin}$  и  $u_{lin}^{[21]}$ );
- сжимаемой, Сен-Венана–Кирхгофа вида (45) ( $u_{sk}$  и  $u_{sk}^{[21]}$ );
- несжимаемой, неогоуковой вида (53) ( $u_{neo}$  и  $u_{neo}^{[21]}$ );
- несжимаемой, экспоненциальной вида (54) ( $u_{exp}$  и  $u_{exp}^{[21]}$ ).

В перечисленных моделях использовались следующие константы:  $E = 6 \times 10^6$  Па,  $\nu = 0.45$ ,  $\rho = 1200$  кг/м<sup>3</sup>,  $\gamma = 0.8$ . В целом расхождение авторских результатов с данными из работы [21] не превышали 4%.

Также авторами данной работы осуществлена оценка временных затрат на построение матрицы жесткости линейно-упругого материала для постановок задачи в перемещениях (в пределах малых деформаций) и в абсолютных узловых координатах с применением автоматического дифференцирования (производных первого (10) и второго (17) порядков). Апробированы три сетки, различающиеся по числу ячеек. Расчеты осуществлены на ЭВМ с ОЗУ 8 Гб и процессоре Intel Core i3-1005G1 1.2 ГГц. Согласно таблице 2, наиболее быстрым оказывается алгоритм, основанный на методе перемещений. Подходы с автоматическим дифференцированием (АД) требуют для реализации больше времени: примерно в 2 раза подход при производных первого порядка и более чем в 2.5 раза подход при производных второго порядка.

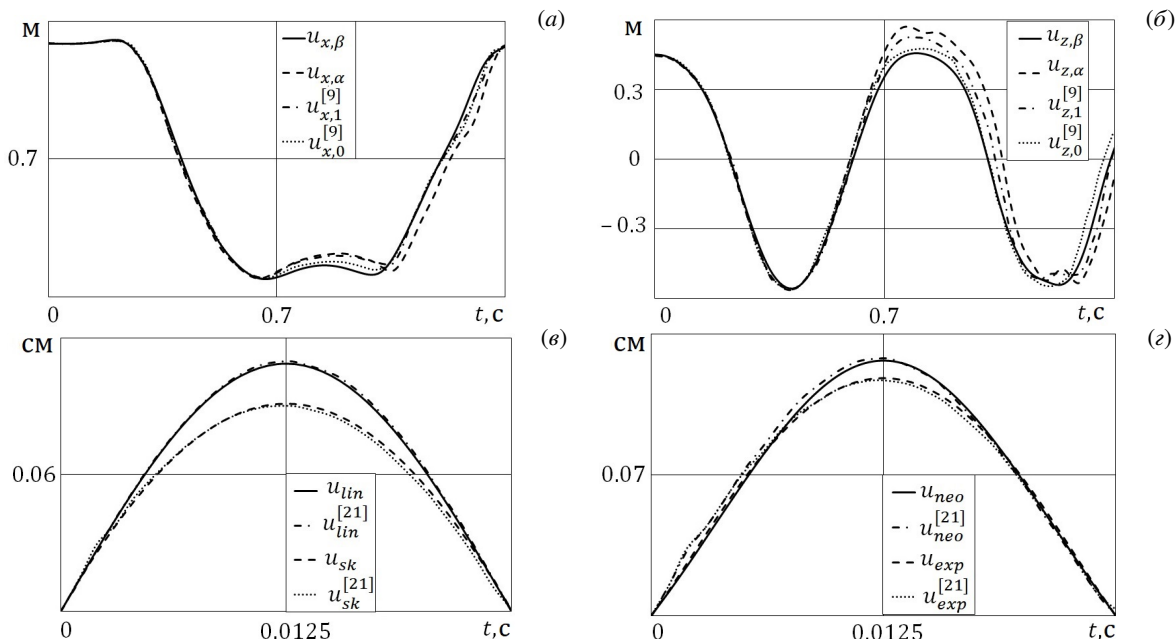
**Таблица 2.** Временные затраты на построение матрицы жесткости линейно-упругого материала для задачи расширения цилиндра

Число ячеек сетки	(Время, [с])/прирост затрат		
	Метод перемещений	АД с производными первого порядка	АД с производными второго порядка
1024	3.1	7.0/2.6	9.3/3.0
8192	26.6	56.0/2.1	74.7/2.8
27648	94.0	188.8/2.0	251.5/2.6

Однако более затратное по времени АД второго порядка позволяет исключить ошибки в части вывода явного вида тензора напряжений для новых моделей гиперупругих материалов, что оптимизирует процесс их интеграции в программное приложение.

### 7. Заключение

Построен метод решения статических и динамических задач теории упругости, основанный на



**Рис. 5.** Распределение компонент перемещений во времени для задачи колебания маятника (а, б) и расширения полого цилиндра (в, г)

МКЭ-формулировке в терминах абсолютных узловых координат (ANCF). При этом в качестве наборов узловых степеней свободы конечного элемента используются только абсолютные координаты узлов, что дает возможность применять ANCF подход для вычислений на неструктурированных шестигранных сетках.

Расчетная матрица жесткости элемента имеет вид симметричной матрицы Гессе и строится при помощи разработанного алгоритма численного дифференцирования второго порядка, который также позволяет исследовать гиперупругие модели, не имеющие аналитического выражения для напряжений. Для дискретизации уравнения движения наряду с широко используемой в ANCF подходе схемой интегрирования Ньюмарка применена НТТ- $\alpha$  схема.

Рассмотренные примеры решения статических и динамических задач упругости для линейного и гиперупругих материалов (модели неогукса, Сен-Венана–Кирхгофа и другие) показывают в целом хорошую согласованность результатов, полученных разработанным авторами методом и на основе других численных подходов.

Предполагается дальнейшее развитие метода в части его применения для решения задач контактного взаимодействия с учетом физической и геометрической нелинейности, а также моделирования сложных физических процессов ударного воздействия на биологические ткани и органы с различными определяющими соотношениями.

## Литература

1. Луцин Л.П., Шаранюк А.В. Метод конечных элементов в задачах динамики свободных конструкций // Ученые записки ЦАГИ. 2000. Т. 31, № 3/4. С. 156–177.
2. Shabana A.A., Hussien H.A., Escalona J.L. Application of the Absolute Nodal Coordinate Formulation to Large Rotation and Large Deformation Problems // Journal of Mechanical Design. 1998. Vol. 120, no. 2. P. 188–195. DOI: 10.1115/1.2826958.
3. Gerstmayr J., Sugiyama H., Mikkola A. Review on the Absolute Nodal Coordinate Formulation for Large Deformation Analysis of Multibody Systems // Journal of Computational and Nonlinear Dynamics. 2013. Vol. 8, no. 3. 031016. DOI: 10.1115/1.4023487.
4. Otsuka K., Makihara K., Sugiyama H. Recent Advances in the Absolute Nodal Coordinate Formulation: Literature Review From 2012 to 2020 // Journal of Computational and Nonlinear Dynamics. 2022. Vol. 17, no. 8. 080803. DOI: 10.1115/1.4054113.
5. Olshevskiy A., Dmitrochenko O., Kim C.-W. Three-Dimensional Solid Brick Element Using Slopes in the Absolute Nodal Coordinate Formulation // Journal of Computational and Nonlinear Dynamics. 2014. Vol. 9, no. 2. 021001. DOI: 10.1115/1.4024910.
6. Olshevskiy A., Dmitrochenko O., Yang H.-I., Kim C.-W. Absolute nodal coordinate formulation of tetrahedral solid element // Nonlinear Dynamics. 2017. Vol. 88, no. 4. P. 2457–2471. DOI: 10.1007/s11071-017-3389-1.
7. Дмитроченко О.Н. Десятичный номенклатурный код dncmkot для идентификации существующих и автоматической генерации новых конечных элементов // Вестник Брянского государственного технического университета. 2017. № 1. С. 207–217. DOI: 10.12737/24955.
8. Дмитроченко О.Н. Расширенный десятичный номенклатурный код dncm описания произвольного конечного элемента // Вестник Брянского государственного технического университета. 2017. № 2. С. 155–166. DOI: 10.12737/article\_59353e29d22508.11477409.
9. Kim H., Lee H., Lee K., Cho H., Cho M. Efficient flexible multibody dynamic analysis via improved C0 absolute nodal coordinate formulation-based element // Mechanics of Advanced Materials and Structures. 2022. Vol. 29, no. 25. P. 4125–4137. DOI: 10.1080/15376494.2021.1919804.
10. Obrezkov L.P., Mikkola A., Matikainen M.K. Performance review of locking alleviation methods for continuum ANCF beam elements // Nonlinear Dynamics. 2022. Vol. 109. P. 531–546. DOI: 10.1007/s11071-022-07518-z.
11. Hilber H.M., Hughes T.J.R., Taylor R.L. Improved numerical dissipation for time integration algorithms in structural dynamics // Earthquake Engineering & Structural Dynamics. 1977. Vol. 5. P. 283–292. DOI: 10.1002/EQE.4290050306.
12. Караваев А.С., Копысов С.П. Метод композиции решений в контактных задачах с трением деформируемых тел // Вестник Удмуртского университета. Математика. Механика. Компьютерные науки. 2023. Т. 33, № 4. С. 659–674. DOI: 10.35634/vm230408.
13. Bücker H.M., Corliss G.F. A Bibliography of Automatic Differentiation // Automatic Differentiation: Applications, Theory, and Implementations. Vol. 50 / ed. by M. Bücker, G. Corliss, U. Naumann, P. Hovland, B. Norris. 2006. P. 321–322. DOI: 10.1007/3-540-28438-9\_28.
14. Семенов К.К. Автоматическое дифференцирование функций, выраженных программным кодом // Известия высших учебных заведений. Приборостроение. 2011. Т. 54, № 12. С. 34–39.

15. *Vigliotti A., Auricchio F.* Automatic Differentiation for Solid Mechanics // Archives of Computational Methods in Engineering. 2021. Vol. 28. P. 875–895. DOI: 10.1007/s11831-019-09396-y.
16. *Караваев А.С., Копысов С.П., Пономарёв А.Б.* Алгоритмы построения и перестроения неструктурированных четырехугольных сеток в многосвязных областях // Вычислительная механика сплошных сред. 2012. Т. 5, № 2. С. 144–150. DOI: 10.7242/1999-6691/2012.5.2.17.
17. *Караваев А.С., Копысов С.П.* Построение адаптивных шестигранных сеток из поверхностной и воксельной геометрических моделей // Вестник Удмуртского университета. Математика. Механика. Компьютерные науки. 2023. Т. 33, № 3. С. 534–547. DOI: 10.35634/vm230310.
18. *Macneal R.H., Harder R.L.* A proposed standard set of problems to test finite element accuracy // Finite Elements in Analysis and Design. 1985. Vol. 1, issue 1. P. 3–20. DOI: 10.1016/0168-874X(85)90003-4.
19. *Ebel H., Matikainen M.K., Hurskainen V.-V., Mikkola A.* Higher-order beam elements based on the absolute nodal coordinate formulation for three-dimensional elasticity // Nonlinear Dynamics. 2017. Vol. 88, no. 2. P. 1075–1091. DOI: 10.1007/s11071-016-3296-x.
20. *Le Clézio H., Lestringant C., Kochmann D.M.* A numerical two-scale approach for nonlinear hyperelastic beams and beam networks // International Journal of Solids and Structures. 2023. Vol. 276. 112307. DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2023.112307.
21. *Mengaldo G.* Nonlinear Fluid-Structure interaction with applications in computational haemodynamics: PhD thesis / Mengaldo G. 2011. URL: [https://www.politesi.polimi.it/retrieve/a81cb059-b461-616b-e053-1605fe0a889a/Master\\_thesis.pdf](https://www.politesi.polimi.it/retrieve/a81cb059-b461-616b-e053-1605fe0a889a/Master_thesis.pdf).

### Сведения об авторах:

*Караваев Александр Сергеевич*, кфмн, нс, Удмуртский государственный университет (УдГУ), 426034, г. Ижевск, ул. Университетская, д. 1; e-mail: [karavaev-alexander@yandex.ru](mailto:karavaev-alexander@yandex.ru); ORCID: 0009-0000-6510-8483

*Копысов Сергей Петрович*, дфмн, проф., УдГУ; e-mail: [s.kopysov@gmail.com](mailto:s.kopysov@gmail.com); ORCID: 0000-0003-2511-5894