



Institute of Computer Science
Academy of Sciences of the Czech Republic

Modifikace FEC – dynamická kontaktní úloha v lineární vazkopružnosti se třením

M. Lanzendörfer

Technical report No. 1007



Institute of Computer Science
Academy of Sciences of the Czech Republic

Modifikace FEC – dynamická kontaktní úloha v lineární vazkopružnosti se třením

M. Lanzendörfer

Technical report No. 1007

Abstrakt:

Kód FEC byl připraven k řešení dynamických kontaktních problémů v lineární pružnosti, bez tření. Vypracovaná modifikace implementuje lineární vazkopružný model materiálu a ve formulaci kontaktní úlohy zahrnuje Trescův model daného tření.

Předložená studie je výzkumnou zprávou projektu MPO ČR č. FT-TA/087 za rok 2007.

Keywords:

metoda konečných prvků, dynamická kontaktní úloha se třením, vazkopružnost, matematické programování

1 Úvod

1.1 Úvod, motivace

Matematický model jednostranného kontaktu pružných těles má rozsáhlé důležité aplikace od průmyslového vývoje až po například výzkum biomechaniky lidského skeletu. Program s pracovním názvem FEC (resp. FEC 3D), sestavený za účelem řešení stacionárních kontaktních úloh v lineární pružnosti metodou konečných prvků ve třech prostorových dimenzích, byl již na ÚI AV ČR používán ke studiu některých aplikací v biomechanice a v geomechanice (viz například [9]). Software FEC je popsán v technických zprávách [1], [4] a [6], další vyvíjené metody jsou popisovány v [8]. Výchozí kód používá formulaci kontaktu pomocí podmínek Signoriniho typu společně s Trescovým modelem tření. Ve zprávě [10] byla popsána modifikace kódu FEC připravená pro numerické simulace dynamické kontaktní úlohy bez tření, v lineární pružnosti. Ta byla také aplikována na řešení problémů v biomechanice lidského kolenního kloubu a jeho náhrady, viz [12].

Při řešení některých reálných úloh v řadě oborů, například biomechanice, geomechanice, mechanice a technologii, je potřeba uvažovat i jinou než dokonale pružnou odezvu materiálů. V některých aplikacích je vhodné uvažovat modely, popisující napětíovou odezvu nejen v závislosti na aktuální deformaci, ale také na krátké historii deformace. V následující zprávě popíšeme formulaci modelu v lineární vazkopružnosti. Současně budeme uvažovat kontaktní úlohu se zahrnutím třecích sil, s modelem nestacionárního Trescova tření. Popíšeme časovou a prostorovou diskretizaci a následně předložíme jednoduchou modifikaci kódu FEC, která zahrnuje numerické řešení těchto úloh. Vývoj byl součástí projektu MPO ČR pod označením FT-TA/087.

1.2 Fyzikální formulace

Mějme oblast Ω představující sjednocení \bar{s} jednotlivých pružných těles $\Omega = \cup_{s=1}^{\bar{s}} \Omega^s \subset \mathbb{R}^3$ ve třírozměrném prostoru. Hranici oblasti rozdělme disjunktčně podle uvažovaných okrajových podmínek na $\partial\Omega = \Gamma_{\mathbf{F}} \cup \Gamma_{\mathbf{u}} \cup \Gamma_{\mathbf{c}}$, přičemž $\Gamma_{\mathbf{c}} = \cup_{r,s} \Gamma_{\mathbf{c}}^{r,s}$, kde $\Gamma_{\mathbf{c}}^{r,s} = \Gamma_{\mathbf{c}}^r \cap \Gamma_{\mathbf{c}}^s$ představuje kontaktní rozhraní mezi tělesy Ω^r a Ω^s , $\Gamma_{\mathbf{c}}^s \subset \partial\Omega^s$. Uvažujme časový interval $I = (0, T)$, v němž budeme vývoj mechanického systému studovat. Hledáme posunutí $\mathbf{u} : I \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}^3$, splňující následující:

V celé oblasti Ω je splněna pohybová rovnice

$$\rho \partial_{tt} \mathbf{u} + \alpha \partial_t \mathbf{u} - \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}, \partial_t \mathbf{u}) = \mathbf{g} \quad \text{v } I \times \Omega, \quad (1.1)$$

kde $\rho > 0$ je materiálová hustota (konstantní v každém tělese Ω^s) a $\alpha > 0$ je tlumící parametr. Ve vazkopružném modelu obvykle uvažujeme $\alpha = 0$. Značíme ∂_t , respektive ∂_{tt} první, respektive druhou derivaci podle času. Pro tenzor napětí $\boldsymbol{\sigma}$ uvažujeme vztah

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}, \partial_t \mathbf{u}) &= \boldsymbol{\sigma}_0(\mathbf{u}) + \boldsymbol{\sigma}_1(\partial_t \mathbf{u}) \\ &= \mathbf{C}_0 \mathbf{e}(\mathbf{u}) + \mathbf{C}_1 \mathbf{e}(\partial_t \mathbf{u}), \\ \mathbf{e}(\mathbf{v}) &= \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{v} + \nabla^T \mathbf{v}), \end{aligned} \quad (1.2)$$

tedy $\boldsymbol{\sigma}_0$ je lineárně závislé na linearizovaném tenzoru deformace (tenzoru malých deformací) $\mathbf{e}(\mathbf{u})$ a člen $\boldsymbol{\sigma}_1$ přidává obdobnou lineární závislost na rychlosti deformace. Přitom \mathbf{C}_0 , \mathbf{C}_1 jsou tenzory čtvrtého řádu takové, že platí podmínky symetrie a podmínky pozitivní definitnosti, viz například [1], [5]. Program FEC je navíc připraven a používán pro modely izotropního materiálu; pro každou oblast Ω^s jsou zadávány dvě materiálové konstanty určující elastickou odezvu: Youngův modul pružnosti E_0 a Poissonova konstanta σ_0 ; vazká odezva v $\boldsymbol{\sigma}_1(\partial_t \mathbf{u})$ je v současné verzi modelována obdobně, předepsáním dvou konstant E_1 a σ_1 .

Na hranici $\Gamma_{\mathbf{u}}$ uvažujeme tělesa pevně uchycena, posunutí je tedy předepsáno pomocí Dirichletovy okrajové podmínky

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_D \quad \text{na } I \times \Gamma_{\mathbf{u}}, \quad (1.3)$$

zatímco na hranici $\Gamma_{\mathbf{F}}$ je předepsáno zatížení těles pomocí Neumannovy okrajové podmínky

$$\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} = \mathbf{f} \quad \text{na } I \times \Gamma_{\mathbf{F}}, \quad (1.4)$$

kde \mathbf{n} značí normálový vektor k hranici Γ_F . Jak \mathbf{u}_D tak \mathbf{f} se mohou měnit v závislosti na čase.

Na kontaktním rozhraní předepisujeme Signoriniho podmínku nepronikání

$$\begin{aligned} [\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}]^{rs} &\leq 0, & \sigma_{\mathbf{n}}^{rs} &\leq 0 \\ \sigma_{\mathbf{n}}^{rs} [\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}]^{rs} &= 0 \end{aligned} \quad \text{na } I \times \Gamma_c, \quad (1.5)$$

kde $[*]^{rs} := *^r - *^s$ značí skok hodnoty $*$ na rozhraní těles Ω^r a Ω^s , kde \mathbf{n} značí jednotkový normálový vektor ke kontaktní hranici Γ_c^{rs} a kde $\sigma_{\mathbf{n}}^{rs} = \sigma_{\mathbf{n}}^r = \sigma_{\mathbf{n}}^s$, $\sigma_{\mathbf{n}} = (\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}) \cdot \mathbf{n}$ je normálová část napětí na kontaktním rozhraní. Zároveň na kontaktním rozhraní uvažujeme Trescův model tření, tedy podmínku

$$\begin{aligned} |\boldsymbol{\sigma}_{\mathbf{t}}^{rs}| &\leq g_c^{rs}, & [\partial_t \mathbf{u}_{\mathbf{t}}]^{rs} &= -\gamma \boldsymbol{\sigma}_{\mathbf{t}}^{rs} \\ [\partial_t \mathbf{u}_{\mathbf{t}}]^{rs} (|\boldsymbol{\sigma}_{\mathbf{t}}^{rs}| - g_c^{rs}) &= 0 \end{aligned} \quad \text{na } I \times \Gamma_c, \quad (1.6)$$

kde $\gamma(t, \mathbf{x}) > 0$ je libovolná (nikoliv předepsaná) skalární funkce, kde $g_c^{rs} > 0$ je dané tření na rozhraní Ω^r a Ω^s , kde $\mathbf{u}_{\mathbf{t}} := \mathbf{u} - (\mathbf{u} \cdot \mathbf{n})\mathbf{n}$ je tečná složka posunutí a kde $\boldsymbol{\sigma}_{\mathbf{t}}^{rs} = \boldsymbol{\sigma}_{\mathbf{t}}^r = \boldsymbol{\sigma}_{\mathbf{t}}^s$, $\boldsymbol{\sigma}_{\mathbf{t}} := (\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}) - \sigma_{\mathbf{n}}\mathbf{n}$ je tečné napětí na rozhraní Γ_c^{rs} .

Řešení vychází z předepsané počáteční podmínky

$$\mathbf{u}|_{t=0} = \mathbf{u}_0, \quad \partial_t \mathbf{u}|_{t=0} = \bar{\mathbf{u}}_0 \quad \text{v } \Omega, \quad (1.7)$$

kde předpokládáme, že \mathbf{u}_0 je splňuje Signoriniho kontaktní podmínku (1.5) a je v souladu s Dirichletovou okrajovou podmínkou (1.3).

2 Model pro numerické simulace

2.1 Časová diskretizace

Zvolným schématem diskretizace v časové proměnné bylo semi-implicitní schéma, stejně jako v [10]. Volba je motivována tím, aby výsledná úloha v každém časovém kroku měla strukturu shodnou se stacionární úlohou řešenou v původním kódu FEC. Pro pevně zvolenou velikost časového kroku $\tau > 0$ uvažujeme jednotlivé časové hladiny

$$t_k = k\tau, \quad k = 1, 2, \dots$$

Rovnici (1.1) pak diskretizujeme v čase jako (horní index k značí vždy hodnotu v čase t_k):

$$\rho \left(\frac{\mathbf{u}^k - 2\mathbf{u}^{k-1} + \mathbf{u}^{k-2}}{\tau^2} \right) + \alpha \left(\frac{\mathbf{u}^k - \mathbf{u}^{k-1}}{\tau} \right) - \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}_0(\mathbf{u}^k) - \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}_1 \left(\frac{\mathbf{u}^k - \mathbf{u}^{k-1}}{\tau} \right) = \mathbf{g} \quad \text{v } \Omega, \quad (2.1)$$

což po přeuspořádání členů dává:

$$\left(\frac{\rho}{\tau^2} + \frac{\alpha}{\tau} \right) \mathbf{u}^k - \operatorname{div} \left((\boldsymbol{\sigma}_0 + \frac{\boldsymbol{\sigma}_1}{\tau})(\mathbf{u}^k) \right) = \mathbf{g} + \left(2\frac{\rho}{\tau^2} + \frac{\alpha}{\tau} \right) \mathbf{u}^{k-1} - \frac{1}{\tau} \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}_1(\mathbf{u}^{k-1}) - \frac{\rho}{\tau^2} \mathbf{u}^{k-2}. \quad (2.2)$$

Okrajové podmínky (1.3), (1.4) a (1.5) jednoduše vyžadujeme na každé časové hladině

$$\mathbf{u}^k = \mathbf{u}_D^k \quad \text{na } \Gamma_u, \quad (2.3)$$

$$\boldsymbol{\sigma}^k \mathbf{n} = \mathbf{f}^k \quad \text{na } \Gamma_F, \quad (2.4)$$

$$\begin{aligned} [\mathbf{u}^k \cdot \mathbf{n}]^{rs} &\leq 0, & \sigma_{\mathbf{n}}^k &\leq 0, \\ \sigma_{\mathbf{n}}^k [\mathbf{u}^k \cdot \mathbf{n}]^{rs} &= 0 \end{aligned} \quad \text{na } \Gamma_c, \quad (2.5)$$

hodnoty \mathbf{f}^k a \mathbf{u}_D^k se opět mohou pro různá k lišit. Okrajové podmínky (1.6) Trescova modelu tření přejdou v

$$\begin{aligned} |\boldsymbol{\sigma}_{\mathbf{t}}^{rs,k}| &\leq g_c^{rs}, & [\mathbf{u}_{\mathbf{t}}^k - \mathbf{u}_{\mathbf{t}}^{k-1}]^{rs} &= -\gamma \boldsymbol{\sigma}_{\mathbf{t}}^{rs,k} \\ [\mathbf{u}_{\mathbf{t}}^k - \mathbf{u}_{\mathbf{t}}^{k-1}]^{rs} (|\boldsymbol{\sigma}_{\mathbf{t}}^{rs,k}| - g_c^{rs}) &= 0 \end{aligned} \quad \text{na } \Gamma_c. \quad (2.6)$$

Pro předepsání počáteční podmínky jednoduchým způsobem předpokládáme zadání \mathbf{u}^0 a \mathbf{u}^{-1} , přičemž \mathbf{u}^0 předepisuje počáteční posunutí v čase $t = 0$ a \mathbf{u}^{-1} je zvoleno tak, aby nahradilo počáteční podmínku $\partial_t \mathbf{u}|_{t=0} = \bar{\mathbf{u}}_0$, tedy tak, že platí (viz (1.7))

$$\mathbf{u}^0 = \mathbf{u}_0, \quad \frac{\mathbf{u}^0 - \mathbf{u}^{-1}}{\tau} = \bar{\mathbf{u}}_0.$$

2.2 Variační formulace v daném časovém kroku

Zopakujeme zde variační formulaci úlohy, na níž je postaveno řešení metodou konečných prvků, viz také [1], [2], [3]. Označme $\mathbf{W} = \mathbf{W}^{1,2}(\Omega^1)^3 \times \dots \times \mathbf{W}^{1,2}(\Omega^{\bar{s}})^3$, kde $\mathbf{W}^{1,2}(\Omega^s)$ je standardní Sobolevův prostor. Pak množina přípustných posunutí (přípustných z hlediska Dirichletovy okrajové podmínky a Signoriniho kontaktní podmínky) na dané časové hladině t_k je

$$\mathbf{K}^k = \left\{ \mathbf{v} \mid \mathbf{v} \in \mathbf{W}, \quad \begin{array}{ll} \mathbf{v} = \mathbf{u}_D^k & \text{na } \Gamma_D \\ [\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}]^{rs} \leq 0 & \text{na } \cup_{r,s} \Gamma_c^{rs} \end{array} \right\}. \quad (2.7)$$

Funkcionál potenciální energie v čase t_k definujeme jako

$$\mathcal{L}^k(\mathbf{v}) = \frac{1}{2}A(\mathbf{v}, \mathbf{v}) - F^k(\mathbf{v}) + j^k(\mathbf{v}), \quad (2.8)$$

kde

$$A(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \int_{\Omega} (\mathbf{C}_0 + \frac{1}{\tau}\mathbf{C}_1) \mathbf{e}(\mathbf{u}) : \mathbf{e}(\mathbf{v}) \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \left(\frac{\rho}{\tau^2} + \frac{\alpha}{\tau} \right) \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{x}, \quad (2.9)$$

$$F^k(\mathbf{v}) = \int_{\Gamma_F} \mathbf{f}^k \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{s} + \int_{\Omega} \left(\mathbf{g} + \left(\frac{2\rho}{\tau^2} + \frac{\alpha}{\tau} \right) \mathbf{u}^{k-1} - \frac{\rho}{\tau^2} \mathbf{u}^{k-2} \right) \cdot \mathbf{v} + \frac{\mathbf{C}_1}{\tau} \mathbf{e}(\mathbf{u}^{k-1}) : \mathbf{e}(\mathbf{v}) \, d\mathbf{x}, \quad (2.10)$$

$$j^k(\mathbf{v}) = \int_{\Gamma_c^{rs}} g_c^{rs} |[v_t - u_t]^{rs}| \, d\mathbf{s}. \quad (2.11)$$

Poznamenejme, že v každém tělese Ω^s , $s = 1, \dots, \bar{s}$ uvažujeme obecně různé konstanty $\rho = \rho^s$ a $\alpha = \alpha^s$. Obdobně pro $\mathbf{x} \in \Omega^s$ uvažujeme $[\mathbf{C}_m \mathbf{e}(\mathbf{u})]_{ij} = [\mathbf{C}_m^s \mathbf{e}(\mathbf{u}^s)]_{ij} = \sum_{\hat{i}\hat{j}} C_{m,\hat{i}\hat{j}}^s e_{\hat{i}\hat{j}}(\mathbf{u}^s)$, kde \mathbf{C}_m^s , $m = 0, 1$, jsou zadány na každé podoblasti Ω^s různými materiálovými parametry (v používaném nejjednodušším případě konstantami E_m^s, σ_m^s).

Řešením \mathbf{u}^k naší úlohy na časové hladině t_k je minimum funkcionálu $\mathcal{L}^k(\mathbf{v})$ v množině přípustných posunutí \mathbf{K}^k

$$\mathbf{u}^k \in \mathbf{K}^k : \quad \mathcal{L}^k(\mathbf{u}^k) \leq \mathcal{L}^k(\mathbf{v}), \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{K}^k. \quad (2.12)$$

Jelikož funkcionál $\mathcal{L}^k(\mathbf{v})$ je díky členu $j^k(\mathbf{v})$ nehladký, formulujeme namísto úlohy minimalizace úlohu hledání sedlového bodu následujícím způsobem. Zavedeme množinu Λ

$$\Lambda = \{ \boldsymbol{\mu} \mid \boldsymbol{\mu} \in L^\infty(\Gamma_c)^3, \quad |\boldsymbol{\mu}| \leq 1 \text{ skoro všude na } \Gamma_c \}$$

a všimneme si, že

$$j^k(\mathbf{v}) = \sup_{\boldsymbol{\mu} \in \Lambda} J^k(\mathbf{v}, \boldsymbol{\mu}), \quad J^k(\mathbf{v}, \boldsymbol{\mu}) = \int_{\Gamma_c^{rs}} g_c^{rs} \boldsymbol{\mu} \cdot [v_t - \mathbf{u}_t^{k-1}]^{rs} \, d\mathbf{s}. \quad (2.13)$$

Definujeme tedy v čase t_k funkcionál sedlového bodu

$$\mathcal{H}^k(\mathbf{v}, \boldsymbol{\mu}) = \frac{1}{2}A(\mathbf{v}, \mathbf{v}) - F^k(\mathbf{v}) + J^k(\mathbf{v}, \boldsymbol{\mu}). \quad (2.14)$$

Řešením naší úlohy na časové hladině t_k je pak pár $(\mathbf{u}^k, \boldsymbol{\lambda}^k)$ takový, že:

$$\mathbf{u}^k \in \mathbf{K}^k, \boldsymbol{\lambda}^k \in \Lambda : \quad \mathcal{H}^k(\mathbf{u}^k, \boldsymbol{\mu}) \leq \mathcal{H}^k(\mathbf{u}^k, \boldsymbol{\lambda}^k) \leq \mathcal{H}^k(\mathbf{v}, \boldsymbol{\lambda}^k) \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{K}^k, \forall \boldsymbol{\mu} \in \Lambda. \quad (2.15)$$

Za řešení dynamické úlohy diskretizované v čase pak považujeme posloupnost $\{\mathbf{u}^k\}_{k=1}^{\bar{k}}$ (kde $t_{\bar{k}} = T$), případně vhodně zvolenou interpolaci, která z této posloupnosti vychází.

2.3 Aproximace konečnými elementy

Mějme připravenou regulární triangulaci \mathcal{T}_h (h značí velikost nejdelší hrany triangulace) jednotlivých těles Ω^s , s čtyřstěnnými elementy (simplexy) \mathcal{T}_{hn} , $n = 1, \dots, N_{el}$ a s vrcholy a_m , $m = 1, \dots, N_v$. Předpokládáme, že tělesa uvažovaná ve vzájemném kontaktu mají společnou hranici Γ_c^{rs} a že vrcholy

sousedících elementů z Γ_c^r a Γ_c^s vždy tvoří pár (v němž oba vrcholy mají stejné souřadnice a jemuž přísluší normálový vektor \mathbf{n}). Stejně tak sousedící stěny elementů na Γ_c tvoří páry, které značíme S_{hl} , $l = 1, \dots, N_{mult}$.

Množiny \mathbf{W} , \mathbf{K}^k a $\mathbf{\Lambda}$ aproximujeme konečně-dimenzionálními množinami

$$\mathbf{W}_h = \{ \mathbf{v}_h \in \mathcal{C}(\Omega^1)^3 \times \dots \times \mathcal{C}(\Omega^5)^3 \mid \mathbf{v}_h|_T \in P_1(T)^3, \forall T \in \mathcal{T}_h \}, \quad (2.16)$$

$$\mathbf{K}_h^k = \left\{ \mathbf{v}_h \in \mathbf{W}_h \mid \begin{array}{l} \mathbf{v}_h(a_m) = \mathbf{u}_D^k(a_m), \forall a_m \in \Gamma_D \\ [\mathbf{v}_h(a_m^{rs}) \cdot \mathbf{n}]^{rs} \leq 0, \forall a_m^{rs} \in \Gamma_c^{rs} \end{array} \right\}, \quad (2.17)$$

$$\mathbf{\Lambda}_h = \{ \boldsymbol{\mu}_h \in \mathbf{\Lambda} \mid \boldsymbol{\mu}_h|_S \in P_0(S)^3, \forall S = \bar{T} \cap \Gamma_c, T \in \mathcal{T}_h \}. \quad (2.18)$$

Za řešení $(\mathbf{u}_h^k, \boldsymbol{\lambda}_h^k)$ aproximované úlohy v čase t_k pak považujeme aproximaci

$$\mathbf{u}_h^k \in \mathbf{K}_h^k, \boldsymbol{\lambda}_h^k \in \mathbf{\Lambda}_h : \quad \mathcal{H}^k(\mathbf{u}_h^k, \boldsymbol{\mu}_h) \leq \mathcal{H}^k(\mathbf{u}_h^k, \boldsymbol{\lambda}_h^k) \leq \mathcal{H}^k(\mathbf{v}_h, \boldsymbol{\lambda}_h^k) \quad \forall \mathbf{v}_h \in \mathbf{K}_h^k, \forall \boldsymbol{\mu}_h \in \mathbf{\Lambda}_h.$$

Vektor posunutí $\mathbf{v}_h \in \mathbf{K}_h^k$ je určen svými souřadnicemi ve vhodné bázi prostoru \mathbf{W}_h , tedy vektorem $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^{N_{dof}}$ obsahujícím složky vektoru posunutí ve vrcholech a_m . Číslo N_{dof} je počet stupňů volnosti, v našem případě rovné trojnásobku počtu vrcholů, které neleží na Γ_D , tedy těch vrcholů, na kterých není posunutí dáno explicitně Dirichletovou okrajovou podmínkou. Vektor Lagrangeových multiplikátorů $\boldsymbol{\mu}_h \in \mathbf{\Lambda}_h$ je určen vektorem $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^{3N_{mult}}$ obsahujícím složky vektoru posunutí na stěnách na Γ_c . Vektory \mathbf{y} , \mathbf{z} jsou tedy algebraickou reprezentací vektorů \mathbf{v}_h a $\boldsymbol{\mu}_h$. Obdobně na jednotlivém elementu triangulace budeme značit $\boldsymbol{\Delta} \in \mathbb{R}^{12}$ vektor obsahující 3 složky posunutí ve 4 vrcholech čtyřstěny; prvky $\boldsymbol{\Delta}$ jsou výběrem z prvků vektoru \mathbf{y} . Na stěně elementu na kontaktním rozhraní označíme $\mathbf{Z} \in \mathbb{R}^3$ vektor Lagrangeových multiplikátorů; prvky \mathbf{Z} jsou tedy výběrem z prvků vektoru \mathbf{z} . Označme $\boldsymbol{\Delta}_S \in \mathbb{R}^9$ výběr prvků z $\boldsymbol{\Delta}$, určující hodnoty \mathbf{v}_h na stěně S .

Výraz $\mathcal{H}^k(\mathbf{v}_h, \boldsymbol{\mu}_h)$ lze vyjádřit jako součet příspěvků za všechny elementy, tj. za objemy jednotlivých čtyřstěnů a za ty jejich stěny, které leží na hranici Γ_F nebo na kontaktní hranici Γ_c . Jelikož funkce z prostoru \mathbf{W}_h jsou lineární na každém elementu T_{hn} a funkce z $\mathbf{\Lambda}_h$ jsou na každé stěně kontaktní hranice konstantní, lze jednotlivé příspěvky $\mathcal{H}^k(\mathbf{v}_h, \boldsymbol{\mu}_h)$ vyjádřit následujícím způsobem.

$$\frac{1}{2} A(\mathbf{v}_h, \mathbf{v}_h) \Big|_{T_{hn}} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\Delta}^T \mathbf{C}_n \boldsymbol{\Delta}, \quad (2.19)$$

kde definujeme $\mathbf{C}_n \in \mathbb{R}^{12 \times 12}$ na základě (2.9). Obdobně lineární člen $F^k(\mathbf{v}_h)$ napíšeme jako

$$F^k(\mathbf{v}_h) \Big|_{T_{hn}} = \boldsymbol{\Delta}^T \mathbf{b}_n^k,$$

příčmež vektor $\mathbf{b}_n^k \in \mathbb{R}^{12}$ je definován vztahem (2.10). Konečně příspěvek $J_h^k(\mathbf{v}_h^k, \boldsymbol{\mu}_h^k)$ na stěně S_{hl} lze vyjádřit jako

$$J^k(\mathbf{v}_h, \boldsymbol{\mu}_h) \Big|_{S_{hl}} = (\boldsymbol{\Delta}_S^T \mathbf{G}_l^T + \mathbf{h}_l^{kT}) \mathbf{Z}, \quad (2.20)$$

kde $\mathbf{G}_l \in \mathbb{R}^{3 \times 9}$ a $\mathbf{h}_l^k \in \mathbb{R}^3$ jsou definovány vztahem (2.13). Platí $\mathbf{h}_l^k = \mathbf{G}_l \boldsymbol{\Delta}_S^{k-1}$ kde $\boldsymbol{\Delta}_S^{k-1}$ je obdoba $\boldsymbol{\Delta}_S$ vztahující se k vektoru řešení předcházejícího časového kroku.

Funkcionál $\mathcal{H}^k(\mathbf{v}_h, \boldsymbol{\mu}_h)$ je tedy algebraicky reprezentován funkcí

$$\mathcal{F}^k(\mathbf{y}, \mathbf{z}) = \frac{1}{2} \mathbf{y}^T \mathbf{C} \mathbf{y} + \mathbf{y}^T \mathbf{b}^k + \mathbf{y}^T \mathbf{G}^T \mathbf{z} + \mathbf{z}^T \mathbf{h}^k, \quad (2.21)$$

kde matice $\mathbf{C} \in \mathbb{R}^{N_{dof} \times N_{dof}}$ a $\mathbf{G} \in \mathbb{R}^{N_{mult} \times N_{dof}}$ a vektory $\mathbf{b}^k \in \mathbb{R}^{N_{dof}}$ a $\mathbf{h}^k \in \mathbb{R}^{N_{mult}}$ vzniknou sečtením příspěvků \mathbf{C}_n , \mathbf{b}_n^k a \mathbf{G}_l , \mathbf{h}_l^k za všechny elementy T_{hn} a stěny na kontaktu S_{hl} (a eliminací neznámých ve vrcholech s Dirichletovou okrajovou podmínkou). Matice \mathbf{C} je symetrická, pozitivně definitní, řídká a blokově diagonální (bloky odpovídají jednotlivým podoblastem Ω^s). Matice \mathbf{G} obsahuje jen N_{cont} nenulových, řídkých sloupců, kde N_{cont} je počet stupňů volnosti vrcholů ležících na kontaktní hranici, zpravidla $N_{cont} \ll N_{dof}$.

Signorininiho podmínku nepronikání na kontaktní hranici, aproximovanou nerovností (2.17)₂, vyžadovanou jen ve vrcholech elementů na kontaktním rozhraní

$$[\mathbf{v}_h(a_m^{rs}) \cdot \mathbf{n}]^{rs} \leq 0, \forall a_m^{rs} \in \Gamma_c^{rs}, \quad (2.22)$$

lze napsat pro každý kontaktní pár jako

$$\mathbf{A}_m^T \Delta_P \leq 0, \quad (2.23)$$

kde $\Delta_P \in \mathbb{R}^6$ obsahuje vektory posunutí ve dvou vrcholech tvořících kontaktní pár a_m^{rs} a kde $\mathbf{A}_m \in \mathbb{R}^6$ je vektor odpovídající podmínce (2.22) (v podstatě lze říci $\mathbf{A}_m^T = [\mathbf{n}, -\mathbf{n}]$). Aproximovaná kontaktní podmínka pro celou úlohu lze tedy vyjádřit jako nerovnost

$$\mathbf{A}\mathbf{y} \leq \mathbf{0}, \quad (2.24)$$

kde $\mathbf{0} \in \mathbb{R}^{N_{pairs}}$ a $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N_{pairs} \times N_{dof}}$ má jen N_{cont} nenulových, řídkých sloupců (N_{pairs} je počet kontaktních párů a N_{cont} počet stupňů volnosti na Γ_c , platí $N_{pairs}, N_{cont} \ll N_{dof}$).

Celá úloha je diskretizací metodou konečných prvků popsáním způsobem v každém časovém kroku k převedena na algebraickou úlohu hledání sedlového bodu funkce

$$\mathcal{F}^k(\mathbf{y}, \mathbf{z}) = \min_{\mathbf{y}} \max_{\mathbf{z}} \mathcal{F}^k(\hat{\mathbf{y}}, \hat{\mathbf{z}}) \quad (2.25)$$

při současném zachování omezujících podmínek:

$$\mathbf{A}\mathbf{y} \leq \mathbf{0} \quad (2.26)$$

$$z_{3l-2}^2 + z_{3l-1}^2 + z_{3l}^2 \leq 1, \quad l = 1, 2, \dots \quad (2.27)$$

Tato úloha je ve FEC řešena Uzawovou metodou, popsanou například v [2, 5], jejíž algoritmus je následující.

1. Je dán parametr $\rho > 0$. Nastav počáteční $\mathbf{z}^0 := (0, \dots, 0)$ a $i := 0$.
2. Dokud není splněno zastavovací kritérium (*), opakuj:
 - (a) $i := i + 1$.
 - (b) Urči $\mathbf{r} := \mathbf{b}^k + \mathbf{G}^T \mathbf{z}^{i-1}$.
 - (c) Spočti \mathbf{y}^i jako řešení minimalizační úlohy s omezením:

$$\mathbf{y}^i \leftarrow \min_{\mathbf{y}, \mathbf{A}\mathbf{y} \leq \mathbf{0}} \frac{1}{2} \mathbf{y}^T \mathbf{C} \mathbf{y} + \mathbf{y}^T \mathbf{r}.$$

Minimalizační úloha s omezením $\mathbf{A}\mathbf{y} \leq \mathbf{0}$, je řešena metodou sdružených projektovaných gradientů popsanou například v [1].

- (d) Urči $\hat{\mathbf{z}}^i := \mathbf{z}^{i-1} + \rho(\mathbf{G}\mathbf{y}^i + \mathbf{h}^k)$.
- (e) Urči $\mathbf{z}^i := \Pi_{\Lambda}(\hat{\mathbf{z}}^i)$, kde projekce Π_{Λ} je definována jako projekce vektorů multiplikátorů na jednotlivých kontaktních stěnách:

$$\begin{pmatrix} z_{3l-2}^i \\ z_{3l-1}^i \\ z_{3l}^i \end{pmatrix} := \pi \begin{pmatrix} \hat{z}_{3l-2}^i \\ \hat{z}_{3l-1}^i \\ \hat{z}_{3l}^i \end{pmatrix}, \quad l = 1, 2, \dots,$$

kde $\pi : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ je projekce do jednotkové koule:

$$\pi(\zeta) := \begin{cases} \zeta, & \|\zeta\| \leq 1 \\ \frac{1}{\|\zeta\|} \zeta, & \|\zeta\| \geq 1. \end{cases}$$

Jako zastavovací kritérium (*) je ve FEC používán test na velikost změny aproximace mezi jednotlivými iteracemi, $\|\mathbf{y}^k - \mathbf{y}^{k-1}\|/\|\mathbf{y}^k\|, \|\mathbf{z}^k - \mathbf{z}^{k-1}\|/\|\mathbf{z}^k\| < \varepsilon$, viz [5]. Poznamenejme, že toto kritérium není vždy dobré; jednak vhodná volba $\varepsilon > 0$ závisí na zadané úloze (a na volbě parametru ρ) a jednak pomalá konvergence algoritmu mezi jednotlivými kroky (stagnace) nijak nevyovídá o přesnosti získaného řešení algebraické úlohy. Přitom ve stacionárních úlohách je snadnější vyladit parametry ρ a ε pro řešení algebraické úlohy pro daný typ úlohy, v dynamické úloze však chování algebraických problémů může záviset také na délce časového kroku τ nebo se dokonce může v různých časových krocích k lišit. Lze tedy uvažovat o jiných zastavovacích kritériích či o použití jiného algoritmu pro řešení úlohy.

3 Implementace

Program FEC je kód implementovaný v jazyce Fortran 77, bez použití dalších specializovaných knihoven. Byl sestaven pro řešení statických kontaktních úloh v lineární pružnosti, základní stavební prvky implementace jsou popsány v [1] a následných zprávách [2, 3, 4, 6]. Implementace dynamické úlohy do kódu FEC je popsána ve zprávě [10]. Verze popisovaná zde se od této liší zahrnutím vazkopružného modelu a zahrnutím Trescova modelu tření. V následující kapitole jen stručně vyjmenujeme, kterých částí kódu FEC se úpravy dotkly.

Vazkopružnost

Zahrnutí vazkopružného modelu jednoduše řečeno spočívá v přidání členu $\sigma_1(\partial_t \mathbf{u})$ v (1.2) v rovnici (1.1). Po časové diskretizaci a převedení na variační formulaci se objeví dva nové členy, které bylo nutno zabudovat do podprogramů sestavujících algebraickou úlohu (2.21).

- V definici bilineární formy $A(\mathbf{u}, \mathbf{v})$, viz (2.9), je nově přičítán tenzor $\frac{1}{\tau} \mathbf{C}_1$ k původnímu \mathbf{C}_0 . Tato modifikace zasahuje do podprogramu

```
subroutine ELSTIFF(...),
```

kde jsou sestavovány lokální matice \mathbf{C}_n , viz (2.19). Viz také [10] a [6],

- Ve formulaci $F^k(\mathbf{v})$, viz (2.10), je nově obsažen výraz $\int_{\Omega} \frac{\mathbf{C}_1}{\tau} \mathbf{e}(\mathbf{u}^{k-1}) : \mathbf{e}(\mathbf{v}) \, d\mathbf{x}$. Oproti původní verzi byla proto upravena struktura matic MPrevX a MPrevVH, které slouží k sestavování těch příspěvků $F^k(\mathbf{v})$, jejichž hodnota závisí na řešení v předcházející časové hladině \mathbf{u}^{k-1} . Příslušná modifikace FEC se projevila v podprogramu

```
subroutine RStiff(...),
```

který prvky matic MPrevX a MPrevVH připravuje, viz [10].

Tření

Sestavení algebraické úlohy hledání sedlového bodu s maticí \mathbf{G} je obsaženo již ve verzi FEC pro stacionární úlohy a je popsáno například v [6]. Matice \mathbf{G} je uložena ve formátu CSR (*Compressed Sparse by Rows*) a je sestavována podprogramem

```
subroutine FricBS(...).
```

Jak plyne z (2.20), struktura matice \mathbf{G} nedoznala oproti původní stacionární formulaci žádné změny. Dynamická verze se od stacionárního kódu popisovaného v [6] liší jen zacházením s hodnotami okrajových podmínek, což je již obecně popsáno v [10].

Ve formulaci (2.21) se nově objevuje člen \mathbf{h}^k . Přitom ale platí, že $\mathbf{h}^k = \mathbf{G}\mathbf{y}^{k-1}$, kde \mathbf{y}^{k-1} je vektor řešení spočtený v předchozím časovém kroku. Vektor \mathbf{h}^k tedy není nutné sestavovat po elementech, ale lze jej v každém časovém kroku k získat pouhým vynásobením matice \mathbf{G} (ta se s časem nemění) a vektoru předchozího řešení.

Vstupní a výstupní data

Program FEC po překladu tvoří jediný spustitelný soubor fec06.x, který se volá bez dalších parametrů. Výsledkem běhu programu je řada výstupních souborů *.gmv.kkkk v adresáři ./gmv/, kde kkkk je číslo časového kroku. Tyto výstupní soubory jsou určeny pro vizualizaci programem GMV, (*General Mesh Viewer*), viz [11]. Soubor obsahuje popis sítě konečných prvků a vektor posunutí v každém vrcholu sítě. Geometrie oblasti je deformována podle spočtených hodnot řešení, tj. souřadnice vrcholů sítě jsou posunuty o spočtený vektor posunutí přenásobený konstantou DisplacementMagnification, která je předepsána v podprogramu OUT2GMV3(...).

Zadání časového intervalu a délky kroku τ a další parametry běhu programu jsou zadány v souborech `TIME.IN` a `SOLPAR.IN`. V `SOLPAR.IN` je zejména zadáván parametr ρ Uzawova algoritmu. Zahrnutí vazkopružného modelu stejně jako zahrnutí třecích sil jsou volitelné a lze je v `TIME.IN` zapnout či vypnout.

`bTmDiscretisation` – určuje chování programu:

- 0 výpočet stacionárního řešení, tj. žádná časová diskretizace, hodnoty okrajových podmínek se uvažují v čase `dTime=dTmStart`
- 1 výpočet kvazistacionární úlohy, tj. v modelu se neuvažuje setrvačný ani tlumící člen
- 2 výpočet dynamické úlohy
- 1 žádný výpočet (načte datové struktury a exportuje síť ve výstupním formátu, bez hodnot řešení)

`bFrictionTreatment` – 2 pro zahrnutí (Trescova) tření, 0 pro model bez tření, (1 pro původní stacionární formulaci tření, experimentální možnost)

`bViscoelasticity` – 1 pro vazkopružný model, 0 pro elastický model

`dTmStart` – začátek časového intervalu

`dTmEnd` – konec časového intervalu

`dTimeStep` – velikost časového kroku

Geometrická a materiálová data jsou programem načtena ze třech zdrojových souborů: `USR_FIRST.TXT`, `USR_MESH.TXT` a `USR_MATERIAL.TXT`. Soubor `USR_FIRST.TXT` se načítá jako první a obsahuje informace o rozměrech zadávaných datových polí. Nejdůležitější položky jsou (zápis v souboru odpovídá názvům proměnných ve zdrojovém kódu):

`NoTetras` – počet elementů sítě (čtyřstěnů)

`NoVertices` – počet vrcholů

`NoBoundaries` – počet stěn elementů na hranici oblasti

`NoSubdomains` – počet těles, resp. oblastí s různými materiálovými vlastnostmi

`NoContactBoundaries` – počet (dvojic) stěn elementů na kontaktní hranici

`NoContactPairs` – počet dvojic vrcholů na kontaktní hranici (tj. dvojic, na kterých je realizována kontaktní podmínka nepronikání)

V souboru `USR_MATERIAL.TXT` jsou předepsány následující položky. Jejich zápis odpovídá datové struktuře ve zdrojovém kódu `FEC`, index `I` odpovídá číslu podoblasti.

`(Weight(J,I), J=1,3)`

vektor síly působící na jednotku hmotnosti

`EStiff(I), SigStiff(I)`

Youngův modul pružnosti E_0 a Poissonova konstanta σ_0

`EVisco(I), SigVisco(I)`

konstanty E_1 a σ_1 udávající vazkou odezvu tenzoru napětí

`RhoDensity(I), AlphaDamping(I)`

materiálová hustota ρ a tlumící koeficient α

Hodnoty polí popisujících geometrii sítě jsou zadány v souboru `USR_MESH.TXT`. Zápis položek opět odpovídá zápisu uvnitř zdrojového kódu:

$VX(I), VY(I), VZ(I)$
 souřadnice vrcholu s indexem $I, I=1..NoVertices$

$(ITNODE(J, I), J=1, 5)$
 indexy vrcholů ($J=1..4$) čtyřstěnu $I, I=1..NoTetras$;
 číslo podoblasti ($J=5$) ke které čtyřstěn náleží

$(IBNDRY(J, I), J=1, 5)$
 indexy vrcholů ($J=1..3$) stěny $I, I=1..NoBoundaries$;
 typ okrajové podmínky ($J=4$) zadané na této stěně:

- 1 homogenní (nulová) Neumannova o.p.
- 2 nehomogenní Neumannova o.p., tj. předepsané zatížení
- 1 Dirichletova o.p., tj. předepsané posunutí
- 2 jednostranný kontakt
- 3 oboustranný kontakt
- 0 vnitřní stěna, tj. stěna mezi oblastmi, které jsou součástí stejného tělesa (ale liší se např. materiálovými vlastnostmi)

$(ICCB(J, I), J=1, 3)$
 indexy stěn ($J=1, 2$) přiléhajících k sobě na kontaktní hranici, $I=1..NoContactBoundaries$

$(ICP(J, I), J=1, 2)$
 indexy vrcholů tvořících kontaktní dvojici, $I=1..NoContactPairs$

$CPX(I), CPY(I), CPZ(I)$
 souřadnice normálového vektoru příslušejícího ke kontaktní dvojici, $I=1..NoContactPairs$

$(ICCB2(J, I), J=1, 3)$
 $(ICP2(J, I), J=1, 2)$
 $CPX2(I), CPY2(I), CPZ2(I)$
 obdobné indexy stěn, indexy vrcholů a souřadnice normálového vektoru, pro oboustranný kontakt

Jednoduché vzorové příklady vstupních dat jsou součástí zdrojového kódu FEC.

4 Shrnutí

Předložená zpráva popisuje formulaci problému kontaktu několika těles, modelovaných v lineární vazkopružnosti, s Trescovým modelem tření. Úloha byla diskretizována v čase pomocí semi-implicitního schématu a v prostoru metodou konečných prvků. V předložené zprávě popisujeme jednoduchý způsob, jakým byla modifikována implementace programu FEC popsaná v předchozí zprávě [10] tak, aby zahrnula jak vazkopružný model tak nestacionární model tření.

Předložená studie je výzkumnou zprávou projektu MPO ČR č. FT-TA/087 za rok 2007.

Literatura

- [1] Z. Kestřánek, “Numerical analysis of the contact problem, comparison of methods for finding the approximate solution,” Tech. Rep. No. 648, Institute of Computer Science, AS CR, 1995.
- [2] Z. Kestřánek and J. Nedoma, “The conjugate projected gradient method – numerical tests and results,” Tech. Rep. No. 677, Institute of Computer Science, AS CR, 1996.
- [3] J. Nedoma and Z. Kestřánek, “Preconditioners for contact problems in elasticity,” Tech. Rep. No. 739, Institute of Computer Science, AS CR, 1998.
- [4] Z. Kestřánek and J. Nedoma, “FEC - a code for contact problems in thermoelasticity,” Tech. Rep. No. 740, Institute of Computer Science, AS CR, 1998.
- [5] Z. Kestřánek, *Numerical analysis of the 3D contact problem of Signorini type with friction in thermoelasticity. H-version of the finite element approximation*. PhD thesis, Technical University Prague, 1999.
- [6] Z. Kestřánek, “Description of the finite element program for contact problem,” Tech. Rep. No. 831, Institute of Computer Science, AS CR, 2001.
- [7] J. Nedoma, J. Stehlík, M. Bartoš, F. Denk, V. Džupa, J. Fousek, I. Hlaváček, Z. Klézl, and I. Květ, *Biomechanika lidského skeletu a umělých náhrad jeho částí*. Universita Karlova v Praze – Nakladatelství Karolinum, 2006.
- [8] J. Nedoma and J. Daněk, “Dynamic and quasi-static FE simulations of the function of human joints and their total replacements based on the mortar approach,” Tech. Rep. No. 1005, Institute of Computer Science, AS CR, 2007.
- [9] J. Nedoma and J. Daněk, “Dynamic and quasi-static simulations of the function of knee joint and its artificial replacements in 2D and 3D,” in preparation.
- [10] M. Lanzendörfer, “Modifikace FEC – kód pro dynamickou kontaktní úlohu v lineární pružnosti,” Tech. Rep. No. 980, Institute of Computer Science, AS CR, 2006.
- [11] L. A. National Laboratory, “The general mesh viewer.” <http://www-xdiv.lanl.gov/XCM/gmv/GMVHome.html>.
- [12] M. Lanzendörfer and J. Daněk, “Aplikace FEC v biomechanice kolenního kloubu,” Tech. Rep. No. 1006, Institute of Computer Science, AS CR, 2007.