

Моделирование механики материалов как инструмент планирования натурного эксперимента на основе его виртуального анализа

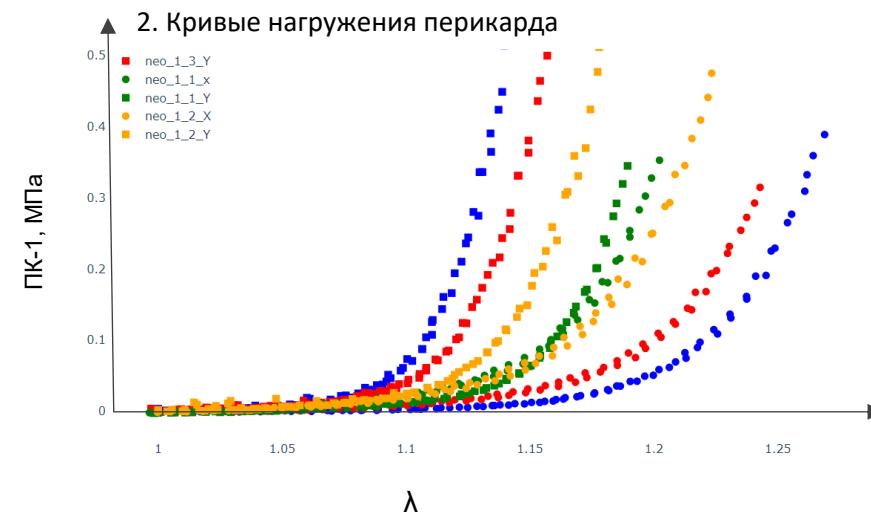
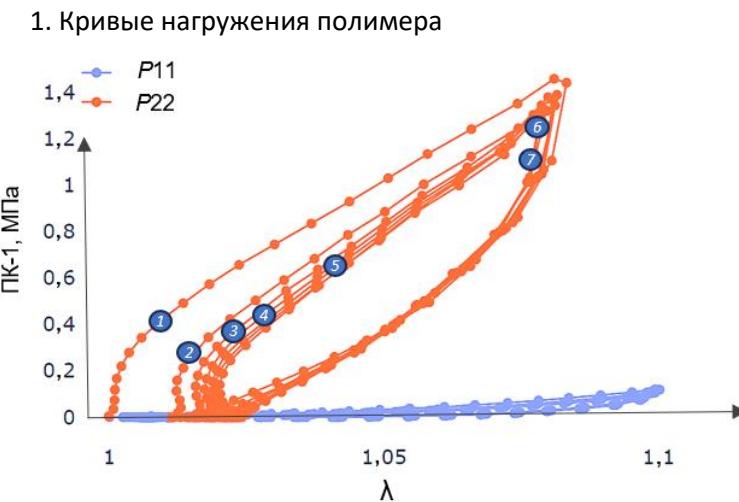
Артур Левонович Овсепьян^{1,2}

¹ПМГМУ

² НТУ «Сириус»

Введение

- Математические модели, способные предсказывать нелинейное механическое поведение мягких материалов при больших деформациях, требуются в инженерных отраслях – от полимерной промышленности, до робототехники и персонализированной медицины [1, 2]. Мягкие материалы, такие как эластомеры и мягкие ткани, обладают сложным, нелинейным откликом на приложенные нагрузки.

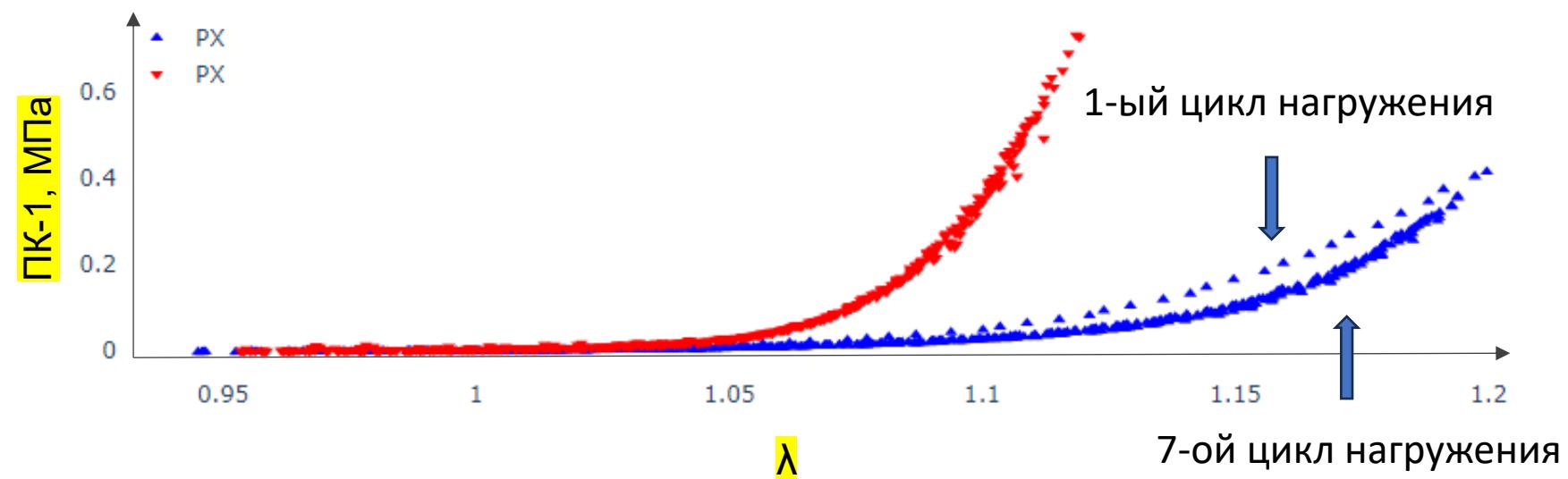
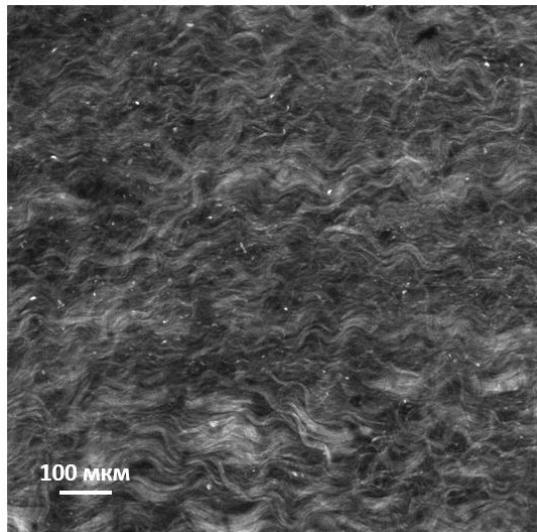


- Теоретическая база моделирования механики эластомеров и биоматериалов – нелинейная теория упругости. Широко распространены гиперупругие модели механики (определяющие соотношения) [3].

1. Mechanical characterization and FE modelling of a hyperelastic material
2. Control-oriented models for hyperelastic soft robots through differential geometry of curves
3. Nonlinear solid mechanics: a continuum approach for engineering science

Мягкие ткани, прекондиционирование

Биоматериалы имеют сложную иерархическую микроструктуру, которая во многом определяет их механическое поведение. Для построения математических моделей механики биоматериалов критически важно понимание микроструктурной организации биоматериала. Стандартный спектр микроскопических исследований сложно сочетаем с механическим тестированием.



Конф. Микроскопия перикарда

Двухосные кривые прекондиционирования ксеноперикарда

Проблема

И феноменологический и основанный на данных подход невозможны без натурных экспериментов. Вопрос – **каких? Какие нужны протоколы?** Требуется экспериментальная база, позволяющая воспроизводить сложные условия нагружения и для эластомеров и для биоматериалов. Инженерные ASTM F2150–19; ISO 37:2017 не подходят для исследования биоматериалов.

Протокол испытаний – это формализованный, версионируемый документ и набор процедур, которые однозначно регламентируют подготовку образца, условия среды, схему нагружения и измерения, обработку данных и критерии качества так, чтобы результаты были сопоставимыми, воспроизводимыми и пригодными для построения определяющих соотношений.

Методы редукции обобщенных феноменологических моделей дают разные результаты на разных протоколах [6, 7].

6. On the AIC-based model reduction for the general Holzapfel–Ogden myocardial constitutive law
7. Constitutive modeling of brain tissue: current perspectives

Цель

Разработка протоколов и методов планирования натурных экспериментов на основе их виртуального аналога, достаточных, для построения гиперупругих определяющих соотношений биоматериалов

Гиперупругий материал

- В гиперупругой постановке постулируется существование упругого потенциала $\psi(\mathbf{F})$ (далее W), зависящего от выбранной меры деформации, который полностью описывает механическое поведение материала. Тензор напряжения Коши принимает вид:

$$\sigma = \frac{1}{J} \frac{\partial \psi(\mathbf{F})}{\partial \mathbf{F}} \mathbf{F}^T, \quad J = \det \mathbf{F}$$

\mathbf{F} – градиент деформации, определяемый как $\partial \mathbf{x} / \partial \mathbf{X}$ (в приложении)

- Подходы к построению гиперупругого потенциала:

Феноменологический – требует выбора формы потенциала $\psi(\mathbf{F}) = f(IF, a_1, \dots, a_n)$, где f – известная функция, a_i – неизвестные параметры, которые необходимо подогнать [3].

Основанный на данных – может быть задан в частных производных (функциях отклика) [4], в парах напряжение-деформация и т. д [5].

1. Вне зависимости от подхода требуется натурный эксперимент

2. Гиперупругость не требует задания аналитической формы определяющего соотношения

Определяющее соотношение, основанное на данных. Мера деформаций Лапласа

Задание частных производных потенциала.

Зависит от меры деформации:

$$W(\mathbf{F}) = W(\xi_1(\mathbf{F}), \dots, \xi_n(\mathbf{F})) \rightarrow \frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}} = \sum_{i=1}^n \frac{\partial W}{\partial \xi_i} \frac{\partial \xi_i}{\partial \mathbf{F}},$$

где $\xi_i(\mathbf{F})$ – заданные (известные) меры деформации,

$\frac{\partial W}{\partial \xi_1}, \dots, \frac{\partial W}{\partial \xi_n}$ – функции отклика.

ξ_i – мера деформации Лапласа,
предложенная **Srinivasa Int. J. Eng. Sci. 2012**.

Основана на QR-разложении градиента деформации.

$$\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \mathbf{F} = \tilde{\mathbf{F}}^T \tilde{\mathbf{F}}$$

$\tilde{\mathbf{F}}$ может быть получена факторизацией Холецкого
ПТД Коши-Грина.

$$\tilde{F}_{11} = \sqrt{C_{11}}, \quad \tilde{F}_{12} = C_{12}/\tilde{F}_{11}, \quad \tilde{F}_{22} = \sqrt{C_{22} - \tilde{F}_{12}^2}. \text{ и т.д.}$$

$$\xi_1 = \ln(\tilde{F}_{11}), \quad \xi_2 = \ln(\tilde{F}_{22}), \quad \xi_3 = \ln(\tilde{F}_{33}),$$

$$\xi_4 = \frac{\tilde{F}_{12}}{\tilde{F}_{11}}, \quad \xi_5 = \frac{\tilde{F}_{23}}{\tilde{F}_{22}}, \quad \xi_6 = \frac{\tilde{F}_{13}}{\tilde{F}_{11}}.$$

Гиперупругий материал:

$$\tilde{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbf{Q}^T \boldsymbol{\sigma} \mathbf{Q},$$

$$\tilde{\sigma}_{ii} = \frac{1}{J} \frac{\partial W}{\partial \xi_i}, \quad i = 1, 2, 3,$$

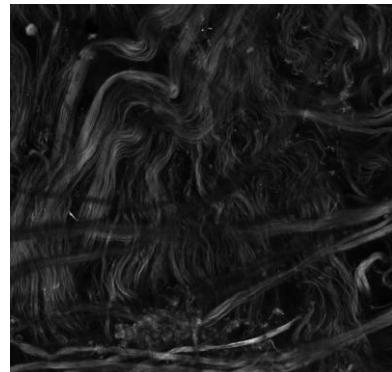
$$\tilde{\sigma}_{12} = \frac{1}{J} \frac{\partial W}{\partial \xi_4} + \frac{\tilde{F}_{23}}{\tilde{F}_{33}} \frac{\partial W}{\partial \xi_5},$$

$$\tilde{\sigma}_{13} = \frac{\tilde{F}_{22}}{J \tilde{F}_{11}} \frac{\partial W}{\partial \xi_4}, \quad \tilde{\sigma}_{23} = \frac{\tilde{F}_{33}}{J \tilde{F}_{22}} \frac{\partial W}{\partial \xi_6}.$$

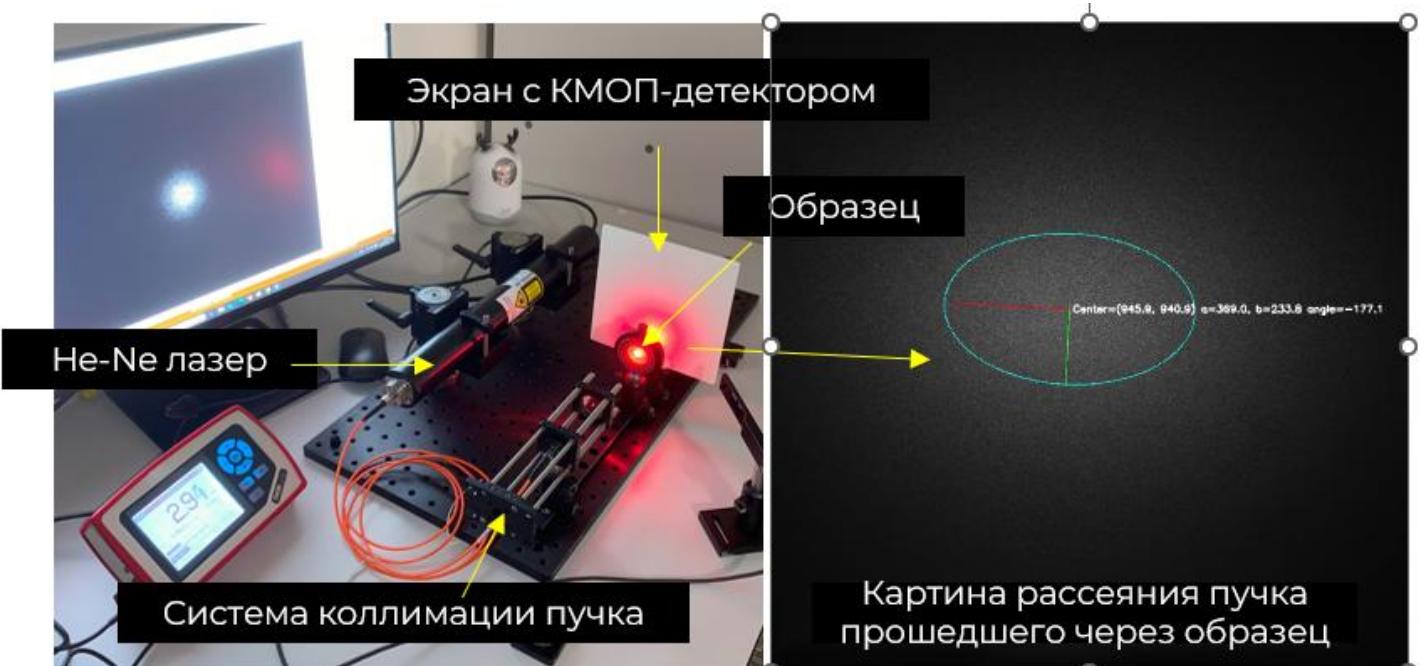
Перикард.

Анализ микроструктуры биоматериалов

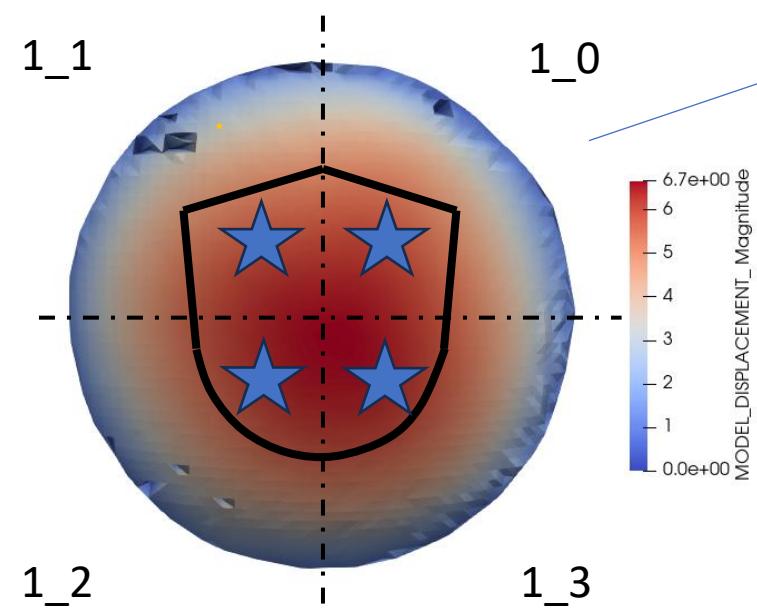
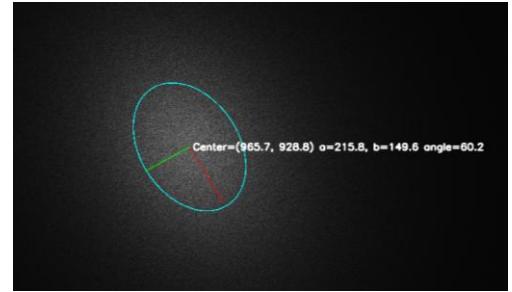
Для оценки микроструктуры образца во время механических испытаний применяем **метод малоуглового светорассеяния SALS**, позволяющий локально оценивать характеристики волокон биоматериала – выделенные направления анизотропии, волнистость и др.



Конфокальная микроскопия перикарда.
Слева – фиброзный, справа – серозный слои перикарда

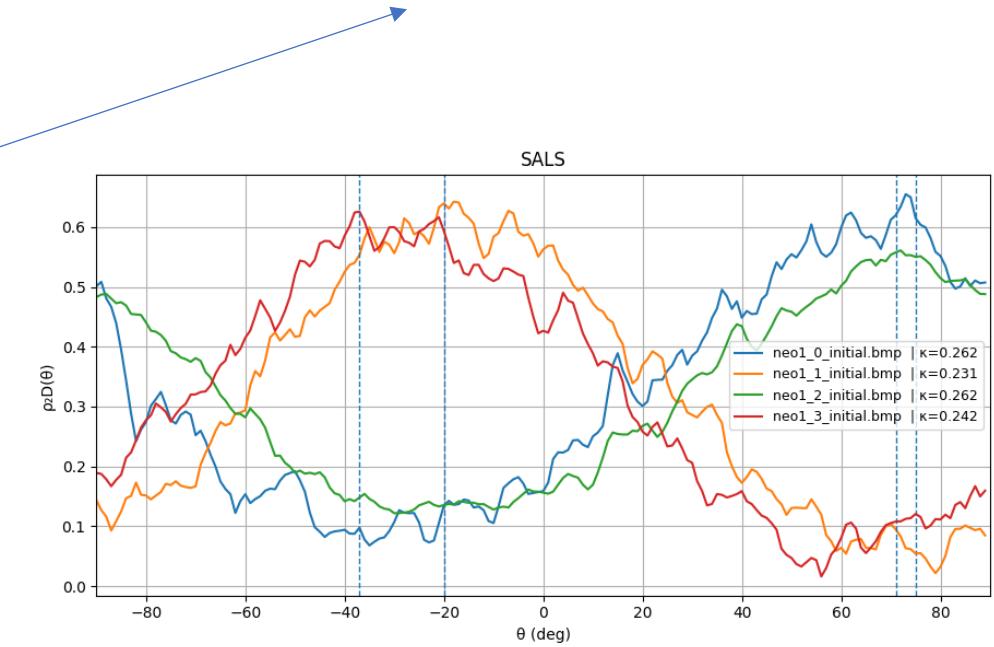


Достаточно ли данных раздутия для восстановления основанного на данных определяющего соотношения для задачи диастолического состояния реконструированного клапана аорты



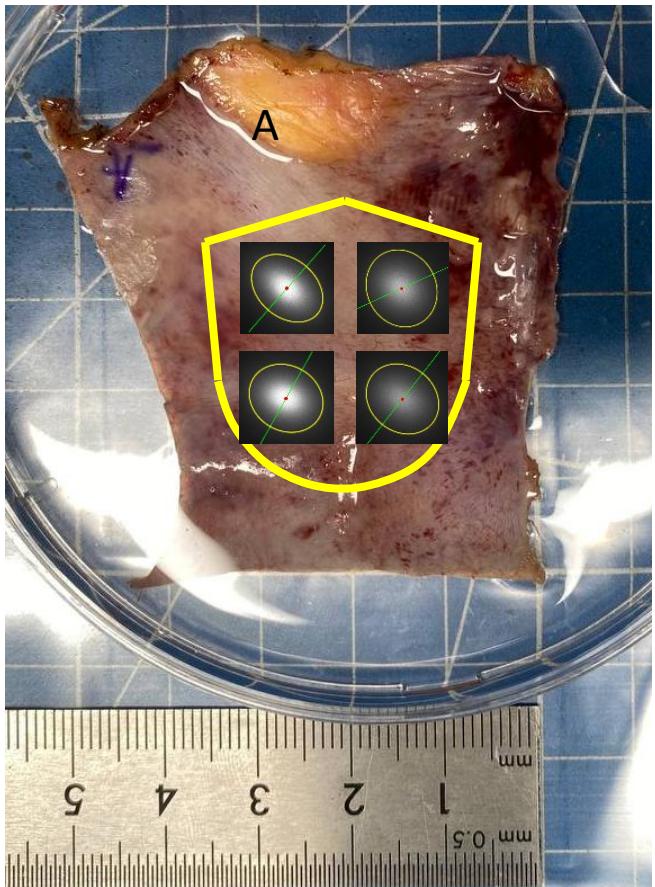
1. Тест на инфляцию ксеноперикарда

Протокол инфляции – 7 циклов
прекондиционирования
8-ой рабочий. Давление – 20 кПа. После
испытания нарезаем и фиксируем
начальное «главное» направление.

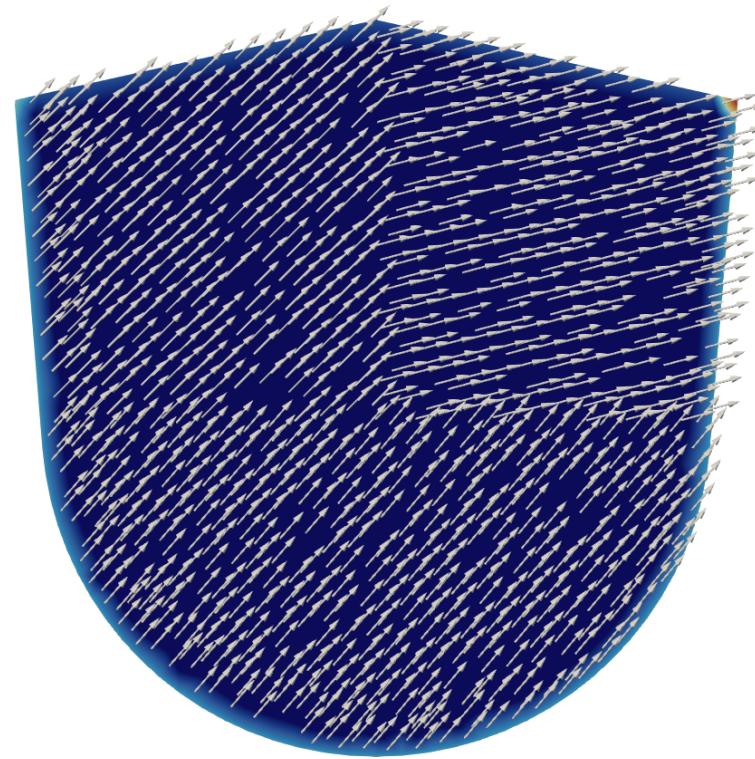


Малоугловое рассеяние в «звездах»

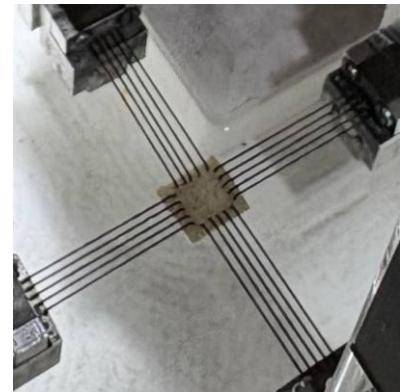
Достаточно ли данных раздутия для восстановления основанного на данных определяющего соотношения?



Оценка локальной анизотропии SALS



FE-сетка с анизотропией из SALS



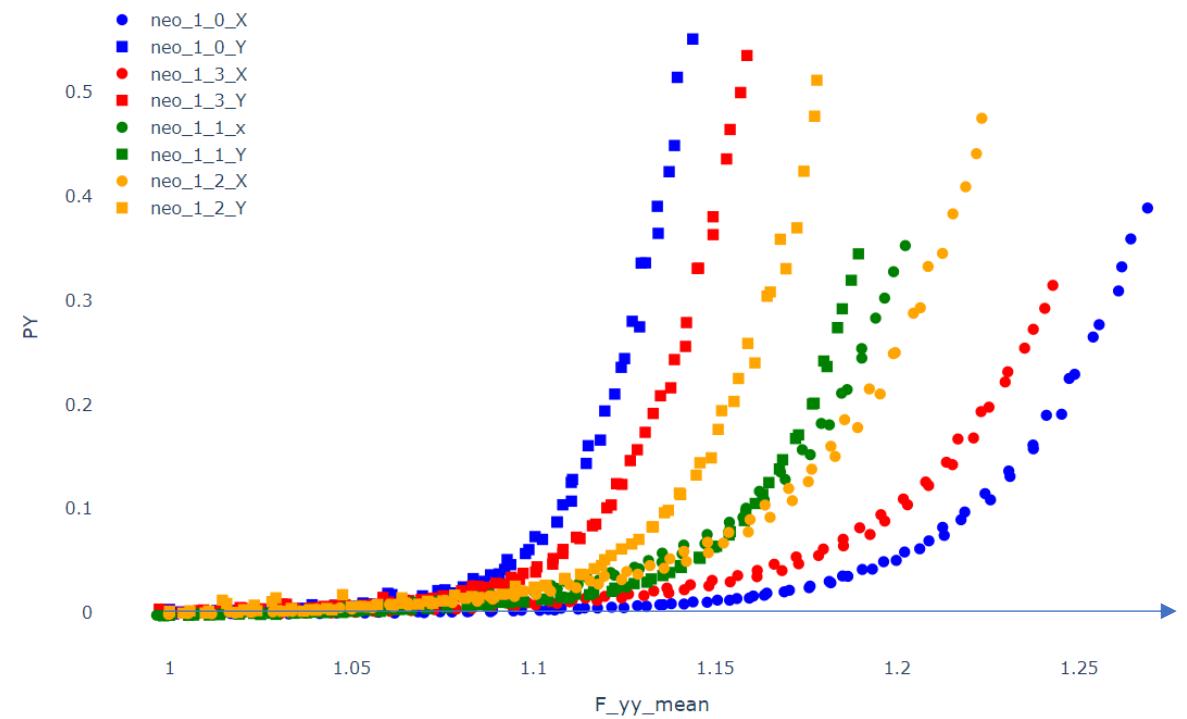
Достаточно ли данных раздутия для восстановления основанного на данных определяющего соотношения? Нижняя оценка для протокола испытаний

Далее исполняем двухосный протокол по Sommer и подгоняем потенциал

- kappa-модель Gasser-Ogden-Holzapfel
- $W_{GOH} = \frac{\mu}{2}(I_1 - 3) + \frac{c_3}{2c_4}(\exp(c_4[\kappa I_1 + (1 - 3\kappa)I_4 - 1]^2) - 1)$,

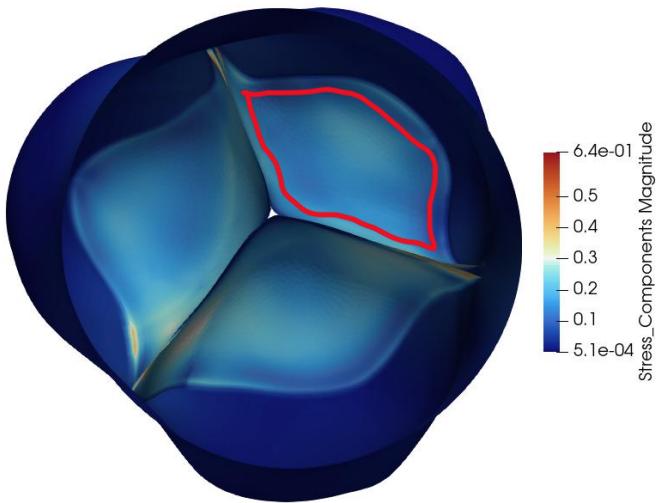
$$\mu > 0, c_3 > 0, c_4 > 0, \kappa \in \left[0; \frac{1}{3}\right],$$

где μ – модуль сдвига, c_3, c_4 – материальные параметры, $\kappa = \frac{1}{4} \int_0^\pi \rho(\theta) \sin^3 \theta d\theta$ – параметр распределения волокон, где $\rho(\theta)$ – бета-распределение;



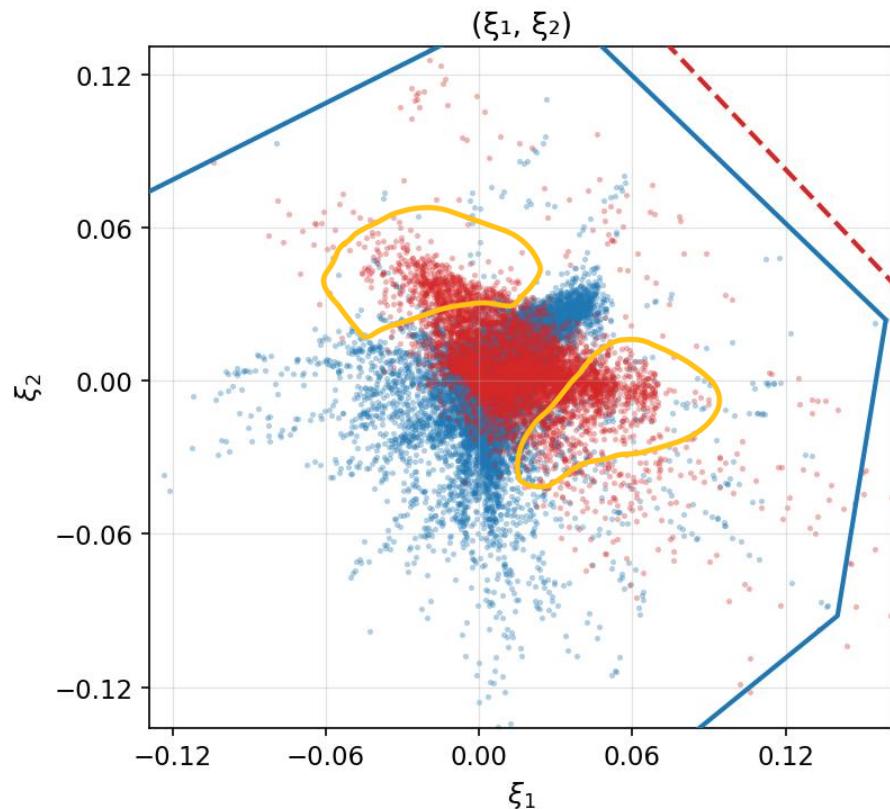
Ориентируем образец, поворачиваем образец, пока главные оси эллипса не попадут в ноль. Размечаем для резки. В машине, по X – мягкая ось. Прекондиционирование 7 циклов, -> Sommer.

Достаточно ли данных раздутия для восстановления основанного на данных определяющего соотношения? Нет, недостаточно.

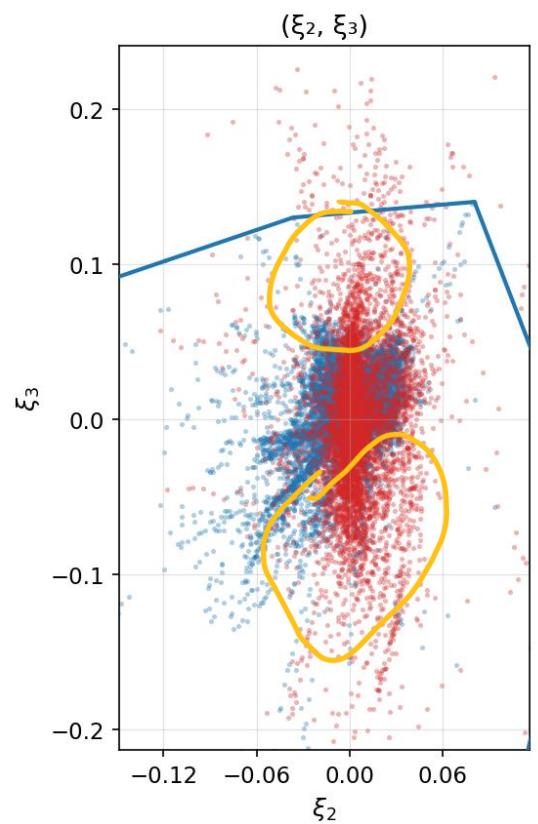


Из синтетических данных закрытия клапана [11] и натурной инфляции извлекаем данные о деформациях в мерах Лапласа.
Оцениваем пересечение полученных облаков

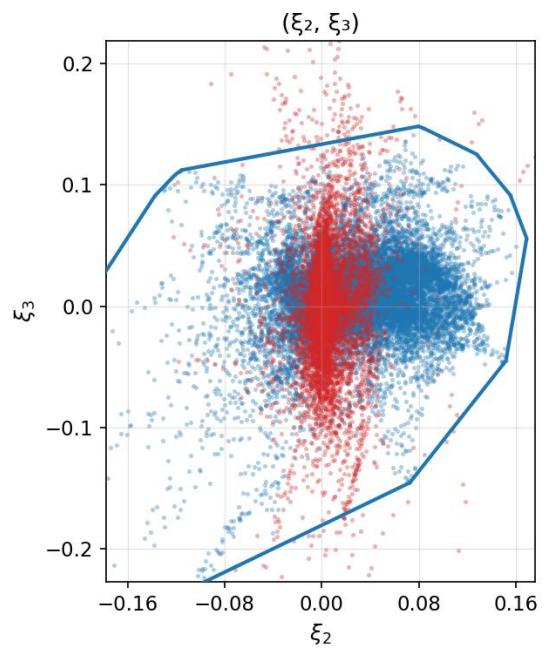
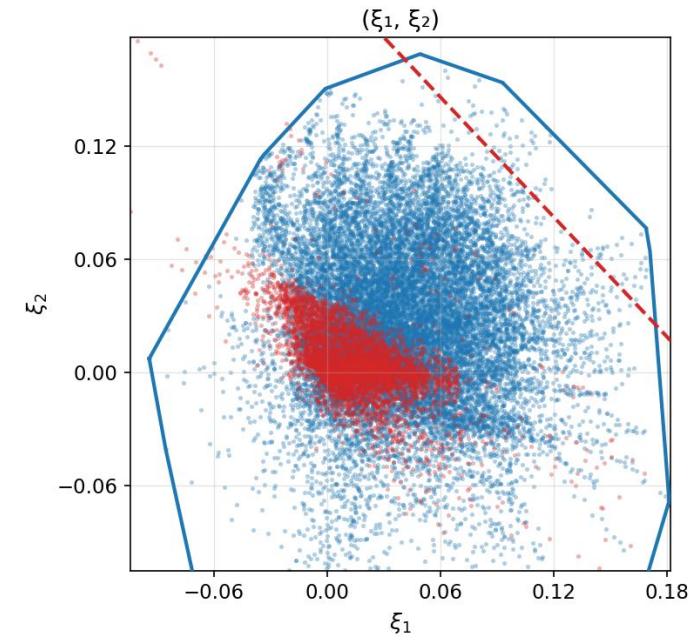
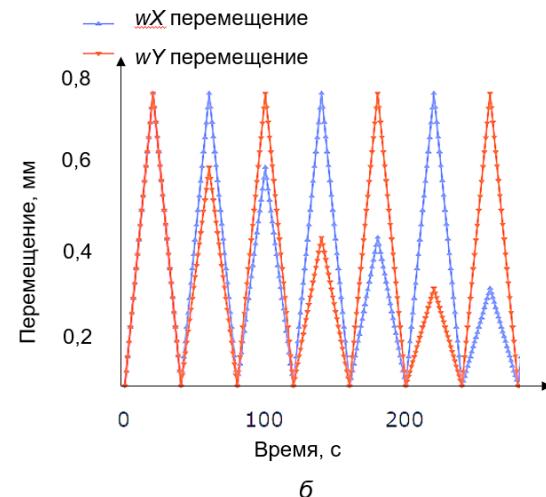
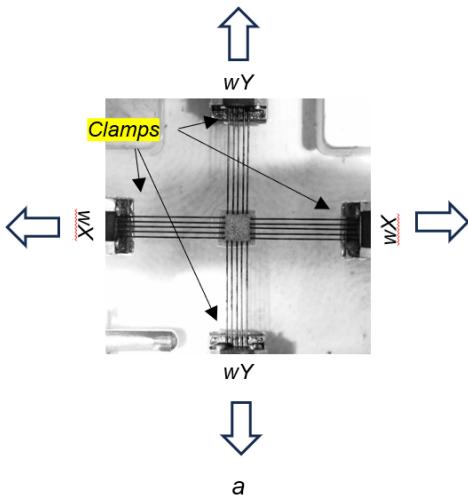
10. Liogky A. Computational mimicking of surgical leaflet suturing for virtual aortic valve neocuspидization



Красные точки – синтетическое закрытие
клапана, синие – натурное раздутие



Достаточно ли данных двухосного эксперимента по протоколу Sommer для восстановления основанного на данных определяющего соотношения?



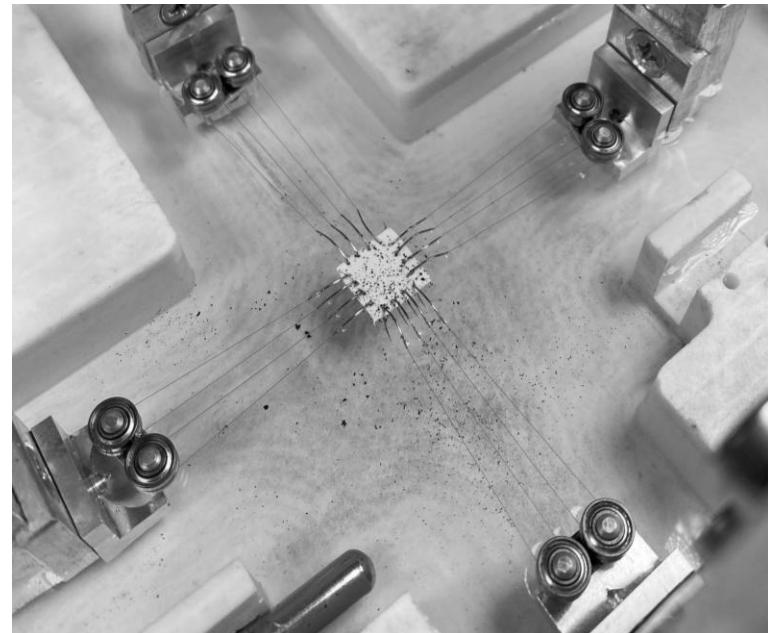
Sommer-протокол двухосного эксперимента для человеческого ГА-фиксированного перикарда

Красные точки – синтетическое закрытие клапана, синие – натурный двухосный эксперимент

Планы.

Развитие подходов требует:

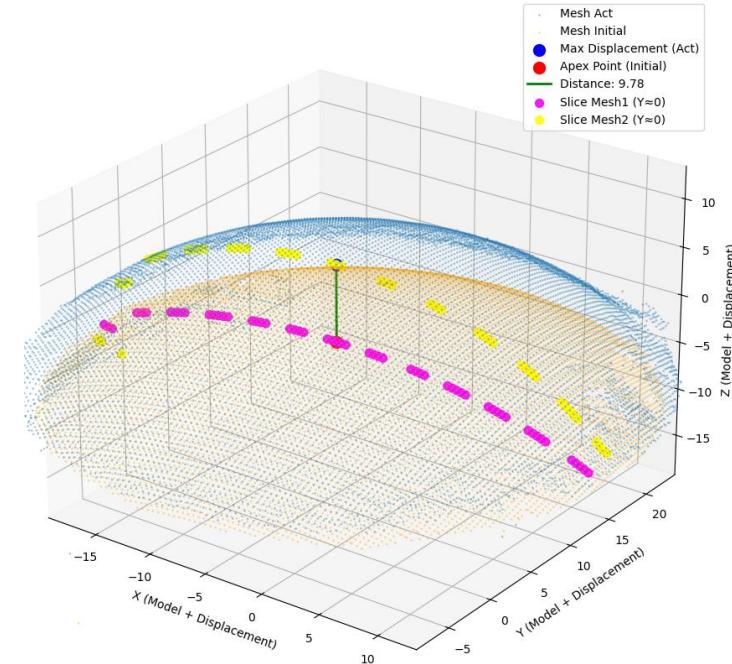
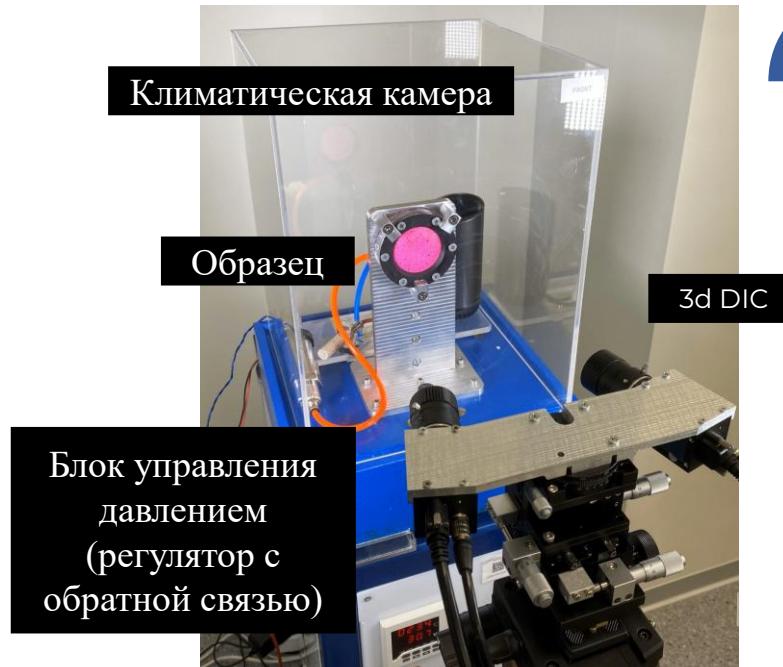
1. Натурной нижней оценки для моделируемых процессов (В первую очередь для процедуры Озаки);
2. Способы полнополевой оценки напряжений на двухосных экспериментах;
3. Разработки функционалов для оптимизации граничных условий под задачу;
4. Новых протоколов управления экспериментальными машинами.



Спасибо за внимание!

Случай 1. Обогащение эксперимента с изотропной мембраной.
Идея оптимизации двухосного эксперимента

Тест на раздувание (инфляция) мембранны



Профили образца в начале эксперимента (фиолетовый)
и при давлении 10 кПа (желтый)

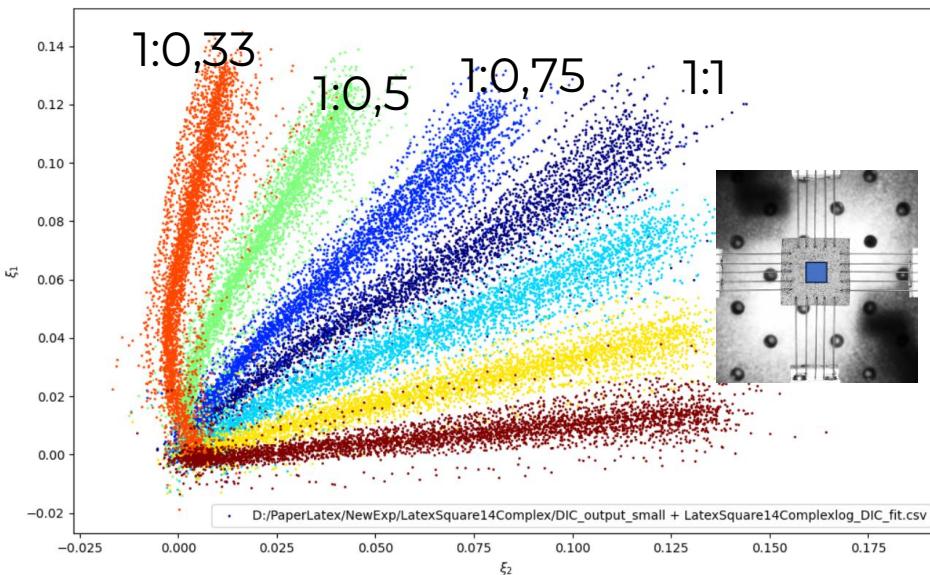
Проблема недостатка данных для основанных на данных определяющих соотношений

Классическое предположение об однородности напряжений и деформаций

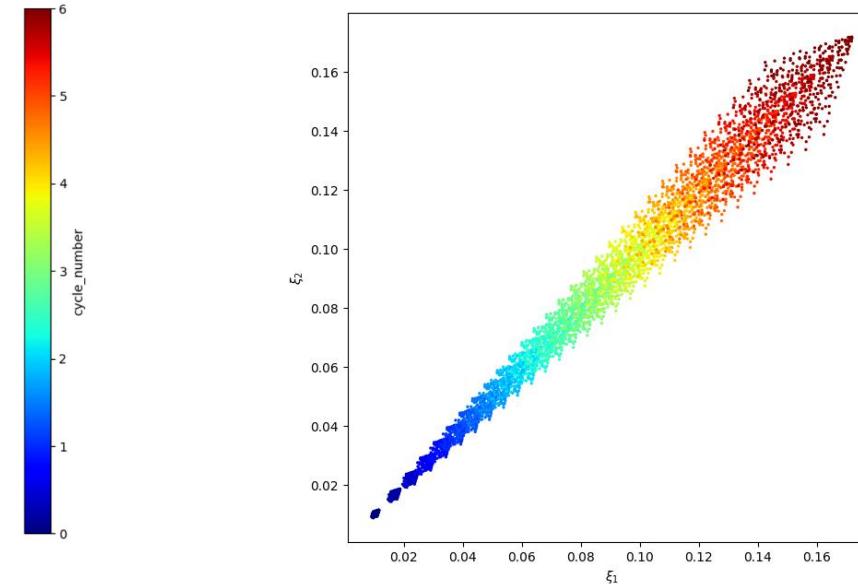
В работе [9] решалась задача нахождения напряжённо-деформированного состояния гиперупругого тела в случае таблично заданных функций отклика (data-driven) и без предположений относительно формы потенциала. Функции отклика задавались мерами деформации Лапласа.

Мотивация – уход от выбора гиперупругого определяющего соотношения. Было показано, что инфляционный эксперимент дает недостаточно данных для достижения сходимости решателя.

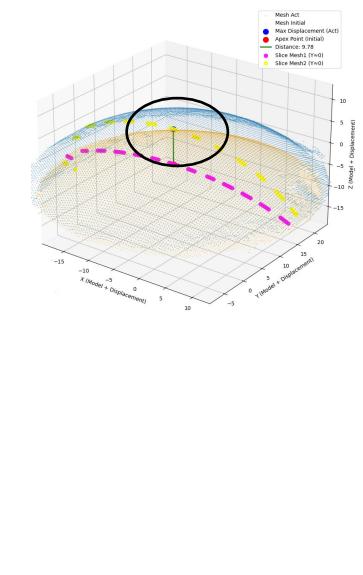
Когда как сложный двухосный эксперимент дает «богатые данные» (рис. Слева), позволяя варьировать режимами двухосного нагружения, инфляционный эксперимент изотропной мембранны ограничен равнодвухосными деформациями в полюсе (рис. Справа)



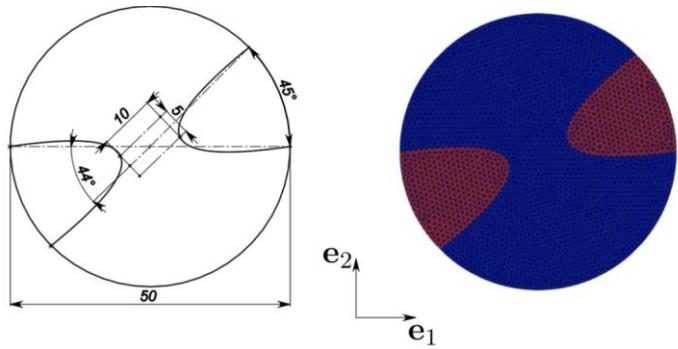
Результаты неравнодвухосного экспериментального протокола в мерах деформации Лапласа



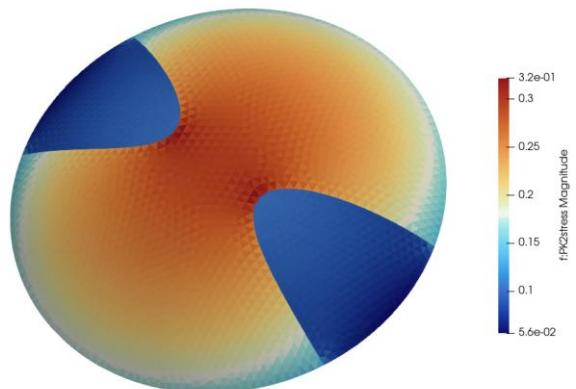
Результаты инфляционного теста в мерах деформации Лапласа. Данные собирались в полюсе образца



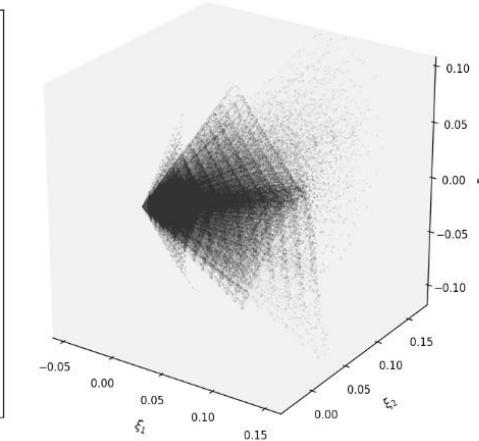
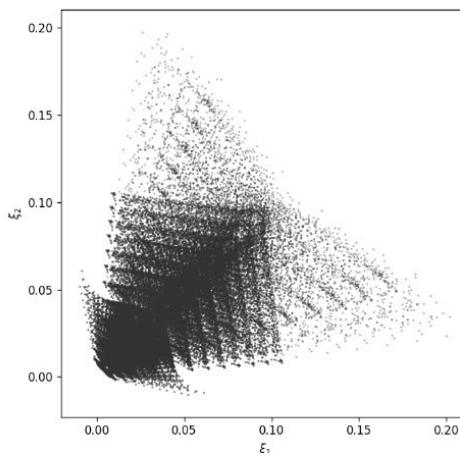
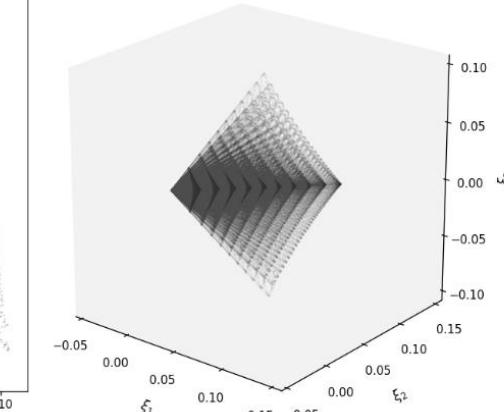
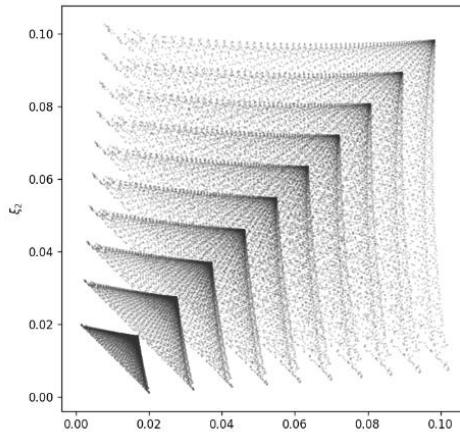
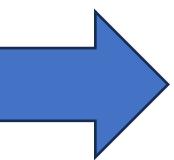
Концентраторы напряжений. Переменная толщина



Геометрия мембраны неоднородной толщины

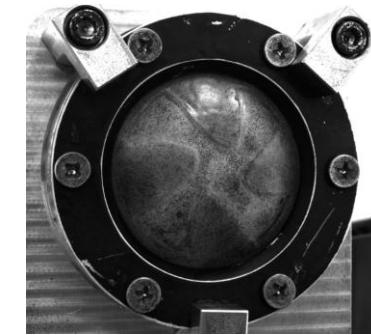


Генерация синтетических данных



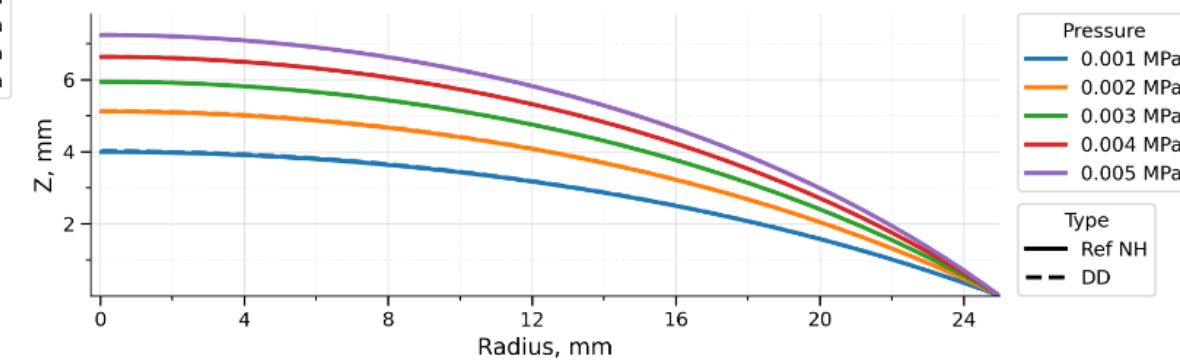
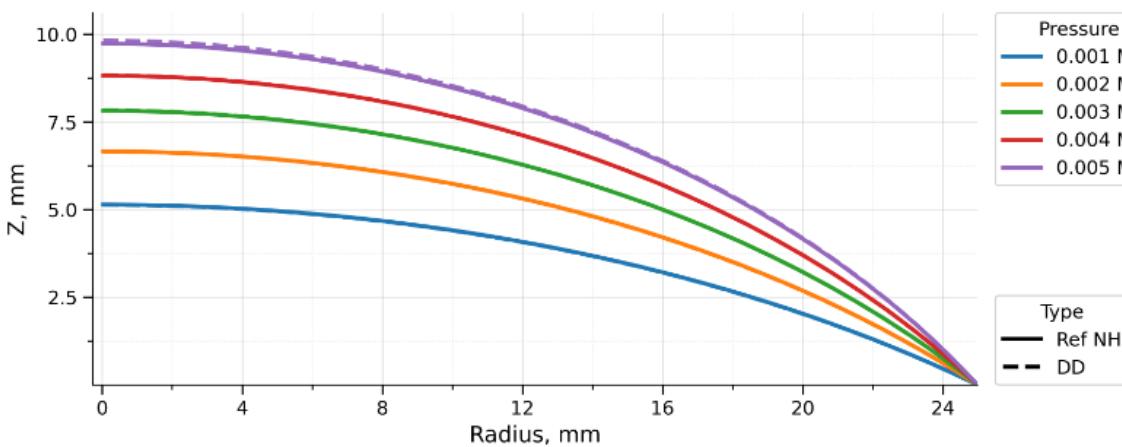
Таблично-заданные определяющие соотношения из синтетических данных, собранных при виртуальном надувании мембран однородной и неоднородной толщины

Результат



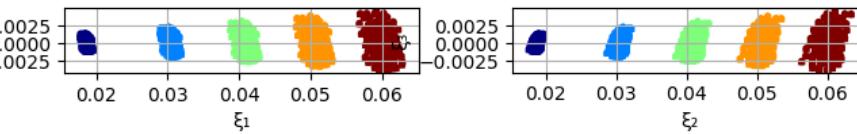
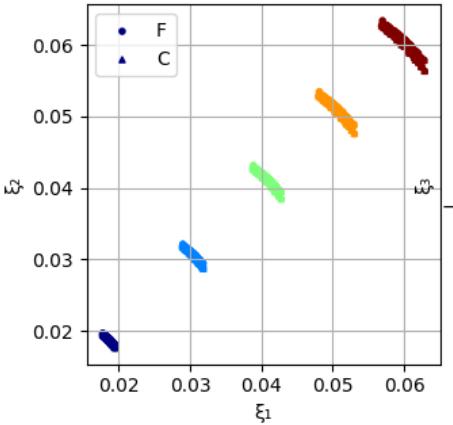
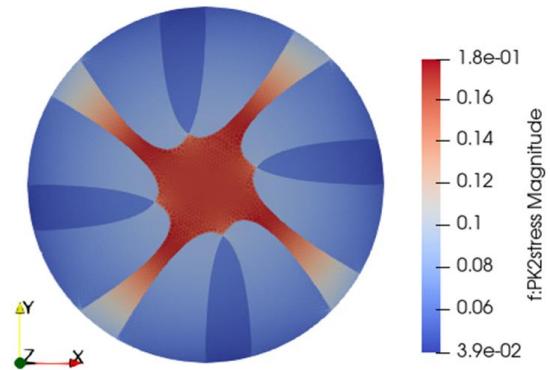
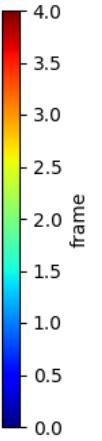
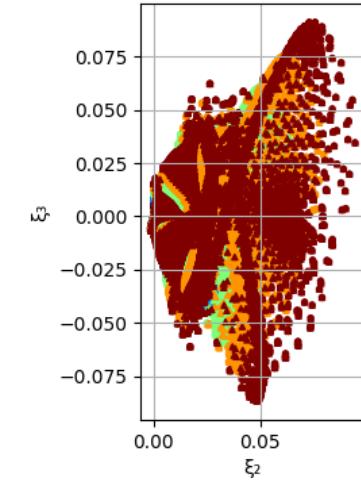
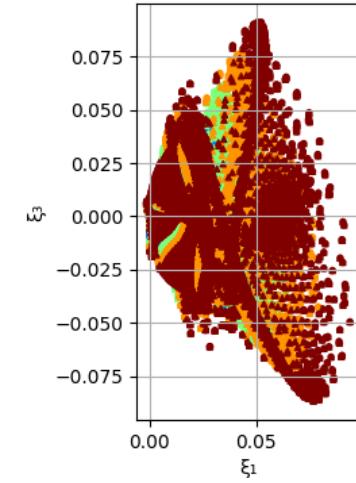
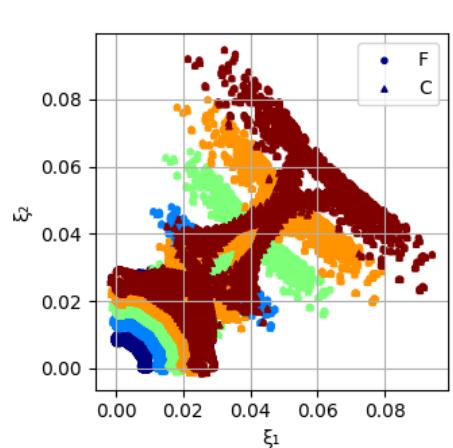
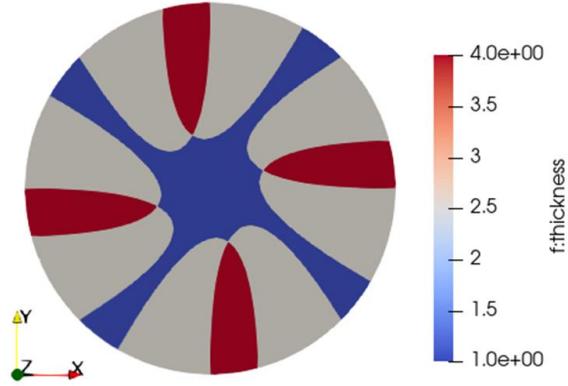
Был предложен следующий подход к инфляционному эксперименту. Подход состоит из четырёх этапов:

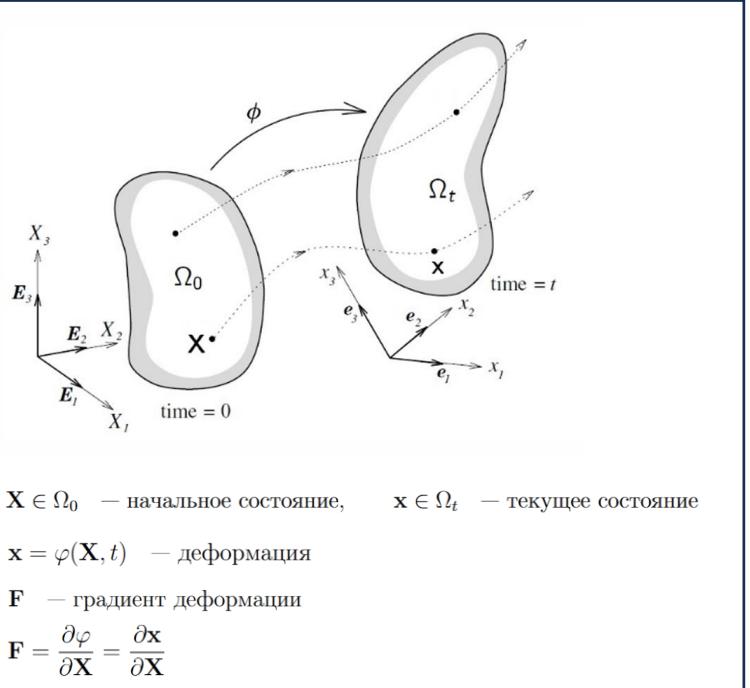
1. Раздуть круглую мембрану с неоднородной толщиной и получить поле перемещений из DIC;
2. Оценить поле напряжений методом жёсткого материала на основе статической определимости;
3. Сформировать облако точек в пространстве растяжения Лапласа ξ с данными $\partial\psi/\partial\xi$;
4. Использовать интерполяцию по k -ближайшему/ICNN элементу в облаке точек для получения определяющего соотношения на основе данных.



Профили раздутых мембран, полученные с помощью метода конечных элементов с потенциалом Неогуковским потенциалом (Ref NH) и с помощью метода конечных элементов с заданным на основе данных соотношением.

Наложенные патчи deg=60 (сбор данных в центральной зоне 5x5мм, по всему образцу)





Постановка задачи. Рассматриваем деформацию тонкой гиперупругой мембраны под нагрузкой. Пусть компактное множество параметров $\Theta \subset \mathbb{R}^2$, а гладкие отображения

$$\mathbf{X}: \Theta \rightarrow \Omega_0 \subset \mathbb{R}^3, \quad \mathbf{x}: \Theta \rightarrow \Omega_t \subset \mathbb{R}^3$$

задают среднюю поверхность мембранны в *начальной* и *текущей* конфигурациях соответственно.

Координатные базисы. Конвективные базисные векторы

$$\mathbf{G}_\alpha = \frac{\partial \mathbf{X}(\theta_1, \theta_2)}{\partial \theta_\alpha}, \quad \mathbf{g}_\alpha = \frac{\partial \mathbf{x}(\theta_1, \theta_2)}{\partial \theta_\alpha}, \quad \alpha = 1, 2.$$

Градиент деформации.

$$\mathbf{F} = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{X}} = \sum_{\alpha=1}^2 \mathbf{g}_\alpha \otimes \mathbf{G}^\alpha,$$

где \otimes — тензорное произведение, а контравариантные векторы $\mathbf{G}^\alpha = \sum_{\beta=1}^2 (G^{-1})_{\alpha\beta} \mathbf{G}_\beta$ получены через метрический тензор $G_{\alpha\beta} = \mathbf{G}_\alpha \cdot \mathbf{G}_\beta$.

Правый тензор Коши — Грина поверхности.

$$\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \mathbf{F}.$$

Двумерные инварианты.

$$I_1 = \text{tr } \mathbf{C}, \quad I_2 = J^2 = \frac{1}{2}((\text{tr } \mathbf{C})^2 - \text{tr } \mathbf{C}^2)$$

где J — поверхностный якобиан.

Связь с 3-D инвариантами (несжимаемость).

$$I_1^{(3d)} = I_1 + I_1^{-1}, \quad I_2^{(3d)} = I_2 + I_1 I_2^{-1}, \quad I_3^{(3d)} = 1.$$

1.2 Конститутивные соотношения

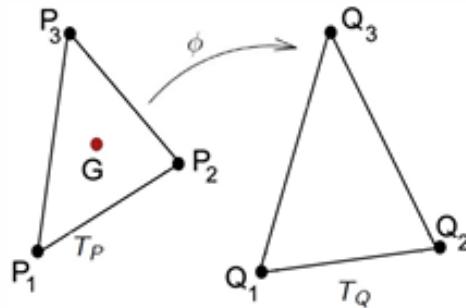
Полагая существование потенциальной энергии $W(\mathbf{F})$ (определенной на единицу неожатой площади), *двумерный тензор напряжений Коши* (аналог 3-D тензора Коши) задаётся

$$\mathbf{T} = \frac{2}{J} \mathbf{F} \frac{\partial W}{\partial \mathbf{C}} \mathbf{F}^T.$$

Полная упругая энергия.

$$U = \int_{\Omega_0} W(\mathbf{F}) dX.$$

2d SVK: Delingette H., 2008



Конформная согласованная треугольная/тетраэдralная сетка в исходной области Ω_0

P_1 конечные элементы

Ассемблирование (S_i это множество элементов, содержащих i -ый узел):

$$\sum_{T_P \in S_i} (F_i(T_P) + F_{i,ext}(T_P)) = 0, \text{ где}$$

$$\text{сила упругости } F_i(T_P) = -\frac{\partial U}{\partial Q_i} \stackrel{P_1}{=} -A_p \frac{\partial \psi(G)}{\partial Q_i},$$

$$\text{внешние силы } F_{i,ext}(T_P) = \int_{T_Q} b \lambda_i d\Omega.$$

Для произвольного гиперупругого материала $\psi(\xi_1, \dots, \xi_m)$ с мерами деформации ξ_1, \dots, ξ_m

- узловая упругая сила

$$F_i(T_P) = -\frac{\partial U(T_P)}{\partial Q_i} = -A_P \sum_{s=1}^m \frac{\partial \psi}{\partial \xi_s} \frac{\partial \xi_s}{\partial Q_i};$$

- $\partial \xi_s / \partial Q_i$ задаются явными формулами
- $\partial \psi / \partial \xi_s$ (функция отклика) отражает механические свойства материала, полученные экспериментальным путём

Решать полученную нелинейную систему можно любым безъякобианным методом, например, безъякобинным методом Ньютона-Крылова или даже методом релаксации.

Метод ближайшего соседа: $\partial\psi/\partial\xi_i(\vec{\xi}) = \partial\psi/\partial\xi_i(\arg \min_{\vec{\xi}_t} ||\vec{\xi}_t - \vec{\xi}||)$

Метод K -ближайших соседей взвешанными обратными расстояниями:

$$\frac{\partial\psi}{\partial\xi_i}(\vec{\xi}) = \sum_{j=1}^K w_j^p \cdot \frac{\partial\psi}{\partial\xi_i}(\vec{\xi}_j^p),$$

где $\{\vec{\xi}_j^p\}_{j=1}^K$ - близк. соседи по $||\cdot||_p$, $w_j^p = \left(1 + \sum_{l=1, l \neq j}^K \frac{||\vec{\xi}_j^p - \vec{\xi}||_p}{||\vec{\xi}_l^p - \vec{\xi}||_p}\right)^{-1}$

Метод ближайшего соседа с линейной интерполяцией в окрестности 0:

$$T_{ij}(\nabla x) = \begin{cases} S_{ijkl} E_{kl}, & ||\vec{\xi}|| < a \\ T_{ij} \left(\frac{\partial\psi}{\partial\xi_l}(\vec{\xi}) \right), & \text{иначе} \end{cases},$$

где $\vec{\xi} = \vec{\xi}(\nabla x)$, $\mathbb{E} = (\mathbb{F}^T \mathbb{F} - \mathbb{I})/2$