ALGORITMA PENYELESAIAN PERSAMAAN DINAMIKA LIQUID CRYSTAL ELASTOMER

Oleh:

Supardi

SEKOLAH PASCA SARJANA
JURUSAN ILMU FISIKA
UNIVERSITAS NEGERI YOGYAKARTA
2012

PENDAHULUAN

Liquid Crystal elastomer (LCE) merupakan materi lunak dengan keberaturan orientasional dan memiki fitur kombinasi antara liquid crystal (LC) dengan polimer yang elastik. LCE petama kali diusulkan oleh de Genes dan pertama kali disintesis oleh Finkelman dan kawan-kawan (Finkelman, dkk., 1981). Materi ini terdiri atas polimer LC dengan pautan melintang (*cross-linked)* dengan sisi keberaturan orientasional. Keberadaan LCE membawa banyak fenomena yang tidak ditemukan pada kristal cair ataupun polimer. Fitur utama yang dibawa oleh LCE adalah adanya kopling yang kuat antara deformasi mekanik dengan order orientasional. Sebagai konsekuensi dari kopling ini, regangan (*strain)* mekanis akan mengubah parameter benahan (*order parameter)* dan oleh sebab itu sifat-sifat fisis LCE yang ditunjukkan dengan adanya rangsangan luar, misalnya adanya pengaruh cahaya saja akan menghasilkan perubahan yang sangat besar. Seperti ditunjukkan oleh Camacho-Lopez dkk. (2004) bahwa keberaturan orientasional dapat dipengaruhi oleh adanya rangsangan seperti halnya cahaya. Mereka mendemonstrasikan bahwa dengan melarutkan *azo dyes* ke dalam cuplikan LCE, maka deformasi mekanis sebagai respon terhadap iluminasi tak uniform oleh cahaya tampak menjadi sangat besar (bengkok lebih dari 60^{o}) dan lebih dari dua orde magnitud lebih cepat dibandingkan dengan yang telah dilaporkan sebelumnya (Finkelman dkk, 2001). Deformasi induksi-cahaya cepat memungkinkan LCE berinteraksi dengan lingkungan dengan cara yang baru dan tidak diharapkan. Ketika sebuah berkas cahaya dari atas disinarkan ke arah sample *dye-doped LCE* yang mengambang di air, maka LCE akan "berenang" menjauhi cahaya tersebut.

Banyak penelitian telah dilakukan untuk mengkaji secara mendalam mengenai tanggap LCE oleh adanya rangsangan luar. Namun demikian, dinamika kristal cair jenis ini belum dapat dijelaskan secara gamblang. Seperti penelitian yang telah dilakukan oleh Cviklinski dkk (2003) tentang isomerisasi UV pada nematic elastomer. Dari penelitian ini terungkap bahwa relaksasi makroskopik ditentukan oleh relaksasi order nematik dan bukan oleh relaksasi jaringan polimer. Bentuk dari LCE sangat bergantung kepada parameter group mesogenik. Keberaturan ini dapat dimanipulasi jika "photo-isomerisable group" , misalnya N = N ikatan dimasukkan ke dalam materi. Tanggap foto mekanik panjang dari azo-benzena yang berisi nematic elastomer pada suhu yang berbeda telah dikaji dengan menggunakan pengukuran gaya dan optical berifringe yang difokuskan pada aspek fundamental dari dinamika populasi dan berkaitan dengan laju keberulangan respon.

PERSAMAAN GERAK

Untuk menjelaskan perilaku dinamik dari LCE ini, maka perlu diselesaikan ungkapan persamaan diferensial yang menyatakan evolusi waktu terhadap pergeseran materi elastis yang ditunjukkan oleh persamaan

$$\begin{aligned}\lambda \frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t} &= \frac{1}{2}\nabla_\alpha \cdot \left(\boldsymbol{L}^{-1}\boldsymbol{F}\,\boldsymbol{L_o}\right) + \nabla_\alpha \cdot \left(\Lambda (J-1) J \boldsymbol{F}^{-1}\right) \\ &+ \frac{\lambda_1}{2\lambda_3}\nabla_\alpha \cdot \left(\left(\nabla_\alpha \boldsymbol{u}\,\boldsymbol{F}^{-1} + \boldsymbol{F}^{-T}\nabla_\alpha \boldsymbol{u}^{-T}\right)\boldsymbol{F}^{-T}\right)\end{aligned} \quad (1)$$

dengan λ : konstanta bilangan positif, $\boldsymbol{F}$ adalah gradien deformasi, $\boldsymbol{L_o} = \boldsymbol{I} + 2\mu \boldsymbol{Q_o}$ adalah tensor panjang langkah pada keadaan awal dimana $\boldsymbol{Q_o}$ adalah tensor parameter benahan mula-mula, dan J = det(**F**).

Sedangkan untuk menyatakan perubahan parameter benahan pada setiap saat dinyatakan oleh persamaan

$$\begin{aligned}\frac{\partial S}{\partial t} &= -\frac{1}{6(1-\mu S)^2}\left[tr\left(\boldsymbol{F}\boldsymbol{L_o}\boldsymbol{F}^{\boldsymbol{T}}\right) - \frac{3(1+2\mu^2 S^2)}{(1+2\mu S)^2} tr\left(\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^{\boldsymbol{T}}\boldsymbol{F}\boldsymbol{L_o}\boldsymbol{F}^{\boldsymbol{T}}\right)\right] \\ &+ \frac{\mu^2 S}{(1-\mu S)(1+2\mu S)} + \frac{200}{3}\left(-5\left(\frac{Tem}{300}-1\right)S + 4S^2 - 5S^3\right)\end{aligned} \quad (2)$$

Beberapa parameter yang terlibat dalam persamaan ini antara lain *S:* parameter benahan, yaitu parameter yang bertanggung jawab terhadap keadaan LC, *μ:* parameter relaksasi, *Tem*: fungsi suhu yang bergantung pada lokasi dan waktu, ***F***: gradient deformasi dan ***n***: vektor director. Untuk kasus fase uniaksial, bentuk tensor parameter benahan dinyatakan oleh $\boldsymbol{Q}=S\left(3/2\,\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^{T}-\frac{1}{2}\boldsymbol{I}\right)$.

Untuk menjaga panjang director ***n*,** maka perlu dinyatakan sebuah persamaan diferensial seperti diperlihatkan di bawah ini

$$\frac{\partial \boldsymbol{n}}{\partial t}=\frac{\mu S}{3S^2(1-\mu S)(1+2\mu S)}\left[\boldsymbol{F}\boldsymbol{L}_{\boldsymbol{o}}\boldsymbol{F}^{T}-tr\left(\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^{T}\boldsymbol{F}\boldsymbol{L}_{\boldsymbol{o}}\boldsymbol{F}^{T}\right)\boldsymbol{I}\right]\boldsymbol{n} \tag{3}$$

Persamaan berikutnya menyatakan keadaan deformasi LCE pada setiap saat yang dinyatakan oleh persamaan

$$\frac{\partial \boldsymbol{F}}{\partial t}=\nabla_{\alpha}{}'\boldsymbol{u} \tag{4}$$

ALGORITMA UNTUK MENYELESAIKAN PERSAMAAN GERAK PADA DINAMIKA LCE

Sebagaimana diperlihatkan pada persamaan (1), (2), (3) dan (4) bahwa keempat persamaan diferensial tersebut mengandung derivatif waktu dan ruang. Oleh sebab itu, ada beberapa metode yang dapat digunakan untuk menyelesaikan persamaan ini. Diantara metode yang dapat diuji untuk menyelesaikan persamaan diferensial ini antara lain (1) metode FTCS (Forward in Time, Centerd in Space), yaitu pendekatan derivatif dengan menggunakan pendekatan beda maju untuk derivatif waktu dan beda terpusat untuk derivatif ruangnya (2) metode CTCS (Centered-Space Centered-Space), yaitu metode yang menggunakan pendekatan beda hingga terpusat untuk derivatif waktu dan ruangnya, (3) metode spectral(FFT, DFT dan Chebyshev). Namun demikian, dalam paper ini hanya akan digunakan metode FTCS mengingat kesederhanaan dalam diskretisasinya.

1 ALGORITMA UNTUK PERSAMAAN PERGESERAN

Sebagaimana dinyatakan oleh persamaan (1)

$$\lambda \frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t} = \frac{1}{2} \nabla_\alpha \cdot \left(\boldsymbol{L}^{-1} \boldsymbol{F} \boldsymbol{L_o} \right) + \nabla_\alpha \cdot \left(\Lambda (J-1) J \boldsymbol{F}^{-1} \right) + \frac{\lambda_1}{2\lambda_3} \nabla_\alpha \cdot \left(\left(\nabla_\alpha \boldsymbol{u} \boldsymbol{F}^{-1} + \boldsymbol{F}^{-T} \nabla_\alpha \boldsymbol{u}^{-T} \right) \boldsymbol{F}^{-T} \right)$$

Persamaan ini dapat diselesaikan dengan metode FTCS yaitu dengan mengambil pendekatan beda hingga maju untuk derivatif waktu dan beda hingga terpusat untuk derivatif ruangnya. Dalam persamaan tersebut derivatif waktu sudah jelas tampak, tetapi untuk derivatif ruangnya perlu dikaji lebih lanjut.

Sebelum kita melakukan diskretisasi terhadap persamaan (1), maka terlebih dahulu akan dijelaskan beberapa hal mengenai parameter yang terlibat di dalam persamaan ini. Apabila digunakan koordinat kartesan, maka ungkapan ∇_α dapat dinyatakan sebagai $\nabla_\alpha = \hat{i} \frac{\partial}{\partial x} + \hat{j} \frac{\partial}{\partial y} + \hat{k} \frac{\partial}{\partial z}$. Sedangkan untuk $\boldsymbol{L}$ dan $\boldsymbol{F}$ masing-masing dapat dinyatakan sebagai

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{I} + 2\mu \boldsymbol{Q} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} + 2\mu \begin{bmatrix} \frac{3}{2} n_x n_x - \frac{1}{2} & \frac{3}{2} n_x n_y & \frac{3}{2} n_x n_z \\ \frac{3}{2} n_y n_x & \frac{3}{2} n_y n_y - \frac{1}{2} & \frac{3}{2} n_y n_z \\ \frac{3}{2} n_z n_x & \frac{3}{2} n_z n_y & \frac{3}{2} n_z n_z - \frac{1}{2} \end{bmatrix} \tag{5}$$

mengingat

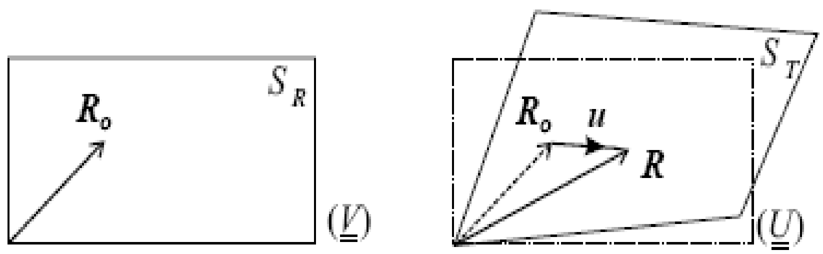
$$\boldsymbol{Q} = S \left(3/2\, \boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^{\boldsymbol{T}} - \frac{1}{2} \boldsymbol{I} \right) \quad \text{atau} \tag{6a}$$

$$Q_{ij} = S \left(\frac{3}{2} n_i n_j - \frac{1}{2} \delta_{ij} \right) \tag{6b}$$

Sedangkan $\boldsymbol{F}$ adalah gradien deformasi yang dinyatakan oleh

$$F_{ij} = \frac{\partial R_i}{\partial R_{oj}} \tag{7}$$

Makna fisis yang terkandung di dalam gradien deformasi ini dapat dijelaskan sebagai berikut. Jika dipandang sebuah ruang acuan S_R dari sebuah benda sebelum melakukan deformasi ke ruang S_T . Sebuah titik materi $\boldsymbol{R_o}$ di dalam S_R menjadi $\boldsymbol{R} = \boldsymbol{R_o} + \boldsymbol{u}(\boldsymbol{R_o})$ di dalam S_T (Lihat gambar 1).



Gambar 1. Deformasi benda elastis. Sebuah titik dengan koordinat $\boldsymbol{R_o}$ *dalam ruang acuan* S_R *dipindahkan ke posisi baru* **R** *di dalam ruang target* S_T *. Deformasi digambarkan secara penuh oleh medan vektor pergeseran* $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{R_o})$ *pada setiap titik dalam bentuk benda mula-mula. Selanjutnya* $\boldsymbol{R_o}$ *dipindah ke* **R** *oleh* $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{R_o})$ *. Matriks* **V** *dan* **U** *masing-masing adalah rotasi untuk* S_R *dan* S_T *.*

Sudah jelas bahwa hanya gradien pergeseran saja yang berkontribusi terhadap efek fisis: medan pergeseran uniform $\boldsymbol{u}$ berkaitan dengan perpindahan benda secara keseluruhan.

Apabila transformasi ruang target terjadi karena rotasi $\boldsymbol{U}$ sehingga $\boldsymbol{R}' = \boldsymbol{U} \cdot \boldsymbol{R}$ dan deformasi ruang acuan karena rotasi $\boldsymbol{V}$ sehingga $\boldsymbol{R_o'} = \boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{R_o}$ maka tensor gradien deformasi dapat dinyatakan oleh

$$F'_{kl} = U_{kl} \frac{\partial R_i}{\partial R_{oj}} V^T_{jl} \tag{8a}$$

$$\boldsymbol{F}' = \boldsymbol{U} \cdot \boldsymbol{F} \cdot \boldsymbol{V}^{\boldsymbol{T}} \qquad \text{atau sebalikya} \tag{8b}$$

$$\boldsymbol{F} = \boldsymbol{U}^{\boldsymbol{T}} \boldsymbol{F}' \boldsymbol{V} \tag{8c}$$

Selanjutnya, untuk melakukan diskretisasi pada persamaan (1) maka perlu dimisalkan

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}^{-1} \boldsymbol{F} \boldsymbol{L}_{\boldsymbol{o}} \quad \text{atau} \quad A_{ij} = \left(\boldsymbol{L}^{-1} \boldsymbol{F} \boldsymbol{L}_{\boldsymbol{o}}\right)_{\boldsymbol{ij}} \tag{9}$$

$$\boldsymbol{B} = \Lambda(J-1) J \boldsymbol{F}^{-\boldsymbol{T}} \quad \text{atau} \quad B_{ij} = \left(\Lambda(J-1) J \boldsymbol{F}^{-\boldsymbol{T}}\right)_{ij} \tag{10}$$

$$\boldsymbol{C} = \nabla_{\alpha} \boldsymbol{u} \boldsymbol{F}^{-1} \boldsymbol{F}^{-\boldsymbol{T}} \quad \text{atau} \quad C_{ij} = \left(\nabla_{\alpha} \boldsymbol{u} \boldsymbol{F}^{-1} \boldsymbol{F}^{-\boldsymbol{T}}\right)_{ij} \tag{11}$$

$$\boldsymbol{D} = \boldsymbol{F}^{-\boldsymbol{T}} \nabla_{\alpha} \boldsymbol{u}^{-\boldsymbol{T}} \boldsymbol{F}^{-\boldsymbol{T}} \quad \text{atau} \quad D_{ij} = \left(\boldsymbol{F}^{-\boldsymbol{T}} \nabla_{\alpha} \boldsymbol{u}^{-\boldsymbol{T}} \boldsymbol{F}^{-\boldsymbol{T}}\right)_{ij} \tag{12}$$

sehingga diperoleh bentuk yang lebih sederhana

$$\lambda \frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t} = \frac{1}{2} \nabla_{\alpha} \cdot \boldsymbol{A} + \nabla_{\alpha} \cdot \boldsymbol{B} + \frac{\lambda_1}{2\lambda_3} \nabla_{\alpha} \cdot \left(\boldsymbol{C} + \boldsymbol{D}\right) \quad \text{atau} \tag{13a}$$

$$\lambda \frac{\partial u_i}{\partial t} = \frac{1}{2} \partial_i A_{ij} + \partial_i B_{ij} + \frac{\lambda_1}{2\lambda_3} \partial_i \left(C_{ij} + D_{ij}\right) \tag{13b}$$

Jika diskretisasi dilakukan hanya ke arah x saja maka diperoleh

$$\begin{aligned} \lambda \frac{u_x^{k+1} - u_x^k}{\Delta t} &= \frac{1}{2} \frac{A_{xj,i+1}^k - A_{xj,i-1}^k}{2\Delta x} + \frac{B_{xj,i+1}^k - B_{xj,i-1}^k}{2\Delta x} \\ &+ \frac{\lambda_1}{2\lambda_3} \left(\frac{C_{xj,i+1}^k - C_{xj,i-1}^k}{2\Delta x} + \frac{D_{xji+1}^k - D_{xj,i-1}^k}{2\Delta x} \right) \end{aligned} \tag{14}$$

$$\begin{aligned} u_x^{k+1} &= \frac{1}{\lambda} u_x^k + \frac{\Delta t}{2\lambda} \frac{A_{xj,i+1}^k - A_{xj,i-1}^k}{2\Delta x} + \frac{\Delta t}{\lambda} \frac{B_{xj,i+1}^k - B_{xj,i-1}^k}{2\Delta x} \\ &+ \frac{\lambda_1 \Delta t}{2\lambda\lambda_3} \left(\frac{C_{xj,i+1}^k - C_{xj,i-1}^k}{2\Delta x} + \frac{D_{xj,i+1}^k - D_{xj,i-1}^k}{2\Delta x} \right) \end{aligned} \tag{15}$$

dengan *j=1..3 (atau x, y dan z).* Beda hingga yang digunakan untuk mendekati ungkapan derivatif pada (15) adalah beda maju untuk derivatif waktu dan beda terpusat untuk derivatif ruangnya.

Berdasarkan pada diskretisasi (15) maka kita dapat menyusun algoritma untuk memperoleh ungkapan pergeseran ***u*** pada setiap saat.

(1) Tentukan harga tetapan $\lambda, \lambda_{1,} \lambda_3$

(2) Tentukan panjang langkah untuk Δt dan Δx

(3) Tentukan batas bawah t_a dan batas atas t_b untuk derivatif waktu.

(4) Tentukan batas bawah x_a dan batas atas x_b untuk derivtif ruangnya.

(5) Tentukan jumlah iterasi maksimum $M = \frac{(t_b - t_a)}{\Delta t}$ dan $N = \frac{(x_b - x_a)}{\Delta x}$

(6) Menentukan syarat awal, yaitu pada t=0.0 untuk menentukan $u = u_x^o$

(7) Memberikan syarat batas (dapat berupa Dirichlet atau Neuman) untuk $A_{xj}, B_{xj}, D_{xj}, D_{xj}$ di sepanjang $x = N$

(8) Untuk k=1:N

(a) $t_k = t_a + k \Delta t$

1. Untuk i=1:N-1

1. $x_i = x_a + i \Delta x$

2. Hitung $A_i = \frac{\Delta t}{2\lambda} \frac{A_{xj,i+1}^k - A_{xj,i-1}^k}{2 \Delta x}$, $B_i = \frac{\Delta t}{\lambda} \frac{B_{xj,i+1}^k - B_{xj,i-1}^k}{2 \Delta x}$

$$C_i = \frac{\lambda_1 \Delta t}{2 \lambda \lambda_3} \frac{C_{xj,i+1}^k - C_{xj,i-1}^k}{2 \Delta x} \quad \text{dan} \quad D_i = \frac{D_{xj,i+1}^k - D_{xj,i-1}^k}{2 \Delta x}$$

3. Hitung $u_{i+1} = u_i + A_i + B_i + C_i + D_i$

(b) Tampilkan data untuk t, x dan u.

(9) Selesai

2 ALGORITMA PERSAMAAN DINAMIKA PARAMETER BENAHAN

Persamaan parameter benahan diberikan oleh persamaan (2) yang dapat ditulis kembali

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -\frac{1}{6(1-\mu S)^2}\left[tr(\boldsymbol{FL_o F^T}) - \frac{3(1+2\mu^2 S^2)}{(1+2\mu S)^2} tr(\boldsymbol{nn^T FL_o F^T}) \right] + \frac{\mu^2 S}{(1-\mu S)(1+2\mu S)} + \frac{200}{3}\left(-5(\frac{Tem}{300}-1)S + 4S^2 - 5S^3 \right)$$

Persamaan diferensial seperti ditunjukkan oleh persamaan di atas tentunya lebih mudah dikerjakan dibandingkan dengan persamaan sebelumnya, mengingat ruas kanan tidak mengandung derivatif ruang. Akan tetapi, untuk mempermudah perhitungan, kita perlu melakukan penyederhanaan. Apabila dimisalkan

$\boldsymbol{A} = tr(\boldsymbol{FL_o F^T})$, $\boldsymbol{B} = tr(\boldsymbol{nn^T FL_o F^T})$ sehingga persamaan (1) menjadi

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -\frac{1}{6(1-\mu S)^2}\left[tr(\boldsymbol{A}) - \frac{3(1+2\mu^2 S^2)}{(1+2\mu S)^2} tr(\boldsymbol{B}) \right] + \frac{\mu^2 S}{(1-\mu S)(1+2\mu S)} \frac{+200}{3}\left(-5(\frac{Tem}{300}-1)S + 4S^2 - 5S^3 \right) \tag{16}$$

maka kita cukup menggunakan pendekatan beda maju saja untuk derivatif waktunya, sehingga diperoleh ungkapan diskretisasi

$$\frac{S_{i+1}-S_i}{\Delta t} = -\frac{1}{6(1-\mu S_i)^2}\left[tr(\boldsymbol{A}) - \frac{3(1+2\mu^2 S_i^2)}{(1+2\mu S_i)^2} tr(\boldsymbol{B}) \right] + \frac{\mu^2 S_i}{(1-\mu S_i)(1+2\mu S_i)} \frac{+200}{3}\left(-5(\frac{Tem}{300}-1)S_i + 4S_i^2 - 5S_i^3 \right) \tag{17}$$

atau

$$S_{i+1} = S_i - \frac{\Delta t}{6(1-\mu S_i)^2}\left[tr(\boldsymbol{A}) - \frac{3(1+2\mu^2 S_i^2)}{(1+2\mu S_i)^2} tr(\boldsymbol{B}) \right] + \frac{\Delta t \mu^2 S_i}{(1-\mu S_i)(1+2\mu S_i)} \frac{+200\Delta t}{3}\left(-5(\frac{Tem}{300}-1)S_i + 4S_i^2 - 5S_i^3 \right) \tag{18}$$

Dari persamaan (18) kita dapat menyusun algoritma dinamika parameter benahan sebagai berikut:

2. Tentukan konstanta μ dan *Tem*
3. Tentukan tensor gradient deformasi ***F***, tensor panjang langkah $\boldsymbol{L_o}$ dan vektor director ***n***.

4. Hitung $\boldsymbol{A}=tr\left(\boldsymbol{F}\boldsymbol{L}_{\boldsymbol{o}}\boldsymbol{F}^{\boldsymbol{T}}\right)$ dan $\boldsymbol{B}=tr\left(\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^{\boldsymbol{T}}\boldsymbol{F}\boldsymbol{L}_{\boldsymbol{o}}\boldsymbol{F}^{\boldsymbol{T}}\right)$
5. Tentukan batas bawah t_a dan batas atas t_b untuk derivatif waktu.
6. Tentukan panjang langkah waktu Δt
7. Hitung jumlah iterasi $N=\frac{(t_b-t_a)}{\Delta t}$
8. Berikan harga awal (inisialisasi) $S=S_o$
9. Untuk i=1:N
   (a) $t_i=t_a+i\Delta t$
   (b) Hitung

$$Y_i=-\frac{\Delta t}{6(1-\mu S_i)^2}\left[tr(\boldsymbol{A})-\frac{3(1+2\mu^2 S_i^2)}{(1+2\mu S_i)^2}tr(\boldsymbol{B})\right]+\frac{\Delta t\,\mu^2 S_i}{(1-\mu S_i)(1+2\mu S_i)}$$
$$+\frac{200\Delta t}{3}\left(-5\left(\frac{Tem}{300}-1\right)S_i+4S_i^2-5S_i^3\right)$$

   (c) Hitung $S_{i+1}=S_i+Y_i$
   (d) Tampilkan data *S* untuk tiap elemen t_i
10. Selesai

3 ALGORITMA PERSAMAAN DINAMIKA DIRECTOR

Untuk menyelesaikan secara numerik bentuk dari ungkapan derivatif waktu pada persamaan dinamika director ***n***, maka perlu dilakukan pernyederhaan ungkapan terlebih dahulu. Dimisalkan $\boldsymbol{A}=\left(\boldsymbol{F}\boldsymbol{L}_{\boldsymbol{o}}\boldsymbol{F}^{\boldsymbol{T}}\right)$, $\boldsymbol{B}=tr\left(\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^{\boldsymbol{T}}\boldsymbol{F}\boldsymbol{L}_{\boldsymbol{o}}\boldsymbol{F}^{\boldsymbol{T}}\right)\boldsymbol{I}$ dan ***C*=*A*+*B*** maka persamaan (3) menjadi

$$\frac{\partial \boldsymbol{n}}{\partial t}=\frac{\mu S}{3S^2(1-\mu S)(1+2\mu S)}\boldsymbol{C}\,\boldsymbol{n} \qquad (19)$$

Jika diambil pada arah sumbu *x* saja, maka ungkapan (19) menjadi

$$\frac{\partial n_x}{\partial t}=\frac{\mu S}{3S^2(1-\mu S)(1+2\mu S)}\boldsymbol{C}\,n_x \qquad (20)$$

Dengan menggunakan pendekatan beda hingga maju pada derivatif waktunya, maka ungkapan (20) dapat dinyatakan oleh

$$\frac{n_x^{i+1}-n_x^i}{\Delta t}=\frac{\mu S}{3S^2(1-\mu S)(1+2\mu S)}\boldsymbol{C}\, n_x^i \tag{21}$$

atau

$$n_x^{i+1}=n_x^i+\frac{\Delta t\,\mu S}{3S^2(1-\mu S)(1+2\mu S)}\boldsymbol{C}\, n_x^i \tag{22}$$

dengan cara yang sama diperoleh untuk diskretisasi ke arah sumbu *y* dan *z*

$$n_y^{i+1}=n_y^i+\frac{\Delta t\,\mu S}{3S^2(1-\mu S)(1+2\mu S)}\boldsymbol{C}\, n_y^i \tag{23}$$

$$n_z^{i+1}=n_z^i+\frac{\Delta t\,\mu S}{3S^2(1-\mu S)(1+2\mu S)}\boldsymbol{C}\, n_z^i \tag{24}$$

Berdasarkan pada persamaan (22), (23) atau (24) maka kita dapat menyusun algoritma program sebagai berikut.

1. Tentukan konstanta μ dan *S*
2. Tentukan tensor gradient deformasi ***F***, tensor panjang langkah $\boldsymbol{L_o}$ dan vektor director ***n***.
3. Hitung $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{F}\boldsymbol{L_o}\boldsymbol{F}^{\boldsymbol{T}}$ dan $\boldsymbol{B}=tr(\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^{\boldsymbol{T}}\boldsymbol{F}\boldsymbol{L_o}\boldsymbol{F}^{\boldsymbol{T}})\boldsymbol{I}$
4. Tentukan batas bawah t_a dan batas atas t_b untuk derivatif waktu.
5. Tentukan panjang langkah waktu Δt
6. Hitung jumlah iterasi $N=\frac{(t_b-t_a)}{\Delta t}$
7. Berikan harga awal (inisialisasi) $n_i=n_o$ (kita dapat mengambil derivatif ke arah sumbu *x*, *y* atau *z)*
8. Untuk i=1:N

   (a) $t_i=t_a+i\,\Delta t$

(b) Hitung $y_i = \dfrac{\Delta t\,\mu S}{3S^2(1-\mu S)(1+2\mu S)}\boldsymbol{C}\,n_i$

(c) Hitung $n_{i+1} = n_i + y_i$

(d) Tampilkan data n_i pada tiap elemen t_i

9. Selesai

4 ALGORITMA DINAMIKA DEFORMASI

Persamaan dinamika deformasi benda elastis dinyatakan oleh persamaan (4), atau jika ditulis kembali

$$\frac{\partial \boldsymbol{F}}{\partial t} = \nabla_\alpha{}' \boldsymbol{u}$$

Sebelum kita membuat algoritma penyelesaian numerik persamaan diferensial di atas, maka perlu terlebih dahulu dijabarkan variabel yang terlibat di dalamnya. Variabel $\boldsymbol{F}$ adalah tensor deformasi yang berhubungan dengan tensor gradien pergeseran $\boldsymbol{u}$ dengan hubungan

$$F_{ij} = \delta_{ij} + u_{ij} \qquad (25)$$

Identitas δ_{ij} merupakan tensor satuan yang menyatakan tidak adanya deformasi. Sedangkan u_{ij} adalah tensor gradien pergeseran yang dinyatakan oleh

$$u_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial R_{oj}} \qquad (26)$$

Dengan mensubstitusikan ungkapan (25) ke persamaan (4) maka diperoleh ungkapan

$$\frac{\partial F_{ij}}{\partial t} = \nabla_\alpha u_j \quad \text{atau}$$

$$\frac{\partial(\delta_{ij} + u_{ij})}{\partial t} = \nabla_\alpha u_j \quad \text{atau}$$

$$\frac{\partial(u_{ij})}{\partial t} = \nabla_\alpha u_{ij} \quad \text{atau}$$

$$\frac{\partial(u_{ij})}{\partial t}=\frac{\partial u_j}{\partial x_i} \tag{27}$$

mengingat $\frac{\partial(\delta_{ij})}{\partial t}=0$. Dengan demikian, berdasarkan pada persamaan (27) kita dapat melakukan diskretisasi sebagai berikut. Jika hanya diambil pada arah sumbu *x* saja, maka dengan menerapkan metode FTCS diperoleh ungkapan diskretisasi

$$\frac{(u_{xj}^{k+1}-u_{xj}^{k})}{\Delta t}=\frac{u_{j,i+1}^{k}-u_{j,i-1}^{k}}{2\Delta x} \tag{28}$$

atau

$$u_{xj}^{k+1}=u_{xj}^{k}+\frac{\Delta t}{2\Delta x}\left(u_{j,i+1}^{k}-u_{j,i-1}^{k}\right) \tag{29}$$

dengan *j*=1..3 (*x,y dan z)*. Selanjutnya dapat dibuat algoritma sebagai berikut

(1) Tentukan panjang langkah untuk Δt dan Δx

(2) Tentukan batas bawah t_a dan batas atas t_b untuk derivatif waktu.

(3) Tentukan batas bawah x_a dan batas atas x_b untuk derivtif ruangnya.

(4) Tentukan jumlah iterasi maksimum $M=\frac{(t_b-t_a)}{\Delta t}$ dan $N=\frac{(x_b-x_a)}{\Delta x}$

(5) Menentukan syarat awal, yaitu pada t=0.0 untuk menentukan $u=u_x^o$

(6) Memberikan syarat batas (dapat berupa Dirichlet atau Neuman) untuk di $u_{j,i}^{k}$ sepanjang $x=N$

(7) Untuk *k=1:N*

(a) $t_k=t_a+k\Delta t$

1. *Untuk i=1:N-1*
    1. $x_i=x_a+i\Delta x$
    2. *Hitung* $y_i=\frac{\Delta t}{2\Delta x}\left(u_{j,i+1}^{k}-u_{j,i-1}^{k}\right)$

3. *Hitung* $u_{i+1}=u_i+y_i$

(b) *Tampilkan data untuk* t_i, x_i *dan* u_i .

(8) Selesai

Setelah diperoleh harga u_{ij} , maka dilanjutkan dengan menghitung tensor gardien deformasi

$$F_{ij}=\delta_{ij}+u_{ij}$$