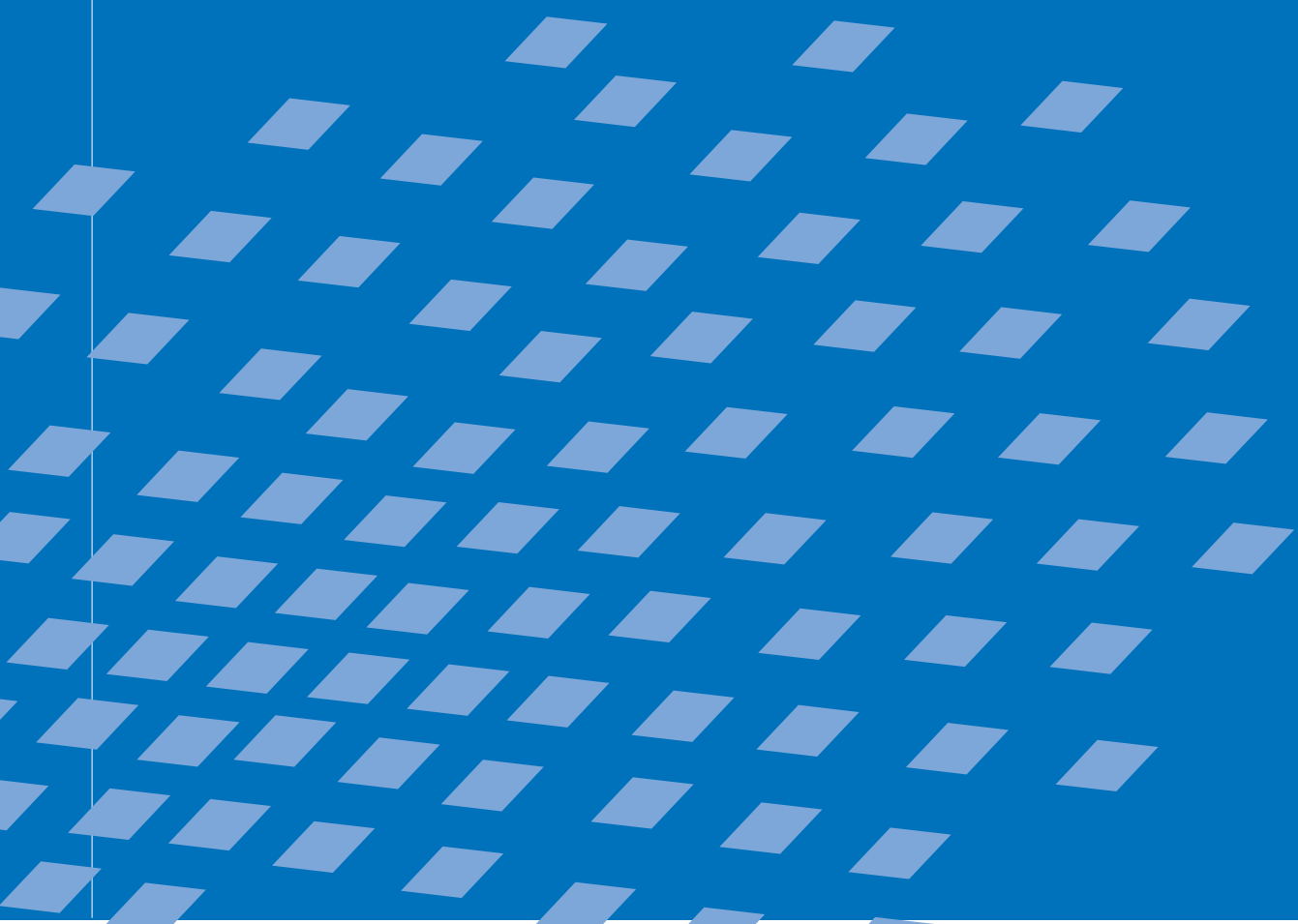




Hierarchische Mehrskalenmodellierung des Versagens von Werkstoffen mit Mikrostruktur

Andrea S. Hund



Hierarchische Mehrskalenmodellierung des Versagens von Werkstoffen mit Mikrostruktur

von

Andrea S. Hund

Bericht Nr. 48 (2007)

Institut für Baustatik und Baudynamik der Universität Stuttgart

Professor Dr.-Ing. habil. M. Bischoff

Stuttgart 2007



© Andrea S. Hund

Berichte können bezogen werden über:
Institut für Baustatik und Baudynamik
Universität Stuttgart
Pfaffenwaldring 7
D-70550 Stuttgart
Tel.: 07 11 / 6 85 661 23
Fax: 07 11 / 6 85 661 30
<http://www.ibb.uni-stuttgart.de/>

Alle Rechte, insbesondere das der Übersetzung in andere Sprachen, vorbehalten. Ohne Genehmigung des Autors ist es nicht gestattet, diesen Bericht ganz oder teilweise auf photomechanischem, elektronischem oder sonstigem Wege zu kommerziellen Zwecken zu vervielfältigen.

ISBN 978-3-00-021079-2

Hierarchische Mehrskalenmodellierung des Versagens von Werkstoffen mit Mikrostruktur

Von der Fakultät Bau- und Umweltingenieurwissenschaften
der Universität Stuttgart zur Erlangung der Würde eines Doktors der
Ingenieurwissenschaften (Dr.-Ing.) genehmigte Abhandlung

vorgelegt von

Andrea S. Hund

aus Stuttgart

Hauptberichter: Prof. Dr.-Ing. Dr.-Ing. E. h. Dr. h. c. Ekkehard Ramm

Mitberichter: Prof. Dr.-Ing. habil. Stefanie Reese

Tag der mündlichen Prüfung: 16. Februar 2007

Zusammenfassung

Die vorliegende Arbeit befasst sich mit der Analyse des Verhaltens von Strukturen, die aus mikroheterogenen Materialien – beispielsweise Verbundmaterialien – gefertigt sind. Hierbei sind die charakteristischen Abmessungen der Materialkomponenten im Allgemeinen deutlich kleiner als die charakteristischen Abmessungen der Struktur. Deshalb sind mechanische Modelle, die die Materialskala direkt auflösen zu aufwändig. Andererseits sind makroskopische Modelle, die das lokale Materialverhalten nur phänomenologisch in gemittelter Weise erfassen zu ungenau, um zuverlässige Prognosen des Systemverhaltens bis zum Zustand des Versagens treffen zu können und um den Versagensvorgang zu untersuchen. Eine Alternative stellen Methoden dar, die die physikalischen Vorgänge, die sich auf der Skala der Materialheterogenitäten abspielen, detailliert erfassen und auf der Strukturskala im Rahmen eines Mehrskalenmodells einbinden.

Ziel dieser Arbeit ist die Entwicklung eines entsprechenden Mehrskalenkonzeptes zur Analyse strukturmechanischer Probleme mit Mehrskalencharakteristik bei entfestigendem Werkstoffverhalten. Auf die Ausarbeitung eines effizienten und robusten Lösungsalgorithmus wird besonderer Wert gelegt.

Das vorgestellte Mehrskalenmodell basiert hierbei auf einem volumenverbindenden Skalenübergang, der durch hierarchisches Anreichern der grobskaligen Lösung realisiert wird. Durch den volumenverbindenden Skalenübergang behält das Mehrskalenmodell im entfestigenden Beanspruchungsbereich seine Gültigkeit, wenn die Skalenunterschiede durch lokalisierendes Materialverhalten klein werden.

Im Hinblick auf die Effizienz der Methode wird die hierarchische Anreicherung der Grobskalenlösung nur in Bereichen nichtlinearen Materialverhaltens eingesetzt. Hierfür wird ein verzerungsbasiertes Kriterium zur adaptiven Anpassung des Mehrskalenbereichs vorgeschlagen. Darüber hinaus wird ein lokaler Träger für die feinskaligen Variablen eingeführt, wodurch die Feinskalengleichungen äußerst effizient gelöst werden können. Ein simultaner Lösungsalgorithmus gewährleistet die Berücksichtigung der vorhandenen starken Kopplung zwischen den Skalen.

Im Zusammenhang mit der Lokalitätsannahme werden unterschiedliche Möglichkeiten zur Formulierung von Nebenbedingungen für die feinskaligen Variablen vorgestellt und entwickelt. Anhand geeigneter Modellbeispiele werden diese Möglichkeiten untersucht und hinsichtlich ihrer Vor- und Nachteile im Rahmen des Mehrskalenmodells verglichen.

Das Potential des vorgestellten hierarchischen Mehrskalenkonzeptes hinsichtlich Genauigkeit einerseits und Effizienz andererseits wird an verschiedenen Anwendungsbeispielen aufgezeigt.

Abstract

The present study is concerned with the analysis of the behavior of structures, made up of micro-heterogeneous materials like composites. Models, which directly resolve the material structure are too expensive, since the characteristic length of material components is much smaller than the characteristic length of the structure. On the other hand, macroscopic models capturing the local material behavior only in phenomenological sense are too inaccurate for a reliable analysis of the structural behavior within the post-failure range. An alternative are methods, which take care of the physical behavior on the scale of material heterogeneities in a detailed manner and include them on the structural scale by means of a multiscale model.

The aim of this thesis is the development of an appropriate multiscale concept to solve problems of structural mechanics with multiscale characteristics for softening material behavior. In this connection an efficient and robust solution algorithm is of particular importance.

The proposed multiscale method is based on a volume coupled scale transition, which is realized via a hierarchical refinement of the large scale solution. With this volume coupled scale transition, the multiscale model remains valid in the stage of softening, where the differences between scales become small due to localized material behavior.

With respect to the efficiency of this method, hierarchical refinement is restricted to regions with nonlinear material behavior. Therefore a strain-based criterion for the adaptive adjustment of the multiscale region is proposed. Additionally a local carrier is introduced for the fine scale variables, which allows a very efficient solution of the small scale equations. A simultaneous solution algorithm accounts for the strong coupling between the scales.

In the context of the locality assumption for the small scale variables, different possibilities to formulate constraint conditions are presented and introduced. Using adequate test cases these possibilities are investigated and compared with respect to their pros and cons within the multiscale method.

The potential of the proposed multiscale concept with respect to accuracy and efficiency is exemplified by means of various applications.

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Zeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Baustatik und Baudynamik.

Mein herzlicher Dank gilt Herrn Professor Ekkehard Ramm für die Anregung dieser Arbeit, die freundliche und herzliche Aufnahme in Ihr Institut, Ihre motivierende Betreuung und persönliche Unterstützung, viele hilfreiche und animierende Diskussionen, Ihr Vertrauen in uns Mitarbeiter und die Freiheit, die Sie mir in meiner Arbeit gewährt haben. Danke auch für die Anregung und Ermöglichung meiner Teilnahme an Konferenzen und Workshops und für die Integration meiner Arbeit in die deutsch-holländische Forschergruppe "Multiscale Methods in Computational Mechanics". Die Zeit bei Ihnen am Institut wird mir immer in schönster Erinnerung bleiben.

Frau Professor Stefanie Reese danke ich für ihre spontane Zusage zur Übernahme des Mitberichts, worüber ich mich sehr gefreut habe. Vielen Dank für die zügige Durchsicht der Arbeit.

Meinen Kollegen danke ich für das "freundschaftliche Miteinander". Das betrifft sowohl die Zusammenarbeit, als auch die gemeinsamen Kaffeepausen in der Küche oder auf dem Balkon und Unternehmungen, wie die Joggingrunde, Ausflüge, Wanderungen und Skiausfahrten. Danke für Eure Freundschaft und Unterstützung. Darüberhinaus ein großer Dank an Manfred Bischoff, der stets ein offenes Ohr und eine weiterhelfende Antwort auf meine Fragen hat und für seine Großzügigkeit als "neuer Chef", dass ich mich in der letzten Phase meiner Promotion nahezu ausschließlich dieser widmen durfte. Auch Malte von Scheven möchte ich besonders danken; nicht nur, dass Du uns beim Joggen zu Höchstleistungen motiviert hast, sondern auch, dass Du mir immer geholfen hast, wenn mein Rechner und ich Kommunikationsprobleme hatten. Christiane Förster danke ich, dass ich in Ihr einen Ansprechpartner für mathematische Fragen und eine liebe Freundin habe, Benjamin Schneider, Stefan Hartmann, Malte und Manfred, dass ich mit ihnen von den Bergen träumen kann und Frédéric Hilchenbach für die Colafläschchen und Schokolädchen zwischendurch. Mein Dank geht an Thomas Hettich für seine Unterstützung beim Beispiel zur "eXtended Finite Element Methode" und an Ingrid Bruss für die Durchsicht meiner Arbeit. Meinem ehemaligen Kollegen Volker Gravemeiner möchte für die ersten Bekanntschaften mit der "Variational Multiscale Methode" anhand unseres kleinen Beispiels danken.

Dank an meine Freunde für die schönen und lustigen Ablenkungen von den Finiten Elementen.

Ganz besonders möchte ich meinen lieben Eltern danken, für eine wunderschöne Kindheit und dass Ihr mich so liebevoll fördert und unterstützt und mir in allen Lebensphasen den nötigen Rückhalt gebt, und meinen Brüdern Stefan und Thomas, auf die ich mich immer verlassen kann. Mama, danke für Deinen tollen Einsatz im Namen der neuen Rechtschreibung.

Von ganzem Herzen möchte ich mich bei meinem lieben Tobias bedanken. Deine konstruktive Kritik hat wesentlich zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen. In Deiner liebevollen und verständnisvollen Art verstehst Du es immer, für mich die Sonne scheinen zu lassen, mich aufzubauen und zum Lachen zu bringen. Ein Glück, dass wir uns gefunden haben.

Stuttgart, im Februar 2007

Andrea Hund

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Motivation	1
1.2	Zielsetzung	3
1.3	Gliederung	4
2	Modellierungsaspekte und Grundlagen	6
2.1	Faserverbundwerkstoffe – Überblick	6
2.1.1	Versagensmechanismen in Faserverbundwerkstoffen	7
2.1.2	Modellierung des Versagens von Faserverbundwerkstoffen	7
2.2	Formulierung des Randwertproblems	11
2.2.1	Randwertproblem der lokalen Kontinuumsmechanik	11
2.2.2	Randwertproblem im Interface	15
2.3	Verwendete Konstitutivgesetze	18
2.3.1	Isotrope Elasto–Schädigung	18
2.3.2	Schädigungsbasiertes Konstitutivgesetz im Interface	21
2.3.3	Kondensation der konstitutiven Gleichungen	23
2.4	Entfestigung → Regularisierung	24
2.4.1	Netzadaptierter Entfestigungsmodul	26
2.4.2	Gradientenerweitertes Kontinuumsmodell	27
3	Mehrskalenmodelle und effiziente Lösungsmethoden	33
3.1	Einführung	33
3.2	Skalenseparation – homogenisierungsbasierte Mehrskalmethoden	36
3.2.1	Analytische Verfahren	39
3.2.2	Numerische ungekoppelte Homogenisierungsverfahren	41
3.2.3	Numerische gekoppelte Homogenisierungsverfahren	42
3.3	Keine Skalenseparation – hierarchische Mehrskalmethoden	44
3.4	Effiziente Gleichungslösung	51
3.4.1	Direkte vs. iterative Gleichungslöser	51
3.4.2	Gebietszerlegungsmethoden	54
3.4.3	Mehrgitterverfahren	62
4	Ein hierarchisches Zweiskalenmodell zur materiell nichtlinearen Versagensanalyse	64
4.1	Konzept des hierarchischen Zweiskalenmodells	64
4.1.1	Ausgangsproblem	64
4.1.2	Additive Zerlegung	65
4.1.3	Zweiskalenproblem	65

4.2	Hierarchisches Zweiskalenmodell für nichtlineares Materialverhalten	66
4.2.1	Begrenzung des Zweiskalengebiets	66
4.2.2	Additive Zerlegung	68
4.2.3	Schwache Form des Zweiskalenmodells	68
4.2.4	Diskretisierung	69
4.3	Lösung des Zweiskalenproblems – Annahme lokaler Träger	72
4.3.1	Annahme lokaler Träger	73
4.3.2	Schwache Form mit Lokalitätsannahme	74
4.3.3	Diskretes Zweiskalenproblem mit Lokalitätsannahme	75
4.3.4	Linearisiertes Zweiskalenproblem mit Lokalitätsannahme	76
4.4	Algorithmische Umsetzung	78
4.4.1	Parallelität	80
4.4.2	Berechnung der Steifigkeiten und Residuen	80
4.4.3	Statische Kondensation der feinskaligen Freiheitsgrade	80
4.4.4	Assemblierung der reduzierten Elementsteifigkeiten und –residuen	82
4.4.5	Lösung des erweiterten Gleichungssystems	82
5	Nebenbedingungen für die feinskaligen Verschiebungen	83
5.1	Einführung	83
5.2	Randbedingungen	86
5.2.1	Nullrandbedingung	86
5.2.2	Schwache Nullrandbedingung	89
5.2.3	Randfunktionen	94
5.3	Übergangsbedingungen	96
5.3.1	Umsetzung mit der Strafterm–Methode	97
5.3.2	Umsetzung mit der Lagrange–Multiplikatoren–Methode	106
5.3.3	Umsetzung mit der erweiterten Lagrange–Multiplikatoren–Methode	112
5.4	Fazit	115
6	Untersuchung der Nebenbedingungen	117
6.1	Ausbreitung von Lokalisierungsbereichen	117
6.1.1	Versagenszone senkrecht zum Grobskalenelementrand	117
6.1.2	Versagenszone schräg zum Grobskalenelementrand	120
6.1.3	Versagenszone parallel zum Grobskalenelementrand	122
6.1.4	Zusammenfassung	124
6.2	Genauigkeit und Rechenzeitersparnis	124
6.3	Weitere Effizienzbetrachtungen	132
6.3.1	Optimales Diskretisierungsverhältnis	134
6.3.2	Beschleunigungsfähigkeit	137
6.3.3	Zusammenfassung	138

6.4	Bewertung der Nebenbedingungen	139
7	Numerische Beispiele	141
7.1	Anwendungsbeispiel: Faserverstärkte Probe	141
7.2	L-förmige Scheibe mit diskretem Rissmodell	144
7.3	Benchmarkproblem: Vierpunkt-Biegebalken	148
8	Zusammenfassung und Ausblick	154
8.1	Zusammenfassung	154
8.2	Ausblick	155
	Literatur	157
	Anhang	170
	Stichwortverzeichnis	172

Abkürzungen, Bezeichnungen, Notationen

Auf folgende Abkürzungen und Bezeichnungen wird in der vorliegenden Arbeit mehrfach zurückgegriffen:

Abkürzungen

FEM	Finite Element Methode
FSL	Feinskalenlösung

Mathematische Notationen

\mathbb{R}^n	n-dimensionaler Euklidischer Raum
∇	Gradientenoperator
div	Divergenz bezüglich kartesischem Koordinatensystem \mathbf{x}
$(\cdot)_{,x}$	partielle Ableitung nach x
[]	Sprungoperator
\forall	für alle

Bezeichnungen

Kontinuumsmechanik

\mathbf{x}	Platzierung im Euklidischen Raum
\mathbf{n}	Normalenvektor
\mathbf{u}	Verschiebungsvektor
$[\mathbf{u}]$	Verschiebungssprung
$\boldsymbol{\varepsilon}$	Verzerrungstensor
$\boldsymbol{\sigma}$	Cauchy'scher Spannungstensor
\mathbf{t}	Spannungsvektor
\mathbf{C}^{el}	elastischer Werkstofftensor (/–matrix)
\mathbf{C}_{tan}^{ed}	Materialtangente
\mathbf{C}_{sek}^{ed}	Materialsekante
\mathbf{Q}	akkustischer Tensor
\mathbf{q}	Vektor interner Geschichtsvariablen
$\hat{\mathbf{b}}$	externe Volumenlast
$\hat{\mathbf{t}}$	externe Randlast
$\hat{\mathbf{u}}$	vorgeschriebene Randverschiebung
Π	Gesamtenergie
Π_{int}	interne Energie
Π_{ext}	externe Energie
Π_p	potentielle Energie

Zweiskalenmodell (kontinuierliche Formulierung)

$\bar{\mathbf{u}}$	Grobskalenverschiebung
\mathbf{u}'	Feinskalenverschiebung

Materialparameter

E	E-Modul
ν	Querdehnzahl
λ, μ	Lamé-Konstanten
D	Schädigungsvariable
ε_v	äquivalente Verzerrung
$\tilde{\varepsilon}_v$	nichtlokale äquivalente Verzerrung
\varkappa	maximal eingeprägte äquivalente Verzerrung
\varkappa_0	Schädigungsschwellenwert
\varkappa_u	Bruchdehnung
k	Materialparameter des Schädigungsmodells
α, β	Materialparameter des Entfestigungsgesetzes
G_u	Bruchenergie
c	Gradientenparameter
w	Rissbandbreite

Räumliche Diskretisierung

n_{ele}	Anzahl der Finiten Elemente
n_{ele}^{IF}	Anzahl der Interface-Elemente
n_{ele}^{kont}	Anzahl der Kontinuums-elemente
\mathbf{N}	Verschiebungsansatzfunktion
\mathbf{B}	zugehöriger B-Operator
\mathbf{N}_E	Ansatzfunktion der nichtlokalen Verzerrung
\mathbf{B}_E	zugehöriger B-Operator
\mathbf{d}	Verschiebungsfreiheitsgrade eines Elements
\mathbf{D}	Verschiebungsfreiheitsgrade des Systems
\mathbf{e}	nichtlokale Verzerrungsfreiheitsgrade eines Elements
\mathbf{E}	nichtlokale Verzerrungsfreiheitsgrade des Systems
\mathbf{f}_{int}	Vektor der internen Elementkräfte
\mathbf{F}_{int}	Vektor der internen Systemkräfte
\mathbf{f}_{ext}	Vektor der externen Elementkräfte
\mathbf{F}_{ext}	Vektor der externen Systemkräfte
\mathbf{R}	Residuum
\mathbf{k}	Elementsteifigkeitsmatrix

\mathbf{K}	Systemsteifigkeitsmatrix
\cup	Assemblierungssymbol

Räumliche Diskretisierung ... Zweiskalenmodell

\bar{e}	betrachtetes Grobskalenelement
e'	betrachtetes Feinskalenelement
\bar{n}_{ele}	Anzahl der Grobskalenelemente in Ω
$\bar{n}_{ele}^{\bar{\Omega}}$	Anzahl der Grobskalenelemente im Grobskalengebiet $\bar{\Omega}$
$\bar{n}_{ele}^{\Omega'}$	Anzahl der Grobskalenelemente im Zweiskalengebiet Ω'
n'_{ele}	Anzahl der Feinskalenelemente im Zweiskalengebiet Ω'
n'_{ele}^{IF}	Anzahl der Feinskalen-Interface-Elemente im Zweiskalengebiet Ω'
n'_{ele}^{kont}	Anzahl der Feinskalenkontinuumselemente im Zweiskalengebiet Ω'
$n'_{ele}^{\bar{e}}$	Anzahl der Feinskalenelemente im Grobskalenelement \bar{e}
$n'_{ele}^{IF,\bar{e}}$	Anzahl der Feinskalen-Interface-Elemente im Grobskalenelement \bar{e}
$n'_{ele}^{kont,\bar{e}}$	Anzahl der Feinskalenkontinuumselemente im Grobskalenelement \bar{e}
$n'_{dof}^{\bar{e}}$	Anzahl der Feinskalenfreiheitsgrade im Grobskalenelement \bar{e}
\bar{N}	Ansatzfunktion für die grobskaligen Verschiebungen
\bar{B}	groskaliger B-Operator
N'	Ansatzfunktion für die feinskaligen Verschiebungen
B'	feinskaliger B-Operator
\bar{d}	Vektor der grobskaligen Elementverschiebungsfreiheitsgrade
\bar{D}	Vektor der grobskaligen Systemverschiebungsfreiheitsgrade
d'	Vektor der feinskaligen Elementverschiebungsfreiheitsgrade
D'	Vektor der feinskaligen Systemverschiebungsfreiheitsgrade
\bar{f}_{int}	Vektor der grobskaligen internen Elementkräfte
\bar{f}_{ext}	Vektor der grobskaligen externen Elementkräfte
f'_{int}	Vektor der feinskaligen internen Elementkräfte
f'_{ext}	Vektor der feinskaligen externen Elementkräfte

Gebietszerlegung

Γ_{ms}	Kopplungsrand
Γ_b	Kopplungsråder eines Grobskalenelements im Zweiskalengebiet
$[u']$	Verschiebungssprung der feinskaligen Verschiebung $[u'] = u^m - u^s$
m und s	benachbarte Grobskalenelemente am Kopplungsrand Γ_{ms} , m mit positivem, s mit negativem Vorzeichen behaftet
\bar{e} und \bar{n}	benachbarte Grobskalenelemente am Kopplungsrand $\Gamma_{\bar{e}\bar{n}}$, \bar{e} = betrachtetes Grobskalenelement, \bar{n} = benachbartes Grobskalenelement
n_{dom}	Anzahl der Teilgebiete

n_Γ	Anzahl der Kopplungsränder im Zweiskalengebiet
$n_\Gamma^{\bar{e}}$	Anzahl der Kopplungsränder des Grobskalenelements \bar{e}
nn_Γ	Anzahl der Feinskalenverschiebungsknoten auf einem Kopplungsrand Γ_{ms}
$nn_{\bar{e}}$	Anzahl der Feinskalenverschiebungsknoten auf den Kopplungsrändern des Grobskalenelements \bar{e}
nn	Anzahl der Feinskalenverschiebungsknoten auf allen Kopplungsrändern
n_λ^Γ	Anzahl der Lagrange–Freiheitsgrade auf einem Kopplungsrand Γ_{ms}
λ	Lagrange–Multiplikator
N_λ	Ansatzfunktion des Lagrange–Multiplikators
l	Vektor der Lagrange–Freiheitsgrade an einem Knoten
L	Vektor der Lagrange–Freiheitsgrade eines Kopplungsrandes Γ_{ms}
ϵ	Strafterm–Parameter
Π_{NB}	Energiebeitrag der Nebenbedingung

Gebiete und Ränder

Ω	Gebiet
Γ^{IF}	Interface–Gebiet
Ω^{kont}	Kontinuumsgebiet
$\partial\Omega$	Rand des Gebiets Ω
$\partial\Omega_t$	Neumannrand
$\partial\Omega_u$	Dirichletrand
Ω'	Zweiskalengebiet
$\bar{\Omega}$	Grobskalengebiet
$\partial\Omega'_t$	Neumannrand des Zweiskalengebiets
$\partial\Omega'_u$	Dirichletrand des Zweiskalengebiets
Γ'	Rand des Zweiskalengebiets
Γ'^{IF}	Interface–Gebiet im Zweiskalengebiet
Ω'^{kont}	Kontinuumsgebiet im Zweiskalengebiet
$\Omega'_{\bar{e}}$	Gebiet des Grobskalenelements \bar{e} im Zweiskalengebiet
$\Omega'_{\bar{e}}^{IF}$	Interface–Gebiet des Grobskalenelements \bar{e} im Zweiskalengebiet
$\Omega'_{\bar{e}}^{kont}$	Kontinuumsgebiet des Grobskalenelements \bar{e} im Zweiskalengebiet
Γ_{ms}	Kopplungsrand
Γ_b	Kopplungsränder eines Grobskalenelements im Zweiskalengebiet

Spezifikationen

$\overline{(\cdot)}$	Grobskalen...
$(\cdot)'$	Feinskalen...
$(\cdot)^k$... im Lastschritt k

- $(\cdot)^i$... im Iterationsschritt i
- $\delta(\cdot)$ Testfunktion zur Variablen (\cdot) , bzw. virtuelle Variable (\cdot) ,
oder Variation der Variablen (\cdot)

Weitere Abkürzungen und Bezeichnungen werden beim jeweiligen Auftreten erläutert.

1 Einleitung

1.1 Motivation

Viele natürliche und künstliche Werkstoffe weisen eine innere Struktur auf, die durch Einschlüsse, Fasern, Hohlräume, Risse usw. gebildet wird. Sind die Abmessungen der Materialkonstituierenden bzw. der Fehlstellen wesentlich kleiner als die Systemabmessungen, wird in dieser Arbeit von *mikroheterogenen Werkstoffen* gesprochen. Natürliche mikroheterogene Werkstoffe haben beispielsweise kristalline oder zelluläre Struktur. Typische Vertreter künstlicher mikroheterogener Werkstoffe sind *Verbundwerkstoffe*, zu denen faserverstärkte Materialien und Beton zählen.

Das Potential von Verbundwerkstoffen liegt in der Möglichkeit des Materialdesigns. Durch bewusste Auswahl und Anordnung unterschiedlicher Materialkomponenten können Werkstoffe mit speziellen, strukturangepassten Eigenschaften hergestellt werden. Dies betrifft sowohl mechanische Eigenschaften wie Steifigkeit, Festigkeit, Duktilität, Dämpfungseigenschaften und Gewicht als auch thermische oder chemische Eigenschaften wie Wärmedehnung, Korrosionsbeständigkeit und Dauerhaftigkeit. So haben Verbundwerkstoffe in den letzten Jahren für vielfältige technische Anwendungen im Maschinen- und Automobilbau, in der Luft- und Raumfahrtindustrie, im Bauwesen, in der Biomechanik und anderen Bereichen zunehmend an Bedeutung gewonnen.

Sowohl für zuverlässige Prognosen des Systemverhaltens bis zum Zustand des Versagens als auch zur Optimierung des Materialaufbaus werden mathematische Modelle benötigt, die die komplexen physikalischen Vorgänge dieser Werkstoffe erfassen können. Häufig sind nicht nur globale Größen, wie die Gesamtdeformation oder Traglast von Interesse, sondern auch die Analyse des Versagenshergangs. Das Materialversagen wird durch einzelne Mikrorisse in den Materialkomponenten oder durch Ablösen der Komponenten infolge lokaler Spannungskonzentrationen initiiert. Der Zusammenschluss und die Interaktion dieser Mikrodefekte führen schließlich zum globalen Systemversagen. Die Werkstoffheterogenitäten geben also eine untere Skala, die *Feinskala*, vor und das Materialverhalten und damit auch die Systemantwort wird durch physikalische Prozesse, die sich auf dieser unteren Skala abspielen, bestimmt. Das heißt, das Systemverhalten weist eine ausgesprochene *Zwei- bzw. Mehrskaleneigenschaft* auf. Unter Umständen ist es sinnvoll, neben der Skala der Materialkomponenten (*Feinskala*) und der Strukturskala (*Grobskala*) weitere Skalen einzuführen. Dies können Zwischenskalen sein, die typische Ensembles der Materialstruktur auflösen, oder die Atomskala, siehe Bild 1.1.

Die Mehrskaleneigenschaft bestimmt auch die Optimierung des Materialdesigns. Während die Designvariablen – das sind beispielsweise die mechanischen Eigenschaften der einzelnen Komponenten, ihr Volumenanteil und ihre Ausrichtung – die Mikrostruktur des Materials betreffen, sind die Entwurfsziele globale Tragwerkseigenschaften, wie Systemsteifigkeit, Traglast und Systemduktilität.

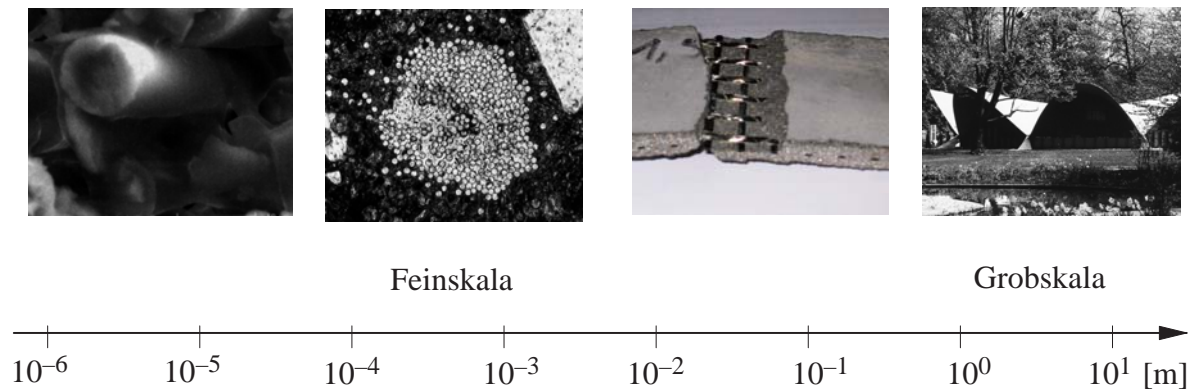


Bild 1.1: Skalenspektrum am Beispiel einer Struktur aus Textilbeton

Makroskopische Materialmodelle berücksichtigen die lokalen Vorgänge auf der Feinskala lediglich phänomenologisch in verschmierter Weise. Sie werden auf der Strukturskala, die in dieser Arbeit als *Grobskala* bezeichnet wird, formuliert und halten dadurch den Aufwand numerischer Analysen gering. Für einen Überblick über gängige makroskopische Materialmodelle für Faserverbundwerkstoffe sei auf Lemaitre & Chaboche (1990) oder Jirásek & Bazant (2002) verwiesen. Um den unterschiedlichen Versagensarten und dem richtungsabhängigen Verhalten Rechnung tragen zu können, sind makroskopische Konstitutivgesetze für Mehrphasenmaterialien recht komplex. Dadurch kann die Identifikation der Materialparameter – das können unter Umständen sehr viele sein – ein Problem darstellen. Für Analysen des lokalen Verhaltens auf der Feinskala sind diese Modelle ungeeignet und auch in der Prognose des globalen Systemverhaltens führen sie bei inelastischem Materialverhalten zwangsläufig zu gewissen Ungenauigkeiten.

Der anhaltende Fortschritt der Rechnerleistungen rechtfertigt jedoch die Entwicklung von genaueren Modellen, die die lokalen Vorgänge auf der Feinskala detailliert erfassen und auf der Grobskala im Rahmen eines *Zwei- oder Mehrskalensmodells* einbinden. Das Verhalten der einzelnen Komponenten kann dabei im Allgemeinen durch relativ einfache Konstitutivgesetze dargestellt werden.

Im Hinblick auf Speicherkapazitäten und Rechenzeiten ist es dagegen auch mittelfristig undenkbar, die Materialkomponenten in der gesamten Struktur direkt aufzulösen (*Feinskalenmodell*).

Liegen Fein- und Grobskala sehr weit auseinander, so können im Rahmen eines Zweiskalenmodells die grobskaligen Zustandsvariablen in einem repräsentativen Ausschnitt der Materialstruktur als konstant angesehen werden. Auf dieser Annahme, die als *Skalenseparation* bezeichnet wird, basiert der Skalenübergang von *Homogenisierungsverfahren*. Durch analytische (Eshelby (1957), Hashin & Shtrikmann (1962), Tanaka & Mori (1972)) bzw. numerische (Guedes & Kikuchi (1990), Miehe et al. (2002)) Untersuchungen des Verhaltens der heterogenen Materialstruktur werden *homogene Ersatzmodelle* entwickelt, die auf der Grobskala als Materialmodell dienen. Während entsprechende Verfahren für elastisches Materialverhalten ausgereift sind, ist die Homogenisierung inelastischen Materialverhaltens Gegenstand aktueller Forschungstätigkeit (Schröder (1996), Wriggers et al. (1998), Döbert (2001), Miehe & Koch (2002), Reese (2003), Zohdi (2004), Löhnert (2004), Bayreuther (2004), Gitman (2006)).

Im Prozess des Materialversagens werden die Deformationsgradienten in den Versagensbereichen so groß, dass die Annahme der Skalenseparation ihre Gültigkeit verliert. Es wird ein *volumenverbindender Skalenübergang* erforderlich, der die Feinskala in endlichen Teilbereichen der Grobskala auflöst. Historischer Ursprung der Mehrskalenmodelle mit volumenverbindendem Skalenübergang sind die sogenannten *global–local–Verfahren* (Mote (1971), Noor (1986)), die eine hierarchische Verfeinerung der numerischen Approximation in Bereichen besonderen Interesses vorsehen. Diese Idee wurde für unterschiedliche Probleme mit Mehrskalencharakteristik unter den Bezeichnungen *zooming technique* (Rank (1993)), *homogenized dirichlet projection method* (Zohdi et al. (1996)), *variational multiscale method* (Hughes et al. (1998)), *superposition based multiscale methods* (Fish & Shek (2000)) u.a. aufgegriffen. Diesen Methoden ist die hierarchische Anreicherung der grobskaligen Lösung durch feinskalige Anteile gemein, weshalb in der vorliegenden Arbeit die Bezeichnung *hierarchische Mehrskalenmethoden* verwendet wird. Sie unterscheiden sich bezüglich der Modelle und Diskretisierungsmethoden auf den Skalen, der Bedingung, in welchen Bereichen der Struktur die Grobskalenlösung anzureichern ist und dem Lösungsverfahren für das skalenkoppelnde Gleichungssystem. Der Einsatz effizienter Lösungsverfahren ist hier unerlässlich, da das hierarchische Verfeinern mit vielen zusätzlichen Freiheitsgraden verbunden ist. Es bieten sich insbesondere *nicht überlappende Gebietszerlegungsmethoden* (Ladevèze (2004)) und *Mehrgitterverfahren* (Fish & Belsky (1995 a, b), Bayreuther (2004)) an.

1.2 Zielsetzung

In dieser Arbeit sollen Konzepte und Algorithmen zur *effizienten* Systemanalyse von Verbundstrukturen aus *mikroheterogenen, entfestigenden* Werkstoffen unter Berücksichtigung der *Skaleninteraktion* entwickelt und bereitgestellt werden. Mit der Formulierung eines entsprechenden Mehrskalenmodells soll die Lücke zwischen Homogenisierungsmethoden, die auf Probleme mit Skalenseparation beschränkt sind, und Feinskalenberechnungen geschlossen werden. Grundlegende Anforderungen an das Mehrskalenmodell sind das *wirkliche Auflösen der feinen Skala* und eine Kommunikation zwischen den Skalen, die ein *effizientes Lösen der skalenkoppelnden Gleichungen* ermöglicht. Die Kombination dieser beiden Aspekte stellt die grundlegende Herausforderung für hierarchische Mehrskalenmethoden dar. Sie sind Thema aktueller Forschungstätigkeit (Farhat et al. (2003), Krause & Rank (2003), Ladevèze (2004), Gravemeier et al. (2004), Franca et al. (2005), Hund & Ramm (2006)) und der Ansatzpunkt der vorliegenden Arbeit. Neben den bereits genannten Zielen soll die Formulierung *flexibel* für den Einsatz unterschiedlicher mechanischer Modelle auf den betrachteten Skalen sein.

Ein entscheidendes Kriterium für den Nutzen einer Mehrskalenmethode ist ihre Effizienz, die von der algorithmischen Umsetzung des Modells abhängt. Aus diesem Grund liegt die Ausarbeitung eines effizienten und robusten Lösungsalgorithmus für das skalenkoppelnde Gleichungssystem im besonderen Interesse dieser Arbeit.

Eine vielversprechende Möglichkeit stellt das Entkoppeln des Feinskalenproblems durch Einführung eines lokalen Trägers für die feinskaligen Variablen im Sinne eines *subgrid scale models*

(Brezzi (2000)) dar. Zu dieser Thematik werden geeignete Ansätze aus der Literatur aufbereitet, der Problemstellung angepasst und weiterentwickelt sowie eigene Ideen vorgestellt. Im Vordergrund steht die Frage, inwiefern Lokalität der Feinskalenvariablen gefordert werden kann, ohne die Genauigkeit der Formulierung zu beeinträchtigen. Entsprechende Nebenbedingungen, mit denen das Postulat des lokalen Trägers verwirklicht werden kann, werden theoretisch und an geeigneten numerischen Tests analysiert sowie kritisch bewertet. Wichtige Kriterien sind hierbei neben der Effizienz auch die Genauigkeit und Robustheit der Methode. Im Hinblick auf die Effizienz der Methode ist es darüber hinaus wichtig, dass der Bereich der feinskaligen Auflösung räumlich begrenzt und adaptiv angepasst werden kann.

Die Anwendung des Mehrskalensmodells erfolgt exemplarisch für faserverstärkte Verbundwerkstoffe und homogene Reibungsmaterialien. Bei letzteren entsteht durch die lokale Zerrüttung des Materials während des Versagens ebenfalls eine heterogene Struktur im Material. Die Betrachtungen beschränken sich auf zwei Skalen: Die Feinskala, auf der die Materialheterogenitäten aufgelöst betrachtet werden, und die Grobskala, auf der die Struktur bzw. der Probekörper betrachtet wird. Die Formulierung eines Mehrskalensmodells kann rekursiv aus der des Zweiskalenmodells erfolgen. Auf beiden Skalen kommen kontinuumsmechanische Modelle zum Einsatz. Hierbei werden regularisierende Maßnahmen hinsichtlich der Materialentfestigung vorgesehen. Es wird jedoch auch die Möglichkeit aufgezeigt, diskontinuierliche Modelle auf der Feinskala einzubringen.

Da im Allgemeinen weder für das grobskalige noch für das feinskalige Verhalten analytische Lösungen zur Verfügung stehen, soll die Formulierung auf beiden Skalen durch *Finite Elemente* diskretisiert werden. Die numerische Umsetzung der Algorithmen erfolgt im Finite Element Programm *CCARAT*, dem Forschungsprogramm am Institut für Baustatik und Baudynamik der Universität Stuttgart. Numerische Ergebnisse werden durch den Vergleich mit Feinskalenlösungen bzw. experimentellen Ergebnissen verifiziert.

1.3 Gliederung

In *Kapitel 2* wird zunächst eine kurze Einführung in das mechanische Verhalten von Faserverbundwerkstoffen und ein Überblick über geeignete Modellierungs- und Diskretisierungsmöglichkeiten gegeben. Es folgt die Formulierung des zugehörigen Anfangsrandwertproblems in lokal kontinuumsmechanischem Kontext sowie die zugehörige schwache Form als Basis der numerischen Diskretisierung mit Finiten Elementen. Auf die im Rahmen dieser Arbeit verwendeten inelastischen Konstitutivgesetze und Regularisierungen des lokalen Kontinuumsmodells wird gesondert eingegangen.

Kapitel 3 gibt in einer Übersicht über Mehrskalensmodelle und effiziente Lösungsmethoden den aktuellen Stand der Wissenschaft in diesem Bereich wieder. Das Kapitel dokumentiert somit den Ausgangspunkt zur Formulierung eines hierarchischen Mehrskalensmodells und seiner algorithmischen Realisierung.

Das Grundgerüst hierarchischer Mehrskalensmodelle wird in *Kapitel 4* skizziert. Aufbauend auf einer konzeptionellen Einführung wird das Anfangsrandwertproblem für strukturmechanische

Probleme mit mikroheterogenen, inelastischen Werkstoffen im Mehrskalenkontext formuliert und mit Finiten Elementen diskretisiert. Das Kapitel schließt mit der algorithmischen Umsetzung und mit Aspekten der Implementierung.

In *Kapitel 5* wird die Annahme eines lokalen Trägers für die feinskaligen Variablen als Grundlage für eine effiziente Lösungsstrategie vorgestellt. Im Vordergrund steht die Frage nach adäquaten Nebenbedingungen an die feinskaligen Variablen. Hierfür werden unterschiedliche bestehende und neue Möglichkeiten aufgezeigt und umgesetzt.

Eine ausführliche Diskussion und ein systematischer Vergleich der vorgestellten Nebenbedingungen erfolgt in *Kapitel 6*. Anhand geeigneter numerischer Versuche findet eine vergleichende, kritische Bewertung statt.

Das in den Kapiteln 4 bis 6 vorgestellte Gesamtkonzept wird in *Kapitel 7* zur Simulation mehrerer praxisnaher Anwendungen eingesetzt. Hierbei wird das Potential des Zweiskalenmodells aufgezeigt und an Benchmarkproblemen verifiziert. Auch die Flexibilität des Zweiskalenmodells gegenüber unterschiedlichen mechanischen Modellen auf der feinen Skala wird demonstriert.

Eine Zusammenfassung der Arbeit und ein Ausblick auf mögliche Weiterentwicklungen der behandelten Themen folgen schließlich in *Kapitel 8*.

2 Modellierungsaspekte und Grundlagen

In diesem Kapitel werden die Grundlagen vorgestellt, die für die weiteren Betrachtungen und für die Formulierung eines Zweiskalenmodells für Strukturen aus Reibungsmaterialien und Faserverbundwerkstoffen notwendig sind. Nach einem kurzen Überblick über das mechanische Verhalten von Faserverbundwerkstoffen und entsprechende Modellierungsmöglichkeiten im Rahmen der Finiten Element Methode (Abschnitt 2.1) wird die hier verwendete, kontinuumsmechanische Formulierung vorgestellt. In Abschnitt 2.2 wird das Randwertproblem eingeführt, Abschnitt 2.3 befasst sich mit schädigungsbasierten Konstitutivgesetzen für unverstärkte und faserverstärkte Werkstoffe. Möglichkeiten zur Regularisierung des lokalen Kontinuumsmodells im Zustand der Materialentfestigung sind Thema des Abschnitts 2.4. Sämtliche Darstellungen in dieser Arbeit sind auf zweidimensionale, quasi-statische Betrachtungen bei kleinen Deformationen beschränkt.

2.1 Faserverbundwerkstoffe – Überblick

Faserverbundwerkstoffe werden aus Fasern, die in einen Grundwerkstoff (*Matrix*) eingebettet werden, hergestellt. Bei geeigneter Wahl und Anordnung der Einzelkomponenten entsteht so ein Material, das unter anderem bessere Steifigkeits-, Festigkeits- und Duktilitätseigenschaften als die Ausgangsmaterialien aufweist und dem speziellen Tragverhalten einer Struktur angepasst werden kann.

Unter mechanischer Beanspruchung übernehmen die Fasern einen Großteil der Lastabtragung. Voraussetzung hierfür ist nach Schultz (1996), dass sowohl die Festigkeit als auch die Steifigkeit der Fasern größer als die des Matrixmaterials sind und dass die Bruchdehnung des Matrixmaterials größer als die der Fasern ist. Die Matrix trägt in begrenztem Umfang mit, sie verhindert das Ausknicken der Fasern unter Druck und schützt die Fasern.

Die Schicht zwischen Fasern und Matrix wird als *Interface* bezeichnet. Dieses Interface leitet die Last von der Matrix in die Fasern ein und spielt somit eine bedeutende Rolle bei der Kraftübertragung im Verbundwerkstoff. Es handelt sich hierbei entweder um eine produktionsbedingte Übergangsschicht oder um eine gezielte Oberflächenbeschichtung bzw. Oberflächenstrukturierung der Fasern zur Verbesserung der Verbundeigenschaften. Untersuchungen hierzu wurden beispielsweise von Krüger & Reinhardt (2004) und Halbeisen & Schiff (2004) vorgenommen. Chawla (1998) und Herakovic (1998) geben einen Überblick über die Eigenschaften verschiedener Faser- und Matrixmaterialien sowie deren Kombinationen.

Die Fasern werden einzeln oder als Faserbündel mit zufälliger, uni- bzw. bidirektionaler Ausrichtung oder als Gewebe ins Matrixmaterial eingebracht. Der innere Verbund zwischen den Einzelfilamenten in den Faserbündeln kann nach Untersuchungen von Hegger et al. (2002) durch Aufbringen einer Beschichtung verbessert werden, so dass die inneren Fasern bei der Lastabtragung stärker aktiviert werden können. Strukturen aus faserverstärkten Werkstoffen werden häu-

fig als Laminat aus dünnwandigen, miteinander verklebten, unidirektional verstärkten Schichten aufgebaut. Im Rahmen dieser Arbeit werden ausschließlich unidirektional verstärkte Reibungsmaterialien betrachtet, siehe Abbildung 2.1.

2.1.1 Versagensmechanismen in Faserverbundwerkstoffen

Versagensvorgänge von Faserverbundwerkstoffen sind komplex und werden auf unterschiedlichen Skalen initiiert. Auf der Feinskala führen Fehlstellen und Defekte in der Gitterstruktur zu Spannungskonzentrationen, die das Lösen atomarer Bindungen und somit Mikrorisse oder Mikroporen verursachen. Die Akkumulation solcher Mikrodefekte führt zu lokalen Versagensmechanismen auf der Skala der Materialkomponenten. Dazu gehören das Reißen einer Faser bei Erreichen der Bruchdehnung unter Zug, Faserbeulen unter Druck, Ablösen der Faser von der Matrix, eventuell bis zum Herausziehen der Faser, sowie das Versagen der Matrix. Ein weiterer möglicher Versagensvorgang von Laminaten ist das gegenseitige Ablösen von Einzelschichten in ihrer Grenzfläche. Er wird als *Delamination* bezeichnet. Die Interaktion dieser verschiedenen lokalen Versagensmechanismen kann schließlich zum Systemversagen führen.

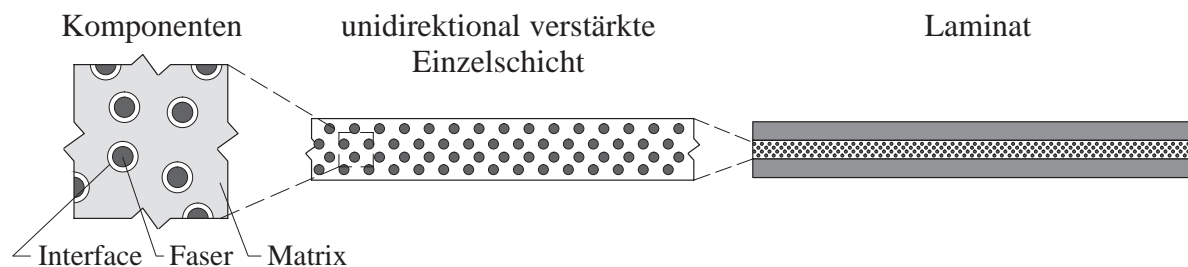


Bild 2.1: Aufbau von Faserverbundwerkstoffen

Der Versagensverlauf und die Versagensart einer Faserverbundstruktur wird durch vielfältige interagierende Einflüsse auf der Fein- und der Grobsskala gesteuert. Zu den Einflussfaktoren auf der Grobsskala gehören beispielsweise die geometrische Form und Lagerung der Struktur sowie die mechanische oder thermische Beanspruchung. Zu den Einflussfaktoren auf der Feinskala zählen die Eigenschaften der verwendeten Werkstoffe, wie der Faserdurchmesser, der Fasergehalt und die Orientierung der Fasern.

2.1.2 Modellierung des Versagens von Faserverbundwerkstoffen

Folgender Überblick befasst sich mit der Modellierung der Materialdegradation in Faserverbundwerkstoffen und der Abbildung von Materialgrenzen auf der Feinskala.

- **Materialdegradation – Risse**

Die Materialdegradation spröder Materialien wie Beton wird durch wachsende Mikroporen und Mikrorisse verursacht. Dieses Materialversagen kann entweder kontinuumsmechanisch oder diskret modelliert werden. Ein Überblick über diese beiden Möglichkeiten findet sich bei de Borst (2004).

Bei der *kontinuumsmechanischen Abbildung des Materialversagens* werden Risse phänomenologisch durch entfestigende Materialgesetze berücksichtigt (Bild 2.2 a). Hierbei werden regulisierende Maßnahmen erforderlich, siehe Abschnitt 2.4, da die klassische Kontinuumsmechanik das Abbilden von Rissen nicht beinhaltet, siehe beispielsweise Truesdell & Noll (1965).

Für eine *diskrete Rissabbildung* muss die kinematische Formulierung Verschiebungsdiskontinuitäten zulassen. Erste bruchmechanische Ansätze ermöglichten das Abbilden von Rissen an Rändern der Finiten Elemente, siehe beispielsweise Martha et al. (1993). Die Elemente an den Rissflanken werden bei diesem Vorgehen durch Verdoppeln der zugehörigen Knoten voneinander getrennt (Bild 2.2 b). Eine Durchdringung der Struktur an den so entstehenden zusätzlichen Rändern muss durch Nebenbedingungen unterbunden werden. Um dem Rissverlauf folgen zu können, ist entweder ein sehr feines Netz oder häufiges Neuvernetzen – und damit das Übertragen von Geschichtsvariablen vom alten auf das neue Netz – erforderlich.

Eine alternative Methode fügt zur Berücksichtigung der kohäsiven Lastübertragung sogenannte Interface-Elemente im Riss zwischen den angrenzenden Finiten Elementen ein. Dies ermöglicht die Berücksichtigung kohäsiver Kräfte nach der Rissentstehung, siehe z.B. Ortiz & Pandolfi (1999). Die meisten Umsetzungen sehen keine Neuvernetzung vor, so dass die Ergebnisse unter Umständen zur Netzabhängigkeit tendieren.

Finite Element Formulierungen, die Risse im Elementinneren abbilden können, gehören zu den neueren Entwicklungen. Die Notwendigkeit des Neuvernetzens bzw. des extrem feinen Vernetzens entfällt dadurch. Diese Formulierungen reichern die kinematischen Ansätze im Element um Sprungterme für die Verschiebungsdiskontinuität an. Beim *Strong Discontinuity Approach (SDA)* (Simo et al. (1993), Oliver (1996)) ist die Anreicherung eine Linearkombination der Einheitssprungfunktion mit Standardansatzfunktionen und dadurch elementweise begrenzt. Die mit der Anreicherung verbundenen zusätzlichen Freiheitsgrade können also auf Elementebene statisch kondensiert werden. Diese Art der Anreicherung führt jedoch zu einer Kopplung der Verzerrungen auf beiden Seiten des Risses innerhalb eines Elementes, was unter Umständen unphysikalische Deformationen erzwingt (Jirásek & Belytschko (2002)), siehe Bild 2.2 c. Weiterentwicklungen der Methode wurden unter anderem von Garikipati (1996) und Mosler (2002) betrieben. Garikipati fand eine Möglichkeit, die das künstliche Einführen einer finiten Rissbandbreite zur Beschränkung der Verzerrungen erübrigt. Mosler (2002) schlug vor, die zusätzlichen Freiheitsgrade bereits auf Integrationspunkzebene zu eliminieren. Das ermöglicht eine sehr einfache Umsetzung der Methode mit nur minimalen Eingriffen am Integrationspunkt in ein bestehendes Finite Element Programm.

Eine noch fortschrittlichere Methode zur Rissabbildung im Elementinneren durch Anreicherung der Kinematik ist die *eXtended Finite Element Method (XFEM)*, siehe Bild 2.2 d, die von Moës et al. (1999) eingeführt wurde. Basierend auf dem Konzept der *Partition of Unity* (Babuska & Melenk (1997)) wird die kinematische Anreicherung als Produkt von Standardansatzfunktionen und Anreicherungsfunktionen formuliert. Dadurch ist die Anreicherung knotenbasiert und nicht wie beim Strong Discontinuity Approach elementbasiert. Die Anreicherungsfunktionen können dem speziellen Problem angepasst werden – z.B. durch Verwendung der Einheitssprungfunktion für die kinematische Beschreibung eines Risses – und sorgen so für hohe Genauigkeit der Formu-

lierung. Die Standardansatzfunktionen begrenzen den Einflussradius der Anreicherung, so dass die dünne Besetzung der Systemmatrizen erhalten bleibt. Da die zusätzlichen Freiheitsgrade der kinematischen Anreicherung globale Freiheitsgrade sind, ist der Implementierungsaufwand relativ hoch: Mit dem Wachstum der Risse ändert sich die Anzahl der Freiheitsgrade und deren Konnektivität. Die geometrische Lage der Risse wurde von Ventura et al. (2002) erstmalig durch *vector-level-set*-Funktionen beschrieben. Level-set-Funktionen ermöglichen die Verfolgung von sich entwickelnden Oberflächen durch zeitlich veränderliche implizite Funktionen höherer Ordnung $\varphi(\mathbf{x}, t)$ (Osher & Sethian (1988)). Die zu beschreibende Oberfläche wird durch $\varphi(\mathbf{x}, t) = 0$ erfasst. Die level-set-Funktion kann beispielsweise die Abstandsfunktion von einem Punkt \mathbf{x} zur Rissoberfläche zum Zeitpunkt t sein und durch Finite Element Ansätze diskretisiert werden.

Für einen ausführlichen Überblick und Vergleich der hier nur kurz angeschnittenen Methoden zur Abbildung starker Diskontinuitäten im Rahmen der Finiten Element Methode sei auf Jirásek & Belytschko (2002) sowie Karihaloo & Xiao (2003) verwiesen.

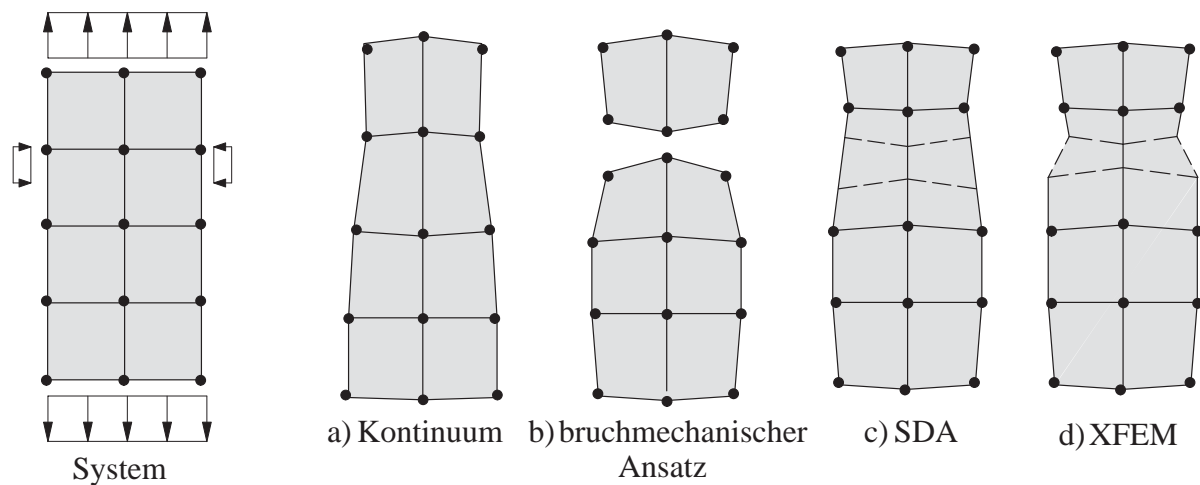


Bild 2.2: Zugprobe mit inhomogener Beanspruchung: Abbildung von Rissen

- **Materialgrenzen**

An Materialgrenzen, beispielsweise zwischen Fasern und Matrixmaterial, tritt aus Gleichgewichtsgründen und wegen unterschiedlicher Spannungs-Dehnungs-Beziehungen in den aneinandergrenzenden Werkstoffen ein Verzerrungssprung auf. Materialgrenzen können im Rahmen der Finiten Element Methode auf verschiedene Weisen abgebildet werden, die in Bild 2.3 gegenübergestellt werden.

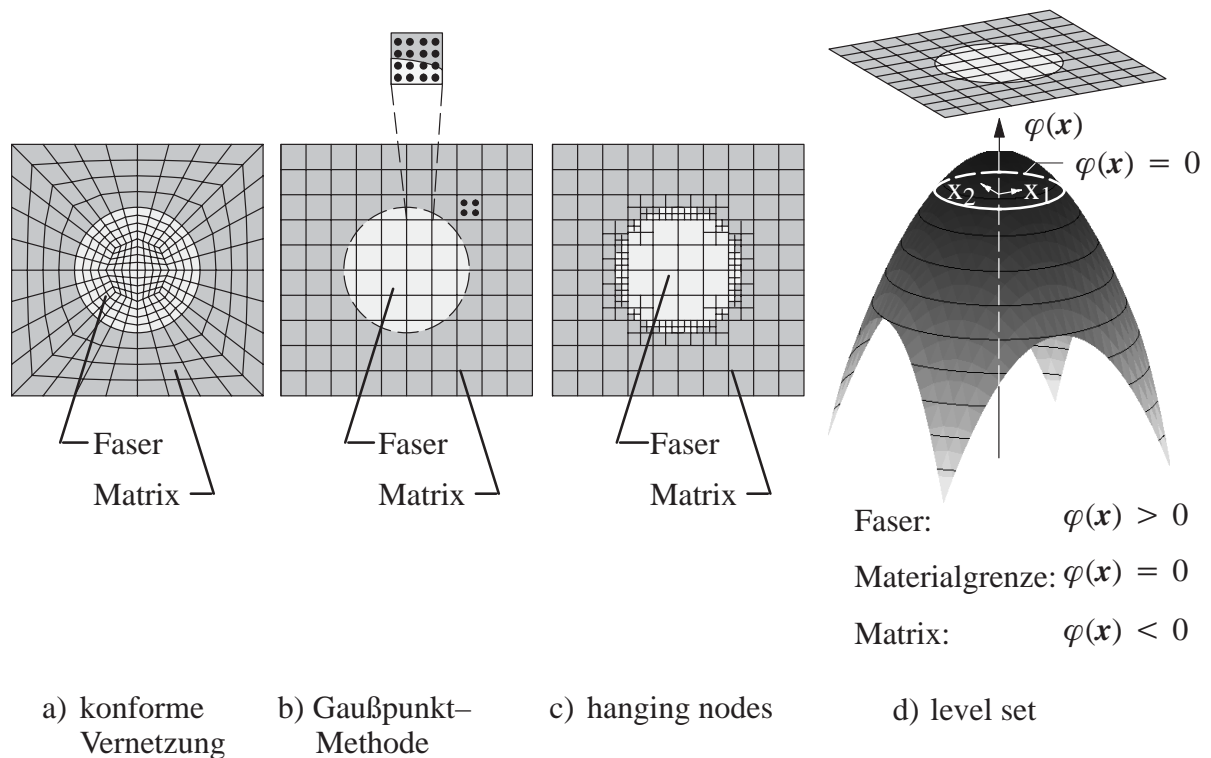


Bild 2.3: Abbildung von Materialgrenzen

Als genaueste, und im Hinblick auf die Rechenzeit auch sehr effiziente Möglichkeit, werden die Elemente geometrisch an den Materialgrenzen ausgerichtet (*konforme Vernetzung*), so dass jedem Element ein Material zugeordnet ist, siehe Bild 2.3 a. Nachteilig ist hierbei der große Aufwand für die Vernetzung der Materialstruktur, insbesondere bei dreidimensionalen Betrachtungen. Darüberhinaus kann eine solche Vernetzung zu entarteten Elementen führen, was nachteilig für die Genauigkeit sein kann.

Alternativ stellten Zohdi et al. (1998) die *Gaußpunkt-Methode* für die Diskretisierung mikroheterogener Werkstoffe vor, siehe Bild 2.3 b. Hierbei verlaufen die Elementränder willkürlich zu den Materialgrenzen, so dass ein einfaches und wenig aufwändiges Vernetzen möglich ist. Ein Element kann dabei mehrere Materialien beinhalten, jedem Integrationspunkt wird jedoch jeweils ein Material zugeordnet. Die Integrationsordnung wird in den Elementen, die eine Materialgrenze beinhalten, erhöht. Dies geschieht, um die Genauigkeitsverluste möglichst gering zu halten. Doch auch mit erhöhter Anzahl an Integrationspunkten ist das Verhalten von Elementen mit mehreren Materialien tendenziell zu steif, da die diskreten Verzerrungen die physikalisch vorhandenen Verzerrungsdiskontinuitäten an Materialgrenzen nicht wiedergeben. Ein weiterer Nachteil liegt in der erhöhten Rechenzeit durch die zusätzlich eingeführten Integrationspunkte.

Auf diesen Erfahrungen aufbauend verwendet Löhnert (2004) die *hanging-nodes-Methode*, siehe Bild 2.3 c. In der Umgebung von Materialgrenzen wird hierbei eine auf dem hanging-nodes-Konzept basierende Netzverfeinerung vorgenommen. Jedem Element wird genau ein Material zugewiesen. Die Geometrie der Materialkomponenten kann dadurch nur näherungsweise er-

fasst werden. In einem vergleichenden Beispiel zeigt Löhnert, dass die hanging-nodes-Methode effizienter und genauer als die Gaußpunkt-Methode ist.

Im Rahmen der eXtended Finite Element Method beschreiben Sukumar et al. (2001) die Lage von Materialgrenzen im Element sehr elegant durch level-set-Funktionen und ermöglichen so ebenfalls eine von den Materialgrenzen unabhängige Vernetzung, siehe Bild 2.3 d. Die auftretenden Verzerrungsdiskontinuitäten an den Materialgrenzen werden entsprechend dem XFEM-Konzept durch Anreicherung der kinematischen Ansätze berücksichtigt. Dieses Vorgehen verbindet hohe Modellgenauigkeit mit der Möglichkeit des einfachen Vernetzens; demgegenüber steht die aufwändige Umsetzung der Methode.

Im Rahmen des in dieser Arbeit vorgestellten Zweiskalenmodells für Strukturanalysen werden für die Anwendung auf Faserverbundwerkstoffe und homogene Reibungsmaterialien folgende Modelle zur Beschreibung der Materialdegradation und zur Abbildung von Materialgrenzen auf der Feinskala verwendet: In Anlehnung an Döbert (2001) wird die Entfestigung des Matrixmaterials und der Fasern jeweils durch ein regularisiertes kontinuumsmechanisches Schädigungsmodell beschrieben. Die Ablösung im Interface zwischen den Materialkomponenten wird durch den Ansatz *regularisierter starker Diskontinuitäten* erfasst. Dadurch ergibt sich die Notwendigkeit einer den Materialgrenzen angepassten (konformen) Diskretisierung. Entsprechende kontinuumsmechanische Modelle und deren Diskretisierung mit Finiten Elementen werden in den folgenden Abschnitten eingeführt. Da es sich um Modelle handelt, die in der Literatur gängig sind, werden die Darstellungen bewusst knapp gehalten.

2.2 Formulierung des Randwertproblems

Auf der Grobskala des Zweiskalenmodells basiert die Formulierung des Randwertproblems auf einem lokalen Kontinuumsmodell (Abschnitt 2.2.1). Auf der Feinskala kommt dieses lokale Kontinuumsmodell ebenfalls zum Einsatz, z.B. bei Anwendungen mit Faserverbundwerkstoffen für die Materialkomponenten Faser und Matrix. Im postkritischen Beanspruchungsbereich werden regularisierende Maßnahmen erforderlich, die in Abschnitt 2.4 bereitgestellt werden. Das Randwertproblem für die Materialkomponente Interface wird in Abschnitt 2.2.2 beschrieben.

2.2.1 Randwertproblem der lokalen Kontinuumsmechanik

Der betrachtete Körper mit physikalischen Eigenschaften wie Textur und Dichte kann als eine Menge von Punkten mit Platzierungen \boldsymbol{x} im Euklidischen Raum \mathbb{R}^3 beschrieben werden. Er nimmt das Gebiet Ω ein. Die Bewegung des Körpers wird durch das vektorwertige Verschiebungsfeld \boldsymbol{u} beschrieben. Die formändernde Deformation des Körpers wird durch den Verzerrungstensor $\boldsymbol{\varepsilon}$ quantifiziert. Unter der Annahme einer linearen Kinematik berechnen sich die Verzerrungen nach Gleichung (2.2) als symmetrischer Anteil des Verschiebungsgradienten, siehe Bild 2.4. Die Deformation weckt mechanische Beanspruchungen im Körper, die durch den Cauchy'schen Spannungstensor $\boldsymbol{\sigma}$ ausgedrückt werden. Die konstitutiven Gleichungen (2.3) be-

schreiben im Rahmen der *lokalen* Kontinuumsmechanik die Spannungen punktweise als Funktion der Verzerrungen und eines Satzes von internen Geschichtsvariablen zusammengefasst im Vektor \mathbf{q} . An einer Schnittfläche Γ_n des Körpers mit der Normalen \mathbf{n} wird der Spannungsvektor \mathbf{t} frei. Nach dem *Cauchy–Theorem* berechnet sich dieser Spannungsvektor durch

$$\mathbf{t} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} \quad \text{auf } \Gamma_n. \quad (2.1)$$

Die Spannungen erfüllen die lokale Form der Impulsbilanz (2.4), also das Gleichgewicht zwischen dem Vektor der internen Kräfte und dem Vektor der externen Volumenkräfte $\hat{\mathbf{b}}$ in jedem Punkt \mathbf{x} . Aufgrund der Drehimpulsbilanz ist das Spannungsfeld symmetrisch, so dass $\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}^T$ in Ω gilt. Der Rand $\partial\Omega$ des Körpers teilt sich in disjunkte Untermengen $\partial\Omega = \partial\Omega_u \cup \partial\Omega_t$ mit $\partial\Omega_u \cap \partial\Omega_t = \emptyset$, auf denen entweder Randbedingungen (RB) vom Dirichlet–Typ (Gleichung (2.5)) oder Randbedingungen vom Neumann–Typ (Gleichung (2.6)) vorgeschrieben sind. $\partial\Omega_u$ wird als Dirichletrand und $\partial\Omega_t$ als Neumannrand bezeichnet.

Die Gleichungen (2.2) – (2.6) beschreiben das punktweise Randwertproblem vollständig. Die Darstellung der Beziehungen im Tonti–Diagramm (Bild 2.4) geht auf Tonti (1972, 1976) zurück. Das Diagramm zeigt die Abhängigkeiten zwischen den Variablen \mathbf{u} , $\boldsymbol{\varepsilon}$ und $\boldsymbol{\sigma}$ durch die kinematische Gleichung, das Konstitutivgesetz und die Gleichgewichtsbeziehung in anschaulicher Weise.

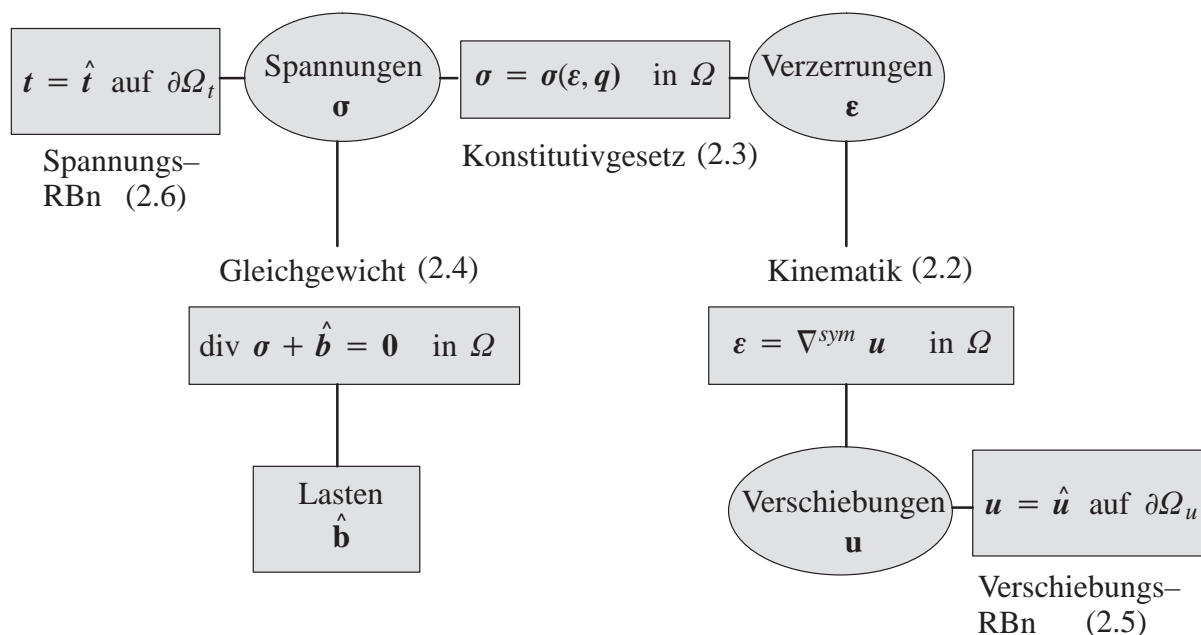


Bild 2.4: Tonti–Diagramm: Starke Form des Randwertproblems

• Schwache Form des Randwertproblems

Zur numerischen Lösung des Randwertproblems wird die in Bild 2.4 dargestellte starke Form des Randwertproblems in eine sogenannte *schwache Form* überführt. Für die hier zunächst verwendete *Verschiebungsformulierung* werden die Verschiebungen \mathbf{u} als Primärvariable gewählt.

Die Verzerrungen $\boldsymbol{\varepsilon}$ und Spannungen $\boldsymbol{\sigma}$ werden punktweise durch die kinematischen Gleichungen (2.2) und das Konstitutivgesetz (2.3) als Funktion der Verschiebungen \mathbf{u} beschrieben. Die schwache Form des Gleichgewichts ergibt sich durch Wichtung der Gleichgewichtsbeziehung (2.4) mit Testfunktionen $\delta \mathbf{u}$ und Integration über das Gebiet Ω .

$$\int_{\Omega} \delta \mathbf{u} \cdot \left[\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} + \hat{\mathbf{b}} \right] dV = 0 \quad + \text{ stat. RBn} \quad \forall \delta \mathbf{u} \quad (2.7)$$

Hiermit wird das Gleichgewicht nur noch im integralen Sinne über das Gebiet und nicht mehr punktweise erfüllt. Dieses Vorgehen wird als *Methode der gewichteten Residuen* bezeichnet. Die Anwendung des Gauß'schen Integralsatzes und das Einsetzen der punktweise erfüllten kinematischen und konstitutiven Beziehungen sowie der Randbedingungen ergibt folgende Darstellung der schwachen Form.

$$\underbrace{\int_{\Omega} \delta \boldsymbol{\varepsilon} : \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{q}) dV}_{\delta \Pi_{int}} - \underbrace{\int_{\Omega} \delta \mathbf{u} \cdot \hat{\mathbf{b}} dV - \int_{\partial \Omega_t} \delta \mathbf{u} \cdot \hat{\mathbf{t}} dA}_{\delta \Pi_{ext}} = 0 \quad \forall \delta \mathbf{u} \quad (2.8)$$

$$\delta \Pi = \delta \Pi_{int} - \delta \Pi_{ext} = 0 \quad \forall \delta \mathbf{u}$$

Interpretiert man die Testfunktionen $\delta \mathbf{u}$ als virtuelle Verschiebungen, so ist die Äquivalenz der schwachen Form des Gleichgewichts (2.8) und des *Prinzips der virtuellen Verschiebungen (PvV)* offensichtlich. Das PvV besagt, dass die virtuelle Arbeit $\delta \Pi$ als Differenz der virtuellen internen Arbeit $\delta \Pi_{int}$ und der virtuellen externen Arbeit $\delta \Pi_{ext}$ verschwindet. Einen Überblick über alternative Variationsmethoden als Grundlage gemischter oder hybrider Finite Element Formulierungen findet man beispielsweise bei Felippa (1994).

• Diskretisierung

In dieser Arbeit wird die *Methode der Finiten Elemente (FEM)* als numerisches Näherungsverfahren zur Simulation des Antwortverhaltens von Strukturen verwendet. Grundlegende Ideen der Finiten Element Methode gehen auf Argyris (1960), Clough (1965) und Zienkiewicz (1971) zurück. Zu den bekanntesten aktuellen Lehrbüchern gehören Zienkiewicz et al. (2005), Hughes (2000), Belytschko et al. (2000) und Wriggers (2001).

Die zugrunde liegende kontinuumsmechanische Gleichung in schwacher Form (Gleichung (2.8)) wird im Rahmen der Finiten Element Methode durch eine endliche Anzahl an Unbekannten diskretisiert. Dazu wird der zu analysierende Körper Ω in n_{ele} Elemente Ω_e unterteilt: $\Omega \approx \Omega^h = \bigcup_{e=1}^{n_{ele}} \Omega_e$. Der Verschiebungsverlauf im Element wird approximativ durch polynomiale Ansatzfunktionen N zwischen den Knotenverschiebungen \mathbf{d} interpoliert. Dieselbe Interpolation wird bei einer Bubnov–Galerkin–Diskretisierung für die Testfunktionen $\delta \mathbf{u}$ vorgenommen. Für die diskreten Gleichungen wird in dieser Arbeit die Matrix–Vektor–Notation verwendet. Die kinematische Beziehung (2.2) liefert die diskretisierten Verzerrungen und virtuellen Verzerrungen mit dem \mathbf{B} –Operator als symmetrischem Anteil des Gradienten der Ansatzfunktionen N .

$$\mathbf{u} \approx \mathbf{u}^h = N \mathbf{d}, \quad \delta \mathbf{u} \approx \delta \mathbf{u}^h = N \delta \mathbf{d}, \quad \boldsymbol{\varepsilon}^h = \mathbf{B} \mathbf{d}, \quad \delta \boldsymbol{\varepsilon}^h = \mathbf{B} \delta \mathbf{d} \quad (2.9)$$

Die diskrete Darstellung der schwachen Form des Gleichgewichts ergibt sich durch Einsetzen der Ansätze (2.9) in Gleichung (2.8).

$$\delta \Pi^h = \bigcup_{e=1}^{n_{ele}} \delta \mathbf{d}^T \left[\underbrace{\int_{\Omega^e} \mathbf{B}^T \boldsymbol{\sigma}^h(\mathbf{d}, \mathbf{q}) \, dV}_{\mathbf{f}_{int}(\mathbf{d})} - \underbrace{\int_{\Omega^e} \mathbf{N}^T \hat{\mathbf{b}} \, dV - \int_{\partial\Omega_i^e} \mathbf{N}^T \hat{\mathbf{t}} \, dA}_{-\mathbf{f}_{ext}} \right] = 0 \quad \forall \delta \mathbf{d} \quad (2.10)$$

Das Symbol \bigcup steht für den Zusammenbau (*Assemblierung*) der elementweisen internen und externen Kräfte $\mathbf{f}_{int}(\mathbf{d})$ und \mathbf{f}_{ext} zu den Systemkräften $\mathbf{F}_{int}(\mathbf{D})$ und \mathbf{F}_{ext} unter Berücksichtigung der kinematischen Verträglichkeit und des Knotengleichgewichts (*direkte Steifigkeitsmethode*). Der Index h , der zur Unterscheidung zwischen diskretisierten und kontinuierlichen Variablen dient, wird im Folgenden nicht notiert. Da Gleichung (2.10) für beliebige Testfunktionen erfüllt sein muss, erhalten wir folgendes im Allgemeinen nichtlineares Gleichungssystem zur Bestimmung der unbekanntenen Knotenverschiebungen \mathbf{D} des Systems.

$$\mathbf{F}_{int}(\mathbf{D}) - \mathbf{F}_{ext} = \mathbf{0} \quad (2.11)$$

Es drückt das Gleichgewicht zwischen den internen und externen Knotenkräften aus. Die Belastung wird schrittweise gesteigert, wobei das nichtlineare Gleichungssystem in jedem Lastschritt iterativ gelöst wird (*implizites Verfahren*). In dieser Arbeit wird dazu das weitverbreitete Newton–Raphson–Verfahren verwendet, das sich bei konsistenter Linearisierung der Gleichungen durch quadratische Konvergenz in der Nähe der Lösung auszeichnet.

- **Linearisierung**

Da in dieser Arbeit nichtlineares Materialverhalten untersucht wird, ist $\mathbf{F}_{int}(\mathbf{D})$ eine nichtlineare Funktion der Knotenverschiebungen \mathbf{D} . Die externen Kräfte \mathbf{F}_{ext} seien verschiebungsunabhängig. Zur iterativen Lösung des nichtlinearen Gleichungssystems (2.11) zu einem bestimmten Lastniveau \mathbf{F}_{ext} wird das Residuum $\mathbf{R} := \mathbf{F}_{int}(\mathbf{D}) - \mathbf{F}_{ext} = \mathbf{0}$ als Differenz der internen und externen Kräfte eingeführt. Dieses Residuum ist also eine Ungleichgewichtskraft, die im Laufe der Iteration zu Null werden soll. Im Rahmen einer Newton–Raphson–Iteration wird dieses Residuum in einer Taylorreihe um die unbekanntene Lösung des Iterationsschritts $i \rightarrow i + 1$ entwickelt. Terme höherer als erster Ordnung werden dabei vernachlässigt und es ergibt sich folgendes linearisiertes Residuum.

$$\text{lin } \mathbf{R}(\mathbf{D}^{i+1}) = \mathbf{R}(\mathbf{D}^i) + \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{D}} \Big|_{\mathbf{D}^i} \Delta \mathbf{D}^{i+1} = \mathbf{0} \quad \text{mit } \Delta \mathbf{D}^{i+1} = \mathbf{D}^{i+1} - \mathbf{D}^i \quad (2.12)$$

Mit der Definition der Tangentensteifigkeit $\mathbf{K}^i := \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{D}} \Big|_{\mathbf{D}^i} = \frac{\partial \mathbf{F}_{int}}{\partial \mathbf{D}} \Big|_{\mathbf{D}^i}$ erhält man das linearisierte Gleichungssystem

$$\mathbf{K}^i \Delta \mathbf{D}^{i+1} = \mathbf{F}_{int}(\mathbf{D}^i) - \mathbf{F}_{ext} \quad (2.13)$$

zur Berechnung der unbekanntenen residuellen Änderung der Systemfreiheitsgrade $\Delta \mathbf{D}^{i+1}$. Die Tangentensteifigkeit sowie das Residuum werden aus folgenden Elementbeiträgen assembliert

$$\begin{aligned}
\mathbf{K}^i &= \bigcup_{e=1}^{n_{ele}} \mathbf{k}_e^i = \bigcup_{e=1}^{n_{ele}} \frac{\partial \mathbf{f}_{int}^i}{\partial \mathbf{d}} \Big|_{\mathbf{d}^i} = \bigcup_{e=1}^{n_{ele}} \int_{\Omega_e} \mathbf{B}^T \mathbf{C}_{tan}^i \mathbf{B} \, dV \\
\mathbf{R}^i &= \mathbf{F}_{int}^i - \mathbf{F}_{ext} = \bigcup_{e=1}^{n_{ele}} [\mathbf{f}_{e,int}^i - \mathbf{f}_{e,ext}] = \bigcup_{e=1}^{n_{ele}} \left[\int_{\Omega_e} \mathbf{B}^T \boldsymbol{\sigma}^i \, dV - \mathbf{f}_{e,ext} \right]
\end{aligned} \tag{2.14}$$

mit der Materialtangente $\mathbf{C}_{tan}^i = \partial \boldsymbol{\sigma}^i / \partial \boldsymbol{\varepsilon}^i$. Die Spezifizierung der Werkstoffgleichungen gibt die Definition der Spannungen $\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{q})$ vor. Sie beeinflusst sowohl die internen Kräfte \mathbf{F}_{int}^i als auch die Tangentensteifigkeit \mathbf{K} über die Materialtangente. Die hier verwendeten Materialgesetze werden in Abschnitt 2.3 vorgestellt.

2.2.2 Randwertproblem im Interface

An Materialgrenzen zwischen Fasern und Matrixmaterial wird in dieser Arbeit ein Interface im Sinne einer *Kohäsivzone* etabliert. Es ermöglicht die Berücksichtigung von dort möglicherweise auftretenden Verschiebungsdiskontinuitäten und beschreibt den Zusammenhang zwischen Verschiebungssprung und Spannungsvektor an den Rissoberflächen. In der Literatur werden solche Kohäsivzonenmodelle auch in homogenen Materialien zur Beschreibung diskreter Risse verwendet (Larsson et al. (1993), Miehe & Schröder (1994), Ortiz & Pandolfi (1999), Sigmund (2002)) oder zur Beschreibung der Delamination in Laminaten, siehe Allix & Ladevèze (1992) und Allix (2002).

Das Interface nimmt im n -dimensionalen Körper Ω das $(n - 1)$ -dimensionale Gebiet Γ^{IF} ein. Die kinematische Variable im Interface ist der Verschiebungssprung $[\mathbf{u}] = \mathbf{u}^o - \mathbf{u}^u$ zwischen den Verschiebungen auf der "oberen" und "unteren" Seite des Interfaces, \mathbf{u}^o und \mathbf{u}^u , siehe Bild 2.5. Zur Regularisierung der Formulierung wird dem Interface eine endliche Dicke t als Materialparameter zugewiesen. Das zugehörige fiktive Gebiet Ω^{IF} wird durch parallele Flächen, jeweils im Abstand $t/2$ zur Oberfläche Γ^{IF} , begrenzt. Es wird ein linearer Verschiebungsverlauf über die Interface-Dicke angenommen, so dass die Verzerrung $\boldsymbol{\varepsilon}$ konstant über die Interface-Dicke und endlich ist. Die derart regularisierte Verzerrung berechnet sich zu

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \nabla^{sym} \mathbf{u} = \frac{1}{t} \, sym \left([\mathbf{u}] \otimes \mathbf{n} \right), \tag{2.15}$$

wobei \mathbf{n} die Einheitsnormale zum Interface darstellt.

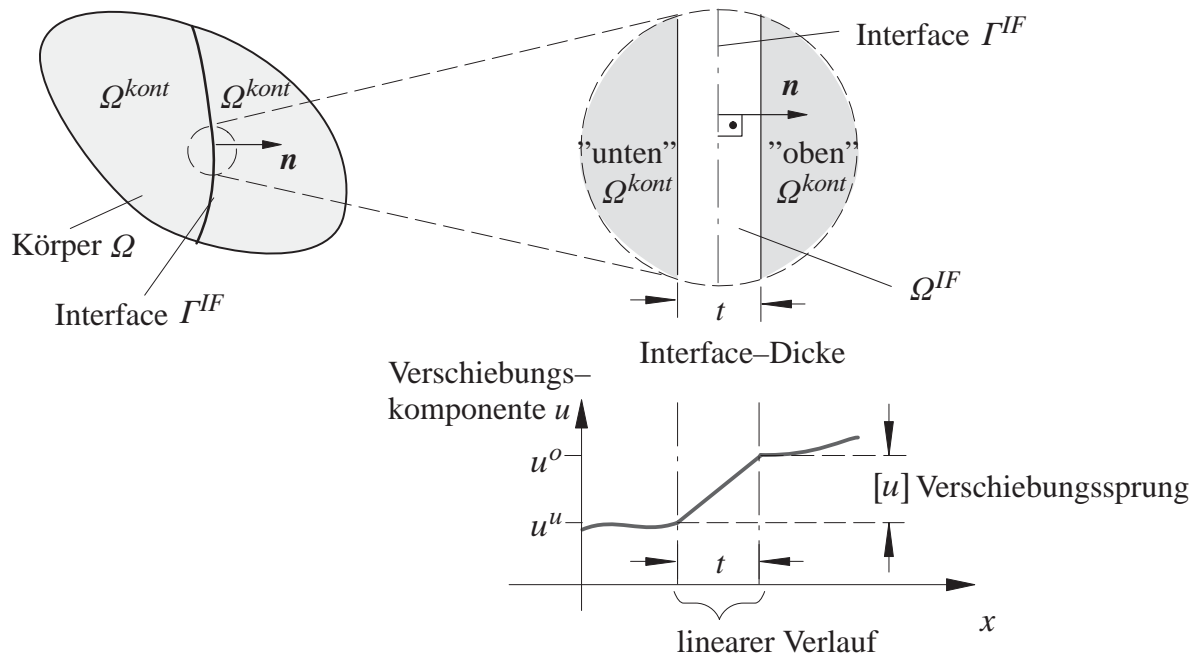


Bild 2.5: Verschiebungsansatz im Interface

Der Zusammenhang zwischen dem kohäsiven Spannungsvektor $\mathbf{t} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}$ im Interface und dem arbeitskonjugierten Verschiebungssprung $[u]$ wird durch ein Werkstoffgesetz der Form

$$\mathbf{t} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{t}([u], \mathbf{q}) \quad (2.16)$$

beschrieben, das die ausgeprägte Richtungsabhängigkeit des Verhaltens in Normalen- und Tangentialrichtung berücksichtigt, siehe Abschnitt 2.3.2.

- **Schwache Form des Randwertproblems mit Verschiebungsdiskontinuität**

Die kontinuierlichen Beiträge des Gebiets $\Omega^{kont} = \Omega \setminus \Gamma^{IF}$ zur schwachen Form des Gleichgewichts (2.8) werden durch den Beitrag $\delta\Pi_{int}^{IF}$ des Interfaces Γ^{IF} ergänzt, siehe Bild 2.13.

$$\underbrace{\int_{\Omega^{kont}} \delta \boldsymbol{\varepsilon} : \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{q}) \, dV}_{\delta\Pi_{int}^{kont}} + \underbrace{\int_{\Gamma^{IF}} [\delta \mathbf{u}] \cdot \mathbf{t} \, dA}_{\delta\Pi_{int}^{IF}} - \underbrace{\int_{\Omega^{kont}} \delta \mathbf{u} \cdot \hat{\mathbf{b}} \, dV - \int_{\partial\Omega_t} \delta \mathbf{u} \cdot \hat{\mathbf{t}} \, dA}_{\delta\Pi_{ext}} = 0 \quad \forall \delta \mathbf{u} \quad (2.17)$$

$$\delta\Pi = \delta\Pi_{int}^{kont} + \delta\Pi_{int}^{IF} - \delta\Pi_{ext} = 0 \quad \forall \delta \mathbf{u}$$

- **Diskretisierung des Interfaces**

Die Darstellung beschränkt sich auf den zweidimensionalen Fall, also auf ein eindimensionales Interface. Für die diskrete Formulierung wird die Matrix-Vektor-Notation verwendet. In Bild 2.6 ist exemplarisch ein Interface-Element mit linearen Verschiebungsansätzen dargestellt.

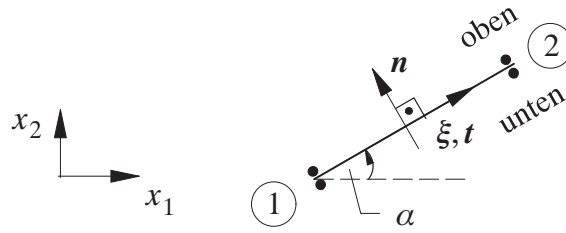


Bild 2.6: Interface-Element mit linearen Verschiebungsansätzen

Der Verschiebungssprung $[\mathbf{u}] = [[u_n], [u_t]]^T$ berechnet sich als Differenz der Verschiebungen auf der "oberen" – das ist die Seite der positiven Normalen – und "unteren" Seite des Interfaces

$$[\mathbf{u}] = \mathbf{L} \mathbf{u} \quad (2.18)$$

mit der Sprungoperatormatrix \mathbf{L} und dem Verschiebungsvektor \mathbf{u} .

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \end{bmatrix} \quad \text{und} \quad \mathbf{u} = [u_n^u \ u_n^o \ u_t^u \ u_t^o]^T \quad (2.19)$$

Die Koordinaten \mathbf{x} und Verschiebungen \mathbf{u} auf beiden Seiten des Interfaces werden mit Ansatzfunktionen N zwischen den Knotenwerten interpoliert. Der diskretisierte Verschiebungssprung berechnet sich demzufolge als

$$[\mathbf{u}] \approx [\mathbf{u}^h] = \mathbf{A} \mathbf{L} \mathbf{N} \mathbf{d}, \quad [\delta \mathbf{u}] \approx [\delta \mathbf{u}^h] = \mathbf{A} \mathbf{L} \mathbf{N} \delta \mathbf{d}. \quad (2.20)$$

Die Elementfreiheitsgrade \mathbf{d} sind konsistent zum umgebenden Kontinuum im globalen Koordinatensystem orientiert. Die dadurch notwendige Transformation in Richtung der Interface-Orientierung am betrachteten Materialpunkt wird durch die Transformationsmatrix \mathbf{A} vorgenommen.

$$\mathbf{A} := \begin{bmatrix} \cos \alpha(\mathbf{x}) & \sin \alpha(\mathbf{x}) \\ -\sin \alpha(\mathbf{x}) & \cos \alpha(\mathbf{x}) \end{bmatrix} \quad (2.21)$$

Der diskretisierte Beitrag der n_{ele}^{IF} Interface-Elemente zur schwachen Form ist

$$\delta \Pi_{int}^{IFh} = \bigcup_{e=1}^{n_{ele}^{IF}} \delta \mathbf{d}^T \underbrace{\int_{\Gamma_e^{IF}} (\mathbf{A} \mathbf{L} \mathbf{N})^T \mathbf{t} \, dA}_{\mathbf{f}_{int}^{IF}(\mathbf{d})} \quad \forall \delta \mathbf{d}. \quad (2.22)$$

- **Linearisierung der Interface-Terme**

Die Systemsteifigkeitsmatrix \mathbf{K}^i und die internen Kräfte \mathbf{F}_{int}^i des linearisierten Gleichungssystems (2.13) werden durch folgende Interface-Elementbeiträge ergänzt:

$$\mathbf{k}^{IF, i} = \frac{\partial f_{int}^{IF}}{\partial \mathbf{d}^i} \Big|_{\mathbf{d}^i} = \int_{\Gamma_e^{IF}} (\mathbf{A} \ \mathbf{L} \ \mathbf{N})^T \mathbf{D}_{\tan}^i (\mathbf{A} \ \mathbf{L} \ \mathbf{N}) \, dA \quad (2.23)$$

$$\mathbf{f}_{int}^{IF, i} = \int_{\Gamma_e^{IF}} (\mathbf{A} \ \mathbf{L} \ \mathbf{N})^T \mathbf{t}^i \, dA .$$

2.3 Verwendete Konstitutivgesetze

Im folgenden Abschnitt werden die in dieser Arbeit verwendeten schädigungs-basierten Materialmodelle beschrieben. Damit werden das Konstitutivgesetz (Gleichung (2.3)) für die Materialkomponenten Faser und Matrix und das Konstitutivgesetz im Interface (Gleichung (2.16)) spezifiziert.

Ein lokales, kontinuumsmechanisch formuliertes Stoffgesetz $\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{q})$ beschreibt den punktweise definierten Zusammenhang zwischen den Spannungen $\boldsymbol{\sigma}$ und den Verzerrungen $\boldsymbol{\varepsilon}$ unter Berücksichtigung von Geschichtsvariablen \mathbf{q} . Grundlage des elastizitätsbasierten Schädigungsmodells, das in Abschnitt 2.3.1 beschrieben wird, ist die linear-elastische Spannungs-Dehnungsbeziehung

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C}^{el} : \boldsymbol{\varepsilon} \quad \text{mit} \quad \mathbf{C}^{el} = \lambda \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} + 2\mu \mathbf{I} \quad (2.24)$$

mit dem vierstufigen Einheitstensor \mathbf{I} und den Lamékonstanten $\lambda = E\nu/((1 + \nu)(1 - 2\nu))$ und $\mu = E/(2(1 + \nu))$. E ist hierbei der E-Modul und ν bezeichnet die Querdehnzahl. Thermische Einflüsse und viskose Effekte sowie irreversible Verzerrungen werden in dieser Arbeit nicht in Betracht gezogen.

2.3.1 Isotrope Elasto-Schädigung

Unter Schädigung versteht man den irreversiblen Prozess der progressiven Schwächung eines Materials durch wachsende Mikrorisse und Mikroporen unter Beanspruchung. Diese werden durch Spannungskonzentrationen in der Nähe von Mikrodefekten und inneren Grenzschichten oder durch das Aufreißen atomarer Verbindungen verursacht. Die Schädigungsmechanik beschreibt diesen Vorgang phänomenologisch als kontinuierliche Degradation der elastischen Eigenschaften. Sie geht auf Kachanov (1958) zurück, der als erster eine Geschichtsvariable zur Abminderung der elastischen Eigenschaften einführte. Für einen Überblick über die historische Entwicklung der Schädigungsmechanik sei auf Lemaitre (2002) und Kuhl (2000) verwiesen. Eine umfassende Übersicht über die Variationsbreite der Schädigungsmechanik für unterschiedliche Schädigungsmechanismen geben beispielsweise Lemaitre (1996), Lemaitre & Chaboche (1990), sowie Krajcinovic (1996).

Das in dieser Arbeit verwendete Schädigungsmodell ist isotrop und elastizitätsbasiert. Während ein allgemeines isotropes Schädigungsmodell beide elastischen Materialkonstanten unabhängig voneinander abmindert, siehe beispielsweise Ju (1991) oder Leukart (2005), wird hier der Son-

derfall eines *Ein-Parameter-Schädigungsmodells* betrachtet. Die Schädigungsentwicklung ist verzerrungskontrolliert, so dass das Werkstoffgesetz in einem verschiebungsformulierten Finiten Element Modell seinen expliziten Charakter aufweist: Am Materialpunkt können zu einem vorgegebenen Verzerrungszustand unter Kenntnis der Belastungsgeschichte die Spannungen und die Materialtangente direkt eindeutig bestimmt werden.

Die Geschichtsvariable des Ein-Parameter-Schädigungsmodells ist die Schädigungsvariable D . Sie wird in der Literatur als Verhältnis von geschädigter Fläche A_d zur Ausgangsfläche A_0 des repräsentativen Volumens eingeführt. Es ist $D = A_d/A_0$ mit $0 \leq D \leq 1$. Dabei kennzeichnet $D = 0$ einen ungeschädigten Zustand und $D = 1$ einen vollständig geschädigten Zustand. Die Spannungs-Dehnungs-Beziehung der verzerrungsbasierten Formulierung folgt aus dem *Konzept der effektiven Spannungen* (Rabotnov (1963)) in Verbindung mit der *Hypothese der Verzerrungsäquivalenz* (Lemaitre (1996)). Das in Bild 2.7 dargestellte Konzept der effektiven Spannungen besagt, dass sich die *effektiven Spannungen* $\tilde{\sigma}$ aus den auf die Fläche A_0 wirkenden *nominalen Spannungen* σ bezogen auf die infolge Schädigung abgeminderte Fläche $A_0 - A_d$ ergeben:

$$\tilde{\sigma} (A_0 - A_d) = \sigma A_0 \quad \rightarrow \quad \tilde{\sigma} = \frac{1}{1 - D} \sigma . \quad (2.25)$$

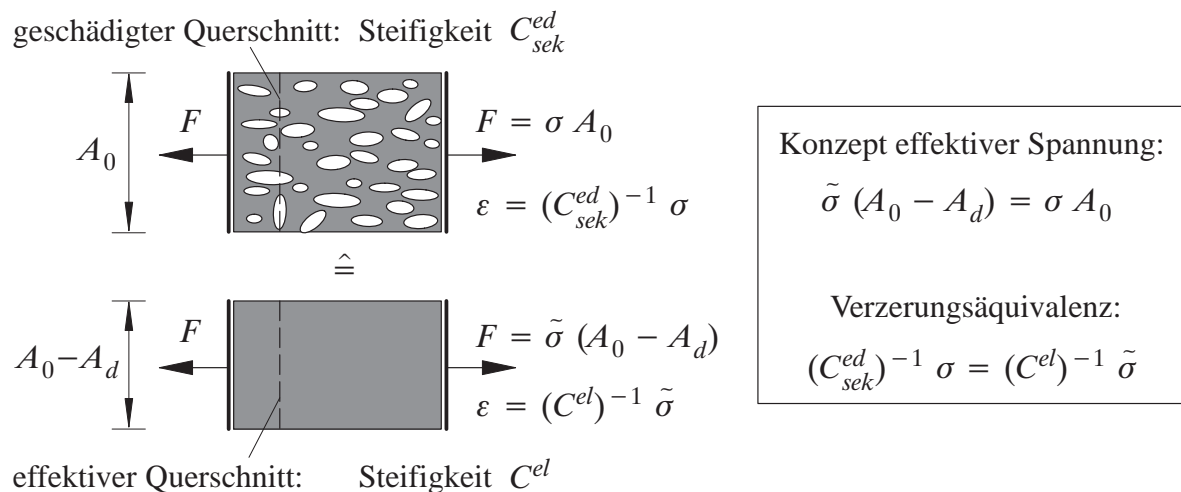


Bild 2.7: Konzept der effektiven Spannungen, Hypothese der Verzerrungsäquivalenz

Nach der Hypothese der Verzerrungsäquivalenz (Bild 2.7) sind die Verzerrungen assoziiert mit dem geschädigten Zustand gleich den Verzerrungen des ungeschädigten Materials unter den nominalen Spannungen.

$$\varepsilon = (C_{sek}^{ed})^{-1} : \sigma = (C^{el})^{-1} : \tilde{\sigma} \quad (2.26)$$

Aus den Gleichungen (2.25) und (2.26) ergibt sich die Spannungs-Dehnungs-Beziehung des Ein-Parameter-Schädigungsmodells.

$$\sigma = (1 - D) C^{el} : \varepsilon \quad \text{mit} \quad C_{sek}^{ed} = (1 - D) C^{el} \quad (2.27)$$

Ein verzerrungsbasiertes Schädigungskriterium $\phi(\varepsilon_v, \kappa)$ überprüft, ob der momentane Verzerrungszustand (Zeitpunkt $t = \tau$) die im Beanspruchungsverlauf ($0 \leq t \leq \tau$) maximale eingeprägte äquivalente Verzerrung $\kappa = \max_{0 \leq t \leq \tau}(\varepsilon_v(t), \kappa_0)$ erreicht. Der momentane Verzerrungszustand wird durch das skalarwertige äquivalente Verzerrungsmaß $\varepsilon_v(\varepsilon)$ repräsentiert und κ_0 ist der Schädigungsschwellenwert. Wird $\varepsilon_v(\varepsilon) = \kappa$ erreicht, nimmt die Schädigung zu ($\dot{D} > 0$), ansonsten stagniert die Schädigung ($\dot{D} = 0$), siehe Gleichung (2.28).

$$\phi(\varepsilon_v, \kappa) = \varepsilon_v(\varepsilon) - \kappa \begin{cases} = 0 & \text{Schädigungsfortschritt} \\ < 0 & \text{kein Schädigungsfortschritt} \end{cases} \quad (2.28)$$

Das Schädigungskriterium wird durch die Kuhn–Tucker Be- und Entlastungsbedingungen

$$\phi \leq 0 \quad \dot{\kappa} \geq 0 \quad \phi \dot{\kappa} = 0 \quad (2.29)$$

sowie die Konsistenzbedingung $\dot{\phi} \dot{\kappa} = 0$ vervollständigt.

Für einen einaxialen Versuch ($\varepsilon_v(\varepsilon) = \varepsilon$) ist das Spannungs–Dehnungs–Verhalten bei Elasto–Schädigung in Bild 2.8 dargestellt. Das Material verhält sich elastisch, bis die Verzerrung den Schädigungsschwellenwert κ_0 erreicht (Phase 1). Bei weiterer Steigerung der Verzerrung entfestigt das Material (Phase 2), es ist $\phi = 0$. In einer Ent- und Wiederbelastungsschleife (Phase 3) zeigt sich die eingeprägte Degradation der Steifigkeit. Bei vollständiger Entlastung verbleiben keine irreversiblen Dehnungen. Die Schädigung stagniert ($\phi < 0$) und nimmt erst wieder beim Überschreiten der maximal eingeprägten Verzerrung zu (Phase 4).

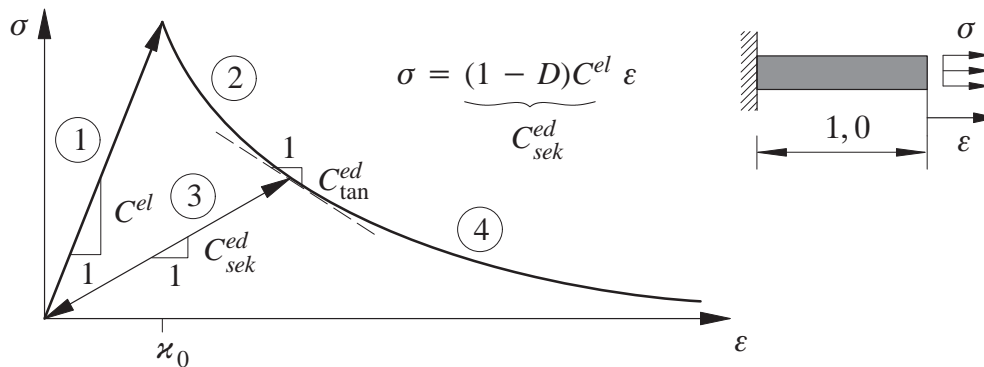


Bild 2.8: Eindimensionale Spannungs–Dehnungsbeziehung

Die Beziehung zwischen den Spannungs– und Dehnraten

$$\dot{\sigma} = (1 - D)C^{el} : \dot{\varepsilon} - \left(C^{el} : \varepsilon \otimes \frac{\partial D}{\partial \varepsilon} \right) : \dot{\varepsilon} = C^{ed}_{tan} : \dot{\varepsilon} \quad (2.30)$$

bestimmt die Materialtangente für das geschädigte Material C^{ed}_{tan} . Es ist

$$C^{ed}_{tan} = C^{ed}_{sek} - \tilde{\sigma} \otimes \frac{\partial D}{\partial \varepsilon}. \quad (2.31)$$

Der Einfluss der Verzerrungskomponenten auf die äquivalente Verzerrung $\varepsilon_v(\boldsymbol{\varepsilon})$ ist werkstoffspezifisch. Für eine vereinfachte Beschreibung des Verhaltens von Beton eignet sich das numerisch sehr stabile Schädigungsmodell nach de Vree et al. (1995)

$$\varepsilon_v(\boldsymbol{\varepsilon}) = \frac{k-1}{2k(1-2\nu)} I_1 + \frac{1}{2k} \sqrt{\frac{(k-1)^2}{(1-2\nu)^2} I_1^2 - \frac{12k}{(1+\nu)^2} J_2} . \quad (2.32)$$

Hierbei ist $I_1 = \text{tr } \boldsymbol{\varepsilon}$ die erste Hauptinvariante und $J_2 = 1/6 (\text{tr } \boldsymbol{\varepsilon})^2 - 1/2 \boldsymbol{\varepsilon} : \boldsymbol{\varepsilon}$ die zweite Grundinvariante des Verzerrungstensors. Der Materialparameter $k \geq 1$ ermöglicht eine unterschiedliche Wichtung von Zug und Druck. Dieses Schädigungsgesetz zählt zu den nichtassoziierten Modellen, da die Normalenrichtung auf die Schädigungsfläche $\partial D / \partial \boldsymbol{\varepsilon}$ nicht parallel zur effektiven Spannung $\tilde{\boldsymbol{\sigma}}$ ist. Dadurch ist die Materialtangente unsymmetrisch. Weitere Schädigungsmodelle und deren graphische Darstellung im Hauptverzerrungsraum werden beispielsweise bei Peerlings (1999) beschrieben.

Auch die Schädigungsevolution ist materialspezifisch zu definieren. Für Beton wurde beispielsweise von Mazars & Pijaudier-Cabot (1989) ein exponentielles Entfestigungsgesetz eingeführt.

$$D(\kappa) = \begin{cases} 0 & \text{für } \kappa \leq \kappa_0 \\ 1 - \frac{\kappa_0}{\kappa} (1 - \alpha + \alpha e^{-\beta(\kappa - \kappa_0)}) & \text{für } \kappa > \kappa_0 \end{cases} \quad (2.33)$$

Die Schädigung nähert sich asymptotisch dem Wert $D \rightarrow 1$ für $\kappa \rightarrow \infty$. Alternativ wird in dieser Arbeit das *modified power law* nach Geers (1997) verwendet. Vollständige Entfestigung ($D = 1$) wird bei diesem Entfestigungsgesetz für die Grenzdehnung $\kappa = \kappa_u$ erreicht.

$$D(\kappa) = \begin{cases} 0 & \text{für } \kappa \leq \kappa_0 \\ 1 - \left(\frac{\kappa_0}{\kappa}\right)^\beta \left(\frac{\kappa_u - \kappa}{\kappa_u - \kappa_0}\right)^\alpha & \text{für } \kappa_0 < \kappa < \kappa_u \\ 1 & \text{für } \kappa \geq \kappa_u \end{cases} \quad (2.34)$$

Der Materialparameter β regelt die Rate der Schädigungszunahme und α steuert den Grenzwert der Entfestigung für $\varepsilon_v \rightarrow \infty$ bei exponentieller Schädigungsevolution bzw. in der Nähe von κ_u bei Entfestigung nach Gleichung (2.34). Für entfestigendes Materialverhalten ist bei exponentieller Schädigungsevolution $0 < \alpha \leq 1$ und $\beta > 0$ und für das *modified power law* gilt $\alpha > 0$ und $\beta \geq 1$.

2.3.2 Schädigungsbasiertes Konstitutivgesetz im Interface

Das Konstitutivgesetz im Interface beschreibt den Ablösungsprozess zwischen Fasern und Matrixmaterial in einem Faserverbundwerkstoff. Die Entfestigung des Interfaces wird hier schädigungsmechanisch beschrieben. Unter Normaldruck können auch nach vollständiger Dekohäsion noch Tangentialkräfte (Richtungen \boldsymbol{t}_1 und \boldsymbol{t}_2) im Interface durch Reibung übertragen werden, siehe Bild 2.9. Dieser Effekt ist vor allem beim Herausziehen von Fasern aus dem Matrixmate-

rial, d.h. in Faserlängsrichtung, von Interesse und kann durch ein Plastizitätsmodell erfasst werden, siehe Michalowski & Mroz (1978) und Döbert et al. (2000). Für die Untersuchungen in dieser Arbeit mit zweidimensionalen Betrachtungen quer zur Faser wird er jedoch nicht berücksichtigt.

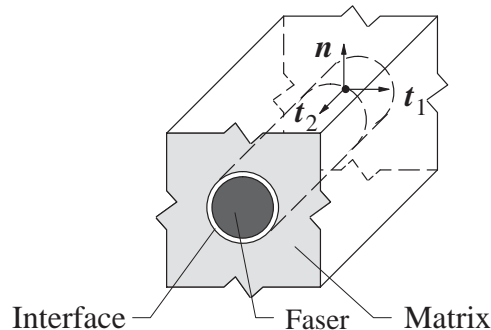


Bild 2.9: Lokales Koordinatensystem im Interface

Aus den linear-elastischen Beziehungen des Kontinuums (Gleichung (2.24)) unter Berücksichtigung des Cauchy-Theorems (2.1) und der kinematischen Gleichung (2.15) folgt das linear-elastische Werkstoffgesetz im Interface Γ^{IF} .

$$\mathbf{t} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = (\mathbf{C}^{el} : \boldsymbol{\varepsilon}) \cdot \mathbf{n} = \left(\mathbf{C}^{el} : \frac{1}{t} \text{sym}([\mathbf{u}] \otimes \mathbf{n}) \right) \cdot \mathbf{n} = \frac{1}{t} \underbrace{\mathbf{n} \cdot \mathbf{C}^{el} \cdot \mathbf{n}}_{\mathbf{Q}^{el}} \cdot [\mathbf{u}] \quad (2.35)$$

Der akustische Tensor $\mathbf{Q} := \mathbf{n} \cdot \mathbf{C} \cdot \mathbf{n}$ stellt den Zusammenhang zwischen Spannungsvektor \mathbf{t} und Verschiebungssprung $[\mathbf{u}]$ her. Wird der akustische Tensor singular, zeigt das den Verlust der Elliptizität und die Entstehung einer starken Diskontinuität an, siehe de Borst et al. (1993), Ottosen & Runesson (1991). Gleichung (2.35) lautet in Komponentenschreibweise:

$$\begin{bmatrix} t_n \\ t_{t_1} \\ t_{t_2} \end{bmatrix} = \frac{1}{t} \begin{bmatrix} \frac{(1-\nu)E}{(1+\nu)(1-2\nu)} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{(1-2\nu)E}{2(1+\nu)(1-2\nu)} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{(1-2\nu)E}{2(1+\nu)(1-2\nu)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} [u_n] \\ [u_{t_1}] \\ [u_{t_2}] \end{bmatrix}. \quad (2.36)$$

Diese Darstellung verdeutlicht, dass sich die Komponenten des Spannungsvektors \mathbf{t} aus der Normalprojektion des Spannungstensors $\boldsymbol{\sigma}$ auf die Interface-Fläche Γ^{IF} berechnen. Die Materialtangente ist entkoppelt, so dass die Komponenten des Spannungsvektors jeweils nur von der entsprechenden Komponente des Verschiebungssprungs $[\mathbf{u}]$ abhängig sind. Die Materialsteifigkeit in Normalenrichtung ist dabei $Q_n^{el} = (1-\nu)E/((1+\nu)(1-2\nu))$ und in Tangentialrichtung jeweils $Q_t^{el} = (1-2\nu)E/(2(1+\nu)(1-2\nu))$.

Auf dieser elastischen Grundlage baut das Schädigungsmodell des Interfaces auf. Wie von Döbert (2001) vorgeschlagen, werden für die Normalenrichtung (D_n) und die Tangentialrichtungen (D_{t_1} und D_{t_2}) unabhängige Schädigungsvariablen eingeführt:

$$\begin{bmatrix} t_n \\ t_{t_1} \\ t_{t_2} \end{bmatrix} = \frac{1}{t} \underbrace{\begin{bmatrix} (1 - D_n) Q_n^{el} & 0 & 0 \\ 0 & (1 - D_{t_1}) Q_t^{el} & 0 \\ 0 & 0 & (1 - D_{t_2}) Q_t^{el} \end{bmatrix}}_{Q_{sek}^{ed}} \begin{bmatrix} [u_n] \\ [u_{t_1}] \\ [u_{t_2}] \end{bmatrix}. \quad (2.37)$$

Diese Schädigungsvariablen werden, dem Schädigungskriterium (2.28) und den Kuhn–Tucker Bedingungen (2.29) entsprechend, durch die jeweilige maximal in der Belastungsgeschichte aufgetretene äquivalente Verzerrung \varkappa_n , \varkappa_{t_1} oder \varkappa_{t_2} kontrolliert. Die Entfestigung im entstehenden Riss wird durch den Verschiebungssprung vorangetrieben, was folgende Definition der äquivalenten Verzerrungen ε_v^n , $\varepsilon_v^{t_1}$ und $\varepsilon_v^{t_2}$ motiviert.

$$\begin{aligned} \varepsilon_v^n &:= \frac{k-1}{2k} [u_n] + \frac{1}{2k} \sqrt{(k-1)^2 [u_n]^2 + 4k [u_n]^2}, \\ \varepsilon_v^{t_1} &:= \sqrt{[u_{t_1}]^2}, & \varepsilon_v^{t_2} &:= \sqrt{[u_{t_2}]^2} \end{aligned} \quad (2.38)$$

Das Schädigungsmodell in Gleichung (2.38) sieht keine Interaktion der tangentialen und normalen Komponenten des Verschiebungssprungs – und somit auch keine Schädigungsfläche – vor. In Anlehnung an das Schädigungsmodell von de Vree et al. (1995) (Gleichung (2.32)) ermöglicht der Materialparameter k eine unterschiedliche Wichtung des Einflusses von Zug- und Druckdeformationen auf die äquivalente Verzerrung. Die Schädigungsevolution wird durch das im vorigen Abschnitt vorgestellte exponentielle Entfestigungsgesetz nach Mazars & Pijaudier–Cabot (1989) (Gleichung (2.33)) mit unabhängigen Materialparametern $\varkappa_0^{n/t_2/t_2}$, $\alpha^{n/t_1/t_2}$ und $\beta^{n/t_1/t_2}$ für die Normalenrichtung und die Tangentialrichtungen beschrieben.

Über den Zusammenhang $\dot{\mathbf{i}} = 1/t \mathbf{Q}_{\tan}^{ed} [\dot{\mathbf{u}}]$ kann die Materialtangente im Interface bestimmt werden:

$$\mathbf{Q}_{\tan}^{ed} = \mathbf{Q}_{sek}^{ed} - \left(\mathbf{Q}^{el} \cdot [\mathbf{u}] \right) \otimes \mathbf{d} \quad \text{mit} \quad \mathbf{d} := \begin{bmatrix} \frac{\partial D_n}{[u_n]} & \frac{\partial D_{t_1}}{[u_{t_1}]} & \frac{\partial D_{t_2}}{[u_{t_2}]} \end{bmatrix}^T \quad (2.39)$$

2.3.3 Kondensation der konstitutiven Gleichungen

Die in den beiden vorigen Abschnitten eingeführten Konstitutivgesetze sind für den allgemeinen Fall dreidimensionaler Betrachtungen mit 6 unabhängigen Spannungs- und Verzerrungskomponenten des Kontinuums bzw. 3 Verschiebungssprungkomponenten im Interface notiert. Bei zweidimensionalen Betrachtungen in der xy -Ebene wird eine Kondensation der Spannungen und der Materialtangente auf die xx -, yy - und xy -Einträge benötigt. Im ebenen Verzerrungszustand ($\varepsilon_{xz} = \varepsilon_{yz} = \varepsilon_{zz} = 0$) sind alle Verzerrungskomponenten bekannt, die als Eingangswert für das dreidimensional formulierte kontinuumsmechanische Werkstoffgesetz benötigt werden. Im ebenen Spannungszustand ($\sigma_{xz} = \sigma_{yz} = \sigma_{zz} = 0$) dagegen sind die Verzerrungskomponenten ε_{xz} , ε_{yz} und ε_{zz} zunächst unbekannt. De Borst (1991) beschreibt ein iteratives Vorgehen zur Bestimmung dieser Verzerrungskomponenten. Für den betrachteten Sonderfall isotroper Schä-

digung mit einer skalaren Schädigungsvariablen können ε_{xz} , ε_{yz} und ε_{zz} jedoch aus den Gleichungen (2.27) und (2.24) für $\sigma_{xz} = \sigma_{yz} = \sigma_{zz} = 0$ direkt bestimmt werden. Es ergibt sich $\varepsilon_{xz} = \varepsilon_{yz} = 0$ und $\varepsilon_{zz} = -\nu(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy})/(1 - \nu)$. Die reduzierte Materialtangente wird durch Kondensation von ε_{xz} , ε_{yz} und ε_{zz} gewonnen.

Im Interface ist die Spannungs–Verschiebungssprung–Beziehung in den Normalen– und Tangentialrichtungen entkoppelt. Die Reduktion für zweidimensionale Betrachtungen kann direkt durch Streichen der überflüssigen Zeile und Spalte vorgenommen werden, falls das lokale Koordinatensystem im Interface mit dem Systemkoordinatensystem übereinstimmt.

2.4 Entfestigung → Regularisierung

Im postkritischen Beanspruchungsbereich werden bei entfestigendem, lokalisierendem Materialverhalten lokal formulierte Kontinuumsmodelle unzureichend. Regularisierende Maßnahmen werden deshalb erforderlich. Dieses Problem wird im Folgenden an einem Modellproblem erläutert. Anschließend werden die in der vorliegenden Arbeit eingesetzten regularisierenden Maßnahmen in den Abschnitten 2.4.1 und 2.4.2 beschrieben.

Der Begriff *Lokalisierung* bezeichnet die Ausbildung schmaler Versagenszonen, die durch große Verzerrungsgradienten gekennzeichnet sind. Sie entstehen durch Akkumulation und Interaktion von Mikrodefekten. Die Breite des Versagensbandes ist werkstoffabhängig. Das umgebende Material entlastet im Allgemeinen während dieses Prozesses. Lokalisierung wird im Strukturantwortverhalten als Entfestigung wahrgenommen. Während einer nichtlinearen Strukturanalyse kann das Auftreten solcher *Instabilitäten* anhand von Versagenskriterien festgestellt werden. Hierzu wird auf die Literatur verwiesen (de Borst et al. (1993), Kuhl (2000)).

Die Unzulänglichkeit punktweise (lokal) formulierter Kontinuumsmodelle bei Entfestigung ist seit langem bekannt (Hill (1962), Bazant (1976), de Borst (1986), Sluys (1992)). Das Problem ist der Verlust der Elliptizität der Differentialgleichung im postkritischen Bereich. In Verbindung mit den ursprünglichen Randbedingungen wird das Randwertproblem beim Typwechsel der Differentialgleichung schlecht gestellt. Die Ursache dieses Problems liegt darin begründet, dass punktweise formulierte kontinuumsmechanische Stoffgesetze durch Mittelung des Verhaltens eines Materialausschnittes gewonnen werden. Die Formulierung verliert durch diese Mittelung die Information über die lokale Verteilung und Interaktion von Mikrodefekten (Krajcinovic (1996), Mühlhaus (1995)) und ist deshalb nicht in der Lage, Lokalisierungsphänomene abzubilden. Bei einer Diskretisierung mit Finiten Elementen äußert sich diese Unzulänglichkeit in einer pathologischen Netzabhängigkeit der Ergebnisse im postkritischen Bereich (de Borst (1986), Belytschko et al. (1986)).

An einem einfachen Beispiel, das von de Borst (1986) beschrieben wurde, soll dieses Manko demonstriert werden. Ein Dehnstab aus elasto–schädigendem Material stehe unter Zugbeanspruchung, die Verschiebung am freien Ende wird sukzessive gesteigert ($\dot{\varepsilon} > 0$), siehe Bild 2.10.

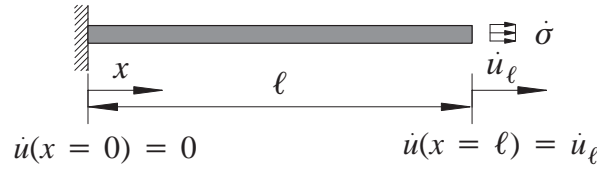


Bild 2.10: Modellproblem Zugstab

Die äquivalente Verzerrung ist die eindimensionale Dehnung, d.h. $\varepsilon_v = \varepsilon$. Das Gleichgewicht $\dot{\sigma}_{,x} = 0$, die Werkstoffgleichung $\dot{\sigma} = C_{\tan}^{ed} \dot{\varepsilon} = ((1 - D) E - D_{,\varepsilon} E \varepsilon) \dot{\varepsilon}$ und die kinematische Beziehung $\dot{\varepsilon} = \dot{u}_{,x}$ führen auf die Bewegungsdifferentialgleichung des Dehnstabs.

$$C_{\tan}^{ed} \dot{u}_{,xx} + C_{\tan, x}^{ed} \dot{u}_{,x} = 0 \quad (2.40)$$

Für homogenes Material ist $C_{\tan, x}^{ed} = 0$ und die Bewegungsgleichung (2.40) wird zu $C_{\tan}^{ed} \dot{u}_{,xx} = 0$. Das Material verhält sich zunächst elastisch ($C_{\tan}^{ed} = E > 0$) und die eindeutige Lösung der Differentialgleichung ist $\dot{u}(x) = x/l \dot{u}_l$. Bei fortschreitender Dehnung wird irgendwann der Zustand $C_{\tan}^{ed} = 0$ erreicht und die Bewegungsgleichung degeneriert zur wahren Aussage ($0 = 0$). Jedes zweifach differenzierbare Verschiebungsratenfeld, das die Randbedingungen erfüllt, ist dann eine Lösung.

Hat dagegen das Material einen Defekt im Punkt x_s , so wird dort im Beanspruchungsverlauf als erstes der Zustand $C_{\tan}^{ed} = 0$ erreicht, während im Restsystem noch $C_{\tan}^{ed} > 0$ gilt. Aus dem Werkstoffgesetz folgt dann $\dot{\sigma}(x = x_s) = 0$ und aus Gleichgewichtsgründen muss die Spannungsrate in jedem Punkt verschwinden, d.h. $\dot{\sigma}(x) = 0$. Dies kann an allen Punkten $x \neq x_s$ nur für $\dot{\varepsilon}(x) = 0$ erfüllt werden. Die gesamte Verzerrungsrate $\dot{\varepsilon}$ akkumuliert sich deshalb im Schwachpunkt x_s und die Verzerrungsraten $\dot{\varepsilon}(x)$ und auch die Verschiebungen $u(x)$ werden dadurch singulär. Im Punkt x_s nimmt die Schädigung bei weiterer Steigerung der Dehnung zu, bis $D = 1$ erreicht ist und die Spannungen auf Null abgesunken sind. Das Restsystem $x \neq x_s$ kann diesem Spannungsabfall nur durch elastisches Entlasten folgen. Die dissipierte Bruchenergie $G_u := \int \sigma du$ ist dabei Null.

Der Dehnstab aus Bild 2.10 wird nun durch n Finite Elemente diskretisiert. Die Entfestigung sei linear: $D(\varepsilon) = \kappa_u(\varepsilon - \kappa_0)/(\varepsilon(\kappa_u - \kappa_0))$ für $\kappa_0 \leq \varepsilon \leq \kappa_u$. Auch im Diskreten kann der Fall homogenen Materials vorliegen. Die Dehnungsverteilung im Stab ist dann konstant, die zugehörige Strukturantwort wird als homogener Lösungspfad bezeichnet, siehe Bild 2.11.

Durch numerische Ungenauigkeiten kann aber auch der Fall eintreten, dass der Schädigungsschwellenwert κ_0 geringfügig variiert. Die Dehnrate im Element mit dem kleinsten Schädigungsschwellenwert ist $\dot{\varepsilon} = -(\kappa_u - \kappa_0) \dot{\sigma}/(\kappa_0 E)$, während das umgebende Material elastisch bleibt und entlastet ($\dot{\varepsilon} = \dot{\sigma}/E$). Die über den Stab gemittelte Verzerrungsrate $\bar{\dot{\varepsilon}}$ ist

$$\bar{\dot{\varepsilon}} = \frac{n-1}{n} \frac{\dot{\sigma}}{E} + \frac{1}{n} \left(-\frac{\kappa_u - \kappa_0}{\kappa_0} \right) \frac{\dot{\sigma}}{E} = \left(1 - \frac{1}{n} \frac{\kappa_u}{\kappa_0} \right) \frac{1}{E} \dot{\sigma} = \left(\bar{C}_{\tan}^{ed} \right)^{-1} \dot{\sigma} \quad (2.41)$$

mit der gemittelten Tangente $\bar{C}_{\tan}^{ed} = (E n \kappa_0)/(n \kappa_0 - \kappa_u)$. Sie ist offensichtlich von der Elementanzahl n abhängig. Die Strukturantwort scheint mit zunehmender Netzverfeinerung spröder zu werden, siehe Bild 2.11.

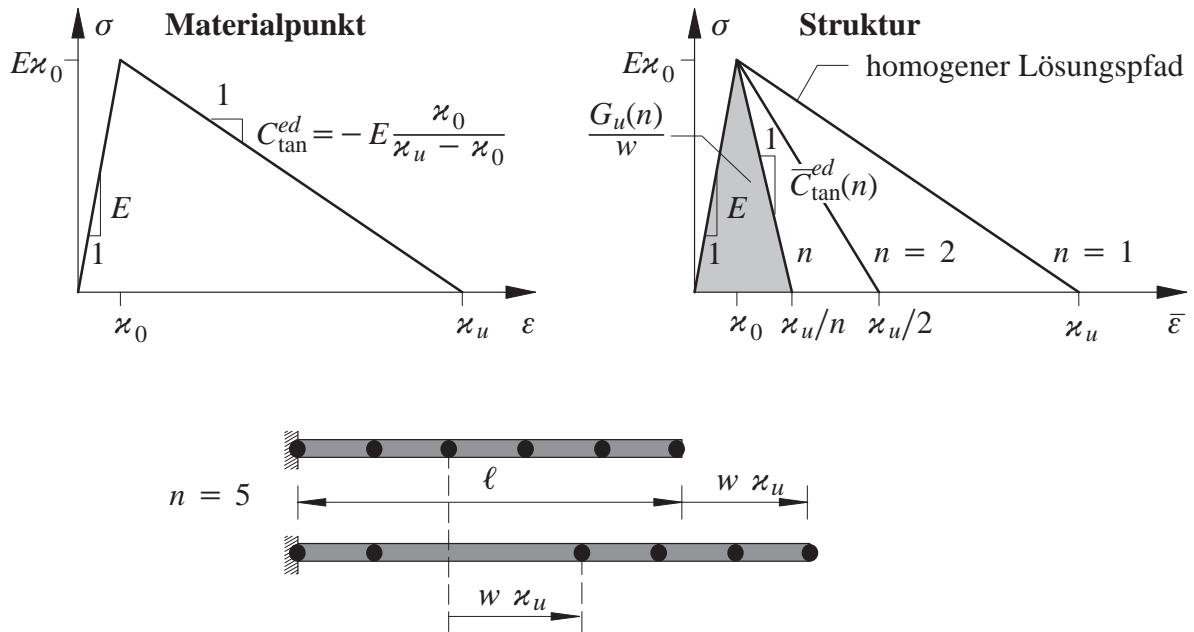


Bild 2.11: Modellbeispiel Dehnstab – diskretisiert

Die in einem Riss der Breite w dissipierte Bruchenergie ist ebenfalls diskretisierungsabhängig und strebt mit zunehmender Elementanzahl gegen Null.

$$G_u = \int \sigma \, du = \frac{1}{2n} E w \xi_u \xi_0 \rightarrow 0 \text{ für } n \rightarrow \infty \quad (2.42)$$

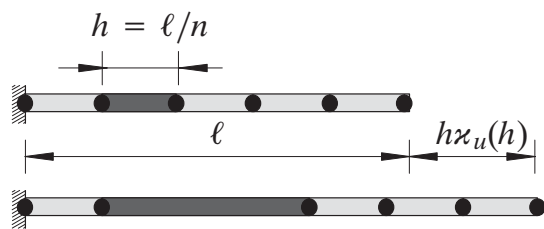
Die diskretisierten Verschiebungen sind C_0 -kontinuierlich, so dass statt der singulären Verzerrungen der Kontinuumslösung sehr große, aber endliche Verzerrungen im schwächsten Element auftreten. Mit zunehmender Elementverfeinerung strebt die diskrete Lösung gegen die unphysikalische singuläre Kontinuumslösung, was sich in Netzabhängigkeit äußert.

Durch Erweiterung des lokalen kontinuumsmechanischen Modells kann dieses Manko überwunden werden. Solche Erweiterungen, die gewährleisten, dass die mathematische Formulierung gut gestellt bleibt, werden als Regularisierungsmethoden bezeichnet. Sie basieren entweder auf einer Anreicherung der kinematischen Formulierung, wie beispielsweise der in Abschnitt 2.1.2 kurz vorgestellte Strong Discontinuity Approach und die eXtended Finite Element Method, oder auf einer Anreicherung der konstitutiven Beschreibung durch Berücksichtigung einer internen Länge in der Formulierung. Kuhl (2000) und Döbert (2001) geben einen Überblick über verschiedene Regularisierungsstrategien. Im Folgenden werden ausschließlich die in dieser Arbeit verwendeten Verfahren vorgestellt.

2.4.1 Netzadaptierter Entfestigungsmodul

Die Methode des netzadaptierten Entfestigungsmoduls ist ein anschauliches und einfaches Verfahren zur Gewährleistung objektiver, diskretisierungsunabhängiger Strukturantworten im Entfestigungsbereich. Sie wurde von Pietruszczak & Mroz (1981), Bazant & Oh (1983) sowie Wil-

lam (1984) eingeführt. Die physikalisch für jedes Material charakteristische und konstante Bruchenergie \bar{G}_u wird hierbei als Materialparameter aufgefasst und in die Formulierung eingebracht. Dadurch können netzunabhängige Strukturantworten gewährleistet werden. Das Problem, dass die mathematische Formulierung im postkritischen Bereich schlecht gestellt ist, ist dadurch jedoch nicht gelöst. Für das Modellbeispiel des Dehnstabs ist die materialspezifische Bruchenergie $\bar{G}_u = 1/2 E \bar{\kappa}_u \kappa_0 w$ bei linearer Entfestigung mit einer Rissdehnung $\bar{\kappa}_u$ und einer Rissbandbreite w . Der Dehnstab sei durch n Elemente der Breite $h = \ell/n$ diskretisiert. Dann nimmt die Lokalisierungszone die Breite eines Elements h ein. Es ist zu beachten, dass die tatsächliche Rissbandbreite w nicht größer als die Elementbreite h sein darf. Damit die Dissipation der konstanten Bruchenergie \bar{G}_u gewährleistet werden kann, muss das Verhalten am Materialpunkt diskretisierungsabhängig definiert werden, mit h als internem Längenparameter. Aus der Forderung nach einer konstanten Bruchenergie kann die Bruchdehnung $\kappa_u(h)$ bestimmt werden, siehe Gleichung (2.43).



dissipierte Energie:

$$G_u = \frac{1}{2} E \kappa_u(h) \kappa_0 h \stackrel{!}{=} \bar{G}_u = \frac{1}{2} E \bar{\kappa}_u \kappa_0 w \quad (2.43)$$

$$\rightarrow \kappa_u(h) = \bar{\kappa}_u \frac{w}{h}$$

Der netzadaptierte Entfestigungsmodul wird dadurch zu $C_{\tan}^{ed}(h) = - (E \kappa_0 h) / (\bar{\kappa}_u w - \kappa_0 h)$, siehe Bild 2.12. Sowohl die gemittelte Verzerrung $\bar{\varepsilon} = 1/E (1 - \bar{\kappa}_u w / \ell) \dot{\sigma}$ als auch die Struktur tangente \bar{C}_{\tan}^{ed} sind diskretisierungsunabhängig, siehe Bild 2.12.

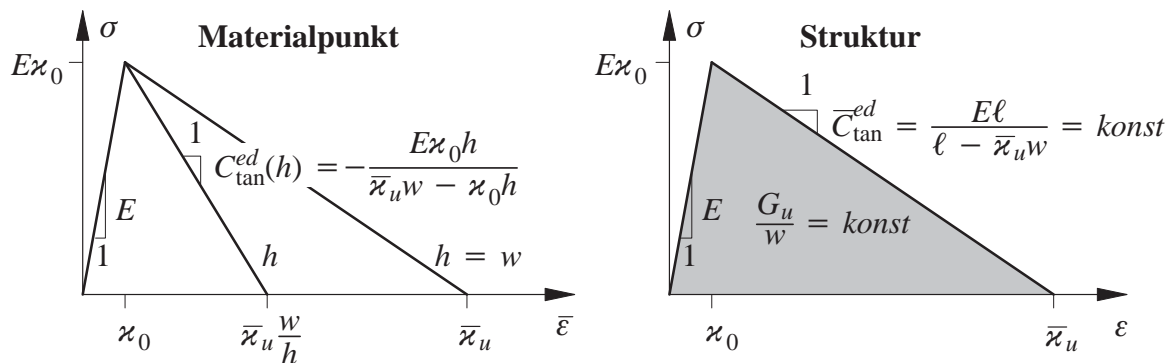


Bild 2.12: Modellbeispiel Dehnstab – netzadaptierter Entfestigungsmodul

2.4.2 Gradientenerweitertes Kontinuumsmodell

Die Probleme lokaler Kontinuumsformulierungen im entfestigenden Antwortbereich, die durch die Verwendung gemittelter Beziehungen für das punktweise Materialverhalten verursacht werden, können durch Berücksichtigung nichtlokaler Informationen überwunden werden. Solche *nichtlokalen Kontinuumsmodelle* beschreiben – im Gegensatz zu den lokalen Modellen – die

Spannungsantwort eines Punktes nicht ausschließlich über die Verzerrungsgeschichte des Punktes, sondern auch über die Verzerrungsgeschichte seiner Umgebung. Anstatt alle Größen der Konstitutivbeziehungen nichtlokal zu berücksichtigen, kann die Formulierung näherungsweise durch eine einzige nichtlokale Größe, die die Entfestigung charakterisiert, angereichert werden. Peerlings (1999) führt beispielsweise die äquivalente Verzerrung als nichtlokale Größe $\tilde{\varepsilon}_v$ ein. Diese kontrolliert die Schädigungsevolution (Gleichungen (2.28) und (2.33) bzw. (2.34)), während die anderen konstitutiven Gleichungen unverändert bleiben:

$$\boldsymbol{\sigma} = (1 - D(\tilde{\varepsilon}_v)) \mathbf{C}^{el} : \boldsymbol{\varepsilon} . \quad (2.44)$$

Die nichtlokale Größe $\tilde{\varepsilon}_v$ ergibt sich aus einer mit $w(\boldsymbol{\xi})$ gewichteten Mittelung der lokalen Größe ε_v im Einflussbereich V .

$$\tilde{\varepsilon}_v(\mathbf{x}) = \frac{1}{V} \int_V w(\boldsymbol{\xi}) \varepsilon_v(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}) dV \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega^{kont} \quad (2.45)$$

Durch die Wichtungsfunktion $w(\boldsymbol{\xi})$ – z.B. die Gauß-Verteilung $w(\boldsymbol{\xi}) = 1/(2\pi)^{1,5} \ell^3 \exp(-\boldsymbol{\xi}^2/2\ell^2)$ – wird der Einflussradius ℓ als materialcharakteristische interne Länge in die Formulierung eingebracht. Diese interne Länge gewährleistet, dass sich eine Lokalisierungszone mit einer diskretisierungsunabhängigen Breite w ausbildet.

Da die Definition der nichtlokalen Größe in integraler Form nach Gleichung (2.45) nicht zum lokalen Charakter der Finiten Element Methode passt und eine konsistente Linearisierung erschwert, wird stattdessen häufig eine *gradientenbasierte* Definition der nichtlokalen Größe verwendet. Durch Taylorreihenentwicklung kann die Integralform (2.45) in folgende Gradientenform gebracht werden, siehe Kröner (1967), Lasry & Belytschko (1988) oder Peerlings (1999).

$$\tilde{\varepsilon}_v(\mathbf{x}) = \varepsilon_v(\mathbf{x}) + c \nabla^2 \varepsilon_v(\mathbf{x}) + \mathcal{O}(\nabla^4 \varepsilon_v(\mathbf{x})) \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega^{kont} \quad (2.46)$$

Alternativ können *gradientenerweiterte Modelle* direkt physikalisch motiviert werden: Beispielsweise bei kristallinen Materialien durch den Einfluss der plastischen Versetzungsdichte. Der Parameter c ist eine Funktion der charakteristischen Länge ℓ . Wird die Gauß'sche Normalverteilung als Wichtungsfunktion verwendet, ist $c = \ell^2/2$. Gleichung (2.46) beschreibt die nichtlokale Größe $\tilde{\varepsilon}_v$ in expliziter Weise als Funktion der lokalen Größe ε_v . Durch einfache Umformung, siehe Peerlings (1999), kann aus der expliziten Definition der nichtlokalen Größe folgende implizite Beziehung gewonnen werden.

$$\varepsilon_v(\mathbf{x}) = \tilde{\varepsilon}_v(\mathbf{x}) - c \nabla^2 \tilde{\varepsilon}_v(\mathbf{x}) + \mathcal{O}(\nabla^4 \varepsilon_v(\mathbf{x})) \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega^{kont} \quad (2.47)$$

Die Unterschiede der expliziten und impliziten Formulierung wurden von Peerlings (1999) sowie Peerlings et al. (2001) ausführlich diskutiert. Askes et al. (2000) untersuchten den Einfluss der höheren Gradienten im expliziten und impliziten Fall. Sie kamen zu dem Schluss, dass im impliziten Fall bereits die Berücksichtigung der Gradienten 2. Ordnung sehr genau im Vergleich zur nichtlokalen Definition nach (2.45) ist, jedoch die regularisierende Wirkung nur für $D \in [0; 1[$ gewährleistet werden kann. Die explizite Definition hingegen zeigt auch bei Berücksichtigung höherer Gradienten keine Konvergenz zur Lösung des Problems in der nichtloka-

len Definition. So wird im Folgenden die von Peerlings (1999) vorgeschlagene implizite Formulierung unter Berücksichtigung der Gradienten bis zur 2. Ordnung verwendet.

- **Starke Form**

Die implizite Beziehung (2.47) stellt eine Differentialbeziehung im Sinne einer zusätzlichen Eulergleichung dar, deren Lösung die nichtlokale Verzerrung $\tilde{\varepsilon}_v$ ist. Somit ist die gradientenerweiterte Kontinuumsformulierung eine Zweifeldformulierung. Sie besteht aus der Gleichgewichtsbeziehung (2.4) und der impliziten Definition der nichtlokalen Verzerrung (2.47) unter Berücksichtigung des Werkstoffgesetzes, der Kinematik sowie der Randbedingungen nach Bild 2.4. Die Verschiebungen \mathbf{u} und die nichtlokale äquivalente Verzerrung $\tilde{\varepsilon}_v$ sind die primären Variablen. Zur eindeutigen Lösung dieses Zweifeldproblems sind zusätzliche Randbedingungen für die nichtlokale Verzerrung vorzuschreiben. Hier wird die von Peerlings (1999) vorgeschlagene natürliche Randbedingung

$$\tilde{\varepsilon}_{v,n} = \mathbf{0} \text{ auf } \partial\Omega \quad (2.48)$$

verwendet. Diese Randbedingung führt im Falle eines homogenen Spannungszustandes auf $\tilde{\varepsilon}_v = \varepsilon_v$ in Ω und ist deshalb konsistent mit der nichtlokalen Definition nach Gleichung (2.45).

Es ist zu beachten, dass die nichtlokale Verzerrung $\tilde{\varepsilon}_v$ nicht über ein Interface hinweg gemittelt werden darf, da $\tilde{\varepsilon}_v$ sonst in der Umgebung des Interfaces durch die im Interface auftretenden Verzerrungen $\varepsilon = 1/t \operatorname{sym}([\mathbf{u}] \otimes \mathbf{n})$ beeinflusst würde. Deshalb ist die Definition der äquivalenten Verzerrung jeweils auf die Kontinuumsbereiche $\Omega^{kont,k}$ beschränkt, die durch den Außenrand $\partial\Omega$ oder ein Interface Γ^{IF} begrenzt werden, siehe Bild 2.13. Auf dem Rand $\partial\Omega^{kont} = \partial\Omega \cup \Gamma^{IF}$ gelten die natürlichen Randbedingungen (2.48) für $\tilde{\varepsilon}_v$.

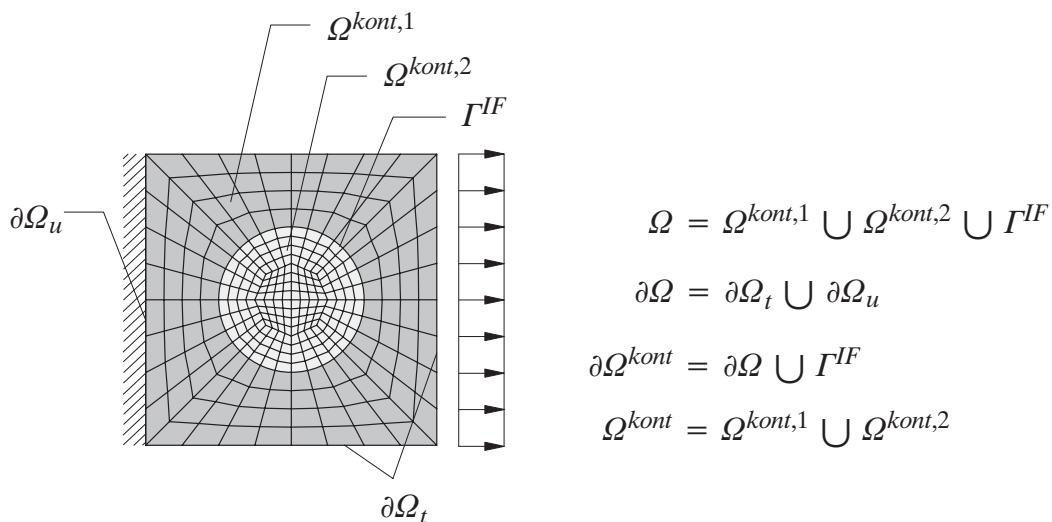


Bild 2.13: Definitionsbereich der nichtlokalen Verzerrung $\tilde{\varepsilon}_v$ für ein Kontinuum mit Interfaces

- **Schwache Form**

Die schwache Form des Gleichgewichts (2.8) bzw. (2.17) wurde bereits in Abschnitt 2.2.1 bzw. 2.2.2 eingeführt. Hinzu kommt nun die schwache Form der impliziten Definition der nichtloka-

len äquivalenten Verzerrung (2.47). Mit der Methode der gewichteten Residuen, unter Verwendung der partiellen Integration und unter Berücksichtigung der Randbedingung (2.48), wird Gleichung (2.47) in folgende schwache Form gebracht.

Für alle Teilbereiche $\Omega^{kont,k}$ gilt :

$$\int_{\Omega^{kont,k}} c \nabla \delta \tilde{\varepsilon}_v \cdot \nabla \tilde{\varepsilon}_v dV + \int_{\Omega^{kont,k}} \delta \tilde{\varepsilon}_v (\tilde{\varepsilon}_v - \varepsilon_v) dV = 0 \quad \forall \delta \tilde{\varepsilon}_v \quad (2.49)$$

• Diskretisierung

Zur Diskretisierung der Zweifeldformulierung (2.17) und (2.49) wird der Körper \mathfrak{B} in Finite Elemente zerlegt, wobei die Zerlegung für die Diskretisierung der Verschiebungen \mathbf{u}^h und der nichtlokalen Verzerrung $\tilde{\varepsilon}_v^h$ unterschiedlich sein kann, jedoch jeweils die Materialgrenzen berücksichtigt. Ebenso wie der Verschiebungsverlauf (Gleichung (2.9)) wird auch die nichtlokale äquivalente Verzerrung durch polynomiale Ansatzfunktionen N_E zwischen den Knotenwerten \mathbf{e} interpoliert. Dieselbe Interpolation wird hier im Sinne einer Bubnov–Galerkin–Formulierung für die Testfunktionen $\delta \tilde{\varepsilon}_v$ vorgenommen. Im Folgenden wird die Matrix–Vektor–Notation verwendet.

$$\tilde{\varepsilon}_v \approx \tilde{\varepsilon}_v^h = N_E \mathbf{e}, \quad \delta \tilde{\varepsilon}_v \approx \delta \tilde{\varepsilon}_v^h = N_E \delta \mathbf{e}, \quad \nabla \tilde{\varepsilon}_v = \mathbf{B}_E \mathbf{e}, \quad \delta \nabla \tilde{\varepsilon}_v^h = \mathbf{B}_E \delta \mathbf{e} \quad (2.50)$$

Der Operator \mathbf{B}_E bezeichnet den Gradienten der Ansatzfunktionen N_E . Da es sich bei der Zweifeldformulierung (2.17) mit (2.49) lediglich um ein gekoppeltes Problem und nicht um eine gemischte Formulierung handelt, müssen die diskreten Verschiebungen und die diskrete nichtlokale Verzerrung nicht der *Inf–Sup–Bedingung* (Babuska (1973)) genügen, siehe Simone et al. (2003). Haben die lokalen Verzerrungen und die nichtlokale äquivalente Verzerrung einen unterschiedlichen Ansatzgrad – z.B. bei linearen Ansätzen für die Verschiebungen und die nichtlokale Verzerrung – kann es zu unkritischen Spannungsoszillationen kommen, die lokal bleiben und deren Amplitude begrenzt ist. Das Einsetzen der Ansätze (2.9) und (2.50) in die schwache Form ergibt die diskrete schwache Form.

Gleichgewicht:

$$\bigcup_{e=1}^{n_{ele}} \delta \mathbf{d}^T \left[\underbrace{\bigcup_{e=1}^{n_{ele}^{kont}} \int_{\Omega^e} \mathbf{B}^T \boldsymbol{\sigma} dV}_{\mathbf{f}_{int}^{D, kont}} + \underbrace{\bigcup_{e=1}^{n_{ele}^{IF}} \int_{\Gamma^e} (\mathbf{A} \mathbf{L} \mathbf{N})^T \mathbf{t} dA}_{\mathbf{f}_{int}^{D, IF}} - \underbrace{\bigcup_{e=1}^{n_{ele}^{kont}} \left[\int_{\Omega^e} \mathbf{N}^T \hat{\mathbf{b}} dV - \int_{\partial \Omega_i^e} \mathbf{N}^T \hat{\mathbf{t}} dA \right]}_{-\mathbf{f}_{ext}^D} \right] = 0 \quad \forall \delta \mathbf{d} \quad (2.51)$$

nichtlokale Verzerrung:

$$\bigcup_{e=1}^{n_{ele}^{kont}} \delta \mathbf{e}^T \left[\underbrace{\int_{\Omega^e} c \mathbf{B}_E^T \nabla \tilde{\varepsilon}_v dV + \int_{\Omega^e} N_E (\tilde{\varepsilon}_v - \varepsilon_v(\boldsymbol{\varepsilon})) dV}_{\mathbf{f}_{int}^E} \right] = 0 \quad \forall \delta \mathbf{e}$$

n_{ele}^{kont} ist dabei die Anzahl der Elemente in Ω^{kont} und n_{ele}^{IF} die Anzahl der Interface–Elemente auf Γ^{IF} . Die Gesamtelementanzahl ist $n_{ele} = n_{ele}^{kont} + n_{ele}^{IF}$. Die Assemblierung der Elementbeiträge

zur diskreten schwachen Form der Evolutionsgleichung der nichtlokalen Verzerrung berücksichtigt die Unabhängigkeit von $\tilde{\varepsilon}_v$ in den einzelnen Bereichen $\Omega^{kont,k}$.

- **Linearisierung**

Die Lösung des nichtlinearen gekoppelten Gleichungssystems (2.51) zu einem Lastniveau F_{ext} mit dem Newton–Raphson–Verfahren basiert auf der Linearisierung $\mathbf{K}^i \Delta \mathbf{D}^{i+1} = -\mathbf{R}(\mathbf{D}^i)$. Die Lösung des linearisierten Gleichungssystems ergibt die residuale Änderung des Freiheitsgradvektors $\Delta \mathbf{D}^{i+1} = \bigcup_{e=1}^{n_{ele}} [\Delta \mathbf{d}^{i+1} \Delta \mathbf{e}^{i+1}]^T$, siehe Abschnitt 2.2.1. Die Systemsteifigkeitsmatrix \mathbf{K}^i und das Residuum \mathbf{R}^i setzen sich aus den assemblierten Elementbeiträgen zusammen.

$$\mathbf{K}^i = \bigcup_{e=1}^{n_{ele}^{kont}} \begin{bmatrix} \mathbf{k}_{DD}^{kont,i} & \mathbf{k}_{DE}^i \\ \mathbf{k}_{ED}^i & \mathbf{k}_{EE}^i \end{bmatrix} + \bigcup_{e=1}^{n_{ele}^{IF}} \begin{bmatrix} \mathbf{k}^{IF,i} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{R}^i = \bigcup_{e=1}^{n_{ele}^{kont}} \begin{bmatrix} \mathbf{r}_D^{kont,i} \\ \mathbf{r}_E^i \end{bmatrix} + \bigcup_{e=1}^{n_{ele}^{IF}} \begin{bmatrix} \mathbf{r}^{IF,i} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} \quad (2.52)$$

Die Elementsteifigkeits– und Elementresiduenbeiträge sind dabei

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_{DD}^{kont,i} &= \frac{\partial \mathbf{f}_{int}^{D, kont}}{\partial \mathbf{d}} \Big|_{\mathbf{d}^i} = \int_{\Omega_e} \mathbf{B}^T \underbrace{\frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} \Big|_{\boldsymbol{\varepsilon}^i}}_{\mathbf{C}_{sek}^{ed}} \mathbf{B} dV & \mathbf{k}_{DE}^i &= \frac{\partial \mathbf{f}_{int}^D}{\partial \mathbf{e}} \Big|_{\mathbf{e}^i} = \int_{\Omega_e} \mathbf{B}^T \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_v} \Big|_{\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_v^i} \mathbf{N}_E dV \\ \mathbf{k}_{ED}^i &= \frac{\partial \mathbf{f}_{int}^E}{\partial \mathbf{d}} \Big|_{\mathbf{d}^i} = - \int_{\Omega_e} \mathbf{N}_E^T \frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_v}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} \Big|_{\boldsymbol{\varepsilon}^i} \mathbf{B} dV & \mathbf{k}_{EE}^i &= \frac{\partial \mathbf{f}_{int}^E}{\partial \mathbf{e}} \Big|_{\mathbf{e}^i} = \int_{\Omega_e} (c \mathbf{B}_E^T \mathbf{B}_E + \mathbf{N}_E^T \mathbf{N}_E) dV \\ \mathbf{r}_D^{kont,i} &= \mathbf{f}_{int}^{D, kont,i} - \mathbf{f}_{ext}^{D,i} & \mathbf{r}_E^i &= \mathbf{f}_{int}^{E,i}. \end{aligned} \quad (2.53)$$

Die Interface–Elementbeiträge $\mathbf{k}^{IF,i}$ und $\mathbf{r}^{IF,i}$ sind in Gleichung (2.23) definiert. Auch bei assoziiertem Schädigungsgesetz ist die Systemsteifigkeitsmatrix unsymmetrisch.

Die regularisierende Wirkung der Gradientenerweiterung auf das Kontinuumsmodell soll ebenfalls am Modellbeispiel des Dehnstabs untersucht werden (Bild 2.14). Die äquivalente Verzerrung ε_v ist die eindimensionale Dehnung ε . Es wird ein exponentielles Entfestigungsgesetz nach Gleichung (2.33) angenommen mit $\kappa_0 = 0,0001$, $\alpha = 0,96$ und $\beta = 650$. Der Längenparameter c sei $0,00001 \text{ m}^2$. Das System wird durch 10, 40 und 80 Finite Elemente diskretisiert. In der Strukturantwort zeigt sich die regularisierende Wirkung der Gradientenerweiterung. Mit zunehmender Elementanzahl konvergiert die Strukturantwort, die dissipierte Bruchenergie ist dabei endlich. An der Deformationsfigur und der Schädigungsverteilung ist zu erkennen, dass sich die Lokalisierungszone über eine Breite erstreckt, die größer als eine Elementbreite ist und unabhängig von der Elementanzahl durch den Längenparameter c gesteuert wird, siehe auch Kuhl (2000) für eine ausführlichere Diskussion.

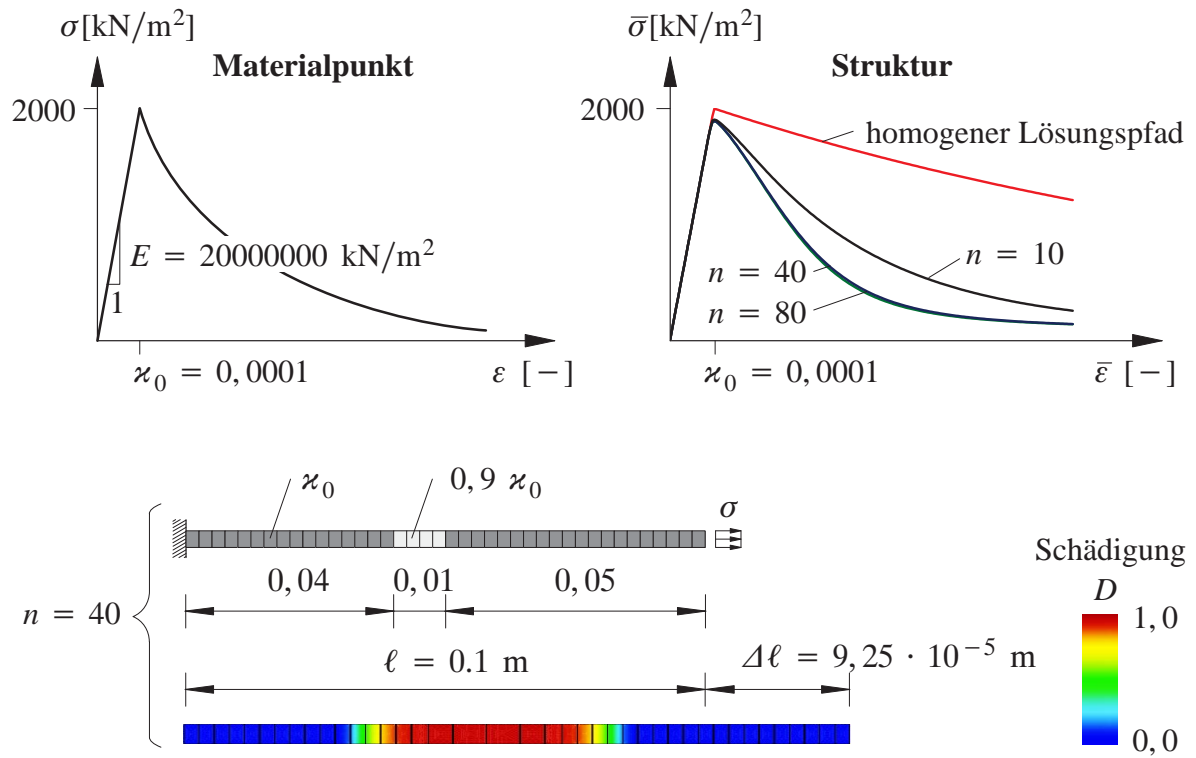


Bild 2.14: Modellbeispiel Dehnstab – gradientenerweitert

3 Mehrskalenmodelle und effiziente Lösungsmethoden

Dieses Kapitel gibt einen Überblick über Methoden zur Analyse von Strukturproblemen mit Mehrskalencharakteristik. Typische Anwendungen sind Strukturen aus mikroheterogenen Werkstoffen, wie Verbundwerkstoffe oder Werkstoffe mit lokalen Defekten oder Versagenszonen, bei denen die Abmessungen der einzelnen Materialkomponenten bzw. Defekte wesentlich kleiner als die Strukturabmessungen sind. Bei Problemen mit breitem Skalenspektrum ist der Einsatz von Mehrskalenmodellen in Verbindung mit effizienten Gleichungslösern empfehlenswert, da die direkte Lösung des Randwertproblems bei Auflösung der Materialkomponenten und Fehlstellen (*Feinskalenlösung FSL*) im Allgemeinen die vorhandenen Rechen- und Speicherkapazitäten bei weitem überschreitet. Das Kapitel dient der Einordnung des in dieser Arbeit eingesetzten hierarchischen Mehrskalenmodells in die Vielfalt der in der Literatur verbreiteten Mehrskalen- und Lösungsmethoden.

3.1 Einführung

Das Verhalten von Strukturen aus mikroheterogenen Werkstoffen weist einen zweiskaligen Charakter auf, da die Materialheterogenitäten auf der Komponentenskala (*Feinskala*) das Antwortverhalten auf der Strukturskala (*Grobskala*) mitbestimmen. Verfahren, die diesem zwei- bzw. mehrskaligen Charakter Rechnung tragen und die physikalischen Vorgänge auf der Feinskala in die grobskalige Formulierung einbinden, werden als *Zwei-* bzw. *Mehrskalenmethoden* bezeichnet. Ziel dieser Verfahren ist es, den Rechen- und Speicheraufwand gering zu halten und dabei möglichst die Genauigkeit der Feinskalenlösung zu erreichen.

Liegen die Fein- und Grobskala so weit auseinander, dass die grobskaligen Feldgrößen in einem repräsentativen Teilausschnitt der Mikrostruktur als konstant angenommen werden können, spricht man von *Skalenseparation*. Dies ist der Fall, wenn die Strukturabmessungen wesentlich größer als die Abmessungen der Materialheterogenitäten sind, siehe Nemat-Nasser & Hori (1999). Die Annahme der Skalenseparation kann während des Beanspruchungsverlaufs ihre Gültigkeit verlieren. So werden etwa im entfestigenden Antwortbereich die Verzerrungsgradienten in der Lokalisierungszone so groß, dass die Verzerrungen im repräsentativen Teilausschnitt der Mikrostruktur nicht mehr als konstant angenommen werden können. Die Annahme der Skalenseparation ist dann zumindest in dieser Zone nicht mehr gerechtfertigt.

Für Anwendungen, bei denen die Annahme der Skalenseparation zutrifft, wurden Homogenisierungsmethoden entwickelt, siehe Abschnitt 3.2. Unter dem Begriff *Homogenisierung* versteht man die Substitution eines heterogenen Materials durch ein homogenes *effektives Ersatzmaterial*. Die konstitutiven Eigenschaften des Ersatzmaterials werden durch geeignete Mittelung der entsprechenden Eigenschaften des heterogenen Materials über einen repräsentativen Teilbereich der Feinskala gewonnen. Dieser repräsentative Teilbereich wird als *Repräsentatives Volumenelement (RVE)* bezeichnet. Der Skalenübergang erfolgt bei den Homogenisierungsmethoden *punktweise*, d.h. das konstitutive Verhalten eines infinitesimalen Punktes auf

der Grobskala wird an das Verhalten des Feinskalenausschnitts endlicher Größe (RVE) geknüpft. Bei elastischem Verhalten und kleinen Deformationen existieren für einfache Anordnungen der Heterogenitäten analytische Lösungen zur Bestimmung der Ersatzigenschaften, siehe beispielsweise Voigt (1887), Reuss (1929), Eshelby (1957) oder Tanaka & Mori (1972). Für komplexere Materialstrukturen sind jedoch numerische Verfahren notwendig.

Ungekoppelte numerische Homogenisierungsverfahren bestimmen die Ersatzigenschaften des mikroheterogenen Materials und formulieren daraus ein grobskaliges Werkstoffgesetz in geschlossener Form (Suquet (1987), Zohdi et al. (1998)). Bei elastischem Verhalten und kleinen Deformationen ist dies eindeutig und konsistent möglich. Bei nichtlinearem Materialverhalten sind jedoch Annahmen bezüglich des grobskaligen Werkstoffgesetzes notwendig, wie zum Beispiel die Einführung interner Variablen zur phänomenologischen Erfassung der nichtlinearen Vorgänge auf der feinen Skala. Die Konsistenz zwischen dem Verhalten des heterogenen Ausgangsmaterials und dem Verhalten des Ersatzmaterials ist dann nicht unbedingt gewährleistet. Ungekoppelte numerische Homogenisierungsmethoden bei nichtlinearem Verhalten sind Gegenstand der aktuellen Forschung (Zohdi et al. (1998), Zohdi & Wriggers (2001), Döbert (2001), Reese (2003), Löhnert (2004)). Der Vorteil ungekoppelter Homogenisierungsverfahren ist, dass die Bestimmung der Ersatzigenschaften nur ein einziges Mal vorgenommen werden muss.

Bei komplizierten Anordnungen der Materialheterogenitäten oder bei komplexen nichtlinearen Vorgängen auf der feinen Skala kann ein adäquates grobskaliges Werkstoffgesetz in der Regel nicht mehr gefunden werden. In solchen Fällen kommen *gekoppelte* numerische Homogenisierungsverfahren zum Einsatz (Schröder (1996), Miehe & Koch (2002), Kouznetsova (2002), Gitman (2006)). Hierbei wird auf die Formulierung eines grobskaligen Materialmodells verzichtet. Vielmehr werden für jeden Beanspruchungszustand die effektiven Feldgrößen an den Integrationspunkten der Grobskala durch Mittelung des Verhaltens im zugehörigen RVE gewonnen. Dieses Verfahren ist wesentlich aufwändiger als ungekoppelte Homogenisierungsverfahren. Zu jedem Beanspruchungszustand ist, zusätzlich zur Lösung des grobskaligen Randwertproblems, an jedem Integrationspunkt das zugehörige nichtlineare feinskalige Randwertproblem im RVE zu lösen.

Ist die Annahme der Skalenseparation nicht gerechtfertigt, so ist ein *volumenverbindender* Skalenübergang erforderlich (Abschnitt 3.3). In endlichen Teilbereichen des Grobskalengebiets wird die heterogene Mikrostruktur durch hierarchisches Verfeinern im Maßstab 1 : 1 aufgelöst. Zu diesen *hierarchischen Mehrskalmethoden* zählen *Substrukturmethoden* (Wilson (1974)), die sogenannten *global–local–Methoden* (Noor (1986), Mao & Sun (1991), Whitcomb (1991)), die *s–version* der Finiten Element Methode (Fish (1992)), aber auch aktuellere Entwicklungen wie die *variational multiscale method* (Hughes et al. (1998)), die *bridging multiscale method* (Kadowaki & Liu (2004)), der *coupled volume approach* (Gitman (2006)) sowie speziell für heterogene Materialien entwickelte Mehrgitterverfahren (Fish & Belsky (1995 a, b), Bayreuther (2004)).

Hierarchische Mehrskalmethoden sind für beliebig komplexe nichtlineare Vorgänge auch im Bereich der Entfestigung einsetzbar. Die Formulierung und Analyse dieser Methoden bei exem-

plarischer Anwendung auf das inelastische Verhalten faserverstärkter und homogener Reibungsmaterialien ist der Schwerpunkt der vorliegenden Arbeit.

Zur Reduktion des Rechen- und Speicheraufwands wird der Einsatz der hierarchischen Mehrskalenumformulierung in dieser Arbeit auf die Teile der Struktur beschränkt, in denen nichtlineares Verhalten auftritt, während in den Bereichen mit Skalenseparation homogenisierte Werkstoffgesetze verwendet werden. Die gewählte Strategie erlaubt weitere Effizienzsteigerung durch einen effizienten Gleichungslösungsalgorithmus, der mit Gebietszerlegungsmethoden verwandt ist, siehe Abschnitt 3.4 und Kapitel 4.

Eine Zwischenstufe zwischen den gekoppelten Homogenisierungsverfahren (punktweiser Skalenübergang) und hierarchischen Mehrskalenumformulierung (volumenverbindender Skalenübergang) stellt die *nichtlokale gekoppelte Homogenisierung*, auch als *Homogenisierung 2. Ordnung* bezeichnet, dar (Kouznetsova (2002)). Der Skalenübergang erfolgt hierbei punktweise, jedoch wird die Annahme konstanter grobskaliger Verzerrungen bzw. Spannungen im RVE aufgegeben. Das RVE wird neben den grobskaligen Verzerrungen bzw. Spannungen auch durch deren Gradienten $\nabla \epsilon$ bzw. durch die arbeitskonjugierten Spannungen höherer Ordnung τ belastet. Dieses Verfahren kann zwar im Entfestigungsbereich eingesetzt werden, ohne zu pathologischer Netzabhängigkeit zu führen, jedoch besteht eine direkte Abhängigkeit zwischen der abstrakten RVE-Größe und der regularisierenden internen Länge auf der groben Skala. Das heißt, die Größe des RVE wird zum zusätzlichen Modellparameter.

Asymptotische Erweiterungsmethoden (Sanchez-Palencia (1980)), als alternative, mathematisch orientierte Homogenisierungsmethoden für den Sonderfall hochfrequent periodischer Materialien, seien hier nur der Vollständigkeit halber erwähnt. Sie können sowohl für elastische (Hori & Nemat-Nasser (1999), Mc Devitt et al. (2001), Michel & Suquet (2003)) als auch für inelastische Materialien (Fish et al. (1997)) eingesetzt werden. Als einführende Literatur wird Zienkiewicz et al. (2005) empfohlen.

In Bild 3.1 sind die verschiedenen Mehrskalenumformulierungsmethoden einander schematisch gegenübergestellt. Die Übergabe der Variablen zwischen Grob- und Feinskala ist für eine Verschiebungsformulierung angegeben.

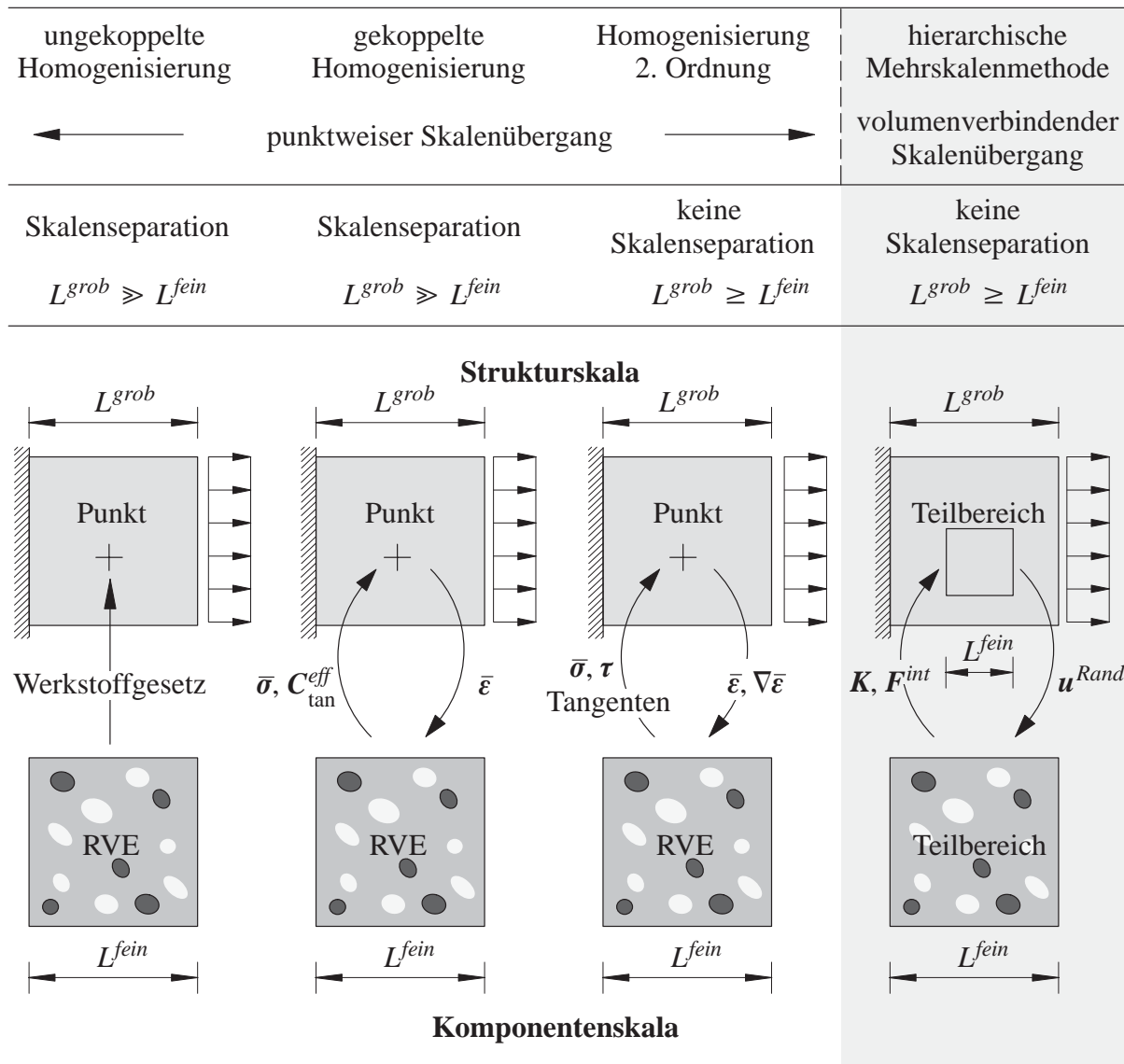


Bild 3.1: Mehrskalenmethoden – Überblick

3.2 Skalenseparation – homogenisierungsbasierte Mehrskalenmethoden

Der folgende Abschnitt befasst sich mit der Homogenisierung als Skalenübergang zwischen der Komponenten- und der Strukturskala. Homogenisierungsmethoden formulieren ein effektives homogenes Ersatzmodell und erfassen damit das komplexe Verhalten mikroheterogener Strukturen in effizienter Weise. Voraussetzung für die grobskalig punktweise Definition effektiver Ersatzgrößen als gemittelte Werte der entsprechenden Größen in einem repräsentativen Ausschnitt der Materialstruktur (RVE) ist die Skalenseparation. Die Grundaufgaben der Homogenisierungsverfahren sind: die Definition des RVE, die Formulierung geeigneter Randbedingungen an das RVE, die den Belastungszustand auf der Grobskala widerspiegeln (*„Lokalisierung“*), die Lösung des feinskaligen Randwertproblems im RVE sowie die Berechnung effektiver Variablen durch Mittelung (*Homogenisierung*) der feinskaligen Variablen im RVE. Die Formulierung von

Randbedingungen an das RVE stellt hierbei den Skalenübergang von der Grob- zur Feinskala dar, die Homogenisierung den Skalenübergang von der Fein- zur Grobskala, siehe Bild 3.5.

- **Repräsentatives Volumenelement**

Die Frage nach der Existenz und Größe des Repräsentativen Volumenelements spielt eine wichtige Rolle. In der Literatur findet man hierzu eine Vielzahl qualitativer Antworten (Hill (1963), Lemaitre (1996), Hashin (1983), van Mier (1997)). Das RVE muss demnach so groß sein, dass es genügend Informationen über die Mikrostruktur beinhaltet, um statistisch repräsentativ zu sein. Dies ist laut Hill (1963) der Fall, wenn die durch Mittelung im RVE berechneten effektiven Ersatzparameter im Rahmen einer gewählten Genauigkeitstoleranz unabhängig von der Art der Randbedingungen (siehe unten) und der Platzierung des RVE in der Mikrostruktur sind. Andererseits muss das RVE klein genug sein, um auf der Grobskala noch als Punkt aufgefasst werden zu können, also wesentlich kleiner als die Strukturabmessungen. Für Beton empfiehlt van Mier (1997) die 3- bis 5-fache Größe des Durchmessers des maximalen Einschlusses. Die absolute Größe des RVE hängt also von der Mikrostruktur ab. Das heißt, sie hängt von den Abmessungen und der geometrischen Form der Einschlüsse bzw. Fehlstellen, deren Volumenanteil sowie den Steifigkeitsunterschieden zwischen den verschiedenen Materialkomponenten ab. Beim Sonderfall periodisch angeordneter Heterogenitäten ist das RVE als *Einheitszelle* zu wählen, also als ein Ausschnitt aus der Materialstruktur, der sich periodisch wiederholt.

Gitman (2006) führt numerische Untersuchungen zum Konvergenzverhalten der effektiven Parameter einer Mikrostruktur für verschiedene RVE-Ausschnitte der Mikrostruktur bei zunehmender RVE-Größe durch. Sie formuliert den in Bild 3.2 angegebenen allgemeingültigen Algorithmus, zur Untersuchung ob ein RVE existiert und um die Mindestgröße des RVEs für beliebige Mikrostrukturen zu ermitteln. Im vorkritischen Beanspruchungsbereich konnte Gitman feststellen, dass die *effektiven Größen* $(\cdot)^{eff}$, gemittelt über die Anzahl der betrachteten Ausschnitte, mit zunehmender RVE-Größe konvergieren. Daraus kann auf die Existenz eines RVEs im vorkritischen Beanspruchungsbereich geschlossen werden. Im nachkritischen Beanspruchungsbereich dagegen konnte keine Konvergenz des Mittelwertes der effektiven Größen mit zunehmender RVE-Größe beobachtet werden. Das bedeutet, dass bei Entfestigung kein RVE existiert und der punktweise Skalenübergang nicht zutreffend ist.

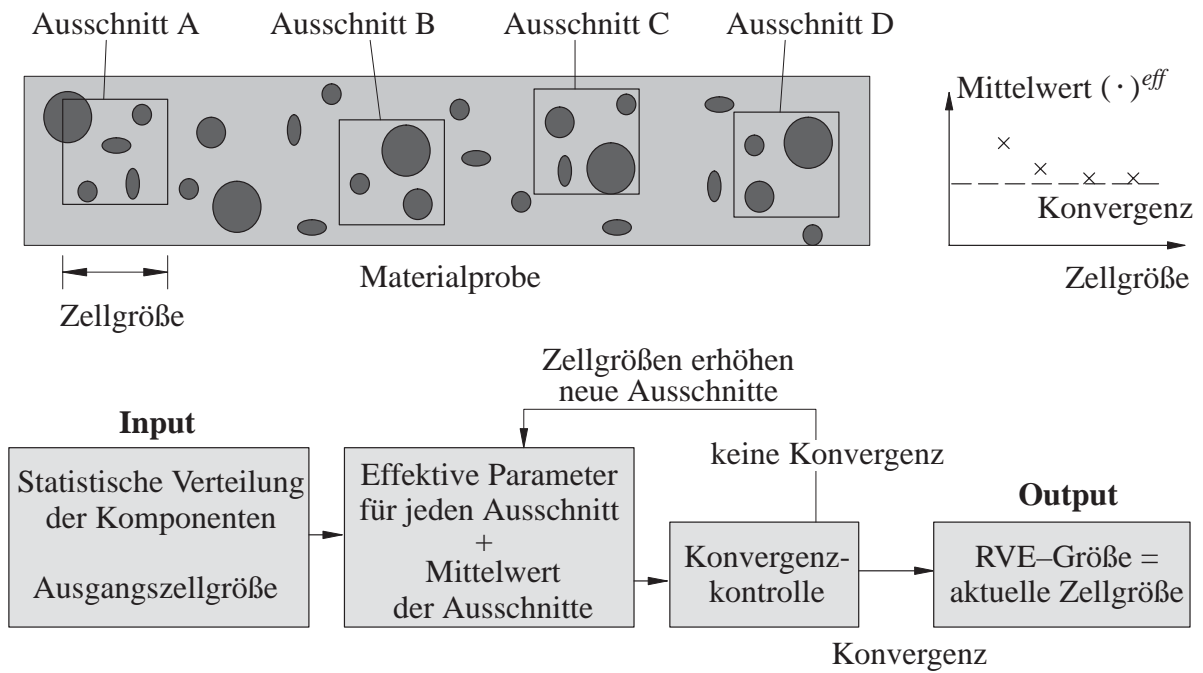


Bild 3.2: Untersuchung auf Existenz des RVE und Ermittlung der Größe des RVE

- **Definition effektiver Variablen**

Im Punkt $\bar{\mathbf{x}}$ des grobskaligen Kontinuums werden die homogenisierten grobskaligen Variablen (*effektive Variablen*) $\overline{(\cdot)}$ aus den feinskaligen Variablen $(\cdot) = \overline{(\cdot)} + \tilde{(\cdot)}$ durch Volumenmittlung gewonnen. $\tilde{(\cdot)}$ stellt hierbei die lokale Fluktuation im RVE um den Mittelwert $\overline{(\cdot)}$ dar. Durch Anwendung des Gauß'schen Integralsatzes können diese Volumenintegrale in Oberflächenintegrale über den Rand des RVEs umgeformt werden. Das grobskalige Verzerrungsfeld (effektive Verzerrung) im Punkt $\bar{\mathbf{x}}$ ist dementsprechend

$$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}} = \frac{1}{V} \int_{\Omega_{RVE}} \boldsymbol{\varepsilon} \, dV = \frac{1}{V} \int_{\Gamma_{RVE}} \text{symm}(\mathbf{u} \otimes \mathbf{n}) \, dA \quad (3.1)$$

bei einem RVE des Volumens V , dessen Oberfläche mit Γ_{RVE} bezeichnet wird. \mathbf{n} sei die Normale auf die Oberfläche des RVEs. Entsprechend ist das grobskalige Spannungsfeld (effektive Spannung)

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{1}{V} \int_{\Omega_{RVE}} \boldsymbol{\sigma} \, dV = \frac{1}{V} \int_{\Gamma_{RVE}} \text{symm}(\mathbf{t} \otimes \mathbf{x}) \, dA \quad , \quad (3.2)$$

mit Randspannungsvektoren $\mathbf{t} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}$ auf Γ_{RVE} .

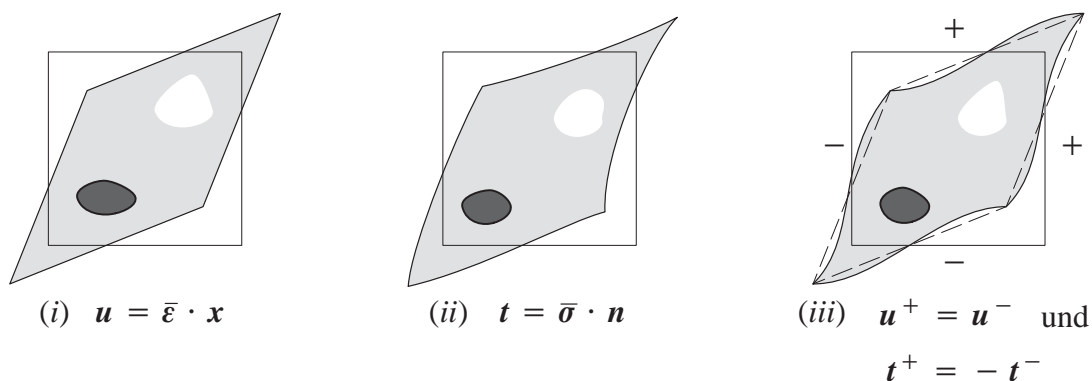
- **Randbedingungen an das RVE**

Eine fundamentale Bedingung an das Homogenisierungsverfahren ist die nach Hill (1972) benannte Forderung der *energetischen Konsistenz* zwischen der Grob- und Feinskala. Demnach

muss die gemittelte feinskalige Spannungsleistung gleich der grobskaligen Spannungsleistung sein.

$$\overline{(\boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}})} = \bar{\boldsymbol{\sigma}} : \dot{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}} \quad (3.3)$$

Die zur Formulierung des feinskaligen Randwertproblems notwendigen Randbedingungen an das RVE müssen dieser Hill-Bedingung genügen. Somit regelt die *Hill-Bedingung* den Übergang von der Grob- zur Feinskala. Die drei gängigsten Randbedingungen, die dieser Bedingung genügen, sind die *homogenen Randbedingungen*, zu denen die *Verschiebungsrandbedingungen (VRB)* und die *Spannungsrandbedingungen (SRB)* zählen, und die *periodischen Randbedingungen (PRB)*, siehe Bild 3.3. Die homogenen Randbedingungen werden für Mikrostrukturen mit irregulär verteilten Heterogenitäten eingesetzt. Verschiebungsrandbedingungen erzwingen lineare Randverschiebungen am RVE und lassen keine Verschiebungsfluktuationen $\tilde{\mathbf{u}}$ auf dem Rand des RVEs zu. Sie führen generell zu einer Überschätzung der effektiven Steifigkeit, d.h. sie liefern eine obere Grenze der effektiven Steifigkeit, wie von Huet (1990) und Sab (1992) bewiesen wurde. Spannungsrandbedingungen forcieren homogene Randspannungen und unterdrücken Spannungsfluktuationen $\tilde{\mathbf{t}}$ auf Γ_{RVE} . Sie führen auf eine untere Grenze der effektiven Steifigkeit, siehe Huet (1990). Für periodisch aufgebaute Mikrostrukturen sind periodische Randverschiebungen in Verbindung mit antiperiodischen Randspannungen zu fordern.



- | | | |
|-----------------------------------|--|----------------------------|
| (i) Verschiebungsrandbedingungen | $\mathbf{u} = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \cdot \mathbf{x}$ | } homogene Randbedingungen |
| (ii) Spannungsrandbedingungen | $\mathbf{t} = \bar{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{n}$ | |
| (iii) periodische Randbedingungen | $\mathbf{u}^+ = \mathbf{u}^-$ und $\mathbf{t}^+ = -\mathbf{t}^-$ | |

Bild 3.3: Randbedingungen an das RVE

3.2.1 Analytische Verfahren

Die Ursprünge der Homogenisierung liegen in analytischen Verfahren zur Ermittlung effektiver Elastizitätstensoren, die die Eigenschaften der heterogenen Mikrostruktur möglichst genau reflektieren. Diese analytischen Verfahren sind auf einfache Anordnungen und Geometrien der Einschlüsse im Matrixmaterial und elastische Betrachtungen begrenzt. Einige aktuellere Ver-

öffentlichungen befassen sich mit inkrementellen Vorgehensweisen für inelastische Materialien, siehe Suquet (1997) und Ponte Castaneda & Suquet (1998). Trotz ihrer begrenzten Anwendbarkeit spielen analytische Verfahren eine wichtige Rolle zur Kontrolle numerischer Homogenisierungsergebnisse oder experimenteller Untersuchungen. Die einfachsten Verfahren berücksichtigen lediglich den Volumenanteil der einzelnen Materialkomponenten, während genauere Methoden auch die geometrische Form der Einschlüsse in Betracht ziehen.

Hier wird lediglich ein kurzer Einblick in analytische Homogenisierungsverfahren gegeben, ohne Anspruch auf Vollständigkeit. Zur Veranschaulichung wird exemplarisch ein isotropes, elastisches Zweiphasenmaterial betrachtet, bei dem der Kompressionsmodul der Faser K^F zehnmal so groß ist wie der des Matrixmaterials K^M bei gleicher Querdehnzahl $\nu^F = \nu^M$. Für dieses Beispiel werden in Bild 3.4 die *Voigt–* und *Reuss–Grenzen* sowie die obere und untere *Hashin–Shtrikman–Grenze* und die Abschätzung nach der generalisierten selbstkonsistenten Methode für den effektiven Kompressionsmodul K^{eff} verglichen. Die Volumenanteile der Faser im Matrixmaterial vol^F werden bei diesem Vergleich variabel gehalten.

- **Voigt–Reuss–Grenzen**

Die von Voigt (1887) eingeführte Abschätzung der effektiven Eigenschaften basiert auf der Annahme konstanter Verzerrungen im RVE, also auf der Vernachlässigung von Eigenverzerrungen. Das bringt eine Verletzung des Gleichgewichts mit sich. Der effektive Elastizitätstensor ist demnach das Volumenmittel des Elastizitätstensors \mathbf{C} der einzelnen Phasen.

$$\mathbf{C}_{Voigt}^{eff} = \frac{1}{V} \int_{\Omega} \mathbf{C} \, dV \quad (3.4)$$

Hingegen beruht die von Reuss (1929) formulierte Abschätzung auf der Annahme konstanter Spannungen, d.h. der Vernachlässigung von Spannungsfluktuationen. Dies bedeutet eine Verletzung der Kinematik. Die effektive Nachgiebigkeit wird dementsprechend als Volumenmittel der Nachgiebigkeit der einzelnen Komponenten \mathbf{C}^{-1} definiert.

$$\mathbf{C}_{Reuss}^{eff} = \left[\frac{1}{V} \int_{\Omega} \mathbf{C}^{-1} \, dV \right]^{-1} \quad (3.5)$$

Hill (1952) wies die Grenzeigenschaften der Approximationen von Voigt und Reuss bezüglich des tatsächlichen effektiven Elastizitätstensors \mathbf{C}^{eff} nach, siehe auch Sab (1992). Hinsichtlich der Eigenwerte der Elastizitätstensoren gilt nach Hill (1952)

$$\mathbf{C}_{Reuss}^{eff} \leq \mathbf{C}^{eff} \leq \mathbf{C}_{Voigt}^{eff} . \quad (3.6)$$

Diese einfach zu bestimmenden Grenzen liegen, wie man an Bild 3.4 erkennen kann, sehr weit auseinander und sind deshalb nur von untergeordneter praktischer Bedeutung. Sie gelten für isotrope Mikrostrukturen und ziehen die Geometrie der Einschlüsse nicht in Betracht.

- **Hashin–Shtrikman–Grenzen**

Die "schärfsten" Grenzen für isotrope Materialien, ohne die Geometrie der Mikrostruktur zu berücksichtigen, sind die Schranken nach Hashin & Shtrikman (1962, 1963). Sie basieren auf Va-

riationsprinzipien und dem Verfahren nach Eshelby (1957). Die höhere Genauigkeit der Hashin–Shtrikman–Grenzen (HS_oben und HS_unten) im Vergleich zu den Reuss–Voigt–Grenzen kann man an Bild 3.4 erkennen.

- **Abschätzungen**

Viele Approximationsmethoden, wie beispielsweise die selbstkonsistente Methode (SK) nach Halpin & Kardos (1976) basieren auf Eshelby's Einbettungsverfahren (Eshelby (1957)). Dieses Einbettungsverfahren gibt die analytische Lösung der effektiven Eigenschaften für einen elliptischen Einschluss in einer unendlich ausgedehnten Matrix an. Hierbei wird der sogenannte Eshelby–Tensor S eingeführt, der den linearen Zusammenhang $\tilde{\epsilon} = S : \epsilon^*$ zwischen den Transformationsverzerrungen ϵ^* des Einschlusses und den Fluktuationsverzerrungen $\tilde{\epsilon} = \epsilon - \bar{\epsilon}$ herstellt. Die Transformationsverzerrungen sind die Verzerrungen, die der Einschluss erfährt, wenn er spannungsfrei aus der ihn umgebenden Matrix ausgebaut wird. Dieses Ergebnis wurde von Tanaka & Mori (1972) und Mori & Tanaka (1973) auf einen Mehrphasenverbund erweitert.

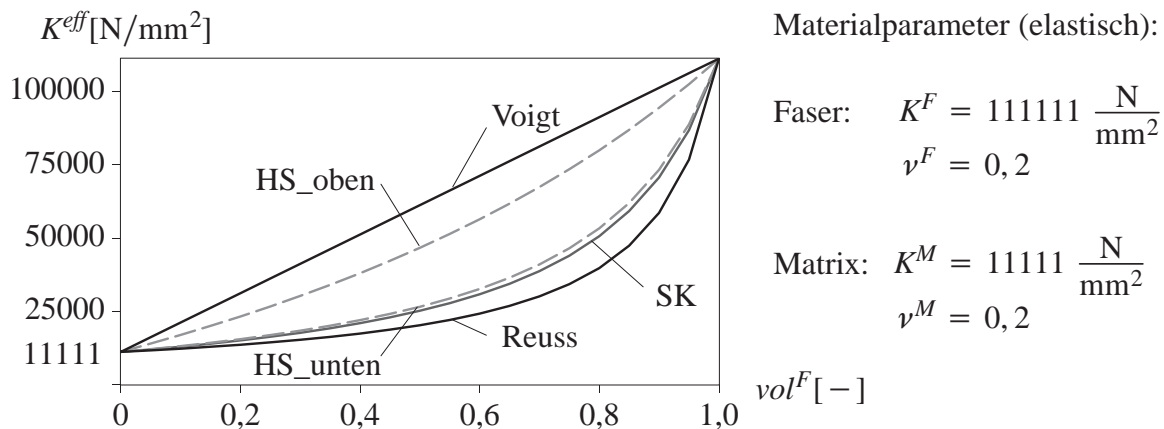


Bild 3.4: Analytische Grenzen und Schätzungen des effektiven Kompressionsmoduls

3.2.2 Numerische ungekoppelte Homogenisierungsverfahren

Die beschränkte Anwendbarkeit analytischer Verfahren ist der Ansatzpunkt numerischer Homogenisierungsmethoden. Wie von Huet (1990) nachgewiesen, liegen numerisch ermittelte Abschätzungen der effektiven Materialsteifigkeit in jedem Fall innerhalb der Voigt–Reuss–Grenzen. Die numerischen Abschätzungen konvergieren mit zunehmender Größe d_{RVE} des RVEs zur tatsächlichen effektiven Materialsteifigkeit C^{eff} , bei Verschiebungsrandbedingungen (VRB) von oben, bei Spannungsrandbedingungen (SRB) von unten. Für die Eigenwerte der effektiven Elastizitätstensoren gilt:

$$C_{Reuss}^{eff} \leq C_{SRB, d_{RVE}^1}^{eff} \leq C_{SRB, d_{RVE}^2}^{eff} \leq C^{eff} \leq C_{VRB, d_{RVE}^2}^{eff} \leq C_{VRB, d_{RVE}^1}^{eff} \leq C_{Voigt}^{eff} \quad (3.7)$$

Hierbei sei $d_{RVE}^1 < d_{RVE}^2$. Im elastischen Fall enthält der effektive Elastizitätstensor \mathbf{C}^{eff} maximal 21 unabhängige Materialparameter (keinerlei Materialsymmetrien). Diese Parameter werden durch Beanspruchungstests am RVE bestimmt: Ausgehend von einem grobskaligen Beanspruchungszustand $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$ bzw. $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$ wird das Randwertproblem im RVE mit Randbedingungen nach Bild 3.3 formuliert und numerisch gelöst. Die effektiven Spannungen $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$ bei Beanspruchung durch $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$ bzw. die effektiven Verzerrungen $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$ bei Beanspruchung durch $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$ werden durch Mittelung nach Gleichung (3.2) bzw. (3.1) bestimmt. Durch Auswertung des Zusammenhangs

$$\begin{bmatrix} \bar{\sigma}_{11} & \bar{\sigma}_{22} & \bar{\sigma}_{33} & \bar{\sigma}_{12} & \bar{\sigma}_{13} & \bar{\sigma}_{23} \end{bmatrix}^T = \mathbf{C}^{eff} \begin{bmatrix} \bar{\varepsilon}_{11} & \bar{\varepsilon}_{22} & \bar{\varepsilon}_{33} & \bar{\varepsilon}_{12} & \bar{\varepsilon}_{13} & \bar{\varepsilon}_{23} \end{bmatrix}^T \quad (3.8)$$

zwischen den effektiven Spannungen und effektiven Verzerrungen in Matrix–Vektor–Notation können je Beanspruchungstest sechs effektive Elastizitätskonstanten bestimmt werden, siehe Hashin (1983). Für den allgemeinen Fall von 21 unabhängigen Elastizitätskonstanten ist daher die Auswertung von vier linear unabhängigen Belastungszuständen notwendig, um den effektiven Elastizitätstensor \mathbf{C}^{eff} zu ermitteln.

Im inelastischen Fall ist die Formulierung eines effektiven Werkstoffgesetzes in geschlossener Form nicht eindeutig, d.h. nicht ohne Annahmen möglich. Zohdi et al. (1998) entwickelten ein Verfahren, bei dem für zunehmende Beanspruchungsniveaus im RVE jeweils die Sekantensteifigkeiten ermittelt werden. Diese können dann für grobskalige Berechnungen herangezogen werden. Döbert (2001) dagegen schlägt vor, ein effektives Werkstoffgesetz in geschlossener Form mit internen Variablen zur phänomenologischen Berücksichtigung des inelastischen Verhaltens zu postulieren. Zur Ermittlung der effektiven Materialparameter, zu denen neben den elastischen Konstanten \mathbf{C}_{el}^{eff} die Evolutionsgleichungen der internen Variablen \mathbf{q} zählen, führt sie Belastungstests am RVE durch. Die Materialparameter der effektiven konstitutiven Beziehungen werden durch folgendes Optimierungsproblem identifiziert:

$$\frac{1}{2} \|\boldsymbol{\sigma}^{eff}(\mathbf{C}_{el}^{eff}, \mathbf{q}) - \bar{\boldsymbol{\sigma}}^{RVE}\|^2 \rightarrow MIN . \quad (3.9)$$

Es wird also eine Fehlerquadratminimierung zwischen den im RVE ermittelten effektiven Spannungen $\bar{\boldsymbol{\sigma}}^{RVE}$ und den effektiven Spannungen $\boldsymbol{\sigma}^{eff}(\mathbf{C}_{el}^{eff}, \mathbf{q})$ des postulierten Werkstoffgesetzes durchgeführt.

3.2.3 Numerische gekoppelte Homogenisierungsverfahren

Gekoppelte Homogenisierungsverfahren werden bei komplexen nichtlinearen Vorgängen auf der Feinskala eingesetzt, um die Genauigkeitsverluste ungekoppelter Homogenisierungsverfahren, die durch Annahmen bezüglich eines effektiven Werkstoffgesetzes entstehen, zu vermeiden. Die Formulierung des konstitutiven Verhaltens findet hierbei ausschließlich auf der Feinskala statt. In einem verschiebungstriebenen Algorithmus wird zu jedem Beanspruchungsniveau $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}(\bar{\mathbf{x}})$ des grobskaligen Randwertproblems (RWP) in allen betrachteten grobskaligen Materialpunkten $\bar{\mathbf{x}}$ das Randwertproblem des zugehörigen RVEs gelöst. Randbedingungen an die RVEs sind entsprechend Bild 3.3 zu formulieren und die nichtlinearen Randwertprobleme in den RVEs

können beispielsweise mit der Methode der Finiten Elemente, der *Voronoi-Zellen-Methode* (Gosh et al. (1996)) oder durch Fouriertransformationen (Michel et al. (2000)) numerisch gelöst werden. Im darauf folgenden Homogenisierungsprozess werden jeweils die momentanen effektiven Spannungen $\bar{\sigma}$ (Gleichung (3.2)) und die effektive Materialtangente C_{\tan}^{eff} im betrachteten Punkt \bar{x} bestimmt. Damit können die Systemsteifigkeit und die internen Kräfte auf der Grob- skala berechnet werden, siehe Bild 3.5.

Die Formulierung von Spannungsrandbedingungen ist auch in einem verschiebunggetriebenen Algorithmus möglich. So bringen z.B. Miehe & Koch (2002) die Spannungsrandbedingung als Nebenbedingung mittels *Lagrange-Multiplikatoren* in die Formulierung des feinskaligen Randwertproblems ein. Die Lagrange-Multiplikatoren stellen dabei die gesuchten effektiven Spannungen $\bar{\sigma}$ dar und die Nebenbedingung kann durch Umformung über die effektiven Verzerrungen parametrisiert werden.

Die effektive konsistente Materialtangente C_{\tan}^{eff} kann nach Miehe (1996) durch numerische Differentiation, unter Ausnutzung der Beziehung zwischen der Variation der effektiven Spannungen und der Variation der effektiven Verzerrungen, bestimmt werden. Alternativ kann die diskrete schwache Form im RVE auf die Freiheitsgrade am Rand des RVEs kondensiert werden. Über die Beziehung zwischen diesen Randfreiheitsgraden und den effektiven Spannungs- und Verzerrungsinkrementen kann die konsistente effektive Materialtangente direkt ermittelt werden, siehe Kousznetsova (2002). Miehe & Koch (2002) beschreiben das adäquate Vorgehen für Randbedingungen, die als Nebenbedingungen mit Lagrange-Multiplikatoren formuliert werden und Bayreuther (2004) für Randbedingungen, die als Nebenbedingungen mit der *Strafterm-Methode* formuliert werden.

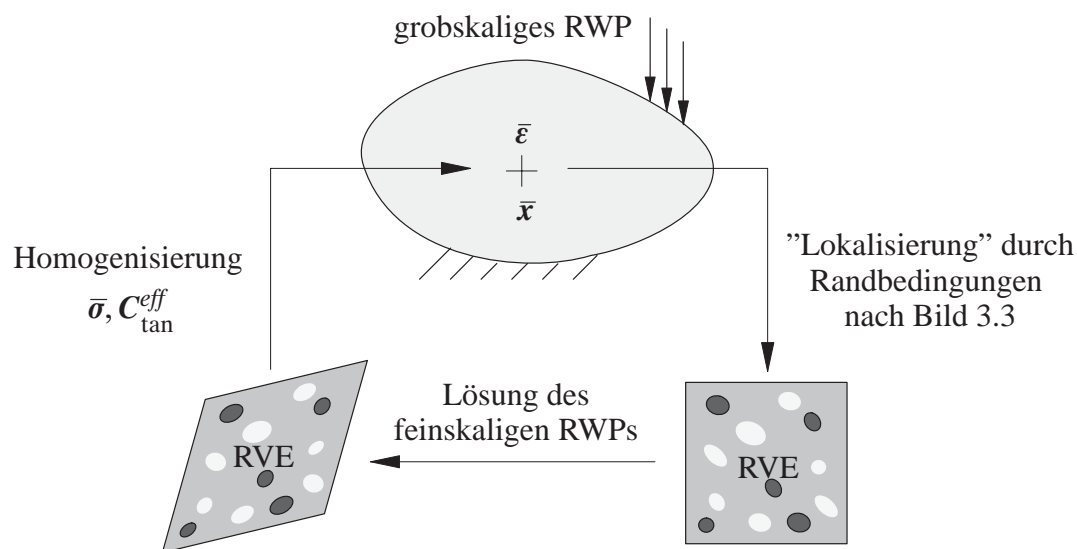


Bild 3.5: Gekoppelte numerische Homogenisierung in einem verschiebunggetriebenen Algorithmus

3.3 Keine Skalenseparation – hierarchische Mehrskalmethoden

Mehrskalprobleme ohne Skalenseparation, deren Formulierung und Untersuchung im besonderen Interesse dieser Arbeit liegen, erfordern in Teilbereichen der Struktur eine 1 : 1 Auflösung der feinen Skala – auch als volumenverbindender Skalenübergang bezeichnet (Bild 3.1). Da entsprechende Mehrskalmethoden die grobskalige Lösung hierarchisch verfeinern (Bild 3.6), werden sie in der vorliegenden Arbeit als *hierarchische Mehrskalmethoden* bezeichnet. Neben Materialien mit Mikrostruktur im entfestigenden Beanspruchungsbereich sind Probleme mit lokalen Effekten typische Beispiele, für die der Einsatz hierarchischer Mehrskalmodelle sinnvoll sein kann. Solche lokalen Effekte können beispielsweise Bereiche hoher Gradienten bei Lokalisierungsphänomenen oder in Form von Schockfronten bei dynamischen Prozessen sein oder Bereiche komplexer Geometrie sowie turbulente Strömungen.

In der Praxis ist das *Detaillieren lokaler Probleme (zoomen)* schon seit langem üblich (Kemmler & Ramm (2001)). Ausgehend von einer grobskaligen Analyse der gesamten Struktur Ω werden in den Teilbereichen, die einer detaillierteren Untersuchung bedürfen, feinskalig aufgelöste Nachlaufrechnungen durchgeführt nach dem *Prinzip von de St. Venant* (Ramm (2002)). Diese Teilbereiche (z.B. die Umgebung eines Anschlussdetails) werden im Folgenden als *Zweiskalengebiet* Ω' bezeichnet. Die Randbedingungen für die Detailprobleme werden der grobskaligen Analyse entnommen. Aufgrund der fehlenden Rückkopplung von der feinen zur groben Skala kann, insbesondere bei nichtlinearem Verhalten, der Genauigkeitsverlust im Vergleich zu einer Feinskalenlösung (FSL) groß werden und bleibt im Allgemeinen unkontrolliert.

Eine Weiterentwicklung dieses Vorgehens sind die sogenannten *global–local–Verfahren* (Mote (1971), Noor (1986), Mao & Sun (1991), Whitcomb (1991)). Sie sehen eine iterative Verbesserung der Randbedingungen an die feinskaligen Detailprobleme vor. Darauf aufbauend nutzen die *spectral overlay method* (Belytschko et al. (1990)) und die *s–version (superposition)* der FEM (Fish (1992)) die Kenntnis des qualitativen Lösungsverlaufs, um problemangepasste Ansätze für den feinskaligen Lösungsanteil zu entwickeln. Rank (1993) und Krause & Rank (2003) verwenden das global–local–Verfahren als adaptive, hierarchische hp–Diskretisierungsverfeinerung, alternativ zu üblichen h–, p– oder hp–Versionen der FEM. Für heterogene elastische Materialien schlagen Zohdi et al. (1996) die *HDPM (Homogenized Dirichlet Projection Method)* vor. Für die grobskalige Analyse wird dabei das Werkstoffverhalten homogenisiert. Einer a posteriori Fehleranalyse entsprechend werden die Zweiskalengebiete festgelegt und dort die Feinskalenprobleme unter Berücksichtigung der tatsächlichen heterogenen Materialstruktur gelöst. Nach einer weiteren Fehleranalyse wird entschieden, ob eine iterative Verbesserung der Ergebnisse durch Vergrößerung der Zweiskalengebiete oder durch eine Verbesserung der homogenisierten Ersatzigenschaften für das grobskalige Gesamtmodell notwendig sind. Die *bridging multi–scale method* wird von Kadowaki & Liu (2004) zur Analyse von Lokalisierungsproblemen eingeführt.

Ein mit den global–local–Verfahren verwandtes Vorgehen ist der *coupled volume approach* von Gitman (2006) für Anwendungen mit mikroheterogenen Materialien im nachkritischen Beanspruchungsbereich. Die Zweiskalengebiete sind dabei Teilbereiche der Grobskalenelemente, die den jeweiligen Integrationspunkten der Grobskala zugeordnet sind.

Brezzi et al. (1997) und Hughes et al. (1998) stellen eine rigorose variationelle Herleitung hierarchischer Mehrskalenmethoden, die sie als *variational multiscale methods* bezeichnen, vor und zeigen die Analogie zu Stabilisierungsverfahren. Dieses für allgemein gehaltene Differentialgleichungen notierte Konzept wurde u.a. von Garikipati & Hughes (1998, 2000) auf Lokalisierungsphänomene in homogenen Materialien, von Masud (2004) zur Stabilisierung bei inkompressiblen plastischen Materialien, von Gravemeier (2003) für die *large eddy simulation* turbulenter Strömungen und von Hund & Ramm (2006) und Hettich et al. (2006) auf das nichtlineare Verhalten heterogener Werkstoffe angewendet.

Folgende Darstellungen sind aus Gründen der Übersichtlichkeit für den Fall *eines* Zweiskalengebiets notiert.

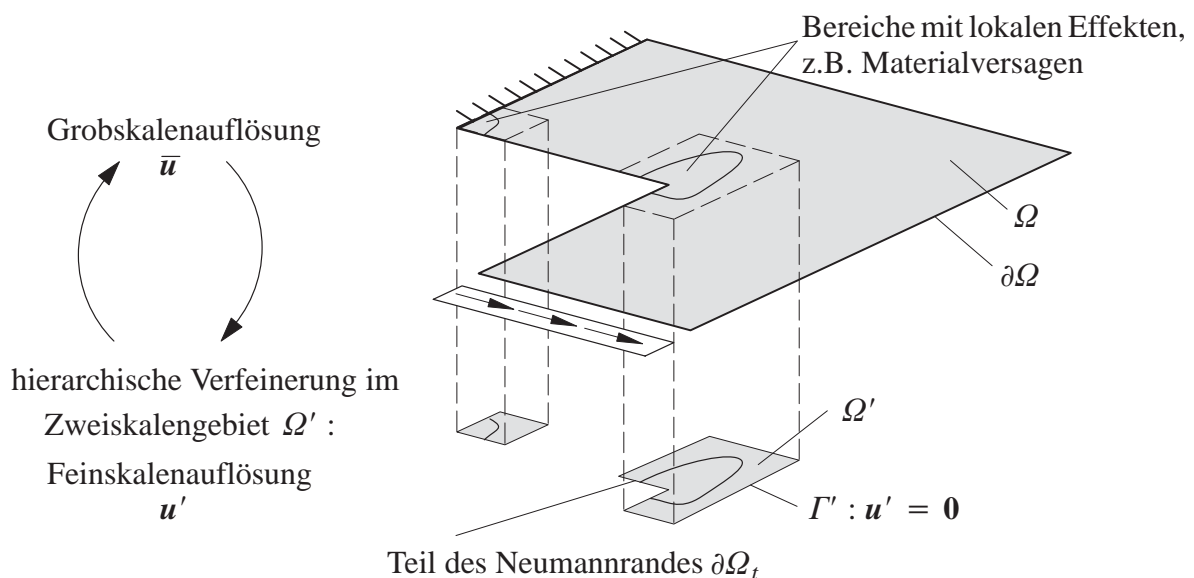


Bild 3.6: Hierarchische Mehrskalenmethoden

Die Formulierung hierarchischer Mehrskalenmethoden basiert auf additiver Anreicherung der grobskaligen Lösung \bar{u} durch den feinskaligen Lösungsanteil u' im Zweiskalengebiet Ω' (Bild 3.6).

$$u = \bar{u} + u' \quad (3.10)$$

Bei Diskretisierung mit Finiten Elementen auf beiden Skalen ($\bar{u} := \bar{N} \bar{d}$ und $u' := N' d'$) und Einführung des additiven Splitts für die Testfunktionen

$$\delta u = \delta \bar{u} + \delta u' \quad (3.11)$$

wird aus der schwachen Form (z.B. Gleichung (2.8)) ein diskretes Zweiskalenproblem der allgemeinen Form:

$$\begin{aligned}
\text{Grobskalenproblem:} & \quad \left[\int_{\Omega} \bar{\mathbf{B}}^T \boldsymbol{\sigma}(\bar{\mathbf{D}}, \mathbf{D}') dV \right] = \begin{bmatrix} \bar{\mathbf{F}}_{ext} \\ \mathbf{F}'_{ext} \end{bmatrix}, & \quad \text{(a)} \\
\text{Feinskalenproblem:} & \quad \left[\int_{\Omega} \mathbf{B}'^T \boldsymbol{\sigma}(\bar{\mathbf{D}}, \mathbf{D}') dV \right] = \begin{bmatrix} \bar{\mathbf{F}}_{ext} \\ \mathbf{F}'_{ext} \end{bmatrix}, & \quad \text{(b)}
\end{aligned} \tag{3.12}$$

bzw. in linearisierter Form:

$$\begin{aligned}
\text{Grobskalenproblem:} & \quad \underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{K}_{\bar{\mathbf{D}}\bar{\mathbf{D}}} & \mathbf{K}_{\bar{\mathbf{D}}\mathbf{D}'} \\ \mathbf{K}_{\mathbf{D}'\bar{\mathbf{D}}} & \mathbf{K}_{\mathbf{D}'\mathbf{D}'} \end{bmatrix}}_{\text{Systemsteifigkeit}} \begin{bmatrix} \Delta \bar{\mathbf{D}} \\ \Delta \mathbf{D}' \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} \bar{\mathbf{F}}_{ext} - \bar{\mathbf{F}}_{int} \\ \mathbf{F}'_{ext} - \mathbf{F}'_{int} \end{bmatrix}}_{\text{Residuum}}, & \quad \text{(a)} \\
\text{Feinskalenproblem:} & \quad \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{\bar{\mathbf{D}}\bar{\mathbf{D}}} & \mathbf{K}_{\bar{\mathbf{D}}\mathbf{D}'} \\ \mathbf{K}_{\mathbf{D}'\bar{\mathbf{D}}} & \mathbf{K}_{\mathbf{D}'\mathbf{D}'} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta \bar{\mathbf{D}} \\ \Delta \mathbf{D}' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{\mathbf{F}}_{ext} - \bar{\mathbf{F}}_{int} \\ \mathbf{F}'_{ext} - \mathbf{F}'_{int} \end{bmatrix}. & \quad \text{(b)}
\end{aligned} \tag{3.13}$$

Hierbei sind $\bar{\mathbf{D}}$ und \mathbf{D}' die grob- und feinskaligen Systemfreiheitsgrade. Neben der Frage, wo und wie groß die Zweiskalengebiete Ω' anzusetzen sind, die mit der Formulierung von Randbedingungen für \mathbf{u}' auf dem Rand der Zweiskalengebiete Γ' einhergeht, unterscheiden sich die Mehrskalmethoden durch die Modelle auf der groben und feinen Skala und die jeweilige Diskretisierung von $\bar{\mathbf{u}}$ und \mathbf{u}' sowie den Lösungsalgorithmus des Zweiskalenproblems (3.12) bzw. (3.13).

- **Lage und Größe der Zweiskalengebiete und Randbedingungen für \mathbf{u}'**

Bei statischen Problemen klingt der feinskalige Lösungsanteil \mathbf{u}' mit zunehmender Entfernung von der Störstelle aufgrund des diffusiven Charakters der elliptischen Differentialgleichung ab. Darauf beruht die Idee des lokalen Detaillierens in begrenzten Zweiskalengebieten Ω' . Zweiskalengebiete sind dort zu etablieren, wo entweder das Interesse an einer detaillierteren Lösung als der grobskaligen besteht, oder wo aufgrund einer Fehleranalyse festgestellt wird, dass die gewünschte Genauigkeitstoleranz durch die grobskalige Lösung nicht eingehalten wird, siehe Fish & Markolefas (1993) sowie Zohdi et al. (1996). Im Rahmen dieser Arbeit sind das die Bereiche des Materialversagens, in denen keine Skalenseparation angenommen werden kann, siehe Abschnitt 4.2.1. Als Randbedingung für den feinskaligen Lösungsanteil wird wegen des abklingenden Verhaltens $\mathbf{u}' = \mathbf{0}$ auf Γ' angenommen. Voraussetzung hierfür ist, dass das Zweiskalengebiet Ω' so groß gewählt wird, dass diese Annahme gerechtfertigt ist. Eine Möglichkeit zur Kontrolle dieser Annahme stellt Zohdi et al. (1996) vor. Grenzt Ω' an den Neumannrand $\partial\Omega_t$ des Gesamtgebiets, so ist es sinnvoll, dort die tatsächlichen Randbedingungen zu verwenden (siehe Bild 3.6), anstatt wie Belytschko et al. (1990) $\mathbf{u}' = \mathbf{0}$ anzunehmen.

- **Modelle und Ansätze auf der Grob- und Feinskala**

Das grobskalige Strukturverhalten kann für die meisten Anwendungen durch ein Kontinuumsmodell beschrieben werden, diskretisiert durch Finite Elemente. Die Modellierung des feinskaligen Verhaltens ist sehr stark von der jeweiligen Problemstellung abhängig und reicht von Kontinuumsmodellen bis zu atomaren Modellen (Belytschko & Xiao (2003), Ortiz et al. (2001), Liu et al. (2006)). Falls bekannt, können natürlich auch analytische Lösungen für \mathbf{u}' verwendet wer-

den (Farhat et al. (2001)). Für die Diskretisierung von Kontinuumsmodellen haben sich sowohl Finite Elemente (Krause & Rank (2003), Gravemeier (2003), Masud (2004), Hund & Ramm (2005)) als auch *netzfreie Methoden* (Liu et al. (1999)) etabliert. Als Erweiterung des Kontinuumsmodells im Fall hoher Gradienten hat sich die Verwendung spezieller Ansätze, die der Lösung des Problems angepasst sind, als sinnvoll erwiesen (Belytschko et al. (1990), Fish (1992), Garikipati & Hughes (2000), Garikipati (2002)). Hettich et al. (2006) verwenden auf der feinen Skala eXtended FEM (XFEM)–Ansätze für die Berücksichtigung der Risskinematik.

Werden auf beiden Skalen Kontinuumsmodelle eingesetzt, kann, wie in dieser Arbeit vorgeschlagen wird, auf die Formulierung eines grobskaligen Materialgesetzes verzichtet werden. Zur Berechnung der Grobskalensteifigkeiten und der grobskaligen internen Kraft (Gleichung (3.13) (a)) wird dann das jeweilige Materialverhalten auf der Feinskala herangezogen. So können Konsistenzprobleme zwischen den Skalen vermieden werden und die Mehrskalenformulierung erreicht die Genauigkeit der entsprechenden Feinskalenformulierung, wie sich in Beispielen (Kapitel 6, 7) zeigen wird.

Zur Reduktion des numerischen Aufwands ist es jedoch auch möglich, unterschiedliche Materialmodelle auf den Skalen einzuführen (Bild 3.7). So können beispielsweise ein phänomenologisches Materialmodell für das Grobskalenproblem (Gleichung (3.12) (a)) und detaillierte Materialmodelle, die das Verhalten der einzelnen Materialkomponenten erfassen, für das Feinskalenproblem (Gleichung (3.12) (b)) verwendet werden (Zohdi et al. (1996)). Ebenso können verschiedene mechanische Modelle, wie ein Kontinuumsmodell auf der Grob– mit einem Molekularmodell auf der Feinskala kombiniert werden (Fish & Chen (2003), Liu et al. (2006)). Erstrecken sich dabei die Grob– und Feinskalenmodelle über das gleiche Gebiet, so sind die Formulierungen auf den beiden Skalen nicht unbedingt konsistent. Das äußert sich z.B. darin, dass mit dem Grobskalenmodell berechneten Spannungen $\bar{\sigma}(\bar{\epsilon}_P + \epsilon'_P, \mathbf{q}_P)$ in einem Punkt P nicht exakt mit den tatsächlichen Spannungen $\sigma(\bar{\epsilon}_P + \epsilon'_P, \mathbf{q}_P)$, die sich aus dem Feinskalenmodell ergeben, übereinstimmen. Das Mehrskalenmodell stellt dann zwangsläufig nur eine Näherung der entsprechenden Feinskalenlösung dar.

Diese Konsistenzprobleme entstehen nicht, wenn die verschiedenen Grob– und Feinskalenmodelle in unterschiedlichen Gebieten eingesetzt werden (Belytschko & Xiao (2003)), oder wenn das Feinskalenmodell eine lokale, infinitesimal begrenzte Anreicherung der Grobskalenlösung darstellt, z.B. im Sinne der eXtended FEM zur Abbildung von Rissen (Garikipati (2002), Hettich et al. (2006)).

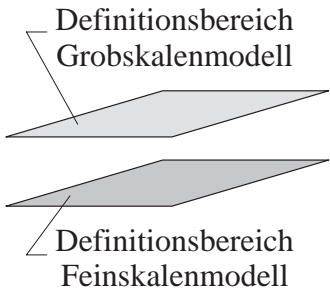
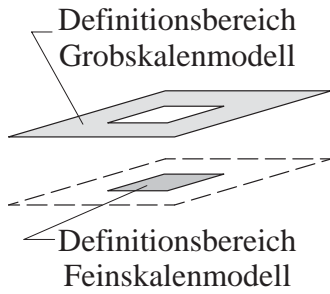
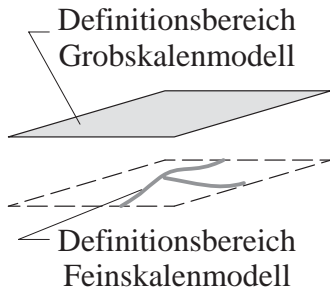
Grob- und Feinskalenmodell im gleichen Gebiet	Grob- und Feinskalenmodell in verschiedenen Gebieten	Feinskalenmodell in infinit. Gebiet (Riss)
 <p>Definitionsbereich Grobkalenmodell</p> <p>Definitionsbereich Feinskalenmodell</p>	 <p>Definitionsbereich Grobkalenmodell</p> <p>Definitionsbereich Feinskalenmodell</p>	 <p>Definitionsbereich Grobkalenmodell</p> <p>Definitionsbereich Feinskalenmodell</p>
<p>Wechsel des mechanischen Modells zwischen den Skalen</p> <p>Konsistenz zwischen den Skalen? → Näherung</p>	<p>strebt zur Feinskalenlösung mit Ausdehnung des Feinskalenbereichs</p>	<p>erfasst Feinskalenverhalten</p>
<p>Zohdi et al. (1996) (versch. Materialmodelle)</p> <p>Gravemeier et al. (2003) (turbulente Strömung)</p> <p>Fish & Chen (2003), Liu et al. (2006) (Kontinuumsmodell und Molekularmodell)</p>	<p>Belytschko & Xiao (2003) (Kontinuumsmodell und Molekularmodell)</p>	<p>Garikipati (2002), Hettich et al. (2006) (schwache bzw. starke Diskontinuitäten (Risse))</p>

Bild 3.7: Umsetzung unterschiedlicher Modelle auf Grob- und Feinskala

Die Ansätze für die grob- und feinskali- gen Lösungsanteile und Testfunktionen müssen die lineare Unabhängigkeit von $\bar{\mathbf{u}}$ und \mathbf{u}' , sowie von $\delta\bar{\mathbf{u}}$ und $\delta\mathbf{u}'$ gewährleisten. Während die meisten in der Literatur beschriebenen Verfahren \mathbf{u}' als hierarchische Verfeinerung von $\bar{\mathbf{u}}$ einführen, lassen Belytschko et al. (1990) und, darauf aufbauend, Fish (1992) diese Beschränkung fallen. In diesem Fall ist die numerische Integration der koppelnden Steifigkeitsbeiträge $\mathbf{K}_{\bar{D}D'}$ und $\mathbf{K}_{D'\bar{D}}$ besonders zu beachten. Um das Zweiskalenmodell in Bezug auf Genauigkeit und Effizienz optimal zu gestalten, ist man bei der Wahl der Ansätze für $\bar{\mathbf{u}}$ und \mathbf{u}' mit folgenden Fragestellungen konfrontiert, die in Kapitel 6 aufgegriffen werden:

- Wie grob darf die Diskretisierung für $\bar{\mathbf{u}}$ sein, damit der Diskretisierungsfehler der grobskali- gen Lösung in den Bereichen außerhalb des Zweiskalengebiets tolerierbar ist und damit der Transfer zwischen den Skalen genau genug ist?
- Wie fein ist die Diskretisierung für \mathbf{u}' zu wählen, damit die feinskali- gen Effekte erfasst werden können?

- Wie sieht die optimale Abstimmung zwischen grob- und feinskaliger Diskretisierung im Hinblick auf ein effizientes Lösungsverfahren aus, falls die Diskretisierungen aneinander geknüpft sind?

- **Lösung des Zweiskalengleichungssystems**

- a) **Partitionierte Lösung**

Sowohl die zooming- und global-local-Methoden als auch die von Ibrahimbegovic & Markovic (2003) beschriebene *operator-split-Methode* lösen das Zweiskalenproblem (3.12) entkoppelt (*partitioniert*) als Grobskalenproblem in Ω und Detailprobleme in Ω' . Bei Verwendung unterschiedlicher Modelle auf den beiden Skalen (z.B. Kontinuums- und Atommodell) ist die Umsetzung im Rahmen eines partitionierten Lösungsalgorithmus sehr einfach möglich und erlaubt die Verwendung unabhängiger Softwaremodule auf beiden Skalen. Ein weiterer Grund zur Verwendung eines partitionierten Lösungsverfahrens kann die Reduktion des Speicheraufwandes sein: Liegen mehrere, räumlich getrennte Zweiskalengebiete und somit unabhängige Detailprobleme vor, können diese parallel gelöst werden.

Die bestehende Kopplung zwischen dem Grobskalen- und Feinskalenproblem wird durch die Übergabe der jeweiligen Lösung des anderen Feldes berücksichtigt. Die skalenkoppelnden Terme $\mathbf{K}_{\overline{D}D'} \Delta \mathbf{D}'$ bzw. $\mathbf{K}_{D'\overline{D}} \Delta \overline{\mathbf{D}}$ des Zweiskalenproblems (Gleichung (3.13)) werden als Nebenbedingungen auf die rechte Seite gebracht. Ausgehend von dieser Zerlegung in zwei Teilprobleme erfolgt die inkrementell-iterative Lösung des Zweiskalenproblems nach Algorithmus 3.1.

-
- (i) Initialisierung: $\overline{\mathbf{D}} = \mathbf{0}, \mathbf{D}' = \mathbf{0}$
 - (ii) Globale Lastschrittschleife (Index k)
 - (iii) Iterationsschleife (Gesamtmodell) (Index i)
 - (iv) Iterationsschleife (Grobskala) (Index j)
 - (v) Löse in Ω Grobskalenproblem (3.13) (a) mit Nebenbedingung $\mathbf{D}' = \mathbf{D}'_i \equiv \text{konst}$, d.h. $\Delta \mathbf{D}'^{j+1} = \mathbf{0}$. \rightarrow Lösung $\overline{\mathbf{D}}_{i+1}^{j+1}$
 - (vi) keine Konvergenz: $j \leftarrow j + 1$ goto (iv), sonst: $\overline{\mathbf{D}}_{i+1} = \overline{\mathbf{D}}_{i+1}^{j+1}$
 - (vii) Iterationsschleife (Feinskala) (Index j)
 - (viii) Löse in Ω' Feinskalenproblem (3.13) (b) mit Nebenbedingung $\overline{\mathbf{D}} = \overline{\mathbf{D}}_{i+1} \equiv \text{konst}$, d.h. $\Delta \overline{\mathbf{D}}^{j+1} = \mathbf{0}$. \rightarrow Lösung \mathbf{D}'_{i+1}^{j+1}
 - (ix) keine Konvergenz: $j \leftarrow j + 1$ goto (vii), sonst: $\mathbf{D}'_{i+1} = \mathbf{D}'_{i+1}^{j+1}$
 - (x) keine Konvergenz: $i \leftarrow i + 1$ goto (iii)
 - (xi) $k \leftarrow k + 1$ goto (ii)

Algorithmus 3.1 Partitionierte Lösung des Zweiskalenproblems

Der Lastschrittindex k wurde der Übersichtlichkeit halber in Algorithmus 3.1 nicht notiert. Bei linearen Problemen wird lediglich ein Lastschritt ausgeführt. Die Verwendung der "hinterher-

hinkenden" Lösung der jeweils anderen Skala als Nebenbedingung für das Grobskalen- bzw. Feinskalenproblem kann im Sinne von *Randbedingungen* (Übergabe der Lösung auf dem Rand Γ') oder durch die Übergabe der Lösung im gesamten Zweiskalengebiet Ω' erfolgen.

Die global-local-Methoden, die zooming-Methode und die operator-split-Methode übergeben *Randbedingungen* zwischen den Skalen. Diese Randbedingungen können als Verschiebungsrandbedingungen (dargestellt in Algorithmus 3.1) oder als Spannungsrandbedingungen realisiert werden. Da im zweiten Fall die Spannungsrandbedingungen auf Γ' im Gleichgewicht stehen müssen – was nicht automatisch der Fall ist – und Starrkörperverschiebungen zu verhindern sind, ist diese Variante aufwändiger und wenig verbreitet, vergleiche Zohdi et al. (2001).

Die zooming-Methode beendet den Lösungsalgorithmus 3.1 ohne Konvergenzkontrolle (Schritt (x)) nach dem ersten Iterationsschritt, d.h. ohne Rückkopplung zur groben Skala. Einige global-local-Methoden weichen von Algorithmus 3.1 dahingehend ab, dass das Grobskalenproblem nur einmal gelöst wird und die Verbesserung der Randbedingungen an die Feinskalenprobleme lediglich durch Aktualisierung der feinskaligen Lösungsanteile erfolgt.

Für den Fall, dass die Lösung der einen Skala im Zweiskalengebiet als Nebenbedingung für die Lösung auf der anderen Skala verwendet wird, kann der partitionierte Lösungsalgorithmus bei entsprechender Konstruktion der Gittertransferoperatoren als Mehrgitterverfahren interpretiert werden (siehe Abschnitt 3.4). So beschreiben Fish & Belsky (1995 a, b) ein Mehrgitterlöungsverfahren für elastische, periodisch heterogene Materialien. Die Besonderheit ist die Entwicklung eines physikalisch motivierten Gittertransfers auf Basis der *analytischen* Homogenisierung. Die Konstruktion des Transferoperators von der Fein- zur Grobskala (*Restriktion*) ist assoziiert mit der Homogenisierung, die des Transferoperators von der Grob- zur Feinskala (*Prolongation*) mit der "Lokalisierung". Diese Idee wurde von Bayreuther (2004) auf beliebig heterogene Materialien bei nichtlinearem Verhalten erweitert. Sein Ansatzpunkt war es, die Konzepte der *numerischen* Homogenisierung auf die Konstruktion von Gittertransferoperatoren zu abstrahieren. Fish & Chen (2004) nutzten den Gedanken des Skalentransfers durch Mehrgitterverfahren für die Kopplung diskreter Modelle auf der Atomebene mit Kontinuumsmodellen auf der Strukturebene. Gravemeier (2006) stellte ein Mehrgitterverfahren zur Lösung eines durch Finite Volumen diskretisierten Mehrskalensproblems für turbulente Strömungen inkompressibler Fluide vor. Der Restriktionsoperator wird analog zum strukturmechanischen Konzept der Homogenisierung über Volumenmittelwertbildung gewonnen.

b) Simultane Lösung

Für eine starke Kopplung zwischen den Skalen ist die Konvergenzrate des partitionierten Lösungsalgorithmus häufig unbefriedigend, so dass es empfehlenswert ist, das Zweiskalenproblem (3.12) bzw. (3.13) *simultan* zu lösen. Zur Reduktion von Lösungs- und Speicheraufwand bei simultaner Lösung haben sich Gebietszerlegungsmethoden (Brezzi et al. (1997), Garikipati & Hughes (2000), Ladevèze (1999, 2004), Zohdi & Wriggers (2001), Gravemeier (2003), Hund & Ramm (2006)) sowie weitere iterative Löser (Krause & Rank (2003), Farhat et al. (1998)) etabliert. Durch Zerlegung des ursprünglichen großen Gleichungssystems in viele kleine, entkoppelte Probleme, die parallel gelöst werden können, sind Gebietszerlegungsmethoden sehr effi-

ziert. Darüber hinaus ist das Zweiskalenmodell durch die Gebietszerlegung flexibel im Hinblick auf eine während des Belastungsprozesses veränderliche Größe des Zweiskalengebiets Ω' , beispielsweise bei sukzessiver Ausbreitung von Lokalisierungszonen. Wegen dieser Vorteile wird in der vorliegenden Arbeit eine nicht überlappende Gebietszerlegungsmethode zur Lösung des Feinskalenproblems (3.13) (b) eingesetzt. Der simultane Lösungsalgorithmus in Verbindung mit Gebietszerlegungsmethoden wird in Abschnitt 4.4 vorgestellt.

3.4 Effiziente Gleichungslösung

Hierarchische Mehrskalenmethoden führen auf große, im Allgemeinen unsymmetrische, dünn besetzte lineare Gleichungssysteme (Gleichung (3.13)) der allgemeinen Form $\mathbf{K} \mathbf{D} = \mathbf{F}$, deren effiziente Lösung ein wichtiges Thema für die vorliegende Arbeit ist. $\mathbf{K} \in \mathbb{R}^{n_{dof} \times n_{dof}}$ bezeichnet die Systemmatrix, $\mathbf{F} \in \mathbb{R}^{n_{dof}}$ die Beanspruchung und $\mathbf{D} \in \mathbb{R}^{n_{dof}}$ die gesuchte exakte Lösung des Gleichungssystems mit n_{dof} Freiheitsgraden. Aufgrund großer Steifigkeitsunterschiede zwischen intakten und geschädigten Bereichen der Struktur ist die Systemmatrix für die Anwendungen in dieser Arbeit meist schlecht konditioniert. Im folgenden Abschnitt wird angenommen, dass das betrachtete Gleichungssystem linear ist, d.h. im Rahmen einer nichtlinearen Analyse dreht es sich hier um die Lösung des linearisierten Gleichungssystems in einem Iterationsschritt der Gleichgewichtsiteration. Der Einfachheit halber wird der Vektor der Unbekannten in diesem Abschnitt mit \mathbf{D} statt mit $\Delta \mathbf{D}$ bezeichnet. Ein alternativer, hier nicht weiter verfolgter Zugang ist die Entwicklung von Lösungsverfahren für nichtlineare Gleichungssysteme, wie beispielsweise die sogenannte *L*Arge-*T*ime-*I*ncrements-Methode (LATIN) (Ladevèze (1999)) für dynamische Prozesse.

In Abschnitt 3.4.1 werden direkte und iterative Gleichungslöser mit ihren Vor- und Nachteilen gegenübergestellt. Gebietszerlegungsmethoden und Mehrgitterverfahren zur Konstruktion problemangepasster iterativer Gleichungslöser sind Thema der Abschnitte 3.4.2 und 3.4.3.

3.4.1 Direkte vs. iterative Gleichungslöser

Bei Lösungsmethoden für lineare Gleichungssysteme (LGS) wird zwischen *direkten* und *iterativen Lösern* unterschieden. Direkte Löser ermitteln die im Rahmen der Rechnergenauigkeit exakte Lösung \mathbf{D} des Gleichungssystems bei vorab bekanntem endlichem numerischem Aufwand. Dieser Aufwand, der in *floating point operations* (Quarteroni et al. (2000)) gemessen wird, nimmt mit $O(n_{dof}^3)$ zu bei Ausnutzung der Bandstruktur der Systemmatrix mit $O(n_{dof} b_k^2)$ (Golub & van Loan (1986)). b_k bezeichnet die Bandbreite der Systemmatrix. Vorteil direkter Löser ist, dass sie auch bei schlecht konditionierten Systemmatrizen robust sind. Ihr Nachteil ist, dass sie durch Parallelisierung nur mäßig beschleunigt werden können. Schon ab wenigen Prozessoren stagniert die Lösungszeit bei Hinzunahme weiterer Prozessoren, siehe Gee (2004).

Bei iterativen Lösern ist der numerische Aufwand zur Ermittlung der – im Rahmen einer gewählten Genauigkeitstoleranz – konvergierten Lösung nicht von vornherein bekannt. Er steigt auch im allgemeinen Fall einer vollbesetzten Systemmatrix nur mit $O(n_{dof}^2)$ je Iteration an, siehe

Quarteroni et al. (2000). Fedorenko (1964) stellte einen iterativen Löser vor, bei dem der Aufwand sogar nur mit $O(n_{dof})$ je Iteration wächst. Allerdings kann unter Umständen die Anzahl benötigter Iterationen ebenfalls mit steigender Anzahl an Freiheitsgraden zunehmen. Ein deutlicher Vorteil iterativer Löser ist es, dass sie eine wesentlich höhere Beschleunigung bei paralleler Umsetzung erreichen als direkte Löser.

Ob für ein gegebenes Problem eine iterative Lösung des Gleichungssystems schneller als eine direkte Lösung und gleichzeitig robust ist, hängt neben der Anzahl der Freiheitsgrade von vielen Einflussfaktoren ab. Dazu zählen das zugrunde liegende physikalische Problem, das die Konditionierung der Systemmatrix beeinflusst (z.B. materielle Nichtlinearität), die Umsetzung des jeweiligen Lösungsalgorithmus, die Programmiersprache, die verwendete Plattform, der Compiler, die Anzahl der Prozessoren usw.

Das zum *Gauß'schen Eliminationsverfahren* äquivalente direkte Lösungsverfahren für eine numerische (softwaretechnische) Umsetzung ist die sogenannte *LU-Faktorisierung*. Die Systemmatrix $\mathbf{K} = \mathbf{L} \mathbf{U}$ wird hierbei in die untere Dreiecksmatrix \mathbf{L} , mit Nulleinträgen oberhalb der Hauptdiagonalen, und in die obere Dreiecksmatrix \mathbf{U} , mit Nullbesetzung unterhalb der Hauptdiagonalen, zerlegt. Für diese Faktorisierung kann beispielsweise der Crout'sche Algorithmus (Quarteroni et al. (2000)) verwendet werden. Nulleinträge bzw. Einträge nahe Null auf der Hauptdiagonalen können durch das Vertauschen von Zeilen bzw. Spalten (*Pivotisierungsstrategien*) vermieden werden. Im Anschluss an die Faktorisierung wird $\mathbf{L} \tilde{\mathbf{D}} = \mathbf{F}$ durch Vorwärtssubstitution und daraufhin $\mathbf{U} \mathbf{D} = \tilde{\mathbf{D}}$ durch Rückwärtssubstitution gelöst. Details und algorithmische Umsetzungen sowie weitere direkte Lösungsverfahren, die ebenfalls auf Faktorisierungen der Systemmatrix beruhen, werden bei Quarteroni et al. (2000), Bathe (2002), Press et al. (1992) und Meister (2005) ausführlich beschrieben. Gee (2004) gibt Hinweise auf direkte Löserpakete in sequentieller und paralleler Ausführung.

Iterative Löser erzeugen eine Folge von Näherungslösungen \mathbf{D}^j , die im günstigen Fall gegen die exakte Lösung \mathbf{D} konvergieren. Statt von der Lösung \mathbf{D} wird im Zusammenhang iterativer Gleichungslöser häufig vom Fehler gesprochen. Der Fehler \mathbf{E}^j in der j -ten Iteration ist hierbei die Differenz zwischen exakter Lösung und approximativer Lösung im j -ten Iterationsschritt,

$$\mathbf{E}^j = \mathbf{D} - \mathbf{D}^j. \quad (3.14)$$

Dieser Fehler verursacht ein Residuum $\mathbf{R}^j = \mathbf{F} - \mathbf{K} \mathbf{D}^j = \mathbf{K} \mathbf{E}^j$. Die exakte Lösung könnte durch

$$\mathbf{D} = \mathbf{D}^{j+1} = \mathbf{D}^j + \mathbf{E}^j = \mathbf{D}^j + \mathbf{K}^{-1} \mathbf{R}^j \quad (3.15)$$

in einem Schritt direkt bestimmt werden. Um jedoch den Aufwand gering zu halten, verwenden iterative Löser nicht die inverse Systemmatrix \mathbf{K}^{-1} sondern eine Näherung davon, die als *Vorkonditionierer* \mathbf{B} bezeichnet wird. Dieser Vorkonditionierer soll möglichst einfach (kostengünstig) aufzustellen und anzuwenden sein und zur Gewährleistung einer hohen Konvergenzrate (Quarteroni et al. (2000)) möglichst genau sein, d.h. $\mathbf{B} \mathbf{K} \approx \mathbf{1}$. So entsteht aus Gleichung (3.15) der iterative Lösungsalgorithmus

$$\mathbf{D}^{j+1} = \mathbf{D}^j + \mathbf{B} \mathbf{R}^j. \quad (3.16)$$

Ein einfacher Vorkonditionierer ist die Inverse der Diagonalmatrix von \mathbf{K} , d.h. $\mathbf{B}_J = (\text{Diag}(\mathbf{K}))^{-1}$. Das zugehörige Lösungsverfahren wird als *Jacobi-Iteration* bezeichnet. Das Aufstellen und Anwenden dieses Vorkonditionierers erfordert nur geringen Aufwand. Dafür sind die Konvergenzeigenschaften der Jacobi-Iteration im Allgemeinen sehr schlecht, falls überhaupt Konvergenz eintritt. Die aufwändigere aber dafür robustere *Gauß-Seidel-Iteration* verwendet als Vorkonditionierer die Inverse der unteren Dreiecksmatrix \mathbf{L} der Systemmatrix, d.h. $\mathbf{B}_{GS} = \mathbf{L}^{-1}$. Weitere Vorkonditionierer basieren beispielsweise auf unvollständigen LU-Zerlegungen. Hierzu sei beispielsweise auf Hackbusch (1993) verwiesen.

Da nicht alle Vorkonditionierer Konvergenz zur tatsächlichen Lösung gewährleisten können oder die Konvergenzrate unbefriedigend niedrig ist, wie z.B. bei der Jacobi-Iteration, können gegebenenfalls sogenannte *Beschleuniger* – auch als *Relaxationsmethoden* bekannt – eingesetzt werden. Der beschleunigte Lösungsalgorithmus hat die allgemeine Form

$$\mathbf{D}_{be}^{j+1} = \mathbf{D}^j + \omega^j \mathbf{B} \mathbf{R}^j = \omega^j \mathbf{D}^{j+1} + (1 - \omega^j) \mathbf{D}^j . \quad (3.17)$$

Die beschleunigte Iterierte \mathbf{D}_{be}^{j+1} setzt sich also aus der aktuellen Iterierten \mathbf{D}^{j+1} (Gleichung (3.16)) und der letzten Iterierten \mathbf{D}^j zusammen, gewichtet durch den unter Umständen veränderlichen Beschleunigungsparameter ω^j . Die Konvergenz der iterativen Lösung nach Gleichung (3.17) ist mindestens linear, wenn die Bedingung $0 < \omega < 2/\lambda_{\max}(\mathbf{B})$ erfüllt ist, siehe z.B. Mok (2001). $\lambda_{\max}(\mathbf{B})$ ist der maximale Eigenwert des Vorkonditionierers. Das Auffinden eines geeigneten Beschleunigungsfaktors ω^j , der eine möglichst hohe Konvergenzgeschwindigkeit gewährleisten soll, ist im Allgemeinen nicht trivial. Als Beispiele sollen hier nur das *Gradientenverfahren* (Quarteroni et al. (2000) und Mok (2001)) und das *Aitken-Verfahren* (Aitken (1937), Irons & Tuck (1969)), das in dieser Arbeit angewendet wird, genannt werden. Das Aitken-Verfahren wurde von Aitken (1937) zur Beschleunigung der iterativen Bestimmung von Eigenwerten vorgeschlagen. Irons & Tuck (1969) beschreiben einen implementierungsfähigen Algorithmus zur Beschleunigung eines langsam konvergierenden modifizierten Newton-Verfahrens. Mit nur geringem zusätzlichem numerischem Aufwand wird der Beschleunigungsparameter folgendermaßen bestimmt.

$$\omega^j = 1 - \mu^j \quad \text{mit} \quad (3.18)$$

$$\mu^j = \mu^{j-1} + (\mu^{j-1} - 1) \frac{((\mathbf{D}_{be}^{j-1} - \mathbf{D}^j) - (\mathbf{D}_{be}^j - \mathbf{D}^{j+1}))^T (\mathbf{D}_{be}^j - \mathbf{D}^{j+1})}{(\mathbf{D}_{be}^{j-1} - \mathbf{D}^j) - (\mathbf{D}_{be}^j - \mathbf{D}^{j+1})^T (\mathbf{D}_{be}^{j-1} - \mathbf{D}^j) - (\mathbf{D}_{be}^j - \mathbf{D}^{j+1})}$$

Zur Konstruktion problemangepasster Vorkonditionierer und Beschleuniger für Gleichungssysteme, denen diskretisierte partielle Differentialgleichungen zugrunde liegen, haben sich *überlappende* und *nicht überlappende Gebietszerlegungsmethoden* sowie *Mehrgitterverfahren* etabliert. Aufgrund ihrer Bedeutung für die Lösung von Mehrskalenproblemen sind diese Verfahren Gegenstand der folgenden Abschnitte. Obwohl im Rahmen dieser Arbeit ausschließlich nicht überlappende Gebietszerlegungsmethoden als iterative Lösungsverfahren umgesetzt und untersucht werden, sollen der Vollständigkeit halber auch überlappende Gebietszerlegungsmethoden und Mehrgitterverfahren kurz vorgestellt werden. Die folgenden Darstellungen orientieren sich an Smith et al. (1996).

3.4.2 Gebietszerlegungsmethoden

Zur Lösung diskretisierter partieller Differentialgleichungen untergliedern Gebietszerlegungsmethoden das Gebiet Ω in n_{dom} Teilgebiete Ω_m , in denen jeweils lokal das zugrunde liegende Problem gelöst wird. Aus einem großen Problem mit vielen Freiheitsgraden werden so viele kleinere Probleme, die mit wesentlich geringerem Rechen- und Speicheraufwand verbunden sind. Ein wichtiges Thema ist die Formulierung von Randbedingungen an den zusätzlichen, durch die Gebietszerlegung eingeführten *Kopplungsrandern* Γ .

Als einführende Literatur können die Veröffentlichungen von Smith et al. (1996), le Tallec (1994), Wohlmuth (2001), Quarteroni & Valli (1999), Korneev & Langer (2004) und für den Sonderfall zweier physikalisch unterschiedlicher Felder die Dissertation von Mok (2001) empfohlen werden.

- **Überlappende Gebietszerlegungsmethoden**

Die Zerlegung des Gebietes Ω in Teilgebiete erfolgt bei überlappenden Gebietszerlegungsmethoden mit einer gewissen Überlappungsbreite δ , siehe Bild 3.8. Der Kopplungsrand des Gebiets Ω_m , der im Gebiet Ω_s liegt, wird mit Γ_{ms} bezeichnet. An den Kopplungsrandern Γ_{ms} sollten sowohl die Spannungen als auch die Verschiebungen der Teilgebiete Ω_m und Ω_s übereinstimmen. Die folgenden Darstellungen beschränken sich jedoch auf den Abgleich der Verschiebungen auf Γ_{ms} .

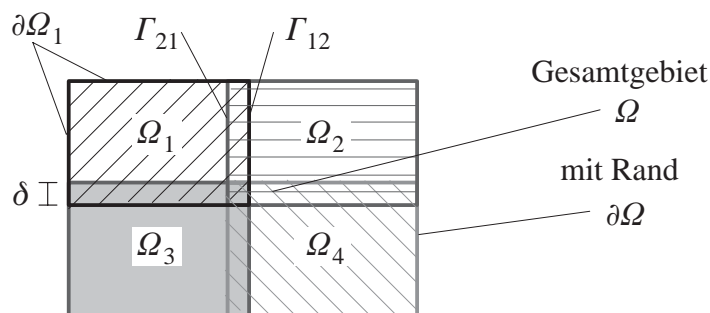


Bild 3.8: Überlappende Gebietszerlegung für $n_{dom} = 4$

Das diskrete und linearisierte Ausgangsproblem lautet $\mathbf{K} \mathbf{D} = \mathbf{F}$ in Ω , dabei bezeichnet \mathbf{D} alle Freiheitsgrade, die nicht auf dem Dirichletrand $\partial\Omega_u$ liegen. Dieses Ausgangsproblem wird durch folgende Teilprobleme, die jeweils in den Teilgebieten Ω_m gelten, ersetzt:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K}_{\Omega_m} & \mathbf{K}_{\Gamma_{ms_1}} & \cdots & \mathbf{K}_{\Gamma_{ms_N}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{D}_{\Omega_m} \\ \mathbf{D}_{\Gamma_{ms_1}}^{j/j+1} \\ \vdots \\ \mathbf{D}_{\Gamma_{ms_N}}^{j/j+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_{\Omega_m} \\ \mathbf{0} \\ \vdots \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} \quad (3.19)$$

Randbedingung auf den Kopplungsrandern Γ_{ms} :

$$\mathbf{D}_{\Gamma_{ms}}^{j/j+1} = \mathbf{H}_{\Omega_s \rightarrow \Gamma_m} (\mathbf{D}_{\Omega_s}^{j/j+1}),$$

wobei D_{Ω_m} die Freiheitsgrade im Innern von Ω_m und $D_{\Gamma_{ms}}$ die Freiheitsgrade auf dem Kopplungsrand Γ_{ms} sind und s_1 bis s_N die N benachbarten Gebiete zu Ω_m sind. Die Diskretisierung in den Teilgebieten kann konform oder nichtkonform im Überlappungsbereich sein. Der Operator $H_{\Omega_s \rightarrow \Gamma_m}(D_{\Omega_s})$, der aus den Verschiebungen D_{Ω_s} diejenigen auf dem Rand Γ_{ms} herausfiltert, ist dementsprechend entweder eine Boole'sche Matrix, oder beinhaltet Interpolationen. Falls im Iterationsschritt $j + 1$ möglichst aktuelle Lösungen aus Ω_s als Randbedingung an das Teilgebiet Ω_m auf Γ_{ms} verwendet werden, d.h. $D_{\Gamma_{ms}} = H_{\Omega_s \rightarrow \Gamma_m}(D_{\Omega_s}^{j+1})$ für den Fall, dass in Ω_s schon die Lösungen der $j + 1$ -ten Iteration vorliegen, und $D_{\Gamma_{ms}} = H_{\Omega_s \rightarrow \Gamma_m}(D_{\Omega_s}^j)$ für den Fall, dass in Ω_s noch keine aktuellen Lösungen vorliegen, wird das Verfahren als *multiplikativ* (bzw. *alternierend*) *Schwarz'sche Gebietszerlegung* bezeichnet. Eine parallele Umsetzung dieses Verfahrens ist offensichtlich nur bedingt möglich. Verwendet man dagegen als Randbedingungen auf Γ_{ms} ausschließlich die Lösungen der letzten Iteration, d.h. $D_{\Gamma_{ms}} = H_{\Omega_s \rightarrow \Gamma_m}(D_{\Omega_s}^j)$, so ist der Lösungsalgorithmus entkoppelt. Jedoch ist aufgrund der schwächeren Kopplung zwischen den Teilgebieten die Konvergenz wesentlich langsamer als bei multiplikativ Schwarz'scher Gebietszerlegung. Das Verfahren wird *additiv Schwarz'sche Gebietszerlegung* genannt.

Am Sonderfall zweier Teilgebiete soll der Zusammenhang zwischen Gebietszerlegungsmethoden und iterativen Gleichungslösern gezeigt werden:

$$\begin{array}{ccc}
 \text{Ausgangsproblem} & & \\
 \left[\begin{array}{cc} K_{\Omega_1} & K_{\Gamma_{12}} H_{\Omega_2 \rightarrow \Gamma_1} \\ K_{\Gamma_{21}} H_{\Omega_1 \rightarrow \Gamma_2} & K_{\Omega_2} \end{array} \right] \begin{bmatrix} D_{\Omega_1} \\ D_{\Omega_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} F_{\Omega_1} \\ F_{\Omega_2} \end{bmatrix} & & \\
 \downarrow & & \\
 \text{Multiplikativ Schwarz} & & \text{Additiv Schwarz} \quad (3.20) \\
 \underbrace{\left[\begin{array}{cc} K_{\Omega_1} & \mathbf{0} \\ K_{\Gamma_{21}} H_{\Omega_1 \rightarrow \Gamma_2} & K_{\Omega_2} \end{array} \right]}_{B_{MS}^{-1}} \begin{bmatrix} D_{\Omega_1} \\ D_{\Omega_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} F_{\Omega_1} \\ F_{\Omega_2} \end{bmatrix} & & \underbrace{\left[\begin{array}{cc} K_{\Omega_1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & K_{\Omega_2} \end{array} \right]}_{B_{AS}^{-1}} \begin{bmatrix} D_{\Omega_1} \\ D_{\Omega_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} F_{\Omega_1} \\ F_{\Omega_2} \end{bmatrix}
 \end{array}$$

An dieser Darstellung der multiplikativ Schwarz'schen Zerlegung erkennt man, dass der Vorkonditionierer B_{MS} einer Blockform des Gauß-Seidel-Vorkonditionierers $B_{GS} = L^{-1}$ entspricht. Die additiv Schwarz'sche Gebietszerlegung ist offensichtlich mit dem Jacobi-Vorkonditionierer verwandt. B_{AS} ist die Blockvariante des Jacobi-Vorkonditionierers $B_J = (Diag(K))^{-1}$. Für konforme Diskretisierungen in den Teilgebieten und für den Sonderfall zweier Teilgebiete besteht der multiplikativ Schwarz'sche Algorithmus aus folgenden zwei Teilschritten.

$$1. \text{ Teilschritt: } D^{j+\frac{1}{2}} = D^j + \underbrace{\begin{bmatrix} K_{\Omega_1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix}}_{B_1}^{-1} \underbrace{(F - K D^j)}_{R^j} \quad (3.21)$$

$$2. \text{ Teilschritt: } \mathbf{D}^{j+1} = \mathbf{D}^{j+\frac{1}{2}} + \underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{K}_{\Omega_2} \end{bmatrix}}_{\mathbf{B}_2}^{-1} \underbrace{\left(\mathbf{F} - \mathbf{K} \mathbf{D}^{j+\frac{1}{2}} \right)}_{\mathbf{R}^{j+\frac{1}{2}}} \quad (3.22)$$

In konformer Notation zu Gleichung (3.16) kann der multiplikativ Schwarz'sche Gebietszerlegungsalgorithmus als

$$\begin{aligned} \mathbf{D}^{j+1} &= \mathbf{D}^j + \mathbf{B}_1 \mathbf{R}^j + \mathbf{B}_2 (\mathbf{F} - \mathbf{K} (\mathbf{D}^j + \mathbf{B}_1 \mathbf{R}^j)) \\ &= \mathbf{D}^j + \underbrace{(\mathbf{B}_1 + \mathbf{B}_2 + \mathbf{B}_1 \mathbf{K} \mathbf{B}_2)}_{\mathbf{B}_{MS}} \mathbf{R}^j \end{aligned} \quad (3.23)$$

geschrieben werden. Die Bezeichnung *multiplikativ Schwarz* verdankt der Algorithmus dem Produktterm $\mathbf{B}_1 \mathbf{K} \mathbf{B}_2$. Entsprechend gilt für den additiv Schwarz'schen Algorithmus

$$\mathbf{D}^{j+1} = \mathbf{D}^j + \underbrace{(\mathbf{B}_1 + \mathbf{B}_2)}_{\mathbf{B}_{AS}} \mathbf{R}^j \quad (3.24)$$

Der *additiv Schwarz'sche* Vorkonditionierer setzt sich also additiv aus den Vorkonditionierungsbeiträgen \mathbf{B}_1 und \mathbf{B}_2 zusammen.

Über die Konvergenzeigenschaften überlappender Gebietszerlegungsmethoden lassen sich nach Smith et al. (1996) folgende Aussagen treffen:

- Die Anzahl benötigter Iterationen nimmt mit der Anzahl der Teilgebiete zu.
- Die Konvergenzgeschwindigkeit nimmt mit zunehmender Überlappungsbreite δ zu.
- Die Anzahl benötigter Iterationen ist bei additiv Schwarz'scher Gebietszerlegung ungefähr doppelt so groß wie bei multiplikativ Schwarz'scher Gebietszerlegung.

Für elliptische Differentialgleichungen stellt die Elimination langweiliger Fehler ein Problem für überlappende Gebietszerlegungsmethoden dar. Da Starrkörperdeformationsanteile keinen Beitrag zur Energie leisten, verschwindet in ungelagerten Teilgebieten Ω_m die Zeilen- und Spaltensumme der Systemmatrix \mathbf{K}_m . Bei einem langweiligen Fehler $\mathbf{e} = \text{konst}$ in Ω_m verschwindet deshalb das Residuum $\mathbf{R}_m = \mathbf{K}_m \mathbf{e}_m = \mathbf{0}$ und somit auch die Korrektur $\mathbf{B} \mathbf{R}_m$. Dieses Manko ist der Ansatzpunkt von Mehrgitterverfahren, siehe Abschnitt 3.4.3.

• Nicht überlappende Gebietszerlegungsmethoden

Nicht überlappende Gebietszerlegungsmethoden ermöglichen sehr effiziente, parallele Lösungsalgorithmen, die auch bei komplexen, nichtlinearen Problemstellungen sehr gute Konver-

genzeigenschaften aufweisen. Ein weiterer Vorteil ist, dass bei Integration dieser Lösungsmethode in ein bestehendes Programmpaket die vorhandenen Datenstrukturen und Konzepte erhalten bleiben können. Darüberhinaus sind nicht überlappende Gebietszerlegungsmethoden sehr flexibel bei wachsender Gebietsgröße, was für die Anwendungen in dieser Arbeit von Interesse ist.

Der Ursprung nicht überlappender Gebietszerlegungsmethoden ist die *Substrukturtechnik* (Wilson (1974)). Vor dem Hintergrund begrenzter Speicherkapazitäten entstanden, wird hierbei die Größe des Gleichungssystems durch *statische Kondensation* reduziert. Die Finiten Elemente werden in Teilbereichen Ω_m zu sogenannten Superelementen zusammengefasst. Die dabei entstehenden Ränder der Superelemente werden mit Γ_m bezeichnet, siehe Bild 3.9. Die Freiheitsgrade der Superelemente werden in die *lokalen* Freiheitsgrade D_Ω^m im Inneren von Ω_m und die *globalen* Freiheitsgrade D_Γ^m auf Γ_m aufgeteilt:

$$\underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{K}_{\Omega\Omega}^m & \mathbf{K}_{\Omega\Gamma}^m \\ \mathbf{K}_{\Gamma\Omega}^m & \mathbf{K}_{\Gamma\Gamma}^m \end{bmatrix}}_{\mathbf{K}^m} \underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{D}_\Omega^m \\ \mathbf{D}_\Gamma^m \end{bmatrix}}_{\mathbf{D}^m} = \underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{F}_\Omega^m \\ \mathbf{F}_\Gamma^m \end{bmatrix}}_{\mathbf{F}^m} \quad (3.25)$$

$$1. \text{ Zeile:} \quad \mathbf{D}_\Omega^m = (\mathbf{K}_{\Omega\Omega}^m)^{-1} (\mathbf{F}_\Omega^m - \mathbf{K}_{\Omega\Gamma}^m \mathbf{D}_\Gamma^m) \quad (3.26)$$

$$\text{in 2. Zeile eingesetzt:} \quad \underbrace{\left(\mathbf{K}_{\Gamma\Gamma}^m - \mathbf{K}_{\Gamma\Omega}^m (\mathbf{K}_{\Omega\Omega}^m)^{-1} \mathbf{K}_{\Omega\Gamma}^m \right)}_{\mathbf{K}_{red}^m} \mathbf{D}_\Gamma^m = \underbrace{\left(\mathbf{F}_\Gamma^m - \mathbf{K}_{\Gamma\Omega}^m (\mathbf{K}_{\Omega\Omega}^m)^{-1} \mathbf{F}_\Omega^m \right)}_{\mathbf{F}_{red}^m}. \quad (3.27)$$

Durch Elimination der inneren (lokalen) Freiheitsgrade D_Ω^m (statische Kondensation) entstehen die auf die Randfreiheitsgrade D_Γ^m reduzierte Steifigkeit \mathbf{K}_{red}^m (*Schurkomplement*) und die rechte Seite \mathbf{F}_{red}^m des jeweiligen Superelementes (Gleichung (3.27)). Die Inverse $(\mathbf{K}_{\Omega\Omega}^m)^{-1}$ muss dabei nicht explizit aufgestellt werden, lediglich ihre Anwendung auf $\mathbf{K}_{\Omega\Gamma}^m$ bzw. \mathbf{F}_Ω^m wird benötigt. Die Assemblierung der reduzierten Superelementbeiträge \mathbf{K}_{red}^m und \mathbf{F}_{red}^m führt auf folgendes Gleichungssystem, das auf die (globalen) Randfreiheitsgrade $\mathbf{D}_\Gamma = \bigcup_{m=1}^{n_{dom}} \mathbf{D}_\Gamma^m$ reduziert ist:

$$\bigcup_{m=1}^{n_{dom}} (\mathbf{K}_{red}^m) \mathbf{D}_\Gamma = \bigcup_{m=1}^{n_{dom}} \mathbf{F}_{red}^m. \quad (3.28)$$

Die inneren Freiheitsgrade D_Ω^m werden jeweils lokal in Ω_m in einer Nachlaufrechnung gemäß Gleichung (3.26) bestimmt. Im linear elastischen Fall muss die reduzierte Steifigkeit \mathbf{K}_{red}^m nur einmal aufgestellt werden. Im Hinblick auf die Lösung der reduzierten Systemgleichung (3.28) ist zu beachten, dass die reduzierte Steifigkeit wesentlich dichter besetzt ist als die Ausgangssteifigkeit. Das Aufstellen von \mathbf{K}_{red}^m und die Rückrechnung zu den lokalen Freiheitsgraden (FHG) D_Ω^m in den einzelnen Superelementen kann parallel erfolgen.

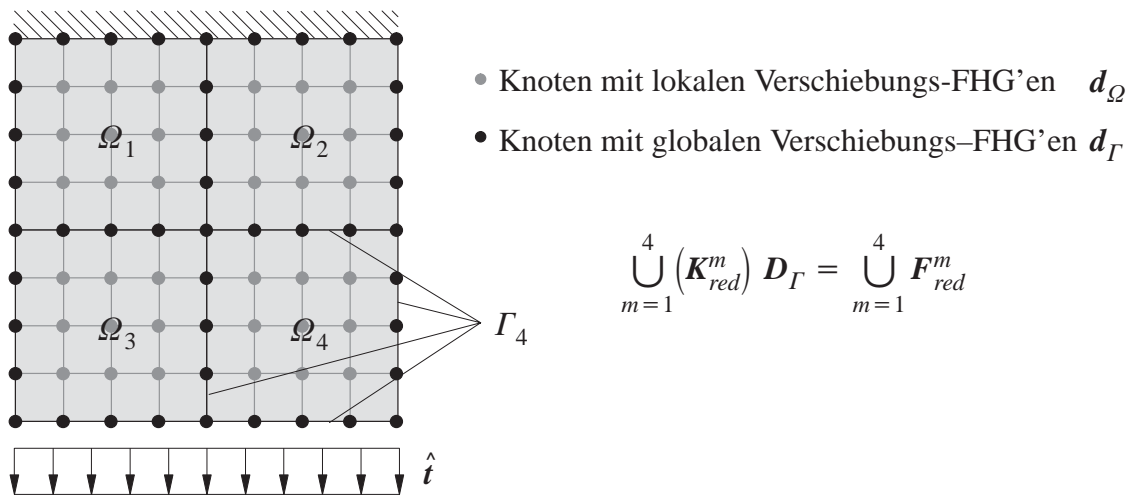


Bild 3.9: Substrukturtechnik, Beispiel mit vier Superelementen Ω_1 bis Ω_4

Die Kompatibilität der Verschiebungen zwischen den Teilgebieten wird bei der Substrukturtechnik durch den Assemblierungsvorgang (Gleichung (3.28)) erzwungen. Bei nicht überlappenden Gebietszerlegungsmethoden dagegen erfolgt die Kopplung der Teilgebiete durch Nebenbedingungen. Vorteilhaft ist dabei zum einen die größere Flexibilität, beispielsweise bezüglich nicht-konformer Diskretisierungen in den Teilgebieten oder unterschiedlicher physikalischer Probleme in den Teilgebieten. Darüber hinaus ermöglicht die Umsetzung mit Nebenbedingungen effiziente parallele Algorithmen, die weniger Kommunikation zwischen den Prozessoren erfordern als die Substrukturtechnik, siehe Farhat & Roux (1991).

Als Nebenbedingungen können Verschiebungsübergangsbedingungen als Verschiebungskontinuität $[\mathbf{u}] = \mathbf{u}_m - \mathbf{u}_s = \mathbf{0}$ auf Γ_{ms} (m ist hierbei mit positivem Vorzeichen, s mit negativem Vorzeichen behaftet) oder Spannungsübergangsbedingungen als Gleichgewicht am Kopplungsrand $\sum \mathbf{t} = \mathbf{t}_m + \mathbf{t}_s = \mathbf{0}$ auf Γ_{ms} formuliert werden, siehe Bild 3.10. Im diskreten Fall führen diese beiden Übergangsbedingungen, im Gegensatz zum kontinuierlichen Fall, zu unterschiedlichen Ergebnissen. Bei punktwiser (starker) Erfüllung der Nebenbedingungen führen Verschiebungsübergangsbedingungen auf zu steife, Spannungsübergangsbedingungen auf zu weiche Lösungen.

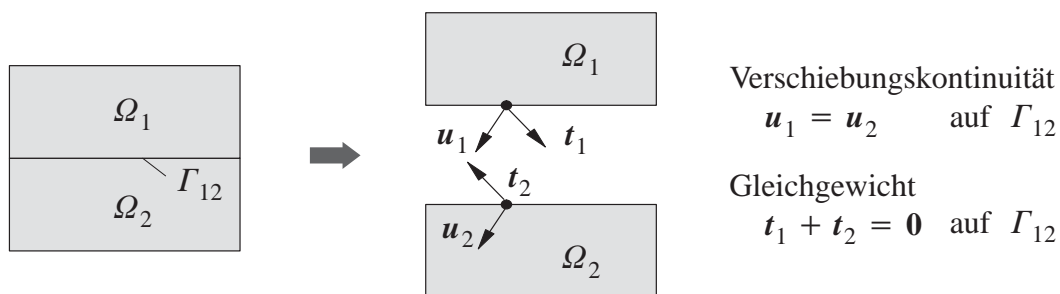


Bild 3.10: Nebenbedingung – Verschiebungskontinuität bzw. Gleichgewicht auf Γ

Die Übergangsbedingungen werden im Allgemeinen mit der Methode der Lagrange-Multiplikatoren (Lagrange (1788), Bertsekas (1984), Meyberg & Vachenaer (1997)) realisiert, siehe

Anhang A1. So wird beispielsweise die Nebenbedingung $[\mathbf{u}] = \mathbf{0}$ auf Γ_{ms} durch den zusätzlichen Energiebeitrag auf dem Kopplungsrand

$$\Pi_{NB} = \sum_{j=1}^{n_\Gamma} \int_{\Gamma_{ms}^j} \lambda \cdot [\mathbf{u}] \, dA \quad (3.29)$$

in das, im elastischen Fall existierende, Potential Π eingebracht. n_Γ ist hierbei die Anzahl der Kopplungsränder. λ wird als Lagrange–Multiplikator bezeichnet. Er stellt die energetisch konjugierte Größe zu $[\mathbf{u}]$ dar. Aus dem Extremwertproblem (Prinzip vom Minimum der gesamten potentiellen Energie) $\Pi_{el} \rightarrow MIN$ mit

$$\Pi_{el} = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon} \, dV - \int_{\Omega} \mathbf{u} \cdot \hat{\mathbf{b}} \, dV - \int_{\partial\Omega_t} \mathbf{u} \cdot \hat{\mathbf{t}} \, dA \quad (3.30)$$

wird durch die Nebenbedingung das stationäre Problem $\Pi = \Pi_{el} + \Pi_{NB} \rightarrow STAT$.

Ausgehend von einer Verschiebungsformulierung sind folgende Varianten der Formulierung möglich, siehe Park et al. (2000), Brezzi & Fortin (1991) oder Zienkiewicz et al. (2005): Die *primale Formulierung* (Steifigkeitsmethode) verwendet ausschließlich Verschiebungsfreiheitsgrade. Dementsprechend wird als Nebenbedingung Gleichgewicht am Kopplungsrand Γ_{ms} ($\sum \mathbf{t} = \mathbf{0}$ auf Γ_{ms}) durch

$$\Pi_{NB} = \sum_{j=1}^{n_\Gamma} \int_{\Gamma_{ms}^j} \lambda \cdot (\mathbf{t}_m + \mathbf{t}_s) \, dA \quad (3.31)$$

gefordert. Der Lagrange–Multiplikator λ ist in diesem Fall die zugehörige Kopplungsrandverschiebung. Die *gemischte Formulierung* fordert als Nebenbedingung Verschiebungskontinuität am Kopplungsrand durch Π_{NB} nach Gleichung (3.29). Die Lagrange–Multiplikatoren sind die Spannungsvektoren auf dem Rand Γ , die dafür sorgen, dass $[\mathbf{u}] = \mathbf{0}$ auf Γ_{ms} (schwach) erfüllt wird (Bild 3.11). Die Formulierung hat dementsprechend Verschiebungen und Spannungen als Primärvariablen. Die *duale Formulierung* (Flexibilitätsmethode) entsteht aus der gemischten Formulierung durch statische Kondensation der Verschiebungsfreiheitsgrade.

Für die Verschiebungsübergangsbedingung ergibt sich folgende variationelle gemischte Formulierung, die auch bei materieller Nichtlinearität ohne Potentialeigenschaft gültig ist:

Gleichgewicht in jedem Teilgebiet $\Omega_{m/s}$:

$$\int_{\Omega_m} \delta \boldsymbol{\varepsilon} : \boldsymbol{\sigma} \, dV + \sum_{j=1}^N \int_{\Gamma_{ms}^j} \lambda \cdot (\pm \delta \mathbf{u}^{m/s}) \, dA = \int_{\Omega_m} \delta \mathbf{u} \cdot \hat{\mathbf{b}} \, dV + \int_{\Gamma_{m,t}} \delta \mathbf{u} \cdot \hat{\mathbf{t}} \, dA \quad (3.32)$$

Nebenbedingung an jedem Kopplungsrand Γ_{ms} :

$$\int_{\Gamma_{ms}} \delta \lambda \cdot (\mathbf{u}^m - \mathbf{u}^s) \, dA = 0$$

Dabei ist N die Anzahl der Kopplungsränder des Teilgebiets $\Omega_{m/s}$. Das Vorzeichen des Terms $\int_{\Gamma} \lambda \cdot (\pm \delta \mathbf{u}^{m/s}) \, dA$ folgt aus der Definition von $[\mathbf{u}] = + \mathbf{u}_m - \mathbf{u}_s$ am jeweiligen Kop-

plungsrand Γ_{ms} . Die Diskretisierung der Verschiebungen wird entsprechend Abschnitt 2.2.1 angenommen. Die Lagrange-Multiplikatoren seien durch $\lambda = N_\lambda L$ diskretisiert, mit Ansatzfunktionen N_λ , die über den Kopplungsrand Γ_{ms} definiert sind, und den entsprechenden Spannungsfreiheitsgraden L . Für den – der Einfachheit halber vorübergehend angenommenen – Fall linearer Elastizität erhält man folgende diskrete Form:

Gleichgewicht in jedem Teilgebiet $\Omega_{m/s}$:

$$\mathbf{K}_m \mathbf{D}_m + \sum_{s=1}^N \pm (\tilde{\mathbf{G}}_{ms})^T \mathbf{L}_{ms} = \mathbf{F}_{ext,m} \quad (3.33)$$

Nebenbedingung an jedem Kopplungsrand Γ_{ms} :

$$\mathbf{G}_{ms} \mathbf{D}_{\Gamma_{ms}}^m - \mathbf{G}_{sm} \mathbf{D}_{\Gamma_{ms}}^s = \mathbf{0}$$

Hierbei sind \mathbf{K}_m und $\mathbf{F}_{ext,m}$ die Steifigkeitsmatrix und die externe Last des Teilgebietes Ω_m . Die "Kopplungsmatrizen" \mathbf{G}_{ms} sind folgendermaßen definiert.

$$\mathbf{G}_{ms} = \int_{\Gamma_{ms}} (\mathbf{N}_\lambda)^T \mathbf{N} dA \quad (3.34)$$

\mathbf{N} sind hierbei die Verschiebungsansätze auf dem Kopplungsrand Γ_{ms} (randweise, nicht elementweise definiert). $\tilde{\mathbf{G}}_{ms}$ entsteht aus \mathbf{G}_{ms} durch Erweiterung um Nullspalten auf alle Verschiebungsfreiheitsgrade in $\Omega_{m/s}$. Zur Veranschaulichung ist für ein Beispiel mit vier Teilgebieten (Bild 3.11) die diskrete Form (3.33) in matrizieller Darstellung in Bild 3.12 gegeben. Die "weißen" Bereiche enthalten ausschließlich Nullen. Hierbei wird angenommen, dass die Verschiebungsfreiheitsgrade als lokale Freiheitsgrade behandelt werden (duale Formulierung).

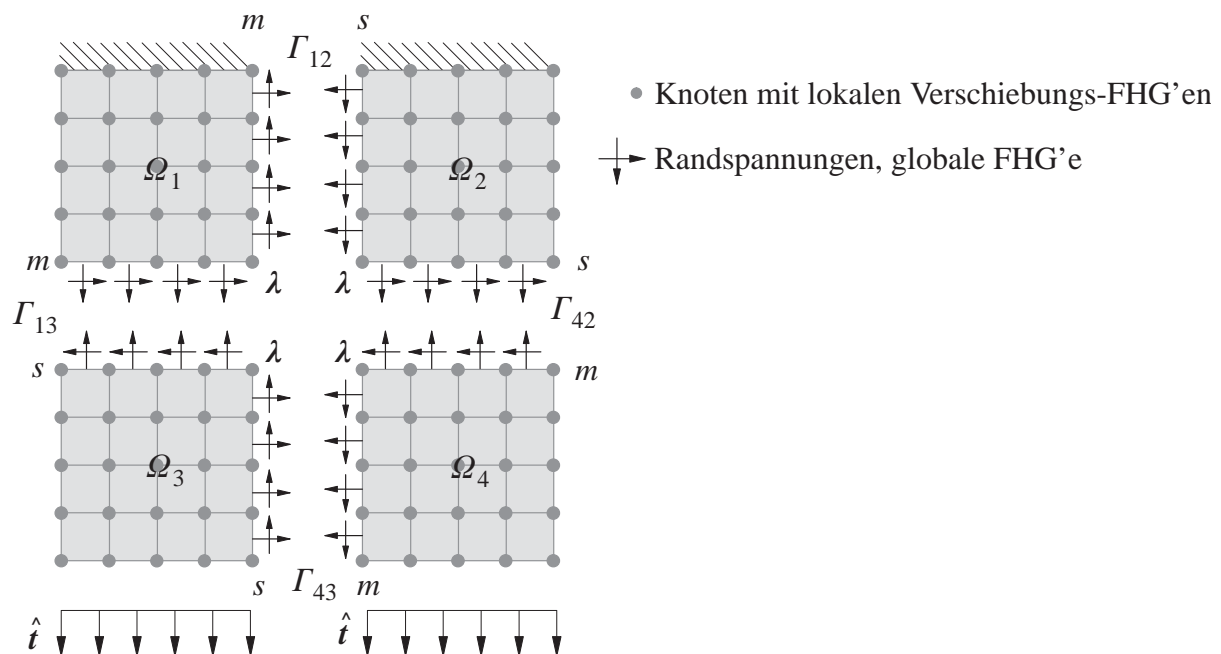


Bild 3.11: Nicht überlappende Gebietszerlegung (duale Formulierung):
 Beispiel mit vier Teilgebieten

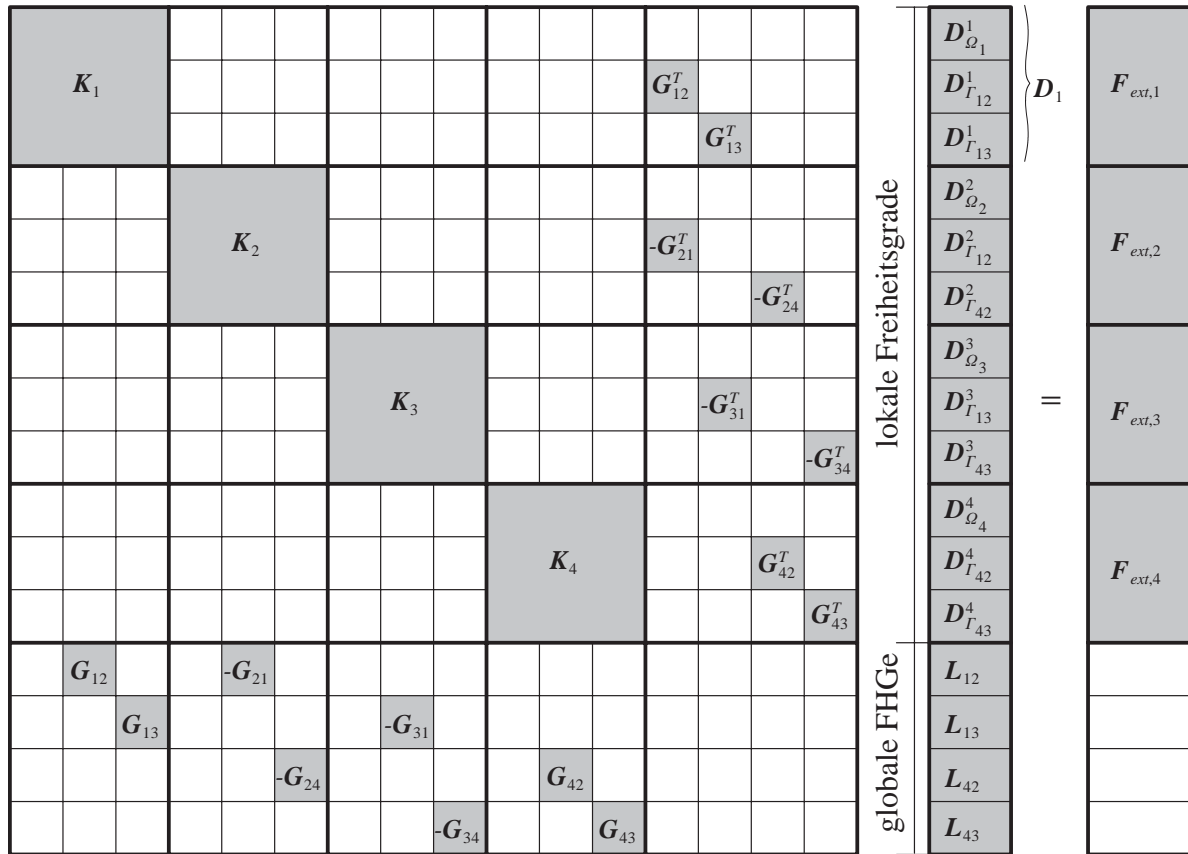


Bild 3.12: Nicht überlappende Gebietszerlegung (duale Formulierung): Diskrete Form

Hierbei sind die Freiheitsgrade der Teilgebiete so sortiert, dass jeweils zuerst die Verschiebungsfreiheitsgrade, die nicht auf einem Kopplungsrand liegen ($D_{\Omega_m}^m$), angeordnet sind und danach die Verschiebungsfreiheitsgrade auf den Kopplungsrändern Γ_{ms} .

Die Ansätze der Lagrange-Multiplikatoren λ und der Testfunktionen $\delta\lambda$ der Nebenbedingung $[\mathbf{u}] = \mathbf{0}$ auf Γ_{ms} (Gleichung (3.32)) haben großen Einfluss auf die Genauigkeit und die Effizienz der Lösungsmethode. Farhat & Roux (1991) führen im Rahmen der dualen *Finite Element Tearing and Interconnecting* (FETI) Methode knotenweise Ansätze für λ und $\delta\lambda$ ein und erfüllen damit die Nebenbedingung im starken Sinne. Durch kontinuierliche Ansätze dagegen wird die Nebenbedingung nur schwach erfüllt. Dafür sind nichtkonforme Diskretisierungen auf den Kopplungsrändern möglich (*Mortar-Methode*), siehe Bernardi et al. (1994) und Wohlmuth (2001). Die Verschiebungsansätze und die Ansätze der Lagrange-Multiplikatoren müssen der *Inf-Sup-Bedingung* genügen, siehe Abschnitt 5.3.2.

Im Allgemeinen sind bei nicht überlappenden Gebietszerlegungsmethoden folgende Punkte zu berücksichtigen: Ungelagerte Teilgebiete, wie beispielsweise die Teilgebiete 3 und 4 in Bild 3.11, erfordern besondere Aufmerksamkeit. Ohne zusätzliche Maßnahmen stellt das Randwertproblem in Ω_3 und Ω_4 jeweils ein singuläres Problem dar. Farhat & Roux (1991) sowie Park & Felippa (1998) schlagen vor, die Verschiebungen in Starrkörperanteile und Deformationsan-

teile zu splitten, wobei die Starrkörperverschiebungen im Gegensatz zu den Deformationsanteilen als globale Variablen gehandhabt werden. Desweiteren ist eine redundante oder unterbestimmte Formulierung der Nebenbedingung an den Eckknoten der Teilgebiete zu vermeiden, siehe Park & Felippa (2000).

Es existieren unterschiedliche Lösungsverfahren für das "gebietszerlegte" Gleichungssystem (3.33). Die direkte Gleichungslösung der unabhängigen Probleme in den Teilgebieten und der globalen Kopplungsrandbeziehung stellt eine Möglichkeit dar. Alternativ sind auch iterative Verfahren üblich, wie beispielsweise im Rahmen der FETI-Methode (Farhat et al. (1998)). Die iterative Lösung findet hierbei durch eine Vorkonditionierung in zwei Schritten statt. Zunächst werden in den Teilgebieten Dirichlet-Probleme mit bekannten Randverschiebungen gelöst und anschließend Neumann-Probleme mit den Residuen als Beanspruchung. Das konjugierte Gradientenverfahren wird zur Konvergenzbeschleunigung eingesetzt.

3.4.3 Mehrgitterverfahren

Die im vorigen Abschnitt erwähnte "Blindheit" überlappender Gebietszerlegungsmethoden gegenüber langwelligem Fehlern bei elliptischen Differentialgleichungen ist der Ansatzpunkt von Zwei- bzw. Mehrgitterverfahren. Neben der iterativen Gleichungslösung (z.B. durch Gebietszerlegung) auf einem feinen "Gitter" zur Elimination des kurzwelligen Fehleranteils wird der langwellige Fehleranteil durch direkte Gleichungslösung auf einer groben Diskretisierung eliminiert. Der Aufwand für die direkte Gleichungslösung auf dem groben Gitter ist wegen der geringen Anzahl an Freiheitsgraden auf dem Grobgitter gering.

Grundlagen zu Mehrgitterverfahren sind in Wessling (1992), Hackbusch (1985), Smith et al. (1996), Briggs et al. (2000) sowie Hackbusch (2004) zu finden. Der prinzipielle Ablauf eines Zweigitterzyklus' ist in Bild 3.13 angegeben.

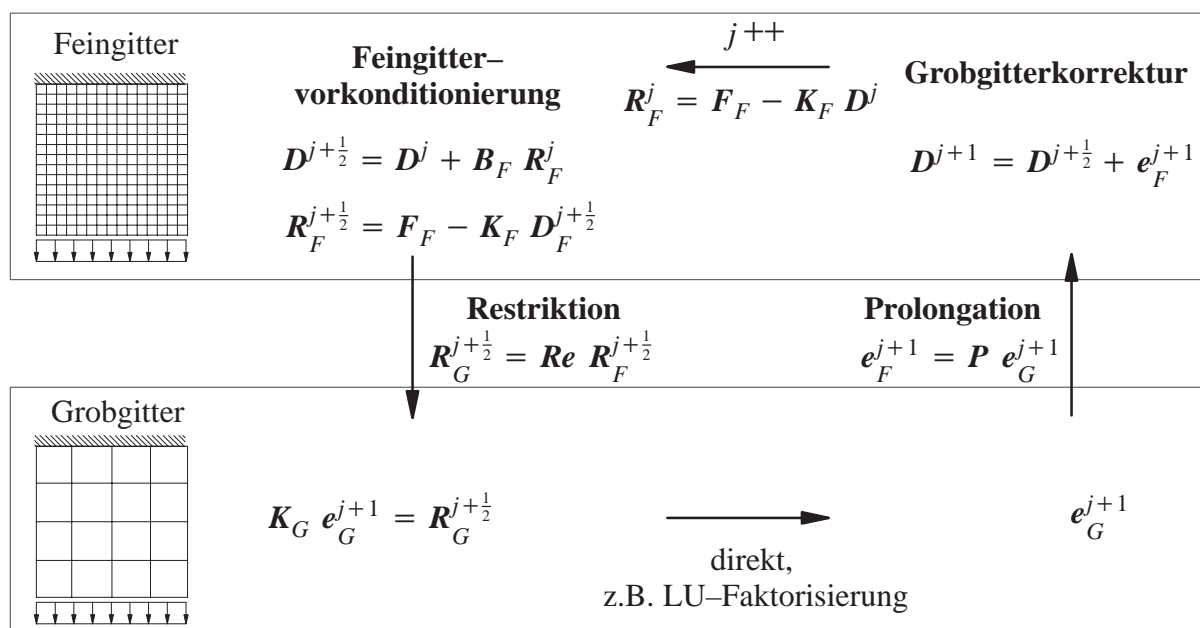


Bild 3.13: Prinzip Zweigitterverfahren

Ausgehend von einer Feingittervorkonditionierung in einem oder mehreren Iterationsschritten (*Glättung*) wird das Residuum des Feingitters \mathbf{R}_F durch den sogenannten *Restriktionsoperator* \mathbf{R}_e auf das Grobgitter beschränkt. Der langwellige Anteil des Fehlers wird auf dem Grobgitter durch direktes Lösen von $\mathbf{K}_G \mathbf{e}_G = \mathbf{R}_e \mathbf{R}_F$ ermittelt und auf das Feingitter *prolongiert*. Diese Grobgitterkorrektur $\mathbf{e}_F = (\mathbf{P} \mathbf{K}_G^{-1} \mathbf{R}_e) \mathbf{R}_F$ verbessert die Feingitterlösung.

Entscheidend für die Effizienz der fehlerglättenden Wirkung des Zwei- bzw. Mehrgitterverfahrens ist hierbei die Konstruktion geeigneter Restriktions- und Prolongationsoperatoren für den Gittertransfer. Eine anschauliche Möglichkeit ist die geometrische Interpolation zwischen den Diskretisierungen. Für Strukturen aus heterogenen Materialien entwickelten Fish & Belsky (1995 a, b) und darauf aufbauend Bayreuther (2004) ein Zweigitterverfahren als abstraktes Zweiskalenmodell. Die Restriktion wird hierbei als Homogenisierung, die Prolongation als Lokalisierung interpretiert. Weitere gängige Verfahren werden bei Bayreuther (2004) gegenübergestellt.

Während *geometrische Mehrgitterverfahren* neben einer feinen Diskretisierung eine bzw. mehrere gröbere Diskretisierungen einführen, verwenden sogenannte *algebraische Mehrgitterverfahren* (Briggs et al. (2000), Brezina (1997), Ramm et al. (2004)) lediglich ein Feingitter und die zugehörige Systemmatrix zur Bestimmung der Groblevelkorrekturen. In diesem Zusammenhang wird häufig von Leveln statt Gittern gesprochen.

4 Ein hierarchisches Zweiskalenmodell zur materiell nichtlinearen Versagensanalyse

Aufbauend auf die kurze Einführung in Abschnitt 3.3 wird in diesem Kapitel ein Zweiskalenmodell vorgestellt, das die Integration feinskaligen Materialverhaltens in ein grobskaliges Strukturmodell ermöglicht. Es soll dem Anspruch genügen, auch im entfestigenden Beanspruchungsbereich gültig und möglichst genau zu sein. Referenz ist hierbei die Feinskalenlösung (FSL). Wie in Abschnitt 3.3 erläutert, ist hierfür ein volumenverbindender Skalenübergang erforderlich, der durch hierarchische Erweiterung der grobskaligen Lösung realisiert wird. Diese Erweiterung der grobskaligen Lösung wird adaptiv auf die Teilbereiche der Struktur beschränkt, in denen die Lösung eine ausgesprochene Feinskalencharakteristik aufweist. Darüber hinaus ermöglicht die Annahme eines lokalen Trägers für die feinskaligen Variablen einen äußerst effizienten Lösungsalgorithmus für das Feinskalenproblem. Sowohl auf der Grob- als auch auf der Feinskala werden im Rahmen der vorliegenden Arbeit beispielhaft kontinuumsmechanische Modelle eingesetzt und mit Finiten Elementen diskretisiert.

In Abschnitt 4.1 wird einführend das Konzept der hierarchischen Zweiskalenformulierung vorgestellt. Die Ausführungen hierzu orientieren sich an Hughes (1995) und Hughes et al. (1998). Dieses Konzept wird in Abschnitt 4.2 auf nichtlineares Verhalten von homogenen und heterogenen Werkstoffen erweitert. Ein effizienter Lösungsansatz für das Zweiskalenmodell wird in Abschnitt 4.3 beschrieben. Die algorithmische Umsetzung ist Thema des Abschnitts 4.4.

4.1 Konzept des hierarchischen Zweiskalenmodells

Zur Verdeutlichung der grundlegenden Ideen des hierarchischen Zweiskalenmodells soll zunächst eine elastische, heterogene Struktur ohne Randlasten betrachtet werden. Das Zweiskalenmodell wird dabei im gesamten Bereich Ω eingeführt.

4.1.1 Ausgangsproblem

Die starke Form des Randwertproblems umfasst die Gleichgewichtsbeziehung (Gleichung (2.4)), das elastische Werkstoffgesetz $\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C}^{el} : \boldsymbol{\varepsilon}$ mit räumlich veränderlichem Werkstofftensor $\mathbf{C}^{el}(\mathbf{x})$, die kinematische Beziehung (2.2) und Randbedingungen (Gleichung (2.5) und (2.6)):

$$\begin{aligned} \operatorname{div} (\mathbf{C}^{el} : \boldsymbol{\varepsilon}) + \hat{\mathbf{b}} &= \mathbf{0} & \text{in } \Omega & & \text{mit} & & \mathbf{u} = \hat{\mathbf{u}} & \text{auf } \partial\Omega_u & \\ & & & & \text{und} & & \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = \hat{\mathbf{t}} & \text{auf } \partial\Omega_t . & \end{aligned} \quad (4.1)$$

Nach Anwendung der Methode der gewichteten Residuen und partieller Integration erhält man mit der Neumann-Randbedingung $\hat{\mathbf{t}} = \mathbf{0}$ auf $\partial\Omega_t$ die schwache Form

$$\int_{\Omega} \delta \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbf{C}^{el} : \boldsymbol{\varepsilon} \, dV = \int_{\Omega} \delta \mathbf{u} \cdot \hat{\mathbf{b}} \, dV \quad \forall \delta \mathbf{u} . \quad (4.2)$$

4.1.2 Additive Zerlegung

Die Lösung \mathbf{u} wird nun additiv in einen grobskaligen Lösungsanteil $\bar{\mathbf{u}}$, der den globalen, langwelligen Anteil der Strukturantwort erfasst, und einen feinskaligen Lösungsanteil \mathbf{u}' , der hier durch lokale Steifigkeitsschwankungen infolge Materialheterogenitäten verursacht wird, zerlegt.

$$\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} + \mathbf{u}' \quad (4.3)$$

\mathbf{u}' kann auch als Fehler der grobskaligen Lösung $\bar{\mathbf{u}}$ interpretiert werden. Erst durch die Diskretisierung der grobskaligen Lösung wird die Aufteilung der Lösung in den grob- und den feinskaligen Anteil nach Gleichung (4.3) eindeutig. Diese Summenzerlegung wird auch für die Testfunktionen eingeführt.

$$\delta \mathbf{u} = \delta \bar{\mathbf{u}} + \delta \mathbf{u}' \quad (4.4)$$

Die Anreicherung \mathbf{u}' darf keine Verschiebungsmoden enthalten, die bereits die grobskalige Lösung $\bar{\mathbf{u}}$ erfasst, d.h. die Ansätze für \mathbf{u}' und $\bar{\mathbf{u}}$ müssen linear unabhängig sein, um eine singuläre Formulierung zu vermeiden. Gleiches gilt für die Testfunktionen $\delta \bar{\mathbf{u}}$ und $\delta \mathbf{u}'$. Mit der kinematischen Gleichung (2.2) und mit Gleichung (4.3) gilt für die Verzerrungen: $\boldsymbol{\varepsilon} = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \boldsymbol{\varepsilon}'$. Für den symmetrischen Gradienten der Testfunktionen gilt mit Gleichung (4.4): $\delta \boldsymbol{\varepsilon} = \delta \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \delta \boldsymbol{\varepsilon}'$. Durch die additive Zerlegung wird aus der starken Form (4.1)

$$\operatorname{div} (\mathbf{C}^{el} : \nabla^{\operatorname{sym}} \bar{\mathbf{u}}) + \operatorname{div} (\mathbf{C}^{el} : \nabla^{\operatorname{sym}} \mathbf{u}') + \hat{\mathbf{b}} = \mathbf{0} \quad \text{in } \Omega . \quad (4.5)$$

Aus der schwachen Form (4.2) wird


$$\int_{\Omega} (\delta \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \delta \boldsymbol{\varepsilon}') : \mathbf{C}^{el} : (\bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \boldsymbol{\varepsilon}') dV = \int_{\Omega} (\delta \bar{\mathbf{u}} + \delta \mathbf{u}') \cdot \hat{\mathbf{b}} dV \quad \forall (\delta \bar{\mathbf{u}} + \delta \mathbf{u}') . \quad (4.6)$$

4.1.3 Zweiskalenproblem

Wegen der linearen Unabhängigkeit der Testfunktionen $\delta \bar{\mathbf{u}}$ und $\delta \mathbf{u}'$ zerfällt Gleichung (4.6) in das sogenannte Grobskalenproblem mit grobskaligen Testfunktionen $\delta \bar{\mathbf{u}}$ und das sogenannte Feinskalenproblem mit feinskaligen Testfunktionen $\delta \mathbf{u}'$.

– Grobskalenproblem:

$$\int_{\Omega} \delta \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} : \mathbf{C}^{el} : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} dV + \int_{\Omega} \delta \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} : \mathbf{C}^{el} : \boldsymbol{\varepsilon}' dV = \int_{\Omega} \delta \bar{\mathbf{u}} \cdot \hat{\mathbf{b}} dV \quad \forall \delta \bar{\mathbf{u}} \quad (4.7)$$

– Feinskalenproblem:  Skalenkopplung

$$\int_{\Omega} \delta \boldsymbol{\varepsilon}' : \mathbf{C}^{el} : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} dV + \int_{\Omega} \delta \boldsymbol{\varepsilon}' : \mathbf{C}^{el} : \boldsymbol{\varepsilon}' dV = \int_{\Omega} \delta \mathbf{u}' \cdot \hat{\mathbf{b}} dV \quad \forall \delta \mathbf{u}' \quad (4.8)$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}' = \mathcal{U}(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}})$$

Dieses Zweiskalenproblem ist durch die gekennzeichneten Terme, die für Kommunikation zwischen den Skalen sorgen, im ganzen Bereich Ω gekoppelt; daher auch die Bezeichnung *volumen-* verbindender Skalenübergang. Die Gleichung (4.8) entsprechende starke Form

$$\operatorname{div} (\mathbf{C}^{el} : \nabla^{sym} \mathbf{u}') = - \underbrace{\left(\hat{\mathbf{b}} + \operatorname{div} (\mathbf{C}^{el} : \nabla^{sym} \bar{\mathbf{u}}) \right)}_{\text{Residuum der groben Skala, siehe Gleichung (4.5)}} \quad (4.9)$$

Residuum der groben Skala, siehe Gleichung (4.5)

lässt im Vergleich zu Gleichung (4.5) erkennen, dass die feinskalige Lösung \mathbf{u}' durch das Residuum der groben Skala getrieben wird. Da eine analytische Lösung des Feinskalenproblems (4.9) meist nicht möglich ist, wird das Feinskalenproblem im Allgemeinen numerisch gelöst ($\boldsymbol{\varepsilon}' = \mathcal{U}(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}})$) und zur Elimination des feinskaligen Lösungsanteils aus dem Grobskalenproblem (4.7) verwendet. Das erweiterte Grobskalenproblem lautet dann

$$\int_{\Omega} \delta \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} : \mathbf{C}^{el} : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \, dV + \underbrace{\int_{\Omega} \delta \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} : \mathbf{C}^{el} : \mathcal{U}(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}) \, dV}_{\text{Zusatzterm}} = \int_{\Omega} \delta \bar{\mathbf{u}} \cdot \hat{\mathbf{b}} \, dV \quad \forall \delta \bar{\mathbf{u}} . \quad (4.10)$$

Der im Vergleich zur schwachen Form (2.8) zusätzliche Term enthält den Effekt der feinen Skala, projiziert auf die grobe Skala. Bei Inkompressibilität, beispielsweise im Zusammenhang mit plastischen Materialien (Masud (2004)) oder Fluiden (Gravemeier et al. (2004)), oder bei Advektions- bzw. Konvektionsproblemen (Brezzi et al. (1997)) kann dieser Zusatzterm auch als Stabilisierung interpretiert werden. Hughes et al. (1998) nutzen die Zweiskalenformulierung als theoretische Begründung von Stabilisierungen.

4.2 Hierarchisches Zweiskalenmodell für nichtlineares Materialverhalten

In diesem Abschnitt wird das Konzept des hierarchischen Zweiskalenmodells auf nichtlineares Materialverhalten erweitert, siehe auch Hund & Ramm (2006). Das vorgestellte Modell kann auch im postkritischen Beanspruchungsbereich eingesetzt werden. Exemplarisch wird es hier für schädigende, homogene und faserverstärkte Materialien formuliert.

4.2.1 Begrenzung des Zweiskalengebiets

Wegen des räumlich abklingenden Charakters feinskaliger Effekte bei elliptischen Differentialgleichungen, also wegen der vorhandenen physikalischen Lokalität, kann zur Reduktion des numerischen Aufwands der Einsatz des Zweiskalenmodells auf Teilbereiche der Struktur beschränkt werden. Es handelt sich dabei um die Bereiche, in denen die Genauigkeit der Grobskalenlösung $\bar{\mathbf{u}}$ als unzureichend angesehen wird. Im Rahmen dieser Arbeit sind das die Bereiche mit nichtlinearem Materialverhalten, also die Versagensbereiche der Struktur. Sie werden als *Zweiskalengebiet* Ω' bezeichnet und breiten sich mit zunehmender Beanspruchung aus. In den verbleibenden elastischen Bereichen, die *Grobskalengebiet* $\bar{\Omega} = \Omega \setminus \Omega'$ genannt werden, findet die Modellierung ausschließlich auf der Grobskala statt. Dort gilt $\mathbf{u}' = \mathbf{0}$. Entspre-

chend wird auf dem Teil des Randes von Ω' , der nicht auf dem Außenrand der Struktur $\partial\Omega$ liegt, $\mathbf{u}' = \mathbf{0}$ angenommen. Auf dem Dirichlet-Randanteil $\partial\Omega'_u$ von Ω' gilt: $\bar{\mathbf{u}} + \mathbf{u}' = \hat{\mathbf{u}}$ und auf dem Neumann-Randanteil $\partial\Omega'_t$ gilt: $\boldsymbol{\sigma}(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \boldsymbol{\varepsilon}') \cdot \mathbf{n} = \hat{\mathbf{t}}$, siehe auch Bild 4.1.

Die Berandung des Zweiskalengebiets Γ' orientiert sich aus pragmatischen Gründen an der Diskretisierung der grobskaligen Verschiebung $\bar{\mathbf{u}}$. Zu jedem Beanspruchungsniveau wird in den Integrationspunkten der Grobskalendiskretisierung in $\bar{\Omega}$ anhand eines äquivalenten Verzerrungsmaßes $\varepsilon_v(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}})$ überprüft, ob das Verhalten noch elastisch oder bereits inelastisch ist. Ist in einem der Integrationspunkte eines Grobskalenelements in $\bar{\Omega}$ die Elastizitätsgrenze $\varepsilon_v^{el,max}$ erreicht, wird es in den Zweiskalenbereich Ω' aufgenommen. Bild 4.1 zeigt die Begrenzung des Zweiskalengebiets in einem bestimmten Beanspruchungszustand.

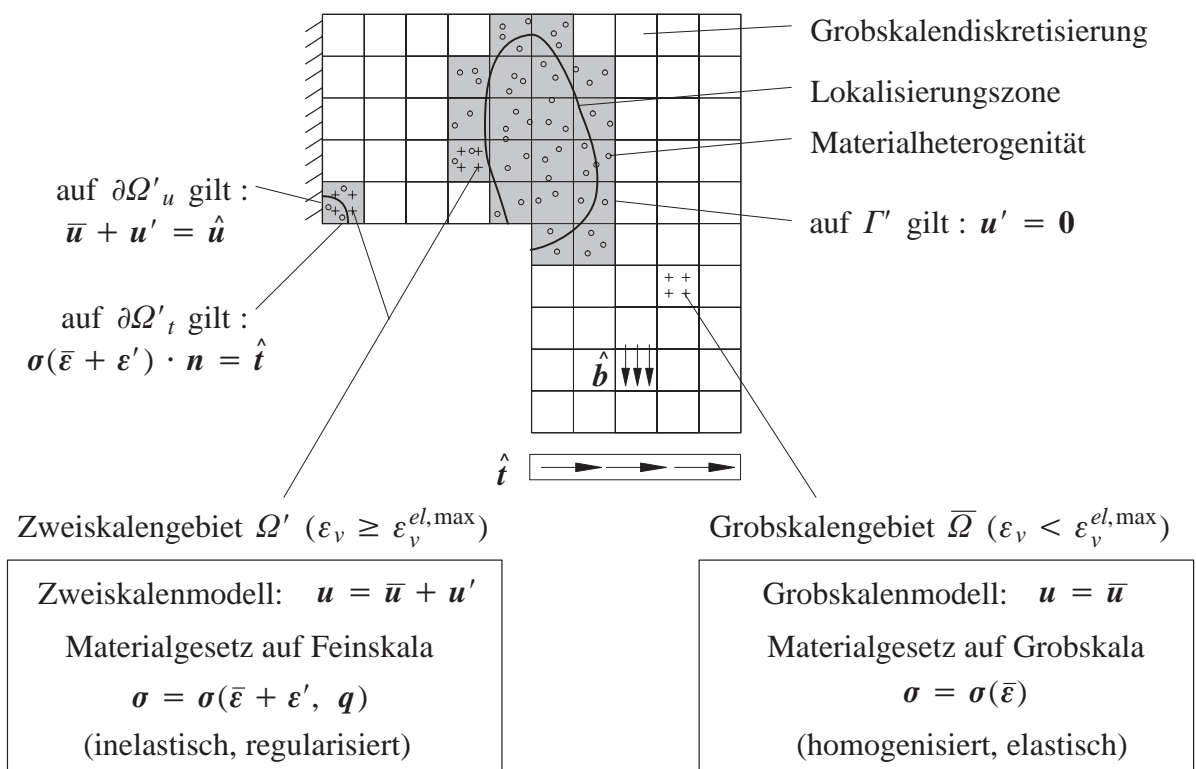


Bild 4.1: Begrenzung des Zweiskalengebiets zu einem Lastniveau

Im Grobskalengebiet $\bar{\Omega}$ werden die Materialheterogenitäten nicht aufgelöst. Für diesen Bereich wird ein phänomenologisches, elastisches Werkstoffgesetz $\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}})$ verwendet, das das Verhalten der heterogenen Materialstruktur in verschmierter (homogenisierter) Weise wiedergibt. Es kann numerisch, durch ungekoppelte Homogenisierung oder experimentell bestimmt werden.

In Ω' dagegen erfolgt hier die inelastische Materialmodellierung der einzelnen Materialkomponenten auf der Feinskala. Zur Gewährleistung objektiver Strukturantworten wird das feinskalige Materialmodell in Ω' gradientenerweitert (siehe Abschnitt 2.4.2) oder es wird die Methode des netzadaptierten Entfestigungsmoduls eingesetzt (siehe Abschnitt 2.4.1). In Interface-Schichten Γ^{IF} zwischen Fasern und Matrixmaterial wird der Ansatz regularisierter starker Diskontinuitäten verwendet (siehe Abschnitt 2.2.2).

Beim Modellwechsel von der Grobskalen- zur Zweiskalenformulierung bei Erreichen von $\varepsilon_v \geq \varepsilon_v^{el, \max}$ entstehen keine Konsistenzprobleme durch Geschichtsvariablen der Materialformulierung, da das inelastische Verhalten erst nach diesem Modellwechsel einsetzt.

Die folgenden Gleichungen werden für heterogene Materialien mit Interface-Schichten und für den Fall der Gradientenerweiterung angegeben. Für Anwendung des Modells auf homogene Materialien entfallen die "Interface-Terme" und bei Verwendung der Methode des netzadaptierten Entfestigungsmoduls entfällt die Evolutionsgleichung der nichtlokalen Verzerrung und die Schädigungsentwicklung wird durch die lokale äquivalente Verzerrung kontrolliert.

4.2.2 Additive Zerlegung

Die nichtlokale Verzerrung $\tilde{\varepsilon}_v$ wird in dieser Arbeit ausschließlich in Ω' eingeführt, da in $\bar{\Omega}$ das Materialverhalten elastisch ist. Sie dient der Regularisierung des feinskaligen Materialmodells. Dementsprechend wird $\tilde{\varepsilon}_v$ hier als feinskalige Variable aufgefasst. Auf dem Rand des Zweiskalengebiets Γ' soll die natürliche Randbedingung $\tilde{\varepsilon}_{v,n} = \mathbf{0}$ gelten. Auch die Verschiebungsdiskontinuitäten $[\mathbf{u}]$ in Interface-Bereichen Γ^{IF} von Ω' werden als feinskalige Variablen verstanden. So erfolgt die additive Zerlegung hier ausschließlich für die Verschiebungen und deren Testfunktionen im Zweiskalengebiet.

$$\begin{array}{l}
 \mathbf{u} = \begin{cases} \bar{\mathbf{u}} + \mathbf{u}' & \text{in } \Omega' \\ \bar{\mathbf{u}} & \text{in } \bar{\Omega} \end{cases} & \delta \mathbf{u} = \begin{cases} \delta \bar{\mathbf{u}} + \delta \mathbf{u}' & \text{in } \Omega' \\ \delta \bar{\mathbf{u}} & \text{in } \bar{\Omega} \end{cases} \\
 \boldsymbol{\varepsilon} = \begin{cases} \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \boldsymbol{\varepsilon}' & \text{in } \Omega' \\ \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} & \text{in } \bar{\Omega} \end{cases} & \delta \boldsymbol{\varepsilon} = \begin{cases} \delta \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \delta \boldsymbol{\varepsilon}' & \text{in } \Omega' \\ \delta \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} & \text{in } \bar{\Omega} \end{cases} \\
 \text{Interface-Diskontinuität: } [\mathbf{u}] = \begin{cases} [\mathbf{u}'] & \text{in } \Omega' \\ \mathbf{0} & \text{in } \bar{\Omega} \end{cases} & [\delta \mathbf{u}] = \begin{cases} [\delta \mathbf{u}'] & \text{in } \Omega' \\ \mathbf{0} & \text{in } \bar{\Omega} \end{cases} \\
 \text{nichtlokale Verzerrung: } \tilde{\varepsilon}_v = \begin{cases} \tilde{\varepsilon}_v & \text{in } \Omega' \\ 0 & \text{in } \bar{\Omega} \end{cases} & \delta \tilde{\varepsilon}_v = \begin{cases} \delta \tilde{\varepsilon}_v & \text{in } \Omega' \\ 0 & \text{in } \bar{\Omega} \end{cases}
 \end{array} \quad (4.11)$$

4.2.3 Schwache Form des Zweiskalenmodells

Das betrachtete Randwertproblem einer ebenen Struktur aus faserverstärktem Material wird auf der Feinskala durch folgende schwache Form (Gleichungen (2.17) und (2.49)) beschrieben

$$\begin{array}{l}
 - \text{Gleichgewicht } \forall \delta \mathbf{u} : \\
 \int_{\Omega^{kont}} \delta \boldsymbol{\varepsilon} : \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\varepsilon}, \tilde{\varepsilon}_v, \mathbf{q}) dV + \int_{\Gamma^{IF}} [\delta \mathbf{u}] \cdot \mathbf{t} dA - \int_{\Omega} \delta \mathbf{u} \cdot \hat{\mathbf{b}} dV - \int_{\partial \Omega_t} \delta \mathbf{u} \cdot \hat{\mathbf{t}} dA = 0 \\
 - \text{Nichtlokale Verzerrung } \forall \delta \tilde{\varepsilon}_v \text{ jeweils in } \Omega^{kont, k} : \\
 \int_{\Omega^{kont, k}} c \nabla \delta \tilde{\varepsilon}_v \cdot \nabla \tilde{\varepsilon}_v dV + \int_{\Omega^{kont, k}} \delta \tilde{\varepsilon}_v (\tilde{\varepsilon}_v - \varepsilon_v) dV = 0 .
 \end{array} \quad (4.12)$$

Bei feinskaliger Diskretisierung im gesamten Gebiet wäre die Lösung dieser schwachen Form die sogenannte Feinskalenlösung (FSL). Durch die Aufteilung der Struktur Ω in das Grobskalengebiet $\bar{\Omega}$ und das Zweiskalengebiet Ω' und mit der additiven Zerlegung der Verschiebungen und deren Testfunktionen (4.11) wird aus dem Feinskalenproblem (4.12) folgendes Zweiskalenproblem. Die schwache Form des Gleichgewichts zerfällt dabei wegen der linearen Unabhängigkeit der Testfunktionen $\delta\bar{\mathbf{u}}$ und $\delta\mathbf{u}'$ in das Grob- und das Feinskalenproblem. Darüber hinaus beinhaltet das Zweiskalenproblem die Evolutionsgleichung der nichtlokalen Verzerrung in den n_k Kontinuumsteilbereichen $\Omega'^{kont,k}$ in Ω' :

– Grobskalenproblem $\forall \delta\bar{\mathbf{u}}$ in Ω : (4.13)

$$\int_{\bar{\Omega}} \delta\bar{\boldsymbol{\varepsilon}} : \boldsymbol{\sigma}(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}) dV + \int_{\Omega'} \delta\bar{\boldsymbol{\varepsilon}} : \boldsymbol{\sigma}(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \boldsymbol{\varepsilon}', \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_v, \mathbf{q}) dV - \int_{\Omega} \delta\bar{\mathbf{u}} \cdot \hat{\mathbf{b}} dV - \int_{\partial\Omega_t} \delta\bar{\mathbf{u}} \cdot \hat{\mathbf{t}} dA = 0$$

– Feinskalenproblem $\forall \delta\mathbf{u}'$ in Ω' :

$$\int_{\Gamma^{IF}} [\delta\mathbf{u}'] \cdot \mathbf{t} dA + \int_{\Omega'^{kont}} \delta\boldsymbol{\varepsilon}' : \boldsymbol{\sigma}(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \boldsymbol{\varepsilon}', \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_v, \mathbf{q}) dV - \int_{\Omega'} \delta\mathbf{u}' \cdot \hat{\mathbf{b}} dV - \int_{\partial\Omega'_t} \delta\mathbf{u}' \cdot \hat{\mathbf{t}} dA = 0$$

– Nichtlokale Verzerrung $\forall \delta\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_v$ jeweils in $\Omega'^{kont,k}$:

$$\int_{\Omega'^{kont,k}} c \nabla \delta\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_v \cdot \nabla \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_v dV + \int_{\Omega'^{kont,k}} \delta\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_v (\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_v - \boldsymbol{\varepsilon}_v) dV = 0 .$$

Die Interface-Bereiche in Ω' sind hierbei mit Γ^{IF} bezeichnet und das Zweiskalengebiet ohne die Interface-Bereiche wird $\Omega'^{kont} := \Omega' \setminus \Gamma^{IF} = \bigcup_{k=1}^{n_k} \Omega'^{kont,k}$ genannt. Das nichtlineare Zweiskalenproblem ist durch die Spannungen $\boldsymbol{\sigma}$ und die nichtlokale Verzerrung $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_v$ im Gebiet Ω' gekoppelt.

4.2.4 Diskretisierung

Sowohl die grob- als auch die feinskaligen Variablen der schwachen Form (4.13) werden durch Finite Elemente diskretisiert.

• Grobskalige Variablen

Für die grobskaligen Verschiebungen und Testfunktionen in Ω werden folgende Ansätze gewählt

$$\bar{\mathbf{u}} \approx \bar{\mathbf{u}}^h = \bar{\mathbf{N}} \bar{\mathbf{d}}, \quad \delta\bar{\mathbf{u}} \approx \delta\bar{\mathbf{u}}^h = \bar{\mathbf{N}} \delta\bar{\mathbf{d}}, \quad \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^h = \bar{\mathbf{B}} \bar{\mathbf{d}}, \quad \delta\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^h = \bar{\mathbf{B}} \delta\bar{\mathbf{d}}, \quad (4.14)$$

mit polynomialen Ansatzfunktionen $\bar{\mathbf{N}}$ zwischen den grobskaligen Knotenverschiebungen $\bar{\mathbf{d}}$ eines Finiten Elements und dem zugehörigen B-Operator $\bar{\mathbf{B}}$. Grobskalige Systemfreiheitsgrade $\bar{\mathbf{D}} = \bigcup_{\bar{e}=1}^{\bar{n}_{ele}} \bar{\mathbf{d}}_{\bar{e}}$ werden mit Großbuchstaben bezeichnet (Bild 4.2). Dabei ist \bar{n}_{ele} die Anzahl an Grobskalenelementen \bar{e} in Ω . Der Operator $\bigcup_{\bar{e}}$ bezeichnet die Assemblierung bezüglich der grobskaligen Diskretisierung.

- **Feinskalige Variablen**

Die Diskretisierung der feinskaligen Variablen \mathbf{u}' , $[\mathbf{u}']$ und $\tilde{\varepsilon}_v$ in Ω' wird als hierarchische h–Verfeinerung der Grobskalendiskretisierung eingeführt, siehe Bild 4.2. Dies hat mehrere Gründe: Es ermöglicht eine einfache Umsetzung der adaptiven, grobskalenelementweisen Ausdehnung des Zweiskalengebiets bei fortschreitender Beanspruchung und eine zu den Materialkomponenten konforme feinskalige Diskretisierung. Darüber hinaus können dadurch hohe Gradienten im feinskaligen Verschiebungsverlauf, z.B. in Lokalisierungsbereichen, gut approximiert werden. Die entsprechenden polynomialen Verschiebungsansätze in einem feinskaligen Element mit feinskaligen Elementfreiheitsgraden \mathbf{d}' lauten

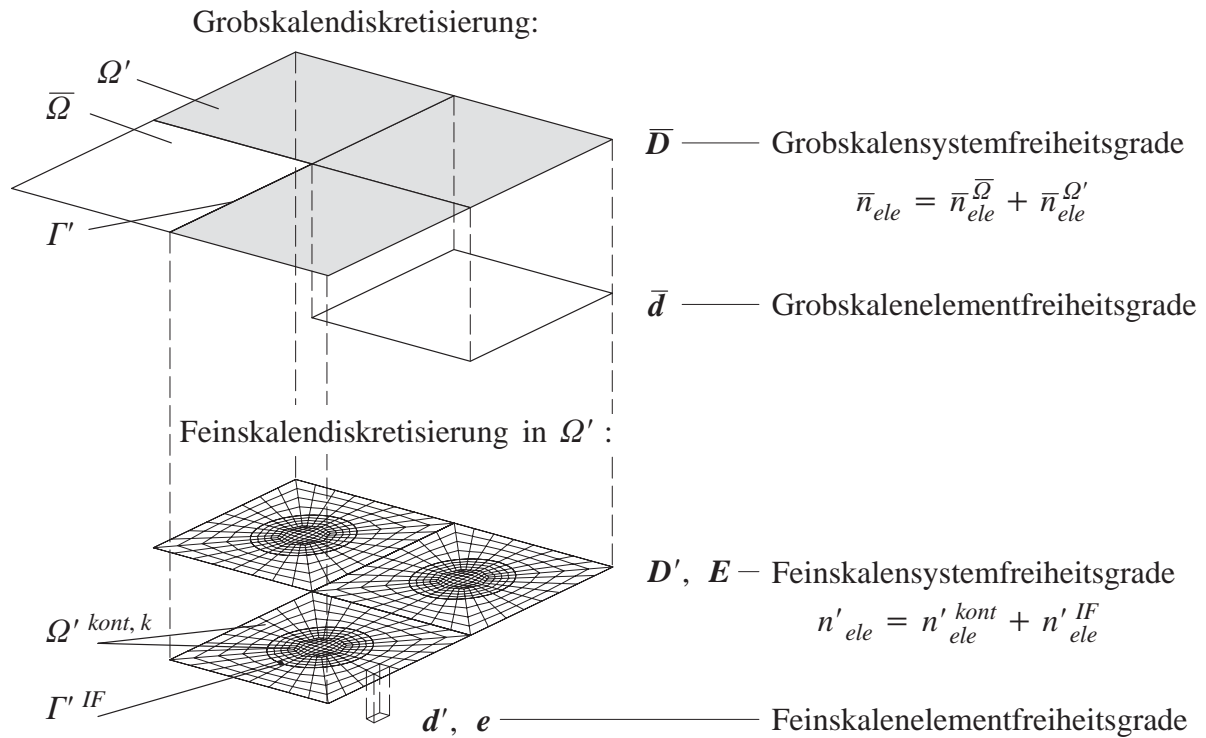
$$\mathbf{u}' \approx \mathbf{u}'^h = \mathbf{N}' \mathbf{d}', \quad \delta \mathbf{u}' \approx \delta \mathbf{u}'^h = \mathbf{N}' \delta \mathbf{d}', \quad \varepsilon'^h = \mathbf{B}' \mathbf{d}', \quad \delta \varepsilon'^h = \mathbf{B}' \delta \mathbf{d}'. \quad (4.15)$$

Die diskreten Verschiebungssprünge über die Interfaces sind dann

$$[\mathbf{u}'] \approx [\mathbf{u}'^h] = \mathbf{A} \mathbf{L} \mathbf{N}' \mathbf{d}', \quad [\delta \mathbf{u}'] \approx [\delta \mathbf{u}'^h] = \mathbf{A} \mathbf{L} \mathbf{N}' \delta \mathbf{d}', \quad (4.16)$$

vergleiche Abschnitt 2.2.1 und 2.2.2. Die nichtlokale Verzerrung wird nach Gleichung (2.50) diskretisiert. Der Index h , zur Kennzeichnung der diskreten Variablen, wird im Folgenden nicht weiter mitgeführt. Feinskalige Systemfreiheitsgrade werden als $\mathbf{D}' = \cup_{e'=1}^{n'_{ele}} (\mathbf{d}'_{e'})$ bzw. $\mathbf{E} = \cup_{e'=1}^{n'_{ele}} (\mathbf{e}_{e'})$ bezeichnet mit n'_{ele} Feinskalenelementen e' , davon n'_{ele}^{kont} Kontinuums– und n'_{ele}^{IF} Interface–Elementen (Bild 4.2). Der Operator $\cup_{e'}$ bezeichnet die Assemblierung bezüglich der feinskaligen Diskretisierung. Bei der Assemblierung der Elementfreiheitsgrade der nichtlokalen Verzerrungen $\mathbf{e}_{e'}$ ist ihre Unabhängigkeit in den einzelnen Bereichen $\Omega'^{kont,k}$ zu berücksichtigen.

Die lineare Unabhängigkeit der fein– und grobskaligen diskreten Verschiebungen $\bar{\mathbf{u}}$ und \mathbf{u}' sowie der diskreten Testfunktionen $\delta \bar{\mathbf{u}}$ und $\delta \mathbf{u}'$ wird in dieser Arbeit durch die Forderung $\mathbf{u}' = \mathbf{0}$ bzw. $\delta \mathbf{u}' = \mathbf{0}$ an den Knoten der grobskaligen Elemente gewährleistet. Bild 4.2 zeigt eine mögliche Diskretisierung der grob– und feinskaligen Variablen.



mit $\mathbf{u}' = \mathbf{0}$ in $\bar{\Omega}$ und auf Γ'
 $\mathbf{u}' = \mathbf{0}$ an Knoten der Grobskalenelemente
 $\tilde{\varepsilon}_{v,n} = \mathbf{0}$ auf Γ'

Bild 4.2: Grob- und feinskalige Diskretisierung, Bezeichnung der Freiheitsgrade

Die Grobskalendiskretisierung ist so fein zu wählen, dass der Diskretisierungsfehler im Grobskalengebiet tolerierbar bleibt. Die Feinskalendiskretisierung muss bei heterogenen Materialien die Materialstruktur auflösen können, ebenso wie die Lokalisierungszone bei Materialversagen und den Diskretisierungsfehler im Zweiskalengebiet akzeptabel klein halten.

Im Bereich der Fluidodynamik hat es sich eingebürgert, die feinskaligen Variablen über die grobskaligen Freiheitsgrade zu parametrisieren, siehe beispielsweise Gravemeier (2003). Dann sind die feinskaligen Ansatzfunktionen Unbekannte, die wiederum durch polynomiale Ansätze diskretisiert werden. Eine derartige Diskretisierung impliziert von vornherein, dass die feinskaligen Freiheitsgrade statisch kondensiert werden. Sie bietet aber sonst keinen Vorteil im Vergleich zu der hier eingeführten Diskretisierung.

- **Diskrete schwache Form des Zweiskalenproblems**

Die Ansätze (4.14) – (4.16) und (2.50) führen auf folgende diskrete Form des nichtlinearen Zweiskalenproblems (4.13):

– Grobskalenproblem $\forall \delta \bar{\mathbf{D}}$ in Ω :

$$\bigcup_{\bar{e}=1}^{\bar{n}_{ele}} \underbrace{\int_{\bar{\Omega}} \bar{\mathbf{B}}^T \boldsymbol{\sigma}(\bar{\mathbf{D}}) dV}_{\bar{\mathbf{f}}_{int}^{\bar{e}}} + \bigcup_{e'=1}^{n'_{ele}} \underbrace{\int_{\Omega_{e'}} \bar{\mathbf{B}}^T \boldsymbol{\sigma}(\bar{\mathbf{D}}, \mathbf{D}', \mathbf{E}, \mathbf{q}) dV}_{\bar{\mathbf{f}}_{int}^{e'}} - \bigcup_{\bar{e}=1}^{\bar{n}_{ele}} \underbrace{\left[\int_{\bar{\Omega}} \bar{\mathbf{N}}^T \hat{\mathbf{b}} dV + \int_{\partial \bar{\Omega}_{\bar{e},t}} \bar{\mathbf{N}}^T \hat{\mathbf{t}} dA \right]}_{\bar{\mathbf{f}}_{ext}^{\bar{e}}} = \mathbf{0}$$

– Feinskalenproblem $\forall \delta \mathbf{D}'$ in Ω' :

$$\bigcup_{e'=1}^{n'_{ele}^{kont}} \underbrace{\int_{\Omega_{e'}} \mathbf{B}'^T \boldsymbol{\sigma}(\bar{\mathbf{D}}, \mathbf{D}', \mathbf{E}, \mathbf{q}) dV}_{\mathbf{f}'_{int}{}^{kont,e'}} + \bigcup_{e'=1}^{n'_{IF}{}^{ele}} \underbrace{\int_{\Gamma_{e'}^{IF}} (\mathbf{ALN}')^T \mathbf{t} dA}_{\mathbf{f}'_{int}{}^{IF,e'}} - \bigcup_{e'=1}^{n'_{ele}} \underbrace{\left[\int_{\Omega_{e'}} \mathbf{N}'^T \hat{\mathbf{b}} dV + \int_{\partial \Omega_{e',t}} \mathbf{N}'^T \hat{\mathbf{t}} dA \right]}_{\mathbf{f}'_{ext}{}^{e'}} = \mathbf{0} \quad (4.17)$$

– Nichtlokale Verzerrung $\forall \delta \mathbf{E}$ in Ω'^{kont} :

$$\bigcup_{e'=1}^{n'_{ele}^{kont}} \underbrace{\left[\int_{\Omega_{e'}} c \mathbf{B}_E^T \nabla \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_v dV + \int_{\Omega_{e'}} \mathbf{N}_E (\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_v - \boldsymbol{\varepsilon}_v(\boldsymbol{\varepsilon})) dV \right]}_{\mathbf{f}'_{int}{}^{E,e'}} = \mathbf{0} ,$$

mit \bar{n}_{ele} Grobskalenelementen, davon $\bar{n}_{ele}^{\bar{\Omega}}$ Elemente in $\bar{\Omega}$ und $\bar{n}_{ele}^{\Omega'}$ Elemente in Ω' . Das Grobskalenproblem erstreckt sich über das gesamte Gebiet. Hierbei sind die Werkstoffbeziehungen im Grobskalenbereich $\bar{\Omega}$ elastisch und an den Integrationspunkten der Grobskalenelemente auszuwerten. Im Zweiskalenbereich Ω' hingegen ist das Materialverhalten nichtlinear und auch zur Berechnung der grobskaligen internen Kraft $\bar{\mathbf{f}}_{int}$ an den Integrationspunkten der Feinskalenelemente auszuwerten. Das Feinskalenproblem und die Evolutionsgleichung der nichtlokalen Verzerrung sind auf den Zweiskalenbereich Ω' beschränkt. Zur Berechnung der internen Kräfte \mathbf{f}'_{int} muss zwischen den Kontinuums- und Interface-Bereichen unterschieden werden.

4.3 Lösung des Zweiskalenproblems – Annahme lokaler Träger

Im Rahmen einer inkrementell-iterativen Pfadverfolgung mit dem Newton-Raphson-Verfahren wird die Lösung des linearisierten Zweiskalenproblems wegen der starken Skalenkopplung simultan vorgenommen, vergleiche Abschnitt 3.3. Die Verwendung eines direkten Gleichungslösers für das diskrete und linearisierte Zweiskalengleichungssystem ist im Allgemeinen durch die große Anzahl an feinskaligen Freiheitsgraden extrem speicher- und rechenzeitaufwändig bzw. wegen der Problemgröße unmöglich. Deshalb wird in dieser Arbeit, der Idee von Brezzi et al. (1997), Ladevèze (1999) folgend, ein lokaler, grobskalenelementweise begrenzter Träger für die feinskaligen Variablen \mathbf{u}' und $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_v$ sowie deren Testfunktionen $\delta \mathbf{u}'$ und $\delta \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_v$ eingeführt. Dies führt zu einer deutlichen Steigerung der Effizienz und erleichtert die adaptive Anpassung des Zweiskalenbereichs an den aktuellen Beanspruchungszustand. Die grobskalige Variable $\bar{\mathbf{u}}$ bzw. $\delta \bar{\mathbf{u}}$ behält ihren globalen Träger.

Alternativ könnte das Zweiskalenproblem partitioniert gelöst werden, wie in Abschnitt 3.3 beschrieben. Da durch die Nichtlinearität und starke Kopplung zwischen den Skalen in den Anwendungen dieser Arbeit die Konvergenzeigenschaften der partitionierten Lösung im Allgemeinen unbefriedigend sind, kommt diese Möglichkeit hier jedoch nicht zum Einsatz.

4.3.1 Annahme lokaler Träger

Durch die *Lokalitätsannahme* zerfallen die Feinskalengleichung und die Evolutionsgleichung der nichtlokalen Verzerrung der schwachen Form (4.13) bzw. (4.17) in entkoppelte und dadurch a priori parallele Teilprobleme in jedem Grobskalenelement. Wie bei Gebietszerlegungsmethoden werden so, statt eines großen, viele kleine Gleichungssysteme gelöst. Die nun lokalen Feinskalenfreiheitsgrade können durch statische Kondensation aus dem globalen Grobskalenproblem eliminiert werden.

Mit der Lokalitätsannahme stellt sich gleichzeitig die Frage nach adäquaten Rand- bzw. Übergangsbedingungen für die feinskaligen Variablen \mathbf{u}' und $\tilde{\epsilon}_v$ auf den künstlich eingeführten inneren *Kopplungsrandern* Γ_{ms} zwischen den Grobskalenelementen m und s (Bild 4.3 (b)).

So wird im folgenden Kapitel untersucht, inwiefern die Lokalität der feinskaligen Verschiebungen \mathbf{u}' ermöglicht werden kann, ohne dadurch den für die Genauigkeit der Lösung notwendigen Informationsfluss zu unterdrücken.

Für die nichtlokale Verzerrung $\tilde{\epsilon}_v$ wird im Rahmen dieser Arbeit, zur Vereinfachung und um zusätzlichen numerischen Aufwand zu vermeiden, ausschließlich die natürliche Randbedingung (2.48) auf den Kopplungsrandern eingesetzt. Diese Randbedingung könnte unter Umständen hinderlich für die Ausbreitung von Schädigungsbereichen sein. Deshalb wird der Einfluss dieser Annahme auf die Genauigkeit der Methode im Auge behalten.

In Abschnitt 3.4.2 wurde, im Zusammenhang mit nicht überlappenden Gebietszerlegungsmethoden, die Problematik des Umgangs mit ungelagerten Teilgebieten sowie der Formulierung der Nebenbedingungen an den Eckpunkten von Teilgebieten angeschnitten. Diese Themen bedürfen hier keiner weiteren Beachtung, da an den Knoten der Grobskalenelemente $\mathbf{u}' = \mathbf{0}$ gilt.

Im Unterschied zu Substrukturmethoden (Abschnitt 3.4.2) werden die feinskaligen Freiheitsgrade \mathbf{D}' und \mathbf{E} am Rand der Grobskalenelemente als lokale Freiheitsgrade behandelt und aus dem globalen Gleichungssystem durch statische Kondensation eliminiert. Die Anzahl der globalen Freiheitsgrade reduziert sich dadurch erheblich.

Bild 4.3 stellt die Diskretisierung der Variablen (a) ohne und (b) mit Lokalitätsannahme für die Feinskalenvariablen gegenüber. Die Lokalitätsannahme ist ein weiterer Grund dafür, die Feinskalendiskretisierung als hierarchische h -Verfeinerung der Grobskalendiskretisierung einzuführen, vergleiche Abschnitt 4.2.4.

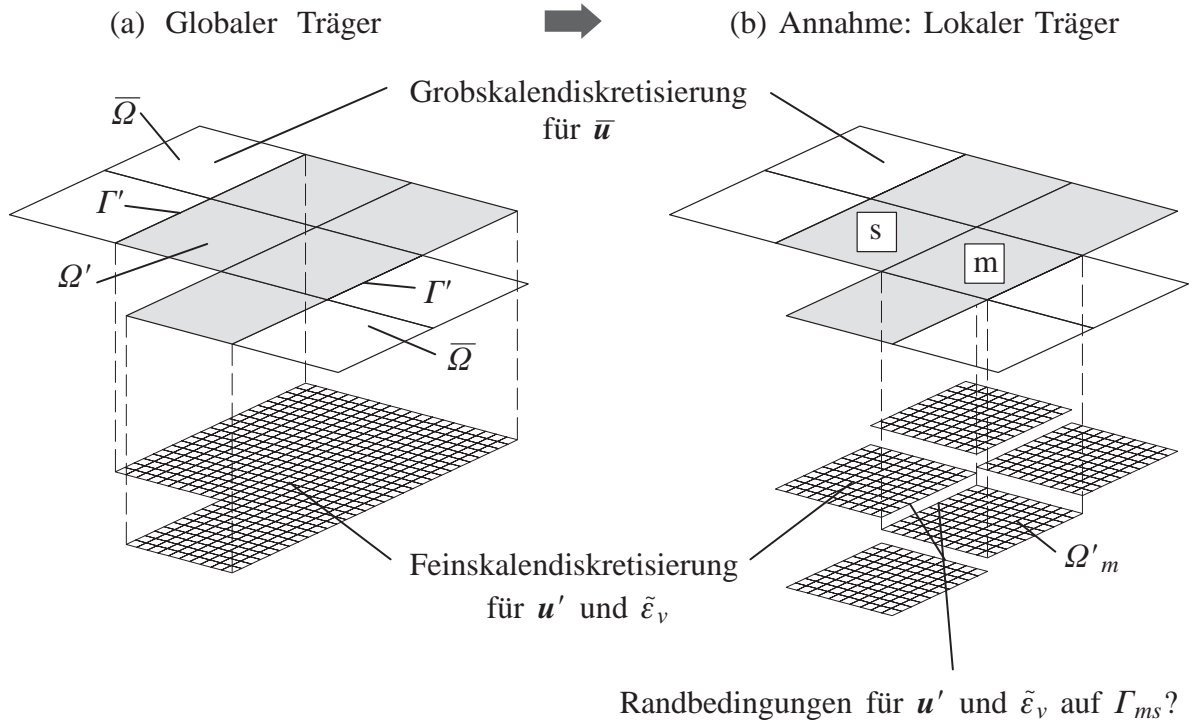


Bild 4.3: Vergleich: Globaler Träger – lokaler Träger für die Feinskalenvariablen

4.3.2 Schwache Form mit Lokalitätsannahme

Um den Blick auf das Wesentliche zu lenken, werden die Gleichungen in diesem Kapitel für die einfache Randbedingung $\mathbf{u}' = \mathbf{0}$ auf den Kopplungsrändern Γ_{ms} angegeben. Die Formulierung des Zweiskalenmodells mit alternativen Rand- bzw. Übergangsbedingungen auf Γ_{ms} ist Thema des folgenden Kapitels. Mit der Randbedingung $\mathbf{u}' = \mathbf{0}$ auf Γ_{ms} lautet die schwache Form des Zweiskalenmodells:

– (a) Grobskalenproblem $\forall \delta \bar{\mathbf{u}}$ im Gesamtgebiet Ω :

$$\delta_{\bar{\mathbf{u}}} \Pi_p := \int_{\bar{\Omega}} \delta \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} : \boldsymbol{\sigma}(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}) dV + \int_{\Omega'} \delta \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} : \boldsymbol{\sigma}(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \boldsymbol{\varepsilon}', \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_v, \mathbf{q}) dV - \int_{\Omega} \delta \bar{\mathbf{u}} \cdot \hat{\mathbf{b}} dV - \int_{\partial \Omega_t} \delta \bar{\mathbf{u}} \cdot \hat{\mathbf{t}} dA = 0 \quad (4.18)$$

– (b) Feinskalenprobleme jeweils $\forall \delta \mathbf{u}'$ in $\Omega'_{\bar{\varepsilon}}$:

$$\delta_{\mathbf{u}'} \Pi_p^{\bar{\varepsilon}} := \int_{\Gamma_{IF}^{\bar{\varepsilon}}} [\delta \mathbf{u}'] \cdot \mathbf{t} dA + \int_{\Omega'_{\bar{\varepsilon}}^{kont}} \delta \boldsymbol{\varepsilon}' : \boldsymbol{\sigma}(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \boldsymbol{\varepsilon}', \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_v, \mathbf{q}) dV - \int_{\Omega'_{\bar{\varepsilon}}} \delta \mathbf{u}' \cdot \hat{\mathbf{b}} dV - \int_{\partial \Omega'_{i,\bar{\varepsilon}}} \delta \mathbf{u}' \cdot \hat{\mathbf{t}} dA = 0$$

– (c) Nichtlokale Verzerrung jeweils $\forall \delta \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_v$ in $\Omega'_{\bar{\varepsilon}}^{kont,k}$:

$$\delta_{\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_v} \Pi_p^{\bar{\varepsilon}} := \int_{\Omega'_{\bar{\varepsilon}}^{kont,k}} c \nabla \delta \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_v \cdot \nabla \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_v dV + \int_{\Omega'_{\bar{\varepsilon}}^{kont,k}} \delta \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_v \cdot (\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_v - \boldsymbol{\varepsilon}_v) dV = 0 .$$

Sie beinhaltet neben dem weiterhin globalen Grobskalenproblem das Feinskalenproblem und die Definitionsgleichung der nichtlokalen Verzerrungen, die nun jeweils auf das Gebiet

$\Omega'_{\bar{e}} \subset \Omega'$ des jeweiligen Grobkalenelements \bar{e} in Ω' beschränkt sind. An dieser Stelle soll die Abkürzung

$$\delta_x \Pi := \frac{\partial \Pi}{\partial x} \delta x \quad (4.19)$$

eingeführt werden. Der Kontinuumsbereich im Grobkalenelement \bar{e} wird $\Omega'_{\bar{e}}{}^{kont}$ genannt und der Interface-Bereich heißt $\Gamma'_{\bar{e}}{}^{IF}$. Das Zweiskalenproblem (4.18) ist im Gegensatz zu Gleichung (4.13) nur noch *lokal* im jeweiligen Grobkalenelement \bar{e} durch die Spannungen σ und die nicht-lokale Verzerrung $\tilde{\varepsilon}_v$ gekoppelt.

4.3.3 Diskretes Zweiskalenproblem mit Lokalitätsannahme

Für Elementfreiheitsgrade werden nach Einführung eines lokalen Trägers weiterhin Kleinbuchstaben (d', e, \bar{d}) und für Grobkalensystemfreiheitsgrade \bar{D} Großbuchstaben verwendet. Neu sind nun die Vektoren der im jeweiligen Grobkalenelement \bar{e} assemblierten Feinskalensfreiheitsgrade $D'_{\bar{e}}$ und $E_{\bar{e}}$, die ebenfalls mit Großbuchstaben bezeichnet werden, wie in Bild 4.4 angegeben.

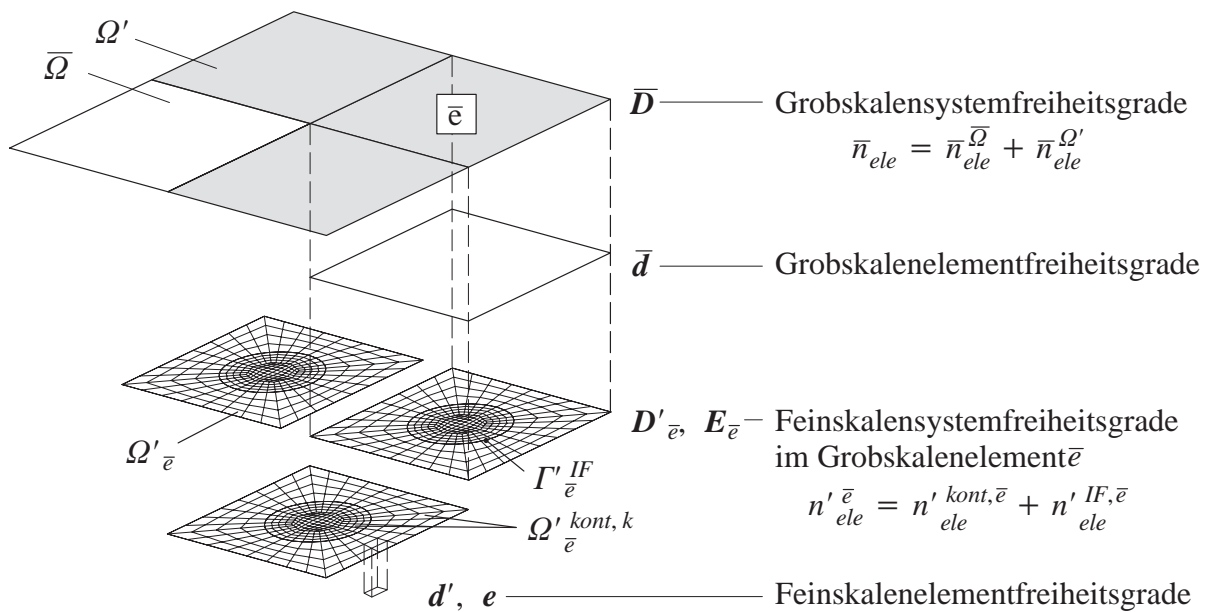


Bild 4.4: Bezeichnung der grob- und feinskaligen Freiheitsgrade mit lokalem Träger

Mit den Ansätzen (4.14)–(4.16) und (2.50) erhält man das nichtlineare, diskrete Zweiskalenproblem mit Lokalisierungsannahme:

– Grobskalenproblem $\forall \delta \bar{\mathbf{D}}$ im Gesamtgebiet Ω :

$$\bigcup_{\bar{e}=1}^{\bar{n}_{ele}} \bar{\mathbf{f}}_{int}^{\bar{e}} + \bigcup_{e'=1}^{n'_{ele}} \bar{\mathbf{f}}_{int}^{e'} - \bigcup_{\bar{e}=1}^{\bar{n}_{ele}} \bar{\mathbf{f}}_{ext}^{\bar{e}} = \mathbf{0}$$

– Feinskalenprobleme $\forall \delta \mathbf{D}'_{\bar{e}}$ in $\Omega'_{\bar{e}}$:

$$\bigcup_{e'=1}^{n'_{kont,\bar{e}}} \mathbf{f}'_{int}{}^{kont,e'} + \bigcup_{e'=1}^{n'_{IF,\bar{e}}} \mathbf{f}'_{int}{}^{IF,e'} - \bigcup_{e'=1}^{n'_{ele}} \mathbf{f}'_{ext}{}^{e'} = \mathbf{0} \quad (4.20)$$

– Nichtlokale Verzerrung $\forall \delta \mathbf{E}_{\bar{e}}$ in $\Omega'_{kont,\bar{e}}$:

$$\bigcup_{e'=1}^{n'_{ele}} \mathbf{f}'_{int}{}^{E,e'} = \mathbf{0}$$

Die elementweise definierten internen und externen Kräfte wurden in Gleichung (4.17) eingeführt. Durch die Lokalisierungsannahme sind das Feinskalenproblem und die Evolutionsgleichung der nichtlinearen Verzerrungen nun lokale Gleichungen in den einzelnen Grobskalenelementen in Ω' . Entsprechend ist n'_{ele} die Anzahl der Feinskalenelemente im Grobskalenelement \bar{e} , davon gibt es $n'_{kont,\bar{e}}$ Kontinuums- und $n'_{IF,\bar{e}}$ Interface-Elemente, siehe Bild 4.4.

4.3.4 Linearisiertes Zweiskalenproblem mit Lokalisierungsannahme

Durch Linearisierung der diskreten, nichtlinearen Gleichungen (4.20) erhält man das Gleichungssystem für die Veränderung der globalen Freiheitsgrade $\Delta \bar{\mathbf{D}}^{i+1}$ und der lokalen Freiheitsgrade $\Delta \mathbf{D}'_{\bar{e}}{}^{i+1}$ und $\Delta \mathbf{E}_{\bar{e}}{}^{i+1}$ im aktuellen Iterationsschritt von i nach $i + 1$. Der Lastschrittindex wird vernachlässigt, um die Notation möglichst übersichtlich zu halten.

$$\text{– Grobskalenproblem} \quad \mathbf{K}_{\bar{\mathbf{D}}\bar{\mathbf{D}}}^i \Delta \bar{\mathbf{D}}^{i+1} + \sum_{\bar{e}=1}^{\bar{n}_{ele}} \left(\mathbf{K}_{\bar{\mathbf{D}}\mathbf{D}'}^{\bar{e},i} \Delta \mathbf{D}'_{\bar{e}}{}^{i+1} + \mathbf{K}_{\bar{\mathbf{D}}\mathbf{E}}^{\bar{e},i} \Delta \mathbf{E}_{\bar{e}}{}^{i+1} \right) = -\bar{\mathbf{R}}^i \quad (a)$$

Im Gebiet jedes Grobskalenelements \bar{e} in Ω' : (4.21)

$$\text{– Feinskalenproblem} \quad \mathbf{K}_{\mathbf{D}'\bar{\mathbf{d}}}^{\bar{e},i} \Delta \bar{\mathbf{d}}_{\bar{e}}{}^{i+1} + \mathbf{K}_{\mathbf{D}'\mathbf{D}'}^{\bar{e},i} \Delta \mathbf{D}'_{\bar{e}}{}^{i+1} + \mathbf{K}_{\mathbf{D}'\mathbf{E}}^{\bar{e},i} \Delta \mathbf{E}_{\bar{e}}{}^{i+1} = -\mathbf{R}'_{\bar{e},i} \quad (b)$$

$$\text{– Nichtlokale Verzerrung} \quad \mathbf{K}_{\mathbf{E}\bar{\mathbf{d}}}^{\bar{e},i} \Delta \bar{\mathbf{d}}_{\bar{e}}{}^{i+1} + \mathbf{K}_{\mathbf{E}\mathbf{D}'}^{\bar{e},i} \Delta \mathbf{D}'_{\bar{e}}{}^{i+1} + \mathbf{K}_{\mathbf{E}\mathbf{E}}^{\bar{e},i} \Delta \mathbf{E}_{\bar{e}}{}^{i+1} = -\mathbf{R}_{\bar{e}}^{\bar{e},i} \quad (c)$$

Da die feinskaligen Variablen in den einzelnen Grobskalenelementen in Ω' unabhängig voneinander sind, summieren sich die skalenkoppelnden Beiträge der Grobskalenelemente für das Grobskalenproblem (4.21) (a) lediglich auf (keine Assemblierung). Die feinskaligen Gleichungen (b) und (c) können lokal in den einzelnen Grobskalenelementen gelöst werden.

Die "Steifigkeiten" des Grobskalenproblems sind als partielle Ableitungen der internen Kraft $\bar{\mathbf{f}}_{int}$ nach den jeweiligen Variablen $\bar{\mathbf{D}}$, \mathbf{D}' und \mathbf{E} definiert:

$$\mathbf{K}_{\bar{\mathbf{D}}\bar{\mathbf{D}}} = \underbrace{\bigcup_{\bar{e}=1}^{\bar{n}_{ele}} \int_{\Omega_{\bar{e}}} \bar{\mathbf{B}}^T \mathbf{C}^{el} \bar{\mathbf{B}} dV}_{=: \mathbf{K}_{\bar{\mathbf{d}}\bar{\mathbf{d}}}^{\bar{e}}} + \underbrace{\bigcup_{e'=1}^{\bar{n}_{ele}'} \int_{\Omega_{e'}} \bar{\mathbf{B}}^T \mathbf{C}_{sek}^{ed} \bar{\mathbf{B}} dV}_{=: \mathbf{K}_{\bar{\mathbf{d}}\bar{\mathbf{d}}}^{\bar{e}}} \quad (4.22)$$

$$\mathbf{K}_{\bar{\mathbf{d}}\mathbf{D}'}^{\bar{e}} = \bigcup_{e'=1}^{n'_{ele}} \int_{\Omega_{e'}} \bar{\mathbf{B}}^T \mathbf{C}_{sek}^{ed} \mathbf{B}' dV \quad \mathbf{K}_{\bar{\mathbf{d}}\mathbf{E}}^{\bar{e}} = \bigcup_{e'=1}^{n'_{ele, \bar{e}}} \int_{\Omega_{e'}} \bar{\mathbf{B}}^T \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_v} N_E dV .$$

Entsprechend sind die "Steifigkeiten" des Feinskalenproblems die partiellen Ableitungen der internen Kraft \mathbf{f}'_{int}

$$\mathbf{K}_{\mathbf{D}'\bar{\mathbf{d}}}^{\bar{e}} = \bigcup_{e'=1}^{n'_{ele, \bar{e}}} \int_{\Omega_{e'}} \mathbf{B}'^T \mathbf{C}_{sek}^{ed} \bar{\mathbf{B}} dV \quad \mathbf{K}_{\mathbf{D}'\mathbf{E}}^{\bar{e}} = \bigcup_{e'=1}^{n'_{ele, \bar{e}}} \int_{\Omega_{e'}} \mathbf{B}'^T \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_v} N_E dV \quad (4.23)$$

$$\mathbf{K}_{\mathbf{D}'\mathbf{D}'}^{\bar{e}} = \bigcup_{e'=1}^{n'_{ele, \bar{e}}} \int_{\Omega_{e'}} \mathbf{B}'^T \mathbf{C}_{sek}^{ed} \mathbf{B}' dV + \bigcup_{e'=1}^{n'_{IF, \bar{e}}} \int_{\Gamma_{e'}^{IF}} (\mathbf{A} \mathbf{L} \mathbf{N}')^T \mathbf{Q}_{tan}^{ed} (\mathbf{A} \mathbf{L} \mathbf{N}') dV$$

und die "Steifigkeiten" der Evolutionsgleichung der nichtlokalen Verzerrung ergeben sich durch partielle Differentiation von $\bar{\mathbf{f}}_{int}^E$

$$\mathbf{K}_{\mathbf{E}\bar{\mathbf{d}}}^{\bar{e}} = - \bigcup_{e'=1}^{n'_{ele, \bar{e}}} \int_{\Omega_{e'}} N_E^T \frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_v}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} \bar{\mathbf{B}} dV \quad \mathbf{K}_{\mathbf{E}\mathbf{D}'}^{\bar{e}} = - \bigcup_{e'=1}^{n'_{ele, \bar{e}}} \int_{\Omega_{e'}} N_E^T \frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_v}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} \mathbf{B}' dV \quad (4.24)$$

$$\mathbf{K}_{\mathbf{E}\mathbf{E}}^{\bar{e}} = \bigcup_{e'=1}^{n'_{ele, \bar{e}}} \int_{\Omega_{e'}} (c \mathbf{B}_E^T \mathbf{B}_E + N_E^T N_E) dV$$

Die Residuen im aktuellen Iterations- bzw. Lastschritt berechnen sich als Differenz zwischen internen und externen Kräften:

$$\bar{\mathbf{R}} = \bigcup_{\bar{e}=1}^{\bar{n}_{ele}} \bar{\mathbf{f}}_{int}^{\bar{e}} + \bigcup_{e'=1}^{n'_{ele}} \mathbf{f}'_{int}^{e'} - \bigcup_{\bar{e}=1}^{\bar{n}_{ele}} \bar{\mathbf{f}}_{ext}^{\bar{e}} \quad (4.25)$$

$$\mathbf{R}'^{\bar{e}} = \bigcup_{e'=1}^{n'_{ele, \bar{e}}} \mathbf{f}'_{int}^{kont, e'} + \bigcup_{e'=1}^{n'_{IF, \bar{e}}} \mathbf{f}'_{int}^{IF, e'} - \bigcup_{e'=1}^{n'_{ele, \bar{e}}} \mathbf{f}'_{ext}^{e'} \quad \mathbf{R}_E^{\bar{e}} = \bigcup_{e'=1}^{n'_{ele, \bar{e}}} \mathbf{f}'_{int}^{E, \bar{e}} .$$

4.4 Algorithmische Umsetzung

Zur Lösung des linearen Gleichungssystems (4.21) werden die lokalen Feinskalenvariablen $D'_{\bar{e}}$ und $E_{\bar{e}}$ aus dem Grobskalenproblem durch statische Kondensation in den einzelnen Grobskalenelementen eliminiert, vergleiche Gleichung (3.25) – (3.27). Die statische Kondensation betrifft ausschließlich die Grobskalenelemente im Zweiskalenbereich Ω' . Mit der reduzierten Elementsteifigkeitsmatrix

$$\mathbf{K}_{red}^{\bar{e}, i} = \left\{ \mathbf{K}_{\bar{d}\bar{d}}^{\bar{e}} - \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{\bar{d}D'}^{\bar{e}} & \mathbf{K}_{\bar{d}E}^{\bar{e}} \end{bmatrix} \underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{K}_{D'D'}^{\bar{e}} & \mathbf{K}_{D'E}^{\bar{e}} \\ \mathbf{K}_{ED'}^{\bar{e}} & \mathbf{K}_{EE}^{\bar{e}} \end{bmatrix}^{-1}}_{=: (\mathbf{K}_{FS}^{\bar{e}})^{-1}} \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{D'\bar{d}}^{\bar{e}} \\ \mathbf{K}_{E\bar{d}}^{\bar{e}} \end{bmatrix} \right\} \Big|_i \quad (4.26)$$

und dem reduzierten Residuum

$$\mathbf{R}_{red}^{\bar{e}, i} = \left\{ \bar{\mathbf{R}}^{\bar{e}} - \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{\bar{d}D'}^{\bar{e}} & \mathbf{K}_{\bar{d}E}^{\bar{e}} \end{bmatrix} (\mathbf{K}_{FS}^{\bar{e}})^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{R}'^{\bar{e}} \\ \mathbf{R}_E^{\bar{e}} \end{bmatrix} \right\} \Big|_i \quad (4.27)$$

der Grobskalenelemente \bar{e} in Ω' lautet das erweiterte, linearisierte Grobskalenproblem

$$\left[\bigcup_{\bar{e}=1}^{\bar{n}_{ele}^{\bar{\Omega}}} (\mathbf{K}_{\bar{d}\bar{d}}^{\bar{e}, i}) + \bigcup_{\bar{e}=1}^{\bar{n}_{ele}^{\Omega'}} (\mathbf{K}_{red}^{\bar{e}, i}) \right] \Delta \bar{\mathbf{D}}^{i+1} = - \left[\bigcup_{\bar{e}=1}^{\bar{n}_{ele}^{\bar{\Omega}}} (\bar{\mathbf{R}}^{\bar{e}, i}) + \bigcup_{\bar{e}=1}^{\bar{n}_{ele}^{\Omega'}} (\mathbf{R}_{red}^{\bar{e}, i}) \right]. \quad (4.28)$$

Es setzt sich aus den Grobskalensteifigkeiten $\mathbf{K}_{\bar{d}\bar{d}}$ bzw. –residuen $\bar{\mathbf{R}}$ der Elemente in $\bar{\Omega}$ und den reduzierten Steifigkeiten und Residuen \mathbf{K}_{red} und \mathbf{R}_{red} der Elemente in Ω' zusammen. Das erweiterte Grobskalenproblem (4.28) beinhaltet die Auswirkung der feinen Skala auf die grobe Skala vollständig. Hierin besteht eine gewisse Analogie zur Verwendung zusätzlicher interner Freiheitsgrade in der Elementtechnologie (z.B. Simo & Rifai (1990)). Die Rückrechnung zu den feinskaligen Variablen erfolgt durch Auswertung der lokalen Gleichungen (4.21) (b) und (c) in jedem Grobskalenelement in Ω' :

$$\begin{bmatrix} \Delta D'_{\bar{e}} \\ \Delta E_{\bar{e}} \end{bmatrix}_{i+1} = (\mathbf{K}_{FS}^{\bar{e}, i})^{-1} \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} -\mathbf{R}'^{\bar{e}} \\ -\mathbf{R}_E^{\bar{e}} \end{bmatrix}_i - \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{D'\bar{d}}^{\bar{e}} \\ \mathbf{K}_{E\bar{d}}^{\bar{e}} \end{bmatrix}_i \Delta \bar{\mathbf{d}}_i^{i+1} \end{bmatrix}. \quad (4.29)$$

Der folgende Algorithmus 4.1 beschreibt die Umsetzung der simultanen Lösung des Zweiskalengleichungssystems mit Lokalisationsannahme für \mathbf{u}' und $\tilde{\varepsilon}_v$, eingebunden in eine inkrementell-iterative Pfadverfolgung.

-
- (i) Input
 Globale Initialisierung: $\bar{\mathbf{D}} = \mathbf{0}$, $\mathbf{D}'_{\bar{e}} = \mathbf{0}$, $\mathbf{E}_{\bar{e}} = \mathbf{0}$, Geschichtsvariablen $\mathbf{q} = \mathbf{0}$
 Berechnung elastische Elementsteifigkeiten $\mathbf{K}_{\bar{d}\bar{d}}^{\bar{e}}$, externe Kräfte $\bar{\mathbf{f}}_{ext, \bar{e}}$, $\mathbf{f}'_{ext, e}$
 - (ii) Globale Lastschrittsschleife (Index k)
 - (iii) Gleichgewichts–Iterationsschleife (Index i)
 - (iv) Schleife über Grobskalenelemente \bar{e}
 - (v) falls \bar{e} in Ω' im Lastschritt k : Grobskalenelement \bar{e} in Ω' , sonst:
 - (vi) Integrationspunktschleife
 - (vii) Berechnung äquivalentes Verzerrungsmaß $\tilde{\varepsilon}_v(\bar{\varepsilon}_{k+1}^i)$
 - (viii) 1. Fall: $\tilde{\varepsilon}_v < \varepsilon_v^{el, \max}$ in allen Integrationspunkten:
 Grobskalenelement \bar{e} in $\bar{\Omega}$
 - 2. Fall: $\tilde{\varepsilon}_v \geq \varepsilon_v^{el, \max}$ in mindestens einem Integrationspunkt:
 Grobskalenelement \bar{e} in Ω'
 - (ix) Aufteilung der Grobskalenelemente \bar{e} auf Prozessoren
 - (x) parallel: Schleife über Grobskalenelemente \bar{e} auf jeweiligem Prozessor
 - (xi) 1. Fall: Grobskalenelement \bar{e} in $\bar{\Omega}$:
 - (xii) Integrationspunktschleife
 - (xiii) Berechnung elastische Spannungen Glg. (2.3)
 - (xiv) Berechnung Integrationspunktbeiträge zu $\bar{\mathbf{R}}^{\bar{e}}|_{k+1}^i$
 - (xv) Assemblierung von $\bar{\mathbf{R}}^{\bar{e}}|_{k+1}^i$ und $\mathbf{K}_{\bar{d}\bar{d}}^{\bar{e}}|_{k+1}^i$
 - (xvi) 2. Fall: Grobskalenelement \bar{e} in Ω'
 - (xvii) Aktualisierung $\mathbf{D}'_{\bar{e}}|_{k+1}^i$, $\mathbf{E}_{\bar{e}}|_{k+1}^i$ nach Glg. (4.29)
 - (xviii) Schleife über Feinskalenelemente in $\Omega_{\bar{e}}$
 - (xix) Integrationspunktschleife
 - (xx) Berechnung Spannungen Glg. (2.3)
 und Materialtangente Glg. (2.31) bzw. (2.39)
 - (xxi) Berechnung Integrationspunktbeiträge zu
 Steifigkeiten und Residuen Glg. (4.22) – (4.25)
 - (xxii) Assemblierung von Feinskalenelementsteifigkeiten
 und –residuen (4.22) – (4.25)
 - (xxiii) statische Kondensation:
 Berechnung $\mathbf{K}_{red}^{\bar{e}}|_{k+1}^i$, $\mathbf{R}_{red}^{\bar{e}}|_{k+1}^i$ (Glg. (4.26), (4.27))
 - (xxiv) Assemblierung von $\mathbf{K}_{red}^{\bar{e}}|_{k+1}^i$ und $\mathbf{R}_{red}^{\bar{e}}|_{k+1}^i$ (Glg. (4.28))
 - (xxv) Lösung erweitertes Grobskalenproblem Glg. (4.28) $\rightarrow \bar{\mathbf{D}}_{k+1}^{i+1}$
 - (xxvi) falls keine Konvergenz: $i \leftarrow i + 1$ goto (iii)
 - (xxvii) Aktualisierung Geschichtsvariablen, Rückrechnung zu Spannungen, Output
 - (xxviii) $k \leftarrow k + 1$ goto (ii)

Nachfolgend werden Details beschrieben, die zur Implementation des Algorithmus 4.1 von Interesse sind.

4.4.1 Parallelität

Die Annahme eines lokalen Trägers dient der Zerlegung des Ausgangsproblems in kleinere Teilprobleme. Dass diese Teilprobleme unabhängig voneinander sind, macht eine parallele Umsetzung des Lösungsalgorithmus besonders attraktiv. So kann die Berechnung der Steifigkeiten und Residuen in den einzelnen Grobskalenelementen (Schritte (x) – (xxiv)) separat stattfinden: In diesen Schritten ist keinerlei Kommunikation zwischen den Prozessoren erforderlich. Für eine gleichmäßige Auslastung der Prozessoren ist zu beachten, dass die Berechnung der reduzierten Steifigkeiten $\mathbf{K}_{red}^{\bar{e}}$ und Residuen $\mathbf{R}_{red}^{\bar{e}}$ in den Grobskalenelementen im Zweiskalenbereich Ω' wesentlich aufwändiger ist als die Berechnung von $\mathbf{K}_{\bar{d}\bar{d}}^{\bar{e}}$ und $\bar{\mathbf{R}}^{\bar{e}}$ in den Grobskalenelementen im Grobskalenbereich $\bar{\Omega}$.

4.4.2 Berechnung der Steifigkeiten und Residuen

Im Grobskalengebiet $\bar{\Omega}$ sind lediglich die Beiträge der Grobskalenelemente zur Steifigkeit $\mathbf{K}_{\bar{D}\bar{D}}^i$ und zum Residuum $\bar{\mathbf{R}}_i$ zu berechnen. Hier gilt das homogenisierte, elastische Werkstoffgesetz $\boldsymbol{\sigma}(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}) = \mathbf{C}^{el} \bar{\mathbf{B}} \bar{\mathbf{d}}$. Die Elementsteifigkeiten sind angesichts des linear elastischen Verhaltens unveränderlich. Ihre Berechnung wird deshalb nur einmal, in Schritt (i), vorgenommen. Ebenso wird die Berechnung der externen Kräfte sowohl in $\bar{\Omega}$ als auch in Ω' nur einmal vorgenommen. Lediglich die Berechnung der grobskaligen internen Kräfte $\bar{\mathbf{f}}_{int, \bar{e}}$ muss in jedem Iterationsschritt i erfolgen (Schritt (xiv)).

Im Zweiskalengebiet Ω' sind sämtliche Steifigkeiten und internen Kräfte nach Gleichung (4.22) in jedem Iterationsschritt i zu bestimmen (Schritt (xxi)). Das Betrachten des Werkstoffverhaltens auf der Feinskala, d.h. an den Integrationspunkten der Feinskalenelemente, ist signifikant für die Genauigkeit der Lösung. Zur numerischen Integration von $\bar{\mathbf{f}}_{int, e'}$ und der Beiträge der Feinskalenelemente zu $\mathbf{K}_{\bar{D}\bar{D}}^{\bar{e}}$, $\mathbf{K}_{\bar{d}\bar{D}'}^{\bar{e}}$, $\mathbf{K}_{\bar{D}'\bar{d}}^{\bar{e}}$, $\mathbf{K}_{\bar{d}\bar{d}E}^{\bar{e}}$, $\mathbf{K}_{E\bar{d}}^{\bar{e}}$ wird folglich die Auswertung der grobskaligen Ansatzfunktionen $\bar{\mathbf{N}}$ bzw. ihrer Ableitungen $\bar{\mathbf{B}}$ an den Integrationspunkten der Feinskalenelemente benötigt. Hierfür müssen die natürlichen Grobskalenelementkoordinaten $\bar{\boldsymbol{\xi}} = [\bar{\xi}, \bar{\eta}]^T$ an den Feinskalenintegrationspunkten, deren kartesische Koordinaten $\mathbf{x} = [x, y]^T$ bekannt sind, bestimmt werden. Dies geschieht durch Inversion des Ansatzes $\mathbf{x} = \bar{\mathbf{N}}(\bar{\boldsymbol{\xi}}) \mathbf{x}_K$. Es sind \mathbf{x}_K die Knotenkoordinaten des Grobskalenelements. Für bilineare Ansätze führt dies auf eine quadratische Gleichung, die direkt gelöst werden kann, siehe Rehle (1996). Bei höherwertigen Ansätzen erhält man einen entsprechend höhergradig nichtlinearen Zusammenhang zwischen natürlichen und kartesischen Koordinaten, der nur iterativ z.B. mit dem Newton-Verfahren gelöst werden kann, siehe Elwi & Hrudey (1989). Die Feinskalenelementsteifigkeiten und –residuen sind im jeweiligen Grobskalenelement, wie in Gleichung (4.22) angegeben, zu assemblieren.

4.4.3 Statische Kondensation der feinskaligen Freiheitsgrade

Die statische Kondensation der feinskaligen Freiheitsgrade in den Grobskalenelementen, die im Zweiskalengebiet liegen (Schritt (xxiii)), bedarf jeweils der sequentiellen Anwendung der inver-

den Steifigkeit $(\mathbf{K}_{FS}^e)^{-1}$, siehe Gleichung (4.26) und (4.27). Dieses sequentiell auf dem jeweiligen Prozessor durchzuführende "Gleichungslösen" kann mit einem direkten oder einem iterativen Gleichungslöser vorgenommen werden. Als Orientierung, ob hierfür im Rahmen dieser Arbeit direkte oder iterative Gleichungslöser zu bevorzugen sind, werden für das in Abschnitt 6.2 beschriebene Beispiel die CPU-Zeiten zur Lösung des Gleichungssystems verglichen, siehe Bild 4.5. Die angegebenen Zeiten wurden im ersten Iterationsschritt eines Lastschritts kurz vor Erreichen der kritischen Last gemessen. Die Anzahl der Freiheitsgrade n_{dof} , mit denen das System diskretisiert ist, wurde hierbei sukzessive gesteigert. Das zugrunde gelegte Beispiel ist die Versagensanalyse einer Struktur aus homogenem schädigendem Material und ist typisch für die in dieser Arbeit untersuchten physikalischen Probleme. Die entsprechenden Zeiten des direkten Gleichungslösers UMFPACK (Davis (2005)) und zweier verbreiteter iterativer Lösungsmethoden: BICGSTAB und GMRES des Löserpakets AZTEC (Tuminaro et al. (1999)) wurden auf einem typischen Arbeitsplatzrechner gemessen. Das direkte Löserpaket UMFPACK verwendet eine LU-Faktorisierung unter Ausnutzung der dünnen Besetzungsstruktur der Systemmatrix (Davis & Duff (1999)). Die iterativen Lösungsmethoden BICGSTAB (BIConjugate Gradient, STABilized) und GMRES (Generalized Minimum RESidual) wurden in Verbindung mit einer ILU (Incomplete LU)-Vorkonditionierung eingesetzt. Die unvollständige LU-Faktorisierung (ILU) hat sich, verglichen mit Jacobi- und Gauß-Seidel-Vorkonditionierungen, als schnellste und robusteste Vorkonditionierung für dieses Beispiel erwiesen. BICGSTAB ist eine Weiterentwicklung des konjugierten Gradientenverfahrens, GMRES gehört zu den Krylov-Unterraumverfahren, für Details siehe Quarteroni et al. (2000).

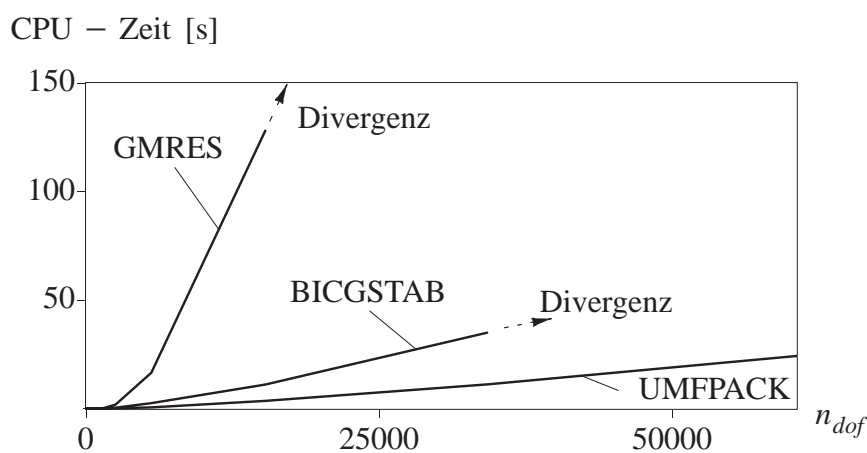


Bild 4.5: CPU-Zeiten zur sequentiellen Lösung des Gleichungssystems in einem Iterationsschritt

Die Ergebnisse in Bild 4.5 sind neben dem betrachteten Beispiel von der Implementierung, der verwendeten Rechnerplattform und vielen weiteren Einflüssen abhängig und können deshalb nicht als allgemeingültige Aussagen bezüglich direkter und iterativer Löser verstanden werden. Unter den gegebenen Umständen ist jedoch der direkte Löser den betrachteten iterativen Lösern im sequentiellen Einsatz sowohl hinsichtlich Geschwindigkeit als auch Robustheit überlegen. Beide iterativen Löser neigen zu Konvergenzproblemen, insbesondere bei Beanspruchungszuständen in der Nähe der kritischen Last, wenn die Steifigkeitsmatrix nahezu singular ist. Sofern

Konvergenz erreicht wurde, waren die iterativen Löser wegen der großen Anzahl benötigter Iterationen deutlich langsamer als der direkte Löser. Bei Diskretisierungen, die der Problemstellung angemessen fein waren, so dass die Lokalisierungszone aufgelöst wurde, konnte mit den iterativen Lösern keine Konvergenz gefunden werden.

So wird für die Problemstellungen dieser Arbeit der direkte Gleichungslöser UMFPACK zur Faktorisierung der Steifigkeiten \mathbf{K}_{FS}^e eingesetzt (vergleiche Abschnitt 3.4.1). Diese Faktorisierung braucht je Gleichgewichtssiteration nur einmal aufgestellt zu werden und wird dann zur Berechnung der reduzierten Steifigkeit (Gleichung (4.26), Schritt (xxiii)), zur Berechnung des reduzierten Residuums (Gleichung (4.27), Schritt (xxiii)) und zur Rückrechnung zu den feinskaligen Freiheitsgraden (Gleichung (4.29), Schritt (xvii)) eingesetzt.

4.4.4 Assemblierung der reduzierten Elementsteifigkeiten und –residuen

Die in Schritt (i) berechneten Steifigkeiten und externen Kräfte sowie die in Schritt (xi) berechneten internen Kräfte der Grobskalenelemente in $\bar{\Omega}$ und die reduzierten Steifigkeiten und Residuen der Grobskalenelemente in Ω' (Schritt (xxiii)) werden in Schritt (xxiv) in die Systemmatrizen des erweiterten Gleichungssystems (4.28) assembliert.

4.4.5 Lösung des erweiterten Gleichungssystems

Die Lösung des erweiterten Gleichungssystems (Gleichung (4.28)), die in Schritt (xxv) berechnet wird, ist der Vektor der grobskaligen Knotenverschiebungen im aktuellen Iterations- und Lastschritt. Im Rahmen dieser Arbeit wird hier ebenfalls der direkte, sequentielle Gleichungslöser UMFPACK verwendet.

5 Nebenbedingungen für die feinskaligen Verschiebungen

5.1 Einführung

Die Annahme eines lokalen Trägers für die feinskaligen Variablen \mathbf{u}' und $\tilde{\varepsilon}_v$ erfordert die Einführung von Nebenbedingungen als Ersatz für die Nachbarschaftseinflüsse an den Kopplungsrändern Γ_{ms} . Die Lösung unter diesen Nebenbedingungen soll möglichst die Genauigkeit der Lösung ohne Lokalisierungsannahme erreichen, und die Realisierung der Nebenbedingungen soll mit nur geringem numerischem Aufwand verbunden sein. Hierbei sind die Nebenbedingungen, die durch die Lokalität der feinskaligen Verschiebungen \mathbf{u}' notwendig werden, von grundlegendem Interesse für die Formulierung des hierarchischen Zweiskalenmodells und Thema dieses Kapitels. Für die nichtlokale Verzerrung $\tilde{\varepsilon}_v$ hingegen, die lediglich anwendungsbedingt in die Formulierung eingeht, wird die vereinfachende Annahme $\tilde{\varepsilon}_{v,n} = \mathbf{0}$ auf Γ_{ms} getroffen.

Es stellt sich die zentrale Frage, ob die Realisierung von *Übergangsbedingungen* für die feinskaligen Verschiebungen erforderlich ist, oder ob bereits vereinfachende Annahmen bezüglich des feinskaligen Verhaltens auf Γ_{ms} , im Sinne von *Randbedingungen*, zu befriedigenden Ergebnissen führen können. Diese Frage beinhaltet das Abwägen zwischen Genauigkeit einerseits und numerischem Aufwand andererseits.

Zu den *Übergangsbedingungen* gehören die Forderungen nach geometrischer Kontinuität $[\mathbf{u}'] = \mathbf{0}$ und Gleichgewicht $\sum \mathbf{t} = \mathbf{0}$ auf Γ_{ms} . Sie ersetzen die, durch die Lokalisierungsannahme verlorene, Nachbarschaft vollständig und können beispielsweise mit der *Lagrange-Multiplikatoren-*, der *Strafterm-* (penalty) oder der *erweiterten Lagrange-Multiplikatoren-Methode* (augmented Lagrange) in starker oder schwacher Form realisiert werden. Anhang A1 gibt eine kurze Einführung in diese Methoden. Sie erkaufen die Lokalität der Feinskalenprobleme auf Kosten zusätzlicher globaler Freiheitsgrade (Methode der Lagrange-Multiplikatoren) oder zusätzlicher Iterationen (erweiterte Lagrange-Multiplikatoren-Methode). Mit der Strafterm-Methode hingegen können die Übergangsbedingungen nur näherungsweise erfüllt werden. Das Lösungsverfahren für das Feinskalenproblem unter Einführung von Übergangsbedingungen entspricht einer nicht überlappenden Gebietszerlegungsmethode. Im Rahmen einer Verschiebungsformulierung steht im Allgemeinen die Forderung nach kompatiblen Verschiebungen gegenüber der Gleichgewichtsbedingung auf Γ_{ms} – die auch von der diskreten Lösung ohne Lokalisierungsannahme nicht erfüllt wird – im Vordergrund (Farhat et al. (2001) und (2003), Hund & Ramm (2006)). Die Genauigkeit der numerischen Lösung könnte jedoch durch eine gemischte Formulierung, die die Spannungen auf den Grobskalenelementrändern als zusätzliche lokale Primärvariable einführt und sowohl Verschiebungskontinuität als auch Gleichgewicht auf den Grobskalenelementrändern erfüllt, verbessert werden (Ladevèze et al. (2001)).

Randbedingungen hingegen sind approximative Nebenbedingungen, die den Verlauf von \mathbf{u}' auf Γ_{ms} postulieren. Da für die Formulierung von Randbedingungen das jeweilige benachbarte

Grobskalenelement nicht von Interesse ist, wird hier die Bezeichnung Γ_b für die Ränder eines Grobskalenelements in Ω' , die nicht auf dem Außenrand $\partial\Omega$ liegen, eingeführt. Die Bezeichnung Γ_{ms} hingegen betont, dass es sich um einen Rand zwischen zwei Grobskalenelementen m und s handelt.

Es sei angemerkt, dass diese Randbedingungen eine andere Bedeutung als die Randbedingungen an das RVE bei Homogenisierungsmethoden haben, auch wenn gewisse formale Analogien bestehen. Die Randbedingungen der Homogenisierungsmethoden bewerkstelligen den Skalenübergang von der Grob- zur Feinskala unter der Annahme der Skalenseparation. Sie stellen den grobskaligen Beanspruchungszustand auf der Feinskala dar. Hier jedoch sollen die Randbedingungen die, durch die Lokalitätsannahme eingebüßte, feinskalige Lösungsumgebung ersetzen, siehe Bild 5.1.

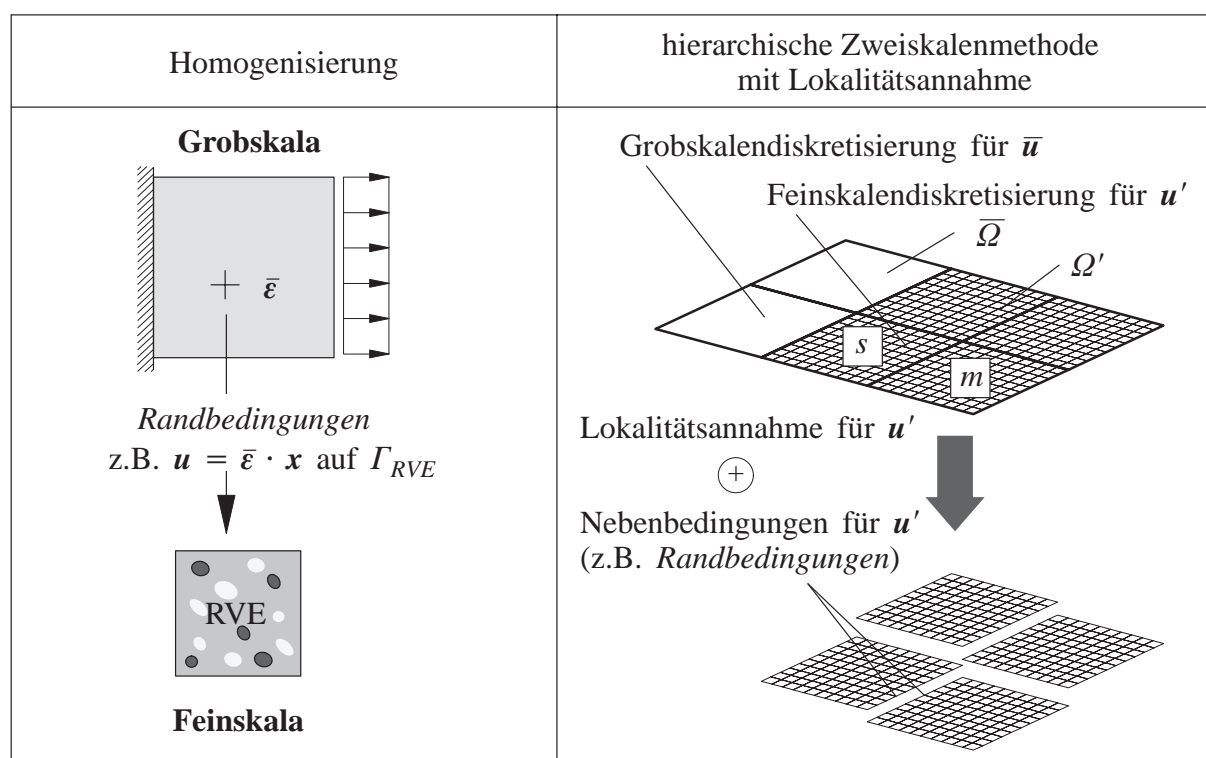


Bild 5.1: Vergleich: Randbedingungen bei Homogenisierung und Lokalitätsannahme

Ein beliebter Ansatz ist die Randbedingung $\mathbf{u}' = \mathbf{0}$ auf Γ_b (Nullrandbedingung), da sie die Lokalität der Feinskalenlösung in einfacher und effizienter Weise verwirklicht. Anwendungen dieser Annahme reichen von turbulenten Strömungen (Russo (1996), Gravemeier (2003)) bis zu strukturmechanischen Problemen, beispielsweise mit inkompressiblen inelastischen Materialien (Masud (2004)). Die unter dieser Annahme exakte Feinskalenlösung \mathbf{u}' , die das Residuum der groben Skalen beseitigt (siehe Abschnitt 4.1), bezeichnen Brezzi et al. (1997) anschaulich als *residual free bubble*. Die Analogie zwischen der Zweiskalenformulierung mit Nullrandbedingung und Stabilisierungsmethoden wurde von Brezzi et al. (1997) und von Hughes et al. (1998) nachgewiesen.

Wegen der Ungenauigkeiten, die durch die Nullrandbedingung hervorgerufen werden können, führten Franca et al. (2005) zunächst für ein Reaktions–Diffusions–Modellproblem, jedoch im Hinblick auf fluidmechanische Anwendungen, alternative Randbedingungen ein. Durch ein-dimensionale Betrachtungen auf den Grobskalenelementrändern werden Randfunktionen bestimmt, die dann als Randbedingungen verwendet werden. Das Vorgehen von Franca et al. (2005) baut auf einer Veröffentlichung von Hou & Wu (1997) zum Thema Mehrskalenmodellierung elastischer, heterogener Materialien auf.

Auch Markovic & Ibrahimbegovic (2004, 2006) wiesen auf die Unzulänglichkeit der Nullrandbedingung für strukturmechanische Probleme mit inelastischen, heterogenen Werkstoffen hin und schlugen eine Aufweichung dieser Annahme durch die schwache Forderung $\int \mathbf{u}' dA = \mathbf{0}$ auf Γ_b vor (*schwache Nullrandbedingung*).

Eine Nebenbedingung, die weder zu den Rand– noch Übergangsbedingungen zu zählen ist, wird von Garikipati & Hughes (2000) und Garikipati (2003) im Zusammenhang mit Lokalisierungsproblemen verwendet. Die feinskaligen Verschiebungen \mathbf{u}' , die als hierarchische p–Verfeinerung von $\bar{\mathbf{u}}$ angesetzt sind, werden lediglich durch die Konsistenzbedingung eingeschränkt, d.h. dass bei homogenen Materialien \mathbf{u}' im Fall eines homogenen Spannungszustands verschwinden muss (Patchtest). Daraus ergeben sich die gleichen Zwangsbedingungen an die Ansätze von \mathbf{u}' , wie in der Elementtechnologie an die Ansätze elementinterner Anreicherungen (Wilson et al. (1973), Simo & Rifai (1990)). Diese Idee wird in dieser Arbeit jedoch nicht weiter verfolgt.

Bild 5.2 gibt eine Übersicht über die in der Literatur im Zusammenhang mit der Lokalitätsannahme verbreiteten Nebenbedingungen.

	Randbedingungen		$\mathbf{u}' = \text{Randfunktion}$	Übergangsbedingungen		sonstige Nebenbedingungen
	$\mathbf{u}' = \mathbf{0}$ stark	$\mathbf{u}' = \mathbf{0}$ schwach		$[\mathbf{u}'] = \mathbf{0}$	$\sum \mathbf{t} = \mathbf{0}$	
Literatur	Brezzi et al. (1997) Hughes et al. (1998)	Markovic & Ibrahimbegovic (2004)	Hou & Wu (1997) Franca et al. (2005)	Farhat et al. (2001) Ladevèze et al. (2001)		Garikipati & Hughes (2000)
Analogien	Stabilisierung Verschiebungs– Randbedingung	Spannungs– Randbedingung		nicht überlappende Gebietszerlegung		EAS, inkompatible Moden

Bild 5.2: Nebenbedingungen – Literaturüberblick

Der Einfluss der Nebenbedingungen auf die Lösungsgenauigkeit hängt unter anderem von der Größe der Grobkalenelemente ab und klingt bei gleicher Feinskalendiskretisierung mit zunehmender Elementgröße ab. Es soll hier jedoch kein Zwang zur Einhaltung von Mindestgrößen der Grobkalenelemente durch unzulängliche Nebenbedingungen entstehen.

Im Folgenden wird die in Kapitel 4 eingeführte Zweiskalenformulierung mit Lokalitätsannahme durch Nebenbedingungen an \mathbf{u}' erweitert. Die Motivation für die jeweiligen Nebenbedingungen sowie deren Vor- und Nachteile im Zusammenhang mit strukturmechanischen Problemen bei materieller Nichtlinearität werden diskutiert und an Beispielen veranschaulicht. Die Beispiele sind so gewählt, dass die Eigenheiten der einzelnen Nebenbedingungen herausgestellt werden können. Abschnitt 5.2 ist den Randbedingungen, Abschnitt 5.3 den Übergangsbedingungen gewidmet. Das Kapitel schließt mit einem Fazit (Abschnitt 5.4).

5.2 Randbedingungen

Der Vorteil von Randbedingungen liegt vor allem darin, dass sie, im Vergleich zu Übergangsbedingungen, meist mit geringerem numerischem Aufwand verbunden sind. Die Feinskalenprobleme können jeweils vollständig lokal in den einzelnen Grobkalenelementen Ω^e behandelt werden. Allerdings geht die Annahme von Randbedingungen mit einem weiteren Approximationsfehler einher. Es bleibt deshalb zu untersuchen, ob die Formulierung des Zweiskalenmodells mit Randbedingungen eine befriedigende Genauigkeit erreichen kann. Abschnitt 5.2.1 behandelt die Nullrandbedingung, Abschnitt 5.2.2 befasst sich mit der schwachen Nullrandbedingung. In Abschnitt 5.2.3 wird die Möglichkeit, spezielle Randfunktionen als Randbedingungen zu verwenden, analysiert.

5.2.1 Nullrandbedingung

Der abklingende Charakter des feinskaligen Lösungsanteils \mathbf{u}' infolge einer lokalen Störung ist bei diffusiven Problemen der Ausgangspunkt für die Annahme $\mathbf{u}' = \mathbf{0}$ auf Γ_b . Damit diese Annahme gerechtfertigt ist, muss der grobskalige Verschiebungsanteil $\bar{\mathbf{u}}$ die Lösung auf den Grobkalenelementrändern Γ_b in guter Näherung erfassen können. Dies kann bei lokalem Versagen, das sich in vereinzelt Mikrorissen äußert, der Fall sein, falls der Einflussradius einer lokalen Störung kleiner als die Abmessung eines Grobkalenelements ist. Breiten sich jedoch die Versagensbereiche aus, schränkt die Annahme $\mathbf{u}' = \mathbf{0}$ auf Γ_b die Kinematik ein und die Systemsteifigkeit wird überschätzt. Die Nullrandbedingung führt deshalb immer auf eine obere Grenze für das Last–Verformungs–Verhalten des Systems.

Trotz Bedenken bezüglich der Genauigkeit soll diese Randbedingung nicht ohne nähere Untersuchung verworfen werden, da sie das lokale Lösen des Feinskalenproblems mit geringstmöglichem numerischem Aufwand, ohne zusätzliche lokale oder globale Freiheitsgrade, ermöglicht.

Die Formulierung des Zweiskalenmodells mit Lokalitätsannahme und der Nullrandbedingung wurde bereits in Kapitel 4.3 eingeführt. Es sei noch erwähnt, dass diese Randbedingung zu kontinuierlichen Feinskalenverschiebungen in Ω führt, mit linearen Randverschiebungen $\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}}$ auf

Γ_b bei bilinearen Ansätzen der grobskaligen Verschiebungen. Hierin kann eine gewisse Ähnlichkeit zu den Verschiebungsrandbedingungen der Homogenisierungsmethoden gesehen werden, da bei diesen die Verschiebungen am Rand des RVEs ebenfalls linear veränderlich sind und den grobskaligen Verzerrungszustand widerspiegeln.

- **Numerisches Beispiel: Nullrandbedingung**

Das folgende Beispiel soll die genannten Möglichkeiten und Grenzen der Nullrandbedingung anhand des Antwortverhaltens einer Probe, die vier elastische Fasern in einem schädigenden Matrixmaterial enthält, veranschaulichen (Bild 5.3). Das Beispiel ist bewusst einfach, jedoch charakteristisch für die Anwendungen dieser Arbeit gewählt. Die Materialparameter der Fasern, des Matrixmaterials und der Interface-Schichten sind in Tabelle 5.1 angegeben. Das System sei am linken Rand eingespannt, am rechten Rand durch die Last F beansprucht. Die Horizontalverschiebungen am rechten Rand der Probe sind starr miteinander verbunden.

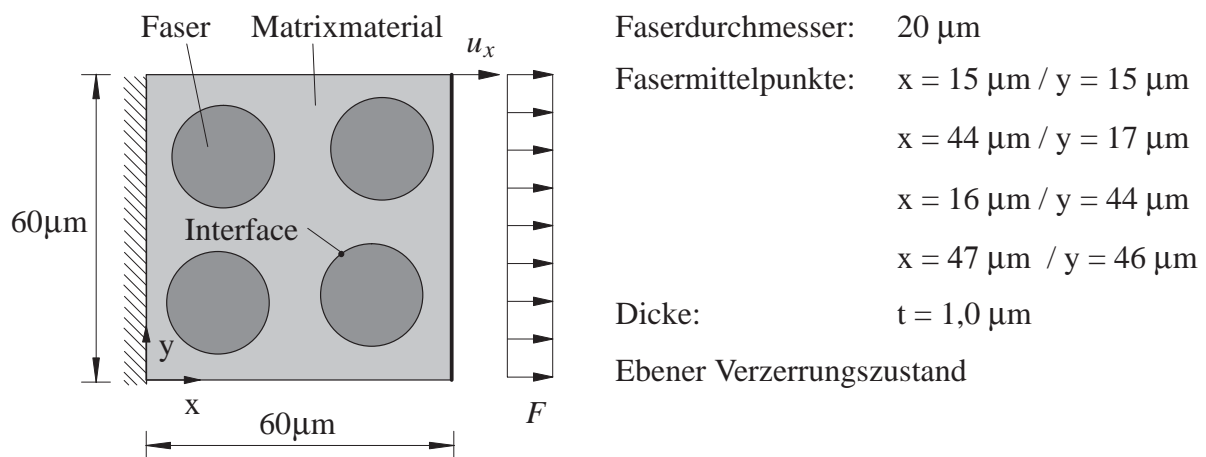


Bild 5.3: Beispiel mit einem Grobskalenelement: Geometrie und Belastung

Aufgrund der abschottenden Charakteristik der Nullrandbedingung ist schon das Verhalten eines einzigen Grobskalenelements aussagekräftig. So wird die Probe durch ein bilineares Grobskalenelement und 877 bilineare Feinskalenelemente, die in Bild 5.5 zu erkennen sind, diskretisiert. Vergleichsweise wird eine Feinskalenberechnung durchgeführt. Hier wird ein Vergleich der Zweiskalenlösung mit der Feinskalenlösung bei gleicher Diskretisierungseinheit angestellt. Deshalb wird dem Diskretisierungsfehler der Lösungen keine weitere Aufmerksamkeit geschenkt. Dies gilt auch für die folgenden Beispiele.

Matrixmaterial			
elastische Eigenschaften:	$E = 32000 \text{ N/mm}^2$		$\nu = 0,33$
äquivalente Verzerrung (de Vree):	$k = 1,0$		
Schädigungsevolution (exponentiell):	$\kappa_0 = 0,002$	$\alpha = 0,98$	$\beta = 30$
Gradientenparameter:	$c = 1,0 \text{ }\mu\text{m}^2$		
Fasern			
elastische Eigenschaften:	$E = 735000 \text{ N/mm}^2$		$\nu = 0,18$
Interface			
elastische Eigenschaften:	$E = 7350 \text{ N/mm}^2$		$\nu = 0,2$
äquivalente Verzerrung (de Vree):	$k = 1,0$		
Schädigungsevolution (exponentiell):	$\kappa_0^n = 0,00005$	$\alpha^n = 1,0$	$\beta^n = 2,0$
	$\kappa_0^t = 0,0001$	$\alpha^t = 1,0$	$\beta^t = 2,0$

Tabelle 5.1: Materialeigenschaften

Unter der gegebenen Beanspruchung beginnen, nach einer anfänglichen elastischen Phase, die Interface-Schichten bei einer Randverschiebung von $u_x = 0,03\mu\text{m}$ unter Normalzug zu versagen. Die Last kann trotz vollständig geschädigter Interface-Bereiche weiter gesteigert werden, bis sich eine Lokalisierungszone im Matrixmaterial ausbildet, die sich zu den horizontalen Rändern der Probe hin ausbreitet und zu globalem Versagen führt. An der Last-Verformungs-Kurve (Bild 5.4) erkennt man, dass für die Nullrandbedingung das Antwortverhalten des Zweiskalenmodells sowohl in der elastischen Phase als auch bei dem lokal begrenzten Versagen der Interface-Schichten sehr genau mit der Feinskalenlösung übereinstimmt. Jedoch verursacht die durch die Nullrandbedingung eingeschränkte Kinematik des Zweiskalenmodells ein zu steifes Verhalten in der entfestigenden Phase, wenn die Versagensbereiche an die Ränder des Grobkalenelements wachsen. Die Grenzeigenschaft (obere Grenze des Last-Verformungs-Verhaltens) dieser Randbedingung ist zu erkennen.

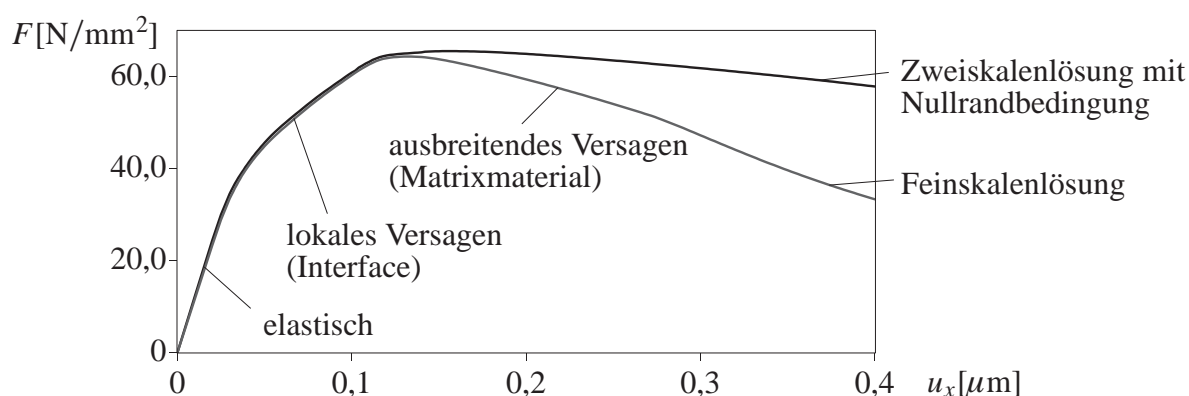


Bild 5.4: Last-Verformungs-Kurve

Auch die Verformungsfigur (Bild 5.5), hier für eine Randverschiebung $u_x = 0,4\mu\text{m}$ und 15-fach überhöht dargestellt, zeigt die Einschränkung der Kinematik noch einmal deutlich. Die Re-

striktion $\mathbf{u}' = \mathbf{0}$ auf Γ_b unterdrückt die Ausbreitung des Lokalisierungsbandes an den Grobskalenelementrändern. Dadurch breitet sich die Schädigung im Vergleich zur Feinskalenlösung über einen zu großen Bereich aus, was die zu duktile Systemantwort bewirkt.

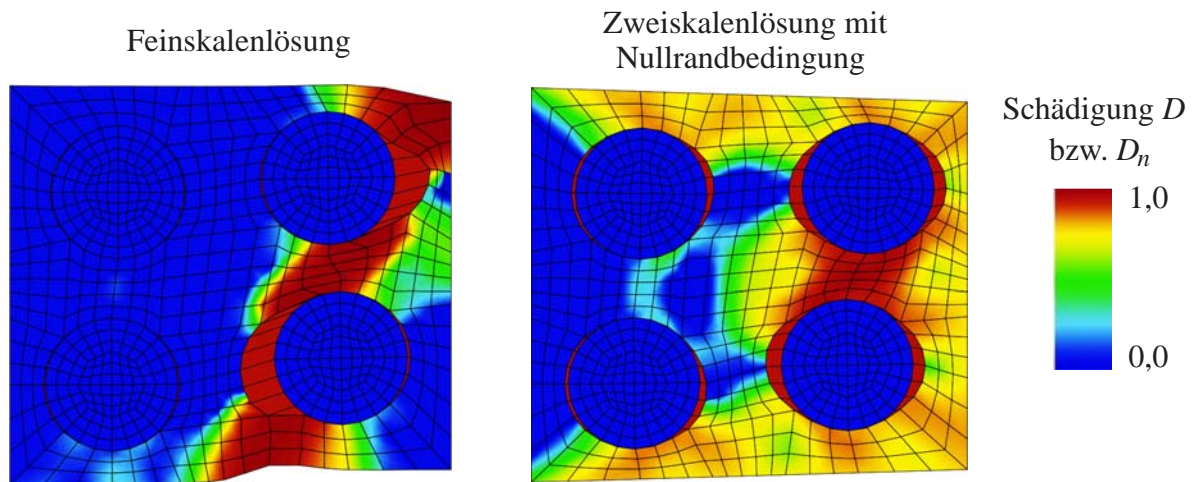


Bild 5.5: Deformation (15-fach überhöht) und Schädigungsverteilung für $u_x = 0,4 \mu\text{m}$

Zusammenfassend lässt sich für dieses Beispiel feststellen, dass die Lösung des Zweiskalenmodells unter der Annahme der Nullrandbedingung im postkritischen Beanspruchungsbereich recht ungenau ist, jedoch als "obere Schranke" dienen kann.

5.2.2 Schwache Nullrandbedingung

Die Idee, das unter der Nullrandbedingung zu steife Strukturverhalten durch die schwache Forderung

$$\int_{\Gamma_b} \mathbf{u}' \, dA = \mathbf{0} \quad (5.1)$$

aufzuweichen, geht auf Markovic & Ibrahimbegovic (2004) zurück. Dahinter steht die Annahme, dass \mathbf{u}' der fluktuierende Anteil der Verschiebungen ist und die feinskaligen Verschiebungen im integralen Mittel über Γ_b verschwinden. Inwiefern diese Randbedingung im Rahmen der vorliegenden Arbeit geeignet ist, wird nun untersucht.

Die feinskaligen Verschiebungen \mathbf{u}' sind als lokale Variablen in den jeweiligen Grobskalenelementen am gemeinsamen Rand benachbarter Grobskalenelemente voneinander unabhängig. Infolgedessen ist die Randbedingung (5.1) jeweils lokal, d.h. unabhängig vom benachbarten Grobskalenelement zu erfüllen. Dies führt zu inkompatiblen Verschiebungen \mathbf{u}' auf den Grobskalenelementrändern. \mathbf{u}' trägt – ebenso wie bei der Nullrandbedingung – nur indirekt über ihren Einfluss auf die grobskaligen Verschiebungen zur "Informationsausbreitung" bei. Die Nebenbedingung (5.1) kann mit der Lagrange-Multiplikatoren-Methode (siehe Anhang A1.1) durch das Lagrange-Funktional

$$\Pi_{NB} = \sum_{\bar{e}=1}^{\bar{n}_{ele}'} \sum_{b=1}^{n_r^{\bar{e}}} \int_{\Gamma_b} \lambda \cdot \mathbf{u}' \, dA \quad (5.2)$$

in die Zweiskalenformulierung eingebracht werden. $n_{\bar{\Gamma}}^{\bar{e}}$ bezeichnet die Anzahl der Ränder des Grobskalenelements \bar{e} , die nicht zum Außenrand $\partial\Omega$ gehören. Da die Nebenbedingung für jedes Grobskalenelement unabhängig vom benachbarten Grobskalenelement gefordert wird, sind die Lagrange–Multiplikatoren λ hier lokale Variablen, siehe Bild 5.6.

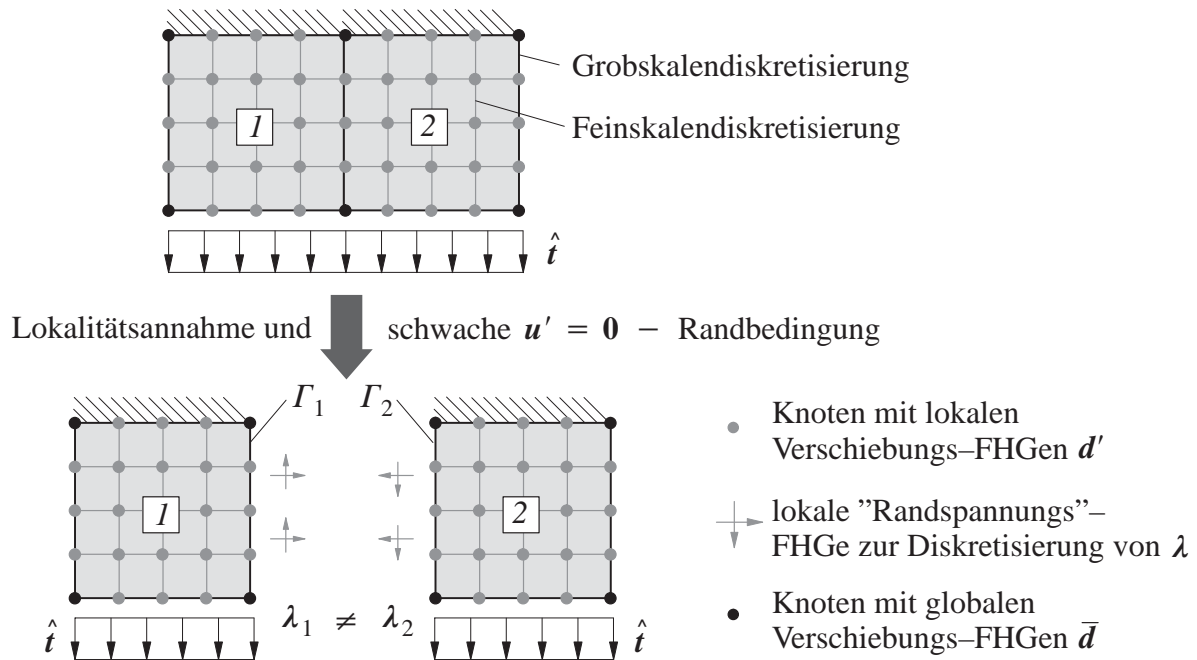


Bild 5.6: schwache Nullrandbedingung, lokale und globale Freiheitsgrade

Die schwache Form umfasst neben dem unveränderten Grobskalenproblem $\delta_{\bar{u}}\Pi_p = 0$ und der Evolutionsgleichung der nichtlokalen Verzerrungen $\delta_{\tilde{\varepsilon}_v}\Pi_p^{\bar{e}} = 0$, siehe Gleichung (4.18) (a) und (c), das Feinskalenproblem und die Gleichungen der Nebenbedingungen an \mathbf{u}' . Das durch die Nebenbedingung erweiterte Feinskalenproblem und die Nebenbedingungsgleichung lauten:

– Feinskalenprobleme jeweils $\forall \delta \mathbf{u}'$ in $\Omega'_{\bar{e}}$:

$$\underbrace{\delta_{\mathbf{u}'}\Pi_p^{\bar{e}}}_{\text{siehe Gleichung (4.18)}} + \delta_{\mathbf{u}'}\Pi_{NB}^{\bar{e}} = 0 \quad \text{mit} \quad \delta_{\mathbf{u}'}\Pi_{NB}^{\bar{e}} := \sum_{b=1}^{n_{\bar{\Gamma}}^{\bar{e}}} \int_{\Gamma_b} \delta \mathbf{u}'|_{\Gamma_b} \cdot \boldsymbol{\lambda} \, dA \quad (a)$$

$$(5.3)$$

– Nebenbedingung jeweils $\forall \delta \boldsymbol{\lambda}$ auf Γ_b :

$$\delta_{\boldsymbol{\lambda}}\Pi_{NB}^{\Gamma_b} := \int_{\Gamma_b} \delta \boldsymbol{\lambda}_b \cdot \mathbf{u}'|_{\Gamma_b} \, dA = 0 \quad (b)$$

Die Diskretisierung der Verschiebungen $\bar{\mathbf{u}}$, \mathbf{u}' und $[\mathbf{u}']$ und der nichtlokalen Verzerrung $\tilde{\varepsilon}_v$ wird, wie in Abschnitt 4.2.4 eingeführt, entsprechend den Gleichungen (4.14) – (4.16) und (2.50) gewählt. Da die Nebenbedingung (5.1) nur schwach erfüllt werden soll, werden $\boldsymbol{\lambda}$ und $\delta \boldsymbol{\lambda}$ lediglich konstant bzw. linear über den ganzen Rand Γ_b angesetzt, nicht bereichsweise:

$$\boldsymbol{\lambda} \approx \boldsymbol{\lambda}^h = N_{\boldsymbol{\lambda}} \mathbf{L}, \quad \delta \boldsymbol{\lambda} \approx \delta \boldsymbol{\lambda}^h = N_{\boldsymbol{\lambda}} \delta \mathbf{L} . \quad (5.4)$$

Der Lagrange–Multiplikator entspricht dem Randspannungsvektor, der notwendig ist, um die Bedingung $\int \mathbf{u}' dA = \mathbf{0}$ auf Γ_b zu erfüllen. Markovic & Ibrahimbegovic (2004) schlagen vor, den Lagrange–Multiplikator λ so anzusetzen, dass seine Normalenkomponente linear und seine Schubkomponente konstant über Γ_b ist.

Würden λ und $\delta\lambda$ mit denselben Ansätzen wie \mathbf{u}' auf Γ_b diskretisiert (bereichsweise linear), so würden Testfunktionen, die die Nebenbedingung $\int \mathbf{u}' dA = \mathbf{0}$ an jedem Feinskalenknoten auf Γ_b einzeln testen, zum Ansatzraum von $\delta\lambda$ gehören. Dadurch würde $\mathbf{u}' = \mathbf{0}$ auf Γ_b an jedem Feinskalenknoten und damit in starkem Sinn erfüllt, was nicht erwünscht ist.

Mit der angegebenen Diskretisierung und nach Linearisierung der schwachen Form (Gleichung (4.18) (a) und (c) und Gleichung (5.3)) ergibt sich folgendes Gleichungssystem für die Veränderung der globalen Freiheitsgrade $\Delta\bar{\mathbf{D}}$ und der lokalen Freiheitsgrade $\Delta\mathbf{D}'$, $\Delta\mathbf{E}$ und $\Delta\mathbf{L}$.

– Grobskalenproblem :

$$\mathbf{K}_{\bar{D}\bar{D}}^i \Delta\bar{\mathbf{D}}^{i+1} + \sum_{\bar{e}=1}^{\bar{n}_{ele}^{\Omega'}} \left(\mathbf{K}_{\bar{d}D'}^{\bar{e},i} \Delta\mathbf{D}'_{\bar{e}}^{i+1} + \mathbf{K}_{\bar{d}E}^{\bar{e},i} \Delta\mathbf{E}_{\bar{e}}^{i+1} \right) = -\bar{\mathbf{R}}^i$$

In jedem Grobskalenelement \bar{e} in Ω' : (5.5)

– Feinskalenproblem :

$$\mathbf{K}_{D'\bar{d}}^{\bar{e},i} \Delta\bar{\mathbf{d}}_{\bar{e}}^{i+1} + \mathbf{K}_{D'D'}^{\bar{e},i} \Delta\mathbf{D}'_{\bar{e}}^{i+1} + \mathbf{K}_{D'E}^{\bar{e},i} \Delta\mathbf{E}_{\bar{e}}^{i+1} + \boxed{\sum_{b=1}^{n_{\Gamma}^{\bar{e}}} (\tilde{\mathbf{G}}^b)^T \Delta\mathbf{L}_{\bar{e}}^{i+1}} = -\mathbf{R}'_{\bar{e},i} \quad \boxed{-\mathbf{R}'_{NB}^{\bar{e},i}}$$

– Nichtlokale Verzerrung :

$$\mathbf{K}_{E\bar{d}}^{\bar{e},i} \Delta\bar{\mathbf{d}}_{\bar{e}}^{i+1} + \mathbf{K}_{ED'}^{\bar{e},i} \Delta\mathbf{D}'_{\bar{e}}^{i+1} + \mathbf{K}_{EE}^{\bar{e},i} \Delta\mathbf{E}_{\bar{e}}^{i+1} = -\mathbf{R}_E^{\bar{e},i}$$

– Nebenbedingung auf jedem Rand Γ_b von \bar{e} :

$$\boxed{\mathbf{G}^b \Delta\mathbf{D}'_{\bar{e}}^{i+1}|_{\Gamma_b}} = -\mathbf{R}_L^{b,i}$$

Die eingerahmten Terme sind durch die Randbedingung (5.1) entstanden. Die anderen Terme sind unverändert im Vergleich zum linearisierten Zweiskalenmodell mit Nullrandbedingung, das in Gleichung (4.21) angegeben ist. $\mathbf{D}'|_{\Gamma_b}$ bezeichnet die Feinskalenverschiebungsfreiheitsgrade auf den Rändern Γ_b . Folgende Notationen, zusätzlich zu den in Gleichungen (4.22) bis (4.25) bereits eingeführten Steifigkeiten und Residuen, wurden in Gleichung (5.5) verwendet:

$$\begin{aligned} \mathbf{G}^b &= \int_{\Gamma_b} \mathbf{N}_{\lambda}^T \mathbf{N}'|_{\Gamma_b} dA, & \tilde{\mathbf{G}}^b &= \int_{\Gamma_b} \mathbf{N}_{\lambda}^T \mathbf{N}' dA \\ \mathbf{R}'_{NB}^{\bar{e},i} &= \sum_{b=1}^{n_{\Gamma}^{\bar{e}}} \int_{\Gamma_b} (\mathbf{N}')^T \lambda^i dA, & \mathbf{R}_L^{b,i} &= \int_{\Gamma_b} \mathbf{N}_{\lambda}^T \mathbf{u}'^i|_{\Gamma_b} dA. \end{aligned} \quad (5.6)$$

Die Matrizen \mathbf{G}^b und $\tilde{\mathbf{G}}^b$ ändern sich während des Beanspruchungsfortschritts nicht, sie müssen also nur einmal aufgestellt werden. $\tilde{\mathbf{G}}^b$ entsteht aus \mathbf{G}^b durch Erweiterung mit Nullspalten auf

alle Feinskalenverschiebungsfreiheitsgrade in $\Omega^{\bar{e}}$, während \mathbf{G}^b auf die Randfreiheitsgrade auf Γ_b beschränkt ist.

Die Lösung des Gleichungssystems (5.5), eingebettet in eine inkrementell–iterative Pfadverfolgung, erfolgt nach Algorithmus 4.1. Die Lagrange–Freiheitsgrade \mathbf{L} gehören dabei zu den lokalen Freiheitsgraden, die durch statische Kondensation aus dem Grobskalenproblem eliminiert werden können. Hierbei ist zu beachten, dass durch die Nebenbedingung ”Nullen” auf der Hauptdiagonale von $\mathbf{K}_{FS}^{\bar{e},i}$ auftreten, die der Gleichungslöser durch Pivotisierung beseitigen muss. Dadurch kann die Zeit zur Lösung des Gleichungssystems zunehmen. Insgesamt ist der numerische Aufwand durch die zusätzlichen lokalen Freiheitsgrade \mathbf{L} und weil die Freiheitsgrade \mathbf{D}' auf den Grobskalenelementrändern nicht verschwinden ($\mathbf{D}' \neq \mathbf{0}$ auf Γ_b) etwas höher als unter der Nullrandbedingung.

Zwischen der schwachen Nullrandbedingung und Spannungsrandbedingungen der Homogenisierung, die mit der Lagrange–Multiplikatoren–Methode in einer Verschiebungsformulierung realisiert werden können (Miehe & Koch (2002)), besteht eine formale Analogie. Nach Miehe & Koch (2002) wird die Spannungsrandbedingung

$$\mathbf{t} = \bar{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{n} \text{ auf } \Gamma_{RVE} \quad (5.7)$$

nicht explizit erfüllt, sondern die Verschiebungsrandbedingungen $\text{sym}(\mathbf{u}_{,x}) - \bar{\boldsymbol{\epsilon}} = \mathbf{0}$ (Abschnitt 3.2) werden in schwacher Form gefordert:

$$\int_{\Gamma_{RVE}} \text{sym}(\mathbf{u} \otimes \mathbf{n}) \, dA - \underbrace{\int_{\Omega_{RVE}} \bar{\boldsymbol{\epsilon}} \, dV}_{V \bar{\boldsymbol{\epsilon}}} = \mathbf{0} . \quad (5.8)$$

Gleichung (5.8) wird als Nebenbedingung durch folgendes Lagrange–Funktional berücksichtigt,

$$\Pi_{NB} = \frac{1}{V} \int_{\Gamma_{RVE}} \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\lambda} \cdot \mathbf{n} \, dA - \boldsymbol{\lambda} : \bar{\boldsymbol{\epsilon}} \quad (5.9)$$

und der Lagrange–Multiplikator $\boldsymbol{\lambda}$ wird als grobskalige Spannung $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$ identifiziert. So kann die Spannungsrandbedingung als ”schwache Verschiebungsrandbedingung” verstanden werden, ebenso wie die $\int \mathbf{u}' \, dA = \mathbf{0}$ – Randbedingung die schwache Variante der Nullrandbedingung darstellt, die wiederum mit der Verschiebungsrandbedingung verwandt ist.

- **Numerisches Beispiel: Schwache Nullrandbedingung**

Am Beispiel des Abschnitts 5.2.1 soll die Eignung der schwachen Nullrandbedingung für inelastisches Materialverhalten überprüft werden. Die Fasern seien nun jedoch periodisch angeordnet und das Matrixmaterial reagiere auf Zug empfindlicher als auf Druck ($k = 10, 0$). Die Beanspruchung des Systems ist in Bild 5.7 angegeben. Die Probe wird durch 4 bilineare Grobskalenelemente mit jeweils 496 bilinearen Feinskalenelementen diskretisiert, siehe auch Bild 5.8. Zum Vergleich wird wiederum eine Feinskalenberechnung durchgeführt.

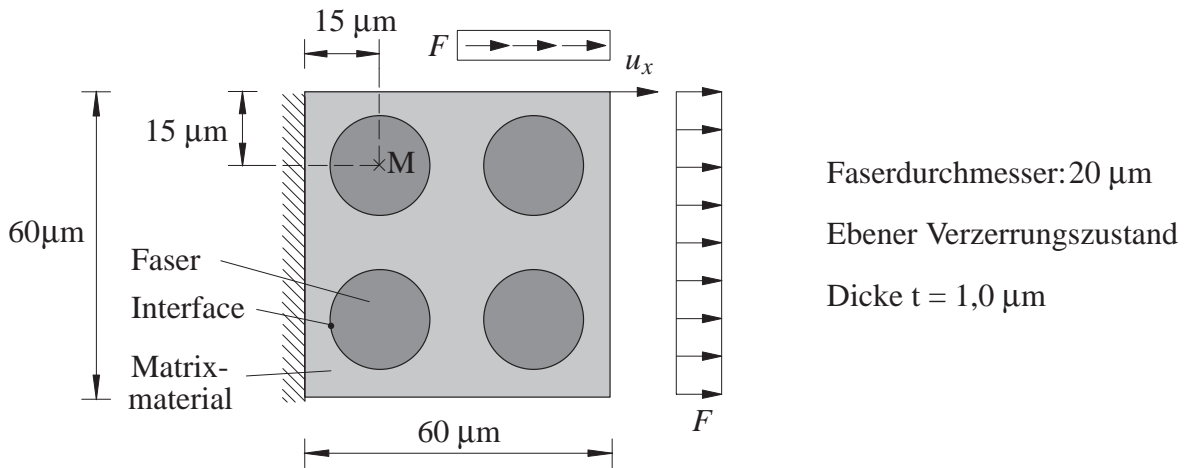


Bild 5.7: System und Beanspruchung

Der Vergleich zwischen der Zweiskalenlösung mit schwacher Nullrandbedingung und der Feinskalenlösung zeigt, dass die schwache Nullrandbedingung das lokale Verhalten hier nicht genau erfasst (Bild 5.8). Das ist sowohl an der Verformung des oberen Systemrands als auch an der Schädigungsverteilung im Matrixmaterial zu sehen. Während sich bei der Feinskalenberechnung eine nahezu vertikale Lokalisierungszone durch das System ausdehnt, wird dieses Wachstum durch die schwache Nullrandbedingung an der horizontalen Grobkalenelementengrenze zwischen den beiden linken Grobkalenelementen behindert. Stattdessen wird ein unphysikalischer Schädigungsmechanismus in Systemmitte aktiviert. Die Deformation zeigt auch die Inkompatibilität der feinskalierten Verschiebungen an den Grenzen der Grobkalenelemente, die sich aus der schwachen Forderung $\int \mathbf{u}' dA = \mathbf{0}$ ergibt.

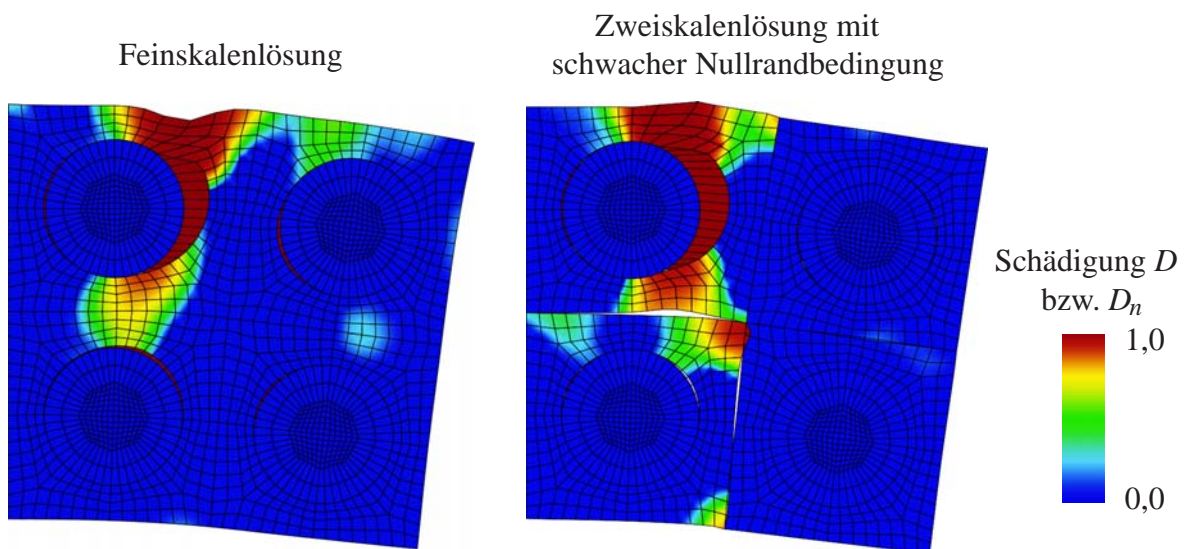


Bild 5.8: Deformation (15-fach überhöht) und Schädigungsverteilung für $u_x = 0,48 \mu\text{m}$

Am Last–Verschiebungs–Verhalten (Bild 5.9) lässt sich feststellen, dass die schwache Nullrandbedingung keine Schranke an das Feinskalenverhalten darstellt. Im präkritischen Bereich wird bei diesem Beispiel die Systemsteifigkeit überschätzt, dagegen wird die Duktilität unterschätzt.

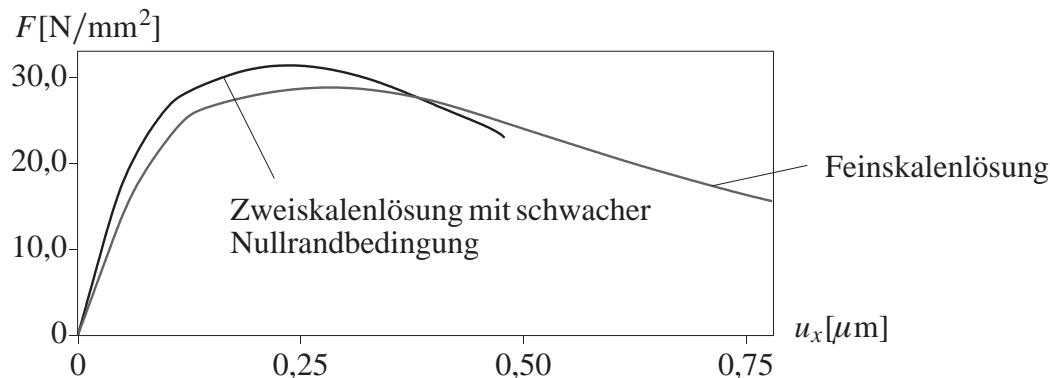


Bild 5.9: Last–Verschiebungs–Verhalten

Ein weiteres Problem neben den Ungenauigkeiten, die durch die schwache Nullrandbedingung entstehen können, ist die geringe numerische Robustheit dieser Randbedingung. Tritt Schädigung mit $D \rightarrow 1$ am Rand eines Grobskalenelements auf, kann es dort durch das Fehlen der umgebenden Nachbarschaft, die die Deformationen beschränken würde, und durch die künstlichen Zwänge $\mathbf{u}' = \mathbf{0}$ an den Knoten der Grobskalenelemente und $\int \mathbf{u}' dA = \mathbf{0}$ auf Γ_b zu unphysikalischen, oszillierenden Deformationen kommen. Diese verursachen im betrachteten Beispiel für $u_x = 0,48\mu\text{m}$ die Divergenz der numerischen Berechnung.

5.2.3 Randfunktionen

Optimal wäre es natürlich, den tatsächlichen Verlauf von \mathbf{u}' auf den Grobskalenelementrändern zu kennen und als Randbedingung vorzugeben. Um diesem Wunsch zumindest etwas näher als mit der Nullrandbedingung zu kommen, schlagen Hou & Wu (1997) für elastische, heterogene Materialien sowie Franca et al. (2005) für ein Reaktions–Diffusions–Modellproblem vor, \mathbf{u}' auf Γ_b durch Funktionen anzunähern, die die feinskalige Charakteristik der zugrunde liegenden Differentialgleichung enthalten. Diese Funktionen sollen als Randbedingung an \mathbf{u}' dienen.

Damit diese Randfunktionen unabhängig von der Umgebung um Γ_b berechnet werden können, wird eine eindimensionale und homogene Variante der entsprechenden Differentialgleichung als Bestimmungsgleichung der Randfunktionen gewählt. Für strukturmechanische, statische Probleme bedeutet dies, dass auf den freigeschnittenen Grobskalenelementrändern Γ_b statt den Gleichgewichtsbeziehungen $\text{div } \boldsymbol{\sigma} + \hat{\mathbf{b}} = \mathbf{0}$ nur die eindimensionale, homogene Differentialgleichung

$$\sigma_{rr,r} = 0 \tag{5.10}$$

gelöst wird, siehe Bild 5.10. Die Grobskalenlösung \bar{u}_r ist hierbei bekannt und an den Knoten der Grobskalenelemente gilt $u'_r = 0$. r sei die Koordinate in Längsrichtung der Kante Γ_b . Diese

reduzierte Differentialgleichung führt auf eine Verteilung von u'_r auf Γ_b , die in direktem Zusammenhang mit dem Verlauf der Flexibilitätskomponente $1/C_{rrrr}(r)$ steht. Es bedarf weiterer Annahmen, um von der skalaren Größe u'_r auf die Komponenten u'_x und u'_y schließen zu können.

Die Ermittlung der Randbedingungen muss im nichtlinearen Fall vor jedem Last- bzw. Iterationsschritt (Schritt (iii) in Algorithmus 4.1) erfolgen und verursacht entsprechend zusätzlichen Aufwand.

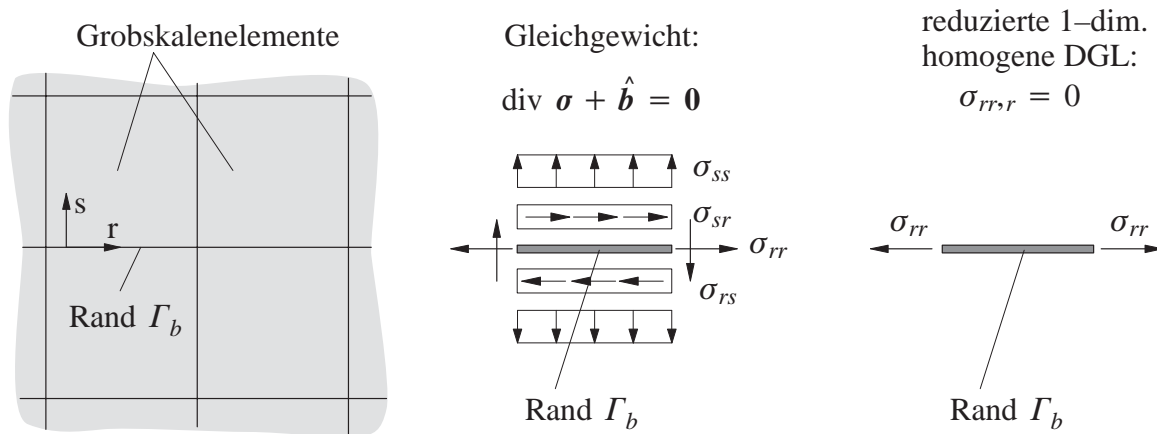


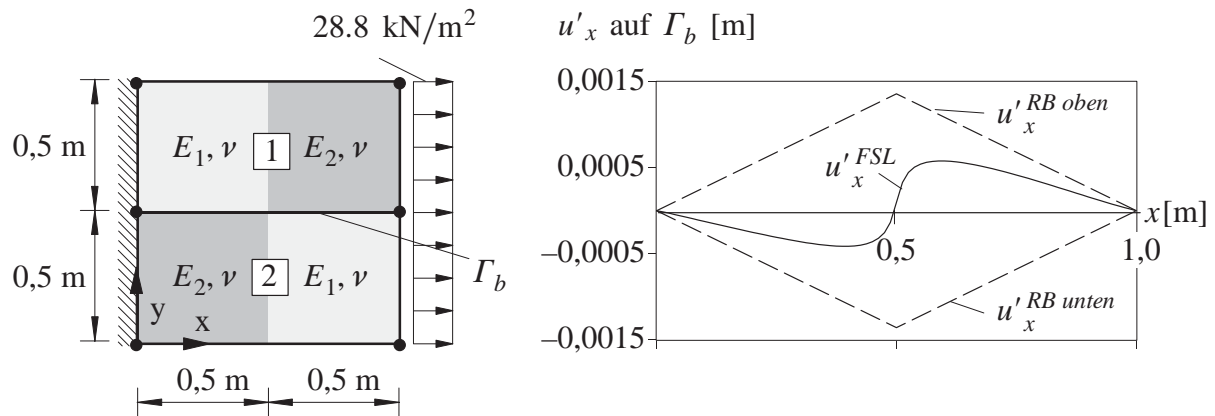
Bild 5.10: Reduzierte eindimensionale Differentialgleichung auf Γ_b

Es erscheint etwas fragwürdig, ob die eindimensionale Differentialgleichung (5.10) das tatsächliche Verhalten von \mathbf{u}' auf Γ_b erfassen kann, da die "Kontaktspannungen" σ_{ss} und σ_{sr} , die zwischen den Grobkalenelementen wirken, nicht berücksichtigt werden. Diese Problematik soll an einem einfachen, wenn auch etwas akademischen, Beispiel demonstriert werden (Bild 5.11).

Es wird eine heterogen elastische Scheibe der Dicke $t = 0,1\text{m}$ im ebenen Spannungszustand mit den Materialeigenschaften $E_1 = 100\text{ kN/m}^2$, $E_2 = 10000\text{ kN/m}^2$ und $\nu = 0,2$ betrachtet. Auch wenn es sich um elastisches Material handelt, sind die Steifigkeitsunterschiede ebenfalls für Lokalisierungsphänomene typisch, wenn das Material lokal entfestigt.

Für die Zweiskalenmodellierung sei die Struktur durch zwei bilineare Grobkalenelemente 1 und 2 mit gemeinsamen Rand Γ_b diskretisiert. Die Randfunktionen $u'_x{}^{RB\text{ oben}}$ bzw. $u'_x{}^{RB\text{ unten}}$ auf Γ_b , die als Randbedingungen für \mathbf{u}' an das oberhalb bzw. unterhalb angrenzende Grobkalenelement dienen sollen, werden durch analytisches Lösen der Gleichung (5.10) ermittelt.

Bild 5.11 (b) zeigt den Vergleich zwischen den auf diese Weise berechneten Randfunktionen $u'_x{}^{RB\text{ oben}}$ bzw. $u'_x{}^{RB\text{ unten}}$ und der Feinskalenlösung $u'_x{}^{FSL}$ auf Γ_b . Für die Feinskalenlösung wird die Struktur durch 6400 bilineare Scheibenelemente diskretisiert. Zur Ermittlung der Randfunktionen $u'_x{}^{RB\text{ oben}}$ und $u'_x{}^{RB\text{ unten}}$ wurde hier zusätzlich angenommen, die Grobkalenlösung \bar{u} sei auf den Grobkalenelementrändern exakt, was im Allgemeinen nicht der Fall ist. So kann jedoch der Effekt der reduzierten Gleichung (5.10) auf die Genauigkeit der Randfunktionen ohne weitere Einflüsse betrachtet werden. Es wird also $\bar{u}_x(x = 0) = 0$ und $\bar{u}_x(x = 1\text{m}) = u'_x{}^{FSL}(x = 1\text{m})$ auf Γ_b vorgegeben.



(a) Struktur und Grobskalendiskretisierung (b) Feinskalenlösung vs. Randbedingungen

Bild 5.11: Beispiel: Auswirkung der Reduzierung der Differentialgleichung

Schon für dieses einfache Beispiel und unter Verwendung der "exakten" Lösungen an den Endpunkten des Randes Γ_b wird deutlich, wie wichtig die hier vernachlässigten Kontaktspannungen σ_{ss} und σ_{sr} für die Genauigkeit der Lösung sind. Der Verlauf von $u'_x{}^{RB\ oben}$ bzw. $u'_x{}^{RB\ unten}$, der als Randbedingung an das Feinskalenproblem im Grobskalenelement $\boxed{1}$ bzw. $\boxed{2}$ verwendet werden soll, ist blind gegenüber den Steifigkeiten im jeweils angrenzenden Grobskalenelement. Das führt hier zu deutlich auseinanderklaffenden Randbedingungen für das Feinskalenproblem im oberen und unteren Grobskalenelement, die jeweils weit von der Feinskalenlösung entfernt sind.

Da trotz deutlich erhöhtem Aufwand die Genauigkeit dieser Randbedingungen für Materialien mit größeren Steifigkeitsunterschieden nicht unbedingt größer als die der Nullrandbedingungen ist, wird dieser Ansatz in der vorliegenden Arbeit nicht weiter verfolgt.

5.3 Übergangsbedingungen

Der Einsatz von Übergangsbedingungen für die Feinskalenverschiebungen lässt eine hohe Genauigkeit der numerischen Lösung erwarten. Der Nachteil von Übergangsbedingungen ist, dass sie im Allgemeinen mit höherem numerischem Aufwand als Randbedingungen verbunden sind. Im Rahmen dieser Arbeit wird ausschließlich die Kontinuitätsbedingung der Verschiebungen

$$[u'] = u'_m - u'_s = \mathbf{0} \text{ auf allen Kopplungsrändern } \Gamma_{ms} \quad (5.11)$$

als Übergangsbedingung eingesetzt (Bild 5.12), während die Gleichgewichtsbedingung $\sum \mathbf{t} = \mathbf{0}$ auf Γ_{ms} nicht explizit gefordert wird. Ferner wird die vereinfachende Annahme getroffen, dass die feinskalige Diskretisierung auf den Kopplungsrändern Γ_{ms} konform ist. Dadurch kann die kontinuierliche Kontinuitätsbedingung $[u'] = \mathbf{0}$ auf Γ_{ms} auch durch die diskrete Kontinuitätsbedingung

$$[d'] = d'_m - d'_s = \mathbf{0} \quad \forall \text{ Feinskalenknoten auf } \Gamma_{ms} . \quad (5.12)$$

für alle Freiheitsgrade \mathbf{d}' an den Knoten j der Feinskalendiskretisierung auf Γ_{ms} ersetzt werden. Neben den Bezeichnungen m (positives Vorzeichen) und s (negatives Vorzeichen) für benachbarte Grobkalenelemente werden im Folgenden auch die Bezeichnungen \bar{e} und \bar{n} verwendet. \bar{e} sei das betrachtete Grobkalenelement, \bar{n} das am jeweiligen Elementrand benachbarte Grobkalenelement. Diese Notation erübrigt an manchen Stellen eine Unterscheidung zwischen dem mit positivem Vorzeichen behafteten "m-Fall" und dem mit negativem Vorzeichen behafteten "s-Fall".

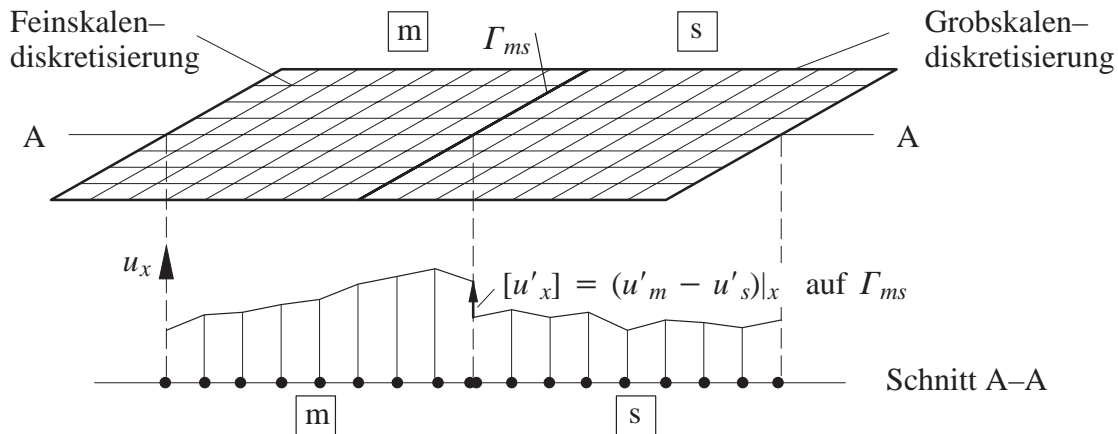


Bild 5.12: Sprung der feinskaligen Verschiebungen auf dem Kopplungsrand Γ_{ms}

In den folgenden Abschnitten wird die Umsetzung der Übergangsbedingung in kontinuierlicher (Gleichung (5.11)) bzw. in diskreter Form (Gleichung (5.12)) mit der Strafterm-Methode, der Methode der Lagrange-Multiplikatoren und der erweiterten Methode der Lagrange-Multiplikatoren beschrieben. Es soll untersucht werden, welches dieser Verfahren sich für die Anwendungsbereiche in dieser Arbeit am besten eignet.

5.3.1 Umsetzung mit der Strafterm-Methode

Mit der Strafterm-Methode kann die Nebenbedingung (5.11) bzw. (5.12) ohne zusätzliche Freiheitsgrade berücksichtigt werden, siehe auch Anhang A1.2. Die Genauigkeit, mit der die Nebenbedingung erfüllt wird, ist von der Wahl des Strafterm-Parameters $\epsilon \geq 0$ abhängig.

Das Funktional, das die diskrete Nebenbedingung (5.12) mit der Strafterm-Methode in die Formulierung des Zweiskalenmodells einbringt, lautet in Vektor-Matrix-Notation:

$$\Pi_{NB}(\mathbf{d}') = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{nn} \epsilon ([\mathbf{d}']^T [\mathbf{d}'])_j, \quad (5.13)$$

wobei nn die Anzahl der Feinskalenknoten auf allen Rändern Γ_{ms} ist. Das Funktional (5.13) bestraft das Abweichen von der Nebenbedingung (5.12) mit Intensität des Strafterm-Parameters ϵ und geht in die schwache Form der lokalen Feinskalenprobleme folgendermaßen ein:

– Feinskalenprobleme jeweils $\forall \delta \mathbf{u}'$ in $\Omega'_{\bar{e}}$:

$$\delta_u \Pi^{\bar{e}} = \underbrace{\delta_u \Pi_p^{\bar{e}} + \delta_u \Pi_{NB}^{\bar{e}}}_{\text{siehe Gleichung (4.18)}} = 0 \quad \text{mit} \quad \delta_u \Pi_{NB}^{\bar{e}} := \sum_{j=1}^{nn_{\bar{e}}} \epsilon \left((\delta \mathbf{d}'^{\bar{e}})^T (\mathbf{d}'^{\bar{e}} - \mathbf{d}'^{\bar{n}}) \right)_j \quad (5.14)$$

$nn_{\bar{e}}$ ist die Anzahl an Feinskalenknoten aller Kopplungsränder $\Gamma_{\bar{e}\bar{n}}$ des Elementes \bar{e} . Neben diesem Feinskalenproblem umfasst die schwache Form das Grobkalenproblem und die Definition der nichtlokalen Verzerrungen, die in Gleichung (4.18) (a) und (c) angegeben sind. Sie werden hier nicht noch einmal notiert, da sie durch die Nebenbedingung nicht verändert werden.

Der Strafterm–Parameter kann als Federsteifigkeit von fiktiven Federn gedeutet werden, die die benachbarten Feinskalenfreiheitsgrade an den Kopplungsrändern miteinander verbinden. Für $\epsilon = 0$ wird die Nebenbedingung nicht, für $\epsilon \rightarrow \infty$ wird sie exakt erfüllt. Gleichzeitig wird jedoch für $\epsilon \rightarrow \infty$ die Formulierung zu einem schlecht gestellten Problem, siehe Zienkiewicz et al. (2005). Bereits für endliche, jedoch sehr große Werte von ϵ kommt der Nebenbedingung eine übertrieben starke Wichtung im Vergleich zu den Gleichgewichtsbeziehungen zu, so dass die Genauigkeit der Lösung sinkt, obwohl die Nebenbedingung sehr genau erfüllt wird. Eine sinnvolle Wahl für den Strafterm–Parameter hängt neben der Problemstellung (Material, Geometrie, ...) auch von der Feinheit der Diskretisierung ab. Je kleiner die Elementabmessungen sind, desto größere Werte nehmen die Elementsteifigkeiten trotz gleichbleibender Materialeigenschaften an. Dementsprechend größer kann ϵ gewählt werden, ohne dass die Nebenbedingung die Formulierung dominiert. Es gilt also zu untersuchen, ob für mäßig große Werte von ϵ , bei denen die Gutgestelltheit des Problems noch nicht gefährdet ist, die Nebenbedingung ausreichend genau erfüllt werden kann.

Die Variation $\delta_u \Pi_{NB}^{\bar{e}}$ impliziert wegen des quadratischen Nebenbedingungsterms in Π_{NB} eine ungewollte Kopplung der Feinskalenprobleme in benachbarten Grobkalenelementen $\Omega'_{\bar{e}}$ und $\Omega'_{\bar{n}}$, siehe Gleichung (5.14). Deshalb wird hier vorgeschlagen, die Lösung der diskreten Gleichungen in den jeweiligen Lastschritten durch ein iterativ *gestaffeltes* Lösungsverfahren vorzunehmen und so die Lokalität der Feinskalenprobleme zu erhalten. Dies wird durch folgende nichtkonsistente Linearisierung von $\delta_u \Pi_{NB}^{\bar{e}}$ erreicht: Während die Verschiebungen $\mathbf{d}'^{\bar{e}}$ des betrachteten Elements \bar{e} als Variable verstanden werden, werden für die zugehörige Nachbarverschiebung $\mathbf{d}'^{\bar{n}}$ auf $\Gamma_{\bar{e}\bar{n}}$ die bereits bekannten Lösungen des letzten Iterationsschritts i verwendet. Dadurch wird der Nebenbedingungsterm in der schwachen Form $\delta_u \Pi_{NB}^{\bar{e}}$ im aktuellen Iterationsschritt $i \rightarrow i + 1$ durch

$$\delta_u \Pi_{NB}^{\bar{e}, i+1} \approx \sum_{j=1}^{nn_{\bar{e}}} \epsilon \left((\delta \mathbf{d}'^{\bar{e}, i+1})^T \left(\mathbf{d}'^{\bar{e}, i+1} - \underbrace{\mathbf{d}'^{\bar{n}, i}}_{\text{bekannt}} \right) \right)_j \quad (5.15)$$

approximiert. Die grob- und feinskalgigen Verschiebungen und die nichtlokale Verzerrung werden, wie in den Gleichungen (4.14) – (4.16) und (2.50) angegeben, diskretisiert. Mit der Approximation (5.15) lautet die Linearisierung der schwachen Form (Gleichung (5.14) und (4.18) (a) und (c)):

– Grobskalenproblem:

$$\mathbf{K}_{\overline{D}\overline{D}}^i \Delta \overline{\mathbf{D}}^{i+1} + \sum_{\overline{e}=1}^{\overline{n}_{ele}'} \left(\mathbf{K}_{\overline{D}\overline{D}'}^{\overline{e},i} \Delta \mathbf{D}'_{\overline{e}}^{i+1} + \mathbf{K}_{\overline{D}\overline{E}}^{\overline{e},i} \Delta \mathbf{E}_{\overline{e}}^{i+1} \right) = - \overline{\mathbf{R}}^i$$

In jedem Grobskalenelement \overline{e} in Ω' : (5.16)

– Feinskalenproblem:

$$\mathbf{K}_{\overline{D}'\overline{d}}^{\overline{e},i} \Delta \overline{\mathbf{d}}_{\overline{e}}^{i+1} + \left(\mathbf{K}_{\overline{D}'\overline{D}'}^{\overline{e},i} + \epsilon \mathbf{M}^{\overline{e}} \right) \Delta \mathbf{D}'_{\overline{e}}^{i+1} + \mathbf{K}_{\overline{D}'\overline{E}}^{\overline{e},i} \Delta \mathbf{E}_{\overline{e}}^{i+1} = - \mathbf{R}'_{\overline{e},i} - \mathbf{R}'_{NB}{}^{\overline{e},i}$$

– Nichtlokale Verzerrung:

$$\mathbf{K}_{\overline{E}\overline{d}}^{\overline{e},i} \Delta \overline{\mathbf{d}}_{\overline{e}}^{i+1} + \mathbf{K}_{\overline{E}\overline{D}'}^{\overline{e},i} \Delta \mathbf{D}'_{\overline{e}}^{i+1} + \mathbf{K}_{\overline{E}\overline{E}}^{\overline{e},i} \Delta \mathbf{E}_{\overline{e}}^{i+1} = - \mathbf{R}_{\overline{E}}^{\overline{e},i} .$$

Die eingeklamerten Terme entstehen aus der Nebenbedingung (5.12). Ansonsten ist das diskrete, linearisierte Zweiskalenproblem unverändert, siehe Gleichung (4.21). Die diagonale Filtermatrix $\mathbf{M}^{\overline{e}}$ der Dimension $[n'_{dof}{}^{\overline{e}} \times n'_{dof}{}^{\overline{e}}]$ hat in den Zeilen und Spalten der Feinskalenverschiebungsfreiheitsgrade, die auf den Kopplungsrändern $\Gamma_{\overline{e}\overline{n}}$ liegen "1" – Einträge auf der Hauptdiagonalen, sonst Nulleinträge. $n'_{dof}{}^{\overline{e}}$ ist die Anzahl der Feinskalenverschiebungsfreiheitsgrade in $\Omega_{\overline{e}}$. Der Strafterm-Parameter ϵ hat offensichtlich die Dimension der Steifigkeitseinträge in der Systemsteifigkeitsmatrix, also [Kraft/Weg] in der vorliegenden Formulierung. Deshalb ist, wie bereits erwähnt, ϵ in einem sinnvollen Verhältnis zu den Steifigkeitseinträgen in der Systemmatrix zu wählen. Das Residuum $\mathbf{R}'_{NB}{}^{\overline{e},i}$ der Dimension $[n'_{dof}{}^{\overline{e}} \times 1]$ hat die Einträge " $\epsilon (d'_a{}^{\overline{e},i} - d'_a{}^{\overline{n},i})$ " mit $a = 1 \dots n_{dim}$ in den Zeilen der Feinskalenverschiebungsfreiheitsgrade, die auf $\Gamma_{\overline{e}\overline{n}}$ liegen, sonst Nulleinträge. Weitere Definitionen der Steifigkeiten und Residuen sind in Gleichung (4.22) gegeben.

Die entkoppelnde Wirkung der vorgeschlagenen, nichtkonsistenten Linearisierung wird deutlich, wenn man den konsistent linearisierten mit dem nicht konsistent linearisierten Beitrag zweier benachbarter Freiheitsgrade $d'_a{}^{\overline{e}}$ und $d'_a{}^{\overline{n}}$ zur schwachen Form $\delta_u \Pi_{NB}$ der Nebenbedingung vergleicht.

– konsistente Linearisierung:
$$\begin{bmatrix} \epsilon & -\epsilon \\ -\epsilon & \epsilon \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta d'_a{}^{\overline{e},i+1} \\ \Delta d'_a{}^{\overline{n},i+1} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \epsilon (d'_a{}^{\overline{e},i} - d'_a{}^{\overline{n},i}) \\ -\epsilon (d'_a{}^{\overline{e},i} - d'_a{}^{\overline{n},i}) \end{bmatrix} \quad (5.17)$$

– nichtkonsistente Linearisierung für gestaffeltes Lösungsverfahren:
$$\begin{bmatrix} \epsilon & 0 \\ 0 & \epsilon \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta d'_a{}^{\overline{e},i+1} \\ \Delta d'_a{}^{\overline{n},i+1} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \epsilon (d'_a{}^{\overline{e},i} - d'_a{}^{\overline{n},i}) \\ -\epsilon (d'_a{}^{\overline{e},i} - d'_a{}^{\overline{n},i}) \end{bmatrix} \quad (5.18)$$

In diversen Beispielen hat sich jedoch gezeigt, dass die nichtkonsistente Linearisierung der Nebenbedingung eine deutliche Verlangsamung der Konvergenz verursacht. Deshalb ist der Einsatz von beschleunigenden Maßnahmen sinnvoll. In dieser Arbeit wird ein extrapolationsbasie-

rtter Beschleuniger (Hund & Ramm (2006)) vorgeschlagen. Vergleichsweise wurde der Beschleuniger nach Aitken umgesetzt, siehe Abschnitt 3.4.1.

Für den extrapolationsbasierten Beschleuniger werden die unbekanntenen Freiheitsgrade $\Delta \mathbf{d}'^{\bar{n}, i+1}$, die bei konsistenter Linearisierung die Kopplung der Feinskalengleichungen verursachen, abgeschätzt und als $\Delta \mathbf{d}'^{\bar{n}}_{est}$ bezeichnet. Die zugehörigen Terme $-\epsilon \Delta \mathbf{d}'^{\bar{n}}_{a, est}$, vergleiche Gleichung (5.17), werden auf die "rechte Seite" gebracht:

$$\text{-- beschleunigtes gestaffeltes Lösungsverfahren: } \begin{bmatrix} \epsilon & 0 \\ 0 & \epsilon \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta \mathbf{d}'^{\bar{e}, i+1}_a \\ \Delta \mathbf{d}'^{\bar{n}, i+1}_a \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \epsilon (d'_{a, \bar{e}, i} - d'_{a, \bar{n}, i}) & -\epsilon \Delta \mathbf{d}'^{\bar{n}}_{a, est} \\ -\epsilon (d'_{a, \bar{e}, i} - d'_{a, \bar{n}, i}) & -\epsilon \Delta \mathbf{d}'^{\bar{e}}_{a, est} \end{bmatrix} \quad (5.19)$$

Die beschleunigten diskreten Feinskalenprobleme in $\Omega'_{\bar{e}}$ lauten dann:

-- Feinskalenproblem in jedem Grobskalenelement \bar{e} in Ω' :

$$\mathbf{K}^{\bar{e}, i}_{D'\bar{d}} \Delta \bar{\mathbf{d}}^{\bar{e}, i+1} + \left(\mathbf{K}^{\bar{e}, i}_{D'D'} + \boxed{\epsilon \mathbf{M}^{\bar{e}}} \right) \Delta \mathbf{D}'^{\bar{e}, i+1} + \mathbf{K}^{\bar{e}, i}_{D'E} \Delta \mathbf{E}^{\bar{e}, i+1} = - \mathbf{R}'^{\bar{e}, i} \boxed{- \mathbf{R}'^{\bar{e}, i}_{NB} - \mathbf{H}'^{\bar{e}}_{est}}. \quad (5.20)$$

Der durch die Beschleunigung hinzugekommene Vektor $\mathbf{H}'^{\bar{e}}_{est}$ hat dieselbe Dimension und Besetzungsstruktur wie das Residuum \mathbf{R}'_{NB} . In den Zeilen der Feinskalenverschiebungsfreiheitsgrade, die auf $\Gamma_{\bar{e}\bar{n}}$ liegen, hat er die Einträge $-\epsilon \Delta \mathbf{d}'^{\bar{n}}_{a, est}$, sonst nur Nulleinträge.

Als Abschätzungen der inkrementellen Nachbarverschiebungen $\Delta \mathbf{d}'^{\bar{n}}_{est}$ in den Lastschritten $k \rightarrow k+1$ werden Extrapolationen der letzten Lastschritte verwendet. Getestet wurden Extrapolationen 0. bis 2. Ordnung:

$$\text{0. Ordnung: } \Delta \mathbf{d}'^{\bar{n}, k+1}_{ex} = \Delta \mathbf{d}'^{\bar{n}, k} \frac{\Delta d_c^{k+1}}{\Delta d_c^k} \quad (5.21)$$

$$\text{1. Ordnung: } \Delta \mathbf{d}'^{\bar{n}, k+1}_{ex} = \Delta \mathbf{d}'^{\bar{n}, k} + (\Delta \mathbf{d}'^{\bar{n}, k} - \Delta \mathbf{d}'^{\bar{n}, k-1}) \frac{\Delta d_c^{k+1}}{\Delta d_c^k} \quad (5.22)$$

$$\text{2. Ordnung: } \Delta \mathbf{d}'^{\bar{n}, k+1}_{ex} = \Delta \mathbf{d}'^{\bar{n}, k} + b \Delta d_c^{k+1} + c (\Delta d_c^{k+1})^2 \quad (5.23)$$

$$\text{mit } c = \left[\Delta \mathbf{d}'^{\bar{n}, k-2} - \Delta \mathbf{d}'^{\bar{n}, k-1} \frac{\Delta d_c^k + \Delta d_c^{k-1}}{\Delta d_c^k} + \Delta \mathbf{d}'^{\bar{n}, k} \frac{\Delta d_c^{k-1}}{\Delta d_c^k} \right] \frac{1}{\Delta d_c^{k-1} (\Delta d_c^k + \Delta d_c^{k-1})}$$

$$\text{und } b = \left[\Delta \mathbf{d}'^{\bar{n}, k} - \Delta \mathbf{d}'^{\bar{n}, k-1} + c (\Delta d_c^k)^2 \right] \frac{1}{\Delta d_c^k}$$

Exemplarisch ist in Bild 5.13 die Extrapolation 1. Ordnung dargestellt.

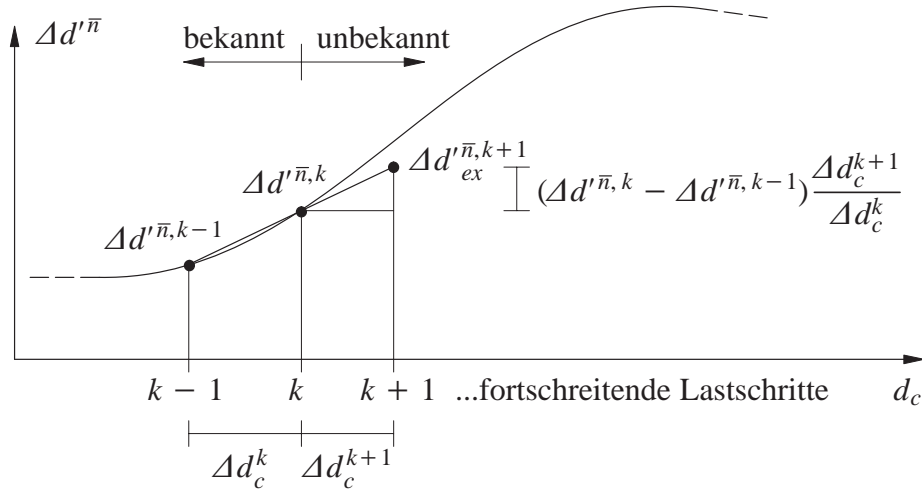


Bild 5.13: Extrapolation 1. Ordnung

d_c bezeichnet eine ausgewählte, vorgegebene Kontrollverschiebung, d.h. der Faktor $\Delta d_c^{k+1}/\Delta d_c^k$ berücksichtigt, dass die Lastschrittweite möglicherweise variiert.

Im Prädiktorschritt eines jeden Lastschritts wird diese Extrapolation als initiale Abschätzung der inkrementellen Nachbarverschiebung verwendet, d.h. $\Delta \mathbf{d}'_{est} := \Delta \mathbf{d}'_{ex}$. Soll diese Abschätzung der inkrementellen Veränderung der Nachbarverschiebung für diesen Lastschritt in den darauf folgenden Korrektoriterationen $i \rightarrow i + 1$ aufrecht erhalten bleiben, ist die residuale Nachbarverschiebung als Differenz zwischen dem "Soll"-Wert des Lastschritts $\Delta \mathbf{d}'_{ex}$ und dem momentanen "Ist"-Wert der Nachbarverschiebung einzuführen:

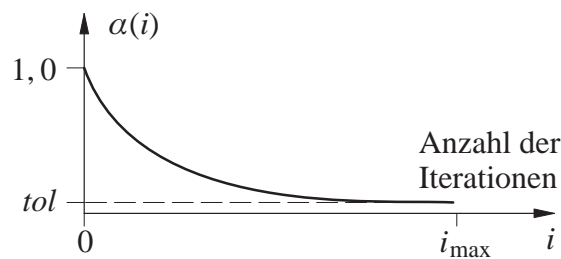
$$\Delta_{i+1} \mathbf{d}'_{est} := \underbrace{\Delta \mathbf{d}'_{ex}{}^{k+1}}_{\text{"Soll"-Wert im Lastschritt } k \rightarrow k+1} - \left[\underbrace{\Delta_p \mathbf{d}'^{\bar{n}}}_{\text{"Ist"-Prädiktorwert}} + \underbrace{\sum_{j < i+1} \Delta_j \mathbf{d}'^{\bar{n}}_j}_{\text{"Ist"-Summe der Werte vorangegangener Korrektoriterationen}} \right] \quad (5.24)$$

$\Delta_p(\cdot)$ ist hierbei die inkrementelle Veränderung im Prädiktorschritt, $\Delta_j(\cdot)$ die residuale Veränderung der Größe in den Korrektoriterationen j .

Auf diese Weise wird jedoch die (fehlerhafte) extrapolierte Abschätzung der inkrementellen Nachbarverschiebung *explizit* in die Formulierung eingebracht. Dadurch wird die Lösung sehr schnell fehlerhaft und es können Konvergenzprobleme auftreten, weil die gewählte Lastschrittweite im Allgemeinen nicht einem expliziten Verfahren angemessen ist. Deshalb wird ein Dämpfungsfaktor $\alpha(i)$ eingeführt, der die Abschätzung (5.24) mit steigender Anzahl an Iterationsschritten i ausblendet:

$$\Delta_{i+1} \mathbf{d}'_{est} := \alpha(i) \left[\Delta \mathbf{d}'_{ex}{}^{k+1} - \left[\Delta_p \mathbf{d}'^{\bar{n}} + \sum_{j < i+1} \Delta_j \mathbf{d}'^{\bar{n}}_j \right] \right] \quad (5.25)$$

Der Dämpfungsfaktor $\alpha(i)$ wird folgendermaßen definiert:



$$\alpha(i) = \exp\left(\ln(\text{tol}) \frac{i}{i_{\max}}\right) \quad (5.26)$$

$$\text{mit } i_{\max} := \left(i_{\max}^{k-1}/i_{\max}^k\right)^q i_{\max}^k$$

$$\text{und } q \in [0,5 \dots 1]$$

Bild 5.14: Dämpfungsfaktor $\alpha(i)$

Er nimmt mit steigender Anzahl an Korrekturiterationen exponentiell von 1 auf eine festgelegte Toleranz tol ab. i_{\max}^k ist die Anzahl der im vorangegangenen Lastschritt k benötigten Korrekturiterationen.

Zunächst wurde i_{\max} als Anzahl benötigter Korrekturiterationen des letzten Lastschritts gesetzt, d.h. $i_{\max} = i_{\max}^k$. Diese Wahl führte jedoch zu einem oszillierenden Verhalten der benötigten Iterationen, d.h. in einem Lastschritt wurden sehr wenige, im darauf folgenden Lastschritt sehr viele Iterationen benötigt usw. Ein Phänomen, das auch bei Verfahren zur automatischen Lastschrittweitensteuerung (Ramm (1981)) bekannt ist.

Daraufhin wurde i_{\max} wie in Bild 5.14 angegeben definiert. Der oszillierende Effekt wird bei dieser Definition von i_{\max} dadurch behoben, dass die Anzahl benötigter Iterationen von zwei vorangegangenen Lastschritten einfließt. Das beschleunigte Zweiskalenmodell kann, wie in Abschnitt 4.4 beschrieben, nach Algorithmus 4.1 umgesetzt werden.

- **Numerisches Beispiel: Strafterm–Methode**

Für das folgende Beispiel soll getestet werden, ob die Nebenbedingung $[\mathbf{u}'] = \mathbf{0}$ mit der Strafterm–Methode für einen Strafterm–Parameter ϵ , der so klein ist, dass die Formulierung noch gut gestellt ist, befriedigend genau erfüllt werden kann. Gleichzeitig wird das Konvergenzverhalten des unbeschleunigten gestaffelten Lösungsverfahrens mit dem durch Aitken bzw. Extrapolation beschleunigten Verfahren verglichen und dem Konvergenzverhalten einer konsistent linearisierten Feinskalenberechnung gegenübergestellt.

Hierfür wird ein dicker Balken aus homogenem, isotropem Reibungsmaterial mit einer geschwächten Schicht in Balkenmitte im ebenen Verzerrungszustand betrachtet. Er sei am linken Ende eingespannt und werde, wie in Bild 5.15 dargestellt, auseinandergezogen. Die fiktiven Materialparameter sind in Tabelle 5.2 angegeben. Unter der gegebenen Beanspruchung beginnt der Balken am rechten Ende in der geschwächten Schicht zu schädigen. Diese Schädigung breitet sich unter steigender Beanspruchung zur Einspannung am linken Ende hin aus.

Für das Zweiskalenmodell wird das System durch zwei bilineare Grobskalenelemente mit jeweils 225 bilinearen Feinskalenelementen diskretisiert. Zum Vergleich wird eine Feinskalenberechnung durchgeführt, wofür das System ebenfalls mit 2×225 bilinearen Elementen diskretisiert wird. Sie dient als Referenzlösung.

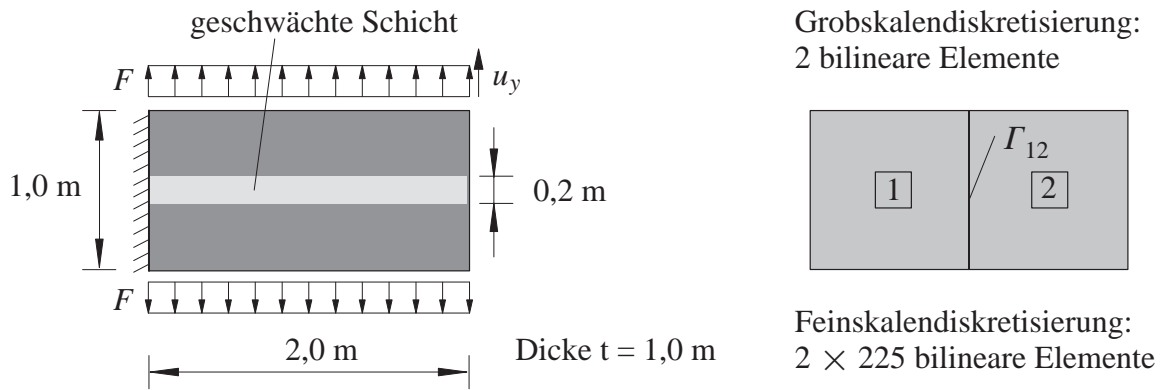


Bild 5.15: Beispiel dicker Balken: Geometrie und Diskretisierung

elastische Eigenschaften:	$E = 1000 \text{ N/mm}^2$	$\nu = 0,2$	
äquivalente Verzerrung (de Vree):	$k = 10,0$		
Schädigungsevolution (exponentiell):	$\kappa_0 = 0,01$	$\alpha = 0,98$	$\beta = 10$
geschwächte Schicht:	$\kappa_0 = 0,007$	$\alpha = 0,98$	$\beta = 20$
Gradientenparameter:	$c = 0,01 \text{ m}^2$		

Tabelle 5.2: Materialeigenschaften des dicken Balkens

Die Zweiskalenberechnung wird für unterschiedliche Strafterm-Parameter ϵ durchgeführt. Für $u_y = 0.015 \text{ m}$ – ein Zustand im entfestigenden Beanspruchungsbereich mit ca. 30 % der Traglast – wird jeweils der relative L_2 -Fehler

$$\text{rel. } \| (\mathbf{u}^{2SL} - \mathbf{u}^{FSL}) \|_{L_2} := \frac{1}{u_y \int_{\Omega} dV} \sqrt{\int_{\Omega} (\mathbf{u}^{2SL} - \mathbf{u}^{FSL})^2 dV} \quad (5.27)$$

der Zweiskalenlösung \mathbf{u}^{2SL} im Vergleich zur Feinskalenlösung \mathbf{u}^{FSL} berechnet, siehe Bild 5.16. Mit u_y wird die in Bild 5.15 eingetragene Kontrollverschiebung bezeichnet. Bereits für recht kleine Werte des Strafterm-Parameters ist die Genauigkeit der Zweiskalenlösung sehr hoch. Sie steigt für dieses Beispiel bis etwa $\epsilon = 1000 \text{ kN/mm}$ und nimmt dann mit wachsendem ϵ wieder ab. Der Grund dafür ist, dass bei großen Werten von ϵ der Nebenbedingungsterm $\delta_u \Pi_{NB}$ die Zweiskalenformulierung (Gleichung (5.14) mit (4.18) (a), (c)) dominiert und dadurch die Gleichgewichtsbeziehung weniger genau erfüllt wird. Zum Vergleich sei die Dehnsteifigkeit des betrachteten Balkens, als typische Systemsteifigkeit, genannt. Sie liegt bei 1000 kN/mm je Meter Dicke.

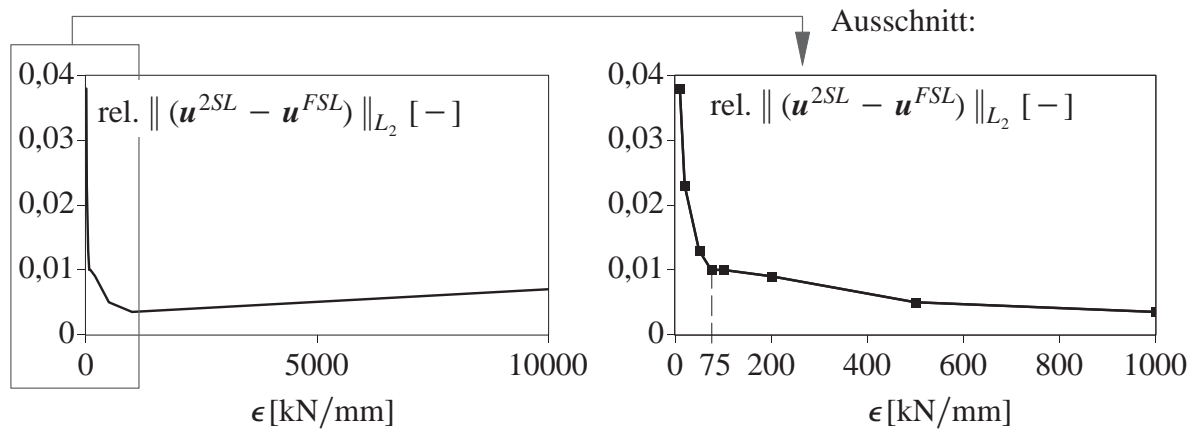


Bild 5.16: L_2 – Fehler in Abhängigkeit des Strafterm-Parameters

Weitere Ergebnisse der Berechnung sollen nun für $\epsilon = 75 \text{ kN/mm}$ (relativer Fehler $\text{rel. } \|(\mathbf{u}^{2SL} - \mathbf{u}^{FSL})\|_{L_2} = 1,0\%$) diskutiert werden. Die Last-Verschiebungs-Kurve (Bild 5.17) zeigt eine sehr gute Übereinstimmung der Zweiskalenlösung (Strafterm-Methode) mit der Feinskalenlösung (FSL). Auch das lokale Verhalten wird von der Zweiskalenlösung gut erfasst, wie man an der Verformungsfigur und der Schädigungsverteilung erkennen kann (Bild 5.18). Die Kontinuität der Verschiebungen wird für den relativ kleinen Strafterm-Parameter $\epsilon = 75 \text{ kN/mm}$ bereits sehr genau erfüllt und sorgt dafür, dass sich trotz Lokalitätsannahme die Schädigung über den Rand Γ_{12} von Element $\boxed{2}$ in das Element $\boxed{1}$ hinein ausbreiten kann. Die Diskontinuitäten in der Schädigungsverteilung der Zweiskalenlösung auf Γ_{12} rühren von den natürlichen Randbedingungen für $\tilde{\epsilon}_v$ auf Γ_{12} her. Hierauf wird in Abschnitt 6.1.3 näher eingegangen. Diese Diskontinuitäten haben jedoch keinen nennenswerten Einfluss auf das Systemverhalten.

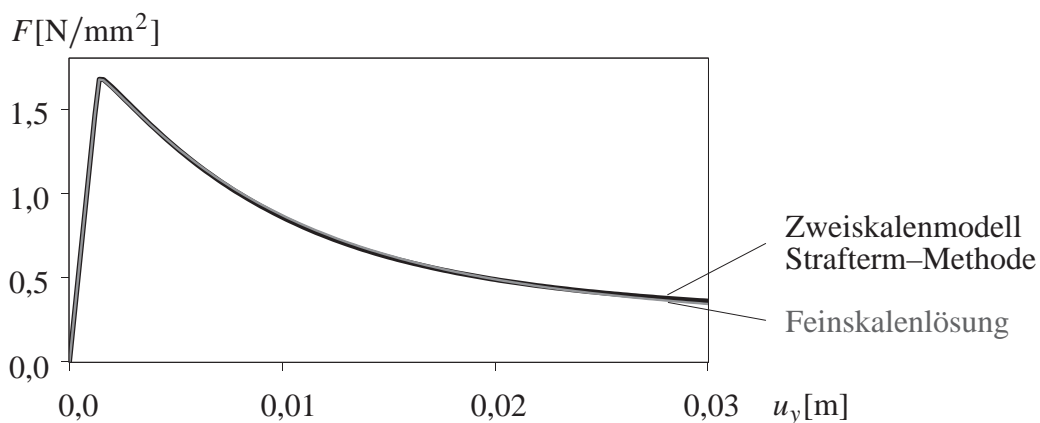


Bild 5.17: Last-Verschiebungs-Kurve: Vergleich Zweiskalenlösung (Strafterm) mit FSL

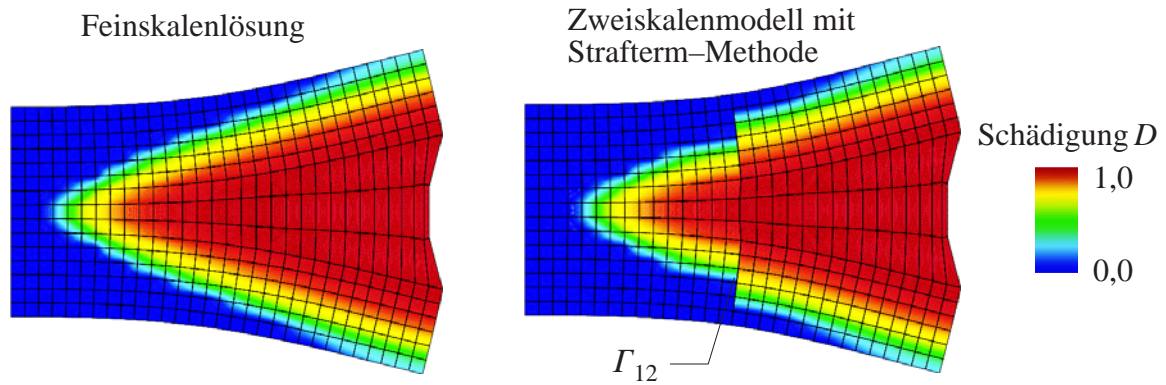


Bild 5.18: Schädigungsverteilung für $u_y = 0,07$ m, dargestellt im deformierten System (Überhöhungsfaktor 4,0)

Bild 5.19 zeigt die Anzahl benötigter Korrektoiterationen je Lastschritt. Die Toleranz der residualen Verschiebungen wurde auf $5,0 \cdot 10^{-7}$ m gesetzt. Ohne Beschleunigung zeigt das ungekoppelte gestaffelte Verfahren ein ziemlich schlechtes Konvergenzverhalten. Die Verbesserung der Konvergenzeigenschaften durch die Aitken-Methode ist in diesem Fall mäßig, während die Extrapolationsmethode mit Extrapolationen 0. Ordnung eine hervorragende Beschleunigung der iterativen Lösung bewirken konnte. Es werden ebenso wenig Iterationen wie bei der Feinskalenrechnung benötigt, mit Ausnahme der allerersten Lastschritte.

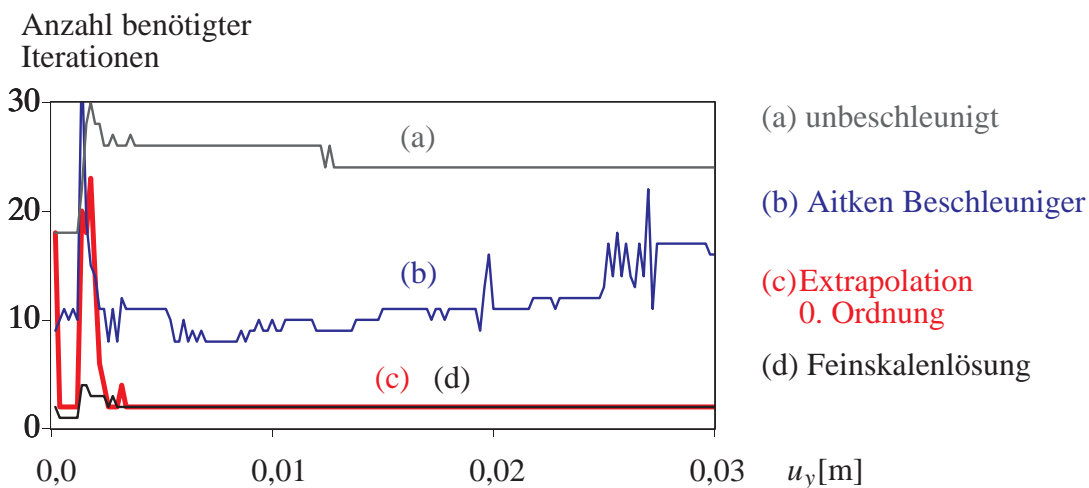


Bild 5.19: Dicker Balken: Konvergenzverhalten

Bei Extrapolationen höherer Ordnung wurde eine Tendenz zur Instabilität festgestellt, die hier im postkritischen Bereich zu Divergenz führte. Je höher die Extrapolationsordnung, desto früher tritt die Instabilität auf, siehe Bild 5.20. Dieser Effekt wird auch bei der sequentiell gestaffelten Lösung von Fluid-Struktur-Interaktionsproblemen beobachtet (Förster et al. (2006)).

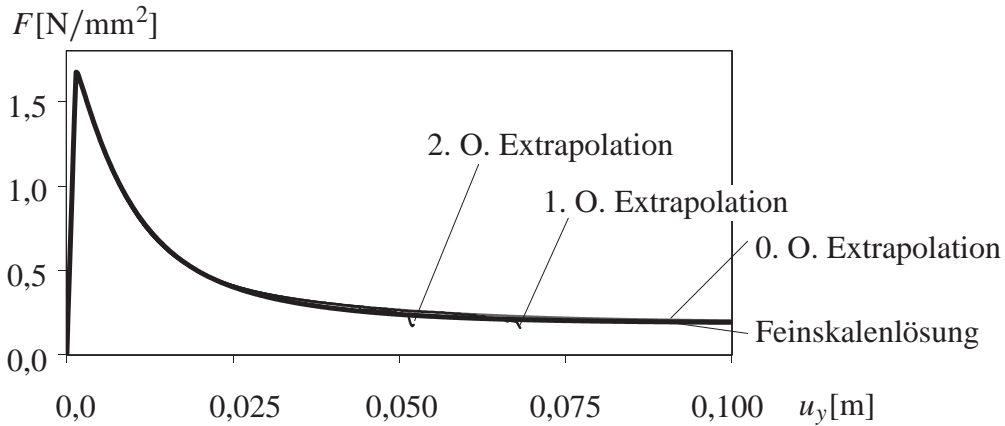


Bild 5.20: Last–Verschiebungs–Kurve: Instabilitäten bei Extrapolation höherer Ordnung

Hinsichtlich der Genauigkeit, mit der die Nebenbedingung erfüllt wird, scheint die Strafterm–Methode bereits für recht kleine Werte von ϵ vollkommen auszureichen. Darüber hinaus ist die Strafterm–Methode mit nur sehr geringem numerischem Aufwand verbunden, da keine zusätzlichen Freiheitsgrade benötigt werden. Ein weiterer Vorteil ist es, dass die Implementierung nur mit minimalen Eingriffen in das bestehende Programm verbunden ist.

Ein Manko kann jedoch unter Umständen die Robustheit des Verfahrens darstellen. Zum einen ist eine gewisse Erfahrung notwendig, um den Strafterm–Parameter ϵ angemessen zu wählen. Zum anderen kann durch die nichtkonsistente Linearisierung die Anzahl benötigter Iterationen auch trotz Beschleunigung über der der konsistenten Linearisierung liegen.

5.3.2 Umsetzung mit der Lagrange–Multiplikatoren–Methode

Eine weitere Möglichkeit, die Übergangsbedingung $[\mathbf{u}'] = \mathbf{0}$ zu realisieren, ist die Methode der Lagrange–Multiplikatoren, siehe auch Abschnitt 3.4.2 und Anhang A1.1. Sie ermöglicht die exakte Erfüllung von Nebenbedingungen, allerdings unter Einführung einer zusätzlichen (globalen) Variablen, dem sogenannten Lagrange–Multiplikator λ . Das Lagrange–Funktional für die kontinuierliche Nebenbedingung (5.11) lautet in Vektor–Matrix–Notation

$$\Pi_{NB}(\mathbf{u}', \lambda) = \sum_{j=1}^{n_F} \int_{\Gamma_{ms}^j} \lambda^T [\mathbf{u}'] dA . \quad (5.28)$$

n_F ist die Anzahl an Rändern Γ_{ms} in Ω' . Der Lagrange–Multiplikator $\lambda \in \mathbb{R}^{n_{dim}}$ kann als der Randspannungsvektor identifiziert werden, der notwendig ist, um die Bedingung $[\mathbf{u}'] = \mathbf{0}$ bei kompatiblen Grobskalenverschiebungen $\bar{\mathbf{u}}$ zu erfüllen. Er ist auf den Grobskalenelementrändern Γ_{ms} in Ω' definiert. Es sei darauf hingewiesen, dass mit dem schwach (integral) formulierten Funktional (5.28) die Nebenbedingung nach der Diskretisierung nur noch näherungsweise erfüllt wird. Die Genauigkeit, mit der der Nebenbedingung entsprochen wird, hängt vom Ansatzgrad für den Lagrange–Multiplikator ab.

Das kontinuierliche (schwache) Funktional (5.28) erlaubt auch inkompatible Diskretisierungen auf Γ_{ms} . Von dieser Möglichkeit wird in dieser Arbeit jedoch kein Gebrauch gemacht.

Bei kompatibler Diskretisierung der feinskaligen Verschiebungen auf den Rändern Γ_{ms} kann die Nebenbedingung auch knotenweise (siehe Gleichung (5.12)) – das bedeutet gleichzeitig punktweise im Bereich zwischen den Knoten – durch das Lagrange–Funktional

$$\Pi_{NB}(\mathbf{d}', \mathbf{l}) = \sum_{j=1}^{m_\Gamma} (\mathbf{l}^T [\mathbf{d}'])_j . \quad (5.29)$$

realisiert werden. \mathbf{l}_j ist der Vektor der Freiheitsgrade des Lagrange–Multiplikators am Knoten j , d.h. $\lambda_j = \mathbf{l}_j$. Die Nebenbedingung $[\mathbf{u}'] = \mathbf{0}$ wird dann auch im diskreten Fall in jedem Punkt auf Γ_{ms} exakt (im Rahmen der numerischen Genauigkeit) erfüllt.

Das Lagrange–Funktional (5.28) bzw. (5.29) erweitert die schwache Form $\delta\Pi = 0$ (Gleichung (4.18)) um einen zusätzlichen Term $\delta_{u'}\Pi_{NB}$ in den Feinskalengleichungen und um die Nebenbedingungsgleichung $\delta_\lambda\Pi_{NB} = 0$. Die kontinuierliche bzw. punktweise Umsetzung der Nebenbedingung führt jeweils auf

– Feinskalenprobleme jeweils $\forall \delta\mathbf{u}'$ in $\Omega'_{\bar{e}}$:

$$\delta_{u'}\Pi^{\bar{e}} = \underbrace{\delta_{u'}\Pi_p^{\bar{e}}}_{\text{siehe Gleichung (4.18)}} + \delta_{u'}\Pi_{NB}^{\bar{e}} = 0 \quad (5.30)$$

siehe Gleichung (4.18)

$$\text{mit } \delta_{u'}\Pi_{NB}^{\bar{e}} := \sum_{j=1}^{n_\Gamma^{\bar{e}}} \int_{\Gamma_{ms}^j} \pm \delta\mathbf{u}'^T \lambda \, dA \quad \text{bzw.} \quad \delta_{u'}\Pi_{NB}^{\bar{e}} := \sum_{j=1}^{m_\Gamma} (\pm \delta\mathbf{d}'^T \mathbf{l})_j$$

(kontinuierlich) (knotenweise)

– Nebenbedingung jeweils $\forall \delta\lambda$ auf Γ_{ms} : (5.31)

$$\delta_\lambda\Pi_{NB} := \int_{\Gamma_{ms}} \delta\lambda^T [\mathbf{u}'] \, dA = 0 \quad \text{bzw.} \quad \delta_\lambda\Pi_{NB} := \sum_{j=1}^{m_\Gamma} (\delta\mathbf{l}^T [\mathbf{d}'])_j = 0 .$$

(kontinuierlich) (knotenweise)

m_Γ ist die Anzahl der Feinskalenverschiebungsknoten auf Γ_{ms} . Das obere (positive) Vorzeichen in Gleichung (5.30) gilt für den ”m”–Fall, das untere (negative) Vorzeichen für den ”s”–Fall. Diese Notation wird auch im Folgenden verwendet. Das Grobskalenproblem und die Evolutionsgleichung der nichtlokalen Verzerrung der schwachen Form bleiben von der Nebenbedingung unberührt; sie sind in Gleichung (4.18) (a) und (c) angegeben. Bei der Methode der Lagrange–Multiplikatoren bleibt, im Gegensatz zur Strafterm–Methode, die Lokalität der Feinskalengleichungen (5.30) erhalten. Die Kopplung der Feinskalenverschiebungen benachbarter Grobskalenelemente erfolgt durch die zusätzliche Nebenbedingungsgleichung (5.31). Diese zählt, ebenso wie das Grobskalenproblem, zu den globalen Gleichungen.

Die Variablen $\bar{\mathbf{u}}$, \mathbf{u}' , $[\mathbf{u}']$ über die Interfaces und $\tilde{\varepsilon}_v$ werden so, wie in den Gleichungen (4.14) – (4.16) und (2.50) angegeben, diskretisiert. Die Diskretisierung der feinskaligen Verschiebungen \mathbf{u}' und des Lagrange–Multiplikators λ muss der *Inf–Sup–Bedingung* genügen, siehe Ba-

buska (1973) oder auch Braess (1997). Diese Bedingung schränkt bei festgelegter Diskretisierung für \mathbf{u}' den Ansatzraum für λ "nach oben" ein. Haben λ und \mathbf{u}'_m bzw. \mathbf{u}'_s dieselbe Ansatzordnung auf Γ_{ms} , wie es bei punktwiser Umsetzung der Nebenbedingung nach Gleichung (5.29) automatisch der Fall ist, so ist die Inf–Sup–Bedingung gerade noch eingehalten. Alle niedrigeren Ansatzordnungen für λ genügen ebenfalls der Inf–Sup–Bedingung.

Bei punktwiser Umsetzung der Nebenbedingung wird λ durch n_{dim} Freiheitsgrade l_j je Feinskalknoten auf den Rändern Γ_{ms} diskretisiert. Die Lagrange–Multiplikatoren λ sind dann einzelne, diskrete Knotenwerte und keine kontinuierliche Funktion, siehe Bild 5.21. Entlang eines Randes Γ_{ms} werden die Freiheitsgrade als $\mathbf{L} = \bigcup_{j=1}^{n_{\text{dim}}} l_j$ bezeichnet.

Bei der kontinuierlichen Variante der Nebenbedingung werden in dieser Arbeit polynomiale p–hierarchische Ansätze entlang eines Randes Γ_{ms} der Form

$$\lambda \approx \lambda^h = N_\lambda \mathbf{L} , \quad \delta\lambda \approx \delta\lambda^h = N_\lambda \delta\mathbf{L} \quad (5.32)$$

eingesetzt. Der Träger der Ansatzfunktionen N_λ reicht dabei jeweils über den ganzen Rand Γ_{ms} , siehe Bild 5.21. Damit die Inf–Sup–Bedingung eingehalten wird, darf hierbei λ höchstens durch gleich viele Freiheitsgrade wie \mathbf{u}' auf Γ_{ms} diskretisiert werden, wie es in Bild 5.21 der Fall ist. Inwiefern die Genauigkeit, mit der die Nebenbedingung (5.11) erfüllt wird, für eine deutlich geringere Anzahl an Freiheitsgraden für λ als für \mathbf{u}' bereits befriedigend ist, wird in nachfolgendem Beispiel geprüft.

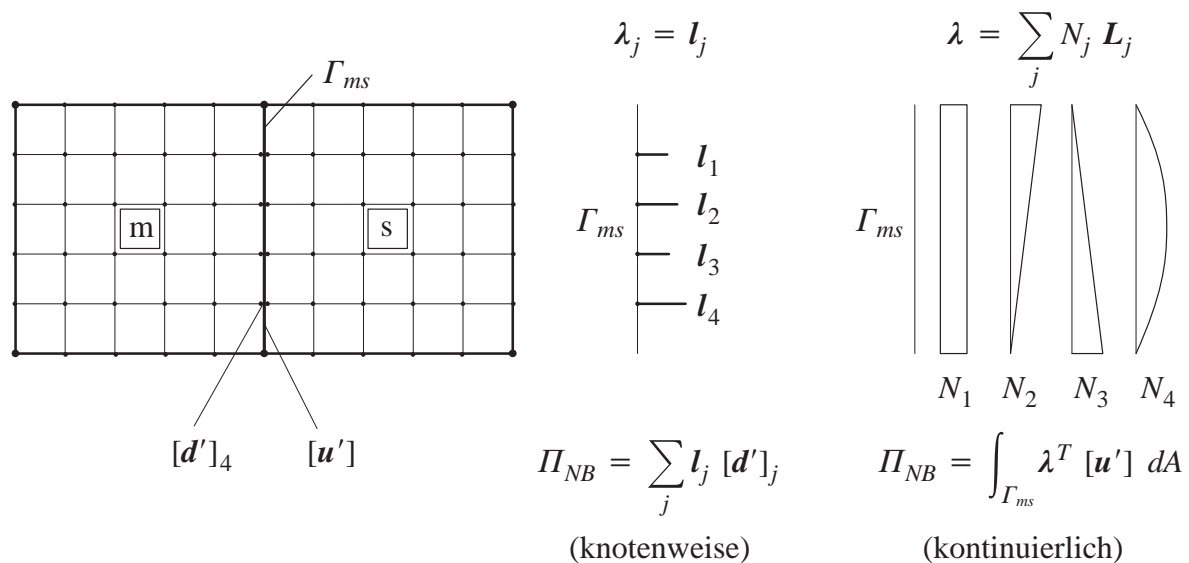


Bild 5.21: Diskretisierung des Lagrange–Multiplikators, knotenweise vs. kontinuierliche Variante

Die von Wohlmuth (2000) und Hübner & Wohlmuth (2005) für Mehrkörperkontaktprobleme vorgeschlagenen dualen Ansätze für λ , die in Verbindung mit einer entsprechenden Transformation der Randfreiheitsgrade eine Entkopplung der Gleichungen für die Lagrange–Freiheitsgrade bewirken, sind hier leider ungeeignet. Die notwendige Transformation würde eine Kopplung der Feinskalkprobleme nach sich ziehen.

Nach Linearisierung der diskretisierten schwachen Form erhält man das folgende Gleichungssystem. Es unterscheidet sich durch die umrahmten Terme bzw. Gleichungen vom diskreten linearisierten Zweiskalenproblem mit Nullrandbedingung (Gleichung (4.21)).

– Grobskalenproblem : (5.33)

$$\mathbf{K}_{\overline{D}\overline{D}}^i \Delta \overline{\mathbf{D}}^{i+1} + \sum_{\overline{e}=1}^{\overline{n}_{ele}'} \left(\mathbf{K}_{\overline{d}D'}^{\overline{e},i} \Delta \mathbf{D}'^{i+1}_{\overline{e}} + \mathbf{K}_{\overline{d}E}^{\overline{e},i} \Delta \mathbf{E}_{\overline{e}}^{i+1} \right) = - \overline{\mathbf{R}}^i$$

– Nebenbedingungen für jeden Rand Γ_{ms} :

$$\mathbf{G}_m \Delta \mathbf{D}'^{i+1}_m|_{\Gamma_{ms}} + \mathbf{G}_s \Delta \mathbf{D}'^{i+1}_s|_{\Gamma_{ms}} = - \mathbf{R}_L^i$$

In jedem Grobskalenelement \overline{e} in Ω' :

– Feinskalenproblem :

$$\mathbf{K}_{D'\overline{d}}^{\overline{e},i} \Delta \overline{\mathbf{d}}_{\overline{e}}^{i+1} + \mathbf{K}_{D'D'}^{\overline{e},i} \Delta \mathbf{D}'^{i+1}_{\overline{e}} + \mathbf{K}_{D'E}^{\overline{e},i} \Delta \mathbf{E}_{\overline{e}}^{i+1} + \sum_{j=1}^{n_{\Gamma}^{\overline{e}}} \left(\tilde{\mathbf{G}}^T \Delta \mathbf{L}^{i+1} \right)_{\Gamma_{ms}^j} = - \mathbf{R}'^{\overline{e},i} - \sum_{j=1}^{n_{\Gamma}^{\overline{e}}} \left(\mathbf{R}'_{NB} \right)_{\Gamma_{ms}^j}^i$$

– Nichtlokale Verzerrung :

$$\mathbf{K}_{E\overline{d}}^{\overline{e},i} \Delta \overline{\mathbf{d}}_{\overline{e}}^{i+1} + \mathbf{K}_{ED'}^{\overline{e},i} \Delta \mathbf{D}'^{i+1}_{\overline{e}} + \mathbf{K}_{EE}^{\overline{e},i} \Delta \mathbf{E}_{\overline{e}}^{i+1} = - \mathbf{R}_E^{\overline{e},i}$$

n_{λ}^{Γ} ist die Anzahl der Freiheitsgrade \mathbf{L} auf dem einzelnen Rand Γ_{ms} und $\mathbf{D}'_{m/s}|_{\Gamma_{ms}}$ der Vektor der Feinskalenverschiebungsfreiheitsgrade der Elemente m bzw. s auf Γ_{ms} .

Die Matrizen $\mathbf{G}_{m/s}$ der Dimension $[n_{\lambda}^{\Gamma} \times 2nn_{\Gamma}]$ und die Residuen \mathbf{R}'_{NB} der Dimension $[n'^{\overline{e}}_{dof} \times 1]$ und \mathbf{R}_L der Dimension $[n_{\lambda}^{\Gamma} \times 1]$ sind bei kontinuierlicher Formulierung der Nebenbedingung durch

$$\mathbf{G}_{m/s} = \pm \int_{\Gamma_{ms}} \mathbf{N}_{\lambda}^T \mathbf{N}' dA, \quad \mathbf{R}'_{NB} = \pm \int_{\Gamma_{ms}} \mathbf{N}'^T \boldsymbol{\lambda}^i dA, \quad \mathbf{R}_L = \int_{\Gamma_{ms}} \mathbf{N}_{\lambda}^T [\mathbf{u}'^i] dA \quad (5.34)$$

definiert.

Bei punktwiser Erfüllung der Nebenbedingung hat $\mathbf{G}_{m/s}$ die Einträge " ± 1 " in den Spalten der Freiheitsgrade $\mathbf{D}'_{m/s}|_{\Gamma_{ms}}$ in der Zeile des zugehörigen Lagrange–Freiheitsgrads, sonst Null–Einträge. \mathbf{R}'_{NB} hat die Einträge " $\pm \boldsymbol{\lambda}^i$ " in den Zeilen der Feinskalenknotten, die auf Γ_{ms} liegen, sonst Nulleinträge und \mathbf{R}_L hat die Einträge " $[\mathbf{d}'^i]$ " in den Zeilen der zu diesen Verschiebungen zugehörigen Lagrange–Freiheitsgrade.

Die Matrix $\tilde{\mathbf{G}}$ der Dimension $[n_{\lambda}^{\Gamma} \times n'^{\overline{e}}_{dof}]$ entsteht aus $\mathbf{G}_{m/s}$ durch Erweiterung mit Nullspalten auf alle Feinskalenverschiebungsfreiheitsgrade $\mathbf{D}'_{\overline{e}}$ des Grobskalenelements. Für die Definitionen der weiteren, bereits eingeführten Matrizen und Vektoren sei auf Gleichung (4.22) verwiesen.

Am Gleichungssystem (5.33) kann man die Bedeutung der Inf–Sup–Bedingung für die diskreten Gleichungen erkennen: Würde λ mit höherer Ansatzordnung als die Feinskalenverschiebungen \mathbf{u}'_m bzw. \mathbf{u}'_s auf Γ_{ms} angesetzt, hätte die Matrix $\mathbf{G} := [\mathbf{G}_m \ \mathbf{G}_s]$ nicht mehr vollen Rang. Das Gleichungssystem (5.33) würde dadurch singulär. Dass die Matrix \mathbf{G} vollen Rang hat, ist eine notwendige, wenn auch nicht hinreichende Bedingung, damit die Inf–Sup–Bedingung erfüllt ist, siehe Zienkiewicz et al. (2005).

Die Lösung des Gleichungssystems (5.33) im Rahmen einer inkrementell–iterativen Pfadverfolgung erfolgt wie in Abschnitt 4.4 beschrieben. Die unveränderlichen Matrizen \mathbf{G}_m und \mathbf{G}_s brauchen jeweils nur einmal aufgestellt zu werden, wenn der jeweilige Rand Γ_{ms} in das Feinskalengebiet Ω' aufgenommen wird. Die Lagrange–Freiheitsgrade \mathbf{L} , deren Anzahl mit Ausbreitung des Feinskalengebiets Ω' zunimmt, zählen zu den globalen Variablen, die nicht durch statische Kondensation lokal eliminiert werden können. Bei punktwiser Umsetzung der Nebenbedingung entspricht der Lösungsalgorithmus des Feinskalenproblems der Gebietszerlegungs­methode FETI (Farhat et al. (1998)).

- **Numerisches Beispiel: Methode der Lagrange–Multiplikatoren**

Anhand des Beispiels aus Abschnitt 5.2.2 soll diskutiert werden, welcher Ansatzgrad für die Diskretisierung des Lagrange–Multiplikators λ hinsichtlich Genauigkeit und Robustheit des Zweiskalenmodells sinnvoll ist. Bei diesem Beispiel ist die feinskalige Verschiebung auf den Kopplungsrändern durch 15 Freiheitsgrade je Verschiebungskomponente (x– und y–Richtung) diskretisiert. Der Lagrange–Multiplikator wird bei kontinuierlicher (schwacher) Forderung der Verschiebungskontinuität (Gleichung (5.28)) vergleichsweise konstant (1 Freiheitsgrad je Komponente), kubisch (4 Freiheitsgrade je Komponente) und quartisch (5 Freiheitsgrade je Komponente) entlang der Kopplungsränder Γ_{ms} angesetzt. Desweiteren wurde λ für die punktweise Forderung der Verschiebungskontinuität entsprechend Gleichung (5.29) mit 15 Freiheitsgraden je Komponente entlang der Kopplungsränder diskretisiert. Eine Feinskalenlösung dient als Referenz.

Das schwache Erfüllen der Übergangsbedingung mit niedrigerem Ansatzgrad für λ als für \mathbf{u}' weicht die Systemkinematik auf und führt zu unteren Grenzen der Systemantwort, siehe Bild 5.22 (a1), (a2) und (a3). Das Antwortverhalten unter diesen Nebenbedingungen ist daher spröder als die Feinskalenlösung. Je höher der Ansatzgrad für λ , desto genauer approximiert die Systemantwort die Feinskalenlösung.

Das punktweise Erfüllen der Übergangsbedingung führt, wie zu erwarten, auf eine Lösung, die die Feinskalenlösung außerordentlich gut approximiert (Bild 5.22 b)). Die hier auftretenden geringen Abweichungen von der Feinskalenlösung entstehen durch die homogenen Randbedingungen an die nichtlokale Verzerrung an den Grobskalenelementrändern. Diese Problematik wird in Abschnitt 6.1.3 näher untersucht.

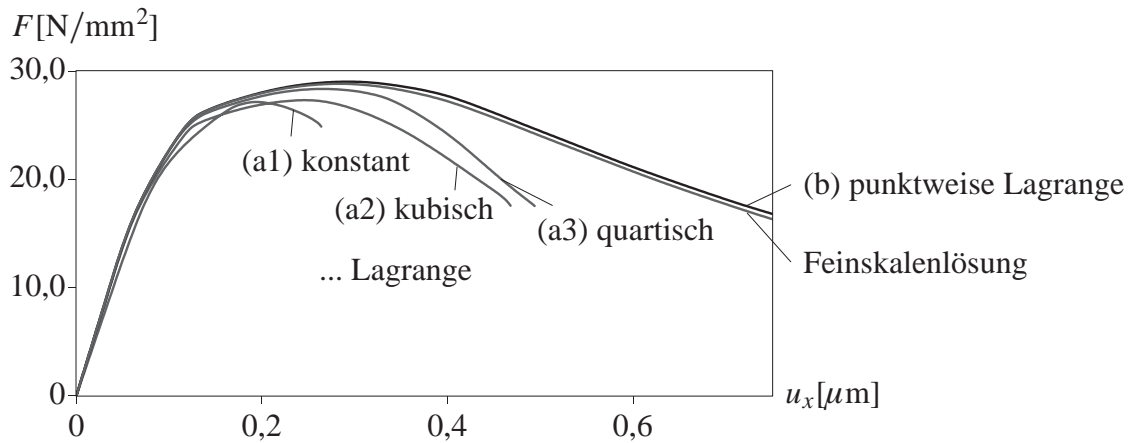


Bild 5.22: Last–Verformungs–Verhalten: Vergleich zwischen Zweiskalenlösungen und FSL

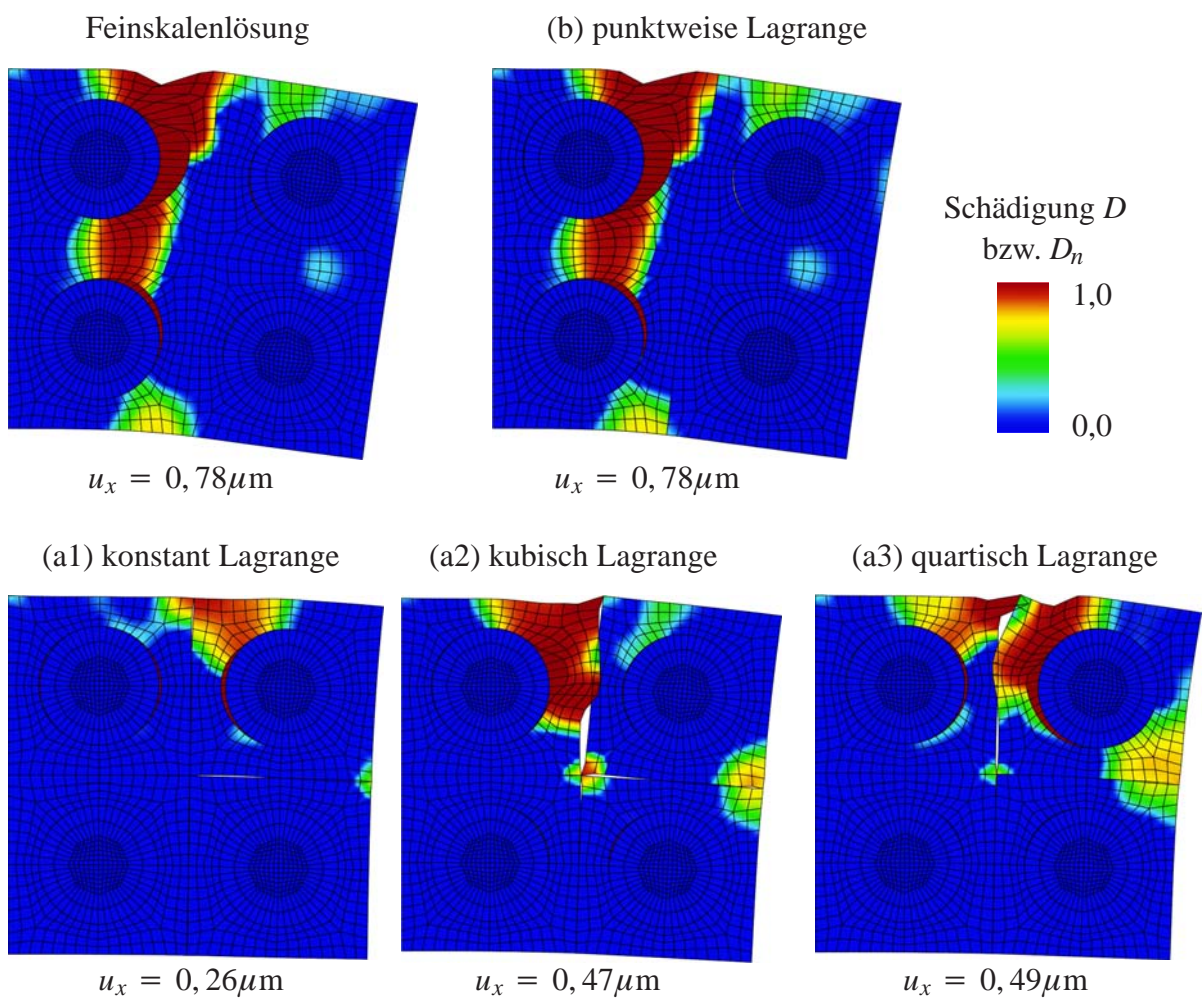


Bild 5.23: Deformation (Überhöhungsfaktor 10,0) und Schädigungsverteilung

Die zu große kinematische Freiheit bei schwacher Erfüllung der Übergangsbedingung mit niedrigen Ansätzen für den Lagrange–Multiplikator λ und die Testfunktion $\delta\lambda$ im Vergleich zu den Ansätzen für \mathbf{u}' äußert sich in inkompatiblen Verschiebungen an den Kopplungsrändern, siehe

Bild 5.23 (a1), (a2), und (a3). Das verursacht in diesem Beispiel für alle drei betrachteten Varianten (konstante, kubische und quartische Ansätze für λ) Schädigungsverteilungen, die das tatsächliche Lokalisierungsverhalten nicht genau erfassen und jeweils zur Divergenz der numerischen Berechnungen führen. Die Deformationszustände (a1), (a2), und (a3) in Bild 5.23 stellen jeweils den letzten Beanspruchungszustand dar, in dem Konvergenz erreicht werden konnte.

Bei punktwiser Erfüllung der Übergangsbedingung dagegen zeigt das lokale Verhalten des Zweiskalenmodells (Bild 5.23 (b)) eine sehr gute Übereinstimmung mit der Feinskalenlösung.

Im betrachteten Beispiel führt die schwache Umsetzung der Nebenbedingung mit deutlich geringerem Ansatzgrad für λ als für \mathbf{u}' auf Γ_{ms} zu unbefriedigenden Ergebnissen sowohl in Bezug auf die Genauigkeit als auch auf die Robustheit, während die punktweise Berücksichtigung der Nebenbedingung (gleicher Ansatzgrad für λ und \mathbf{u}') sehr genaue Ergebnisse liefert. Die numerische Stabilität der punktweisen Variante ist ebenso gut wie die der Feinskalenberechnung. Ein Nachteil der punktweisen Umsetzung kann die unter Umständen große Anzahl an zusätzlichen globalen Freiheitsgraden L sein.

5.3.3 Umsetzung mit der erweiterten Lagrange–Multiplikatoren–Methode

Die erweiterte Lagrange–Multiplikatoren–Methode ist eine Kombination der Strafterm– und Lagrange–Multiplikatoren–Methode. Laut Luenberger (1984) versucht sie, die Vorteile beider Methoden miteinander zu vereinen, um die Nebenbedingung exakt jedoch ohne zusätzliche Freiheitsgrade zu erfüllen, siehe auch Anhang A1.3. Dies wird durch ein iteratives Vorgehen erreicht, bei dem der Lagrange–Multiplikator λ in den Iterationsschritten $\ell \rightarrow \ell + 1$ jeweils konstant gehalten wird und somit keine Variable darstellt. Die Ersparnis der Lagrange–Freiheitsgrade geht jedoch im Vergleich zur ”reinen” Lagrange–Multiplikatoren–Methode mit zusätzlichen Iterationen einher.

Das erweiterte Lagrange–Funktional ist bei punktwiser Forderung der Nebenbedingung durch

$$\Pi_{NB}(\mathbf{d}') = \sum_{j=1}^{nn} (\lambda^T [\mathbf{d}']_j) + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{nn} \epsilon ([\mathbf{d}']^T [\mathbf{d}']_j) . \quad (5.35)$$

gegeben. Der knotenweise Lagrange–Multiplikator λ sei hierbei konstant. Die Äquivalenz der Strafterm– und Lagrange–Funktionale

$$\lambda^T [\mathbf{d}'] \hat{=} \epsilon [\mathbf{d}']^T [\mathbf{d}'] \quad (5.36)$$

nutzend, kann der knotenweise Lagrange–Multiplikator λ durch die ”update”–Vorschrift 1. Ordnung

$$\lambda^{\ell+1} = \lambda^{\ell} + \epsilon [\mathbf{d}'^{\ell+1}] \quad (5.37)$$

aktualisiert werden (siehe Luenberger (1984)). Die Steigung zwischen $[\mathbf{d}']$ und $(\lambda^{\ell+1} - \lambda^{\ell})$ ist der Parameter ϵ . Er beeinflusst deshalb offensichtlich das Konvergenzverhalten der Nebenbedingungsiteration. Die Nebenbedingung verändert das Feinskalenproblem der schwachen Form (4.18). In jedem Grobskalenelement \bar{e} gilt $\forall \delta \mathbf{d}'$:

– Feinskalenproblem:

$$\delta_{u'} \Pi^{\bar{e}} = \underbrace{\delta_{u'} \Pi_p^{\bar{e}}}_{\text{siehe Gleichung (4.18)}} + \delta_{u'} \Pi_{NB}^{\bar{e}} = 0 \quad (5.38)$$

$$\text{mit } \delta_{u'} \Pi_{NB}^{\bar{e}} := \pm \left[\sum_{j=1}^{m_{\bar{e}}} \epsilon \left((\delta \mathbf{d}'^{\bar{e}})^T [\mathbf{d}'] \right)_j + \sum_{j=1}^{m_{\bar{e}}} \lambda_j^T \mathbf{1} \right] \text{ und } \mathbf{1} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \text{ im 2-dim.}$$

Die anderen Gleichungen der schwachen Form (4.18) bleiben unverändert. Wie bei der Strafterm–Methode wird die entstehende Kopplung der Feinskalengleichungen benachbarter Grobkalenelemente durch die nichtkonsistente Linearisierung des Nebenbedingungsterms um den aktuellen Zustand $i + 1$

$$\delta_{u'} \Pi_{NB}^{\bar{e}, i+1} \approx \pm \left[\sum_{j=1}^{m_{\bar{e}}} \epsilon \left(\delta \mathbf{d}'^{\bar{e}, i+1} \right)^T \left(\mathbf{d}'^{\bar{e}, i+1} - \mathbf{d}'^{\bar{n}, i} \right)_j + \sum_{j=1}^{m_{\bar{e}}} \lambda_j^T \mathbf{1} \right] \quad (5.39)$$

aufgehoben. Die Variablen $\bar{\mathbf{u}}$, \mathbf{u}' und $\tilde{\epsilon}_v$ werden nach den Gleichungen (4.14)–(4.16) und (2.50) diskretisiert. Mit der Approximation (5.39) lautet dann die linearisierte schwache Form:

– Grobkalenproblem:

$$\mathbf{K}_{\bar{D}\bar{D}}^i \Delta \bar{\mathbf{D}}^{i+1} + \sum_{\bar{e}=1}^{\bar{n}_{ele}^{\Omega'}} \left(\mathbf{K}_{\bar{D}D'}^{\bar{e}, i} \Delta \mathbf{D}'^{\bar{e}, i+1} + \mathbf{K}_{\bar{D}E}^{\bar{e}, i} \Delta \mathbf{E}_{\bar{e}}^{i+1} \right) = - \bar{\mathbf{R}}^i \quad (5.40)$$

In jedem Grobkalenelement \bar{e} in Ω' :

– Feinskalenproblem:

$$\mathbf{K}_{D'\bar{d}}^{\bar{e}, i} \Delta \bar{\mathbf{d}}_{\bar{e}}^{i+1} + \left(\mathbf{K}_{D'D'}^{\bar{e}, i} + \boxed{\epsilon \mathbf{M}^{\bar{e}}} \right) \Delta \mathbf{D}'^{\bar{e}, i+1} + \mathbf{K}_{D'E}^{\bar{e}, i} \Delta \mathbf{E}_{\bar{e}}^{i+1} = - \mathbf{R}'^{\bar{e}, i} \boxed{- \sum_{j=1}^{n_{\Gamma}^{\bar{e}}} \left(\mathbf{R}'_{NB} \right)_{\Gamma_{ms}^j}}$$

– Nichtlokale Verzerrung:

$$\mathbf{K}_{E\bar{d}}^{\bar{e}, i} \Delta \bar{\mathbf{d}}_{\bar{e}}^{i+1} + \mathbf{K}_{ED'}^{\bar{e}, i} \Delta \mathbf{D}'^{\bar{e}, i+1} + \mathbf{K}_{EE}^{\bar{e}, i} \Delta \mathbf{E}_{\bar{e}}^{i+1} = - \mathbf{R}_E^{\bar{e}, i} .$$

$\mathbf{M}^{\bar{e}}$ der Dimension $[n'_{dof}^{\bar{e}} \times n'_{dof}^{\bar{e}}]$ hat auf der Hauptdiagonalen "1" – Einträge für die Feinskalen–Verschiebungsfreiheitsgrade, die auf Γ_{ms} liegen, sonst Nulleinträge. Das Residuum \mathbf{R}'_{NB} der Dimension $[n'_{dof}^{\bar{e}} \times 1]$ hat die Einträge " $\pm (\epsilon ([d'^i]_a) + \lambda_a)$ " mit $a = 1..n_{dim}$ in der Zeile der Feinskalenverschiebungsfreiheitsgrade, die auf Γ_{ms} liegen, sonst Nulleinträge.

Der Lösungsalgorithmus wird in gleicher Weise wie bei der Strafterm–Methode beschleunigt, siehe Abschnitt 5.3.1. Zur iterativen Anpassung des Lagrange–Multiplikators wird die inkrementell–iterative Pfadverfolgung (Algorithmus 4.1) durch die äußere "update"–Schleife (Index ℓ) zum sogenannten Uzawa–Algorithmus erweitert, siehe Bertsekas (1984) oder Wriggers (2002).

-
- (i) Input
Globale Initialisierung
 - (ii) Globale Lastschrittsschleife (Index k)
 - (iii) Nebenbedingungs–Iterationsschleife (Index ℓ)
 - (iv) Gleichgewichts–Iterationsschleife (Index i)
Schritte (iv) – (xxiv) des Algorithmus 4.1
 - (v) Lösung erweitertes Grobskalenproblem $\rightarrow \bar{\mathbf{D}}_{k+1}^{i+1}$
 - (vi) falls keine Konvergenz des Gleichgewichts: $i \leftarrow i + 1$ goto (iv)
 - (vii) Schleife über Feinskalenknotten auf den Kopplungsrändern Γ_{ms}
 - (viii) Aktualisierung der Lagrange–Multiplikatoren (Gleichung (5.37))
 - (ix) falls keine Konvergenz der Nebenbedingung: $\ell \leftarrow \ell + 1$ goto (iii)
 - (xxvii) Aktualisierung Geschichtsvariablen, Rückrechnung zu Spannungen, Output
 - (xxviii) $k \leftarrow k + 1$ goto (ii)
-

Algorithmus 5.1 Uzawa–Algorithmus

- **Numerisches Beispiel: Erweiterte Lagrange–Multiplikatoren–Methode**

Für das Beispiel, das bereits zur Untersuchung der Strafterm–Methode in Abschnitt 5.3.1 vorgestellt wurde, wird nun der Einfluss des Parameters ϵ auf die Konvergenzeigenschaften der zusätzlichen Nebenbedingungsiteration des Uzawa–Algorithmus 5.1 analysiert. Als Fehlermaß wird die Abweichung von der knotenweise zu erfüllenden Nebenbedingung $[\mathbf{d}'] = \mathbf{0}$ in Form von

$$NB_{err} := \sum_{i=1}^{nn_{\Gamma}} \sqrt{[d'_x]^2 + [d'_y]^2} / nn_{\Gamma} \quad (5.41)$$

eingeführt. In Bild 5.24 ist links die Anzahl an Nebenbedingungsiterationen, die benötigt wurde, um eine gewählte Fehlertoleranz von $NB_{err} = 1,0 \cdot 10^{-6}$ m zu unterschreiten, über dem Parameter ϵ aufgetragen. Rechts ist das Konvergenzdiagramm dieser Iteration für unterschiedliche Werte von ϵ [kN/mm] angegeben.

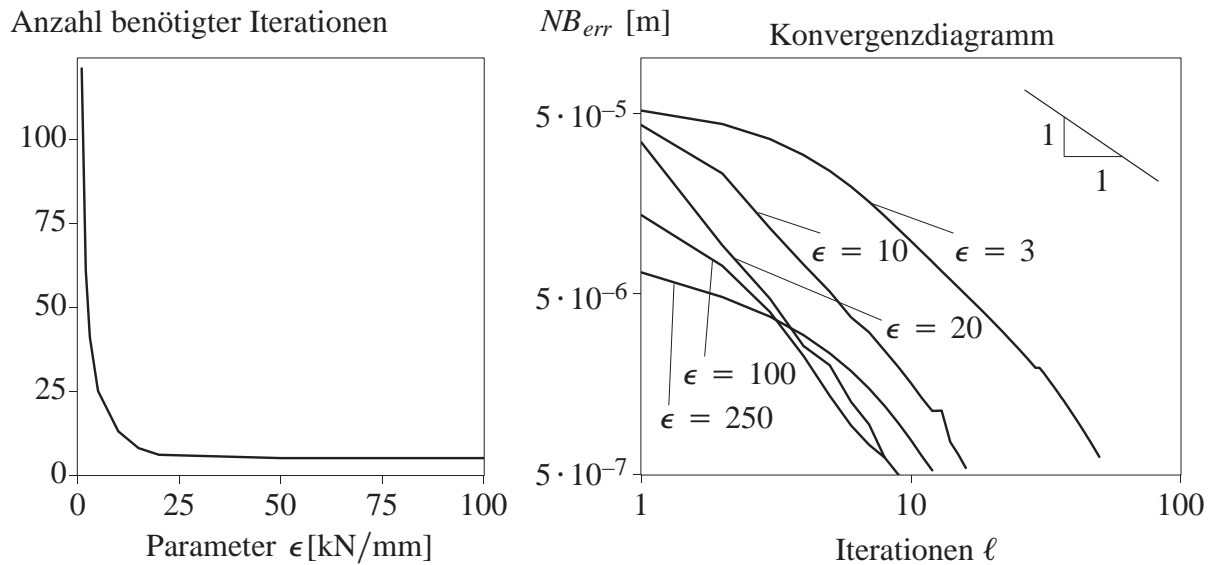


Bild 5.24: Konvergenzeigenschaften der erweiterten Lagrange–Multiplikatoren–Methode

Das linke Diagramm zeigt, dass die Anzahl benötigter Iterationen tatsächlich vom Parameter ϵ abhängt. Für das betrachtete Beispiel nimmt die Anzahl notwendiger Nebenbedingungsiterationen bis $\epsilon \approx 25 \text{ kN/mm}$ sehr schnell auf 5 Iterationen ab, stagniert dann jedoch bei weiterer Steigerung von ϵ . Am Konvergenzdiagramm (rechts) erkennt man, dass die erwartete lineare Konvergenz der "update"-Vorschrift (5.37) erreicht wird. Je größer der Parameter ϵ , desto kleiner ist der anfängliche Fehler, dafür wird die optimale Konvergenzrate zunehmend später erreicht.

Im Kontext des hierarchischen Zweiskalenmodells ist zusätzlich zu beachten, dass die, wegen der Approximation (5.39) notwendigen, beschleunigenden Maßnahmen für die Gleichgewichtsiteration i umso wirkungsvoller sind, je kleiner der Parameter ϵ ist. Insgesamt empfiehlt es sich daher, ϵ nicht "sinnlos" groß zu wählen. Für dieses Beispiel ist es sinnvoll, ϵ im Bereich zwischen 15 kN/mm und 25 kN/mm zu wählen.

Mit der erweiterten Lagrange–Methode kann dieselbe Genauigkeit wie mit der "reinen" Lagrange–Methode erreicht werden. Die Konvergenzordnung der Nebenbedingungsiteration ist jedoch nur linear. Schon für dieses kleine Beispiel mit nur einem Kopplungsrand wurden mindestens 5 Nebenbedingungsiterationen benötigt. Das weist darauf hin, dass in vielen Fällen die "reine" Lagrange–Multiplikatoren–Methode trotz der zusätzlichen Freiheitsgrade die effizientere Variante darstellt.

5.4 Fazit

Das Kapitel gab einen Überblick über unterschiedliche Nebenbedingungen für die feinskaligen Verschiebungen im Zusammenhang mit der Annahme eines lokalen Trägers.

Es zeigte sich, dass die Nullrandbedingungen (stark oder schwach) im Kontext inelastischen, entfestigenden Materialverhaltens zu recht ungenauen Lösungen führen, während die Lösungen

bei Verwendung der Übergangsbedingung $[\mathbf{u}'] = \mathbf{0}$ nahezu exakt sein können. Zur Realisierung dieser Übergangsbedingung wurden drei Möglichkeiten vorgestellt.

Die Methode der Lagrange–Multiplikatoren bringt die Nebenbedingung mit Hilfe einer zusätzlichen Variablen in die Formulierung ein. Bei der Strafterm– und der erweiterten Lagrange–Methode wird die Nebenbedingung ohne zusätzliche Freiheitsgrade verwirklicht, dafür sind bei der erweiterten Lagrange–Methode zusätzliche Iterationen erforderlich. Die Nebenbedingungsterme der Strafterm– und der erweiterten Lagrange–Methode können im Kontext des hierarchischen Zweiskalenmodells nicht konsistent linearisiert werden, da sonst die Lokalität der Feinskalenprobleme verloren geht. In diesem Zusammenhang wurde eine viel versprechende extrapolationsbasierte Beschleunigungsmaßnahme eingeführt und getestet.

Für eine differenzierte Bewertung der vorgestellten Nebenbedingungen sind systematische, vergleichende Untersuchungen notwendig, die im folgenden Kapitel durchgeführt werden. Hierbei wird eine quantifizierende Genauigkeitsanalyse des Zweiskalenmodells für die unterschiedlichen Nebenbedingungen vorgenommen. Darüber hinaus ist die Effizienz des Zweiskalenmodells von großem Interesse. Deshalb werden die jeweiligen Nebenbedingungen anhand von Vergleichen der Rechenzeit bezüglich ihrer Effizienzeigenschaften bewertet.

6 Untersuchung der Nebenbedingungen

Die im vorigen Kapitel eingeführten Nebenbedingungen zur Ermöglichung eines lokalen Trägers für die feinskaligen Verschiebungen \mathbf{u}' werden in den folgenden Abschnitten 6.1 bis 6.3 anhand numerischer Experimente systematisch analysiert. Im Vordergrund des Interesses stehen hierbei Genauigkeit, Effizienz und Robustheit der Zweiskalenmethode. Die Ergebnisse dieser vergleichenden Untersuchungen werden in Abschnitt 6.4 zusammengefasst.

6.1 Ausbreitung von Lokalisierungsbereichen

Die Beispiele des letzten Kapitels haben bereits erkennen lassen, dass das Ausbreiten einer Lokalisierungszone über Grobkalenelementränder hinweg ein Problem für manche der vorgestellten Nebenbedingungen darstellt. An einfachen numerischen Versuchen – mit jeweils nur einem Kopplungsrand – sollen die Nebenbedingungen deshalb gezielt auf die Fähigkeit getestet werden, eine senkrecht, parallel oder schräg über den Kopplungsrand wachsende Lokalisierung wiedergeben zu können. Als Referenz wird jeweils die Feinskalenlösung herangezogen. Für die Feinskalenberechnung werden die Variablen so fein aufgelöst wie die feinskaligen Variablen der Zweiskalenberechnung.

6.1.1 Versagenszone senkrecht zum Grobkalenelementrand

Der erste Versuch ist mit dem Beispiel aus Abschnitt 5.3.1 identisch. Hierbei handelt es sich um eine Probe aus einem homogenen Reibungsmaterial mit einer geschwächten Schicht in der Mitte, siehe Bild 6.1. Die Probe wird mit zwei Grobkalenelementen diskretisiert und derart beansprucht, dass sich ein Schädigungsband senkrecht über den Kopplungsrand Γ_{12} ausbreitet. Für eine detaillierte Problembeschreibung mit Angabe der Materialparameter sei auf Abschnitt 5.3.1 verwiesen.

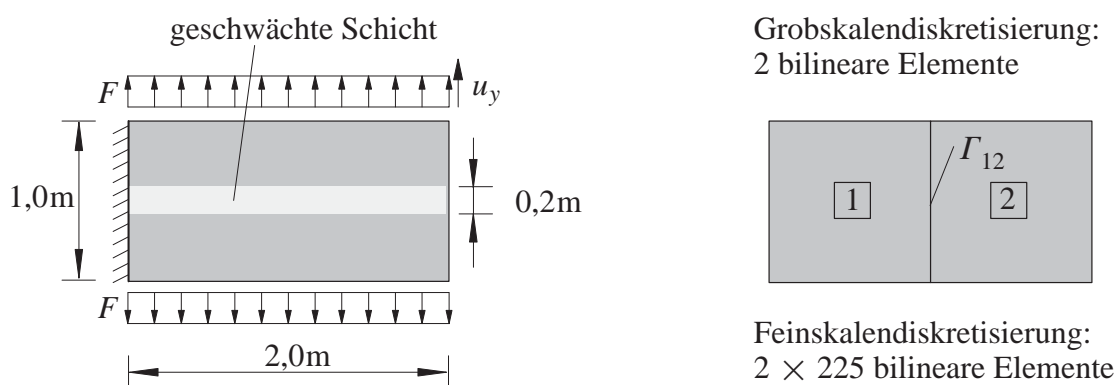


Bild 6.1: Testbeispiel 1: Geometrie und Diskretisierung (Materialdaten Tabelle 5.2)

Wie die Ergebnisse zeigen, kann das Zweiskalenmodell mit der Übergangsbedingung $[\mathbf{u}'] = \mathbf{0}$ auf Γ_{12} , punktweise realisiert durch die Strafterm-Methode ($\epsilon = 75 \text{ kN/mm}$) bzw. ebenfalls

punktweise realisiert durch die Methode der Lagrange–Multiplikatoren, die Feinskalenlösung sehr genau abbilden. Dies ist sowohl am Last–Verformungs–Verhalten (Bild 6.2 (a) und (c)) als auch an den Deformationen sowie der Schädigungsentwicklung (Bild 6.4 (a) und (c) im Vergleich zu Bild 6.3) zu erkennen. Die kleinen Sprünge in der Schädigungsverteilung auf dem Kopplungsrand sind auf die Randbedingung $\tilde{\varepsilon}_{v,n} = \mathbf{0}$ für die nichtlokale Verzerrung zurückzuführen. Sie beeinträchtigen die Genauigkeit der Zweiskalenlösungen insgesamt jedoch nur in äußerst geringem Maße. Die Ergebnisse unter Verwendung der erweiterten Lagrange–Multiplikatoren–Methode sind nicht von denen der Lagrange–Multiplikatoren–Methode zu unterscheiden, und deshalb hier nicht dargestellt.

Bei kontinuierlicher (schwacher) Formulierung der Übergangsbedingung mit quartischen Ansätzen für den Lagrange–Multiplikator treten auf dem Kopplungsrand Γ_{12} inkompatible Verschiebungen auf (Bild 6.4 (b)), da hier der Ansatzgrad für λ (5 Freiheitsgrade je Komponente) deutlich kleiner ist als der für die feinskaligen Verschiebungen auf Γ_{12} (14 Freiheitsgrade je Komponente), vergleiche Abschnitt 5.3.2. Das globale Systemverhalten wird von diesen Verschiebungsincompatibilitäten jedoch kaum gestört, wie am Last–Verformungs–Verhalten (Bild 6.2 (b)) zu erkennen ist.

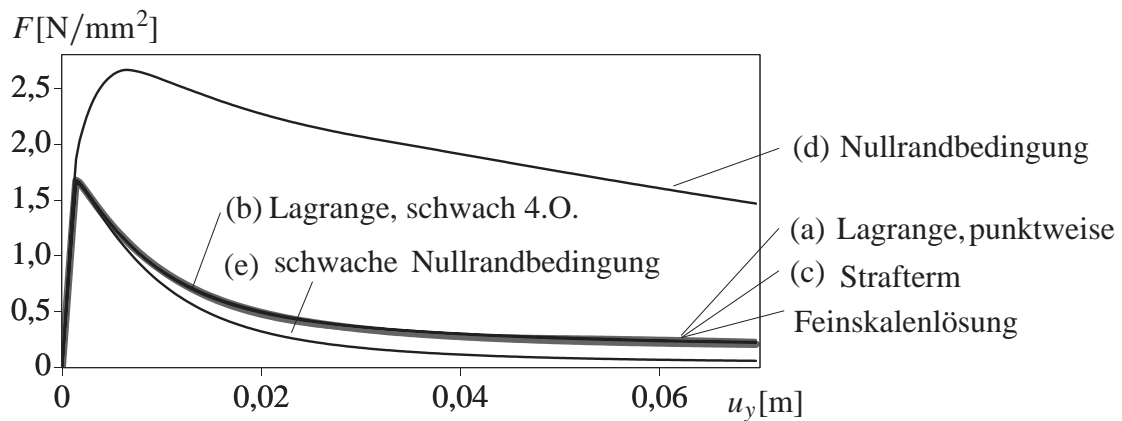


Bild 6.2: Testbeispiel 1: Last–Verformungs–Verhalten

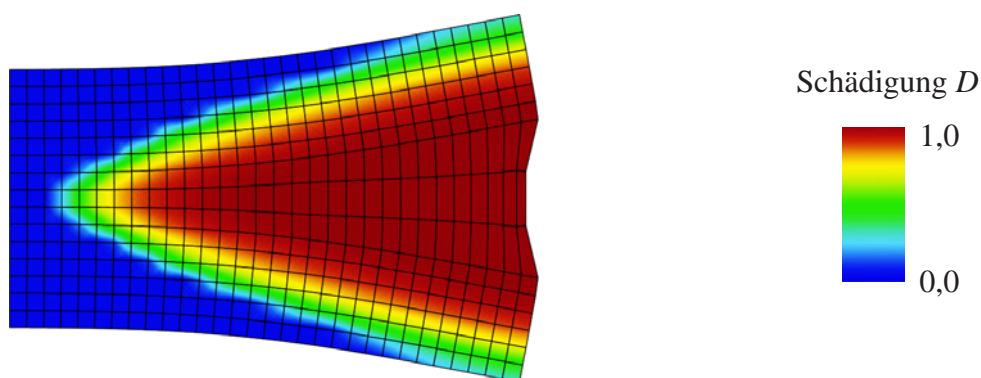


Bild 6.3: Feinskalenlösung: Deformation (Überhöhungsfaktor 3,0) und Schädigung für $u_y = 0,07\text{m}$

Die Nullrandbedingungen in starker und schwacher Form können die Feinskalenkinematik auf Γ_{12} nicht ausreichend erfassen, wodurch das Wachstum der Schädigung über Γ_{12} behindert

wird, siehe Bild 6.5 (d) und (e). Die Nullrandbedingung führt zu einer deutlichen Überschätzung der aufnehmbaren Last (Bild 6.2 (d)). Mit der schwachen Nullrandbedingung dagegen liegt die Last–Verformungs–Kurve recht nah an der Feinskalenlösung (Bild 6.2 (e)). Die Deformationsfigur (Bild 6.5 (e)) macht jedoch deutlich, dass die relativ gute Übereinstimmung dieser integralen Aussage nur zufällig ist. Sie ist auf das zu weiche Verhalten in Grobskalenelement 1 kombiniert mit zu steifem, nahezu ungeschädigtem Verhalten in 2 zurückzuführen. Dies wiederum hängt mit der auftretenden Verschiebungsinkompatibilität auf Γ_{12} zusammen.

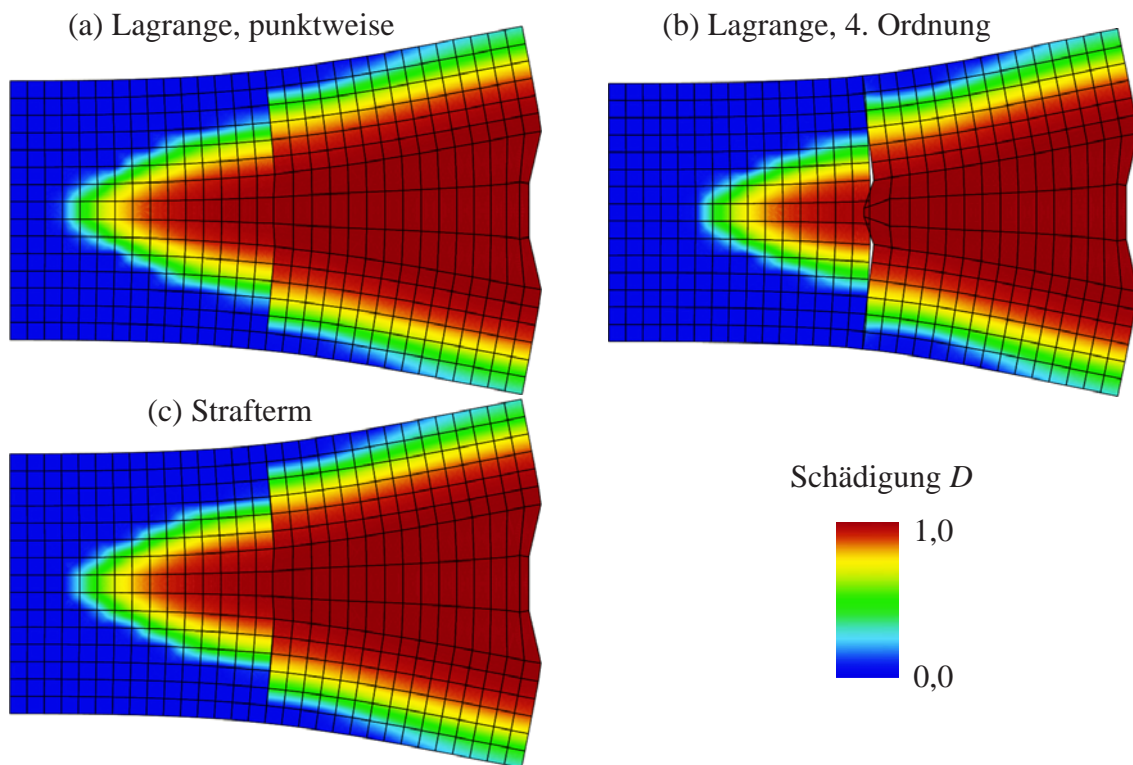


Bild 6.4: Zweiskalenmodell mit Übergangsbedingung:
Deformation (Überhöhungsfaktor 3,0) und Schädigung für $u_y = 0,07$ m

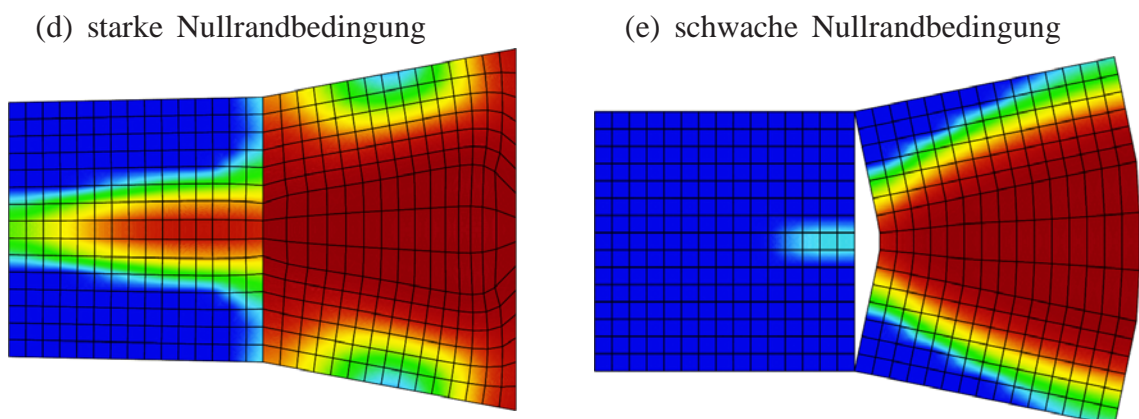


Bild 6.5: Zweiskalenmodell mit Randbedingungen:
Deformation (Überhöhungsfaktor 3,0) und Schädigung für $u_y = 0,07$ m

6.1.2 Versagenszone schräg zum Grobkalenelementrand

In einem zweiten Versuch wird eine Probe aus homogenem, ungeschwächtem Material (Tabelle 6.1) im ebenen Verzerrungszustand betrachtet, siehe Bild 6.6. Sie wird so gelagert und belastet, dass – bei gleicher Grobkalendiskretisierung wie im vorigen Beispiel – eine Schädigungszone schräg über den Rand Γ_{12} vom Grobkalenelement $\boxed{2}$ in das Element $\boxed{1}$ hineinwächst (Bild 6.8). Die feinskaligen Variablen werden durch 900 bilineare Elemente je Grobkalenelement diskretisiert.

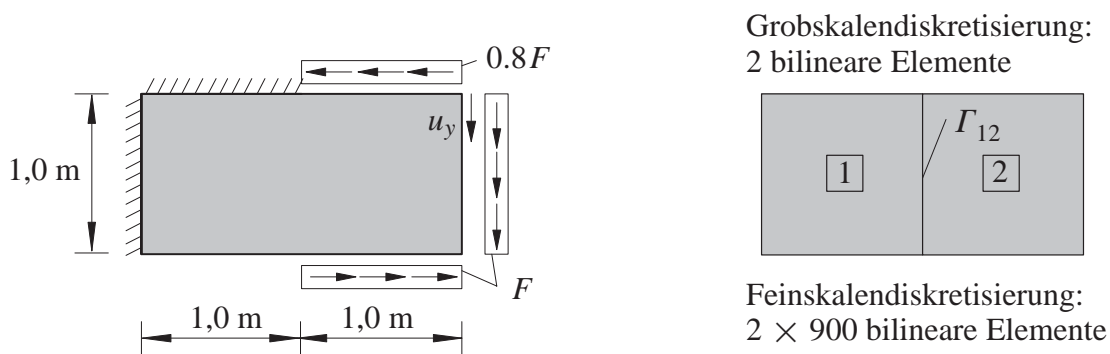


Bild 6.6: Testbeispiel 2: System und Diskretisierung, Dicke $t = 1,0 \text{ m}$

elastische Eigenschaften:	$E = 1000 \text{ N/mm}^2$	$\nu = 0,2$
äquivalente Verzerrung (de Vree):	$k = 10,0$	
Schädigungsevolution (exponentiell):	$\kappa_0 = 0,001$	$\alpha = 0,98 \quad \beta = 10$
Gradientenparameter:	$c = 0,00025 \text{ m}^2$	

Tabelle 6.1: Testbeispiel 2: Materialparameter

Für die schwache Nullrandbedingung sowie die Übergangsbedingung $[\mathbf{u}'] = \mathbf{0}$ mit quartischen Ansätzen für den Lagrange–Multiplikator entlang Γ_{12} treten im entfestigenden Bereich Konvergenzprobleme auf. Das Problem ist in beiden Fällen das Auftreten unphysikalischer Deformationen entlang Γ_{12} im Bereich der Schädigung, siehe Bild 6.9 (e) und Bild 6.10 (b). Diese können wegen der unzureichenden Kopplung mit der Nachbarschaft entstehen, wenn die Tragfähigkeit des Materials im Bereich der Kopplungsränder nahezu erschöpft ist. Für die schwache Nullrandbedingung ist dies ein unvermeidliches Problem, siehe Abschnitt 5.2.2. Für die Lagrange–Methode hingegen ist hier der Ansatzgrad von 5 Freiheitsgraden je Komponente für den Lagrange–Multiplikator λ , verglichen mit den 29 Verschiebungsfreiheitsgraden \mathbf{d}' je Komponente auf Γ_{12} , zu niedrig.

Die Last–Verformungs–Kurve unter der starken und schwachen Nullrandbedingung liegt weit oberhalb der Feinskalenlösung, siehe Bild 6.7 (d) und (e). Beide Randbedingungen verhindern in diesem Beispiel die Ausbreitung der Schädigung von Element $\boxed{2}$ nach $\boxed{1}$ vollständig. Das

führt zu einer falschen Vorhersage des Versagensverhaltens, siehe Bild 6.9 im Vergleich zu Bild 6.8.

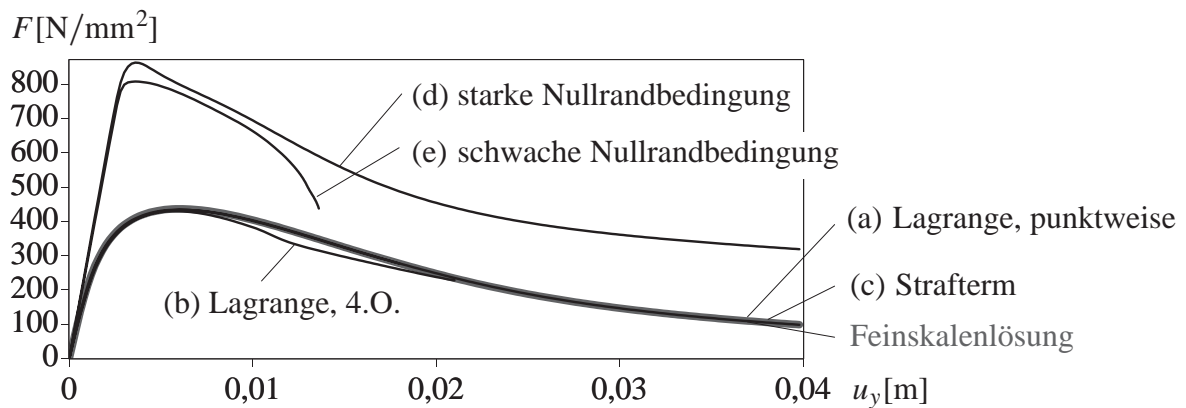


Bild 6.7: Testbeispiel 2: Last-Verformungs-Verhalten

Die Übergangsbedingung mit der Strafterm-Methode ($\epsilon = 100\text{kN/mm}$) und mit punktweiser Lagrange-Multiplikatoren-Methode führt, wie in den vorigen Beispielen, auf sehr genaue Ergebnisse, siehe Bild 6.7 (a) und (c), sowie Bild 6.10 (a) und (c) im Vergleich zu Bild 6.8.

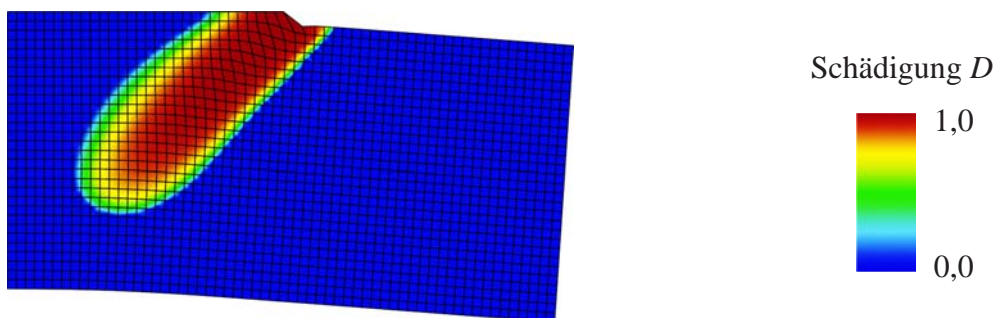


Bild 6.8: Feinskalenlösung: Deformation (Überhöhungsfaktor 10,0) und Schädigung für $u_y = 0,012$ m

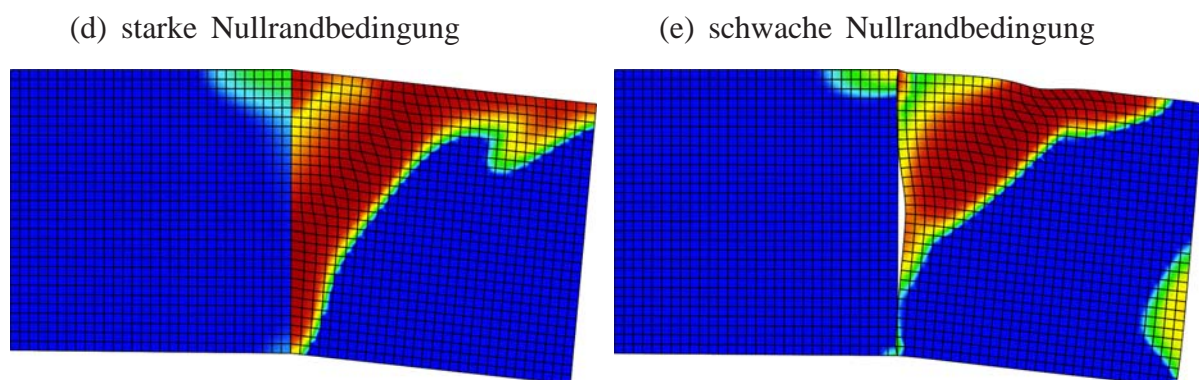


Bild 6.9: Zweiskalenmodell mit Randbedingungen: Deformation (Überhöhungsfaktor 10,0) und Schädigung für $u_y = 0,012$ m

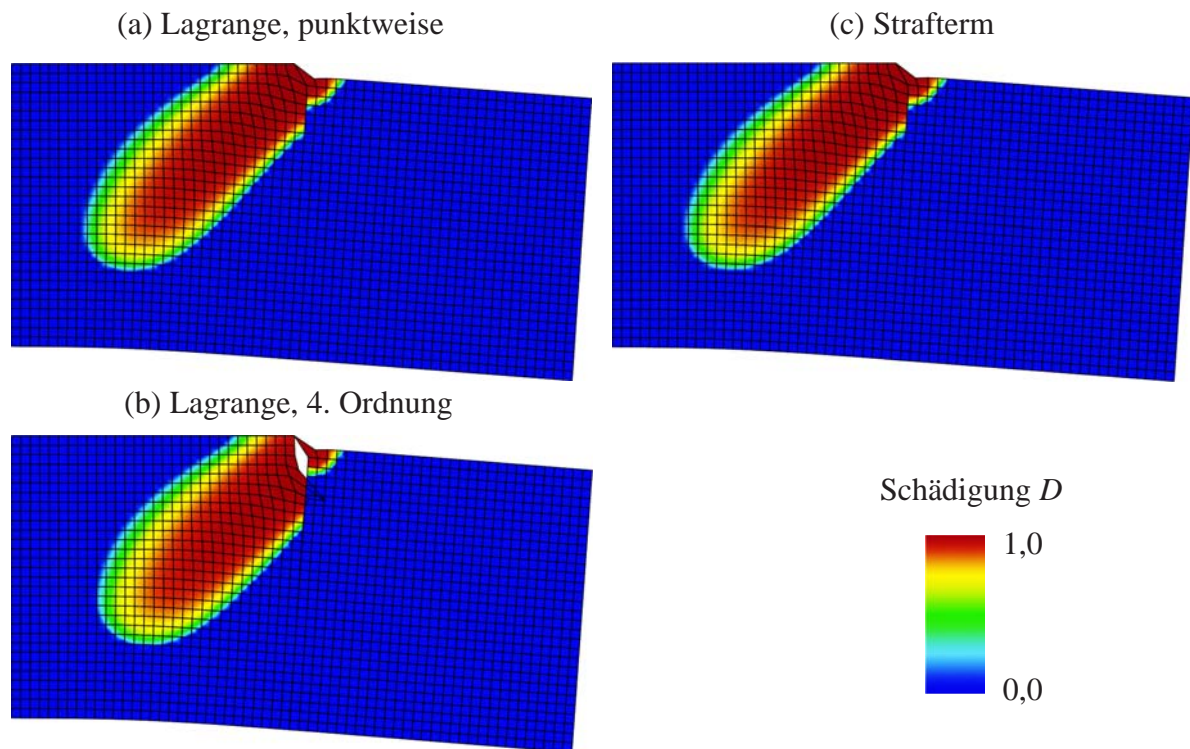


Bild 6.10: Zweiskalenmodell mit Übergangsbedingung:
Deformation (Überhöhungsfaktor 10,0) und Schädigung für $u_y = 0,012$ m

6.1.3 Versagenszone parallel zum Grobkalenelementrand

Bei Regularisierung durch Gradientenerweiterung sind, außer den Nebenbedingungen an die feinskaligen Verschiebungen \mathbf{u}' , auch Nebenbedingungen an die nichtlokale Verzerrung $\tilde{\varepsilon}_v$ infolge des lokalen Trägers der feinskaligen Variablen zu stellen. Der Frage nach Nebenbedingungen für $\tilde{\varepsilon}_v$ wurde in dieser Arbeit kaum Beachtung geschenkt, da sie für die grundlegende Konzeption eines hierarchischen Mehrskalensmodells nicht von Bedeutung ist, sondern eher ein anwendungsspezifisches Problem darstellt. Der Einfachheit halber wird hier die homogene Randbedingung $\tilde{\varepsilon}_{v,n} = \mathbf{0}$ (Gleichung (2.48)) verwendet, siehe Abschnitt 4.3.

An den Schädigungsverläufen der vorigen Beispiele ist zu erkennen, dass diese Randbedingung auch bei punktwiser Erfüllung der Übergangsbedingung mit der Lagrange-Methode zu geringen Abweichungen der Zweiskalenlösung von der Feinskalenlösung führen kann, siehe Bild 6.4 (a) bis (c) im Vergleich zu Bild 6.3 und Bild 6.10 (a) und (c) im Vergleich zu Bild 6.8, die jedoch die Genauigkeit der Zweiskalenlösung nicht weiter beeinträchtigen.

Für manche Problemstellungen verursacht diese einfache Annahme jedoch deutlichere Ungenauigkeiten. Dies ist dann der Fall, wenn sich Lokalisierungen parallel entlang einer Grobkalenelementkante entwickeln oder wenn die Grobkalenelementabmessungen deutlich kleiner als die Breite des Lokalisierungsbands sind. Dieses Problem soll an einem Beispiel veranschaulicht werden. Dafür wird die Probe der vorigen Abschnitte (ungeschwächtes Material, siehe Tabelle 5.2, ebener Verzerrungszustand) durch die in Bild 6.11 dargestellte Schubbeanspruchung belastet.

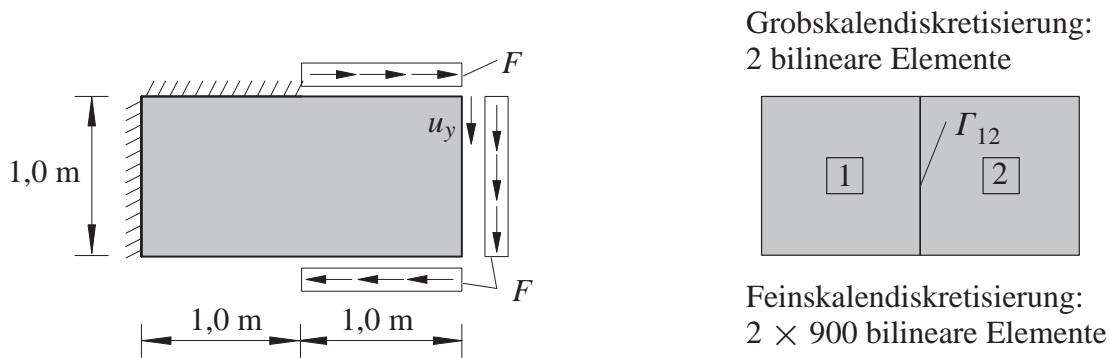


Bild 6.11: Testbeispiel 3: System und Diskretisierung, Dicke $t = 1,0$ m

Selbst bei punktwiser Erfüllung der Übergangsbedingung $[\mathbf{u}'] = \mathbf{0}$ mit der Lagrange-Methode kann das Zweiskalenmodell die tatsächliche Schädigungsverteilung und Deformation, aufgrund der mangelnden Ausbreitung der nichtlokalen Verzerrung über Γ_{12} , nur unzureichend erfassen, siehe Bild 6.12. Die *lokalen* Verzerrungen auf dem Kopplungsrand Γ_{12} reichen hier nicht aus, um den Rissfortschritt in die richtige Richtung zu treiben. Der tatsächliche, leicht gekrümmte Rissverlauf kann deshalb nicht wiedergegeben werden.

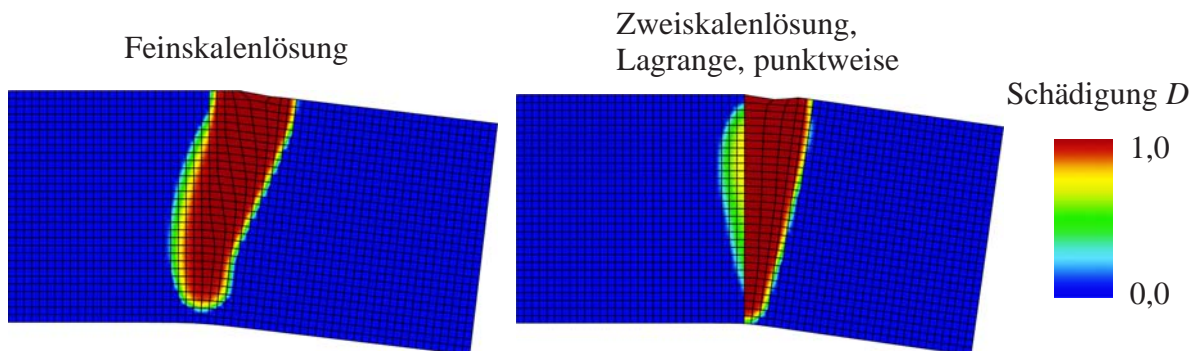


Bild 6.12: Deformation und Schädigung für $u_y = 0,14$ m

Dadurch dehnt sich die Lokalisierungszone der Zweiskalenlösung über einen zu kleinen Bereich aus, so dass die Traglast und die Duktilität der Probe unterschätzt werden, siehe Bild 6.13.

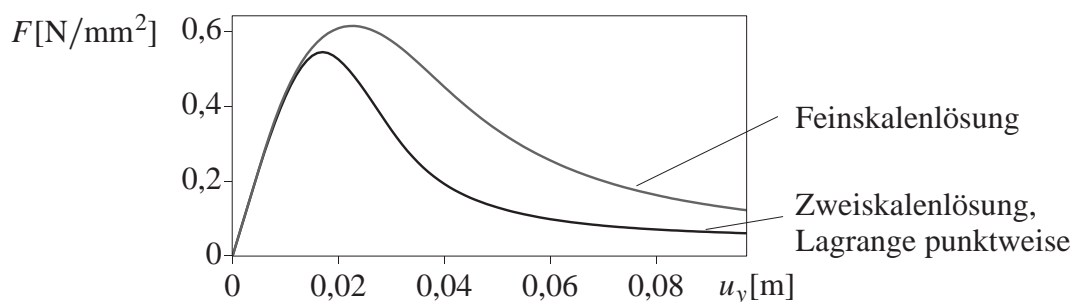


Bild 6.13: Testbeispiel 3: Last-Verformungs-Verhalten

Es kann daher für Problemstellungen mit Lokalisierungsbereichen, die sich parallel entlang Grobkalenelementrändern ausbreiten bei Verwendung einer gradientenerweiterten Schädigungsformulierung sinnvoll sein, auch für die nichtlokale Verzerrung genauere Nebenbedingungen zu verwenden.

6.1.4 Zusammenfassung

Bereits für diese einfachen Testbeispiele sind die starke und schwache Nullrandbedingung ungeeignet. Der Einsatz der Übergangsbedingung $[\mathbf{u}'] = \mathbf{0}$ ist demnach im Zusammenhang mit lokalisierendem Materialversagen unumgänglich und sorgt, bei adäquaten Nebenbedingungen für die nichtlokale Verzerrung, für hohe Genauigkeit. Für Problemstellungen, bei denen sich Lokalisierungen mit einer gewissen Neigung zu den Grobkalenelementrändern ausbreiten, hat sich die einfache Randbedingung $\tilde{\varepsilon}_{\nu,n} = \mathbf{0}$ als geeignet erwiesen.

Bei Anwendung der Lagrange–Methode für die kontinuierlich formulierte Übergangsbedingung nach Gleichung (5.28) sollte der Lagrange–Multiplikator λ mit annähernd gleichviel Freiheitsgraden wie \mathbf{u}' auf den Kopplungsrändern diskretisiert werden. Anderenfalls können Verschiebungsinkompatibilitäten auf Γ_{ms} auftreten, die die Genauigkeit der Lösung beeinträchtigen und zu Divergenz führen können.

6.2 Genauigkeit und Rechenzeiterparnis

Am Beispiel einer L–förmigen Scheibe (Bild 6.14) aus homogenem Reibungsmaterial (Tabelle 6.2) soll eine quantitative Genauigkeitsanalyse der Nebenbedingungen für \mathbf{u}' durchgeführt werden und der Rechenaufwand der Zweiskalenberechnung im Vergleich zur Feinskalenberechnung gemessen werden. Diese L–förmige Scheibe wurde u.a. von Winkler (2001) experimentell untersucht. Hier wird jedoch eine Feinskalenberechnung und nicht das experimentelle Ergebnis als Referenz verwendet. Das System wird, wie in Bild 6.14 dargestellt, durch 300 bilineare Grobkalenelemente und im Zweiskalenbereich Ω' , der sich während des Belastungsprozesses ausdehnt, durch 25 bilineare Feinskalenelemente je Grobkalenelement diskretisiert.

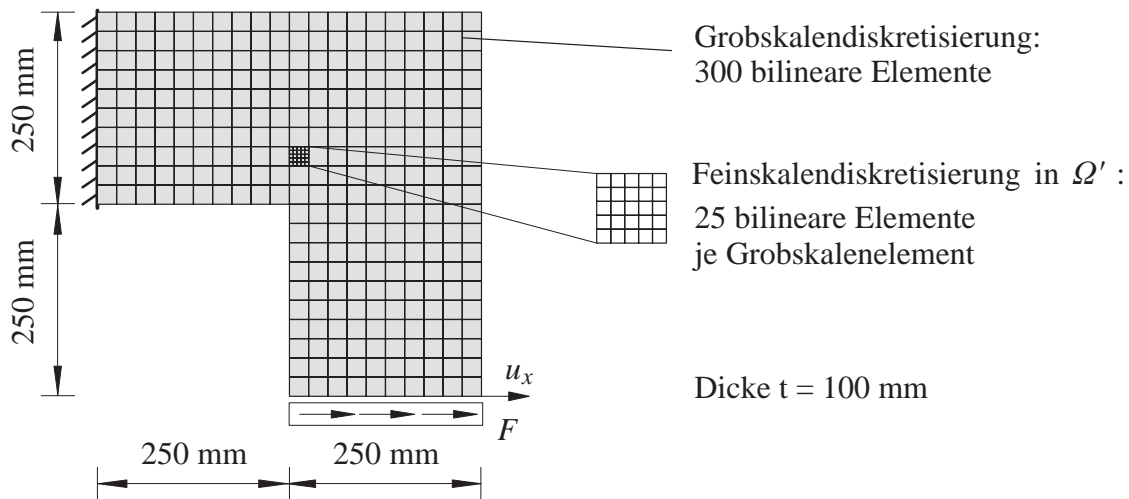


Bild 6.14: L-förmige Scheibe im ebenen Verzerrungszustand: System und Diskretisierung

Für dieses Beispiel wird die Methode des netzadaptierten Entfestigungsmoduls eingesetzt, um die Objektivität der Systemantwort zu gewährleisten. Damit kann die Auswirkung der Nebenbedingungen für \mathbf{u}' auf die Lösungsqualität beurteilt werden ohne den – im Falle der Gradientenerweiterung vorhandenen – Einfluss der Nebenbedingungen für die nichtlokale Verzerrung $\tilde{\varepsilon}_v$.

elastische Eigenschaften:	$E = 10000,0 \text{ N/mm}^2$	$\nu = 0,2$
äquivalente Verzerrung (de Vree):	$k = 10,0$	
Schädigungsevolution (mod. power law):	$\kappa_0 = 0,0004$	$\hat{\kappa}_u = 0,05$
		$\alpha = 1,0$ $\beta = 2,0$
„netzadaptierter Entfestigungsmodul“:	$h = 5,0$	$w = 10,0$

Tabelle 6.2: Materialparameter des Reibungsmaterials

Die Bilder 6.16 – 6.17 zeigen die Deformation und Schädigungsverteilung, die sich unter den verschiedenen Nebenbedingungen im Beanspruchungszustand $u_x = 1,01 \text{ mm}$ einstellen. An der Diskretisierung ist die Ausbreitung des Zweiskalenbereichs Ω' in diesem Zustand zu erkennen. Ω' erstreckt sich über die geschädigten Teilbereiche der Struktur. Offensichtlich variiert die Ausdehnung des Zweiskalengebiets für die verschiedenen Nebenbedingungen. Die entsprechende Feinskalenlösung ist in Bild 6.15 dargestellt.

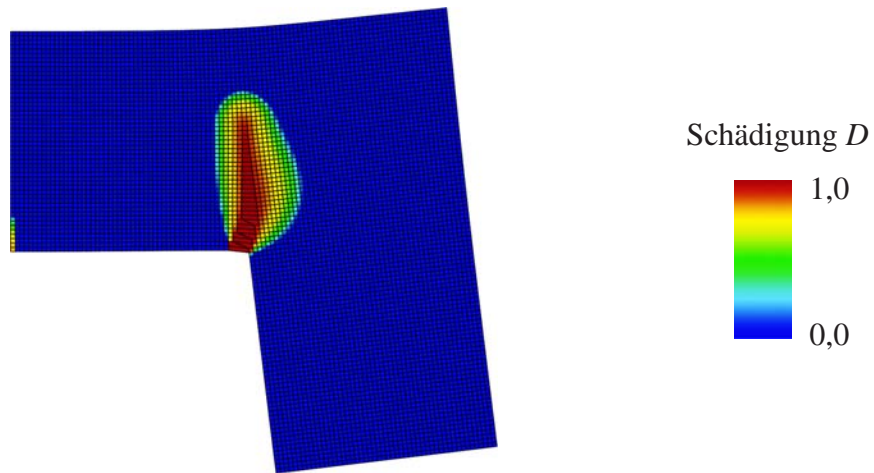


Bild 6.15: Feinskalenlösung: Deformation (Überhöhungsfaktor 50,0) und Schädigung für $u_x = 1,01\text{mm}$

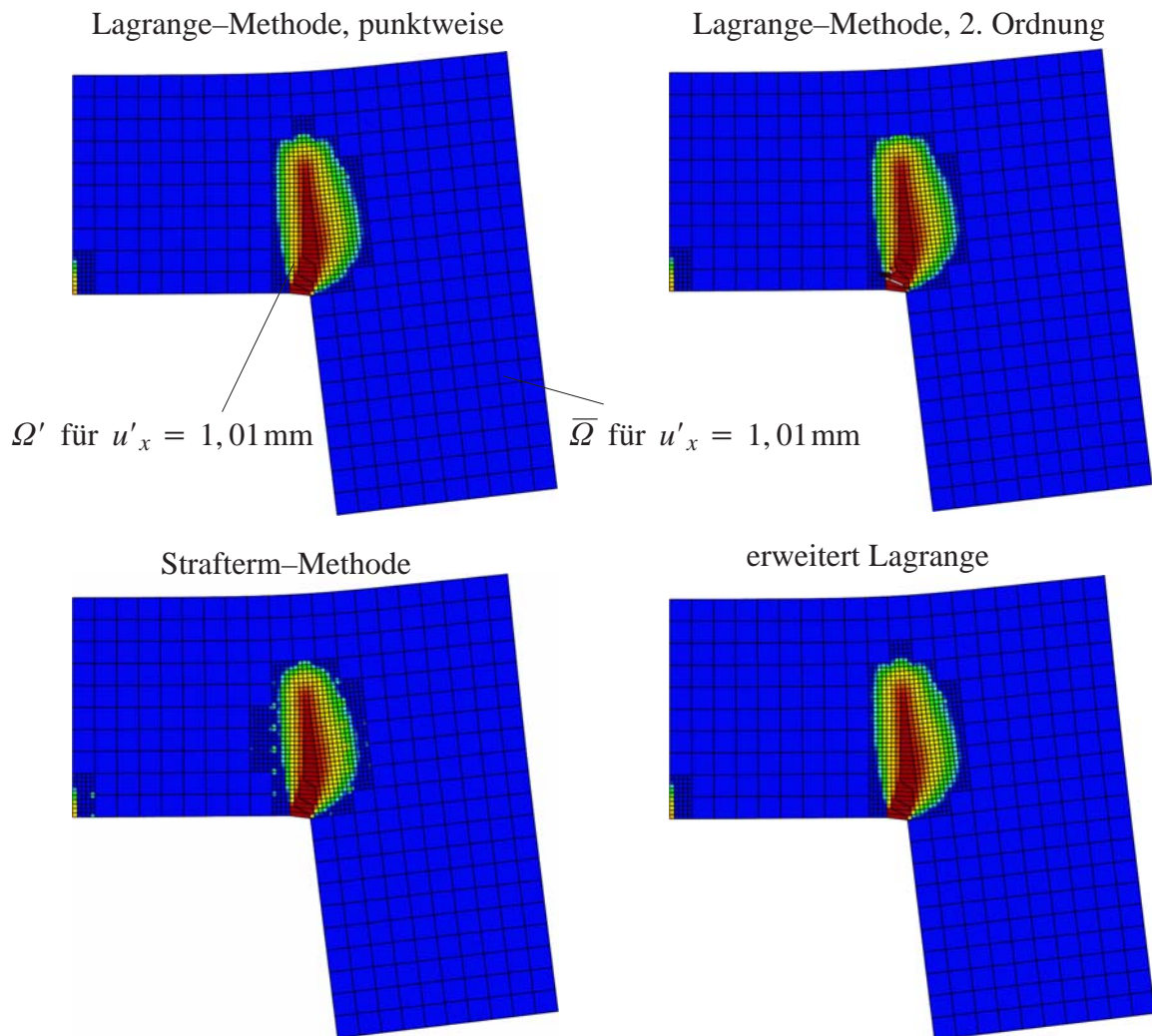


Bild 6.16: Zweiskalenmodell mit Übergangsbedingung: Deformation (Überhöhungsfaktor 50,0) und Schädigung für $u_x = 1,01\text{ mm}$

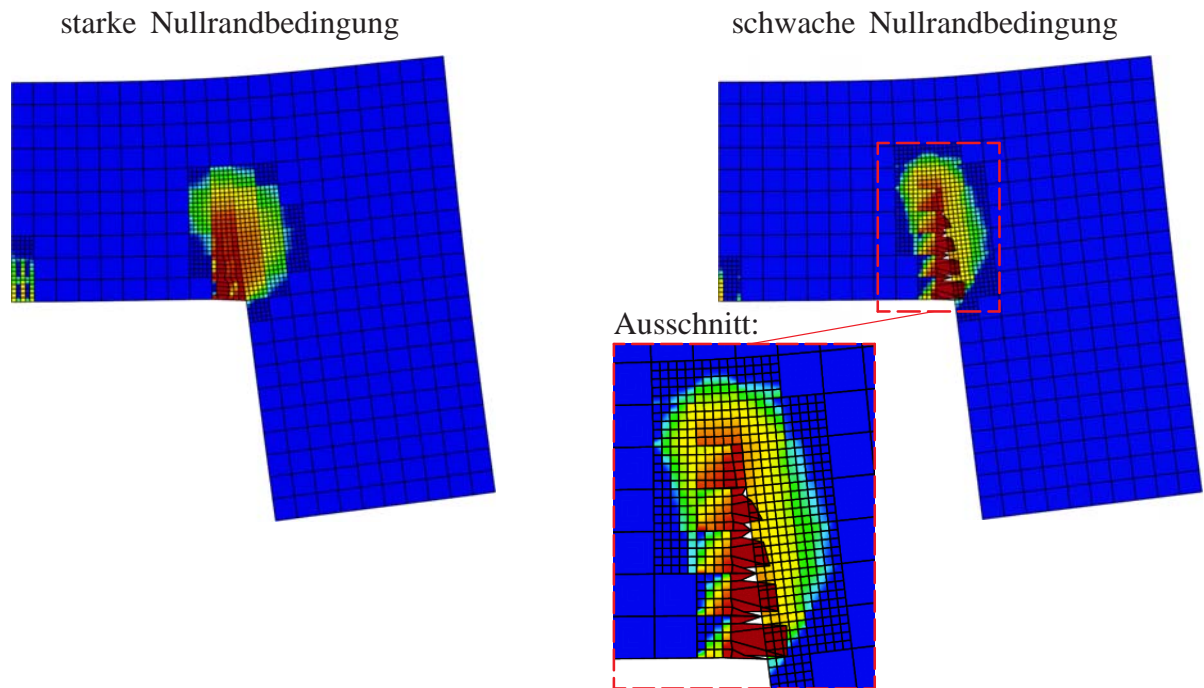


Bild 6.17: Zweiskalenmodell mit Randbedingungen:
 Deformation (Überhöhungsfaktor 50,0) und Schädigung für $u_x = 1,01 \text{ mm}$

Wie zu erwarten, stimmt die Lösung des Zweiskalenmodells mit der Übergangsbedingung $[\mathbf{u}'] = \mathbf{0}$ sehr gut mit der Feinskalenlösung überein. Diese Nebenbedingung wird vergleichend mit der Lagrange-Methode, bei quadratischen (schwache Erfüllung der Nebenbedingung) und knotenweisen (punktweise Erfüllung der Nebenbedingung) Ansätzen über die Kopplungsränder, der Strafterm-Methode ($\epsilon = 500 \text{ kN/mm}$) und der erweiterten Lagrange-Methode auferlegt.

Mit der starken und schwachen Nullrandbedingung dagegen kann weder die Deformation noch die Schädigungsverteilung genau erfasst werden. Die schwache Nullrandbedingung verursacht auch in diesem Beispiel unphysikalisch oszillierende Verschiebungen auf den Kopplungsrändern im geschädigten Bereich, siehe Bild 6.17, die im postkritischen Bereich zu Divergenz führen, siehe Bild 6.18.

Die hohe Genauigkeit des lokalen Verhaltens bei Anwendung der Übergangsbedingung und eine größere Ungenauigkeit bei Verwendung der Randbedingungen spiegeln sich auch im Last-Verformungs-Verhalten (Bild 6.18) wider.

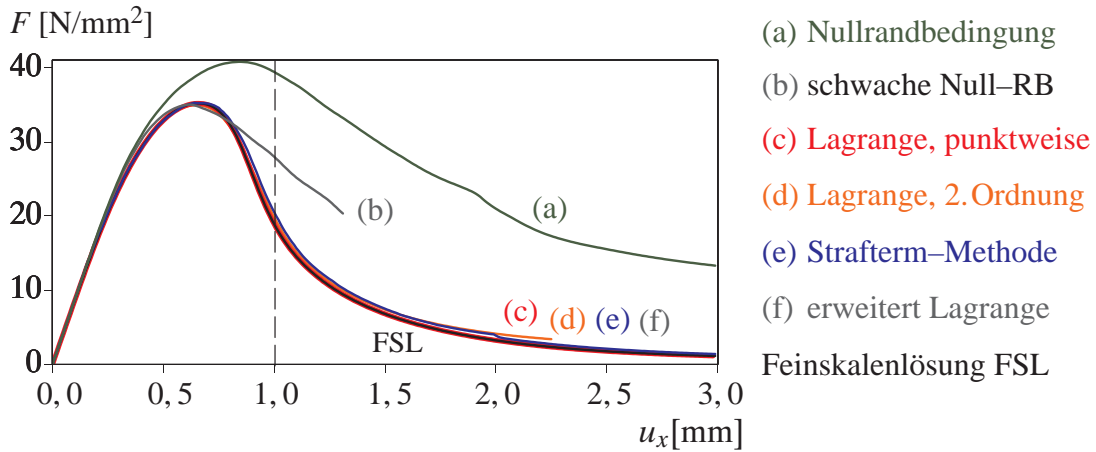


Bild 6.18: Last-Verformungs-Verhalten der L-förmigen Scheibe

Diese qualitativen Eindrücke werden quantitativ durch den durchschnittlichen L_2 -Fehler der Zweiskalenlösung \mathbf{u}^{2SL} für die Verschiebungen

$$\varnothing \|\mathbf{u}^{FSL} - \mathbf{u}^{2SL}\|_{L_2} := \frac{\int \sqrt{(\mathbf{u}^{FSL} - \mathbf{u}^{2SL})^2} dV}{\int dV}, \quad (6.1)$$

bestätigt, siehe Tabelle 6.3. Die Feinskalenlösung \mathbf{u}^{FSL} wird als Referenz für dieses Fehlermaß herangezogen.

Der durchschnittliche L_2 -Fehler der Zweiskalenlösung mit Übergangsbedingung liegt bei punktwiser Umsetzung mit der Lagrange-Methode und der erweiterten Lagrange-Methode in der Größenordnung der Genauigkeitstoleranz des residualen Verschiebungsfehlers, also vernachlässigbar klein. Diese Toleranz ist hier zu 10^{-7} mm gewählt. Bei Verwendung quadratischer Ansätze für den Lagrange-Multiplikator (4 Freiheitsgrade für \mathbf{u}' im Vergleich zu 3 Freiheitsgraden für λ je Komponente auf den Kopplungsrändern) und bei Verwendung der Strafterm-Methode mit $\epsilon = 500000$ N/mm ist der Fehler ebenfalls klein, jedoch nicht vernachlässigbar. Bei Verwendung von Randbedingungen liegt der durchschnittliche L_2 -Fehler noch eine Größenordnung höher.

Während dieses "globale" Fehlermaß für die Strafterm-Methode viermal so groß ist wie für die Lagrange-Methode mit Ansätzen 2. Ordnung, ist andererseits der maximale lokale Fehler für die Verschiebungen

$$\max. \text{ lokaler Fehler} := \max_{x \in \Omega} \left(\sqrt{(\mathbf{u}^{FSL} - \mathbf{u}^{2SL})^2} \right) \quad (6.2)$$

bei Verwendung der Lagrange–Methode mit Ansätzen 2. Ordnung siebenmal größer als bei Verwendung der Strafterm–Methode.

	durchschn. L_2 – Fehler [mm] Gleichung (6.1)	max. lokaler Fehler [mm] Gleichung (6.2)
Lagrange–Methode, punktweise	$2,30 \cdot 10^{-7}$	$5,0 \cdot 10^{-6}$
Lagrange–Methode, 2. Ordnung	$1,88 \cdot 10^{-3}$	$2,7 \cdot 10^{-1}$
Strafterm – Methode	$5,87 \cdot 10^{-3}$	$4,0 \cdot 10^{-2}$
erweiterte Lagrange–Methode	$2,70 \cdot 10^{-7}$	$5,3 \cdot 10^{-6}$
Nullrandbedingung	$6,24 \cdot 10^{-2}$	$2,8 \cdot 10^{-1}$
schwache Nullrandbedingung	$4,23 \cdot 10^{-2}$	$6,0 \cdot 10^{-1}$

Tabelle 6.3 Globale und lokale Fehlernorm für $u_x = 1,01$ mm

Das heißt, die Strafterm–Methode verursacht einen recht kleinen, gleichmäßig verteilten Fehler. Für die Lagrange–Methode mit Ansätzen 2. Ordnung hingegen ist der Fehler fast überall vernachlässigbar bis auf einen sehr kleinen Bereich in der Lokalisierungszone, siehe Bild 6.19. Man erkennt daran, dass Testfunktionen $\delta\lambda$ mit einem Ansatzgrad, der auch nur geringfügig kleiner als der der feinskaligen Verschiebungen auf den Kopplungsrändern ist, nicht ausreichen, um die Forderung $[u'] = \mathbf{0}$ exakt zu erfüllen. Die Verteilung des lokalen Fehlers ist für die punktweise Übergangsbedingung mit der Lagrange–Methode nicht dargestellt, da der Fehler in der ganzen Struktur verschwindend klein ist.

Für die starke und schwache Nullrandbedingung ist der Fehler sehr groß, insbesondere im Bereich der Lokalisierung, siehe Bild 6.19.

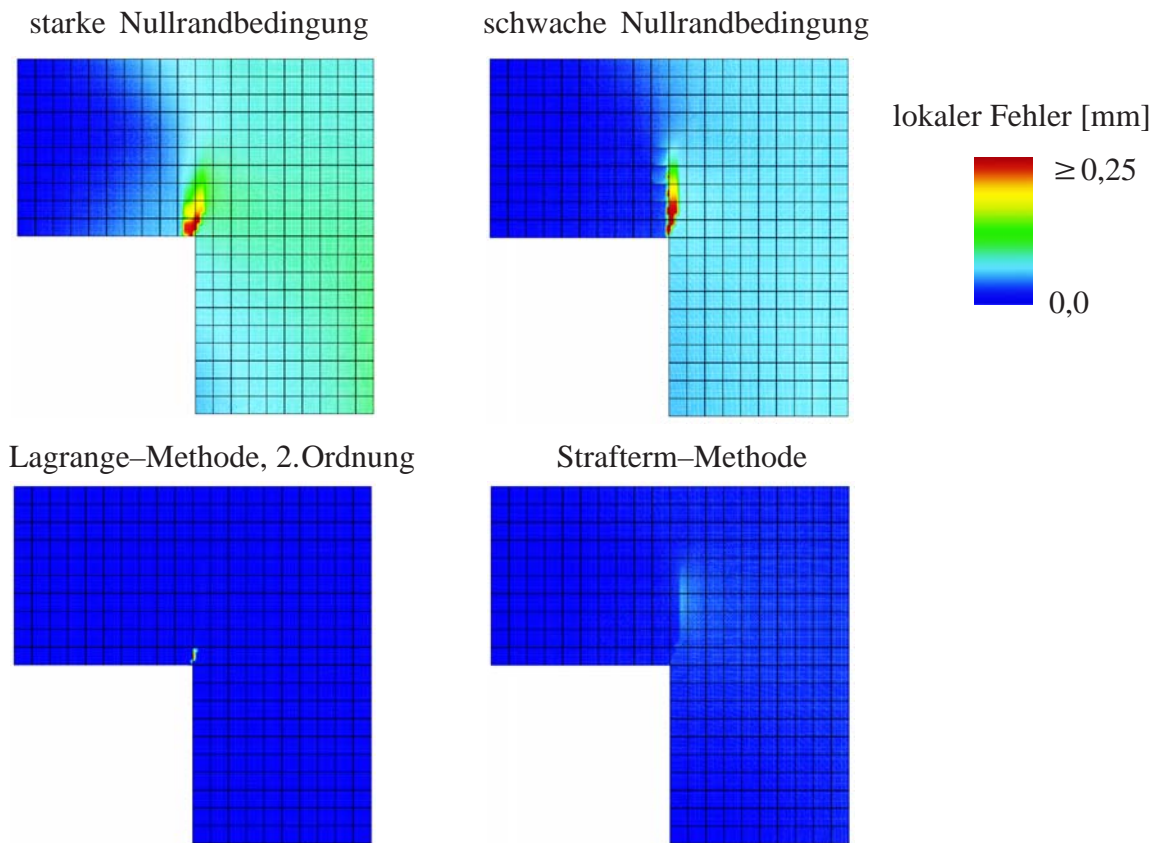


Bild 6.19: Verteilung des lokalen Fehlers für $u_x = 1,01$ mm

Anhand dieses Beispiels sollen außerdem die Nebenbedingungen bezüglich des Rechenzeitaufwands verglichen werden. Der Effizienzgewinn des Zweiskalenmodells im Vergleich zu einer Feinskalenberechnung setzt sich aus folgenden drei Anteilen zusammen:

1. Infolge der Lokalitätsannahme zerfällt das Gleichungssystem des Feinskalenproblems in kleinere, unabhängige Gleichungssysteme.
2. Diese unabhängigen Feinskalenprobleme können parallel ohne Kommunikation zwischen den Prozessoren bearbeitet – d.h. aufgestellt und gelöst – werden (siehe Algorithmus 4.1).
3. Das Zweiskalenmodell wird adaptiv nur in den Bereichen eingesetzt, in denen die Auflösung der Feinskala für die Genauigkeit der Lösung erforderlich ist.

Diesem Effizienzgewinn stehen, je nach Nebenbedingung, unterschiedliche zusätzliche Aufwendungen gegenüber, die in Tabelle 6.4 aufgelistet sind.

Nebenbedingung	zusätzlicher Aufwand
$\mathbf{u}' = \mathbf{0}$, stark	keiner
$\mathbf{u}' = \mathbf{0}$, schwach	lokale Freiheitsgrade \mathbf{d}' je Grobskalenelementrand in Ω' lokale Freiheitsgrade \mathbf{L} je Grobskalenelement in Ω'
$[\mathbf{u}'] = \mathbf{0}$ Strafterm	lokale Freiheitsgrade \mathbf{d}' je Grobskalenelementrand in Ω'
$[\mathbf{u}'] = \mathbf{0}$ Lagrange	lokale Freiheitsgrade \mathbf{d}' je Grobskalenelementrand in Ω' globale Freiheitsgrade \mathbf{L} je Kopplungsrand in Ω'
$[\mathbf{u}'] = \mathbf{0}$ erweitert Lagrange	lokale Freiheitsgrade \mathbf{d}' je Grobskalenelementrand in Ω' zusätzliche Iterationen

Tabelle 6.4 Aufwand der jeweiligen Nebenbedingungen

Für das Beispiel der L-förmigen Scheibe ist in Bild 6.20 die CPU-Zeit zur Lösung der Gleichungssysteme auf einem Prozessor im Lastschritt von $u_x = 1,0\text{mm}$ bis $u_x = 1,01\text{mm}$ (postkritischer Bereich) angegeben. Um die gesamte Zeitersparnis in die Anteile der Adaptivität und der Lokalitätsannahme aufspalten zu können, wird auch die entsprechende CPU-Zeit einer adaptiven Feinskalenberechnung gemessen (FSL, adaptiv).

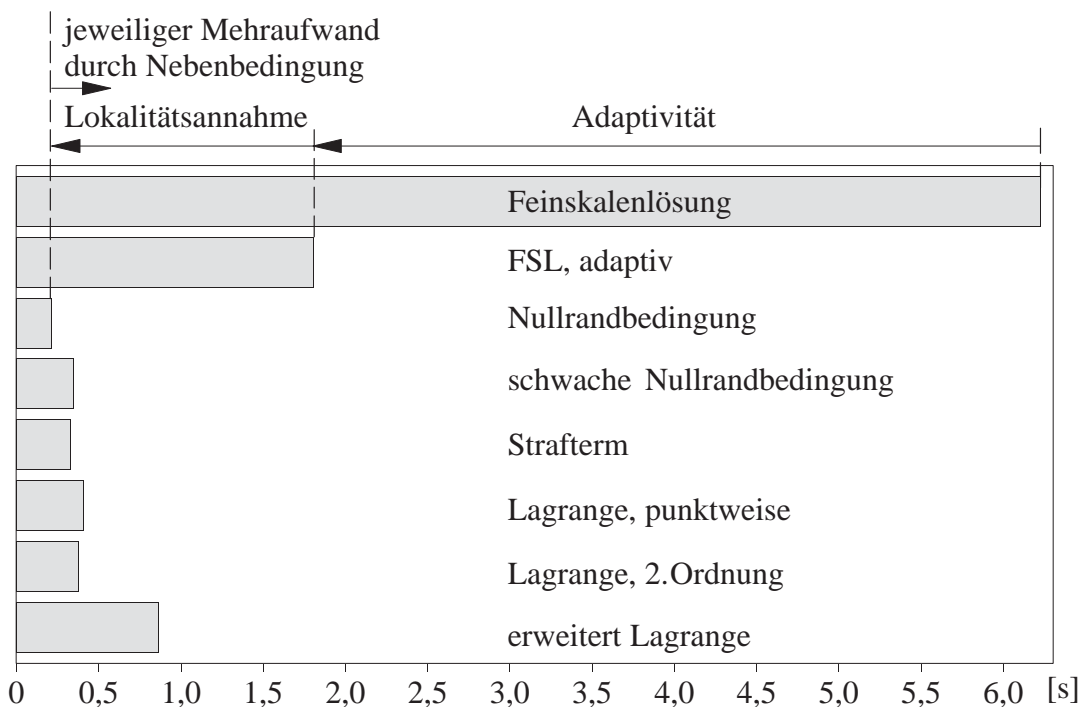


Bild 6.20: CPU-Zeit zum Lösen der Gleichungssysteme in einem Lastschritt auf einem Prozessor

Für dieses Beispiel ist die Zweiskalenlösung 2- bis 9- bzw. 9- bis 30-mal schneller als die adaptive bzw. nicht adaptive Feinskalenlösung. Dabei ist die Übergangsbedingung bei Verwendung

der erweiterten Lagrange–Methode am zeitaufwändigsten, die Nullrandbedingung am effizientesten. Die punktweise Lagrange–Methode ist bei gleicher Genauigkeit deutlich schneller als die erweiterte Lagrange–Methode. Die zusätzlichen Iterationen zur Aktualisierung des Lagrange–Parameters bei der erweiterten Lagrange–Methode nehmen beim Lösen des Gleichungssystems hier wesentlich mehr Zeit in Anspruch als die zusätzlichen Freiheitsgrade für λ der Lagrange–Methode. Interessanterweise ist die Übergangsbedingung in Verbindung mit der Strafterm–Methode bei diesem Beispiel effizienter als die schwache Nullrandbedingung und führt gleichzeitig zu wesentlich genaueren Ergebnissen. Während die schwache Nullrandbedingung die lokalen Gleichungssysteme um die Lagrange–Freiheitsgrade L vergrößert, kommt die Strafterm–Methode ohne zusätzliche Freiheitsgrade aus und benötigt hier, dank der extrapolationsbasierten beschleunigenden Maßnahmen, ebenso wenige Gleichgewichtsiterationen wie die Feinskalenlösung.

6.3 Weitere Effizienzbetrachtungen

Für Anwendungen, bei denen der Einsatz des Zweiskalenmodells auf Teilbereiche der Struktur begrenzt werden kann, sind Grob– und Feinskalendiskretisierung jeweils so zu wählen, dass der Diskretisierungsfehler in $\bar{\Omega}$ und Ω' tolerierbar ist. Zum Thema Diskretisierungsfehler wird hier auf Stein & Rüter (2004) verwiesen. Darüber hinaus müssen in Ω' die Materialkomponenten und die Versagenszone aufgelöst werden können. Wird dagegen das Zweiskalenmodell in der gesamten Struktur eingeführt, stellt sich die Frage, ob es ein optimales Verhältnis zwischen Grob– und Feinskalenelementabmessungen hinsichtlich des Rechenzeitaufwands gibt. Die Netzfeinheit der Feinskalendiskretisierung ist dabei durch den Diskretisierungsfehler festgelegt. Die Existenz eines solchen optimalen Diskretisierungsverhältnisses ist zu vermuten, da die beiden Extremfälle ”ein Grobskalenelement für die ganze Struktur” und ”ein Grobskalenelement je Feinskalenelement” jeweils mindestens so rechenzeitaufwändig wie die Feinskalenberechnung sind. Die Frage, in welcher Größenordnung sich das optimale Diskretisierungsverhältnis bewegt, soll in Abschnitt 6.3.1 anhand eines Beispiels untersucht werden. Für dasselbe Beispiel wird die mögliche Beschleunigung der Rechenzeit durch Nutzung mehrerer Prozessoren (Parallelisierung) in Abschnitt 6.3.2 analysiert.

Betrachtet wird eine gekerbte Probe, siehe Bild 6.21, aus homogenem Reibungsmaterial (Tabelle 6.5), die unter der angegebenen Beanspruchung die in Bild 6.22 dargestellte Schädigungsverteilung entwickelt. In Bild 6.22 sind die Feinskalenlösung und exemplarisch die Lösung des Zweiskalenmodells bei punktweiser Erfüllung der Übergangsbedingung mittels Lagrange–Multiplikatoren–Methode angegeben.

elastische Eigenschaften:	$E = 18000 \text{ N/mm}^2$	$\nu = 0,2$
äquivalente Verzerrung (de Vree):	$k = 10,0$	
Schädigungsevolution (mod. power law):	$\kappa_0 = 0,00021$	$\hat{\kappa}_u = 0,035$
		$\alpha = 1,0 \quad \beta = 2,0$
”netzadaptierter Entfestigungsmodul“:	$h = 1,25$	$w = 13,75$

Tabelle 6.5: Materialparameter des Reibungsmaterials

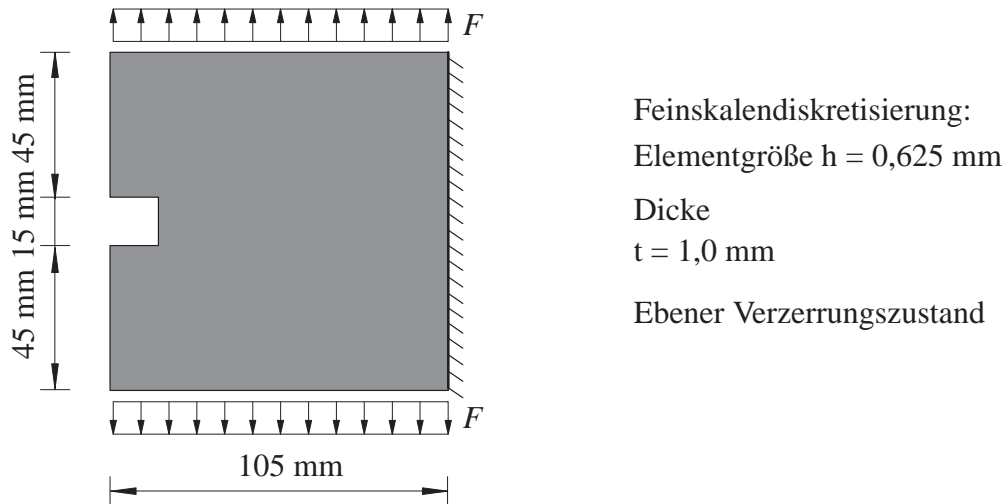


Bild 6.21: Gekerbte Probe: System und Diskretisierung

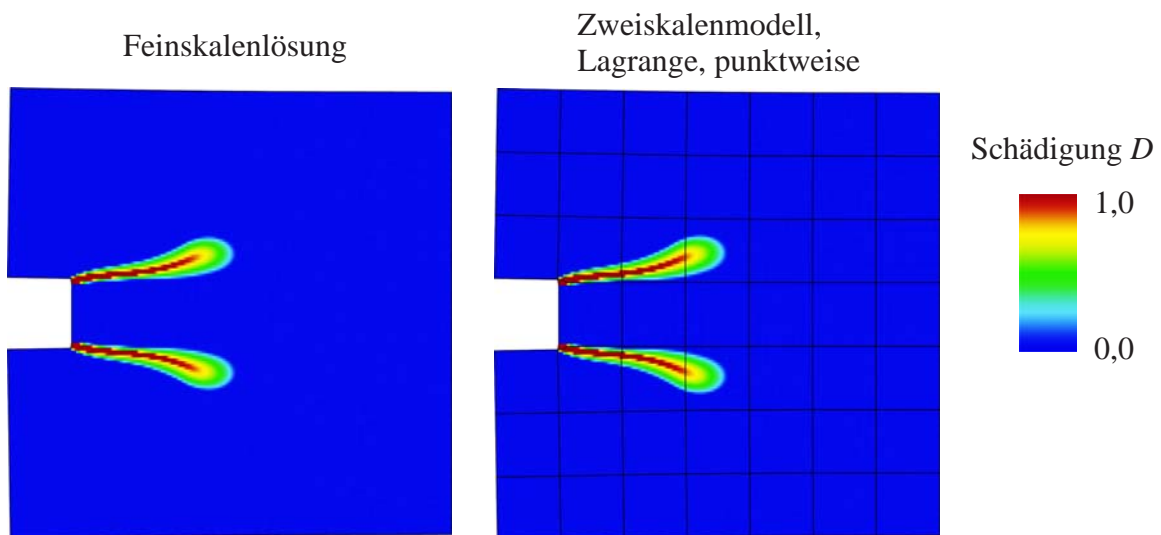


Bild 6.22: Deformation (Überhöhungsfaktor 50,0) und Schädigung für $u_y = 0,02 \text{ mm}$

6.3.1 Optimales Diskretisierungsverhältnis

Um für dieses Beispiel das optimale Verhältnis zwischen der Anzahl an Fein- und Grobkalenelementen zu bestimmen, wird – obwohl hier eigentlich nicht erforderlich – das Zweiskalengebiet in der gesamten Struktur eingeführt. Die feinskaligen Verschiebungen werden durch 27648 bilineare Elemente der Abmessung $h = 0,625$ mm diskretisiert. Die Größe der Grobkalenelemente wird variiert. Für die in Tabelle 6.6 angegebenen Verhältnisse zwischen Grob- und Feinskalendiskretisierung wird die CPU-Zeit zur Lösung der Gleichungssysteme im jeweils ersten Iterationsschritt eines Lastschritts im entfestigenden Beanspruchungsbereich auf einem Prozessor bestimmt. Die entsprechend gemessenen Zeiten sind für die unterschiedlichen Nebenbedingungen in Bild 6.23 aufgetragen.

Anzahl an Feinskalenelementen je Grobkalenelement	4	9	16	36	64	144	576
Anzahl an Grobkalenelementen	6912	3072	1728	768	432	192	48
Elementabmessung der Grobkalenelemente [mm]	1,25	1,875	2,5	3,75	5	7,5	15

Tabelle 6.6 Verhältnisse zwischen Grob- und Feinskalenelementanzahlen

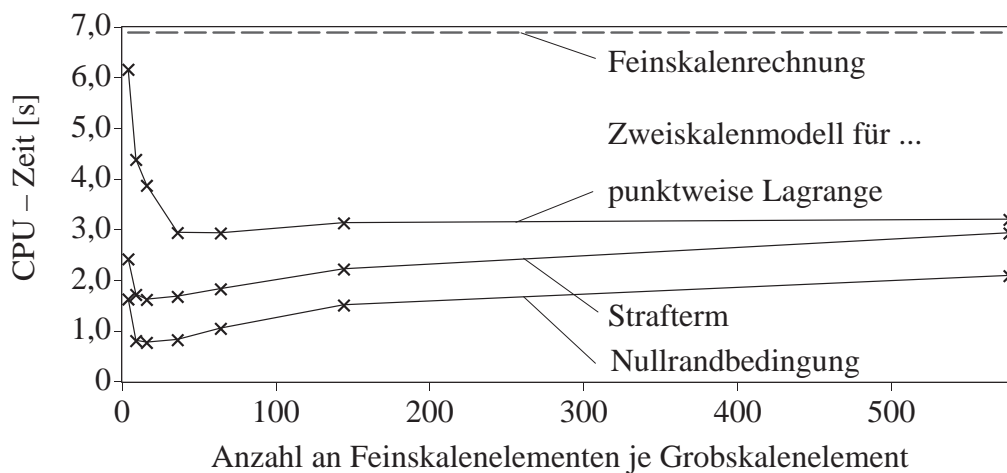


Bild 6.23: CPU-Zeit zur Lösung der Gleichungssysteme in einem Iterationsschritt

Die Untersuchung bleibt, der Übersichtlichkeit halber, auf die Nullrandbedingung sowie die Übergangsbedingung mit punktweiser Lagrange-Multiplikatoren- und Strafterm-Methode ($\epsilon = 500000$ N/mm) begrenzt. In Bild 6.23 ist zum Vergleich auch die entsprechende, benötigte Zeit der Feinskalenberechnung von 6,9 s eingetragen.

Neben der Zeitersparnis der Zweiskalenmethode gegenüber der Feinskalenberechnung zeigt sich, dass es tatsächlich ein optimales Verhältnis zwischen Grob- und Feinskalendiskretisierung hinsichtlich der Rechenzeit gibt. Dieses optimale Verhältnis hängt neben der Problemstellung

und der Nebenbedingung von vielerlei Einflüssen ab, unter anderem von der Implementierung, der Programmiersprache, dem Compiler, dem Gleichungslösungsalgorithmus sowie der Rechnerplattform.

Die benötigte Zeit zur Lösung der Gleichungssysteme in einem Iterationsschritt setzt sich aus der Zeit zur Lösung des globalen, erweiterten Gleichungssystems (4.28) und den Zeiten zur Lösung der lokalen Feinskalenprobleme (Gleichungen (4.26) und (4.27)) in den einzelnen Grobskalenelementen in Ω' zusammen. Für eine genauere Betrachtung wird die Gesamtzeit (Bild 6.23) für die einzelnen Nebenbedingungen nachstehend jeweils in diese beiden Anteile aufgespalten.

- **Nullrandbedingung**

Für die Nullrandbedingung nimmt die Anzahl der Grobskalenfreiheitsgrade \bar{d} mit zunehmendem Verhältnis zwischen Fein- und Grobskalenelementen ab. Dadurch nimmt, wie in Bild 6.24 (b) zu erkennen, die CPU-Zeit zur Lösung des globalen Gleichungssystems (4.28) ab. Gleichzeitig steigt mit der Anzahl an Feinskalenelementen je Grobskalenelement die Zeit zum Lösen der lokalen Gleichungen (4.26) und (4.27) (siehe Bild 6.24 (a)). Zwar nimmt die Zahl der Grobskalenelemente ab, in denen jeweils das Feinskalenproblem zu lösen ist, doch überwiegt die Tatsache, dass die Anzahl der Freiheitsgrade der lokalen Gleichungssysteme wächst. Darüber hinaus wächst die Gesamtanzahl an Feinskalenfreiheitsgraden d' in Ω mit dem Verhältnis zwischen Fein- und Grobskalenelementen, denn die Anzahl der Freiheitsgrade d' , die auf einem Grobskalenelementrand liegen und aus den lokalen Gleichungssystemen eliminiert werden, nimmt ab.

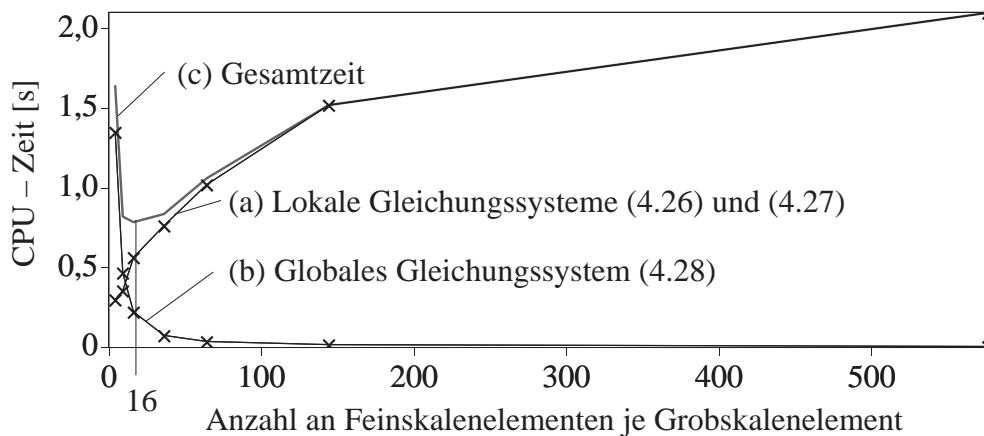


Bild 6.24: Nullrandbedingung: Aufspaltung der CPU-Zeit in Anteile zur Lösung des globalen Gleichungssystems und der lokalen Gleichungssysteme

Diese gegenläufigen Einflüsse führen dazu, dass es ein optimales Verhältnis zwischen Fein- und Grobskalendiskretisierung gibt, für das die Gesamtzeit minimal wird. Dieses Optimum wird in diesem Beispiel bei 16 Feinskalenelementen je Grobskalenelement erreicht, siehe Bild 6.24 (c).

- **Übergangsbedingung, Strafterm**

Dieselben Einflüsse treten auch für die mit der Strafterm–Methode umgesetzte Übergangsbedingung auf. Der einzige Unterschied besteht darin, dass die Anzahl der Feinskalenfreiheitsgrade \mathbf{d}' je Grobkalenelement größer als bei der Nullrandbedingung ist, da die auf den Kopp­lungs­rändern liegenden Freiheitsgrade \mathbf{d}' nicht zu Null gesetzt werden. Somit ist die Zeit zur Lösung der lokalen Gleichungen etwas größer als bei der Nullrandbedingung, siehe Bild 6.25 (a). Die Steigung dieser Kurve ist jedoch geringer als bei der Nullrandbedingung, da mit zunehmender Anzahl an Grobkalenelementrändern die Gesamtanzahl an Freiheitsgraden \mathbf{d}' in Ω zu­nimmt, während sie bei der Nullrandbedingung abnimmt. Die Ursache hierfür liegt darin, dass \mathbf{d}' auf diesen Rändern als "doppelter" Freiheitsgrad auftritt.

Das optimale Verhältnis liegt auch bei der Strafterm–Methode für dieses Beispiel bei 16 Feinskale­nelementen je Grobkalenelement (Bild 6.25 (c)).

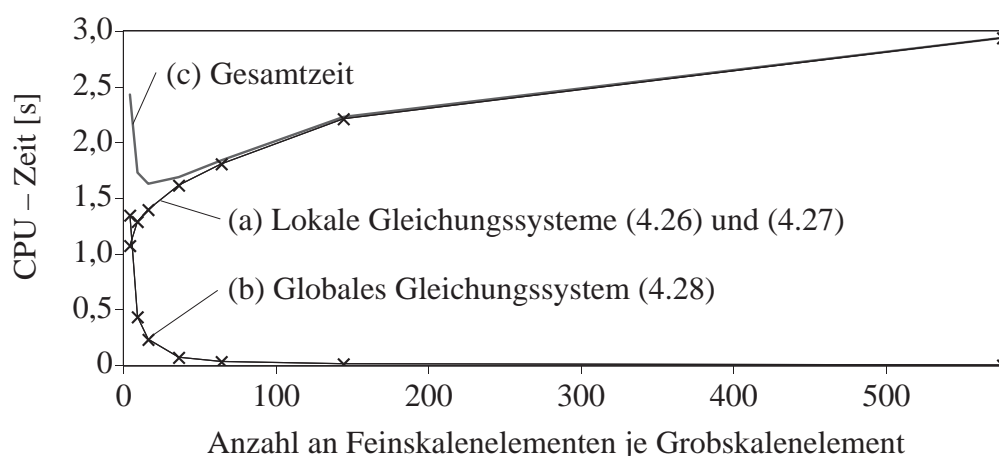


Bild 6.25: $[\mathbf{u}'] = \mathbf{0}$, Strafterm: Aufspaltung der CPU–Zeit in Anteile zur Lösung des globalen Gleichungssystems und der lokalen Gleichungssysteme

- **Übergangsbedingung (punktweise), Lagrange**

Bei der punktwweisen Lagrange–Multiplikatoren–Methode nimmt die Lösung der lokalen Feinskalenprobleme jeweils gleich viel Zeit in Anspruch wie bei der Strafterm–Methode, siehe Bild 6.26 (a). Dafür steigt mit der Anzahl an Grobkalenelementrändern die Anzahl globaler Freiheitsgrade nicht nur durch die Grobkalenfreiheitsgrade $\bar{\mathbf{d}}$ sondern vor allem durch die Lagrange–Freiheitsgrade \mathbf{L} sehr schnell an. Dadurch nimmt die Zeit zur Lösung des globalen Gleichungssystems mit wachsendem Diskretisierungsverhältnis schnell ab, siehe Bild 6.26 (b).

Optimal ist hier das Verhältnis von 36 Feinskale­nelementen je Grobkalenelement, siehe Bild 6.26 (c).

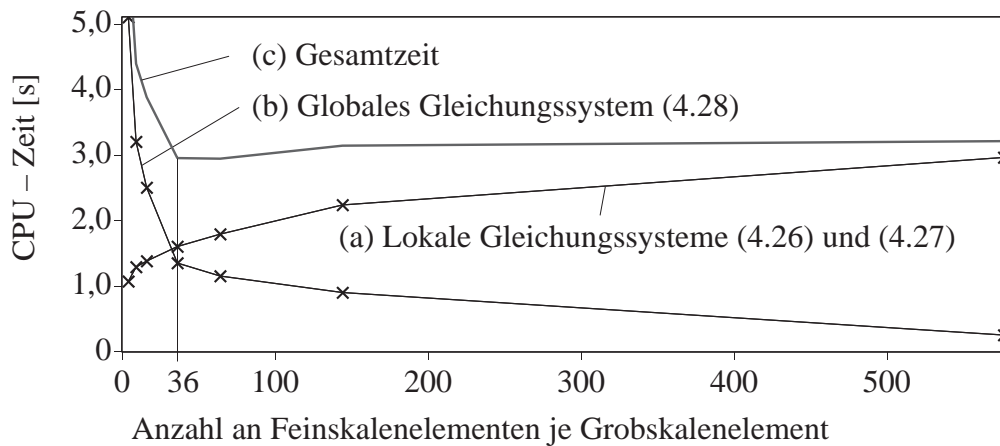


Bild 6.26: $[\mathbf{u}'] = \mathbf{0}$, Lagrange punktwise: Aufspaltung der CPU-Zeit in Anteile zur Lösung des globalen Gleichungssystems und der lokalen Gleichungssysteme

6.3.2 Beschleunigungsfähigkeit

Für das Beispiel der gekerbten Probe wird nun die theoretisch mögliche Beschleunigungsfähigkeit der Zweiskalenmethode durch Parallelisierung untersucht. Exemplarisch werden hierfür die Diskretisierungsverhältnisse von 36 und 576 ausgewählt, siehe Tabelle 6.6.

Bei Nutzung mehrerer Prozessoren können die lokalen Feinskalenprobleme auf die Prozessoren verteilt werden. Sowohl das Aufstellen als auch das Lösen der Feinskalenprobleme kann vollständig kommunikationsfrei stattfinden, d.h. die in den Bildern 6.24 bis 6.26 angegebenen Zeiten zum Lösen der lokalen Feinskalenprobleme reduzieren sich erheblich. Da die Anzahl der Grobskalenelemente im Allgemeinen kein ganzzahliges Vielfaches der Anzahl der Prozessoren ist, ist für die notwendige Zeit zum Lösen der Feinskalenprobleme der Prozessor maßgebend, dem die meisten Grobskalenelemente in Ω' zugeteilt werden. Auch das Grobskalenproblem (globales Gleichungssystem (4.28)) könnte parallel gelöst werden. Das wäre jedoch wegen seiner globalen Kopplung mit Kommunikation zwischen den Prozessoren verbunden, so dass die Beschleunigung hierfür deutlich geringer wäre. Deshalb wird für die folgende Betrachtung von dieser Möglichkeit abgesehen.

Aufgetragen über der Anzahl an Prozessoren stellt Bild 6.27 die CPU-Zeit zur Lösung der Gleichungen im ersten Iterationsschritt des Lastschritts, der auch in Abschnitt 6.3.1 betrachtet wurde, dar. Ganz allgemein ist die maximal mögliche Beschleunigung eines Berechnungsvorgangs die Zeit, die für diesen Berechnungsvorgang auf einem Prozessor benötigt wird, geteilt durch die Anzahl an Prozessoren. Diese theoretische Obergrenze für die mögliche Beschleunigung ist in Bild 6.27 für die Strafterm-Methode gestrichelt eingetragen. Der Vergleich zeigt, dass die hierarchische Zweiskalenmethode eine außerordentlich gute Beschleunigungsfähigkeit aufweist. Sie beruht allein auf der Lokali-tätsannahme für die feinskaligen Variablen.

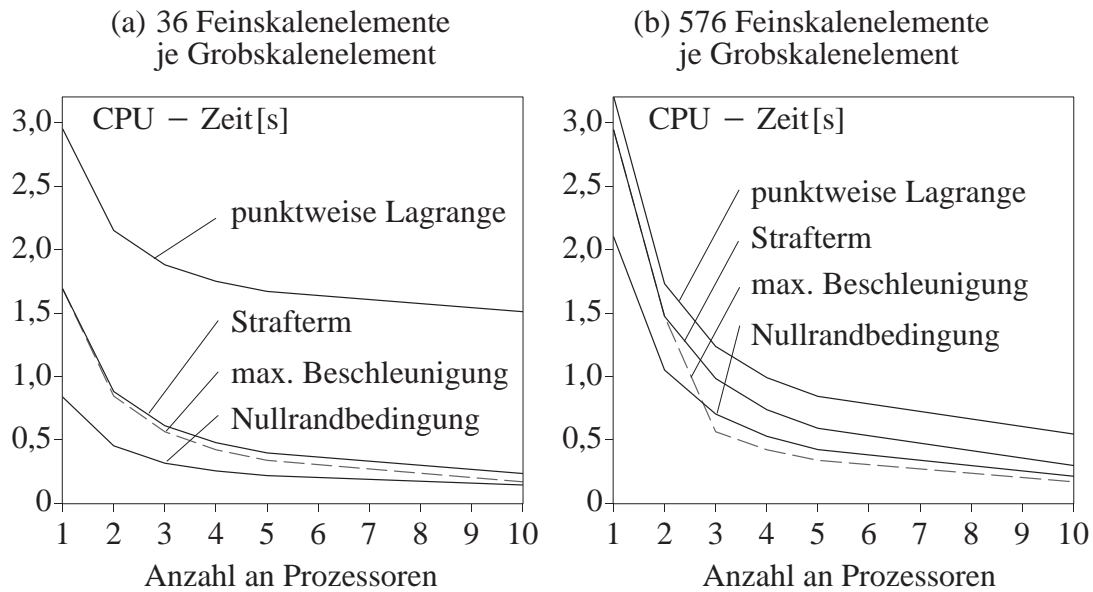


Bild 6.27: CPU-Zeit zur Lösung der Gleichungssysteme in einem Iterationsschritt: Beschleunigung durch Parallelisierung

Dominiert jedoch die Zeit zur Lösung des globalen Gleichungssystems, wie es im betrachteten Beispiel bei der punktweisen Lagrange-Methode für das Diskretisierungsverhältnis von 36 der Fall ist (Bild 6.27 (a)), leidet die Beschleunigungsfähigkeit. Dadurch verschiebt sich bei der punktweisen Lagrange-Methode das optimale Diskretisierungsverhältnis bei Nutzung mehrerer Prozessoren. Während bei Verwendung eines Prozessors das Diskretisierungsverhältnis von 36 optimal ist (Bild 6.26), ist, wie an Bild 6.27 zu erkennen, schon ab 2 Prozessoren das Verhältnis von 576 zu bevorzugen.

6.3.3 Zusammenfassung

Anhand des betrachteten Beispiels kann festgestellt werden, dass es, im Hinblick auf die Effizienz der Zweiskalenmethode, ein optimales Verhältnis zwischen Fein- und Grobskalendiskretisierung gibt. Dieses ist allerdings von vielerlei Einflüssen, u.a. der Anzahl an Prozessoren, abhängig. Während bei Nutzung eines Prozessors dieses optimale Verhältnis für das untersuchte Beispiel recht klein ist (16 – 32 Feinskalenelemente je Grobskalenelement), sind schon ab zwei Prozessoren unter Umständen deutlich größere Verhältniswerte empfehlenswert.

In diesem Fall könnte es, im Hinblick auf die Effizienz und Flexibilität der Methode, überlegenswert sein, den Träger der feinskaligen Variablen nicht auf ein Grobskalenelement zu beschränken sondern auf Grobskalenelementgruppen zu erweitern.

6.4 Bewertung der Nebenbedingungen

Die Beispiele der letzten Abschnitte zeigen das Potential der vorgestellten Zweiskalenmethode. Sie stellt ein äußerst effizientes und genaues Lösungsverfahren für Anwendungen mit mehrskaligem Charakter dar. Um diese hohe Genauigkeit gewährleisten zu können, ist jedoch die Verwendung der Übergangsbedingung $[\mathbf{u}'] = \mathbf{0}$ auf den Kopplungsrändern unumgänglich. Sowohl die starke, als auch die schwache Nullrandbedingung verursachen inakzeptable Ungenauigkeiten. Das Problem der Randbedingungen liegt darin, dass sie die Informationsausbreitung im Gebiet durch unphysikalische Annahmen bezüglich der Feinskalenkinematik auf den Kopplungsrändern unterdrücken. Die Nullrandbedingung kann lediglich bei Versagen, das sich im Inneren der einzelnen Grobskalenelemente abspielt, sinnvoll eingesetzt werden, oder als obere Schranke zur Abschätzung des Last–Verformungs–Verhaltens dienen. Von der schwachen Nullrandbedingung ist bei inelastischem Materialverhalten vollständig abzuraten, weil die tragende Annahme, dass die feinskaligen Verschiebungen im Mittel verschwinden, nicht allgemein zutreffend ist.

Zur Realisierung der Übergangsbedingung wurden die Lagrange–Multiplikatoren–, die Strafterm– und die erweiterte Lagrange–Multiplikatoren–Methode eingesetzt und getestet. Die *Lagrange–Multiplikatoren–Methode* ermöglicht im Rahmen der numerischen Genauigkeit die exakte Erfüllung der Nebenbedingung, wenn der Ansatzgrad der Lagrange–Multiplikatoren mit dem der feinskaligen Verschiebungen auf den Kopplungsrändern übereinstimmt. Von der Wahl eines deutlich geringeren Ansatzgrads für den Lagrange–Multiplikator ist nicht nur wegen auftretenden Genauigkeitsverlusten, sondern auch im Hinblick auf die Robustheit der numerischen Methode abzuraten. Die sonst möglicherweise auftretenden unphysikalischen Inkompatibilitäten im feinskaligen Verschiebungsverlauf können zu numerischen Problemen führen, siehe Abschnitt 6.1.2. Einziger Nachteil dieser Methode ist der numerische Mehraufwand durch die zusätzlichen globalen Freiheitsgrade des Lagrange–Multiplikators im Vergleich zur Nullrandbedingung.

Mit der *Strafterm–Methode* hingegen wird die Nebenbedingung ohne zusätzliche Freiheitsgrade berücksichtigt. Es konnte gezeigt werden, dass der Strafterm–Parameter ϵ so gewählt werden kann, dass weder die Gut–Gestelltheit der Formulierung durch eine zu starke Wichtung der Nebenbedingung gefährdet, noch die Genauigkeit der Lösung beeinträchtigt wird. Diese Wahl ist von der jeweiligen Systemsteifigkeit und der Netzfeinheit der Diskretisierung abhängig, d.h. es wird etwas Erfahrung benötigt, um eine sinnvolle Wahl für ϵ treffen zu können. Darüber hinaus sind im Rahmen des Zweiskalenmodells Beschleunigungsmaßnahmen aufgrund der nichtkonsistenten Linearisierung der Nebenbedingungsterme notwendig. Damit ist im Kontext des Zweiskalenmodells die Strafterm–Methode etwas sensitiv in der Handhabung und weniger robust als die Lagrange–Multiplikatoren–Methode, dafür im Allgemeinen effizienter.

Die *erweiterte Lagrange–Multiplikatoren–Methode* hat sich für das hierarchische Zweiskalenmodell als wenig vorteilhaft erwiesen. Da die Genauigkeit der Strafterm–Methode voll zufriedenstellend ist, und die erweiterte Lagrange–Multiplikatoren–Methode weder schneller als die Lagrange–Multiplikatoren–Methode (siehe Abschnitt 6.2) noch robuster als die Strafterm–Methode ist, sind die anderen beiden Methoden zu bevorzugen.

Ob die Lagrange- oder Strafterm-Methode für die jeweilige Problemstellung vorteilhaft ist, hängt unter anderem von der Ausdehnung des Zweiskalengebiets Ω' ab. Nimmt Ω' nur einen geringen Teil der Struktur ein, überwiegen die Vorteile der Lagrange-Multiplikatoren-Methode. Die Rechenzeit erhöht sich in diesem Fall durch die nur geringe Anzahl an Lagrange-Freiheitsgraden kaum. Breitet sich dagegen das Zweiskalengebiet über einen großen Bereich aus, so ist unter Umständen die Strafterm-Methode effizienter.

Die Stärken und Schwächen der einzelnen Nebenbedingungen im Hinblick auf Genauigkeit, Aufwand und Robustheit sind noch einmal in Tabelle 6.7 zusammengestellt. Hierbei sind die Stärken mit einem \oplus , die Schwächen mit einem \ominus gekennzeichnet.

Nebenbedingung	$u' = 0$		$[u'] = 0$		
	stark	schwach	Strafterm	Lagrange	erweitert Lagrange
Genauigkeit	\ominus	\ominus	\oplus	\oplus	\oplus
numerischer Aufwand	\oplus	\oplus	\oplus	\ominus	\ominus
Robustheit	\oplus	\ominus	\ominus	\oplus	\ominus

Tabelle 6.7 Beurteilung der Rand- bzw. Übergangsbedingungen für u'

7 Numerische Beispiele

Während die numerischen Experimente der vorangegangenen Kapitel der gezielten Untersuchung und dem Vergleich der unterschiedlichen vorgestellten Nebenbedingungen für die feinskaligen Verschiebungen \mathbf{u}' dienten, werden in diesem Kapitel drei Anwendungsbeispiele betrachtet. Abschnitt 7.1 zeigt die Anwendung der hierarchischen Zweiskalenmethode auf einen faserverstärkten Balkenquerschnitt. Am Beispiel einer L-förmigen Scheibe wird in Abschnitt 7.2 das Konzept des hierarchischen Zweiskalenmodells für eine diskrete Rissmodellierung auf der feinen Skala eingesetzt. In Abschnitt 7.3 wird das Zweiskalenmodell anhand eines Benchmarkproblems (gekerbter Vierpunkt-Biegebalken) durch die Gegenüberstellung von Simulations- und Versuchsergebnissen validiert.

7.1 Anwendungsbeispiel: Faserverstärkte Probe

Betrachtet wird ein Balken aus glasfaserverstärktem Mörtel. 100 Faserbündel sind parallel zur Balkenlängsachse angeordnet. Der Balken wird in seiner Längsrichtung gleichförmig beansprucht und gelagert, so dass die Modellierung auf den zweidimensionalen Balkenquerschnitt im ebenen Verzerrungszustand reduziert werden kann, siehe Bild 7.1. Die Faserbündel aus Einzelfilamenten werden vereinfachend als homogene Materialkomponente abgebildet. Unter der gegebenen Beanspruchung verhalten sie sich elastisch. Ebenso wird der Mörtel als homogene Phase betrachtet, dessen entfestigendes Verhalten durch das gradientenerweiterte Schädigungsmodell beschrieben wird. Das Ablösen der Faserbündel vom Matrixmaterial wird durch eine kohäsive Interface-Schicht ermöglicht. Die Materialparameter der Komponenten sind in Tabelle 7.1 angegeben. Das System wird durch 25 bilineare Grobskalenelemente und durch 877 bilineare Feinskalenelemente je Grobskalenelement – davon 96 Interface-Elemente – diskretisiert. Die Anordnung und Abmessungen der Fasern im Querschnitt eines Grobskalenelementes entspricht der des Beispiels in Abschnitt 5.2.1.

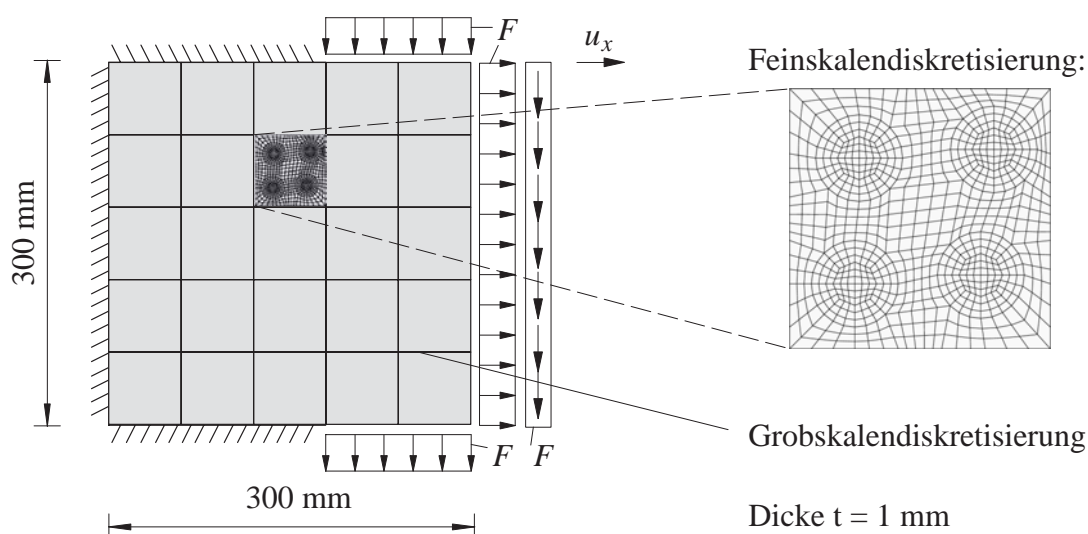


Bild 7.1: Faserverstärkter Balkenquerschnitt: System und Diskretisierung

Matrixmaterial (Mörtel)			
elastische Eigenschaften:	$E = 32000 \text{ N/mm}^2$		$\nu = 0,2$
äquivalente Verzerrung (de Vree):	$k = 3,0$		
Schädigungsevolution (exponentiell):	$\kappa_0 = 0,002$	$\alpha = 0,98$	$\beta = 5,0$
Gradientenparameter:	$c = 2,0 \text{ mm}^2$		
Glasfasern			
elastische Eigenschaften:	$E = 735000 \text{ N/mm}^2$		$\nu = 0,18$
Interface			
elastische Eigenschaften:	$E = 7350 \text{ N/mm}^2$		$\nu = 0,2$
äquivalente Verzerrung (de Vree):	$k = 1,0$		
Schädigungsevolution (exponentiell):	$\kappa_0^n = 0,00005$	$\alpha^n = 1,0$	$\beta^n = 2,0$
	$\kappa_0^t = 0,0001$	$\alpha^t = 1,0$	$\beta^t = 2,0$

Tabelle 7.1: Materialparameter des faserverstärkten Balkens

Die Berechnung wird mit dem hierarchischen Zweiskalenmodell und der Übergangsbedingung $[\mathbf{u}'] = \mathbf{0}$, die mittels Strafterm–Methode ($\epsilon = 50 \text{ kN/mm}$) eingebracht wird, durchgeführt. Eine Feinskalenberechnung wird als Referenz verwendet.

Unter der Mischung aus Zug– und Schubbeanspruchung wächst, wie in Bild 7.2 zu erkennen, ein Schädigungsband gekrümmt vom Endpunkt der Lagerung am oberen Rand in Richtung des Endpunkts der Lagerung am unteren Rand der Probe. Dies führt im geschädigten Bereich zum Ablösen der Faserbündel vom Matrixmaterial, da das Interface hier das schwächste Glied darstellt. Die Schädigung in den Interface–Schichten ist in Bild 7.2 nicht farbig angelegt (weiß), damit das Ablösen der Fasern besser zu erkennen ist.

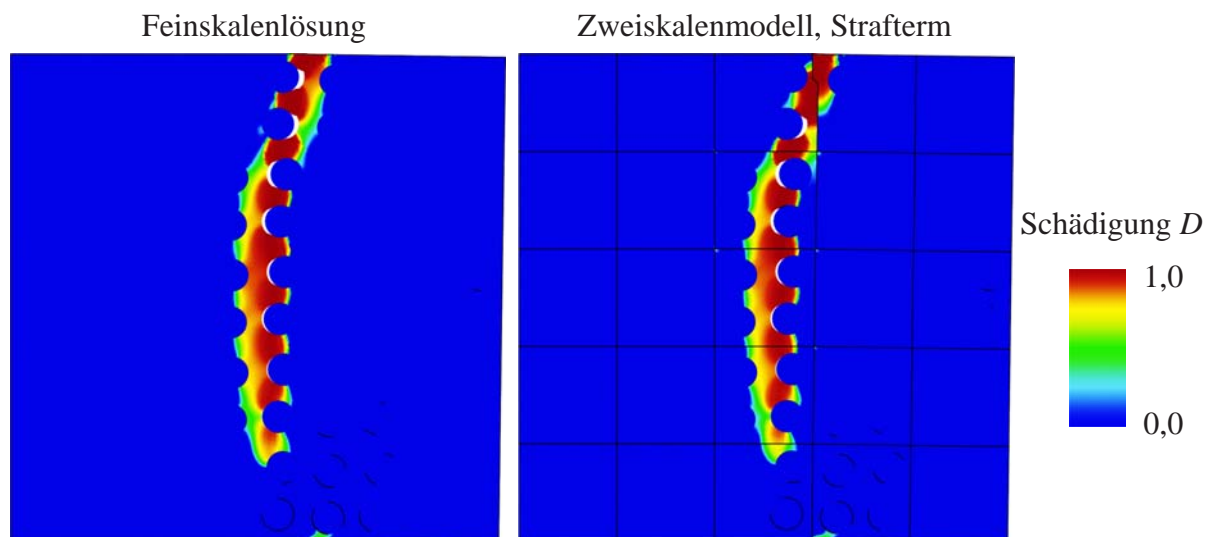


Bild 7.2: Deformation (Überhöhungsfaktor 1,0) und Schädigung des Matrixmaterials für $u_x = 3,73 \text{ mm}$

Sowohl der Schädigungsverlauf als auch die globale Systemantwort in Bild 7.3 zeigen eine gute Übereinstimmung zwischen der Zweiskalenlösung und der Feinskalenlösung. Die geringen Abweichungen entstehen einerseits dadurch, dass mit der Strafterm-Methode die Nebenbedingung $[\mathbf{u}'] = \mathbf{0}$ nicht exakt erfüllt wird, und andererseits durch die homogenen Randbedingungen für die nichtlokale Verzerrung. In Verbindung mit dem Rechenzeitgewinn – die Lösungszeit im ersten Iterationsschritt des Lastschritts von $u_x = 2,0\text{ mm}$ auf $u_x = 2,05\text{ mm}$ reduziert sich auf ein Fünftel der entsprechenden Lösungszeit der Feinskalenlösung (Bild 7.3) bei Verwendung eines Prozessors – präsentiert sich die Zweiskalenformulierung hier als äußerst attraktiv.

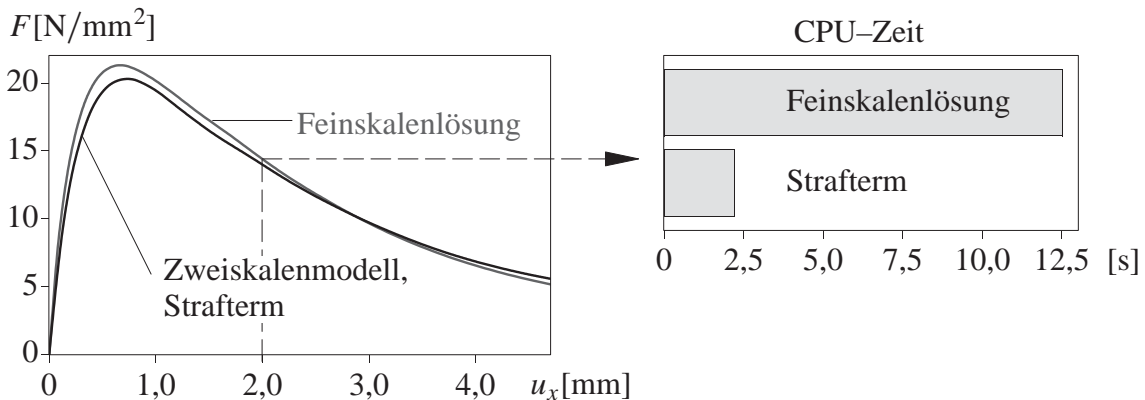


Bild 7.3: Last-Verformungs-Verhalten und CPU-Zeit zur Lösung der Gleichungssysteme

Würden jedoch statt der Übergangsbedingung die starke bzw. schwache Nullrandbedingung für die Zweiskalenmethode verwendet, so wären enorme Genauigkeitsverluste die Folge, wie die Deformationsfiguren und Schädigungsverteilungen in Bild 7.4 verglichen mit der Feinskalenlösung in Bild 7.2 zeigen.

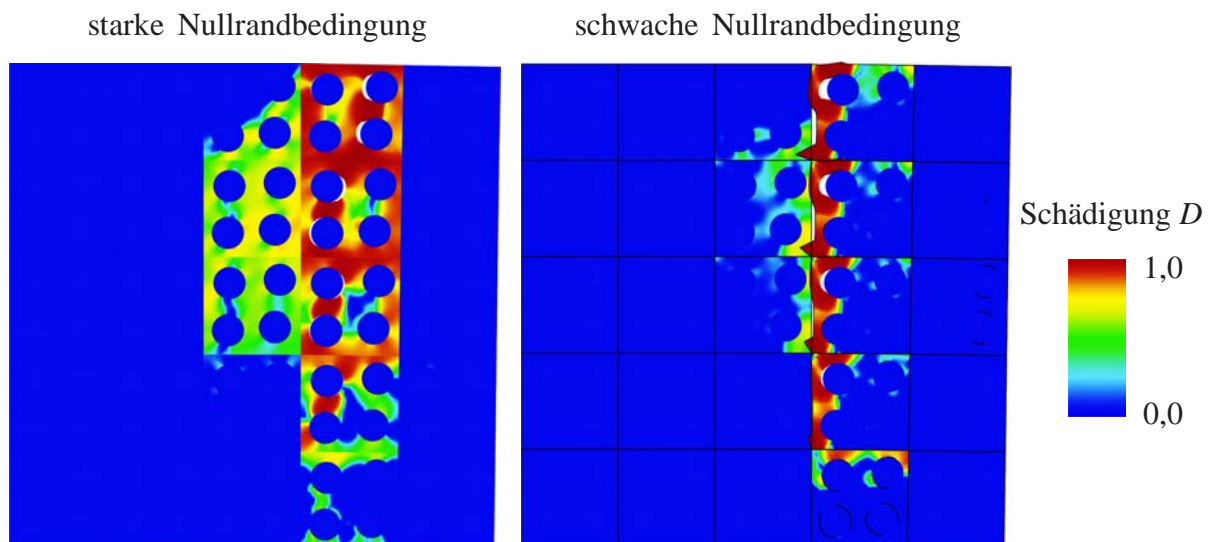


Bild 7.4: Deformation (Überhöhungsfaktor 1,0) und Schädigung für $u_x=3,73\text{ mm}$ bei Verwendung von Randbedingungen

7.2 L-förmige Scheibe mit diskretem Rissmodell

Das Beispiel der L-förmigen Scheibe aus Abschnitt 6.2 soll erneut betrachtet werden. Diesmal wird jedoch, anstelle des bisher in dieser Arbeit verwendeten Schädigungsmodells, ein diskretes Rissmodell auf der Feinskala eingeführt. Zum einen soll dadurch die Möglichkeit aufgezeigt werden, unterschiedliche Modelle auf der Feinskala in das Zweiskalenmodell einzubetten. Andererseits sollen die Ergebnisse des diskreten Rissmodells denen des Schädigungsmodells gegenübergestellt werden. Das verwendete diskrete Rissmodell basiert auf der eXtended Finite Element Method (XFEM), siehe auch Abschnitt 2.1.2. An dieser Stelle werden nur kurz die Grundlagen und die Notation der hier verwendeten XFEM-Formulierung eingeführt. Für Details der speziellen Formulierung sei auf Hettich & Ramm (2006), Hettich et al. (2006) und Hettich (2007) verwiesen.

Dem Konzept der *partition of unity* (Babuska & Melenk (1997)) entsprechend, werden die feinskaligen Verschiebungsansätze um Sprungfunktionen angereichert, die in natürlicher Weise die Risskinematik im Element erfassen. Diese knotenbasierten Anreicherungen sind Linearkombinationen der Einheitssprungfunktion H_i für den jeweiligen Riss i . Die Verschiebung \mathbf{u} setzt sich dann aus folgenden Anteilen zusammen:

$$\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} + \mathbf{u}' \quad \text{mit } \mathbf{u}' = \hat{\mathbf{u}} + \sum_{i=1}^{n_{\text{riss}}} H_i \tilde{\mathbf{u}}_i, \quad (7.1)$$

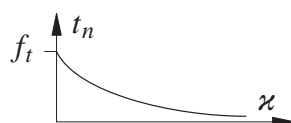
mit polynomialen Verschiebungsansätzen $\hat{\mathbf{u}} := \mathbf{N}' \mathbf{d}'$ und Anreicherungen $H_i \tilde{\mathbf{u}}_i$ für die einzelnen Risse. n_{riss} bezeichnet die Anzahl der Risse im System. Die geometrische Lage der Risse wird durch level-set-Funktionen (Ventura et al. (2002)) beschrieben. Das sind in diesem Zusammenhang implizite Funktionen, die im Riss ihr Vorzeichen wechseln und dadurch die Lage des Risses kennzeichnen.

Durch die Verschiebungssprünge ist die Verzerrung im Riss unbegrenzt. Deshalb wird der Verschiebungssprung $[\mathbf{u}]$ als maßgebliche kinematische Variable im Riss herangezogen. Das Material in der Umgebung der Risse wird als intakt und elastisch verstanden. Im Riss wird ein kohäsives Spannungs-Rissöffnungs-Verhalten angenommen, das durch ein schädigungsbasiertes Materialmodell beschrieben wird. Ein Riss entsteht, beziehungsweise wächst, wenn die maximale Hauptspannung σ_I^{max} die Zugfestigkeit f_t des Materials erreicht. Das äquivalente Verzerrungsmaß, das das entfestigende Verhalten im Riss kontrolliert, ist die Rissöffnungskomponente $[u_n]$ normal zum Riss:

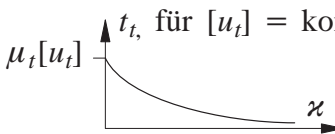
$$\varepsilon_v := [u_n]. \quad (7.2)$$

Die interne Variable \varkappa bezeichnet die in der Belastungsgeschichte maximal am jeweiligen Punkt aufgetretene äquivalente Verzerrung. Folgendes exponentielles Gesetz beschreibt die Entfestigung der normal zum Riss wirkenden Spannungskomponente t_n .

$$t_n = \frac{f_t}{\varkappa} \exp\left(-\frac{f_t}{G_u} \varkappa\right) [u_n] \quad (7.3)$$



G_u bezeichnet dabei die Bruchenergie des Materials. Die in Tangentialrichtung übertragbare Spannung t_t im Riss nimmt ebenfalls mit zunehmender Rissöffnung κ ab:

$$t_t = \mu_t \exp(h_t \kappa) [u_t] . \quad (7.4)$$


μ_t ist hierbei die Anfangsschubsteifigkeit und der Parameter $h_t \leq 0$ steuert die Degression dieser Steifigkeit mit zunehmender Rissöffnung κ . Die Richtung des Rissfortschritts ist die Richtung der maximalen Hauptspannung des um die Risspitze räumlich gemittelten Spannungstensors. Diese Mittelung sorgt für eine kontinuierliche Entwicklung der Rissrichtung.

Als Nebenbedingung an die lokal in den Grobskalenelementen definierten Feinskalenverschiebungen \mathbf{u}' wird in diesem Beispiel punktweise $[\mathbf{u}'] = \mathbf{0}$ auf den Kopplungsrändern gefordert. Hierfür wird die Methode der Lagrange-Multiplikatoren verwendet. Vergleichsweise wird auch die Nullrandbedingung herangezogen. Damit die lineare Unabhängigkeit der grob- und feinskaligen Verschiebungen gewahrt wird, können in der momentanen Implementierung Knoten der Grobskalendiskretisierung nicht mit feinskaligen Sprungfreiheitsgraden $\tilde{\mathbf{u}}$ angereichert werden. Das heißt, das Öffnen eines Risses in unmittelbarer Nachbarschaft von Grobskalenknoten kann nicht ermöglicht werden.

Die elastischen Eigenschaften der L-förmigen Scheibe sind $E = 10000 \text{ N/mm}^2$ und $\nu = 0,2$, vergleiche Abschnitt 6.2. Die Zugfestigkeit des Materials kann über den Zusammenhang zwischen dem Schädigungsschwellenwert und der Zugfestigkeit berechnet werden ($f_t = E \kappa_0 = 4 \text{ N/mm}^2$), wobei der Schädigungsschwellenwert von $\kappa_0 = 0,0004$ in Abschnitt 6.2 gegeben ist. Die Bruchenergie $G_u = 0.25 \text{ N/mm}$ ist die Fläche unter der Spannungs-Rissöffnungskurve. Die Anfangsschubsteifigkeit ist $\mu_t = E/2(1 + \nu) = 4167 \text{ N/mm}^2$, der Parameter h_t liegt bei $-0,1$. Die L-förmige Scheibe, deren Abmessungen in Abschnitt 6.2 angegeben sind, wird durch 48 bilineare Grobskalenelemente mit jeweils 100 bilinearen Feinskalenelementen diskretisiert, siehe Bild 7.5 (b). Die Möglichkeit der adaptiven Anpassung des Zweiskalengebiets ist bei diskreter Rissmodellierung noch nicht realisiert.

Die Berechnung mit dem Schädigungsmodell (Bild 6.15) lässt erkennen, dass der Rissursprung bei homogenem Material im inneren Eckpunkt der Scheibe liegt. Da sich dort ein Knoten der Grobskalendiskretisierung befindet, könnte das Zweiskalenmodell die Rissöffnung nicht richtig erfassen. Das würde eine Überschätzung der Systemsteifigkeit mit sich bringen. Um dieses Problem zu umgehen, wird eine lokale Schwächung der Zugfestigkeit auf $f_t^* = 3,0 \text{ N/mm}^2$ im gekennzeichneten Bereich (siehe Bild 7.5) angenommen, was auch real der Fall sein könnte.

In Bild 7.5 ist die Zweiskalenlösung der Feinskalenlösung bezüglich des Rissverlaufs und der maximalen Hauptspannung σ_I^{\max} im Beanspruchungszustand $u_x = 1,01 \text{ mm}$ gegenübergestellt. Die Ergebnisse des Zweiskalenmodells stimmen sehr gut mit der Feinskalenlösung überein. Offensichtlich liegt die Risswurzel im Bereich der Materialschwächung. Der Riss wächst von dort mit einer leichten Krümmung und mündet in einem vertikal verlaufenden Ast. Am Verlauf der maximalen Hauptspannung erkennt man die Spannungskonzentration im Bereich um die Risspitze, während das Material im bereits gerissenen Bereich elastisch entlastet.

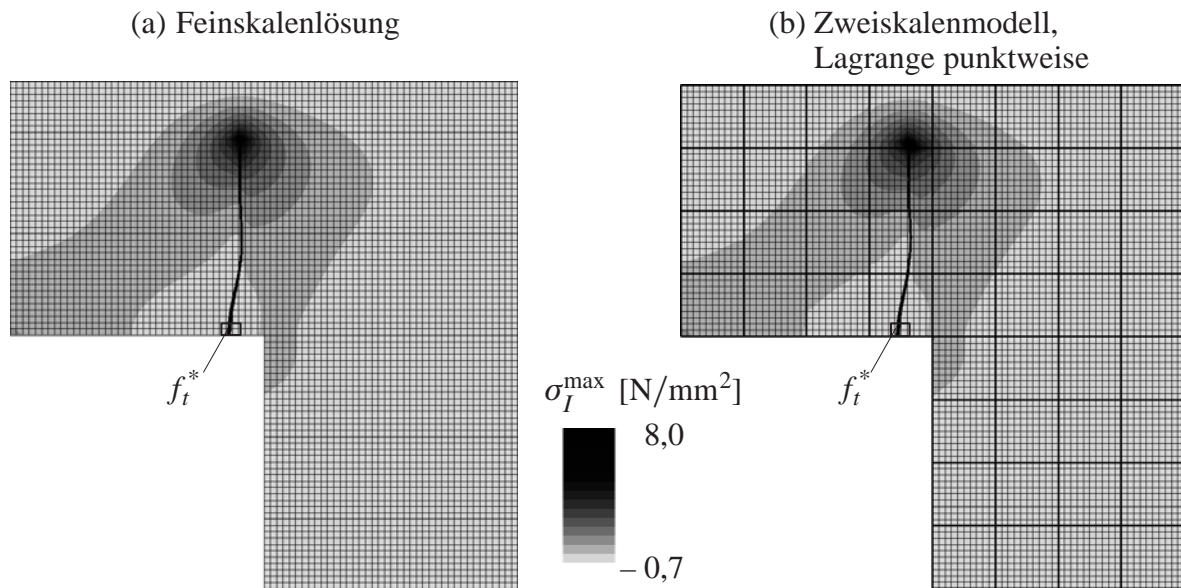


Bild 7.5: Rissverlauf und maximale Hauptspannung für $u_x = 1.01$ mm

Nun wird die Lösung des diskreten Rissmodells mit der des Schädigungsmodells verglichen. Hierbei wird für das Schädigungsmodell das Material durch eine Abminderung des Schädigungsschwellenwertes auf $\kappa_0^* = 0,0003$ im gekennzeichneten Bereich in gleicher Weise wie beim diskreten Rissmodell geschwächt. Der Rissverlauf bei diskreter Modellierung liegt in der Schädigungszone, die sich bei "verschmierter" Modellierung ergibt, siehe Bild 7.6.

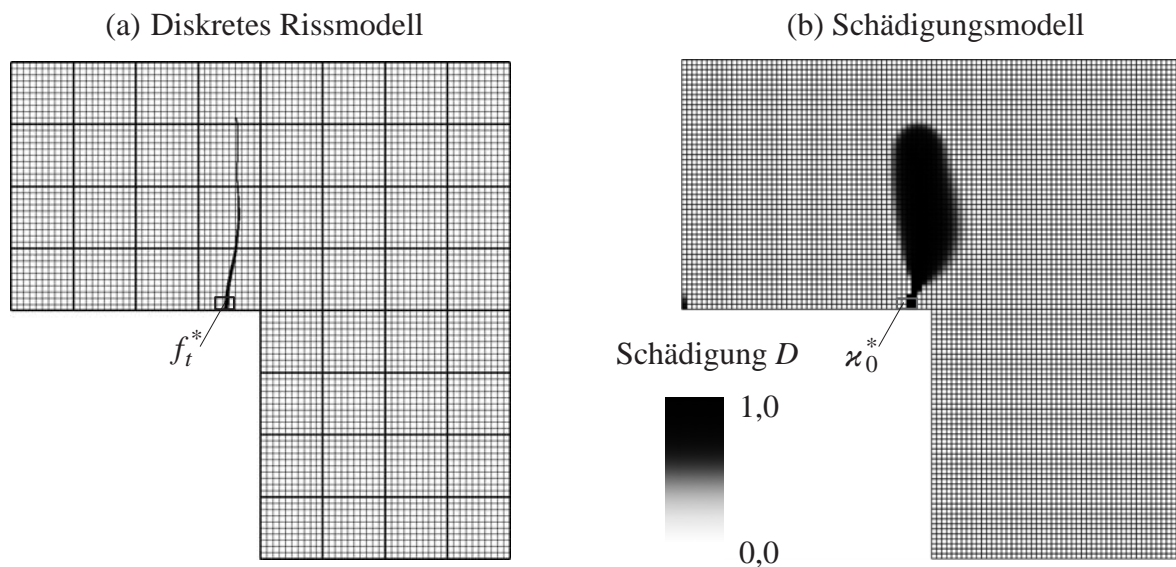


Bild 7.6: Rissverlauf und Schädigungsverteilung bei diskreter bzw. kontinuierlicher Rissabbildung für $u_x = 1.01$ mm

Das Last–Verformungs–Verhalten der XFEM–Feinskalenlösung und der XFEM–Zweiskalenlösung stimmen sehr gut überein, siehe Bild 7.7 (a) und (b). Die kleinen Diskontinuitäten im Verlauf dieser Kurven entstehen dadurch, dass im numerischen Modell der Riss feinskalenelement-

weise und nicht kontinuierlich wächst. Der Vergleich dieser Kurven mit der Last–Verschiebungs–Kurve des Schädigungsmodells (Bild 7.7 (d)) zeigt im elastischen Beanspruchungsbereich ebenfalls eine gute Übereinstimmung und auch die Traglast stimmt überein. Da in diesem Beispiel jedoch unterschiedliche Entfestigungsgesetze für das diskrete Rissmodell und das Schädigungsmodell verwendet werden, kann keine weitere Übereinstimmung der Systemantworten erwartet werden.

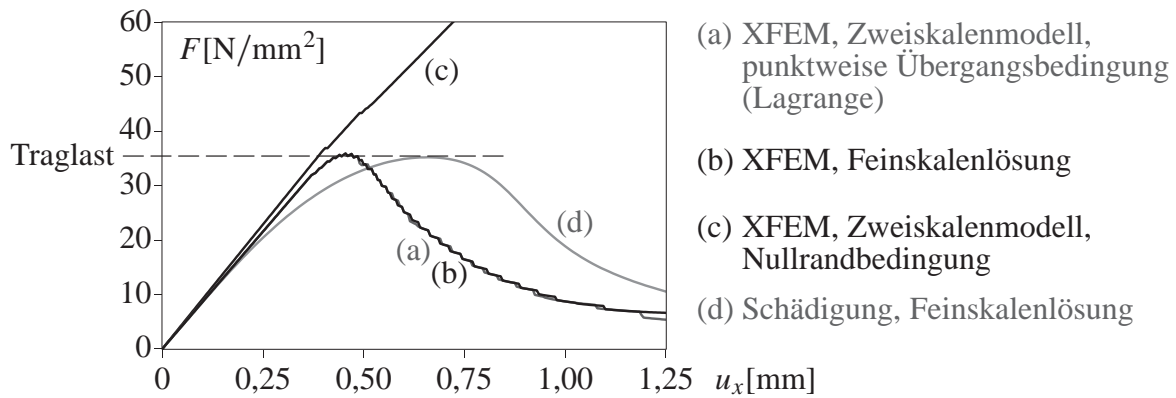


Bild 7.7: *L*-förmige Scheibe: Last–Verformungs–Verhalten

Wird bei diskreter Rissmodellierung jedoch die Nullrandbedingung für die Zweiskalenmethode verwendet, so unterdrückt diese die Rissöffnung auf den Kopplungsrändern, wie in Bild 7.8 zu erkennen ist. Diese kinematische Einschränkung beeinträchtigt das gesamte Strukturverhalten sehr stark: Auch der Hauptspannungsverlauf unter dieser Randbedingung ist unrealistisch und die Systemsteifigkeit im inelastischen Beanspruchungsbereich wird bei weitem überschätzt, siehe Bild 7.7 (c).

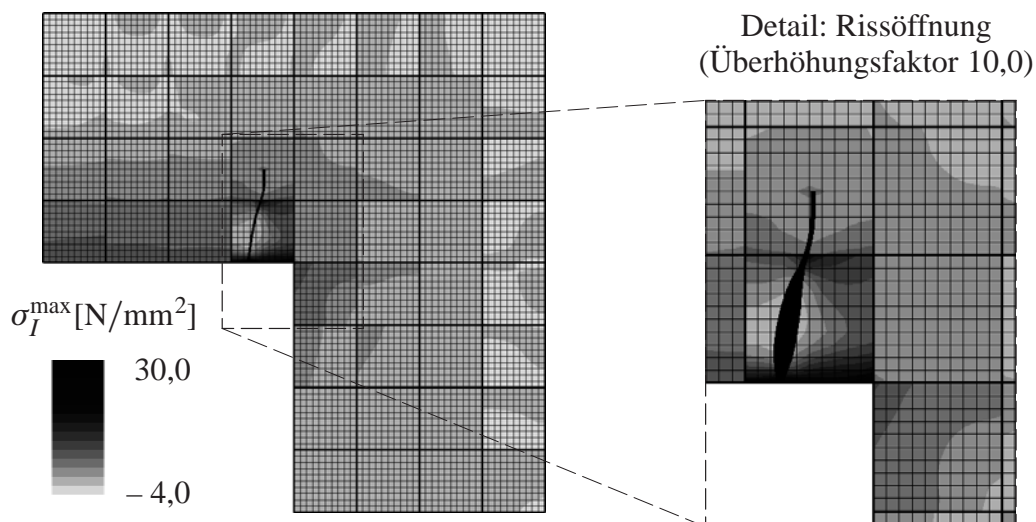


Bild 7.8: *Diskretes Rissmodell mit Nullrandbedingung: Rissverlauf und Rissöffnung für $u_x=1.01\text{mm}$*

An diesem Beispiel konnte gezeigt werden, dass die vorgestellte Zweiskalenmethode auch für diskontinuierliche Modelle auf der Feinskala geeignet ist. Bei Verwendung der Übergangsbedingung ist die Genauigkeit sehr hoch. Die Übereinstimmung der Ergebnisse mit denen einer verschmierten kontinuumsmechanischen Rissabbildung war ebenfalls befriedigend. Darüber hinaus manifestierte sich auch in diesem Zusammenhang noch einmal die Unzulänglichkeit der Nullrandbedingung.

7.3 Benchmarkproblem: Vierpunkt–Biegebalken

Als abschließendes Beispiel wird ein in der Literatur verbreitetes Benchmarkproblem, ein gekerbter Vierpunkt–Biegebalken, mit dem hierarchischen Zweiskalenmodell analysiert. Das Verhalten dieses Balkens aus Beton, dessen Abmessungen und Belastungen in Bild 7.9 dargestellt sind, wurde von Schlangen (1993) experimentell untersucht. Die Kerbe hat eine Breite von 5 mm und ist 20 mm tief. Der Balken ist 100 mm dick und wird im ebenen Spannungszustand modelliert. Die Materialparameter des Betons, für den das gradientenerweiterte Schädigungsmodell verwendet wird, sind in Tabelle 7.2 aufgeführt. Für die numerische Untersuchung werden die beiden Lager sowie die linke Einzellast vereinfacht als Punktlager bzw. Punktlast abgebildet. Diese Vereinfachung hat hier keinen Einfluss auf das globale Systemverhalten, da das Materialverhalten in diesen Bereichen stets elastisch bleibt. Das heißt, diese Bereiche gehören zum Grobskalenbereich $\bar{\mathcal{Q}}$ und die mit den Punktlasten verbundenen Singularitäten werden nicht aufgelöst. Die rechte Last von $10/11 F$ hingegen wird über eine starre Lastplatte von 20 mm Breite in den Balken eingeleitet.

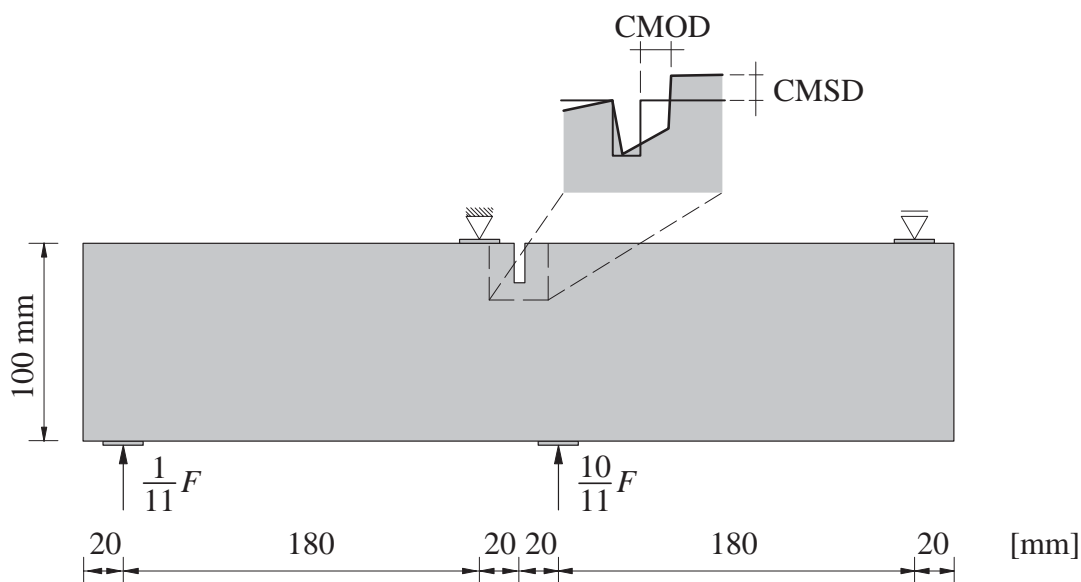


Bild 7.9: Vierpunkt–Biegebalken: System und Beanspruchung

elastische Eigenschaften:	$E = 35000,0 \text{ N/mm}^2$	$\nu = 0,15$	
äquivalente Verzerrung (de Vree):	$k = 10,0$		
Schädigungsevolution (exponentiell):	$\kappa_0 = 0,00007$	$\alpha = 0,96$	$\beta = 80$
Gradientenparameter:	$c = 1 \text{ mm}^2$		

Tabelle 7.2: Materialeigenschaften des Vierpunkt-Biegebalkens

Im Zweiskalenmodell wird für dieses Beispiel die Übergangsbedingung $[\mathbf{u}'] = \mathbf{0}$ verwendet, die punktweise mit der Lagrange-Multiplikatoren-Methode in die Formulierung eingebracht wird. Der Bereich inelastischen Verhaltens ist aus den Experimenten bekannt, so dass der Zweiskalenbereich Ω' hier a priori in der Mitte des Balkens, wie in Bild 7.10 dargestellt, eingeführt wird. So kann die Maske der globalen Steifigkeitsmatrix konstant gehalten werden. Die Grobkalenverschiebungen werden durch 109 bilineare Elemente diskretisiert. Die feinskaligen Variablen in Ω' werden durch bilineare Elemente der Abmessung $h = 1,67 \text{ mm}$ diskretisiert.

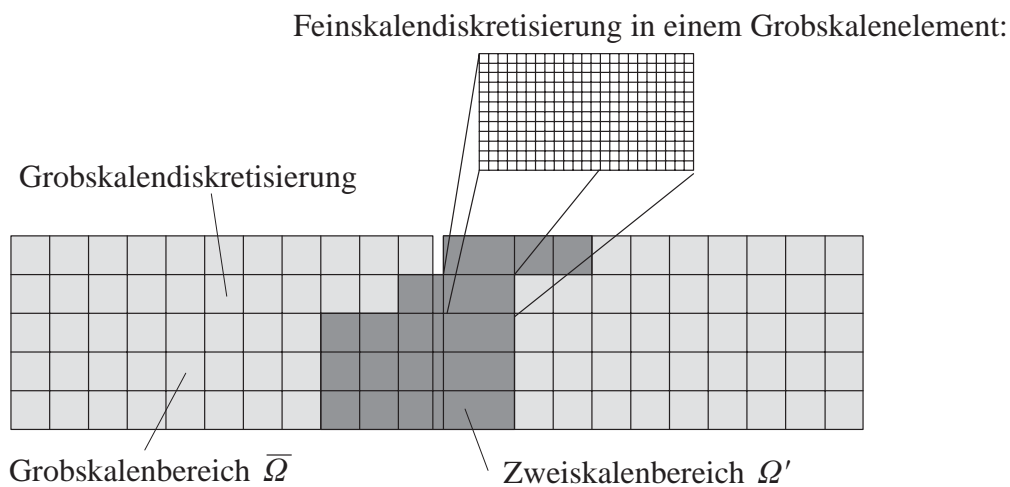


Bild 7.10: Aufteilung in Grob- und Feinskalenbereich und Diskretisierung auf den Skalen

Das Last-Verformungs-Verhalten des Systems wird wegen seines komplexen Verhaltens durch zwei Verformungsmaße kontrolliert. Die Rissöffnung, als horizontale Relativverschiebung der gegenüberliegenden Punkte am oberen Ende der Kerbe, wird als *crack mouth opening displacement* (CMOD) bezeichnet, die vertikale Relativverschiebung dieser Punkte als *crack mouth sliding displacement* (CMSD), siehe Bild 7.9. Die numerisch ermittelten Last-Verschiebungs-Kurven kommen den experimentellen Ergebnissen Schlangen's (1993), die in Bild 7.11 jeweils als grauer Bereich dargestellt sind, sehr nahe.

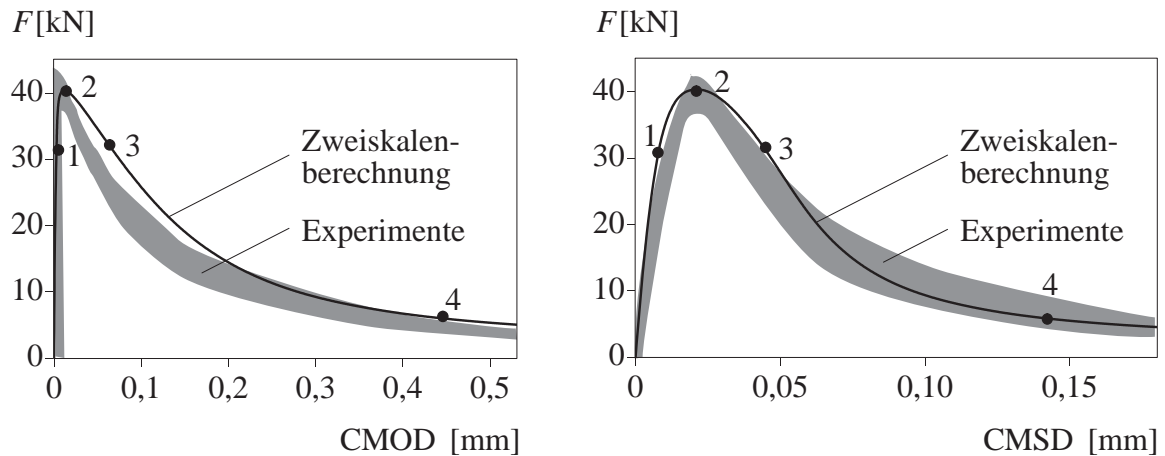


Bild 7.11: Last-Verformungs-Verhalten des Vierpunkt-Biegebalkens

Während des Beanspruchungsverlaufs kann in der Simulation folgendes Verhalten beobachtet werden, das in den Bildern 7.12 und 7.13 für die in den Last-Verschiebungs-Kurven eingetragenen Zustände 1 – 4 dokumentiert ist. Zunächst biegt sich das linke Balkenende nach oben und das rechte Balkenende verdreht sich im Uhrzeigersinn. Dadurch bildet sich infolge Biegezugbeanspruchung ein Schädigungsbereich auf der gegenüberliegenden Seite des Festlagers und infolge Schubbeanspruchung ein von der Kerbe ausgehender, unter ca. 45° geneigter Schubriss. Ein dritter, jedoch deutlich weniger intensiv geschädigter Bereich entsteht durch Biegezug am oberen Balkenrand in der rechten Systemhälfte (Zustand 1). Bei weiterer Steigerung der Beanspruchung wächst das Schädigungsband, das von der Kerbe ausgeht, leicht gekrümmt an (Zustand 2).

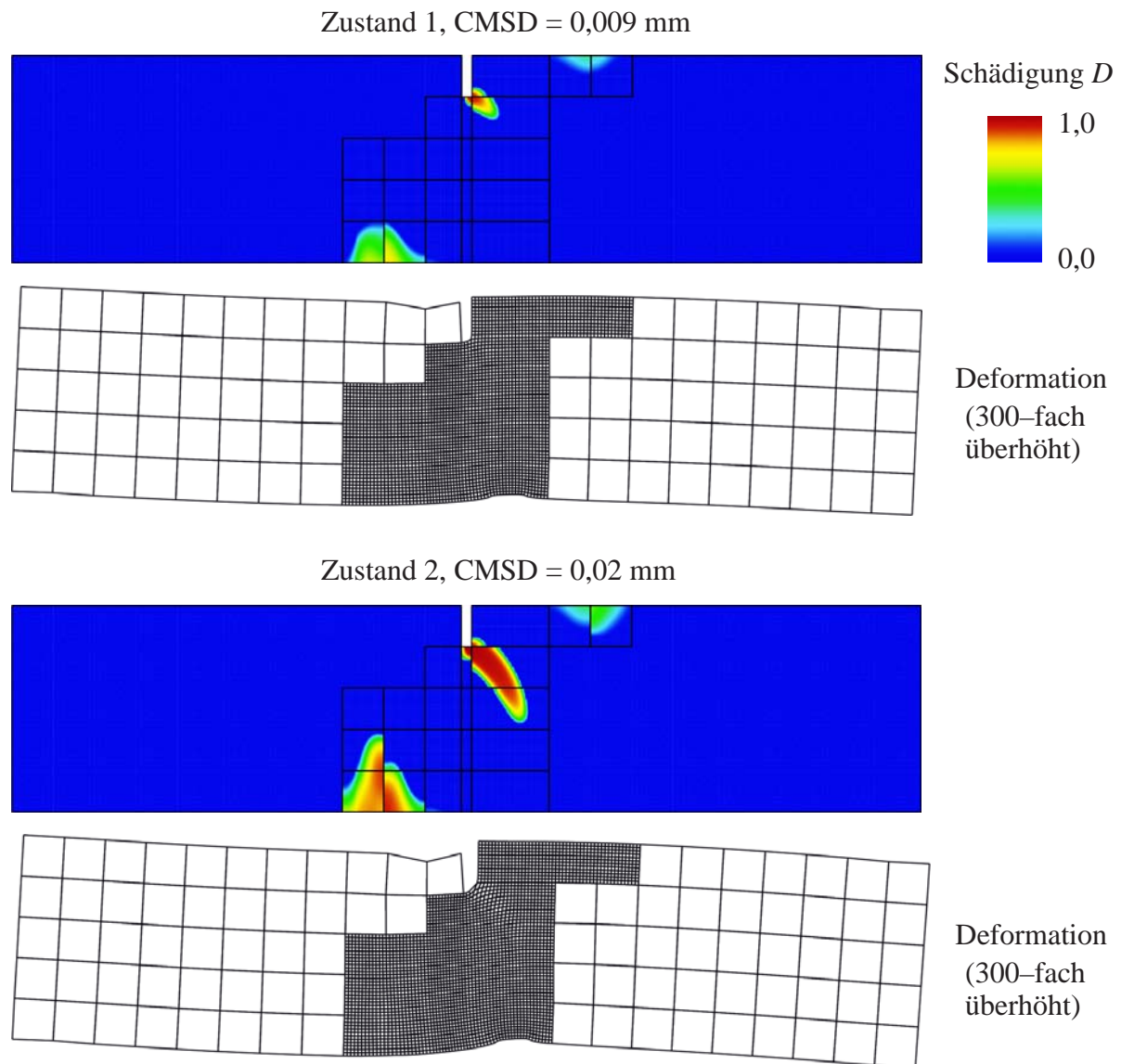


Bild 7.12: Schädigung und Deformation des Vierpunkt-Biegebalkens in den Zuständen 1 und 2

Die Schädigung in diesem Bereich führt schließlich zu einem allmählichen Auseinanderbrechen des Balkens, wobei sich das linke Balkenende wieder absenkt. Dadurch werden die beiden kleineren Schädigungsbereiche am unteren und oberen Balkenrand inaktiv (Zustand 3). Außerhalb des aktiven Schädigungsbandes, das nun infolge Biegezug senkrecht auf die rechte Lastplatte gerichtet anwächst, entlastet das System elastisch (Zustand 4).

Dieses Systemverhalten wird auch von Schlangen (1993) berichtet und ist in Übereinstimmung mit den numerischen Untersuchungen von Peerlings (1999) und Leukart (2005).

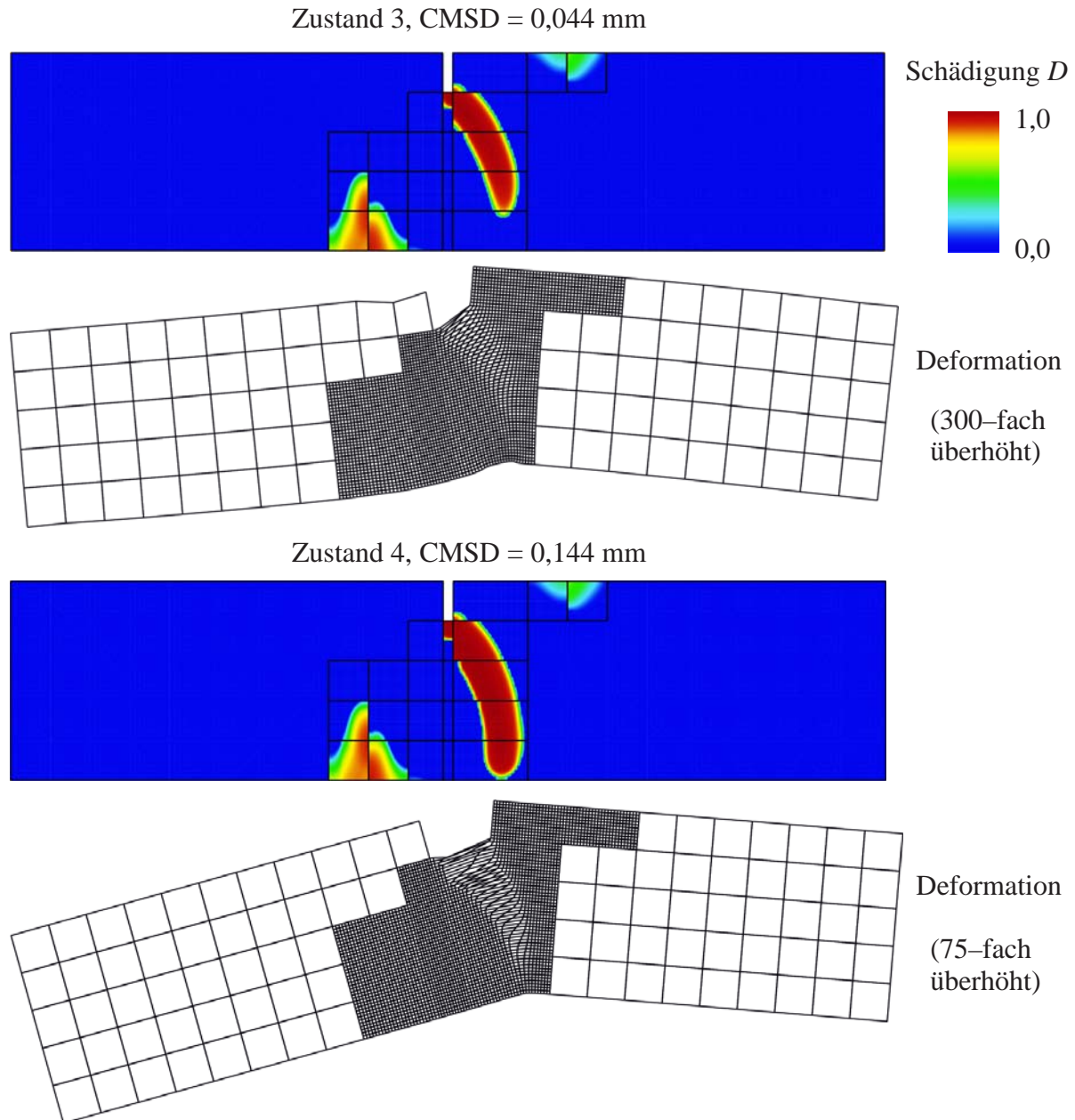


Bild 7.13: Schädigung und Deformation des Vierpunkt-Biegebalkens in den Zuständen 3 und 4

In den Bildern 7.12 und 7.13 fallen gewisse Diskontinuitäten im Schädigungsverlauf an den Kopplungsrändern in Ω' ins Auge. Diese treten insbesondere dort auf, wo die Schädigung nahezu parallel zum Kopplungsrand verläuft, d.h. im Schädigungsbereich am unteren Balkenrand, sowie im maßgeblichen Schädigungsband, das von der Kerbe ausgeht, in der Umgebung der Kerbe. Die Ursache dieses in Abschnitt 6.1.3 beschriebenen Phänomens ist die vereinfachende Annahme homogener Randbedingungen für die nichtlokale Verzerrung $\tilde{\epsilon}_{v,n} = \mathbf{0}$ auf den Kopplungsrändern. Diese Diskontinuitäten im Schädigungsverlauf führen jedoch zu keiner nennenswerten Beeinträchtigung des globalen Verhaltens.

An den Deformationszuständen ist zu erkennen, dass sich die Lokalisierung über mehrere Elementreihen erstreckt, d.h. die Feinskalendiskretisierung ist ausreichend fein für die regularisierende Wirkung der Gradientenerweiterung.

Bild 7.14 zeigt die Gegenüberstellung der experimentell beobachteten Risspfade und des Schädigungsverlaufs der numerischen Berechnung mit dem Zweiskalenmodell. Diese sind offensichtlich in guter Übereinstimmung.

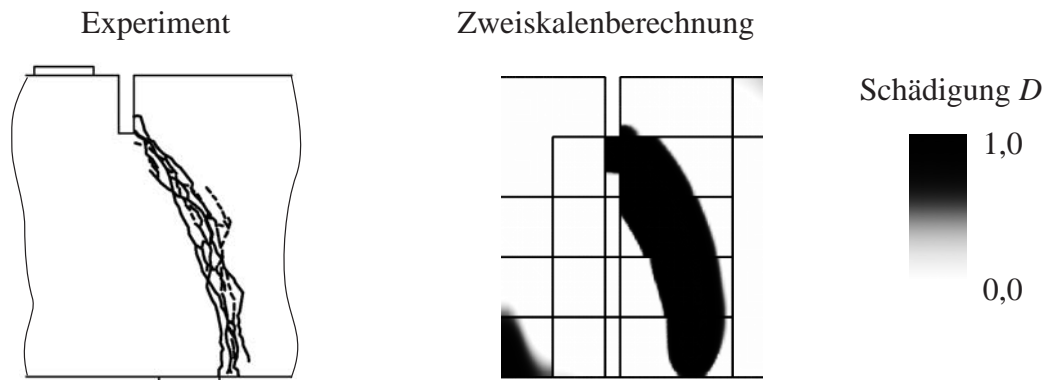


Bild 7.14: Vergleich der experimentellen Rissmuster mit dem Schädigungsverlauf der numerischen Simulation

Anhand dieses Benchmarkbeispiels sollte das in dieser Arbeit entwickelte hierarchische Zweiskalenmodell im Vergleich mit experimentellen Ergebnissen kontrolliert werden. Die numerischen Ergebnisse zeigen hierbei eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen.

8 Zusammenfassung und Ausblick

8.1 Zusammenfassung

Mit dem hierarchischen Zweiskalenmodell wurde ein Verfahren zur effizienten Analyse strukturelle Probleme mit Mehrskaleneigenschaften und entfestigendem Materialverhalten vorgestellt. Die mathematische Formulierung des Zweiskalenmodells und seine algorithmische Umsetzung hängen dabei eng zusammen. So stellt die Methode gleichzeitig ein mechanisch motiviertes, effizientes und robustes Lösungsverfahren dar.

Das Verhalten der einzelnen Materialkomponenten auf der Feinskala und deren Interaktion können durch den *volumenverbindenden Skalenübergang* bis in den entfestigenden Beanspruchungsbereich – wenn die Skalenunterschiede durch lokalisierendes Materialverhalten relativ klein werden – detailliert berücksichtigt werden. Dieser volumenverbindende Skalenübergang wurde durch hierarchisches Anreichern der grobskaligen Lösung erreicht. Dabei setzt sich die Gesamtlösung additiv aus dem grob- und feinskaligen Lösungsanteil zusammen.

Das hierarchische Aufspalten der Lösung unterstützt gleichzeitig den räumlich begrenzten Einsatz des volumenverbindenden Skalenübergangs. Zur Steigerung der Effizienz wurde ein verzerrungsbasiertes Kriterium zur *adaptiven Anpassung des Zweiskalenbereichs* während des Belastungsvorgangs vorgeschlagen. Die Modellierung auf zwei Skalen ist damit auf die Bereiche konzentrierter Beanspruchung beschränkt, in denen die feinskaligen Vorgänge und das grobskalige Strukturverhalten einander stark beeinflussen. In weniger intensiv beanspruchten Bereichen wurde dagegen eine grobskalige Modellierung unter Verwendung homogener Materialmodelle vorgesehen.

Die Formulierung der hierarchischen Zweiskalenmethode wurde exemplarisch für die Anwendung auf homogene und faserverstärkte Reibungsmaterialien eingeführt, wobei für das Matrix- und Fasermaterial jeweils ein gradientenerweitertes Schädigungsmodell verwendet wurde. Die Delamination der Fasern vom Matrixmaterial wurde durch ein Kohäsivzonenmodell berücksichtigt.

Für praxisrelevante Problemstellungen führt die diskrete Formulierung des hierarchischen Zweiskalenmodells auf sehr große Gleichungssysteme. Deshalb ist eine effiziente Lösungsstrategie von entscheidender Bedeutung. Besonderes Augenmerk wurde hierbei auf die Lösung der Feinskalengleichungen gerichtet, da die Anzahl der Feinskalenfreiheitsgrade im Allgemeinen die der Grobskalenfreiheitsgrade bei weitem übersteigt. Durch das *Einführen eines lokalen Trägers* für die feinskaligen Variablen konnte ein äußerst effizientes Lösungsverfahren bereitgestellt werden, bei dem die Feinskalengleichungen zu lokalen, unabhängigen Gleichungen entkoppeln; trotzdem kann der notwendige volumenverbindende Skalentransfer stattfinden.

Um der starken Kopplung zwischen den Skalen gerecht zu werden, wurde ein *simultaner Lösungsalgorithmus* der skalenkoppelnden Gleichungen vorgesehen, der durch statische Kondens-

sation der feinskaligen Variablen in den einzelnen Grobskalenelementen realisiert wurde. Die statische Kondensation reichert die Grobskalengleichungen um die Effekte der feinen Skala an. Nach Lösung des erweiterten globalen Grobskalenproblems kann die Rückrechnung zu den feinskaligen Variablen lokal vorgenommen werden.

Die Lokalitätsannahme erfordert die Formulierung von geeigneten *Nebenbedingungen* für die feinskaligen Variablen. Da das Zweiskalenmodell in dieser Arbeit auf einer Verschiebungsformulierung basiert, wurden ausschließlich Nebenbedingungen an die feinskaligen Verschiebungen in Betracht gezogen. Gezielte Untersuchungen zeigten, dass die Verwendung der Übergangsbedingung $[\mathbf{u}'] = \mathbf{0}$ im Zusammenhang mit lokalisierendem, entfestigendem Werkstoffverhalten unverzichtbar ist. Vereinfachende Annahmen, die vom Standpunkt der Effizienz der Übergangsbedingung möglicherweise überlegen wären und deshalb in anderen Bereichen, z.B. der turbulenten Fluidodynamik, untersucht wurden, erwiesen sich als ungeeignet.

Zur Erfüllung dieser Übergangsbedingung wurden vergleichend die Methode der Lagrange-Multiplikatoren, die Strafterm-Methode und die erweiterte Methode der Lagrange-Multiplikatoren getestet. Für die beiden Letzteren war es notwendig, ein gestaffeltes Lösungsverfahren einzuführen, um die Lokalität der Feinskalenvariablen aufrecht erhalten zu können. Die Konvergenzeigenschaften dieses gestaffelten Lösungsalgorithmus' konnten durch die Entwicklung eines *extrapolationsbasierten Beschleunigungsverfahrens* deutlich verbessert werden.

Durch vergleichende Untersuchungen konnte festgestellt werden, dass im Rahmen des hierarchischen Zweiskalenmodells die Lagrange- und die Strafterm-Methode der erweiterten Lagrange-Methode bezüglich des numerischen Aufwands überlegen sind. Darüber hinaus erwies sich die Lagrange-Methode als robuster und geringfügig genauer als die Strafterm-Methode. Dafür ist vom Standpunkt der Effizienz die Strafterm-Methode der Lagrange-Methode im Allgemeinen überlegen. Vergleiche mit entsprechenden Referenzlösungen zeigten, dass mit beiden Methoden gute Ergebnisse erzielt werden können. Voraussetzung hierfür ist die Wahl eines adäquaten Strafterm-Parameters ϵ bzw. eine geeignete Diskretisierung des Lagrange-Multiplikators λ , mit jeweils gleicher Anzahl an Freiheitsgraden für λ und die feinskaligen Verschiebungen \mathbf{u}' auf den Kopplungsrändern.

Anhand mehrerer Anwendungsbeispiele konnte das Potential des vorgestellten hierarchischen Zweiskalenmodells hinsichtlich Genauigkeit und Effizienz, sowie seine Flexibilität gegenüber der Verwendung unterschiedlicher kontinuierlicher bzw. diskreter Modelle auf der Feinskala aufgezeigt werden.

8.2 Ausblick

Die Annahme eines lokalen Trägers für die feinskaligen Variablen hat sich als Maßnahme zur effizienten Lösung des skalenkoppelnden Gleichungssystems bewährt. Im Zusammenhang mit dieser Annahme wäre die Analyse bzw. Umsetzung folgender Details von Interesse.

Durch die kontinuierliche Formulierung der Übergangsbedingung $[\mathbf{u}'] = \mathbf{0}$ nach Gleichung (5.11) sind beliebige, nichtkompatible Diskretisierungen der Feinskalenvariablen auf den Kopp-

lungsrändern möglich. Die Umsetzung dieser Möglichkeit steht jedoch noch aus. Darüber hinaus wäre es für die Flexibilität des Zweiskalenmodells interessant, den lokalen Träger nicht zwingend grobskalenelementweise zu beschränken, sondern ihn auch über mehrere Grobskalenelemente ausdehnen zu können.

Die kontinuumsmechanische Formulierung wurde durch Gradientenerweiterung regularisiert. Hierbei wurde die nichtlokale Verzerrung als feinskalige Variable mit lokalem Träger eingeführt. Als Nebenbedingung für die nichtlokale Verzerrung wurde in dieser Arbeit der Einfachheit halber und in der Absicht, den numerischen Aufwand möglichst gering zu halten, die homogene Randbedingung $\tilde{\varepsilon}_{v,n} = \mathbf{0}$ auf den Kopplungsrändern verwendet. Diese Annahme ist für viele Anwendungen ausreichend. Damit jedoch auch für den Sonderfall paralleler Risse entlang Grobskalenelementrändern eine hohe Genauigkeit der Lösung gewährleistet werden kann, ist die Umsetzung genauerer Nebenbedingungen notwendig, beispielsweise in Form der Übergangsbedingung $[\tilde{\varepsilon}_v] = 0$ auf Γ_{ms} .

Im Rahmen der vorgestellten Verschiebungsformulierung wurden ausschließlich Verschiebungsnebenbedingungen auf den Kopplungsrändern analysiert. Es wäre interessant zu untersuchen, inwiefern die Genauigkeit des Modells durch die Forderung von Verschiebungskontinuität und Gleichgewicht auf den Kopplungsrändern im Kontext einer gemischten Formulierung gesteigert werden könnte, und ob sich dieser Mehraufwand lohnt.

Im Zusammenhang mit der nichtkonsistenten Linearisierung der Nebenbedingungsterme der Strafterm- und erweiterten Lagrange-Methode wurde ein extrapolationsbasiertes Beschleunigungsverfahren vorgeschlagen. Hierbei wurde bei Verwendung höherer Extrapolationsordnungen die Tendenz zur Instabilität beobachtet. Eine theoretische Begründung für diesen Effekt steht noch aus.

Die Umsetzung des hierarchischen Zweiskalenmodells ist bislang auf die zweidimensionalen Sonderfälle des ebenen Spannungs- bzw. Verzerrungszustands beschränkt. Für praxisrelevante Anwendungen wäre die Erweiterung auf die dritte Dimension wünschenswert. Das prinzipielle Konzept des Zweiskalenmodells bleibt von dieser Erweiterung unberührt. Die Lokalitätsannahme zieht im Dreidimensionalen jedoch die Notwendigkeit von Übergangsbedingungen an *Kopplungsflächen* nach sich. Während mit kontinuierlichen Rissmodellen, wie dem verwendeten Schädigungsmodell, die Erweiterung auf dreidimensionale Probleme einfach und unproblematisch ist, stellt die Formulierung und Umsetzung diskreter Rissmodelle im Dreidimensionalen eine Herausforderung dar.

Durch Erweiterung der Formulierung auf große Deformationen und die Berücksichtigung dynamischer Effekte könnte der Anwendungsbereich des Zweiskalenmodells ausgedehnt werden. Ein interessantes Anwendungsfeld für das hierarchische Zweiskalenmodell sind Fragestellungen aus dem Bereich der Optimierung mikroheterogener Werkstoffe, z.B. die Optimierung des Materialdesigns auf der Feinskala für spezielle Struktureigenschaften.

Literatur

- Aitken, A.C. (1937):** ‘Studies in Practical Mathematics. II. The Evaluation of the Latent Roots and Latent Vectors of a Matrix’, *II Proceedings of the Royal Society of Edinburgh*, **57**, 269–304.
- Allix, O. (2002):** ‘Interface Damage Mechanics: Application to Delamination’, in: *Continuum Damage Mechanics of Materials and Structures*, O. Allix, F. Hild (eds.), Elsevier, Amsterdam, 295–324.
- Allix, O., Ladevèze, P. (1992):** ‘Interlaminar Interface Modeling for the Prediction of Delamination’, *Composite Structures*, **22**, 235–242.
- Argyris, J.H. (1960):** *Energy Theorems and Structural Analysis*. Butterworth, London.
- Askes, H., Pamin, J., de Borst, R. (2000):** ‘Dispersion Analysis and Element-Free Galerkin Solutions of Second- and Fourth-Order Gradient-Enhanced Damage Models’, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **49**, 811–832.
- Babuska, I. (1973):** ‘The Finite Element Method with Lagrangian Multipliers’, *Numerische Mathematik*, **20**, 179–192.
- Babuska, J., Melenk, J. (1997):** ‘The Partition of Unity Method’, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **40**, 727–758.
- Bathe, K.-J. (2002):** *Finite Elemente Methoden*. 2. Auflage, Springer Verlag, Berlin.
- Bayreuther, C.G. (2004):** *Mehrskalmodelle in der Festkörpermechanik und Kopplung von Mehrgittermethoden mit Homogenisierungsverfahren*. Dissertation, Institut für Mechanik (Bauwesen), Universität Stuttgart, Deutschland.
- Bazant, Z.P. (1976):** ‘Instability, Ductility and Size Effect in Strain Softening Concrete’, *ASCE Journal of the Engineering Mechanics Division*, **102**, 331–344.
- Bazant, Z.P., Oh, B.H. (1983):** ‘Crack Band Theory for Fracture of Concrete’, *RILEM Materials & Structures*, **16**, 155–177.
- Belytschko, T., Bazant, Z.P., Hyun, Y.W., Chang, T.P. (1986):** ‘Strain-Softening Materials and Finite Element Solutions’, *Computers & Structures*, **23**, 163–180.
- Belytschko, T., Fish, J., Bayliss, A. (1990):** ‘The Spectral Overlay on Finite Elements for Problems with high Gradients’, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **81**, 71–89.
- Belytschko, T., Liu, W.K., Moran, B. (2000):** *Nonlinear Finite Elements for Continua and Structures*. John Wiley & Sons, Chichester.
- Belytschko, T., Xiao, S.P. (2003):** ‘Coupling Methods for Continuum Model with Molecular Model’, *International Journal for Multiscale Computational Engineering*, **1**, 115–126.
- Bernardi, C., Maday, Y., Patera, A.T. (1994):** ‘A New Nonconforming Approach to Domain Decomposition: The Mortar Element Method’, in: *Nonlinear Partial Differential Equations and Their Applications*, H. Brezis, D. Cioranescu, J.L. Lions (eds.), Longman Publishing Group, Boston, 13–51.
- Bertsekas, D.P. (1984):** *Constraint Optimization and Lagrange Multiplier Methods*. Academic Press, New York.
- Braess, D. (1997):** *Finite Elemente – Theorie, schnelle Löser und Anwendungen in der Elastizitätstheorie*. Springer Verlag, Berlin.

- Brezina, M. (1997):** *Robust Iterative Methods on Unstructured Meshes*. Ph.D.–Thesis, University of Colorado at Denver, Colorado, US.
- Brezzi, F. (2000):** 'Interacting with the subgrid world', in: *Numerical Analysis 1999*, D.F. Griffiths, G.A. Watson (eds.), Chapman & Hall/CRC, Boca Raton, 69–82.
- Brezzi, F., Fortin, M. (1991):** *Mixed and Hybrid Finite Element Methods*, Springer Series in Computational Mathematics Band 15. Springer Verlag, Berlin.
- Brezzi, F., Franca, L.P., Hughes, T.J.R., Russo, A. (1997):** ' $\mathbf{b} = \int \mathbf{g}$ ', *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **145**, 329–339.
- Briggs, W.L., Henson, V.E., Mc Cormick, S.F. (2000):** *A Multigrid Tutorial, Second Edition*. Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), Philadelphia.
- Chaboche, J.L., Girard, R., Levasseur, P. (1997):** 'On the Interface Debonding Models', *International Journal of Damage Mechanics*, **6**, 220–257.
- Chaboche, J.L., Girard, R., Schaff, A. (1997):** 'Numerical Analysis of Composite Systems by Using Interphase/Interface models', *Computational Mechanics*, **20**, 3–11.
- Chawla, K.K. (1998):** *Composite Materials*. Springer Verlag, Berlin.
- Chen, Z., Hou, T.Y. (2002):** 'A Mixed Multiscale Finite Element Method for Elliptic Problems with Oscillating Coefficients', *Mathematics of Computation*, **72**, 541–576.
- Clough, R.W. (1965):** 'The Finite Element Method in Structural Mechanics', in: *Stress Analysis: Recent Developments in Numerical and Experimental Methods*, O.C. Zienkiewicz, S. Holister (eds.), John Wiley & Sons, Chichester, 85–119.
- Davis, T.A. (2005):** 'Umfpack Version 4.6 User Guide', Report, Department of Computer and Information Science and Engineering, University of Florida, Gainesville, <http://www.cise.ufl.edu/research/sparse/umfpack/>.
- Davis, T.A., Duff, I.S. (1999):** 'A Combined Unifrontal / Multifrontal Method for Unsymmetric Sparse Matrices', *ACM Transactions on Mathematical Software*, **25**, 1–20.
- de Borst, R. (1986):** *Non-linear Analysis of Frictional Materials*. Ph.D.–Thesis, Technische Universität Delft, Nederlande.
- de Borst, R. (1991):** 'The Zero–Normal–Stress Condition in Plane–Stress and Shell Elastoplasticity', *Communications in Applied Numerical Methods*, **7**, 29–33.
- de Borst, R. (2004):** 'Damage, Material Instabilities and Failure', in: *Encyclopedia of Computational Mechanics Vol. 2: Solids and Structures*, E. Stein, R. de Borst, T.J.R. Hughes (eds.), John Wiley & Sons, Chichester, 335–374.
- de Borst, R., Sluys, L.J., Mühlhaus, H.–B., Pamin, J. (1993):** 'Fundamental Issues in Finite Element Analysis of Localization of Deformation', *Engineering Computations*, **10**, 99–122.
- de Vree, J.H.P., Brekelmans, W.A.M., van Gils, M.A.J. (1995):** 'Comparison of Nonlocal Approaches in Continuum Damage Mechanics', *Computers & Structures*, **55**, 581–588.
- Döbert, C. (2001):** *Meso–Makromechanische Modellierung von Faserverbundwerkstoffen mit Schädigung*. Dissertation, F 01/3, Institut für Baumechanik und Numerische Mechanik, Universität Hannover, Deutschland.

- Döbert, C., Mahnken, R., Stein, E. (2000):** ‘Numerical Simulation of Interface Debonding with a Combined Damage/Friction Constitutive Model’, *Computational Mechanics*, **25**, 456–467.
- Elwi, A.E., Hruday, T.M. (1989):** ‘Finite Element Model for Curved Embedded Reinforcement’, *Journal of Engineering Mechanics ASCE*, **115**, 740–754.
- Eshelby, J.D. (1957):** ‘The Determination of the Elastic Field of an Ellipsoidal Inclusion and Related Problems’, *Proceedings of the Royal Society of London Series A – Mathematical and Physical Sciences*, **241**, 367–396.
- Farhat, C., Chen, P.–S., Risler, F., Roux, F.–X. (1998):** ‘A Unified Framework for Accelerating the Convergence of Iterative Substructuring Methods with Lagrange Multipliers’, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **42**, 257–288.
- Farhat, C., Harari, I., Franca, L.P. (2001):** ‘The Discontinuous Enrichment Method’, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **190**, 6455–6479.
- Farhat, C., Harari, I., Hetmaniuk, U. (2003):** ‘The Discontinuous Enrichment Method for Multiscale Analysis’, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **192**, 3195–3209.
- Farhat, C., Roux, F.–X. (1991):** ‘A Method of Finite Element Tearing and Interconnecting and its Parallel Solution Algorithm’, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **32**, 1205–1227.
- Fedorenko, R.P. (1964):** ‘The Speed of Convergence of one Iterative Process’, *USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics*, **4**, 227–235.
- Felippa, C.A. (1994):** ‘A Survey of Parametrized Variational Principles and Applications to Computational Mechanics’, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **113**, 109–139.
- Fish, J. (1992):** ‘The s–Version of the Finite Element Method’, *Computers & Structures*, **43**, 539–547.
- Fish, J., Belsky, V. (1995a):** ‘Multigrid Method for Periodic Heterogeneous Media Part 1: Convergence Studies For One–Dimensional Case’, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **126**, 1–16.
- Fish, J., Belsky, V. (1995b):** ‘Multigrid Method for Periodic Heterogeneous Media Part 2: Multiscale Modeling and Quality Control in Multidimensional Case’, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **126**, 17–38.
- Fish, J., Chen, W. (2004):** ‘Discrete–to–Continuum Bridging Based on Multigrid Principles’, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **193**, 1693–1711.
- Fish, J., Markolefas, S. (1993):** ‘Adaptive S–Method for Linear Elastostatics’, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **104**, 363–396.
- Fish, J., Shek, K. (2000):** ‘Multiscale Analysis of Large Scale Nonlinear Structures and Materials’, *International Journal for Computational Civil and Structural Engineering*, **1**, 79–90.
- Fish, J., Shek, K., Pandheeradi, M., Shephard, M. S. (1997):** ‘Computational Plasticity for Composite Structures Based on Mathematical Homogenization: Theory and Practice’, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **148**, 53–73.
- Förster, C., Wall, W.A., Ramm, E. (2006):** ‘Artificial Added Mass Instabilities in Sequential Staggered Coupling of Nonlinear Structures and Incompressible Flows’, accepted in *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*.
- Franca, L.P., Madureira, A.L., Valentin, F. (2005):** ‘Towards Multiscale Functions: Enriching Finite Element Spaces with Local but not Bubble – Like Functions’, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **194**, 3006–3021.

- Franca, L.P., Russo, A. (1996):** ‘Approximation of the Stokes Problem by Residual–Free Macro Bubbles’, *East–West Journal of Numerical Mathematics*, **4**, 265–278.
- Garikipati, K. (1996):** *On Strong Discontinuities in Inelastic Solids and their Numerical Simulation*. Ph.D.–Thesis, Department of Aeronautics and Astronautics, Stanford University, US.
- Garikipati, K. (2002):** ‘A Variational Multiscale Method to Embed Micromechanical Surface Laws in the Macromechanical Continuum Formulation’, *Computer Modeling in Engineering and Sciences*, **3**, 175–184.
- Garikipati, K. (2003):** ‘Variational Multiscale Methods to Embed the Macromechanical Continuum Formulation with Fine–Scale Strain Gradient Theories’, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **57**, 1283–1298.
- Garikipati, K., Hughes, T.J.R. (1998):** ‘A Study of Strain Localization in a Multiple Scale Framework – The One – Dimensional Problem’, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **159**, 193–222.
- Garikipati, K., Hughes, T.J.R. (2000):** ‘A Variational Multiscale Approach to Strain Localization – Formulation for Multidimensional Problems’, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **188**, 39–60.
- Gee, M. (2004):** *Effiziente Lösungsstrategien in der Nichtlinearen Schalenmechanik*. Dissertation, Bericht Nr. 43, Institut für Baustatik, Universität Stuttgart, Deutschland.
- Geers, M.G.D. (1997):** *Experimental Analysis and Computational Modelling of Damage and Fracture*. Ph.D.–Thesis, Technische Universität Eindhoven, Niederlande.
- Gitman, I.M. (2006):** *Representative Volumes and Multi–Scale Modelling of Quasi–Brittle Materials*. Ph.D.–Thesis, Technische Universität Delft, Niederlande.
- Golub, G.H., van Loan, C.F. (1986):** *Matrix Computations*. North Oxford Academic Publishing, London.
- Gosh, S., Lee, K., Moorthy, S. (1996):** ‘Two–Scale Analysis of Heterogeneous Elastic–Plastic Materials with Asymptotic Homogenization and Voronoi Cell Finite Elements’, *Computer Methods of Applied Mechanics and Engineering*, **132**, 63–116.
- Gravemeier, V. (2003):** *The Variational Multiscale Method for Laminar and Turbulent Incompressible Flow*. Dissertation, Bericht Nr. 40, Institut für Baustatik, Universität Stuttgart, Deutschland.
- Gravemeier, V. (2006):** ‘Scale–Separating Operators for Variational Multiscale Large Eddy Simulation of Turbulent Flows’, *Journal of Computational Physics*, **212**, 400–435.
- Gravemeier, V., Wall, W.A., Ramm, E. (2004):** ‘A Three–Level Finite Element Method for the Instationary Incompressible Navier–Stokes Equations’, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **193**, 1323–1366.
- Guedes, J.M., Kikuchi, N. (1990):** ‘Preprocessing and Postprocessing for Materials based on the Homogenization Method with Adaptive Finite Element Methods’, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **83**, 143–198.
- Haidar, K., Dubé, J.F., Pijaudier–Cabot, G. (2003):** ‘Modeling Crack Propagation in Concrete Structures with a Two Scale Approach’, *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, **27**, 1187–1205.
- Hackbusch, W. (1985):** *Multi–Grid Methods and Applications*. Springer Verlag, Berlin.
- Hackbusch, W. (1993):** *Iterative Lösung großer schwachbesetzter Gleichungssysteme*. B. G. Teubner, Stuttgart.

- Hackbusch (2004):** ‘Multigrid Methods for FEM and BEM Applications’, in: *Encyclopedia of Computational Mechanics Vol. 1: Fundamentals*, E. Stein, R. de Borst, T.J.R. Hughes (eds.), John Wiley & Sons, Chichester, 577–596.
- Halbeisen, M., Schiff, H. (2004):** ‘Surface Micro– and Nanostructuring of Textile Fibers’, *Chemical Fibers International*, **54**, 378–399.
- Halpin, J.C., Kardos, J.L. (1976):** ‘Halpin–Tsai Equations – Review’, *Journal of Polymer Engineering and Science*, **16**, 344–352.
- Hashagen, F. (1998):** *Numerical Analysis of Failure Mechanisms in Fibre Metal Laminates*. Ph.D.–Thesis, Technische Universität Delft, Niederlande.
- Hashin, Z. (1983):** ‘Analysis of Composite Materials – a Survey’, *Journal of Applied Mechanics*, **50**, 481–505.
- Hashin, Z., Shtrikman, S. (1962):** ‘A Variational Approach to the Theory of the Elastic Behaviour of Polycrystals’, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **10**, 343–352.
- Hashin, Z., Shtrikman, S. (1963):** ‘A Variational Approach to the Theory of the Elastic Behaviour of Multiphase Materials’, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **11**, 127–140.
- Hegger, J., Will, N., Molter, M., Littwin, R. (2002):** ‘Bruch– und Rissverhalten von textilbewehrtem Beton’, *Bautechnik*, **79**, 268–271.
- Herakovich, C.T. (1998):** *Mechanics of Fibrous Composites*. John Wiley & Sons, New York.
- Hettich, T. (2007):** *Diskontinuierliche Modellierung zur Versagensanalyse von Verbundmaterialien*. Dissertation, Institut für Baustatik, Universität Stuttgart, Deutschland.
- Hettich, T., Hund, A., Ramm, E. (2006):** ‘Modeling of Failure in Composites by X–FEM and Level Sets within a Multiscale Framework’, accepted in *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*.
- Hettich, T., Ramm, E. (2006):** ‘Interface Material Failure Modeled by the Extended Finite Element Method and Level Sets’, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **195**, 4753–4767.
- Hill, R. (1952):**, ‘The Elastic Behaviour of a Crystalline Aggregate’, *Proceedings of the Physical Society of London A*, **65**, 349–355.
- Hill, R. (1962):** ‘Acceleration Waves in Solids’, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **10**, 1–16.
- Hill, R. (1963):** ‘Elastic Properties of Reinforced Solids’, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **11**, 357–372.
- Hill, R. (1972):** ‘Constitutive Macro–Variables for Heterogeneous Solids at Finite Strains’, *Proceedings of the Royal Society of London A – Mathematical and Physical Sciences*, **326**, 131–147.
- Hörmann, M. (2002):** *Nichtlineare Versagensanalyse von Faserverbundwerkstoffen*. Dissertation, Bericht Nr. 39, Institut für Baustatik, Universität Stuttgart, Deutschland.
- Hori, M., Nemat–Nasser, S. (1999):** ‘On Two Micromechanics Theories for Determining Micro–Macro Relations in Heterogeneous Solids’, *Mechanics of Materials*, **31**, 667–682.
- Hou, T.Y., Wu, X.–H. (1997):** ‘A Multiscale Finite Element Method for Elliptic Problems in Composite Materials and Porous Media’, *Journal of Computational Physics*, **134**, 169–189.
- Hübner, S., Wohlmuth, B. (2005):** ‘A Primal–Dual Active Set Strategy for Nonlinear Multibody Contact Problems’, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **194**, 3147–3166.

- Huet, C. (1990):** ‘Application of Variational Concepts to Size Effects in Elastic Heterogeneous Bodies’, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **38**, 813–841.
- Hughes, T.J.R. (1995):** ‘Multiscale Phenomena: Green’s Functions, the Dirichlet–to–Neumann Formulation, Subgrid Scale Models, Bubbles and the Origins of Stabilized Methods’, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **127**, 387–401.
- Hughes, T.J.R. (2000):** *The Finite Element Method*. Dover Publications, Mineola.
- Hughes, T.J.R., Feijóo, G.R., Mazzei, L., Quincy, J.–B. (1998):** ‘The Variational Multiscale Method – a Paradigm for Computational Mechanics’, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **166**, 3–24.
- Hund, A., Ramm, E. (2005):** ‘Application of the Variational Multiscale Method to Damage of Composites’, in: *Proceedings of the 11th International Conference on Fracture*, A. Carpinteri (ed.), Turin, Italy.
- Hund, A., Ramm, E. (2006):** ‘Locality Constraints within Multiscale Model for Nonlinear Material Behaviour’, accepted in *International Journal for Numerical Methods in Engineering*.
- Ibrahimbegovic, A., Markovic, D. (2003):** ‘Strong Coupling Methods in Multi–Phase and Multi–Scale Modeling of Inelastic Behaviour of Heterogeneous Structures’, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **192**, 3089–3107.
- Irons, B., Tuck, R.C. (1969):** ‘A version of the Aitken Accelerator for Computer Implementation’, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **1**, 275–277.
- Jirásek, M., Bazant, Z.P. (2002):** *Inelastic Analysis of Structures*. John Wiley & Sons, Chichester.
- Jirásek, M., Belytschko, T. (2002):** ‘Computational Resolution of Strong Discontinuities’, in: *Proceedings of the WCCM V*, H.A. Mang, E.G. Rammerstorfer, J. Eberhardsteiner (eds.), Vienna, Austria.
- Ju, J.W. (1991):** ‘Isotropic and Anisotropic Damage Variables in Continuum Damage Mechanics’, *Journal of Engineering Mechanics*, **116**, 2764–2770.
- Kachanov, L.M. (1958):** ‘On creep rupture time’, *Izvestiya Akademii Nauk SSSR*, **8**, 26–31.
- Kadowaki, H., Liu, W.K. (2004):** ‘Bridging Multi–Scale Method for Localization Problems’, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **193**, 3267–3302.
- Karihaloo, B., Xiao, Q. (2003):** ‘Modelling of Stationary and Growing Cracks in FE Framework without Remeshing’, *Computers & Structures*, **81**, 119–129.
- Kemmler, R., Ramm, E. (2001):** ‘Modellierung mit der Methode der Finiten Elemente’, in: *Betonkalender 2001*, J. Eibl (ed.), Ernst & Sohn Verlag, Berlin, 143–208.
- Könke, C., Eckardt, S., Häfner, S., Luther, M. (2005):** ‘Multiscale Methods for Simulating the Damage Behaviour of Concrete Structures’, in: *Proceedings of the 5th International Conference on Computation of Shell and Spatial Structures*, E. Ramm, W.A. Wall, K.–U. Bletzinger, M. Bischoff (eds.), Salzburg, Austria.
- Korneev, V.G., Langer, U. (2004):** ‘Domain Decomposition Methods and Preconditioning’, in: *Encyclopedia of Computational Mechanics Vol. 1: Fundamentals*, E. Stein, R. de Borst, T.J.R. Hughes (eds.), John Wiley & Sons, Chichester, 617–648.
- Kouznetsova, V.G. (2002):** *Computational Homogenization for the Multi–Scale Analysis of Multi–Phase Materials*. Ph.D.–Thesis, Technische Universität Eindhoven, Niederlande.

- Krajcinovic, D. (1996):** *Damage Mechanics*. Elsevier, Amsterdam.
- Krause, R., Rank, E. (2003):** ‘Multiscale Computations with a Combination of the h- and p- Versions of the Finite-Element Method’, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **192**, 3959–3983.
- Kröner, E. (1967):** ‘Elasticity Theory of Materials with Long Range Cohesive Forces’, *International Journal of Solids & Structures*, **3**, 731–742.
- Krongauz, Y., Belytschko, T. (1998):** ‘EFG Approximation with Discontinuous Derivatives’, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **41**, 1215–1233.
- Krüger, M., Reinhardt, H.-W. (2004):** ‘Vorgespannte Bauteile aus textildbewehrtem Beton’, *Beton- und Stahlbetonbau*, **99**, 472–475.
- Kuhl, E. (2000):** *Numerische Modelle für kohäsive Reibungsmaterialien*. Dissertation, Bericht Nr. 32, Institut für Baustatik, Universität Stuttgart, Deutschland.
- Ladevèze, P. (1999):** *Nonlinear Computational Structural Mechanics*. Springer Verlag, Berlin.
- Ladevèze, P. (2004):** ‘Multiscale Modelling and Computational Strategies for Composites’, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **60**, 233–253.
- Ladevèze, P., Loiseau, O., Dureisseix, D. (2001):** ‘A Micro-Macro and Parallel Computational Strategy for Highly Heterogenous Structures’, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **52**, 121–138.
- Lagrange, J.-L. (1788):** *Mécanique Analytiques*. (1965 Edition Complète, 2 vols. Blanchard, Paris).
- Larsson, R., Runesson, K., Ottosen, N.S. (1993):** ‘Discontinuous Displacement Approximation for Capturing Plastic Localization’, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **36**, 2087–2105.
- Lasry, D., Belytschko, T. (1988):** ‘Localization Limiters in Transient Problems’, *International Journal of Solids & Structures*, **24**, 581–597.
- Lemaitre, J. (1996):** *A Course on Damage Mechanics*. Springer Verlag, Berlin.
- Lemaitre, J. (2002):** ‘Introduction to Continuum Damage Mechanics’, in: *Continuum Damage Mechanics of Materials and Structures*, O. Allix, F. Hild (eds.), Elsevier, Amsterdam, 235–258.
- Lemaitre, J., Chaboche, J.-L. (1990):** *Mechanics of Solid Materials*. Cambridge University Press.
- Le Tallec, P. (1994):** ‘Domain Decomposition Methods in Computational Mechanics’, *Computational Mechanics Advances*, **1**, 121–220.
- Leukart, M. (2005):** *Kombinierte anisotrope Schädigung und Plastizität bei kohäsiven Reibungsmaterialien*. Dissertation, Bericht Nr. 45, Institut für Baustatik, Universität Stuttgart, Deutschland.
- Liu, W.K., Hao, S., Belytschko, T., Li, S.F., Chang, C.T. (1999):** ‘Multiple Scale Meshfree Methods for Damage, Fracture and Localization’, *Computational Materials Science*, **16**, 197–205.
- Liu, W.K., Park, H.S., Qian, D., Karpov, E.G., Kadowaki, H., Wagner, G.J. (2006):** ‘Bridging Scale Methods for Nanomechanics and Materials’, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **195**, 1407–1421.
- Löhnert, S. (2004):** *Computational Homogenization of Microheterogeneous Materials at Finite Strains Including Damage*. Dissertation, Mitteilung Nr. 04/2, Institut für Baumechanik und Numerische Mechanik, Universität Hannover, Deutschland.

- Luenberger, D.G. (1984):** *Linear and Nonlinear Programming, 2nd edition.* Addison–Wesley Publishing Company, Reading.
- Malvern, L.E. (1969):** *Introduction to the Mechanics of a Continuous Medium.* Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey.
- Mao, K.M., Sun, C.T. (1991):** ‘A Refined Global – Local Finite Element Analysis Method’, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **32**, 29–43.
- Markovic, D., Ibrahimbegovic, A. (2004):** ‘On Micro–Macro Interface Conditions for Micro Scale Based FEM for Inelastic Behaviour of Heterogeneous Materials’, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **193**, 5503–5523.
- Markovic, D., Ibrahimbegovic, A. (2006):** ‘Complementary Energy Based FE Modelling of Coupled Elasto–Plastic and Damage Behaviour for Continuum Microstructure Computations’, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **195**, 5077–5093.
- Martha, L., Wawrzynek, P.A., Ingraffea, A.R. (1993):** ‘Arbitrary Crack Propagation Using Solid Modeling’, *Engineering with Computers*, **9**, 63–82.
- Masud, A. (2004):** ‘Stabilized Methods in Solid Mechanics’, in: *Finite Element Methods: 1970’s and Beyond*, L.P. Franca, T.E. Tezduyar, A. Masud (eds.), CIMNE, Barcelona, 172–187.
- Mazars, J., Pijaudier–Cabot, G. (1989):** ‘Continuum Damage Theory – Application to Concrete’, *Journal of Engineering Materials ASCE*, **115**, 345–365.
- Mc Devitt, T.W., Hulbert, G.M., Kikuchi, N. (2001):** ‘An Assumed Strain Method for the Dispersive Global–Local Modeling of Periodic Structures’, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **190**, 6425–6440.
- Meister, A. (2005):** *Numerik linearer Gleichungssysteme, 2. Auflage.* Vieweg, Wiesbaden.
- Meyberg, K., Vachenaue, P. (1997):**, *Höhere Mathematik 1, 4. Auflage.* Springer Verlag, Berlin.
- Michalowski, R., Mroz, Z. (1978):** ‘Associated and Non–associated Sliding Rules in Contact Friction Problems’, *Archives of Mechanics*, **30**, 259–276.
- Michel, J., Moulinec, H., Suquet, P. (2000):** ‘A Computational Method Based on Augmented Lagrangians and Fast Fourier Transforms for Composites with High Contrast’, *Computer Modeling in Engineering and Science*, **1**, 79–88.
- Michel, J.C., Suquet, P. (2003):** ‘Nonuniform Transformation Field Analysis’, *International Journal of Solids and Structures*, **40**, 6937–6955.
- Miehe, C. (1996):** ‘Numerical Computation of Algorithmic (Consistent) Tangent Moduli in Large–Strain Computational Inelasticity’, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **134**, 223–240.
- Miehe, C., Koch, A. (2002):** ‘Computational Micro–to–Macro Transitions of Discretized Microstructures Undergoing Small Strains’, *Archive of Applied Mechanics*. **72**, 300–317.
- Miehe, C., Schröder, J. (1994):** ‘Post–Critical Discontinuous Localization Analysis of Small–Strain Softening Elastoplastic Solids’, *Archive of Applied Mechanics*, **64**, 267–285.
- Miehe, C., Schröder, J., Bayreuther, C.G. (2002):** ‘On the Homogenization Analysis of Composite Materials Based on Discretized Fluctuations on the Micro–Structure’, *Acta Mechanica*, **155**, 1–16.

- Moës, N., Dolbow, J., Belytschko, T. (1999):** ‘A Finite Element Method for Crack Growth Without Remeshing’, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **46**, 131–150.
- Mok, D. (2001):** *Partitionierte Lösungsansätze in der Strukturmechanik und der Fluid–Struktur–Interaktion*. Dissertation, Bericht Nr. 36, Institut für Baustatik, Universität Stuttgart, Deutschland.
- Mori, T., Tanaka, K. (1973):** ‘Average Stress in Matrix and Average Elastic Energy of Materials with Misfitting Inclusions’, *Acta Metallurgica*, **21**, 571–574.
- Mosler, J. (2002):** *Finite Elemente mit sprungstetigen Abbildungen des Verschiebungsfeldes für numerische Analysen lokalisierter Versagenszustände in Tragwerken*. Dissertation, Mitteilung Nr. 130, Institut für Mechanik, Lehrstuhl für Statik und Dynamik, Ruhr–Universität Bochum, Deutschland.
- Mote, C.D. (1971):** ‘Global – Local Finite Element’, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **3**, 565–573.
- Mühlhaus, H.B. (1995):** *Continuum Models for Materials with Microstructure*. John Wiley & Sons, Chichester.
- Nemat–Nasser, S., Hori, M. (1999):** *Micromechanics: Overall Properties of Heterogeneous Materials*. Elsevier, Amsterdam.
- Noor, A.K. (1986):** ‘Global–Local Methodologies and their Application to Nonlinear Analysis’, *Finite Elements in Analysis and Design*, **2**, 333–346.
- Oliver, J. (1996):** ‘Modelling Strong Discontinuities in Solid Mechanics via Stain Softening Constitutive Equations Part 1: Fundamentals, Part 2: Numerical Simulation’, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **39**, 3575–3623.
- Ortiz, M., Cuitiño, A.M., Knap, J., Kosłowski, M. (2001):** ‘Mixed Atomistic – Continuum Models of Material Behaviour: The Art of Transcending Atomistics in Informing Continua’, *MRS Bulletin*, **26**, 216–221.
- Ortiz, M., Pandolfi, A. (1999):** ‘Finite–deformation Irreversible Cohesive Elements for Three–Dimensional Crack–Propagation Analysis’, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **44**, 1267–1282.
- Osher, S., Sethian, J. (1988):** ‘Fronts Propagating with Curvature Dependent Speed: Algorithms Based on Hamilton–Jacobi Formulations’, *Journal of Computational Physics*, **79**, 12–49.
- Ottosen, N.S., Runesson, K. (1991):** ‘Properties of Discontinuous Bifurcation Solutions in Elasto–Plasticity’, *International Journal of Solids and Structures*, **27**, 401–421.
- Park, K.C., Felippa, C.A. (1998):** ‘A Variational Framework for Solution Method Developments in Structural Mechanics’, *Journal of Applied Mechanics*, **65**, 242–249.
- Park, K.C., Felippa, C.A. (2000):** ‘A Variational Principle for the Formulation of Partitioned Structural Systems’, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **47**, 395–418.
- Park, K.C., Felippa, C.A., Rebel, G. (2002):** ‘A Simple Algorithm for Localized Construction of Non–Matching Structural Interfaces’, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **53**, 2117–2142.
- Peerlings, R.H.J. (1999):** *Enhanced Damage Modelling for Fracture and Fatigue*. Ph.D.–Thesis, Technische Universität Eindhoven, Niederlande.
- Peerlings, R.H.J., Geers, M.G.D., de Borst, R., Brekelmans, W.A.M. (2001):** ‘A Critical Comparison of Nonlocal and Gradient–Enhanced Softening Continua’, *International Journal of Solids and Structures*, **38**, 7723–7746.

- Pietruszczak, St., Mróz, Z. (1981):** 'Finite Element Analysis of Deformation of Strain-Softening Materials', *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **17**, 327–334.
- Ponte Castaneda, P., Suquet, P. (1998):** 'Nonlinear Composites', *Advances in Applied Mechanics*, **34**, 171–302.
- Press, W.H., Teukolsky, S.A., Vetterling, W.T., Flannery, B.P. (1992):** *Numerical Recipes in C, Second Edition*. Cambridge University Press, Cambridge.
- Quarteroni, A., Sacco, R., Saleri, F. (2000):** *Numerical Mathematics*. Springer Verlag, Berlin.
- Quarteroni, A., Valli, A. (1999):** *Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations*. Oxford University Press, Oxford.
- Rabotnov, I.N. (1963):** 'On the Equations of State for Creep', in *Progress in Applied Mechanics – The Prager Anniversary Volume*, Mac Millan, New York, 307–315.
- Ramm, E. (1981):** 'Strategies for Tracing the Non-Linear Response Near Limit Points', in: *Nonlinear Finite Element Analysis in Structural Mechanics*, W. Wunderlich, E. Stein, K.J. Bathe (eds.), Springer Verlag, Berlin, 63–89.
- Ramm, E. (2002):** *Vorlesungsmanuskript: Baustatik Teil I – Grundlagen*. Institut für Baustatik, Universität Stuttgart.
- Ramm, E., Gee, M., Wall, W.A. (2004):** 'A Multilevel Approach to the Solution of Large-Scale Nonlinear Shell Problems', in: *Finite Element Methods: 1970's and Beyond*, L.P. Franca, T.E. Tezduyar, A. Masud (eds.), CIMNE, Barcelona, 17–32.
- Ramm E., Hund, A., Hettich, T. (2006):** 'A Variational Multiscale Method for Composites with Special Emphasis on the X-FEM and Level Sets', in: *Computational Modelling of Concrete Structures. Proceedings of EURO-C 2006*, G. Meschke, R. de Borst, H. Mang, N. Bicanic (eds.), Mayrhofen, Austria.
- Rank, E. (1993):** 'A Zooming – Technique Using a Hierarchical hp-Version of the Finite Element Method', in: *The Mathematics of Finite Elements and Applications – Highlights*, J.R. Whiteman (ed.), John Wiley & Sons, Chichester, 159–170.
- Reese, S. (2003):** 'Meso-Macro Modelling of Fiber-Reinforced Rubber-Like Composites Exhibiting Large Elastoplastic Deformation', *International Journal of Solids and Structures*, **40**, 951–980.
- Rehle, N. (1996):** *Adaptive Finite Element Verfahren bei der Analyse von Flächentragwerken*. Dissertation, Bericht Nr. 20, Institut für Baustatik, Universität Stuttgart, Deutschland.
- Reuss, A. (1929):** 'Berechnung der Fließgrenze von Mischkristallen aufgrund der Plastizitätsbedingung für Einkristalle', *ZAMM Zeitschrift für angewandte Mathematik und Mechanik*, **9**, 49–58.
- Rots, J.G. (1988):** *Computational Modeling of Concrete Fracture*. Ph.D.-Thesis, Technische Universität Delft, Niederlande.
- Russo, A. (1996):** 'Bubble Stabilization of Finite Element Methods for the Linearized Incompressible Navier-Stokes Equations', *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **132**, 335–343.
- Sab, K. (1992):** 'On the Homogenization and the Simulation of Random Materials', *European Journal of Mechanics A/Solids*, **11**, 585–607.
- Sanchez-Palencia, E. (1980):** *Non-Homogeneous Media and Vibration Theory, Lecture Notes in Physics, vol. 127*. Springer Verlag, Berlin.

- Schlagen, E. (1993):** *Experimental and Numerical Analysis of Fracture Processes in Concrete*. Ph.D.–Thesis, Technische Universität Delft, Niederlande.
- Schröder, J. (1996):** *Theoretische und algorithmische Konzepte zur phänomenologischen Beschreibung anisotropen Materialverhaltens*. Dissertation, Bericht Nr I–1, Institut für Mechanik (Bauwesen), Universität Stuttgart, Deutschland.
- Schultz, R. (1996):** *Nichtlineare Struktur– und Versagensanalyse von Faserverbundsystemen mit Mehrschicht–Schalenelementen*. Dissertation, Mitteilung Nr. 96–3, Institut für konstruktiven Ingenieurbau, Ruhr–Universität Bochum, Deutschland.
- Sigmund, T. (2002):** ‘Material Failure Modeling by Cohesive Zone Models’, in: *Proceedings of the WCCM V*, Mang, H. A., Rammerstorfer, F. G., Eberhardsteiner, J. (eds.), Vienna, Austria.
- Simo, J.C., Rifai, S. (1990):** ‘A Class of Mixed Assumed Strain Methods and the Method of Incompatible Modes’, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **29**, 1595–1638.
- Simo, J.C., Oliver, J. Armero, F. (1993):** ‘An Analysis of Strong Discontinuities Induced by Strain–Softening in Rate–Independent Inelastic Solids’, *Computational Mechanics*, **12**, 277–296.
- Simone, A, Askes, H., Peerlings, R.H.J., Sluys, L.J. (2003):** ‘Interpolation Requirements for Implicit Gradient–Enhanced Continuum Damage Models’, *Communications in Numerical Methods in Engineering*, **19**, 563–572.
- Sluys, L.J. (1992):** *Wave Propagation, Localization and Dispersion in Softening Solids*. Ph.D.–Thesis, Technische Universität Delft, Niederlande.
- Smith, B., Bjørstad, P., Gropp, W. (1996):** *Domain Decomposition*. Cambridge University Press, Cambridge.
- Stein, E., Rüter, M. (2004):** ‘Finite Element Methods for Elasticity with Error–controlled Discretization and Model Adaptivity’, in: *Encyclopedia of Computational Mechanics Vol. 2: Solids and Structures*, E. Stein, R. de Borst, T.J.R. Hughes, (eds.), John Wiley & Sons, Chichester, 5–58.
- Sukumar, N., Chopp, D.L., Moës, Belytschko, T. (2001):** ‘Modeling Holes and Inclusions by Level Sets in the Extended Finite–Element Method’, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **190**, 6183–6200.
- Suquet, P. (1987):** ‘Elements of Homogenization for Inelastic Solid Mechanics’, in: *Homogenization Techniques for Composite Media*, E. Sanchez–Palencia, A. Zaoui (eds.), Springer Verlag, Berlin, 193–278.
- Suquet, P. (1997):** ‘Continuum Micromechanics’, in: *Continuum Micromechanics*, P. Suquet (ed.), Springer Verlag, Berlin, 198–263.
- Tanaka, K., Mori, T. (1972):** ‘Note on Volume Integrals of the Elastic Field around an Ellipsoidal Inclusion’, *Journal of Elasticity*, **2**, 199–200.
- Tonti, E. (1972):** ‘On the Mathematical Structure of a Large Class of Physical Theories’, *Atti della Accademia Nazionale dei Lincei*, **52**, 48–56.
- Tonti, E. (1976):** ‘The Reason for Analogies Between Physical Theories’, *Applied Mathematics Modelling*, **1**, 37–53.
- Truesdell, C., Noll, W. (1965):** *The Nonlinear Field Theories. Handbuch der Physik, no. III/3*. Springer Verlag, Berlin.

- Tuminaro, R.S., Heroux, M., Hutchison, S.A., Shadid, J.N. (1999):** ‘Official Aztec User’s Guide Version 2.1’, *Report SAND99–8801J*, Massively Parallel Computing Research Laboratory, Sandia National Laboratories, Albuquerque.
- van Mier, J.G.M. (1997):** *Fracture Processes of Concrete*. CRC Press, New York.
- Ventura, G., Xu, J.X., Belytschko, T. (2002):** ‘A Vector Level Set Method and New Discontinuity Approximations for Crack Growth by EFG’, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **54**, 923–944.
- Voigt, W. (1887):** ‘Über die Beziehung zwischen den beiden Elastizitätskonstanten isotroper Körper’, *Annalen der Physik*, **38**, 573 – 587.
- Wagner, G.J., Liu, W.K. (2003):** ‘Coupling of Atomistic and Continuum Simulations Using a Bridging Scale Decomposition’, *Journal of Computational Physics*, **190**, 249–274.
- Wessling, P. (1992):** *An Introduction to Multigrid Methods*. John Wiley & Sons, Chichester.
- Whitcomb, J. D. (1991):** ‘Iterative Global / Local Finite Element Analysis’, *Computers & Structures*, **40**, 1027–1031.
- Willam, K.J. (1984):** ‘Experimental and Computational Aspects of Concrete Fracture’, in: *Proceedings of the International Conference on Computer Aided Analysis and Design of Structures*, F. Damjanic, E. Hinton, D.R.J. Owen, D. N. Bicanic, V. Simovic (eds.), Pineridge Press, 33–69.
- Wilson, E.L. (1974):** ‘The Static Condensation Algorithm’, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **8**, 199–203.
- Wilson, E.L., Taylor, R.L., Doherty, W.P., Ghaboussi, J. (1973):** ‘Incompatible Displacement Models’, in: *Numerical and Computer Methods in Structural Mechanics*, S.L. Fenves, N. Perrone, A.R. Robinson, W.C. Schnobrich (eds.), Academic Press, New York.
- Winkler, B.J. (2001):** *Traglastuntersuchungen von unbewehrten und bewehrten Betonstrukturen auf der Grundlage eines objektiven Werkstoffgesetzes für Beton*. Dissertation, Innsbruck University Press, Leopold–Franzens–Universität Innsbruck, Austria.
- Wohlmuth, B.I. (2000):** ‘A Mortar Finite Element Method Using Dual Spaces for the Lagrange Multiplier’, *SIAM Journal on Numerical Analysis*, **38**, 989–1012.
- Wohlmuth, B.I. (2001):** *Discretization Methods and Iterative Solvers Based on Domain Decomposition, Lecture Notes in Computational Science and Engineering, Volume 17*. Springer Verlag, Berlin.
- Wriggers, P. (2001):** *Nichtlineare Finite–Element–Methoden*. Springer Verlag, Berlin.
- Wriggers, P. (2002):**, *Computational Contact Mechanics*. John Wiley & Sons, Chichester.
- Wriggers, P., Zavarise, G., Zohdi, T.I. (1998):** ‘A Computational Study of Interfacial Debonding Damage in Fibrous Composite Materials’, *Computational Materials Science*, **12**, 39–56.
- Zienkiewicz, O.C. (1971):** *The Finite Element Method in Engineering Science*. Mc Graw–Hill, London.
- Zienkiewicz, O.C., Taylor, R.L., Zhu, J.Z. (2005):** *The Finite Element Method, Volume I & II*. Elsevier Butterworth Heinemann, London.
- Zohdi, T. (2004):** ‘Homogenization Methods and Multiscale Modeling’, in: *Encyclopedia of Computational Mechanics Vol. 2: Solids and Structures*, E. Stein, R. de Borst, T.J.R. Hughes (eds.), John Wiley & Sons, Chichester, 407–430.

- Zohdi, T., Feucht, M., Gross, D., Wriggers, P. (1998):** ‘A Description of Macroscopic Damage Through Microstructural Relaxation’, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **43**, 493–506.
- Zohdi, T.I., Oden, T.J., Rodin, G.J. (1996):** ‘Hierarchical Modeling of Heterogeneous Bodies’, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **138**, 273–298.
- Zohdi, T., Wriggers, P. (2001):** ‘Computational Micro–Macro Material Testing’, *Archives of Computational Methods in Engineering*, **8**, 131–228.
- Zohdi, T., Wriggers, P., Huet, C. (2001):** ‘A Method of Substructuring Large–Scale Computational Micromechanical Problems’, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **190**, 5639–5656.

Anhang

A1 Extremwertprobleme unter Nebenbedingungen

Zu lösen sei die Extremwertaufgabe

$$\Pi_{el}(\mathbf{u}) \rightarrow \text{MIN} . \quad (\text{A.1})$$

Die Menge ihrer zulässigen Lösungen \mathbf{u} sei durch die kontinuierliche Nebenbedingung

$$\mathbf{C}(\mathbf{u}) = \mathbf{0} \quad (\text{A.2})$$

eingeschränkt. In den folgenden Abschnitten werden drei Methoden zur Lösung des Extremwertproblems (A.1) unter der Nebenbedingung (A.2) beschrieben.

A1.1 Methode der Lagrange – Multiplikatoren

Mit der Methode der Lagrange–Multiplikatoren (Lagrange (1788)) kann die Extremwertaufgabe (A.1) unter der Nebenbedingung (A.2) exakt erfüllt werden.

Wie beispielsweise von Meyberg und Vachenauer (1997) bewiesen, existiert zu jeder Lösung $\tilde{\mathbf{u}}$ der Extremwertaufgabe (A.1) ein Vektor λ , so dass

$$\lambda \cdot \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial \mathbf{u}} \Big|_{\tilde{\mathbf{u}}} = \mathbf{0} \quad (\text{A.3})$$

erfüllt ist. Die Lösungen \mathbf{u} , die das Lagrange–Funktional

$$\Pi(\mathbf{u}, \lambda) := \Pi_{el}(\mathbf{u}) + \Pi_{NB}(\mathbf{u}) \rightarrow \text{STAT} \quad \text{mit} \quad \Pi_{NB}(\mathbf{u}) = \lambda \cdot \mathbf{C}(\mathbf{u}) \quad (\text{A.4})$$

stationär werden lassen, erfüllen die Extremwertaufgabe (A.1) unter der Nebenbedingung (A.2). Denn nur genau für diese Lösungen gilt unter Verwendung von Gleichung (A.3)

$$\begin{aligned} \delta \Pi &= \left(\frac{\partial \Pi_{el}}{\partial \mathbf{u}} + \frac{\partial \Pi_{NB}}{\partial \mathbf{u}} \right) \cdot \delta \mathbf{u} + \frac{\partial \Pi_{NB}}{\partial \lambda} \cdot \delta \lambda \\ &= \left(\underbrace{\frac{\partial \Pi_{el}}{\partial \mathbf{u}}}_{\mathbf{0}} + \underbrace{\lambda \cdot \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial \mathbf{u}}}_{\mathbf{0}} \right) \cdot \delta \mathbf{u} + \underbrace{\mathbf{C}(\mathbf{u})}_{\mathbf{0}} \cdot \delta \lambda = 0 . \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Die zusätzliche Variable λ wird als Lagrange–Multiplikator bezeichnet. Die Problemstellung wird durch diese zusätzliche Variable zu einer gemischten Formulierung.

A1.2 Strafterm–Methode

Die Strafterm–Methode (siehe beispielsweise Luenberger (1984)) führt keine zusätzliche Variable in die Formulierung ein, dafür kann sie die Nebenbedingung nur näherungsweise erfüllen. Das Strafterm–Funktional lautet

$$\Pi(\mathbf{u}) := \Pi_{el}(\mathbf{u}) + \Pi_{NB}(\mathbf{u}) \rightarrow MIN \quad \text{mit } \Pi_{NB}(\mathbf{u}) := \frac{1}{2} \epsilon \mathbf{C}(\mathbf{u}) \cdot \mathbf{C}(\mathbf{u}) . \quad (\text{A.6})$$

Für $\mathbf{C} \geq \mathbf{0}$ ist der Ausdruck $\mathbf{C}(\mathbf{u}) \cdot \mathbf{C}(\mathbf{u})$ genau dann minimal, wenn $\mathbf{C}(\mathbf{u}) = \mathbf{0}$ erfüllt ist. Der sogenannte Strafterm-Parameter ϵ bestraft das Abweichen von der Nebenbedingung. Diese gewählte Konstante ist ein Maß für die Genauigkeit, mit der die Nebenbedingung auferlegt wird. Für $\epsilon = 0$ erhält man die Lösung ohne Nebenbedingung, für $\epsilon \rightarrow \infty$ wird die Nebenbedingung exakt erfüllt. Das Dilemma der Strafterm-Methode ist, dass für $\epsilon \rightarrow \infty$ gleichzeitig die Formulierung schlecht gestellt ist.

A1.3 Erweiterte Methode der Lagrange – Multiplikatoren

Die erweiterte Lagrange-Multiplikatoren-Methode versucht, die Vorteile der Strafterm- und Lagrange-Multiplikatoren-Methode zu vereinen. Die Nebenbedingung wird ohne zusätzliche Freiheitsgrade exakt erfüllt. Dies wird durch ein iteratives Vorgehen erreicht, bei dem λ^ℓ in den Iterationsschritten $\ell \rightarrow \ell + 1$ konstant gehalten wird. So ist λ keine Variable, wird jedoch iterativ dem exakten Lagrange-Multiplikator angenähert. Da die Lösung \mathbf{u} von (A.1) unter der Nebenbedingung (A.2) durch doppeltes Berücksichtigen der Nebenbedingung nicht verändert wird, kann das erweiterte Lagrange-Funktional als

$$\Pi(\mathbf{u}) := \Pi_{el}(\mathbf{u}) + \Pi_{NB}(\mathbf{u}) \rightarrow MIN \quad \text{mit } \Pi_{NB}(\mathbf{u}) := \lambda^\ell \cdot \mathbf{C}(\mathbf{u}) + \frac{1}{2} \epsilon \mathbf{C}(\mathbf{u}) \cdot \mathbf{C}(\mathbf{u}) \quad (\text{A.7})$$

notiert werden. Es kombiniert also das Lagrange- und das Strafterm-Funktional. Es gibt unterschiedliche Ansätze, um λ^ℓ zu aktualisieren, siehe z.B. Bertsekas (1984). Luenberger (1984) nutzt beispielsweise den linearen Zusammenhang zwischen λ und ϵ

$$\lambda = \epsilon \mathbf{C}(\mathbf{u}) \quad (\text{A.8})$$

und aktualisiert durch

$$\lambda^{\ell+1} = \lambda^\ell + \epsilon \mathbf{C}(\mathbf{u}^\ell) . \quad (\text{A.9})$$

Es ist zu beachten, dass das exakte Erfüllen der Nebenbedingung durch die Iterationen ℓ auch bei dieser Methode mit zusätzlichem Aufwand verbunden ist.

Stichwortverzeichnis

additiv Schwarz'sche Gebietszerlegung	55	erweiterte Lagrange- Multiplikatoren-Methode	112 ff., 140, 171
Aitken-Beschleuniger	53, 100, 102, 105	Eshelbys Einbettungs- verfahren	41
algebraische Mehrgitter- verfahren	63	exponentielles Entfestigungsgesetz	21
analytische ungekoppelte Homogenisierung	39	eXtended Finite Element Method	8, 47, 144 ff.
äquivalente Verzerrung	21, 23	extrapolationsbasierter Beschleuniger	99 ff.
Assemblierung	14	F aserverbundwerkstoff	6
asymptotische Erweiterungsmethode	35	Feinskala	1, 11
augmented-Lagrange- Methode	112 ff., 140, 171	Feinskalenlösung	33, 64, 69
B eschleuniger	53 f.	Feinskalenmodell	2
bridging multiscale method	44	Feinskalenproblem	46, 65
coupled volume approach	44	FETI	61
D elamination	7	Finite Element Methode	13 f.
direkte Gleichungslöser	51 f.	G auß'sches Eliminations- verfahren	52
direkte Steifigkeits- methode	14	Gauß-Seidel-Iteration	53
diskretes Rissmodell	8, 144 ff.	Gaußpunkt-Methode	10
duale Ansatzfunktionen	108	Gebietszerlegung	54 ff.
duale Formulierung	59	gekoppelte numerische Homogenisierung	34
e bener Spannungszustand	23	gemischte Formulierung	59
ebener Verzerrungs- zustand	23	geometrische Mehrgitter- verfahren	63
effektive Spannung	19, 38	gestaffeltes Lösungs- verfahren	98 ff.
effektive Verzerrung	38	Glättung	63
effektives Ersatzmaterial	33	global-local-Methoden	44
Einheitszelle	37	globale Freiheitsgrade	57
energetische Konsistenz	38	gradientenerweitertes Kontinuumsmodell	27 ff.
Entfestigung	24	Gradientenverfahren	53
Entfestigungsgesetz	251		

Grobskala	1	lokale Kontinuums- mechanik	12
Grobskalengebiet	66	lokaler Träger	64, 72 ff., 83 ff.
Grobskalenproblem	46, 65	Lokalisierung	24 ff., 36, 43
h anging nodes	10	Lokalitätsannahme	72 ff.
Hashin–Shtrikman- Grenzen	40	LU–Faktorisierung	52
hierarchisches Zweiskalenmodell	3, 34, 44 ff., 64 ff.	m akroskopisches Materialmodell	2
Hill–Bedingung	39	Materialgrenze	9
homogene Randbedingung	39	Materialtangente	20, 23
Homogenisierung	2, 33, 36 ff., 43	Matrix	6
Homogenisierung 2. Ordnung	35	Mehrgitterverfahren	50 f., 62 f.
homogenized Dirichlet projection method	44	Mehrskalenmethoden	2, 33 ff., 36
Hypothese der Verzerrungsäquivalenz	219	Methode der gewichteten Residuen	13
Inf–Sup–Bedingung	30, 61, 107, 110	Methode der Lagrange- Multiplikatoren	58 ff., 106 ff., 140, 170
Interface	6, 15 ff., 21 ff.	mikroheterogene Werkstoffe	1
interne Länge	28	modified power law	21
iterativ gestaffeltes Lösungsverfahren	98 ff.	Mortar–Methode	61
iterative Gleichungslöser	51 ff.	multigrid	50 f., 62 f.
J acobi–Iteration	53	multiplikativ Schwarz- sche Gebietszerlegung	55
K ohäsivzone	15	n atürliche Rand- bedingung	29, 73 f., 122 ff.
konforme Vernetzung	10, 96, 106 f.	Netzabhängigkeit	24 ff.
Konsistenzbedingung	20, 85	netzadaptierter Entfestigungsmodul	26 f.
Konstitutivgesetz	12, 18 ff.	netzfremde Methoden	47
Konzept der effektiven Spannungen	19	nicht überlappende Gebietszerlegung	56 ff.
Kopplungsrand	54, 73	nichtlokale äquivalente Verzerrung	28
L agrange–Multiplikator	59, 106	nichtlokale gekoppelte Homogenisierung	35
Lagrange–Multiplikatoren- Methode	58 ff., 106 ff., 140, 170	nichtlokales Kontinuumsmodell	27
LATIN–Methode	51	nominelle Spannung	19
level set	9 ff. 144		
lokale Freiheitsgrade	57		

Nullrandbedingung	84, 86 ff., 140	selbstkonsistente Methode	41
Nullrandbedingung, schwache	85, 89 ff., 140	simultaner Lösungs- algorithmus	50, 79 ff.
numerische gekoppelte Homogenisierung	34 f., 52 f.	Skalenseparation	2, 33
numerische ungekoppelte Homogenisierung	34, 41 f.	Spannungsrandbedingung	39 f.
partition of unity	8, 144	spectral overlay method	44
partitionierter Lösungs- algorithmus	49 ff.	Stabilisierung	66
Patchtest	85	statische Kondensation	57 f., 73, 78 f.
Penalty–Methode	97 ff., 140, 170	Strafterm–Methode	97 ff., 140, 170
periodische Randbedingung	39	strong discontinuity approach	8
Pivotisierung	52	Substrukturtechnik	57 f.
primale Formulierung	59	Übergangsbedingung	83 ff., 96 ff., 140
Prinzip der virtuellen Verschiebungen	13	überlappende Gebiets- zerlegung	54 ff.
Prolongation	50, 62	ungekoppelte numerische Homogenisierung	34, 41 f.
punktweiser Skalen- übergang	33	Uzawa–Algorithmus	114
Randbedingung	83 ff., 86 ff.	variational multiscale method	45
regularisierte starke Diskontinuität	11	vector level set	9
Regularisierung	24 ff.	Verbundwerkstoff	1
Relaxationsmethoden	53 f.	Verschiebungs- formulierung	12
Repräsentatives Volumen- element	33, 37 f.	Verschiebungs- randbedingung	39 f.
Restriktion	50, 62	Voigt–Grenze	40
Reuss–Grenze	40	volumenverbindender Skalenübergang	3, 34, 44 ff., 66
s–Version der FEM	44	Voronoi–Zellen–Methode	43
Schädigungsevolution	21	XFEM	8, 47, 144 ff.
Schädigungskriterium	20 f.	Zweiskalengebiet	44, 66
Schädigungsmechanik	18 ff.	Zweiskalenmethoden	2, 33 ff.
Schädigungsmodell	21 ff.	Zweiskalenproblem	45, 65
Schurkomplement	57		
schwache Nullrandbedingung	85, 89 ff., 140		

Lebenslauf

Name: *Andrea Simone Hund*

Geburtsdatum: *22. Juni 1976 in Stuttgart*

Eltern: *Willi und Sibylle Hund, geb. Mück*

Familienstand: *ledig*

1982 – 1986 *Besuch der Grundschule in Stuttgart Degerloch*

1986 – 1995 *Besuch des Wilhelms–Gymnasiums in Stuttgart Degerloch*

Juni 1995 *Abitur*

1995 – 1996 *Studium der Architektur an der Universität Stuttgart*

1996 – 2001 *Studium des Bauingenieurwesens an der Universität Stuttgart*

April 2001 *Abschluss als Diplom-Ingenieur (mit Auszeichnung)*

seit April 2001 *wissenschaftliche Mitarbeiterin am Institut für Baustatik und Baudynamik der Universität Stuttgart*

Berichte des Instituts für Baustatik der Universität Stuttgart

- 1 (1983) P. Osterrieder:**
Traglastberechnung von räumlichen Stabwerken bei großen Verformungen mit finiten Elementen.
- 2 (1983) T. A. Kompfner:**
Ein finites Elementmodell für die geometrisch und physikalisch nichtlineare Berechnung von Stahlbetonschalen.
- 3 (1983) A. Diack:**
Beitrag zur Stabilität diskret längsversteifter Kreiszyinderschalen unter Axialdruck.
- 4 (1984) A. Burmeister, F. W. Bornscheuer, E. Ramm:**
Traglasten von Kugelbehältern mit Stützen und Formabweichungen unter Innendruck und Stützenlängskraft.
- 5 (1985) H. Stegmüller:**
Grenzlastberechnungen flüssigkeitsgefüllter Schalen mit „degenerierten“ Schalenelementen.
- 6 (1987) A. Burmeister:**
Dynamische Stabilität nach der Methode der finiten Elemente mit Anwendungen auf Kugelschalen.
- 7 (1987) G. Kammler:**
Ein finites Elementmodell zur Berechnung von Trägern und Stützen mit offenem, dünnwandigem Querschnitt unter Berücksichtigung der Interaktion zwischen globalem und lokalem Versagen.
- 8 (1988) A. Matzenmiller:**
Ein rationales Lösungskonzept für geometrisch und physikalisch nichtlineare Strukturberechnungen.
- 9 (1989) D. Tao:**
Die Technik der reduzierten Basis bei nichtlinearen finiten Element-Berechnungen.
- 10 (1989) K. Weimar:**
Ein nichtlineares Balkenelement mit Anwendung als Längsstreifen axialbelasteter Kreiszyylinder.
- 11 (1990) K.-U. Bletzinger:**
Formoptimierung von Flächentragwerken.
- 12 (1990) S. Kimmich:**
Strukturoptimierung und Sensibilitätsanalyse mit finiten Elementen.
- 13 (1991) U. Andelfinger:**
Untersuchungen zur Zuverlässigkeit hybrid-gemischter finiter Elemente für Flächentragwerke.

- 14 (1992) N. Büchter:**
Zusammenführung von Degenerationskonzept und Schalentheorie bei endlichen Rotationen.
- 15 (1992) Th. J. Hofmann:**
Beitrag zur verfeinerten Balkentheorie.
- 16 (1994) D. Roehl:**
Zur Berechnung von großen elastoplastischen Deformationen bei Flächentragwerken und Kontinua.
- 17 (1994) R. Reitinger:**
Stabilität und Optimierung imperfektionsempfindlicher Tragwerke.
- 18 (1995) R. Suanno:**
Ein dreidimensionales Simulationsmodell für Stahlbeton mit Plastizität und Schädigung.
- 19 (1995) M. Braun:**
Nichtlineare Analysen von geschichteten, elastischen Flächentragwerken.
- 20 (1996) N. Rehle:**
Adaptive Finite Element Verfahren bei der Analyse von Flächentragwerken.
- 21 (1996) C. Haußer:**
Effiziente Dreieckselemente für Flächentragwerke.
- 22 (1996) D. Kuhl:**
Stabile Zeitintegrationsalgorithmen in der nichtlinearen Elastodynamik dünnwandiger Tragwerke.
- 23 (1998) H. Schmidts:**
Zur effizienten Modellierung und Analyse von Hochhaustragwerken.
- 24 (1998) H. Wang:**
Interaktion des lokalen und globalen Stabilitätsverhaltens dünnwandiger Stäbe.
- 25 (1998) K. Maute:**
Topologie- und Formoptimierung von dünnwandigen Flächentragwerken.
- 26 (1998) B. Maurer:**
Karl Culmann und die graphische Statik.
- 27 (1998) F. Çirak:**
Adaptive Finite-Element-Methoden bei der nichtlinearen Analyse von Flächentragwerken.
- 28 (1998) M. Trautz:**
Zur Entwicklung von Form und Struktur historischer Gewölbe aus der Sicht der Statik.

- 29 (1999) H. Menrath:**
Numerische Simulation des nichtlinearen Tragverhaltens von Stahlverbundträgern.
- 30 (1999) M. Bischoff:**
Theorie und Numerik einer dreidimensionalen Schalenformulierung.
- 31 (1999) W. A. Wall:**
Fluid-Struktur-Interaktion mit stabilisierten finiten Elementen.
- 32 (2000) E. Kuhl:**
Numerische Modelle für kohäsive Reibungsmaterialien.
- 33 (2001) A. Maute:**
Adaptive Finite-Element-Methoden in der Strukturdynamik.
- 34 (2001) S. Schwarz:**
Sensitivitätsanalyse und Optimierung bei nichtlinearem Strukturverhalten.
- 35 (2001) A. Haufe:**
Dreidimensionale Simulation bewehrter Flächentragwerke aus Beton mit der Plastizitätstheorie.
- 36 (2002) D.P. Mok:**
Partitionierte Lösungsverfahren in der Strukturdynamik und der Fluid-Struktur-Interaktion.
- 37 (2002) H. Steeb:**
Fehlerschätzer für FE-Berechnungen bei entfestigenden Materialien.
- 38 (2002) K. Krausz:**
Tragverhalten gemauerter Tonnengewölbe mit Stichkappen.
- 39 (2002) M. Hörmann**
Nichtlineare Versagensanalysen von Faserverbundstrukturen.
- 40 (2003) V. Gravemeier**
The Variational Multiscale Method for Laminar and Turbulent Incompressible Flow.
- 41 (2004) R. Kemmler**
Stabilität und große Verschiebungen in der Topologie- und Formoptimierung.
- 42 (2004) G. D'Addetta**
Discrete Models for Cohesive Frictional Materials.
- 43 (2004) M. Gee**
Effiziente Lösungsstrategien in der nichtlinearen Schalenmechanik.
- 44 (2004) T. Erhart**
Strategien zur numerischen Modellierung transientser Impaktvorgänge bei nichtlinearem Materialverhalten.

- 45 (2005) M. Leukart**
Kombinierte anisotrope Schädigung und Plastizität bei kohäsiven Reibungsma-
terialien.
- 46 (2006) F. Huber**
Nichtlineare dreidimensionale Modellierung von Beton- und Stahlbetontrag-
werken.
- 47 (2007) A. Lipka**
Verbesserter Materialeinsatz innovativer Werkstoffe durch die Topologieopti-
mierung.



Universität Stuttgart

ISBN 978-3-00-021079-2