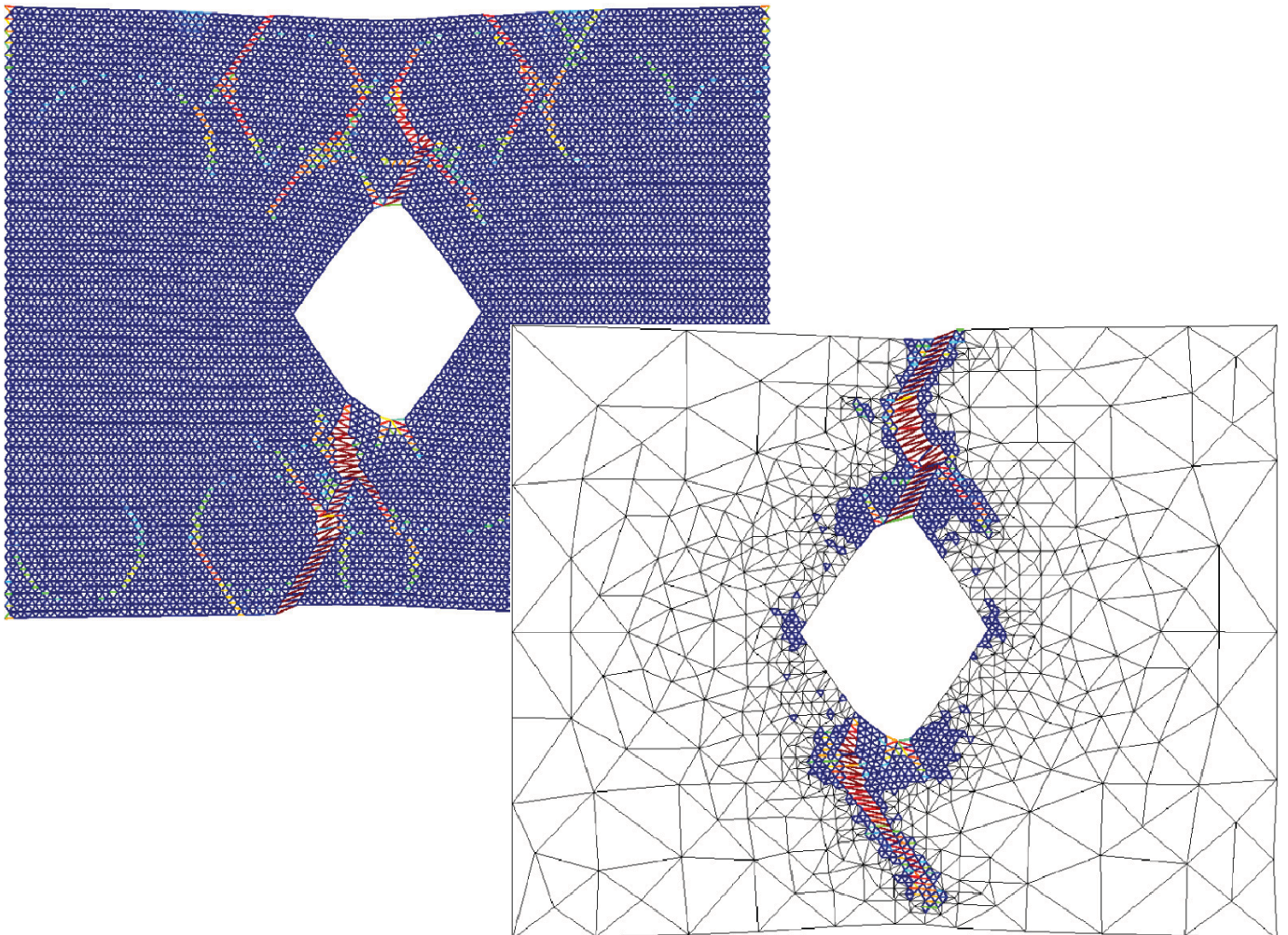


Universität Stuttgart

Baustatik und Baudynamik

# Adaptive diskret-kontinuierliche Modellierung von Materialien mit Mikrostruktur

Annika Sorg





# Adaptive diskret-kontinuierliche Modellierung von Materialien mit Mikrostruktur

von

Annika Mareike Sorg

Bericht Nr. 63

Institut für Baustatik und Baudynamik der Universität Stuttgart

Professor Dr.-Ing. habil. M. Bischoff

2014



© Annika Mareike Sorg

*Berichte können bezogen werden über:*  
Institut für Baustatik und Baudynamik  
Universität Stuttgart  
Pfaffenwaldring 7  
70550 Stuttgart

Tel.: 0711 - 685 66123  
Fax: 0711 - 685 66130  
E-Mail: [sekretariat@ibb.uni-stuttgart.de](mailto:sekretariat@ibb.uni-stuttgart.de)  
<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.*

D93 - Dissertation an der Universität Stuttgart  
ISBN 978-3-00-048300-4

# **Adaptive diskret-kontinuierliche Modellierung von Materialien mit Mikrostruktur**

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

vorgelegt von

**Annika Mareike Sorg**

aus Waiblingen

Hauptberichter: Prof. Dr.-Ing. habil. Manfred Bischoff, Stuttgart

Mitberichter: Prof. Dr. rer. nat. Stefan Luding, Twente

Tag der mündlichen Prüfung: 30. Juli 2014

Institut für Baustatik und Baudynamik der Universität Stuttgart

2014



## Kurzfassung

Im Zentrum der vorliegenden Arbeit steht die Entwicklung einer Methode, die Simulationen des Bruchverhaltens kohäsiver Reibungsmaterialien mit einer Form der Diskrete-Elemente-Methode ermöglicht, ohne dass dazu die gesamte Struktur mit Partikeln aufgelöst werden muss. Dies erfordert die Modellierung von Phänomenen auf unterschiedlichen geometrischen Skalen. Um diese Skalen in einer Simulation zu vereinen, wird eine Kopplung der Finite-Elemente-Methode und der Diskrete-Elemente-Methode vorgeschlagen, bei der die Effizienz der FEM mit der Präzision der DEM kombiniert wird. Hierzu werden Ideen der Quasikontinuumsmethode aus dem Bereich der Atomistik übernommen und auf eine Anwendung für Probleme in der Strukturmechanik kohäsiver Reibungsmaterialien übertragen. Bevor jedoch die Entwicklung der Methode und die Ergebnisse einiger numerischer Beispiele erläutert werden, erfolgt zunächst eine Diskussion der Materialmodellierung.

Materialien weisen auf verschiedenen Skalen eine unterschiedliche Struktur auf. Deshalb werden, abhängig von der Skala, auf der das Material betrachtet wird, unterschiedliche Methoden zur Modellierung eingesetzt. Auf der Makroskala können die meisten Materialien als kontinuierlich betrachtet werden, wohingegen bei genauerer Betrachtung viele Materialien eine diskrete Mikrostruktur besitzen. Ein Beispiel ist Beton, der aus einer Matrix aus Zement besteht, in die ein Zuschlag aus Gesteinskörnern unterschiedlicher Größe eingebettet ist, die Aggregate. Auf einer sehr feinen Skala, nämlich der Atomskala, sind alle Materialien diskret. Um zuverlässige Prognosen des Verhaltens diskreter Materialien bis zum Versagen aufstellen zu können, werden mechanische Modelle benötigt, die die komplexen Vorgänge auf der Ebene der diskreten Mikrostruktur erfassen können. Zwei dazu geeignete Methoden werden in dieser Arbeit kurz vorgestellt: die Diskrete-Elemente-Methode (CUNDALL UND STRACK 1979), die oft bei granularen Materialien und kohäsiven Reibungsmaterialien eingesetzt wird, und die Molekulardynamik (ALDER UND WAINWRIGHT (1957) und ALDER UND WAINWRIGHT (1959)) für Simulationen auf der Atomskala. Ein Nachteil dieser Methoden ist, dass sie einen hohen numerischen Aufwand erfordern und dadurch die Größe der berechenbaren Strukturen begrenzt ist.

Auf makroskopischer Ebene sind Methoden, die auf Formulierungen der Kontinuumsmechanik basieren, sehr effizient und liefern zuverlässige Ergebnisse, solange die Lösung relativ glatt ist. Eine Voraussetzung für die Anwendbarkeit von Kontinuumsmethoden ist Skalenseparation. Diese ist dann garantiert, wenn die globalen Strukturabmessungen so weit über den Abmessungen der Mikrostruktur liegen, dass Homogenisierungsverfahren eingesetzt werden können. Mit Kontinuumsmethoden können Lokalisierungsphänomene der Mikrostruktur jedoch nur verschmiert dargestellt werden und nicht so detailliert wie mit diskreten Methoden. Abgesehen von der Finite-Elemente-Methode (TURNER U. A. (1956), ARGYRIS (1960) und ZIENKIEWICZ UND CHEUNG (1967)), wird auf zwei weitere Kontinuumsmethoden eingegangen: die „Smoothed Particle Hydrodynamics“ (LUCY

(1977) und GINGOLD UND MONAGHAN (1977)) und die Material-Point-Methode (SULSKY U. A. 1994).

Für einen optimalen Kompromiss aus Präzision und Effizienz liegt es nahe, diskrete und kontinuierliche Methoden miteinander zu kombinieren. Dazu wird die Kontinuumsmethode dort eingesetzt, wo die Lösung relativ glatt ist, und die diskrete Methode in Bereichen, wo lokale Phänomene bedeutsam werden, also beispielsweise ein Riss entsteht, zu dessen Auflösung ein detailliertes Modell erforderlich ist. So werden Simulationen großer Strukturen, bei denen eine Rechnung mit vollständig aufgelöster Mikrostruktur die verfügbare Speicherkapazität übersteigt, ermöglicht. Die Kopplung der beiden Methoden ist besonders effizient, wenn die Bereiche, in denen die Struktur fein aufgelöst werden muss, verhältnismäßig klein sind und während der Rechnung adaptiv gefunden werden. In der Literatur sind einige Methoden zu finden, die diesen Ansatz verfolgen. Drei unterschiedliche Konzepte zur Kopplung von Methoden werden in dieser Arbeit kurz vorgestellt. Dabei handelt es sich um die Bridging-Domain-Methode (BELYTSCHKO UND XIAO 2003), die Bridging-Scale-Methode (WAGNER UND LIU 2003) und die Quasikontinuumsmethode (TADMOR U. A. 1996), die alle aus dem Bereich der Atomistik stammen.

In dieser Arbeit wird ausgehend von der Quasikontinuumsmethode eine netz- und modelladaptive Methode für die Anwendung in der Strukturmechanik entwickelt. Sie soll zur Berechnung des Antwortverhaltens von Strukturen eingesetzt werden, deren Material auf einer den globalen Strukturabmessungen um eine bis zwei Größenordnungen unterlegenen Skala aus Partikeln aufgebaut ist, wie beispielsweise Beton. Lokalisierendes Materialverhalten, wie die Entstehung und Ausbreitung von Rissen, steht dabei im Vordergrund. Die Berechnungen sollen mit einer groben Finite-Elemente-Diskretisierung begonnen werden, und der Übergang zum fein aufgelösten diskreten Modell soll in entsprechenden Bereichen adaptiv stattfinden. Der Fokus dieser Arbeit liegt nicht darauf, eine hoch entwickelte Diskrete-Elemente-Methode (DEM) für eine bestimmte Anwendung zu präsentieren, sondern auf der adaptiven Strategie. Daher wird zur Modellierung auf der diskreten, feinen Skala eine einfache Form der Diskrete-Elemente-Methode eingesetzt, die im Wesentlichen einer Gittermethode entspricht. Die Knoten eines gleichseitigen Dreiecksgitters repräsentieren dabei die Mittelpunkte von runden, gleich großen und starren Partikeln und die Gitterstäbe dazwischen die kohäsiven Verbindungen dieser Partikel. Es wird vorausgesetzt, dass dies die Mikrostruktur eines Materials gut approximiert und die numerische Lösung mit der Gittermethode das Materialverhalten deshalb realistisch wiedergeben kann. Die Finite-Elemente-Methode (FEM) bestimmt die Kinematik im System und die Gittermethode definiert das Konstitutivverhalten.

Durch adaptive Netzverfeinerung wird das Netz aus Dreieckselementen in Bereichen mit hohen Verzerrungsgradienten verfeinert. Eine Besonderheit dabei ist, dass neue Knoten immer an Positionen gewählt werden, die in der Mikrostruktur durch einen Partikelmittelpunkt repräsentiert sind. Dadurch ist garantiert, dass am Ende der Netzverfeinerung alle Partikel gleichzeitig einem FE-Knoten entsprechen und damit die vollständig aufgelöste Mikrostruktur wiedergegeben wird. Die Einführung von drei unterschiedlichen Ele-



mentarten, Level 1 bis Level 3, ermöglicht außerdem einen adaptiven Übergang von der groben Skala (FEM) zur vollständig aufgelösten feinen Skala (DEM). Die Steifigkeitsmatrix der drei Elemente wird auf verschiedene Art berechnet, wobei die Mikrostruktur mit unterschiedlicher Genauigkeit aufgelöst wird. In Bereichen mit einem groben Netz (Level 1) wird das Material durch ein äquivalentes Kontinuum repräsentiert, dessen Stoffgesetz durch Homogenisierung bestimmt werden kann. Dort, wo das Netz vollständig aufgelöst ist (Level 3), interagieren die Partikel so, wie es das Feinskalenmodell vorgibt. Dazwischen gibt es die Level 2-Elemente, die den Übergang vom diskreten zum kontinuierlichen Modell darstellen.

Bei den Level 2-Elementen wird die Mikrostruktur zwar nicht ganz aufgelöst, es wird aber dennoch jeder einzelne Stab bei der Ermittlung der Elementsteifigkeitsmatrix berücksichtigt. Im homogenen Fall, bei dem alle Stäbe des regelmäßigen Gitters der Mikrostruktur die gleichen Materialeigenschaften haben, können die Verschiebungen der im Element liegenden Partikel durch Interpolation der Knotenverschiebungen (Cauchy-Born-Regel) des Level 2-Elements berechnet werden. Mithilfe der Partikelverschiebungen lassen sich die Potentiale der Stäbe im Element in Abhängigkeit der Knotenverschiebungen berechnen. Die Summe dieser Potentiale liefert das Gesamtpotential des Elements. Zweimalige Ableitung des Gesamtpotentials nach den Knotenverschiebungen wiederum ergibt die Steifigkeitsmatrix des Level 2-Elements.

Sind die Materialeigenschaften der Stäbe der Mikrostruktur hingegen heterogen verteilt, führt die Anwendung der Cauchy-Born-Regel dazu, dass die Stäbe im Element nicht im Gleichgewicht sind. In diesem Fall wird daher ein Ansatz verfolgt, bei dem die Steifigkeitsmatrix aus Eigenwerten und Eigenvektoren berechnet wird. Dabei repräsentieren die Eigenvektoren jeweils einen Verschiebungszustand und die Eigenwerte geben die Steifigkeit des Elements in diesem Zustand wieder. Für die Ermittlung der Eigenvektoren wird von einem homogenen Stoffgesetz ausgegangen. Die Eigenvektoren entsprechen also den Eigenvektoren der Steifigkeitsmatrix eines Level 1-Elements. Zur Bestimmung der sechs Eigenwerte wird für jede Eigenform des Elements ein Unterproblem auf der Ebene der Mikrostruktur gelöst. Die Eigenvektoren bilden dabei die Verschiebungsrandbedingungen im jeweiligen Zustand. Es wird gefordert, dass sich die Energien im Feinskalenmodell und im Grobskalenmodell entsprechen. Dadurch lässt sich der zu einer Eigenform gehörende Eigenwert des Level 2-Elements berechnen. Aufgrund der Unabhängigkeit der Mikrostruktur eines Level 2-Elements von der Mikrostruktur anderer Level 2-Elemente, können die Steifigkeitsmatrizen der Level 2-Elemente parallel berechnet werden.

Die Anwendbarkeit dieses Gesamtkonzepts wird anhand von vier Beispielen demonstriert, bei denen jeweils eine rechteckige Struktur mit einer mittig gelegenen rautenförmigen Aussparung horizontal gezogen wird. Bei zwei Beispielen haben alle Stäbe dieselben Materialeigenschaften (homogener Fall) und bei den anderen beiden liegt ein heterogenes Material vor. Bei einem der jeweils zwei Beispiele wird den Stäben der Mikrostruktur ein linear elastisches Materialgesetz zugewiesen, und beim zweiten können einzelne Stäbe entsprechend eines einaxialen Schädigungsmodells linear entfestigen. Zur Erstellung des heterogenen Modells wird auf das zuvor beschriebene regelmäßige

Dreiecksgitter ein idealisierter Betonquerschnitt aus unterschiedlich großen, kreisrunden Aggregaten projiziert. Die Heterogenität besteht dann darin, dass den Stäben (im Aggregat oder in der Matrix liegend, bzw. das Interface bildend) unterschiedliche Materialeigenschaften zugewiesen werden. Für linear elastische Stäbe wird die Steifigkeit variiert und für elastisch-schädigende die Festigkeit.

Mit den linear elastischen Beispielen kann gezeigt werden, dass die adaptive Prozedur funktioniert und das Ergebnis der Feinskalenrechnung gut wiedergegeben wird. Im homogenen Fall werden bei der adaptiven Simulation deutlich weniger Freiheitsgrade benötigt als bei einer Vergleichsrechnung mit vollständig aufgelöster Mikrostruktur. Es sind jedoch bei der adaptiven Rechnung einige Schritte zur Netzverfeinerung erforderlich. Dennoch ist in diesem Fall die adaptive Rechnung dreieinhalb mal schneller als die Feinskalenrechnung (Echtzeit). Durch die geringere Anzahl an Freiheitsgraden ergibt sich außerdem ein geringerer Speicherbedarf.

Im heterogenen Fall ist jedoch die Feinskalenrechnung schneller als die adaptive Rechnung. Durch die Verteilung der Aggregate im gesamten Gebiet ist bei diesem Beispiel die gesamte Mikrostruktur heterogen. Die größten Verzerrungsgradienten sind an den Übergängen von Matrix und Aggregaten vorzufinden. An all diesen Übergängen wird deshalb das Netz verfeinert, wodurch sich auch bei der adaptiven Prozedur verhältnismäßig viele Freiheitsgrade ergeben. In Kombination mit mehreren nötigen Verfeinerungsschritten verlängert dies die Berechnungszeit. Trotz des Mangels an Effizienz kann mit diesem Beispiel gezeigt werden, dass die heterogene Mikrostruktur von dem gesamten Verfeinerungsprozess und insbesondere den Level 2-Elementen wahrgenommen und entsprechend aufgelöst wird. Von der Möglichkeit der Parallelisierung bei der Berechnung der Steifigkeitsmatrizen der Level 2-Elemente wurde in dieser Arbeit kein Gebrauch gemacht.

Mit den materiell nichtlinearen Beispielen kann ebenfalls gezeigt werden, dass die Ergebnisse der adaptiven Simulation gut mit denen der numerischen Referenzlösung übereinstimmen. Die Heterogenität der Mikrostruktur wird auch hier durch den Verfeinerungsprozess erwartungsgemäß aufgelöst und ein entstehender Riss verläuft um die festeren Aggregate herum. Während im heterogenen Fall mit der adaptiven Rechnung 59 % der Rechenzeit eingespart werden können, sind dies mit einem homogenen Material sogar 89 %.

Die entwickelte Methode kann ihre volle Stärke dann zeigen, wenn die Lokalisierungsphänomene nur in kleinen Bereichen auftreten und in großen Teilen Kontinuumselemente (Level 1) eingesetzt werden können. Verglichen mit dem Feinskalenproblem können dann viele Freiheitsgrade eingespart werden. Eine effiziente Berechnung großer Strukturen ist somit möglich, ohne dass zur Abbildung von Phänomenen auf der Ebene der Mikrostruktur die gesamte Mikrostruktur aufgelöst werden muss.

## Abstract

The present work focusses on the development of a method that enables simulation of fragmentation of cohesive frictional materials using the discrete element method without fully resolving the microstructure. This requires modelling of phenomena on different geometric scales. In order to link these scales in a single simulation, coupling of the finite element method (FEM) and the discrete element method (DEM) is suggested which combines the efficiency of the FEM with the accuracy of the DEM. The proposed concept transfers ideas from the quasicontinuum method in the field of atomistics to problems in structural mechanics of cohesive frictional materials. Before describing the method and analysing the results of some numerical examples, different strategies for material modelling are discussed.

On different scales, materials show a different structure. Depending on the scale that the material is looked upon, different methods are applied for modelling. On the macroscopic scale, most materials can be considered continuous. When zooming in, many materials have a discrete microstructure. One example is concrete, where grains, which are also called aggregates, reside in a matrix of cement. On a very fine scale, the atomic scale, all materials are discrete. In order to accurately predict the behaviour of discrete materials until failure, mechanical models are required that are capable of representing the complex processes on the level of the discrete microstructure. Two appropriate methods are presented in this work: the discrete element method (CUNDALL UND STRACK 1979), which is often used for simulating granular or cohesive frictional materials, and the molecular dynamics (ALDER UND WAINWRIGHT (1957) and ALDER UND WAINWRIGHT (1959)) for simulations on the atomic scale. The large numerical effort limits the size of computable structures and therefore is a disadvantage of these methods.

On the macroscopic level, methods based on continuum mechanics descriptions like the finite element method (FEM) are efficient and reliable as long as the solution is relatively smooth. A precondition for the application of continuum methods is scale separation. Scale separation means that the dimensions of the global structure are much larger than the dimensions of the microstructure so that homogenisation methods can be applied. Localisation phenomena of the microstructure can only be represented in an average sense and not as detailed as with discrete methods. In addition to the finite element method (TURNER U. A. (1956), ARGYRIS (1960) and ZIENKIEWICZ UND CHEUNG (1967)), two other continuum methods are introduced: the smoothed particle hydrodynamics (LUCY (1977) und GINGOLD UND MONAGHAN (1977)) and the material point method (SULSKY U. A. 1994).

To optimise accuracy and computational efficiency, an obvious idea is to adaptively combine discrete and continuous methods. Local phenomena like crack initiation and evolution require resolution with a discrete model. Therefore, a discrete method is used in areas where localisation appears. In regions where the solution is relatively smooth, a continuum method is sufficiently accurate. This allows for the simulation of large struc-

tures for which computations using a fully resolved microstructure exceed the available amount of memory. Coupling the two methods is especially efficient if the regions in which the microstructure needs to be fully resolved are relatively small and identified within an adaptive procedure. Various methods following this strategy may be found in previous publications. Three different concepts for coupling discrete and continuous methods are presented in this dissertation: The bridging domain method (BELYTSCHKO UND XIAO 2003), the bridging scale method (WAGNER UND LIU 2003) and the quasicontinuum method (TADMOR U. A. 1996), all of which originate in the field of atomistics.

Based on the quasicontinuum method, a mesh and model adaptive method is developed in order to address issues in structural mechanics. Physical particles build the material of the examined structures on a small scale. Small and large scale of the considered materials differ by only one or two orders of magnitude, but not more. The computations should be started with a coarse finite element discretisation. The transition to the fully resolved discrete model should develop adaptively in the respective areas. The emphasis is not on the development of an advanced discrete element method for certain applications but rather on the adaptive strategy. Therefore, a simple form of the discrete element method is used to model the discrete fine scale, which is basically a lattice method. The nodes of a lattice made up of equilateral triangles represent the centres of round, equally sized and rigid particles. It is assumed this is a good approximation of the microstructure of a material. Hence, the numerical solution obtained with the lattice method represents the material behaviour in a realistic way: The finite element method provides the kinematics of the system and the lattice method drives the constitutive behaviour.

The finite element mesh with triangular elements is refined adaptively in areas of high strain gradients. A specific characteristic of the applied mesh refinement procedure is that new nodes are always placed at the centre of a particle in the microstructure. This ensures that at the end of mesh refinement the microstructure is fully resolved and each particle represents a FE node at the same time. Introducing three different element types, level 1 through level 3, furthermore provides an adaptive transition from the coarse scale (FEM) model to the fully resolved fine scale (DEM) model. The difference between the three kinds of elements is the method of computing the stiffness matrix, at which the microstructure is resolved with different accuracy. In regions with a coarse mesh (level 1) the material is represented by an equivalent continuum obtained from homogenisation. Where the mesh is resolved down to the small scale (level 3), the discrete particles interact according to the small scale model. Level 2 elements serve as transition between the scales.

Level 2 elements do not fully resolve the microstructure. However, for computation of the element stiffness matrix, every lattice member inside the element is considered individually. In case of a homogeneous microstructure in which all members of the regular lattice have the same material properties, the displacements of particles inside an element can be obtained from interpolation of the discrete particle movements (Cauchy-

Born rule) at the FE nodes. With the particle displacements at hand, the potentials of the lattice members inside the element can be computed in dependence of the nodal displacements. The sum of all these potentials yields the overall potential of the element. The second derivative of the overall potential with respect to the nodal displacements in turn yields the stiffness matrix of the level 2 element.

When applying the Cauchy-Born rule in case of a heterogeneous distribution of material properties among the trusses of the microstructure, the trusses within an element are not in equilibrium. In this case, a different strategy is used. The stiffness matrix is computed from eigenvalues and eigenvectors. The eigenvectors represent a deformation state and the eigenvalues represent the stiffness of the element in the respective state. For determination of the eigenvectors, a homogeneous material law is assumed. The eigenvectors hence correspond to the eigenvectors of the stiffness matrix of a level 1 element. In order to obtain the six eigenvalues, a subproblem on the level of the microstructure is solved for each eigenmode. The eigenvectors are used as displacement boundary conditions for each state. Requiring equivalence of the energies in the fine scale and the coarse scale model provides an equation for computing the eigenvalue of the level 2 element in the applied eigenmode. Since the microstructures of all level 2 elements are independent from each other, the stiffness matrices of the level 2 elements can be computed in parallel.

Applicability of the overall concept is demonstrated on four examples. All four examples feature a rectangular structure with a rhombus shaped hole in the centre which is stretched horizontally. In two of these examples, all lattice members share the same material properties (homogeneous case). In the remaining two examples, the material properties are distributed heterogeneously. In one of the two examples per case, a linear elastic material law is used for the lattice members, and in the second example, individual members can damage according to a uniaxial linear softening law. For building the heterogeneous model, an idealised section of concrete, built from round aggregates of different size, is projected on the abovementioned regular triangular lattice. The model becomes heterogeneous due to the fact that the lattice members are assigned different material properties, depending on their position (inside an aggregate, inside the matrix or building the interface). For linear elastic lattice members, stiffness is varied. In case of linear softening, strength is varied.

The linear elastic examples show that the adaptive procedure performs well and that the results of the adaptive and the fine scale simulations are in good agreement. In the homogeneous case, adaptive simulation uses many degrees of freedom less than the reference solution with the fully resolved microstructure. However, during adaptive computation, several steps are necessary for refining the mesh. Nevertheless, the adaptive simulation is three times faster than the fine scale computation (wall clock time). Due to the smaller number of degrees of freedom, less memory is required.

In case of a heterogeneous microstructure fine scale computation is faster than adaptive computation. Since aggregates are distributed in the whole domain, the complete microstructure is heterogeneous. The highest deformation gradients develop at the in-

terface of aggregates and matrix. Hence, the mesh is refined in all these interfaces which leads to a huge number of degrees of freedom- even using the adaptive procedure. In combination with several refinement steps, which are required, computation time is extended. Despite the lack of efficiency, this example demonstrates that the heterogeneous microstructure is recognised and resolved by the refinement procedure and especially the level 2 elements. In this dissertation, parallelisation is not implemented for computing level 2 stiffness matrices.

The materialwise nonlinear examples also show that results obtained with the adaptive simulation are in good agreement with the numerical reference solution. The adaptive procedure resolves the heterogeneous microstructure as expected and a developing crack is directed around the stronger aggregates. In the heterogeneous case computation time can be reduced by about 59% with the adaptive simulation compared to the fine scale computation. A reduction by 89% is achieved in case of a homogeneous material.

The method developed is especially powerful in case localisation takes only place in a small region and continuum elements (level 1) can be used in large areas. Compared to the fine scale problem, many degrees of freedoms can be omitted. An efficient computation of large structures is possible without fully resolving the microstructure for a representation of phenomena on a microstructural level.

## Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Zeit als akademische Mitarbeiterin am Institut für Baustatik und Baudynamik der Universität Stuttgart. In diesem Zusammenhang möchte ich mich beim „Stuttgart Research Centre for Simulation Technology“ (SRC SimTech) für die Förderung des Projektes „Adaptive Discrete-Continuous Modeling of Evolving Discontinuities“ im Rahmen des Exzellenzclusters SimTech an der Universität Stuttgart bedanken.

Besonders möchte ich dem Leiter des Instituts und Hauptberichter dieser Arbeit, Herrn Professor Manfred Bischoff, danken, der es mir ermöglichte, in einem optimalen Arbeitsumfeld mit äußerst angenehmer Atmosphäre zu promovieren. Ich konnte sowohl fachlich als auch persönlich viel von ihm lernen und habe stets die nötige Unterstützung erhalten, auch in schwierigeren Phasen. Diese Unterstützung trug wesentlich zur erfolgreichen Fertigstellung meiner Arbeit bei. Vielen Dank dafür!

Herrn Professor Stefan Luding danke ich für das Interesse an meiner Arbeit und die Übernahme des Mitberichts. Ein großes Dankeschön insbesondere für die sehr schnelle Durchsicht der Arbeit.

Vielen Dank an den ehemaligen Institutsleiter, Herrn Professor Ekkehard Ramm, der nach wie vor großes Interesse an den am Institut laufenden Arbeiten zeigt. In Vorbereitung auf Konferenzen hatte ich die Gelegenheit, mit ihm zusammen zu arbeiten und von seiner Erfahrung zu profitieren. In dieser Phase entstanden die ersten präsentierbaren Ergebnisse.

Meinem ehemaligen Kollegen Dr. Benjamin Schneider danke ich für das Bekanntmachen mit der Diskrete-Elemente-Methode zu Beginn meiner Zeit am Institut, sein Interesse an meiner Arbeit, seine fachliche Unterstützung, die vielen zielführenden Diskussionen, die Durchsicht meiner Arbeit und seine Freundschaft. Großer Dank geht außerdem an Dr. Malte von Scheven für seine Hilfsbereitschaft, wenn die Kommunikation zwischen mir und meinem Computer mal wieder fehl schlug, und die Unterstützung beim Programmieren. Insbesondere danke ich ihm aber für seine Offenheit für zahlreiche fachliche Diskussionen und für die Durchsicht einiger Kapitel. Ein herzliches Dankeschön auch an Dr. Anton Tkachuk für die Durchsicht eines Kapitels sowie an Dr. Bernhard Lippmann-Grob für die Rechtschreibkorrektur meiner Arbeit.

Bei meinen Kolleginnen und Kollegen am Institut für Baustatik und Baudynamik möchte ich mich für die freundschaftliche Atmosphäre am Institut bedanken, für die kollegiale Zusammenarbeit, sowie die unterhaltsamen Pausen und Freizeitaktivitäten.

Meinen lieben Eltern, meinem Bruder, meinen Großeltern und meinem Freund Thomas danke ich für die Liebe, die sie mir entgegenbringen, sowie die Unterstützung und den Rückhalt, den sie mir während meiner gesamten Ausbildungszeit gewährt haben.

Stuttgart, im Dezember 2014

Annika Sorg





---

# Inhaltsverzeichnis

<b>Abbildungsverzeichnis</b>	<b>xv</b>
<b>Tabellenverzeichnis</b>	<b>xix</b>
<b>Abkürzungen und Bezeichnungen</b>	<b>xxi</b>
<b>1 Einleitung</b>	<b>1</b>
1.1 Motivation und Zielsetzung . . . . .	1
1.2 Gliederung . . . . .	4
<b>2 Modellbildung von Materialien mit Mikrostruktur</b>	<b>5</b>
2.1 Material und Struktur . . . . .	6
2.2 Diskrete Modelle . . . . .	8
2.2.1 Molekulardynamik . . . . .	10
2.2.2 Diskrete-Elemente-Methode . . . . .	12
2.2.3 Diskrete Strukturmodelle . . . . .	13
2.3 Kontinuumsmodelle . . . . .	15
2.3.1 Finite-Elemente-Methode . . . . .	16
2.3.2 Smoothed Particle Hydrodynamics . . . . .	18
2.3.3 Material-Point-Methode . . . . .	20
2.4 Diskretisierung oder diskretes Modell . . . . .	22
2.4.1 Diskretisierung mit diskreten Modellen . . . . .	23
2.4.2 Regularisierung . . . . .	25
2.5 Diskret-kontinuierliche Kopplungsmethoden . . . . .	27
2.5.1 Bridging-Domain-Methode . . . . .	30

2.5.2	Bridging-Scale-Methode . . . . .	31
2.5.3	Quasikontinuumsmethode . . . . .	32
<b>3</b>	<b>Grundlagen der Kontinuumsmechanik und der Finite-Elemente-Methode</b>	<b>35</b>
3.1	Quasistatisches Randwertproblem . . . . .	36
3.2	Schwache Form des Randwertproblems . . . . .	37
3.3	Diskretisierung . . . . .	39
3.4	Linearisierung . . . . .	42
3.5	Konstitutivgesetze . . . . .	43
3.5.1	Lineare Elastizität . . . . .	43
3.5.2	Isotrope Elasto-Schädigung . . . . .	45
<b>4</b>	<b>Netz- und modelladaptive diskretisierte Partikelmethode</b>	<b>51</b>
4.1	Grundlagen . . . . .	52
4.2	Adaptive Netzverfeinerung . . . . .	55
4.2.1	Kriterium zur Netzverfeinerung . . . . .	56
4.2.2	Verfeinerungsalgorithmus . . . . .	58
4.2.3	Delaunay-Triangulation . . . . .	61
4.3	Modelladaptivität . . . . .	62
4.4	Berechnungsablauf . . . . .	64
<b>5</b>	<b>Adaptive Auflösung der Mikrostruktur für homogenes Material</b>	<b>67</b>
5.1	Kontinuumsmodell (Level 1) . . . . .	67
5.1.1	Elementsteifigkeitsmatrix . . . . .	68
5.1.2	Materielle Nichtlinearität . . . . .	69
5.2	Approximiertes diskretes Modell (Level 2) . . . . .	70
5.2.1	Elementsteifigkeitsmatrix . . . . .	70
5.2.2	Materielle Nichtlinearität . . . . .	74
5.3	Vollständig aufgelöstes diskretes Modell (Level 3) . . . . .	76
5.3.1	Elementsteifigkeitsmatrix . . . . .	76
5.3.2	Materielle Nichtlinearität . . . . .	77
<b>6</b>	<b>Erweiterung auf heterogene Materialien</b>	<b>79</b>
6.1	Heterogene Mikrostruktur . . . . .	80
6.2	Kontinuumsmodell (Level 1) . . . . .	83
6.2.1	Elementsteifigkeitsmatrix . . . . .	84
6.2.2	Materielle Nichtlinearität . . . . .	85
6.3	Approximiertes diskretes Modell (Level 2) . . . . .	86
6.3.1	Elementsteifigkeitsmatrix . . . . .	87
6.3.2	Materielle Nichtlinearität . . . . .	92
6.4	Vollständig aufgelöstes diskretes Modell (Level 3) . . . . .	96

---

<b>7</b>	<b>Numerische Beispiele</b>	<b>99</b>
7.1	Homogen verteilte Stabsteifigkeiten . . . . .	99
7.1.1	Linear elastische Berechnungen . . . . .	101
7.1.2	Materiell nichtlineare Berechnungen . . . . .	104
7.2	Heterogen verteilte Stabsteifigkeiten . . . . .	108
7.2.1	Linear elastische Berechnungen mit Variation der Steifigkeit . . .	108
7.2.2	Materiell nichtlineare Berechnungen mit Variation der Festigkeit .	112
<b>8</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>117</b>
8.1	Zusammenfassung . . . . .	117
8.2	Ausblick . . . . .	119
<b>A</b>	<b>Anhang</b>	<b>121</b>
A.1	Beitrag eines Stabes zur Elementsteifigkeitsmatrix . . . . .	121
A.2	Beitrag eines Stabes zum inneren Kraftvektor . . . . .	123
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>125</b>



---

# Abbildungsverzeichnis

2.1	Von oben links nach unten rechts, die unterschiedliche Mikrostruktur folgender Materialien: Eisen (bcc-Kristallgitter), Zellstoff eines Papiertaschentuchs, Kies, Beton. . . . .	7
2.2	Diskrete Strukturmodelle. Von oben links nach unten rechts: Multihalle in Mannheim, Sydney Harbour Bridge, Kohlenstoffnanoröhre, Graphen. .	14
2.3	Skizze einer Kernfunktion $\Phi(r, h)$ , dargestellt im Zweidimensionalen. Darin ist $r_i = \ \mathbf{r}_i\  = \ \mathbf{x} - \mathbf{x}_i\ $ der Abstand des Partikels $i$ zum Zentrum. . .	19
2.4	Sich während der Rechnung ändernder Bezug von Materialpunkten und Hintergrundnetz bei der Material-Point-Methode. (I) Ausgangskonfiguration. (II) Lagrange'sches Netz zur Lösung der Bewegungsgleichung. (III) Netz wird nach jedem Schritt in die Ausgangskonfiguration zurück verformt.	21
2.5	Einteilung von Simulationenmethoden, ihrer Anwendung und der Art der Lösung in die Kategorien diskret und kontinuierlich. . . . .	23
2.6	Sprung in den Verschiebungen normal zur Versagensfläche (Riss, Gletscherspalte) und Sprung in den Verschiebungen tangential zur Versagensfläche (Schneebrett, Gletschneelawine, Hangrutsch). . . . .	26
2.7	Kopplung bei der Bridging-Domain-Methode in 1D (nach XIAO UND BELYTSCHKO (2004)). . . . .	30
3.1	Dreieckselement mit Koordinaten im Parameterraum. . . . .	41
3.2	Evolution der Schädigung und Spannungs-Dehnungs-Diagramm eines einzelnen Stabes. . . . .	48

3.3	Materialroutine zur Bestimmung der in der Belastungsgeschichte bis zur aktuellen Iteration maximal erreichten Verzerrung $\kappa_{it}$ eines Stabes, der Schädigung $d_{it}$ , der Materialtangente $E_{tan}$ und der Materialsekante $E_{sec}$ .	50
4.1	Regelmäßige Mikrostruktur aus gleich großen, starren und runden Partikeln – Dreiecksgitter aus Federn der Steifigkeit $c$ .	53
4.2	Zusammenhang zwischen der FE-Kinematik und dem Konstitutivgesetz des diskreten Materials.	54
4.3	Ermittlung des geglätteten Deformationsgradienten $\bar{\mathbf{F}}$ (für Element 13).	57
4.4	Verfeinerung von Dreieck $EFG$ nach Algorithmus 2 (lokal) aus RIVARA (1984).	58
4.5	Netzverfeinerungsalgorithmus – neue Knoten auf Partikelpositionen.	59
4.6	Verfeinerung eines Randlements ohne Erhaltung des Strukturrands.	60
4.7	Kantenflip bei Elementen, deren Umkreis einen Knoten eines Nachbarlements enthält.	61
4.8	a) Level 1: Einheitszelle zur Berechnung des homogenen Materialgesetzes für ein Kontinuumsmodell. b) Level 2: Federn, die vollständig im Element liegen (gestrichelt) und zwischen zwei Elementen (gepunktet). c) Level 3: Vollständig aufgelöste Mikrostruktur in der Mitte.	63
4.9	Berechnungsablauf im linearen Fall mit Netzverfeinerung.	65
4.10	Berechnungsablauf im materiell nichtlinearen Fall mit Netzverfeinerung.	66
5.1	Regelmäßiges Dreiecksgitter mit hexagonaler Einheitszelle.	68
5.2	Stab in einem Element mit Knoten- und Partikelverschiebungen.	71
5.3	Sortierung der Partikel und Stäbe hinsichtlich ihrer Lage zum Element im umschreibenden Parallelogramm.	72
5.4	Die Steifigkeitsmatrix von Stab $S$ wird für Element 1 und 2 gebraucht. Sie zählt jeweils mit einem Faktor 0,5 zur Elementsteifigkeitsmatrix der beiden Elemente.	74
5.5	Level 3-Element mit den Knotenkoordinaten im Parameterraum (hier für ein beliebig im Raum orientiertes Gitter gezeichnet).	77
6.1	Starre, kreisrunde Partikel unterschiedlicher Größe, deren Kohäsion über Stabelemente abgebildet wird.	80
6.2	Projektion eines Betonquerschnitts auf ein regelmäßiges Dreiecksgitter (nach SCHLANGEN UND VAN MIER (1992)).	81
6.3	Anteilige Länge der Stäbe in den Aggregaten, der Matrix und den Interfaces.	85
6.4	Eindimensionaler Stab aus vier Teilstäben unterschiedlicher Steifigkeit unter Zugbelastung.	86
6.5	Level 2-Element und dessen Mikrostruktur mit den Verschiebungsfreiheitsgraden $\mathbf{d}$ und $\bar{\mathbf{D}}$ .	87

---

6.6	Mikrodiskretisierung eines Level 2-Elements mit Randbedingungen. . . .	89
6.7	Die Mikrostruktur von Element 52 (siehe Abbildung 7.2) aus dem Beispiel in Abschnitt 7.2.1 in den sechs Eigenformen (20-fach überhöht). . . . .	91
6.8	Ablauf der Berechnung der Steifigkeitsmatrix eines Level 2-Elements im Fall einer heterogenen Mikrostruktur und einem linearen Stoffgesetz. . . .	93
6.9	Ablauf der Berechnung der Steifigkeitsmatrix und des inneren Kraftvektors eines Level-2-Elements im Fall einer heterogenen Mikrostruktur und eines nichtlinearen Stoffgesetzes. . . . .	94
7.1	Strukturabmessungen und Belastung links, Mikrostruktur rechts. . . . .	100
7.2	Ausgangsnetz aus Level 1-Elementen. . . . .	100
7.3	Netz nach der Verfeinerung mit Elementen aller drei Level. Zwei Stäbe im Modell sind markiert. . . . .	101
7.4	Vertikalverschiebungen $u_y$ (in mm) in der deformierten Konfiguration (10-fach überhöht). Oben: DNS, unten: adaptive Simulation. . . . .	102
7.5	Netz nach 270 Belastungsschritten mit Elementen aller drei Level. . . . .	105
7.6	Schädigungsfortschritt nach 270 Schritten in der undeformierten Konfiguration. Links: DNS, rechts: adaptive Simulation. . . . .	105
7.7	Schädigungsfortschritt nach 270 Schritten in der deformierten Konfiguration (100-fach überhöht). Links: DNS, rechts: adaptive Simulation. . . . .	106
7.8	Last-Verschiebungs-Kurven der DNS und der adaptiven Simulation. . . . .	107
7.9	Strukturabmessungen, Belastung und Verteilung der Aggregate. . . . .	108
7.10	Netz nach der Verfeinerung mit Elementen aus Level 2 und Level 3. . . . .	110
7.11	Vertikalverschiebungen $u_y$ (in mm) in der deformierten Konfiguration (10-fach überhöht). Oben: DNS, unten: adaptive Simulation. . . . .	111
7.12	Netz nach 200 Belastungsschritten mit Elementen aller drei Level. . . . .	113
7.13	Schädigungsfortschritt nach 200 Schritten in der deformierten Konfiguration (200-fach überhöht). Links: DNS, rechts: adaptive Simulation. . . . .	114
7.14	Last-Verschiebungs-Kurven der DNS und der adaptiven Simulation. . . . .	115





---

# Tabellenverzeichnis

3.1	Materialtangente an unterschiedlichen Punkten des Spannungs-Dehnungs-Diagramms. . . . .	47
5.1	Faktor $\omega_S$ für den Beitrag zur Elementsteifigkeitsmatrix eines Stabes in Abhängigkeit dessen Position im Element. . . . .	73
6.1	Zuweisung der Lage eines Gitterstabes aufgrund der Position der beiden Partikel, die er verbindet. . . . .	82
7.1	Vergleich der Ergebnisse für $u_y$ , $F_{\text{int},1}$ und $F_{\text{int},2}$ aus der DNS und der adaptiven Simulation. . . . .	103
7.2	$x$ - und $y$ -Koordinaten der Mittelpunkte der Aggregate und deren Radien $r$ . Alle Angaben in mm. . . . .	109



---

# Abkürzungen und Bezeichnungen

Auf folgende Bezeichnungen und Abkürzungen wird mehrfach Bezug genommen. Fettgedruckte Buchstaben bezeichnen Vektoren, Tensoren und Matrizen. Ob es sich um einen Tensor oder eine Matrix handelt, ist dem jeweiligen Kontext zu entnehmen.

## Abkürzungen

ALE	Arbitrary Lagrangian Eulerian
BDM	Bridging-Domain-Methode
BSM	Bridging-Scale-Methode
C	Kontinuum
CST	Constant Strain Triangle
DEM	Diskrete-Elemente-Methode
DNS	direkte numerische Simulation
EAM	Embedded-Atom-Methode
FE	finite Elemente
FEM	Finite-Elemente-Methode
I	Übergang (Interface)
max	maximal
MD	Molekulardynamik
MPM	Material-Point-Methode
o	oben
PDE	partielle Differentialgleichung (Partial Differential Equation)
QC	Quasikontinuum

RVE	repräsentatives Volumenelement
SPH	Smoothed Particle Hydrodynamics
SPR	Superconvergent Patch Recovery
u	unten
X-FEM	erweiterte (eXtended) Finite-Elemente-Methode

### Mathematische Notationen

$\mathbb{R}^n$	n-dimensionaler Euklidischer Raum
$\partial$	Operator für partielle Ableitung
$\cup$	Assemblierungsoperator
$\nabla$	Gradientenoperator
$\text{div}(\bullet)$	Divergenz bezüglich kartesischem Koordinatensystem
$(\bullet)^h$	diskretisierte Größe
$\emptyset$	leere Menge
$\forall$	für alle
$\delta(\bullet)$	virtuelle Größe
$\delta(\bullet)$	Dirac-Delta-Funktion (SPH)
$\mathbf{J}(\bullet)$	Jacobi-Matrix
$(\bullet)_{,x}$	partielle Ableitung nach $x$
$(\bullet) _x$	ausgewertet bei der Größe $x$
$\ \bullet\ $	Euklidische Norm
$(\bullet)_0$	in der Ausgangskonfiguration
$\frac{\partial(\bullet)}{\partial(\bullet)}$	partielle Ableitung
$\otimes$	Tensorprodukt
:	2-fach verjüngendes Produkt
$\Delta(\bullet)$	Inkrement

### Lateinische Buchstaben

<b>a</b>	Gittervektor
<b>A</b>	Querschnittsfläche
<b>A<sub>d</sub></b>	geschädigte Querschnittsfläche
<b>B</b>	B-Operator
<b>b</b>	externe Volumenlast
<b>C</b>	Materialmatrix
<b>C<sub>el</sub></b>	elastischer Materialtensor

$\mathbf{C}_{\text{sec}}$	Sekantensteifigkeit (vierstufiger Tensor)
$\mathbf{C}_{\text{tan}}$	Materialtangente (vierstufiger Tensor)
$C^k$	Kontinuitätsgrad $k$ einer Funktion
$c$	Federsteifigkeit
$c^A$	Steifigkeit einer Feder im Aggregat
$c^I$	Steifigkeit einer Feder des Interfaces
$c^M$	Steifigkeit einer Feder in der Matrix
$\mathbf{D}$	Vektor der globalen Knotenverschiebungen
$\tilde{\mathbf{D}}$	Vektor der Knotenverschiebungen der Mikrostruktur
$\mathbf{d}$	Vektor der Knotenverschiebungen eines Dreieckselements
$\tilde{\mathbf{d}}$	Vektor der Knotenverschiebungen eines Stabelements
$\tilde{\mathbf{d}}^P$	Vektor der Verschiebungen eines Partikels/Punktes $P$
$\hat{\mathbf{d}}^P$	vorgeschriebene Randverschiebungen eines Partikels/Punktes $P$
$d$	Schädigungsparameter
$d_{\text{it}}$	Schädigungsparameter während der Iteration
$E$	Elastizitätsmodul (E-Modul)
$E^A$	E-Modul eines Stabes im Aggregat
$E^I$	E-Modul eines Stabes im Interface
$E^M$	E-Modul eines Stabes in der Matrix
$E_m$	mittlerer E-Modul
$E_{\text{tan}}$	Materialtangente
$E_{\text{sec}}$	Sekantensteifigkeit
$\mathbf{e}$	Basisvektor im kartesischen Koordinatensystem
$\mathbf{F}$	Deformationsgradient
$\bar{\mathbf{F}}$	geglätteter Deformationsgradient
$\mathbf{F}_{\text{ext}}$	globaler Vektor der äußeren Kräfte
$\tilde{\mathbf{F}}_{\text{ext}}$	Vektor der äußeren Kräfte der Mikrostruktur
$\mathbf{F}_{\text{int}}$	globaler Vektor der inneren Kräfte
$\tilde{\mathbf{F}}_{\text{int}}$	Vektor der inneren Kräfte der Mikrostruktur
$\mathbf{f}$	gemittelte Knotenwerte des geglätteten Deformationsgradienten $\bar{\mathbf{F}}$
$\mathbf{f}_{\text{ext}}$	Vektor der äußeren Kräfte eines Dreieckselements
$\mathbf{f}_{\text{int}}$	Vektor der inneren Kräfte eines Dreieckselements
$\mathbf{f}_{\text{int}}^{(L1)}$	Vektor der inneren Kräfte eines Level 1-Elements
$\mathbf{f}_{\text{int}}^{(L2)}$	Vektor der inneren Kräfte eines Level 2-Elements
$\mathbf{f}_{\text{int}}^{(L3)}$	Vektor der inneren Kräfte eines Level 3-Elements
$\mathbf{f}_{\text{int}}^{(L2,S)}$	Beitrag eines Stabes zum inneren Kraftvektor eines Level 2-Elements
$\mathbf{f}_{\text{int}}^{(L3,S)}$	Beitrag eines Stabes zum inneren Kraftvektor eines Level 3-Elements
$\tilde{\mathbf{f}}_{\text{int}}$	Vektor der inneren Kräfte eines Stabelements
$F$	Kraft in einer Feder bzw. einem Stab

$f$	Belastungsfunktion
$G_f$	Bruchenergie
$\mathbf{H}$	Verschiebungsgradient
$\bar{\mathbf{H}}$	geglätteter Verschiebungsgradient
$h$	charakteristische Glättungslänge (SPH)
$\mathbf{I}$	Einheitsmatrix
$\mathbf{K}$	globale Steifigkeitsmatrix
$\mathbf{K}_{\text{tan}}$	globale Tangentensteifigkeitsmatrix
$\mathbf{k}_{\text{tan}}$	Tangentensteifigkeitsmatrix eines Dreieckselements
$\mathbf{k}^{(L1)}$	Steifigkeitsmatrix eines Level 1-Elements
$\mathbf{k}^{(L2)}$	Steifigkeitsmatrix eines Level 2-Elements
$\mathbf{k}^{(L3)}$	Steifigkeitsmatrix eines Level 3-Elements
$\mathbf{k}^{(L2,S)}$	Beitrag eines Stabes zur Steifigkeitsmatrix eines Level 2-Elements
$\mathbf{k}^{(L3,S)}$	Beitrag eines Stabes zur Steifigkeitsmatrix eines Level 3-Elements
$\mathbf{k}_{\text{tan}}^{(L1)}$	Tangentensteifigkeitsmatrix eines Level 1-Elements
$\mathbf{k}_{\text{tan}}^{(L2)}$	Tangentensteifigkeitsmatrix eines Level 2-Elements
$\mathbf{k}_{\text{tan}}^{(L3)}$	Tangentensteifigkeitsmatrix eines Level 3-Elements
$\tilde{\mathbf{K}}$	Steifigkeitsmatrix der Mikrostruktur
$\tilde{\mathbf{K}}_{\text{tan}}$	Tangentensteifigkeitsmatrix der Mikrostruktur
$\tilde{\mathbf{k}}$	Steifigkeitsmatrix eines Stabelements
$\tilde{\mathbf{k}}_{\text{tan}}$	Tangentensteifigkeitsmatrix eines Stabelements
$L$	Länge eines Stabes bzw. Abstand der Mittelpunkte zweier Partikel
$L_A$	Länge aller Stäbe einer Gitterrichtung im Aggregat
$L_I$	Länge aller Stäbe einer Gitterrichtung im Interface
$L_M$	Länge aller Stäbe einer Gitterrichtung in der Matrix
$L_{\text{tot}}$	Gesamtlänge aller Stäbe einer Gitterrichtung
$L_x$	$x$ -Komponente der Länge $L$
$L_y$	$y$ -Komponente der Länge $L$
$m$	Masse
$\mathbf{N}$	Formfunktionen
$\mathbf{n}$	Normalenvektor
$n_{\text{ele}}$	Anzahl der Elemente der Diskretisierung
$n_{\text{node}}$	Anzahl der Knoten je Element
$n_{\text{spring}}$	Anzahl der Federn im Gebiet
$n_{\text{step}}$	Anzahl an Belastungs- oder Verfeinerungsschritten
$n_{\text{truss}}$	Anzahl der Stäbe in einem Level 2-Element
$\mathbf{q}$	Vektor interner Geschichtsvariablen
$\mathbf{r}$	Abstand vom Kugelzentrum (SPH)
$\mathbf{R}$	Residuum

$\tilde{\mathbf{R}}$	Residuum der Mikrostruktur
$r$	Betrag des Abstands vom Kugelzentrum (SPH)
$\mathbf{t}$	Spannungsvektor
$\hat{\mathbf{t}}$	externe Randlast (Neumann-Randbedingung)
$\mathbf{U}$	rechter Strecktensor
$\mathbf{u}$	Verschiebungsvektor
$\hat{\mathbf{u}}$	vorgeschriebene Randverschiebung (Dirichlet-Randbedingung)
$\bar{\mathbf{u}}$	Grobskalenverschiebungen (BSM)
$\mathbf{u}'$	Feinskalenverschiebungen (BSM)
$u$	Verschiebung
$\Delta V$	Volumenelement
$\mathbf{X}$	Ortsvektor in der Ausgangskonfiguration
$\mathbf{x}$	Ortsvektor in der aktuellen Konfiguration
$\mathbf{x}^P$	Ortsvektor eines Partikels $P$ in der aktuellen Konfiguration

### Griechische Buchstaben

$\alpha$	Wichtungparameter (BDM)
$\Gamma$	Gebietsrand
$\Gamma_n$	Schnittfläche
$\Gamma_t$	Neumann-Rand
$\Gamma_u$	Dirichlet-Rand
$\delta\Pi$	virtuelle Arbeit
$\delta\Pi_{\text{int}}$	virtuelle innere Arbeit
$\delta\Pi_{\text{ext}}$	virtuelle äußere Arbeit
$\boldsymbol{\varepsilon}$	Verzerrungstensor
$\varepsilon$	Verzerrung
$\tilde{\varepsilon}$	äquivalente Verzerrung
$\hat{\varepsilon}$	Grenzwert, ab dem ein Element verfeinert werden muss
$\varepsilon_e$	Diskretisierungsfehler im Element $e$
$\varepsilon_\lambda$	Grenzwert zur Modelladaption
$\varepsilon_{\text{tol}}$	kleiner Toleranzwert
$\bar{\eta}$	maximal zulässiger Fehler
$\kappa$	maximale Verzerrung in der Belastungsgeschichte
$\kappa_{\text{it}}$	maximale Verzerrung in der Belastungsgeschichte in den Iterationen
$\kappa_0$	Grenzwert der Verzerrung für Schädigungsbeginn
$\kappa_0^A$	Verzerrungsgrenzwert $\kappa_0$ eines Stabes im Aggregat
$\kappa_0^I$	Verzerrungsgrenzwert $\kappa_0$ eines Stabes im Interface

## Abkürzungen und Bezeichnungen

---

$\kappa_0^M$	Verzerrungsgrenzwert $\kappa_0$ eines Stabes in der Matrix
$\kappa_m$	Grenzwert der Verzerrung für vollständige Schädigung
$\kappa_m^A$	Verzerrung $\kappa_m$ eines Stabes im Aggregat
$\kappa_m^I$	Verzerrung $\kappa_m$ eines Stabes im Interface
$\kappa_m^M$	Verzerrung $\kappa_m$ eines Stabes in der Matrix
$\lambda$	Eigenwert
$\lambda$	Lastfaktor
$\lambda$	erste Lamé-Konstante
$\mu$	zweite Lamé-Konstante
$\nu$	Querdehnzahl
$\xi$	Koordinaten im Parameterraum
$\xi^P$	Koordinaten eines Partikels/Punktes $P$ im Parameterraum
$\pi$	Potential
$\pi_S$	Potential eines Stabes $S$
$\rho$	Dichte
$\sigma$	Cauchy'scher Spannungstensor
$\sigma$	Spannung
$\sigma_{\text{eff}}$	effektive Spannung
$\Phi$	Kernfunktion (SPH)
$\varphi^A$	Anteile an Stäben in Aggregaten
$\varphi^I$	Anteile an Stäben die das Interface bilden
$\varphi^M$	Anteile an Stäben in der Matrix
$\Omega$	Gebiet
$\Omega^e$	Gebiet eines Finiten Elements
$d\Omega$	Teilgebiet
$\omega_S$	Faktor, der den Anteil zur Steifigkeitsmatrix bestimmt

Weitere Abkürzungen und Bezeichnungen werden beim jeweiligen Auftreten erläutert.







---

## Einleitung

### 1.1 Motivation und Zielsetzung

Insbesondere in den Ingenieurbereichen, aber auch in der Physik und der Chemie werden Computersimulationen häufig zur Untersuchung des Deformationsverhaltens von Strukturen unter äußerer Belastung eingesetzt. Das globale Strukturverhalten hängt einerseits von der Geometrie der Struktur ab, andererseits ist es aber auch wesentlich durch das Material, aus dem die Struktur aufgebaut ist, bestimmt. Auf der Ebene der Mikrostruktur eines Materials hat wiederum der strukturelle Aufbau des Materials einen großen Einfluss auf das Materialverhalten. Um wichtige Phänomene sowohl auf der Makro- als auch auf der Mikroskala mit einer Simulation darstellen zu können, ist es wichtig, dass die verwendeten Modelle dazu in der Lage sind, das tatsächliche Verhalten abzubilden.

Materialien weisen auf verschiedenen Skalen eine unterschiedliche Struktur auf. Deshalb werden, abhängig von der Skala auf der das Material betrachtet wird, unterschiedliche Methoden zur Modellierung eingesetzt. Wird das globale Strukturverhalten auf einer sehr groben Skala untersucht, die der Skala der Mikrostruktur des Materials deutlich übergeordnet ist, so gilt Skalenseparation. Viele Materialien können dadurch auf der Makroskala als homogen betrachtet werden. Die Lösung des Problems ist dann in der Regel relativ glatt und Methoden, die auf Formulierungen der Kontinuumsmechanik basieren, wie beispielsweise die Finite-Elemente-Methode, ermöglichen eine effiziente Problemlösung. Bei Kontinuumsmethoden entsprechen die Materialeigenschaften gemittelten Werten, was dazu führt, dass sie nichtlineares, lokalisierendes Materialverhalten nicht ohne Weiteres abbilden können.

Bei Betrachtung auf einer feinen Skala sind alle Materialien aus Teilchen aufgebaut, den Atomen. Je näher die globalen Strukturabmessungen an der Skala der Mikrostruktur

liegen, desto wichtiger ist es, Details der Mikrostruktur im Modell zu berücksichtigen. Hohlräume, Versetzungen im Atomgitter und Fehlstellen führen beispielsweise dazu, dass das Material seinen homogenen Charakter verliert und nicht länger als kontinuierlich betrachtet werden kann. Unter Belastung kann das Material in solchen inhomogenen Bereichen lokalisieren. Um zuverlässige Prognosen über das Verhalten heterogener Materialien, bis hin zum Versagen, stellen zu können, werden mechanische Modelle benötigt, die die komplexen Vorgänge auf der Ebene der diskreten Mikrostruktur erfassen können. Auf der Skala von Atomen und Molekülen bietet die Molekulardynamik (ALDER UND WAINWRIGHT (1957) und ALDER UND WAINWRIGHT (1959)) einen Rahmen für derartige Simulationen.

Doch auch auf deutlich größeren Skalen sind einige Materialien zu finden, deren innere Struktur entweder aus festen Teilchen besteht oder die beim Bruch in feste Teilchen zerfallen, wie beispielsweise kohäsive Reibungsmaterialien. Ein Beispiel eines solchen Werkstoffs ist Beton, der aus einer Matrix aus Zement besteht, in die ein Zuschlag aus Gesteinskörnern unterschiedlicher Größe eingebettet ist, die Aggregate. Zur Simulation kohäsiver Reibungsmaterialien kann die Diskrete-Elemente-Methode (CUNDALL UND STRACK 1979) verwendet werden, bei der starre und in späteren Erweiterungen auch deformierbare Partikel miteinander interagieren. Ein Nachteil der diskreten Methoden ist, dass sie einen hohen numerischen Aufwand erfordern, wodurch die Größe der zu berechnenden Strukturen begrenzt ist.

Für viele industrielle Anwendungen ist es wünschenswert, Strukturen auf grober Skala zu simulieren, dabei aber nicht auf die Modellierung lokaler Phänomene verzichten zu müssen. Dazu gehören mechanische Bearbeitungsprozesse, Erdaushub mit entsprechendem Materialabtrag oder die Modellierung stark nichtlinearen Verhaltens kohäsiver Reibungsmaterialien, wie beispielsweise das Bruchverhalten von Betonstrukturen unter Anpralleinwirkung oder bei Sprengungen. Bei diesen Prozessen ist der materielle Aufbau von Bedeutung, weshalb die Mikrostruktur bei entsprechenden Simulationen berücksichtigt werden sollte. Wird jedoch die Mikrostruktur im gesamten Gebiet fein aufgelöst, entstehen sehr große Berechnungsmodelle. Für einen optimalen Kompromiss aus Präzision und Effizienz ist es daher naheliegend, diskrete und kontinuierliche Methoden miteinander zu kombinieren. Dabei wird die Kontinuumsmethode dort eingesetzt, wo die Lösung relativ glatt ist, und die diskrete Methode in Bereichen, wo lokale Phänomene bedeutsam werden, also beispielsweise ein Riss entsteht, zu dessen Auflösung ein detailliertes Modell erforderlich ist. Sind die Bereiche, in denen die Mikrostruktur aufgelöst werden muss, verhältnismäßig klein und werden diese während der Rechnung adaptiv gefunden, kommen die Vorteile der Methodenkopplung am besten zur Geltung. In der Literatur gibt es einige Methoden, die den Ansatz, diskrete und kontinuierliche Modelle miteinander zu koppeln, verfolgen. Sie sind in den Übersichtsartikeln von CURTIN UND MILLER (2003) und MILLER UND TADMOR (2009) zusammengefasst. Bisher

gibt es solche Kopplungsmethoden hauptsächlich für Simulationen auf der Atomskala, wie beispielsweise die Bridging-Domain-Methode (BELYTSCHKO UND XIAO 2003), die Bridging-Scale-Methode (WAGNER UND LIU 2003) und die Quasikontinuumsmethode (TADMOR U. A. 1996).

In der vorliegenden Arbeit soll eine Methode entwickelt werden, die Simulationen des Bruchverhaltens kohäsiver Reibungsmaterialien mit einer Form der Diskrete-Elemente-Methode ermöglicht, ohne dass dazu die gesamte Mikrostruktur aufgelöst werden muss. Sie soll auf Materialien wie Beton anwendbar sein, bei denen die geometrische Skala der Mikrostruktur nur ein bis zwei Größenordnungen kleiner ist als die der Makrostruktur. Es gilt daher keine Skalenseparation und einige gängige Mehrskalmethoden können nicht angewendet werden. Die Berechnungen sollen mit einer groben Finite-Elemente-Diskretisierung begonnen werden und der Übergang zum fein aufgelösten diskreten Modell soll in entsprechenden Bereichen adaptiv stattfinden. Der Fokus dieser Arbeit liegt nicht darauf, eine hoch entwickelte Diskrete-Elemente-Methode für eine bestimmte Anwendung zu präsentieren, sondern auf der adaptiven Strategie. Daher wird zur Modellierung auf der diskreten, feinen Skala eine einfache Form der Diskrete-Elemente-Methode eingesetzt, die im Wesentlichen einer Gittermethode entspricht. Die kohäsiven Verbindungen zwischen den Partikeln werden durch Stäbe repräsentiert, denen ein Schädigungsmodell zugewiesen wird, sodass sie unter axialer Zugbelastung schädigen können.

Für die Kopplung der beiden Methoden wird das Konzept der Quasikontinuumsmethode auf Anwendungen in der Strukturmechanik übertragen. Diese Methode enthält zwei verschiedene Arten der Adaptivität: Einerseits wird das Netz in Bereichen großer Verzerrungsgradienten adaptiv verfeinert, andererseits wird das Modell, das zur Berechnung eingesetzt wird, diskret oder kontinuierlich, adaptiv ausgewählt. Bei der hier entwickelten Variante werden zur Realisierung der Modelladaptivität drei verschiedene Elementtypen (Level 1 bis Level 3) eingeführt, die bei der Berechnung der Elementsteifigkeitsmatrix die Mikrostruktur mit unterschiedlicher Genauigkeit auflösen. Zu Beginn wird dies für homogene Materialien, bei denen die Stäbe der Mikrostruktur alle die gleichen Materialeigenschaften haben, realisiert und später auf heterogene Materialien ausgeweitet. Im homogenen Fall können sämtliche Deformationen innerhalb eines Elements durch affine Transformationen ausgedrückt werden, was bei heterogener Mikrostruktur nicht möglich ist. Es handelt sich dann um sogenannte nicht-affine Deformationen (engl. „non-affine deformations“).

Die numerische Umsetzung erfolgt im Finite-Elemente-Programm „NumPro“, dem Forschungsprogramm am Institut für Baustatik und Baudynamik der Universität Stuttgart. Die Algorithmen sind in der objektorientierten Programmiersprache C++ sequentiell implementiert.

### 1.2 Gliederung

In Kapitel 2 wird zunächst das Thema der Materialmodellierung behandelt. Nachdem der Zusammenhang von Material und Struktur herausgearbeitet wurde, wird auf verschiedene Methoden zur diskreten und kontinuierlichen Modellierung eingegangen. Es werden weiterhin einige Aspekte diskutiert, die relevant werden, wenn diskrete Methoden zur Diskretisierung eingesetzt werden. Die Vorstellung von drei diskret-kontinuierlichen Kopplungsmethoden schließt das Kapitel. Die kontinuumsmechanischen Grundgleichungen werden in Kapitel 3 eingeführt. Es folgt die Formulierung des quasistatischen Randwertproblems in schwacher Form und die darauf aufbauende Finite-Elemente-Diskretisierung sowie die verwendeten Konstitutivgesetze.

Die Grundlagen der in dieser Arbeit entwickelten netz- und modelladaptiven Methode werden in Kapitel 4 geschaffen. Es wird auf das verwendete Feinskalenmodell eingegangen und die Art und Weise, wie die Kopplung des diskreten und des kontinuierlichen Modells umgesetzt wird, erläutert. Die beiden adaptiven Prozesse stellen einen zentralen Punkt dieser Methode dar und werden hier ausführlich behandelt. Abschließend wird der Berechnungsablauf geschildert. Die im Hinblick auf die Modelladaptivität eingeführten drei Elementtypen unterscheiden sich durch die Berechnung der Steifigkeitsmatrix, durch welche das gewählte Konstitutivgesetz Einzug in die Rechnung erhält. In Kapitel 5 wird die Berechnung der Steifigkeitsmatrizen der drei Elementtypen für den Fall eines homogenen Materials hergeleitet und anschließend in Kapitel 6 auf heterogene Materialien erweitert.

In Kapitel 7 wird anhand von vier Beispielen das Konzept der in den Kapiteln 4 bis 6 entwickelten Methode demonstriert. Für den Fall eines homogenen und eines heterogenen Materials werden jeweils ein Beispiel mit linear elastischem Materialgesetz sowie ein Beispiel, bei dem Entfestigung im Material vorgesehen ist, gewählt. Eine Zusammenfassung der Arbeit und ein Ausblick auf verschiedene Möglichkeiten zur Weiterentwicklung folgen in Kapitel 8.

---

# Modellbildung von Materialien mit Mikrostruktur

Der großen Anzahl unterschiedlicher Materialien werden fortlaufend neue hinzugefügt, die dahingehend entwickelt werden, bestmöglich an ihren Einsatzbereich angepasst zu sein. Die Vielzahl an Materialien reicht von den reinen Elementen des Periodensystems, wozu z. B. auch die reinen Metalle gehören, über in der Natur vorkommende Materialien wie Holz, Lehm, unterschiedliche Gesteinsarten, menschliches und tierisches Gewebe und weiterverarbeitete Materialien wie metallische Legierungen, Papier bzw. Karton bis hin zu vollständig synthetisch hergestellten Materialien wie Kunststoffen (Polymeren), Verbundwerkstoffen, wie z. B. Beton oder Karbonfaserverbundwerkstoffen, intelligenten Materialien, wie z. B. Formgedächtnislegierungen, usw. Betrachtet man diese Materialvielfalt, so ist offensichtlich, dass es kein Generalmodell für alle Materialien geben kann.

Dieses Kapitel befasst sich zunächst ganz allgemein damit, wie Material und Struktur miteinander in Verbindung stehen (Abschnitt 2.1), bevor auf die Modellierung verschiedener Materialtypen eingegangen wird. Es kann dabei auf der Betrachtungsskala zwischen zwei Arten von Materialien unterschieden werden, den diskreten Materialien und solchen, die als kontinuierlich betrachtet werden können. Für die jeweiligen Materialtypen gibt es unterschiedliche Modellierungsansätze. Diese unterscheiden sich, abgesehen von der Art des Materials, auch noch aufgrund der Anwendungsbereiche. In Abschnitt 2.2 werden zunächst verschiedene diskrete Modelle beschrieben, bevor in Abschnitt 2.3 auf diverse Kontinuumsmodelle eingegangen wird. Da nicht immer ganz offensichtlich ist, auf welcher Modellierungsseite man sich gerade befindet, werden in Abschnitt 2.4 die Unterschiede diskutiert, die sich ergeben, wenn eine Methode als Diskretisierungsmethode eingesetzt wird, oder wenn sie ein diskretes Modell beschreibt. Abschnitt 2.5 schließt das Kapitel mit einer Auswahl an Methoden, die diskrete und

kontinuierliche Methoden miteinander koppeln, um die Vorteile der jeweiligen Methode bestmöglich zu nutzen.

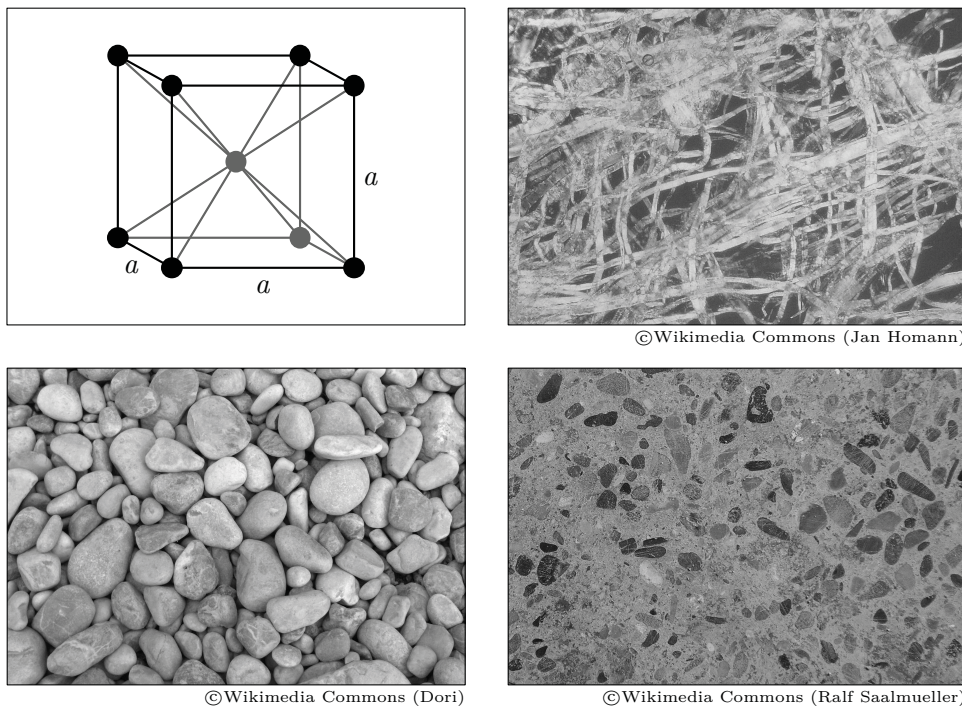
### 2.1 Material und Struktur

Jedes Material besitzt eine individuelle Mikrostruktur. Für einige ausgewählte Materialien ist diese in Abbildung 2.1 dargestellt. Betrachtet man zum Beispiel die Mikrostruktur eines Metalls, so wird man ein Gitter aus Atomen finden, welche im Idealfall eine sehr regelmäßige Anordnung haben. Holz und Papier hingegen sind aus einzelnen Fasern aufgebaut. Sand ist eine Ansammlung einzelner Sandkörner, welchen wiederum eine Gesteinsart zugrunde liegt. Sind die einzelnen Körner etwas größer, so spricht man von Kies. Ein Querschnitt eines Betons zeigt, dass dieser ebenfalls aus Körnern unterschiedlicher Größe besteht, den Aggregaten bzw. dem Zuschlag, welche in einer Matrix eines Zementgemisches eingebettet sind. Zement wiederum besteht aus einzelnen feinen Staubkörnern, diese wiederum aus noch kleineren Elementen, und so kann man jedes Material bis zur Atomskala und weiter auflösen. Bei manchen Materialien können Zwischenskalen ausgemacht werden, die das Material in typische Unterstrukturen auflösen, die sich aber nicht auf der Atomskala befinden, wie z. B. die Aggregate des eben beschriebenen Betons. Die Mikrostruktur eines Materials oder die eben genannten Strukturen auf einer Zwischenskala bestimmen wesentlich das globale Verhalten des Materials. Hierbei sei zum Beispiel an einen Riss durch einen Festkörper gedacht. Der Riss wird dort entstehen, wo das Material am schwächsten ist, wenn der Ort der Rissentstehung nicht schon allein durch die geometrische Struktur des Körpers selbst bestimmt ist. Und er wird sich dorthin ausbreiten, wo Schwachstellen im Material vorzufinden sind, wie z. B. kleine Hohlräume oder geringere Materialfestigkeiten.

Um eine reale Prognose über das Verhalten eines Materials unter gewissen äußeren Einflüssen stellen zu können, muss daher der Aufbau des Materials, also seine Mikrostruktur, in Betracht gezogen werden. Andererseits ist es so, dass das Verhalten einer Struktur unter einer bestimmten Last maßgeblich durch das Material, aus dem sie beschaffen ist, beeinflusst wird. Material und Struktur stehen also im direkten Bezug zueinander und können nicht ohne einander betrachtet werden.

Es gibt jedoch Situationen, bei denen es nicht so wichtig ist zu wissen, wie genau die Mikrostruktur aussieht, und es genügt, wenn man einige globale Größen kennt, um Aussagen für ganze Strukturen zu treffen, wie z. B. das Traglastverhalten oder die Gesamtdeformation. Linear elastisches isotropes Materialverhalten ist z. B. allein durch den Elastizitätsmodul (E-Modul) und die Querdehnzahl charakterisiert. Diese Größen lassen sich leicht mithilfe von Versuchen ermitteln und machen eine detaillierte Berech-





**Abbildung 2.1:** Von oben links nach unten rechts, die unterschiedliche Mikrostruktur folgender Materialien: Eisen (bcc-Kristallgitter), Zellstoff eines Papiertaschentuchs, Kies, Beton.

nung unnötig. Auch komplizierteres Materialverhalten lässt sich mithilfe einiger weniger Parameter abbilden, ohne jedes einzelne Atom modellieren zu müssen. Dies wären zum Beispiel plastisches oder viskoses Materialverhalten und Kombinationen daraus. Sollen jedoch Effekte modelliert werden, bei denen sehr lokale Veränderungen im Material eine große Auswirkung auf das globale Strukturverhalten haben, und stehen diese Veränderungen in direktem Zusammenhang mit der Mikrostruktur des Materials, wie dies z. B. bei Versagenshergängen der Fall ist, so kommt man nicht umhin, die Mikrostruktur bei der Modellierung zu berücksichtigen.

In dieser Arbeit stehen Problemstellungen im Vordergrund, bei denen es wichtig ist, dass die Mikrostruktur des Materials bei der Modellierung berücksichtigt wird, um die gewünschten Effekte abbilden zu können. Die Mikrostruktur ist dabei die Struktur des Materials auf einer Skala, die den globalen Strukturabmessungen untergeordnet ist. In welcher Größenordnung sich diese Skala befindet, hängt unter anderem davon ab, welches Material betrachtet wird und welche Effekte untersucht werden sollen. Dies können Effekte auf der Atomskala sein, dann bilden die Atome die Mikrostruktur des Materials. Es können aber auch Effekte auf einer wesentlich größeren Skala sein, wie z. B. der eingangs beschriebene Riss durch einen Beton. Die Anordnung der Aggregate, ihre Materialeigenschaften und der Verbund zwischen der Zementmatrix und den Aggregaten

sind in diesem Fall die Elemente, die im Wesentlichen den Rissverlauf durch das Material bestimmen. Sie bilden somit die Mikrostruktur. Die Mikroskala bezeichnet im Folgenden die Skala, auf der sich die wie eben definierte Mikrostruktur befindet, und wird auch Feinskala genannt. Die Skala, auf der sich die globalen Strukturabmessungen befinden, wird Makro- oder Grobskala genannt.

Um die diskrete Mikrostruktur eines Materials genau abzubilden, wie z.B. die Gitterstruktur eines Metalls, sind diskrete Modelle am besten geeignet. Sie eignen sich auch zur Modellierung von Materialien, die diskreter Natur sind, wie z.B. Sand, Kies oder anderen granularen Medien, wie Holzpellets oder Getreide. Den diskreten Methoden stehen die Kontinuumsmethoden gegenüber, bei denen auf eine exakte Modellierung der Mikrostruktur bewusst verzichtet wird und die Materialeigenschaften in verschmiertem Zustand berücksichtigt werden. Beide Modellierungsweisen haben ihre Vor- und Nachteile und dienen unterschiedlichen Anwendungen. In den folgenden beiden Abschnitten werden aus beiden Bereichen Methoden der Modellierung vor- und gegenübergestellt. Der Schwerpunkt liegt dabei auf Methoden zur Modellierung von Festkörpern. Fluide sind kein Bestandteil dieser Arbeit und werden außen vor gelassen.

## 2.2 Diskrete Modelle

Diskrete Modelle beschreiben Materialien, die auf einer bestimmten Größenskala aus Teilchen aufgebaut sind. Diese Teilchen können entweder Atome oder Moleküle sein oder aber in irgendeiner Form feste, abgegrenzte Körper auf einer deutlich gröberen Skala als der Atomskala. Je nach Anwendung gibt es unterschiedliche Methoden, die zur Lösung eingesetzt werden können. Zu den klassischen Anwendungen diskreter Methoden gehören die Simulation von

- Gitterdefekten in Metallen auf der Atomskala (Gitterversetzungen, Verunreinigungen durch Substitutionsatome, Korngrenzen usw.),
- Karbonnanoröhren, Graphenen, Fullerenen,
- Polymerketten,
- Materialabtrag z. B. in der Metallverarbeitung,
- Durchmischungsvorgängen von granularen Materialien in Mischtrommeln,
- Befüll- und Entladungsvorgängen von Silos,
- Transportvorgängen granularer Materialien (auf Förderbändern oder in LKWs),
- Bruchverhalten z. B. von Hochsicherheitsglas beim Beschuss,

- Erdbeben oder Gerölllawinen.

Da diskrete Modelle, wie ihr Name schon sagt, diskret sind, ist für die numerische Simulation solcher Systeme keine räumliche Diskretisierung notwendig. Dies setzt jedoch voraus, dass die Teilchen in der Simulation physikalisch existenten Einheiten entsprechen, wovon zunächst bei allen in Abschnitt 2.2 beschriebenen Methoden ausgegangen wird. Auf hiervon abweichende Modellierungsstrategien wird in Abschnitt 2.4 eingegangen. Unter der Voraussetzung, dass die Teilchen physikalisch sind, können mit diskreten Methoden Simulationen durchgeführt werden, deren Ergebnisse weitestgehend der Realität entsprechen. Schwachstellen im Material können z. B. an der richtigen Stelle im Material abgebildet werden, wodurch sich die modellierte Struktur unter Belastung realitätsnah verformt, Risse an diesen Schwachstellen entstehen und sich von dort ausbreiten können. Die Rissbreite bedarf hierbei auch keiner weiteren Interpretation, sie ist durch die Größe und den Abstand der Teilchen vorgegeben. Insofern diese der realen Größe entsprechen, ist auch der Riss sehr realitätsnah. Es findet keine räumliche Diskretisierung in dem Sinn statt, dass der physikalische Raum so unterteilt wird, dass ein Ergebnis nur noch an diskreten Punkten ausgewertet wird. Der Raum besteht schon aus diskreten Einheiten. Dennoch findet eine geometrische Annäherung statt, die das Ergebnis mehr oder weniger stark vom realen Experiment abweichen lässt. Die Form der Teilchen ist oft so komplex, dass ihre Form angenähert wird. Dies ist insbesondere bei granularen Materialien der Fall. Aber auch ganze Moleküle werden als kreis- bzw. kugelförmige Einheiten betrachtet mit angenäherten Eigenschaften.

Zwischen den Teilchen werden Interaktionsgesetze definiert. Durch diese wird bestimmt, wie die Teilchen Kräfte aufeinander ausüben und sich daraufhin bewegen. Je nachdem, was modelliert werden soll, gibt es unterschiedliche Modelle für diese Teilcheninteraktionen. Die unterschiedlichen Simulationsmethoden haben bestimmte Anwendungsbereiche, für die sie bevorzugt eingesetzt werden. Je nach Anwendung unterscheiden sich die eingesetzten Interaktionsmodelle, weshalb auf deren Beschreibung erst in den nachfolgenden Abschnitten bei der Vorstellung der jeweiligen diskreten Methode etwas detaillierter eingegangen wird. Die zu lösenden Gleichungen sind die Bewegungsgleichungen der Newton'schen Mechanik, deren starke Form gelöst wird. Bei diskreten Methoden werden die Gleichgewichtsbedingungen mithilfe von Kräften und Verschiebungen ausgedrückt und nicht, wie bei den später folgenden Kontinuumsmethoden, durch Spannungen und Verzerrungen. Es handelt sich bei diskreten Methoden um eine Lagrange'sche Betrachtungsweise. Physikalisch interpretiert bedeutet das, dass sich der Beobachter mit der Materie mitbewegt. Daneben existiert die Euler'sche Betrachtungsweise, bei der ein Beobachter die Materie von einem bestimmten Punkt aus betrachtet, den er ständig beibehält.

Bei den simulierten Prozessen handelt es sich in der Regel um zeitlich veränderliche Prozesse, welche eine zeitliche Diskretisierung erfordern. In den späteren Kapiteln werden ausschließlich statische oder quasistatische Probleme behandelt, weshalb auf eine Einführung in zeitliche Diskretisierungsverfahren verzichtet wird. Als Literatur zu diesem Thema sei an dieser Stelle z. B. auf DEUFLHARD UND BORNEMANN (2008) verwiesen.

Diskrete Methoden ermöglichen sehr detaillierte Simulationen, was deren großer Vorteil ist. Sie ermöglichen Einblicke in Prozesse, die man ohne diese Simulationen nicht hätte. Dennoch haben sie auch einen entscheidenden Nachteil: Dadurch, dass jedes Teilchen modelliert wird und jedes Teilchen mehrere Freiheitsgrade besitzt, werden die Gleichungssysteme schnell so groß, dass, trotz stets steigender Rechnerleistungen, eine obere Grenze des rechnerisch noch möglichen schon bei relativ kleinen Systemen erreicht ist.

### 2.2.1 Molekulardynamik

Numerische Methoden, bei denen die klassischen Bewegungsgleichungen für Mehrkörpersysteme gelöst werden, und bei denen ein Potential zwischen den einzelnen Partikeln bekannt ist, werden zusammengefasst als Molekulardynamik (MD) bezeichnet. Die Bewegungsgleichungen tauchen dabei entweder in der Lagrange'schen Form auf, also ausgedrückt mithilfe der generalisierten Koordinaten und der Geschwindigkeiten der Partikel, oder in der Hamilton'schen Form, wo die Gleichungen mithilfe der generalisierten Koordinaten und der Impulse der Partikel formuliert sind. Diese beiden Formen beschreiben die Differenz der kinetischen und der potentiellen Energie im System und sie beinhalten die Energieerhaltungsgleichung, die Massenbilanz, die Impulsbilanz und die Drehimpulsbilanz. Die Herleitung dieser Gleichungen aus den beiden Energieformen ist beispielsweise bei LIU U. A. (2006) oder LI UND LIU (2004) zu finden. Die Partikel, welche einzelne Atome, Moleküle oder sonstige feste Teilchen sein können, werden entweder als ein System interagierender Materialpunkte beschrieben oder als feste kugelförmige Körper ohne innere Struktur angenommen. Der interne Status der Atome oder Moleküle ändert sich somit während der Simulation nicht, sondern es wird vorher dessen Wirkung nach außen, z. B. mithilfe einer quantenmechanischen Simulation, ermittelt. Die Massen der Partikel bleiben während der gesamten Simulation konstant. Zwischen den Partikeln wirken Kräfte, die aus der potentiellen Energie im System durch Ableitung des Potentials nach den räumlichen Koordinaten eines Partikels gewonnen werden können.

Im Allgemeinen setzt sich das Potential aus mehreren Teilen zusammen. Ein Anteil des Potentials repräsentiert die Energie eines äußeren Kraftfeldes, wie z. B. des Gravitationsfeldes. Weitere Anteile sind Potentiale zwischen Partikeln. Paarpotentiale beziehen sich auf die Interaktion lediglich zweier Partikel. Ebenso gibt es Drei-Körper-Komponenten usw. In der MD werden in der Regel die äußeren Kraftfelder ignoriert und alle weite-

ren Mehrkörperinteraktionen in den Zweikörperinteraktionen zusammengefasst, um den Rechenaufwand zu reduzieren. Gängige Paarpotentiale sind zum Beispiel das Lennard-Jones-Potential oder das Morse-Potential (z. B. in LI UND LIU (2004)). Ein Mehrkörperpotential für metallische Systeme kann zum Beispiel mit der Embedded-Atom-Methode (EAM) berechnet werden. Dieses Potential wird im Zusammenhang mit der Quasikontinuuumsmethode in Abschnitt 2.5.3 noch einmal erwähnt und daher im Folgenden kurz beschrieben.

Zur Lösung der Bewegungsgleichungen, welche gewöhnliche Differentialgleichungen der Zeit sind, wird ein Anfangswertproblem aufgestellt und dieses nach den Verschiebungen aller Partikel im System gelöst. Dazu wird in der Regel ein explizites Zeitintegrationsverfahren gewählt, wie beispielsweise das zentrale Differenzenverfahren. Die dynamische Bewegung der Partikel wird mithilfe von Positions- und Geschwindigkeitsvektoren ausgedrückt.

Die ersten Molekulardynamik-Simulationen wurden von ALDER UND WAINWRIGHT (1957) und ALDER UND WAINWRIGHT (1959) durchgeführt. Seither wird die MD hauptsächlich für Berechnungen auf atomistischer Skala angewendet. In den Materialwissenschaften dient sie dazu, Vorgänge auf dieser Ebene zu verstehen und neue Materialien zu entwickeln, deren makroskopische Eigenschaften durch Veränderungen auf der Mikroskala mithilfe der MD untersucht und virtuell verändert werden können. Häufig werden dabei Versetzungen in Metallgittern untersucht, das Verhalten eines Materials an Korngrenzen im Material bestimmt oder Nanoindentierung simuliert. Die Methode findet aber z. B. auch in der Biologie, der Chemie und der Medizin Anwendung. Für detailliertere Beschreibungen der MD sei beispielsweise auf LIU U. A. (2006) oder LI UND LIU (2004) verwiesen.

### **Embedded-Atom-Methode**

Die Embedded-Atom-Methode (EAM) ist eine Methode zur Berechnung von Mehrkörperpotentialen speziell für metallische Systeme. Sie wurde 1983 von DAW UND BASKES (1983) und DAW UND BASKES (1984) entwickelt. Zusätzlich zu den Potentialen paarweiser Interaktionen berücksichtigt die EAM eine Einbettungsfunktion, welche die Energie repräsentiert, die benötigt wird, um ein einzelnes Atom in die es umgebende Elektronenwolke mit einer zuvor bekannten Dichte einzufügen. Die gesamte potentielle Systemenergie ist somit die Summe aller Einbettungsenergien und aller Energien paarweiser Wechselwirkungen.

Mithilfe des EAM-Potentials kann z. B. das Verhalten einer metallischen Struktur mit diversen Gitterfehlern untersucht werden. Gitterfehler können Leerstellen oder Verunreinigungen durch sonst im Kristallgitter nicht vorhandene Atome sein, Versetzungen in

der Gitterstruktur oder Korngrenzen. Es können aber auch kleine Risse in der Kristallstruktur gehandhabt werden.

### 2.2.2 Diskrete-Elemente-Methode

Die Diskrete-Elemente-Methode (DEM) von CUNDALL UND STRACK (1979) ist eine Methode zur Berechnung der Bewegung und der Interaktion einer großen Anzahl an Partikeln und wird hauptsächlich zur Simulation granularer Medien verwendet. Sie hat Ähnlichkeit mit der Molekulardynamik, unterscheidet sich aber dadurch, dass Rotationen der Teilchen zugelassen sind, Kontakt von Teilchen auftritt und diese komplizierte Geometrien haben können.

Materialien werden durch feste, abgegrenzte Körper beschrieben, die diskreten Elemente, welche auf verschiedene Weise miteinander interagieren und dadurch Kräfte aufeinander ausüben. Die Partikel können starr oder weich sein, also eine Deformation des Partikels selbst zulassen oder nicht. Starre Körper machen die Annahme eines Verzerrungsmaßes und eines Konstitutivgesetzes für jedes einzelne Partikel überflüssig. Die Partikel können des Weiteren als brechbar oder unbrechbar angenommen werden, wobei für den brechbaren Fall ein Bruchkriterium und eine Bruchregel eingeführt werden müssen. Die Partikelform ist ebenfalls sehr variabel. Von rund bis polygonförmig im zweidimensionalen und kugel- bis polyederförmig im dreidimensionalen können die Partikel jede Form haben. Auch zusammengesetzte Geometrien sind denkbar. Bezogen auf die Partikelwahl stellen starre unbrechbare runde bzw. kugelförmige Partikel das einfachste und dadurch gängigste Modell dar. Die Kräfte zwischen den Partikeln werden mithilfe unterschiedlicher Modelle approximiert.

Kontakt von Partikeln kann hart oder weich modelliert werden. Bei hartem Kontakt wird die Undurchdringbarkeit der Körper erfüllt und somit werden die Partikel bei der ersten Berührung sofort in die entgegengesetzte Richtung beschleunigt. Bei weichem Kontakt wird eine leichte Überschneidung der Partikel zugelassen. Nimmt die Überschneidungsfläche bzw. das Überschneidungsvolumen zu, erhöht sich die Kraft mit der das Partikel in entgegengesetzter Richtung beschleunigt wird und es schließlich dorthin bewegt. Durch Modelle in Tangentialrichtung kann dem System Reibung zwischen Partikeln hinzugefügt werden. Je komplexer die Partikelgeometrie gewählt wurde, desto schwieriger wird die Kontaktsuche. Bei kreis- oder kugelförmigen Partikeln genügt die Information über die Radien und den Mittelpunktsabstand, um zu wissen, ob zwei Partikel in Kontakt sind oder nicht. Kohäsion kann durch Einfügen von Verbindungselementen zwischen Partikeln modelliert werden. Verbindungselemente können z. B. Federn oder Balkenelemente sein.

Die hier vorgestellten Modellierungsvarianten sind nur einige von vielen Möglichkeiten. LUDING (1998), PÖSCHEL UND SCHWAGER (2005) und SCHNEIDER (2012) bieten eine gute Übersicht zu verschiedenen Modellierungsansätzen. Jede einzelne Komponente des Gesamtmodells, sei es die Partikelform, deren Anordnung oder die Interaktionsgesetze zwischen den Partikeln, trägt zum globalen Verhalten des Materials bei und bildet damit das Konstitutivgesetz.

Die Interaktion von Partikeln, wie oben beschrieben, stellt ein transientes Problem dar, bei dem sich Gleichgewichtszustände immer dann einstellen, wenn die auf die Partikel einwirkenden Kräfte ausgeglichen sind. Die zu lösenden Gleichungen sind die Bewegungsgleichungen der Newton'schen Mechanik. Zur Lösung wird ein Anfangswertproblem aufgestellt und mithilfe eines expliziten Lösungsverfahrens gelöst. Jedes diskrete Element hat im allgemeinen dreidimensionalen Fall je drei Translations- und Rotationsfreiheitsgrade. Die Größe der zu lösenden Gleichungen steigt daher bei steigender Partikelzahl sehr schnell an. Durch die Rechnerkapazität ist somit die Modellgröße nach oben begrenzt. Ein weiterer Aspekt, der die DEM zu einer rechenintensiven Methode macht, diesmal bezogen auf die Rechenzeit, ist die Kontaktsuche. Es sollten Maßnahmen angewendet werden, durch die verhindert wird, dass der Kontakt eines Partikels mit allen anderen Partikeln im System überprüft wird. Dies kann z. B. dadurch geschehen, dass die Kontaktsuche nur in geometrisch eingegrenzten Bereichen um ein Partikel stattfindet.

Die DEM kann sowohl als diskrete Methode, als auch als Diskretisierungsmethode angewendet werden. Dient sie zur Diskretisierung, müssen jedoch einige regularisierende Maßnahmen getroffen werden, um die Lösung von der gewählten Partikelgröße unabhängig zu machen. Dazu mehr in Abschnitt 2.4.

### 2.2.3 Diskrete Strukturmodelle

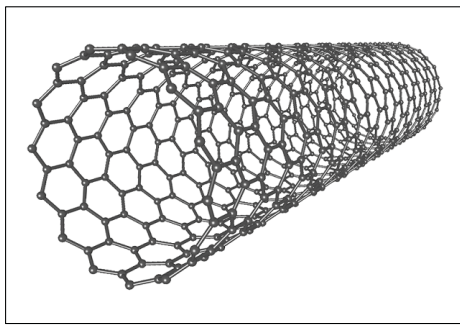
Bei der Molekulardynamik und der Diskrete-Elemente-Methode interagieren einzelne Teilchen miteinander, wie in den letzten beiden Abschnitten beschrieben wurde. Auch wenn Fluide und deren Modellierung sowie Simulation kein Bestandteil dieser Arbeit sind, so soll dennoch erwähnt werden, dass diese beiden Methoden besonders zur Simulation von Flüssigkeiten, Gasen und sonstigen „losen“ Materialien, wie granularen Materialien, geeignet sind. Es gibt jedoch auch einige Festkörper, die aus diskreten, physikalisch existenten Elementen aufgebaut sind. Im Unterschied zu Fluiden und granularen Materialien, wo die Teilchen frei im Raum beweglich sind, haben die Teilchen in Festkörpern fixe Nachbarteilchen, mit denen sie in irgendeiner Form zusammenhängen. Die Teilchen und ihre Verbindungen bilden somit ein Gitter. Dies ist z. B. bei einigen kristallinen Strukturen wie den Kohlenstoffnanoröhren (engl. „carbon nanotube“) oder



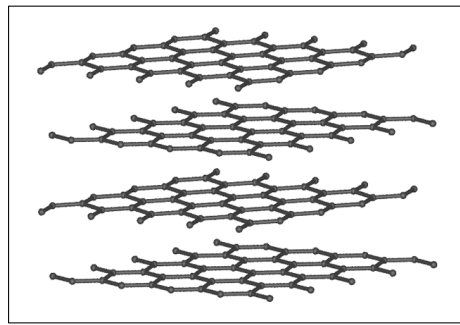
©Wikimedia Commons, Hubert Berberich (HubiB)



©Wikimedia Commons (Pau)



©Wikimedia Commons, Michael Ströck (mstroeck)



©Wikimedia Commons, Michael Ströck (mstroeck)

**Abbildung 2.2:** Diskrete Strukturmodelle. Von oben links nach unten rechts: Multihalle in Mannheim, Sydney Harbour Bridge, Kohlenstoffnanoröhre, Graphen.

Graphenen (Kohlenstoffschichten) der Fall, die in Abbildung 2.2 dargestellt sind, aber auch die Mikrostruktur von Metallen besteht aus einem Atomgitter. Auf einer größeren Skala gibt es im Bauwesen ebenfalls einige Vertreter von Gitterkonstruktionen. Die sogenannten Gitterschalen, die keine richtige Schale darstellen, sondern ein Fachwerk aus einzelnen Stäben oder Balken bilden, sind ein Beispiel dafür. Im Grunde sind Fachwerke jeder Art diskrete Strukturmodelle. Eine prominente Gitterschalenkonstruktion ist das Dach der Multihalle in Mannheim und eine berühmte Fachwerkbrücke die Sydney Harbour Bridge. Beide Beispiele sind Abbildung 2.2 zu sehen.

Eine besondere Art von Gittern sind die regelmäßigen Gitter, die hauptsächlich in Metallen und kristallinen Strukturen vorkommen, wie z. B. den zuvor schon erwähnten Kohlenstoffstrukturen. Die Regelmäßigkeit zeichnet sich dadurch aus, dass sich einzelne Einheiten aus mehreren Teilchen und deren Verbindungen ständig wiederholen und dadurch die gesamte Gitterstruktur aufbauen. Die Mechanik des Gitters kann vollständig durch die kleinste das Gitter repräsentierende Einheit ausgedrückt werden. Die mechanischen Gleichungen, die es zu lösen gilt, sind die Newton'schen Bewegungsgleichungen, wie schon in der MD und der DEM. Der Vorteil der Lösung mithilfe eines Gittermodells gegenüber der Lösung mithilfe der MD oder DEM, wo jedes einzelne Partikel voll aufgelöst ist und alle Interaktionen modelliert werden müssen, liegt in der Wiederholung der das Gitter repräsentierenden Einheiten. Es können einzelne „Bausteine“ einfach zu-



sammengefügt werden, wodurch Rechenzeit eingespart werden kann. LIU U. A. (2006) sei als weiterführende Literatur zum Thema Gittermechanik mit dem Schwerpunkt auf metallischen und kristallinen Strukturen empfohlen.

## 2.3 Kontinuumsmodelle

Während Simulationen mit diskreten Methoden eher virtuellen Experimenten gleichen, wird mit der Kontinuumsmechanik vielmehr die erfahrene Realität beschrieben und kann daher als phänomenologisch betrachtet werden. Die Kontinuumsmechanik befasst sich mit dem Verformungsverhalten und beruht auf einer mathematischen Beschreibung von Spannungen und Verzerrungen. Diese stehen über die konstitutiven Gleichungen und die Kinematik mit der Gleichgewichtsbedingung in Zusammenhang und beschreiben mit den Spannungs- und Verschiebungsrandbedingungen ein mechanisches Problem. In dieser Arbeit werden ausschließlich Probleme der Festkörpermechanik in Betracht gezogen.

Mit Kontinuumsmodellen werden komplexe Prozesse auf einer feinen Skala im Material in der Regel nicht so detailliert wiedergegeben wie mit diskreten Modellen, sondern lediglich verschmiert dargestellt. Jede Struktur wird als ein kontinuierliches Medium betrachtet, dessen Zustand durch bestimmte Feldgrößen beschrieben wird, wie z. B. Temperatur, Dichte, Verschiebungen, Geschwindigkeit, Beschleunigung, Spannungen und Verzerrungen. Diese Feldgrößen sind skalar-, vektor- oder tensorwertige Funktionen, die vom Ort und der Zeit abhängen und von denen Stetigkeit und Differenzierbarkeit erwartet wird. Physikalisch gesehen entspricht diese Beschreibung der Annäherung einer sehr großen Anzahl an Atomen bzw. Partikeln durch einige wenige makroskopische Größen. Eine entscheidende Voraussetzung dafür, dass ein Material als kontinuierlich betrachtet werden kann, ist, dass die Fein- und Grobscala weit auseinander liegen. Dies ist dann der Fall, wenn ein kleines Teilgebiet  $d\Omega$  immer noch so groß ist, dass alle darin befindlichen Partikel im Mittel dieselben Eigenschaften aufweisen wie ein beliebig großes Teilgebiet oder das ganze Gebiet  $\Omega$ . Diese Annahme wird Skalenseparation genannt und ist die Grundlage für Homogenisierungsverfahren.

Wird ein Material als homogen betrachtet, ändert sich qualitativ nichts, wenn  $d\Omega$  immer kleiner wird. Wie zuvor schon erwähnt, stößt man jedoch irgendwann bei jedem Material an die Grenze dessen, dass man von einem homogenen Material sprechen kann, und findet eine heterogene Struktur vor. Das Ergebnis ist dann ebenfalls ein durchschnittlicher Wert und auf solch einer Skala unphysikalisch. Dimensionseffekte können also mit Kontinuumsmodellen nicht wiedergegeben werden. Sie eignen sich dafür bestens, um Phänomene zu untersuchen, die sich auf makroskopischer Ebene abspielen. Die An-

wendungsbereiche von diskreten Modellen und Kontinuumsmodellen unterscheiden sich somit deutlich voneinander.

Da die Bewegungsgleichungen in der Regel nicht analytisch zu lösen sind, werden diese zur Lösung diskretisiert. Am Ende liegt somit keine kontinuierliche Lösung vor, sondern die Lösung an einigen zuvor bestimmten Punkten. Diesen Punkten werden Freiheitsgrade zugewiesen. Während im Rahmen einer klassischen Kontinuumstheorie (Boltzmann-Kontinuum) jedem materiellen Punkt im dreidimensionalen drei Translationsfreiheitsgrade zugeordnet werden, werden bei der mikropolaren Kontinuumstheorie (Cosserat-Kontinuum) zusätzlich drei Rotationsfreiheitsgrade berücksichtigt. Für diese Freiheitsgrade werden die Gleichungen gelöst. Durch Interpolation lassen sich die Feldgrößen im gesamten Gebiet ermitteln. Aufgrund dessen, dass nicht jedes mikroskopische Partikel aufgelöst wird, werden Simulationen wesentlich größerer Strukturen möglich.

Aus den vielen kontinuumsmechanischen Methoden werden in den nächsten Abschnitten drei vorgestellt, die Finite-Elemente-Methode, die Smoothed Particle Hydrodynamics und die Material-Point-Methode. Die Finite-Elemente-Methode wurde ausgewählt, weil sie in dieser Arbeit verwendet wird und die wahrscheinlich am weitesten verbreitete Kontinuumsmethode ist. Die anderen beiden Methoden basieren auf einer Formulierung mit Partikeln, die in dieser Arbeit ebenfalls eine große Rolle spielen, sind aber dennoch den Kontinuumsmethoden zuzuordnen.

### 2.3.1 Finite-Elemente-Methode

Grundsätzlich handelt es sich bei der Finite-Elemente-Methode (FEM) um ein numerisches Lösungsverfahren für partielle Differentialgleichungen (PDE). Dies können Gleichungen der Strukturmechanik oder der Fluidmechanik sein, aber auch z. B. elektrostatische oder elektromagnetische Feldgleichungen. Aufgrund der Vielzahl an Möglichkeiten und Varianten, die die FEM birgt, wird im Folgenden nur die Grundidee der Methode vorgestellt. Die Variante, die später verwendet wird, wird in Kapitel 3 detaillierter beschrieben. Für ein weiterführendes Studium sei außerdem auf die bekanntesten aktuellen Lehrbücher von ZIENKIEWICZ U. A. (2006), BELYTSCHKO, T. U. A. (2008) und HUGHES (2000) verwiesen.

Die grundlegenden Ideen zur FEM stammen von ARGYRIS (1960) mit der Matrizenformulierung, TURNER U. A. (1956), die die Direkte-Steifigkeits-Methode entwickelten, und Zienkiewicz, der letzten Endes alle Zutaten zusammenbrachte und erkannte, dass mit der FEM eine Methode zur Lösung partieller Differentialgleichungen geschaffen wurde. Das erste Finite-Elemente-Buch schrieben ZIENKIEWICZ UND CHEUNG (1967), dessen folgende Auflagen (ZIENKIEWICZ U. A. 2006) bis heute die Standardwerke der FEM sind.

Einer der wesentlichen Aspekte der FEM ist die Unterteilung des betrachteten Gebiets in Elemente finiter Größe, also nicht in infinitesimal kleine Elemente. Diese Elemente werden daher finite Elemente genannt und geben der Methode ihren Namen. Den Elementknoten sind die zuvor erwähnten Freiheitsgrade zugewiesen, für die die Gleichungen gelöst werden. Zwischen den Knoten wird die Lösung interpoliert. Dazu können Funktionen unterschiedlicher Ordnung herangezogen werden. Funktionen höherer Ordnung können eine bessere Annäherung der Lösung ergeben. Eine größere Anzahl an entsprechend kleineren Elementen einer bestimmten Ordnung sollte zu einem besseren Ergebnis führen, oder zumindest zum gleichen Ergebnis. Die exakte Lösung stellt eine Funktion dar, die durch die abschnittsweise definierten Interpolationsfunktionen, die Ansatzfunktionen, angenähert wird. Ist die exakte Lösung im Lösungsansatz enthalten, so wird man sie auch bekommen.

In der Strukturmechanik ist die FEM die am meisten verbreitete und am weitesten entwickelte Simulationsmethode. Die zu lösende Gleichung ist die schwache Form des Prinzips der virtuellen Verschiebungen. Um sie zu erhalten, werden die Impulsbilanz und die Spannungsrandbedingungen jeweils mit einer Testfunktion multipliziert und über das Gebiet integriert. Die Impulsbilanz und die Spannungsrandbedingungen sind somit nicht mehr punktweise erfüllt, sondern nur im integralen Sinne. Dadurch wird die Impulsbilanz für die meisten Probleme erst lösbar. Zur vollständigen numerischen Beschreibung des Problems sind außerdem Verschiebungsrandbedingungen, die kinematischen Gleichungen und das Materialgesetz notwendig. Die kinematischen Gleichungen setzen die Verzerrungen mit den Verschiebungen in Beziehung, und das Materialgesetz beschreibt das Verhältnis zwischen den Spannungen und den Verzerrungen. Die schwache Form des Prinzips der virtuellen Verschiebungen ist die Gleichung, die zur Lösung diskretisiert wird, räumlich, und bei zeitlich veränderlichen Problemen auch in der Zeit. Gelöst wird für die Freiheitsgrade an den Knoten, bei statischen Problemen also die Verschiebungen und gegebenenfalls die Rotationen. Die oben erwähnten Interpolationsansätze werden demnach für die Verschiebungen bzw. Rotationen gemacht. Aus den Verschiebungen lassen sich Verzerrungen berechnen und daraus wiederum Spannungen. Im Gegensatz zu den diskreten Methoden sind die Gleichungen der Kontinuumsmethoden in Spannungen und Verzerrungen, als kontinuierliche Größen, formuliert. Da die Spannungen und Verzerrungen zur numerischen Integration an den Integrationspunkten, meistens den Gaußpunkten, bekannt sein müssen, werden sie dort ausgewertet.

Bei der FEM kommt sowohl die Lagrange'sche, als auch die Euler'sche Betrachtungsweise zum Einsatz.<sup>1</sup> Für Probleme aus der Fluidmechanik wird zumeist der Euler'sche Ansatz gewählt, während für strukturmechanische Problemstellungen die Lagrange'sche

---

<sup>1</sup>Weitere Modifikationen, wie beispielsweise die „Arbitrary Lagrangian Eulerian“-Formulierung (ALE) oder die „Updated Lagrangian“-Formulierung sind auch möglich, nachzulesen z. B. bei BELYTSCHKO, T. u. A. (2008).

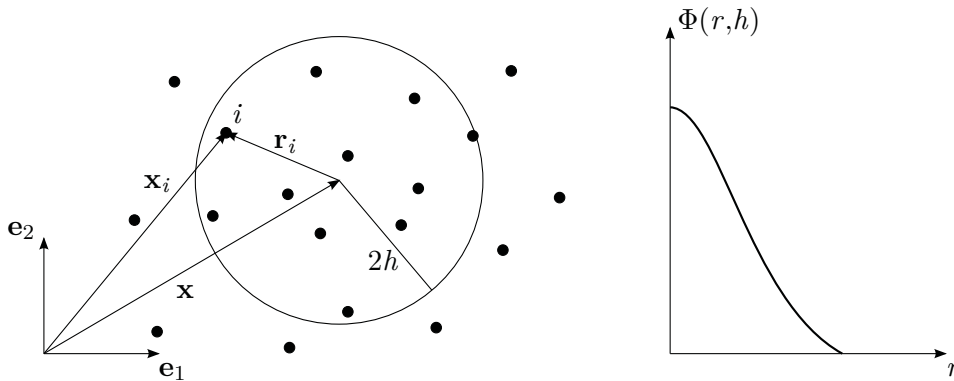
Formulierung verwendet wird. Zur Zeitintegration werden implizite und explizite Verfahren eingesetzt. Welche Methode bevorzugt werden sollte, ist problemabhängig. Hohe Frequenzen werden am besten mit expliziten Verfahren aufgelöst, erfordern in der Regel aber kleine Zeitschritte. In anderen Fällen können implizite Verfahren mit einer größeren Schrittweite schneller zielführend sein.

Im Rahmen der Finite-Elemente-Methode gibt es einige Ansätze zur Umsetzung bzw. Berücksichtigung diskreten Materialverhaltens. Einer davon ist die sogenannte Mehrskalensimulation, wie beispielsweise die FE<sup>2</sup>. GALVANETTO UND ALIABADI (2010) bieten eine Einführung in das Thema der Mehrskalensimulation von Festkörpern. Um die Mikrostruktur in die Rechnung mit einzubeziehen, wird an jedem Materialpunkt ein Unterproblem auf deutlich kleinerer Skala gelöst. Ein die Mikrostruktur repräsentierendes Volumenelement wird dazu der Belastung am aktuellen Materialpunkt ausgesetzt. Dies geschieht zum Beispiel, indem der Deformationsgradient an dieser Stelle übergeben wird. Als Ergebnis des Subproblems werden die gemittelten Spannungen und die Materialtangente dem Makroproblem übergeben. In MIEHE U. A. (2011) wird dieses Verfahren beispielsweise auf Medien mit granularer Mikrostruktur angewandt.

Einige andere Ansätze haben zum Ziel, diskrete Risse abbilden zu können. Zum Einen kann ein Riss mithilfe der Kontinuumsschädigungsmechanik abgebildet werden. Dabei wird jedoch lediglich die Steifigkeit eines Elements reduziert. Das Ergebnis ist kein diskreter Riss, sondern eine lediglich verschmierte Darstellung der Steifigkeitsabnahme durch einen Riss. Es können alternativ a priori definierte Riss-Elemente eingeführt werden, wobei dann schon vor Beginn der Rechnung festgelegt wird, wo der Riss verläuft, oder es wird im Falle eines Rissfortschritts neu vernetzt. Ein weiterer Ansatz ist die erweiterte Finite-Elemente-Methode (X-FEM), bei der Risse mithilfe von Sprungfunktionen abgebildet werden. All diese Ansätze haben gemeinsam, dass sie, insbesondere bei vielen Rissen, sehr komplex werden.

### 2.3.2 Smoothed Particle Hydrodynamics

Die Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) ist eine Lagrange'sche netzfreie Methode, die von LUCY (1977) und GINGOLD UND MONAGHAN (1977) praktisch zeitgleich entwickelt wurde. Ursprünglich wurde sie zur Simulation der Interaktion von Sternen in der Astrophysik entwickelt und dient heute hauptsächlich der Lösung zeitlich veränderlicher hydrodynamischer Gleichungen. Sie basiert auf der Modellvorstellung, dass ein Fluid aus einer endlichen Anzahl an diskreten Partikeln besteht, die während der gesamten Simulation dieselbe Masse haben. Im Gegensatz zu den Partikeln bei den diskreten Methoden haben diese Partikel keinerlei physikalische Bedeutung, sie dienen lediglich als Diskretisierung eines eigentlich als kontinuierlich angenommenen Mediums. Die Partikel



**Abbildung 2.3:** Skizze einer Kernfunktion  $\Phi(r, h)$ , dargestellt im Zweidimensionalen. Darin ist  $r_i = \|\mathbf{r}_i\| = \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|$  der Abstand des Partikels  $i$  zum Zentrum.

werden zufällig im Fluid verteilt und folgen den Newton'schen Bewegungsgleichungen. Die Anzahl der Partikel bildet die Auflösung des Fluids und beeinflusst somit die Rechengenauigkeit der Methode. Wie bei den diskreten Methoden steigt auch hier mit der Partikelanzahl die erforderliche Rechenleistung.

Der mittlere Abstand der Partikel wird charakteristische Glättungslänge (smoothing length)  $h$  genannt und ist der wichtigste Parameter der Methode. Zur Vermeidung von Singularitäten, werden lokal kontinuierliche Felder eingeführt, die das kollektive Verhalten des diskreten Systems repräsentieren sollen. Dies ist umgesetzt mithilfe der sogenannten Kerne, das sind Funktionen, die als glättende Interpolationsfelder dienen. Als Kern  $\Phi(\mathbf{x}, h)$  kann jede Funktion dienen, die folgende Kriterien erfüllt (LI UND LIU 2004):

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^3} \Phi(\mathbf{x}, h) \, d\Omega &= 1 \\ \Phi(\mathbf{x}, h) &\rightarrow \delta(\mathbf{x}), \quad h \rightarrow 0 \\ \Phi(\mathbf{x}, h) &\in C^k(\mathbb{R}^n), \quad k \geq 1. \end{aligned} \tag{2.1}$$

Das erste Kriterium entspricht der Eigenschaft der Dirac-Delta-Funktion  $\delta(\mathbf{x})$ , dass das Integral der Funktion immer Eins ergibt. Das diskrete Gegenstück hierzu wäre die Zerlegung der Eins (partition of unity). Das zweite Kriterium bedeutet, dass im Limit, wenn  $h$  gegen Null geht, der Kern der Dirac-Delta-Funktion entspricht. Die letzte Eigenschaft entspricht der Forderung, dass der Kern mehr als einmal differenzierbar sein soll, was ihm seine glättende Eigenschaft verleiht. Für unterschiedliche Anwendungen werden unterschiedliche Kerne benötigt. Typische Funktionen sind z. B. die Gauß'sche Glockenkurve, kubische oder quartische Spline-Kurven. Eine solche Funktion ist beispielhaft in Abbildung 2.3 dargestellt. Welche Funktion geeignet ist, findet man nur durch Testen und Vergleichen mit Lösungen anderer Simulationen heraus.

Sämtliche Zustandsgrößen, wie Temperatur, Druck, Dichte usw., sind an die Partikel gebunden. Um den integrierten Wert einer Größe  $A$  an einem Punkt  $\mathbf{x}$  im Raum zu berechnen, wird die Summe über alle  $N$  Partikel gebildet, die sich in einer imaginären Kugel mit dem Radius  $2h$  befinden, deren Zentrum bei  $\mathbf{x}$  liegt:

$$A(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^N \frac{m_i}{\rho_i} A(\mathbf{x}_i) \Phi(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i, h). \quad (2.2)$$

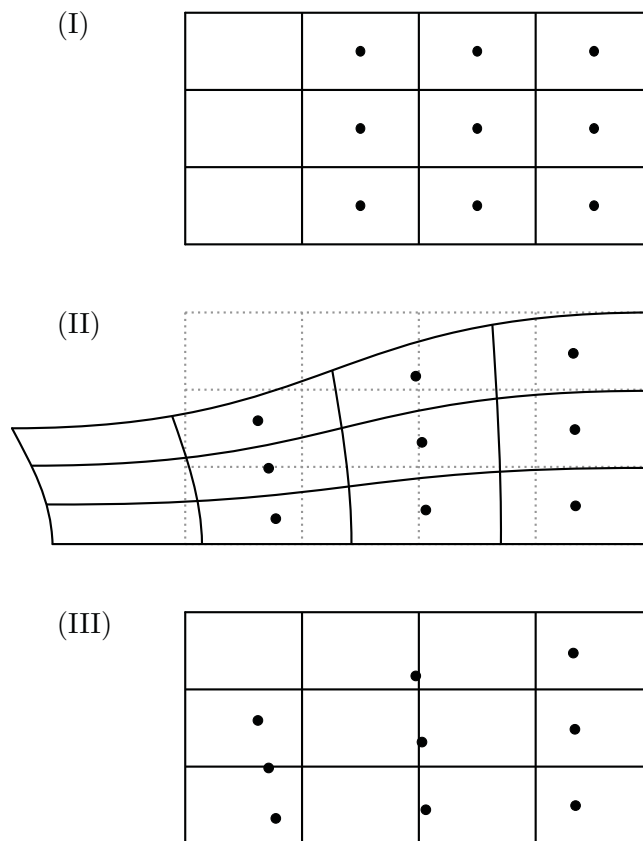
Jedes Teilchen liefert einen skalarwertigen Anteil dieser Größe  $A(\mathbf{x}_i)$ , der mit dem Kern gewichtet wird. Ableitungen einer Größe beziehen sich nicht auf die Größe selbst, sondern auf den Kern. Dadurch werden die partiellen Differentialgleichungen zu gewöhnlichen Differentialgleichungen und somit deren Lösung stark vereinfacht.  $m_i$  und  $\rho_i$  sind dabei die Masse und die Dichte des durch das Partikel repräsentierten Volumenelements  $\Delta V_i = m_i/\rho_i$ . Im Gegensatz zur FEM wird bei der SPH die starke Form diskretisiert. Die numerische Zeitintegration wird in den meisten Fällen mit einem expliziten Verfahren durchgeführt.

Die algorithmische Struktur des Verfahrens gilt als sehr einfach, da zur Gleichungslösung kein Hintergrundnetz benötigt wird. Aufgrund dieser Netzunabhängigkeit ermöglicht die SPH die Handhabung größerer Verformungen als netzbasierte Methoden. Dies ist bei der Simulation von Fluiden unabdingbar, ist aber auch zur Festkörpersimulation von Vorteil. Die Erweiterung auf Probleme der Festkörpermechanik stammt von LIBERSKY UND PETSCHKE (1991). Seitdem wurde die Methode beispielsweise im Zusammenhang mit der Simulation von Schädigung, Fragmentierung, Rissausbreitung oder Metallumformungsprozessen eingesetzt, aber auch zur Simulation von Anprallvorgängen und zur Schockwellenausbreitung. Bei der SPH kann es zu Schwierigkeiten bei der Anwendung auf Festkörperprobleme mit Verschiebungsrandbedingungen geben und es können Instabilitäten unter Zugbelastung auftreten.

### 2.3.3 Material-Point-Methode

Die Material-Point-Methode (MPM) ist eine auf der FEM basierende Partikelmethode. Sie wurde als Erweiterung der Particle-in-cell-Methode (HARLOW U. A. 1964), die aus der Fluidodynamik stammt, für Probleme der Festkörperdynamik von SULSKY U. A. (1994) entwickelt.

Bei der MPM werden materielle Punktmassen, oder Materialpunkte (material points) durch ein Euler'sches Hintergrundnetz bewegt. Diese Punktmassen repräsentieren kleine Untergebiete des deformierbaren Körpers. Es wird ihnen im Ausgangszustand ihr zu repräsentierendes Volumen und die entsprechende Masse zugewiesen, welche sich während der Berechnung nicht ändern. Die Spannungen und sämtliche andere Zustandsvariablen



**Abbildung 2.4:** Sich während der Rechnung ändernder Bezug von Materialpunkten und Hintergrundnetz bei der Material-Point-Methode. (I) Ausgangskonfiguration. (II) Lagrange'sches Netz zur Lösung der Bewegungsgleichung. (III) Netz wird nach jedem Schritt in die Ausgangskonfiguration zurück verformt.

werden nicht wie bei der FEM an den Gaußpunkten ausgewertet und gespeichert, sondern an den Materialpunkten. Die Materialeigenschaften werden außerdem ebenfalls an diesen Punkten gespeichert. Wie in Abbildung 2.4 (I) dargestellt, wird das FE-Netz so groß gewählt, dass es den Körper in seiner Ausgangskonfiguration abdeckt, sowie alle Bereiche, in die hinein man während der Berechnung eine Bewegung erwartet.

Das resultierende Gleichungssystem wird, genau wie bei der FEM, durch räumliche und zeitliche Diskretisierung der schwachen Form des Prinzips der virtuellen Verschiebungen hergeleitet und ebenso nach den Knotenverschiebungen gelöst. Die zeitliche Integration findet in der Regel mit einem expliziten Verfahren statt. Im Raum werden zur Lösung nur Elemente berücksichtigt, die Materialpunkte enthalten, die anderen werden deaktiviert (BEUTH 2012). Dies kann einige Probleme bringen, wie z.B. unphysikalische Diskontinuitäten in der Struktur oder im schlimmsten Fall kinematische Systeme. Um

dies zu vermeiden, können an Stellen wo sonst „leere“ Elemente entstünden masselose Materialpunkte eingefügt werden.

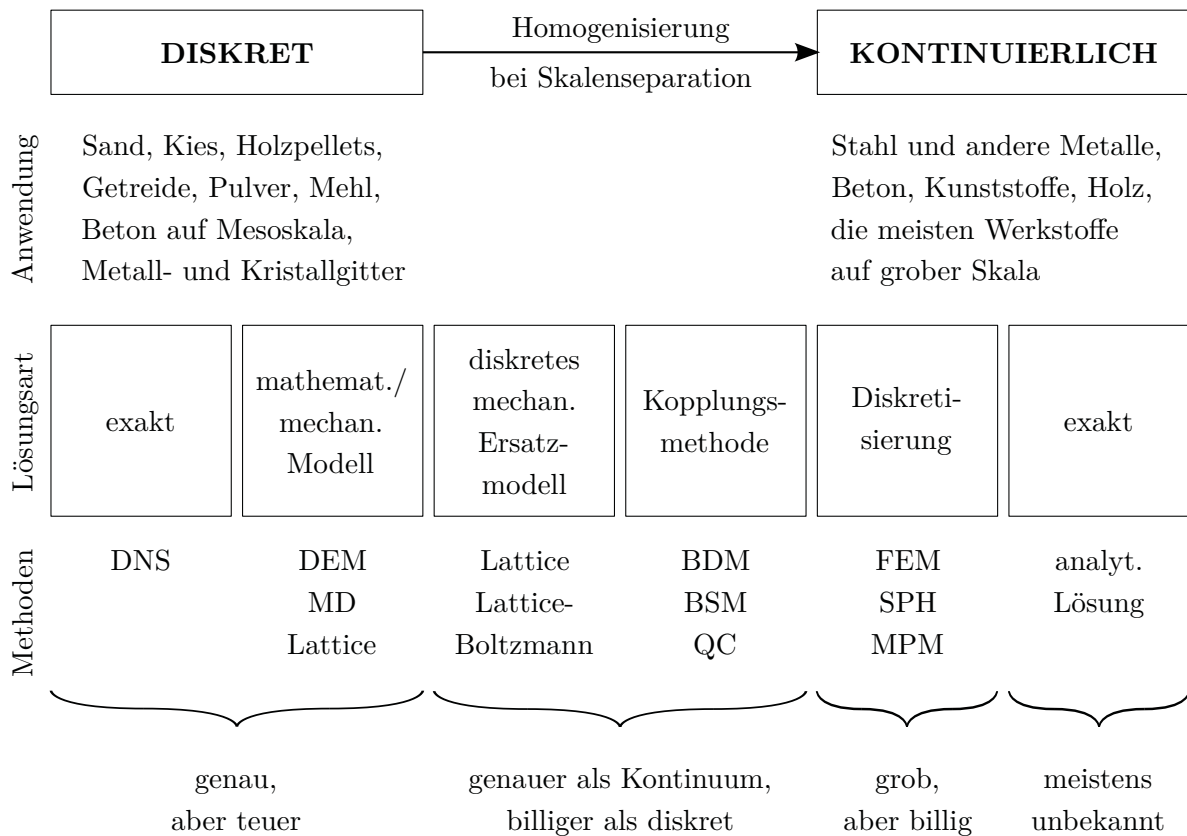
Die Lösung der Bewegungsgleichung ist Lagrange'scher Art dahingehend, dass, wie in Abbildung 2.4 (II) zu sehen ist, das FE-Verschiebungsfeld die Bewegung der auf dem Netz liegenden Materialpunkte beschreibt. Nach jedem Berechnungsschritt wird das Hintergrundnetz wieder in seinen ursprünglichen Zustand gebracht, während sich die Materialpunkte weiter bewegt haben. Dies ist in in Abbildung 2.4 (III) veranschaulicht. Deshalb wird die Art des Netzes auch mit der einer Updated-Lagrange-Formulierung verglichen (SULSKY U. A. 1994). Die Beziehung zwischen Elementen und Materialpunkten ändert sich also kontinuierlich während einer Berechnung. Sämtliche Informationen werden aus den Knotenwerten interpoliert und an den Materialpunkten gespeichert. Vor dem nächsten Schritt müssen dann die Werte der Materialpunkte wieder an das in den Ursprungszustand zurückverformte Netz übergeben werden. Die Randbedingungen werden im Gegensatz zur FEM auf die Materialpunkte aufgebracht und nicht auf die Knoten des FE-Netzes.

Durch die Euler'sche Beschreibung des FE-Netzes werden stark verzerrte Netze vermieden. Daher ist die MPM gut zur Simulation von Problemen mit großen Verformungen geeignet. Dadurch, dass alle Informationen, die das Material und den aktuellen Zustand des Materials betreffen, an den Lagrange'schen Materialpunkten gespeichert sind, gilt die MPM, verglichen mit anderen rein Euler'schen Modellen, außerdem als einfacher zu implementieren (SULSKY U. A. 1994), weil die konvektiven Terme wegfallen. Der Aspekt der Partikelformulierung in der MPM trägt dazu bei, dass Diskontinuitäten besser abgebildet werden können und die Lösung weniger netzabhängig ist. Des Weiteren wird die Methode gerne bei Durchdringungsproblemen eingesetzt und zur Modellierung von Mehrphasensystemen. Die MPM ist rechenintensiver als herkömmliche FE-Methoden, was dem Informationsaustausch zwischen dem FE-Netz und den Materialpunkten und dem Zurücksetzen des Netzes nach jedem Schritt geschuldet ist.

## 2.4 Diskretisierung oder diskretes Modell

Aus den vorherigen Abschnitten geht hervor, dass diskrete Modelle am besten zur Simulation diskreter Materialien und Strukturen eingesetzt werden und Kontinuumsmodelle dann am besten geeignet sind, wenn ein großer Skalenunterschied zwischen der diskreten Mikrostruktur und der Struktur auf der Makroskala besteht und man nur an der Untersuchung von Phänomenen interessiert ist, die sich auf makroskopischer Ebene abspielen. Wie die bisher besprochenen Methoden hinsichtlich ihrer Anwendung traditionell eingeteilt werden, ist in Abbildung 2.5 zusammengefasst. Auf der linken Seite befinden sich





**Abbildung 2.5:** Einteilung von Simulationen, ihrer Anwendung und der Art der Lösung in die Kategorien diskret und kontinuierlich.

die diskreten Methoden und auf der rechten die kontinuierlichen. Diskrete Materialien können, nachdem ein homogenes Stoffgesetz gefunden wurde, auf einer groben Skala auch mit kontinuierlichen Methoden berechnet werden. Wie aus Abschnitt 2.3 bekannt, müssen dazu die Fein- und die Grobskala weit genug auseinander liegen. Ein Ansatz, Simulationen diskreter Phänomene an Strukturen zu ermöglichen, deren Größe es nicht zulässt, die Mikrostruktur komplett aufzulösen, sind die sogenannten Kopplungsmethoden. Einige solche Methoden werden in Abschnitt 2.5 vorgestellt. Sie verknüpfen diskret und kontinuierlich modellierte Bereiche, um die Genauigkeit der diskreten Methoden mit der Effizienz der kontinuierlichen Methoden zu kombinieren. In Abbildung 2.5 werden sie daher zwischen den diskreten und den kontinuierlichen Methoden eingeordnet.

### 2.4.1 Diskretisierung mit diskreten Modellen

Eine Kategorisierung in diskrete und kontinuierliche Modelle ist nicht immer eindeutig möglich. Wie in Abschnitt 2.3.1 schon angesprochen, gibt es, z. B. in der FEM, Ansätze mit denen auch kontinuierliche Modelle in der Lage sind, diskrete Phänomene, wie

beispielsweise Risse, abzubilden. Diskrete Modelle werden ebenfalls nicht ausschließlich zur Simulation diskreter Materialien verwendet, sondern auch zur Approximation kontinuierlicher Materialien eingesetzt. Man kann dann von diskreten mechanischen Ersatzmodellen sprechen, weil sie etwas kontinuierliches durch etwas diskretes ersetzen. Sie sind also weder kontinuierlich noch diskret und werden daher in Abbildung 2.5 neben den Kopplungsmethoden eingeordnet.

Bei der „Framework Method“ von HRENNIKOFF (1941) werden linear elastische Flächen-tragwerke durch unterschiedliche Fachwerke substituiert. Dies diente zum Zeitpunkt der Methodenentwicklung der Überwindung von mathematischen Schwierigkeiten bei der Lösung der Differentialgleichungen der Elastizitätstheorie und kann als einer der ersten Schritte in Richtung der heutigen Finite-Elemente-Methode betrachtet werden. Mit den unterschiedlichen Fachwerkstrukturen können global gesehen jeweils andere elastische Eigenschaften modelliert werden. Es kann z. B. ein auf den zweidimensionalen Raum reduziertes Kontinuum im ebenen Spannungszustand mit der Querdehnzahl  $\nu = 1/3$  durch ein regelmäßiges Dreiecksgitter, bei dem der Winkel zwischen allen Stabrichtungen  $60^\circ$  beträgt, abgebildet werden. Dasselbe Gitter bildet außerdem ein solches Kontinuum im ebenen Verzerrungszustand mit der Querdehnzahl  $\nu = 1/4$  ab. Einen Überblick über Gitter, wie sie in diversen Disziplinen zur Simulation von Kontinua angewendet werden, findet man in OSTOJA-STARZEWSKI (2002).

Zur Diskretisierung von Kontinua mit Gittermodellen kommen in der Strukturmechanik entweder Fachwerksysteme in Frage, bei denen das Gitter aus Normalkraftstäben bzw. Federn aufgebaut ist, oder aber es setzt sich aus Balkenelementen zusammen. SCHLANGEN UND VAN MIER (1992) setzten Stab- und Balkengittermodelle zur Simulation des Bruchverhaltens von Beton ein und verglichen das Ergebnis mit Versuchen. Ein Problem der Gittermodelle ist, dass sie aufgrund ihrer Geometrie eine starke Richtungsabhängigkeit aufweisen. Ein Riss breitet sich in einem regelmäßigen Gitter immer in bestimmten Richtungen aus. Richtungen, die durch das Gitter festgelegt sind, geben in der Regel nicht die physikalische Rissausbreitung des natürlichen Materials wieder.

Anders als z. B. bei der Modellierung von atomistischen Gittern, wo die Stäbe ein Modell für tatsächlich vorhandene Atombindungen sind, haben diese beim Einsatz zur Diskretisierung von Kontinua keinerlei physikalische Bedeutung, sondern sind lediglich Diskretisierungselemente. Werden diskrete Methoden zur Diskretisierung eingesetzt, gelten dieselben Regeln wie für Kontinuumsmethoden: Die Lösung sollte bei feiner werdender Diskretisierung gegen die exakte Lösung konvergieren. Im Falle der Lokalisierung besteht jedoch sowohl bei zur Diskretisierung eingesetzten diskreten Methoden als auch bei Kontinuumsmethoden das Problem der Abhängigkeit von der Auflösung der gewählten Diskretisierung. Um diese Abhängigkeit zu überwinden, werden sogenannte Regulari-

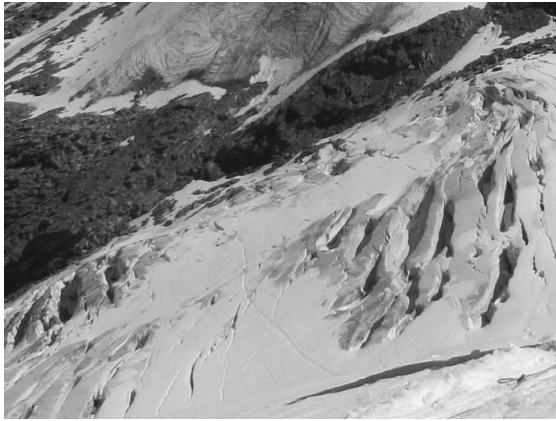
sierungsstrategien angewendet. Eine Beschreibung der Problematik sowie verschiedene Lösungsmöglichkeiten werden im folgenden Abschnitt 2.4.2 kurz beschrieben.

In der Fluidmechanik werden ebenfalls diskrete Methoden als Diskretisierung verwendet. Bei der Lattice-Boltzmann-Methode wird das kontinuierliche Newton'sche Fluid durch diskrete Partikel ersetzt, die durch ein Gitter bewegt werden. Anstatt der Navier-Stokes-Gleichung wird die Boltzmann-Gleichung gelöst, was deutlich einfacher ist. Bei größer werdender Partikelanzahl konvergiert die Lösung mit der Lattice-Boltzmann-Methode gegen die der Navier-Stokes-Gleichung.

### 2.4.2 Regularisierung

Entfestigendes, lokalisierendes Materialverhalten zeichnet sich dadurch aus, dass die Verschiebungen in einem sehr lokalen Bereich konzentriert sind und sich dort eine schmale Versagenszone im Material ausbildet. Das bedeutet beispielsweise, dass die Verschiebungen in diesem Bereich einen großen Gradienten aufweisen oder gar einen Sprung. In den Bereichen um die Versagenszone herum sind die Deformationen deutlich kleiner und es kann dort sogar Entlastung des Materials stattfinden. Bildet sich in einem Material ein Riss aus, so geschieht dies durch Akkumulation von Schädigung in einem Bereich bis einzelne Verbindungen reißen. Die Verschiebungen haben dann einen Sprung normal zur Versagensfläche. In Abbildung 2.6 ist dies auf der linken Seite am Beispiel einer Gletscherspalte veranschaulicht. Tritt die Schädigung tangential zur Versagensfläche ein, so entstehen Scherbänder. Dies kann beispielsweise zu einem Hangrutsch führen, einer Gleitschneelawine oder einem Schneebrett, wie in Abbildung 2.6 rechts dargestellt. Aber auch in Metallen treten diese Lokalisierungsphänomene auf. Dort bilden sich beispielsweise Scherbänder, die durch Versetzungen im Metallgitter entstehen und zu plastischen Verformungen in einem schmalen Band führen.

Da punktweise (lokal) formulierte kontinuumsmechanische Stoffgesetze durch Mittelung des Verhaltens eines Materialausschnitts gewonnen werden, können diese Lokalisierungsphänomene in der klassischen Kontinuumsmechanik nur in verschmierter Form dargestellt werden. Bei einer Finite-Elemente-Diskretisierung äußert sich dieser Mangel durch Abhängigkeit der Lösung vom gewählten Netz. Entfestigt das Material an einer Stelle, so ist bei lokal formulierten Kontinuumsmodellen davon ein ganzes Element betroffen und die Elementgröße bestimmt die Breite der Versagenszone. Die Ursache des Problems der Netzabhängigkeit hat DE BORST (1986) anhand eines einfachen eindimensionalen Beispiels veranschaulicht. Es wird im Folgenden lediglich kurz auf die Problematik eingegangen und was dagegen getan werden kann. Das vollständige Beispiel ist bei DE BORST (1986) nachzulesen und wird ebenfalls in KUHLE (2000) und HUND (2007) ausführlich beschrieben.

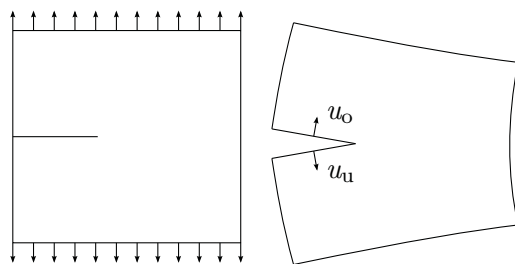


Gletscherspalten

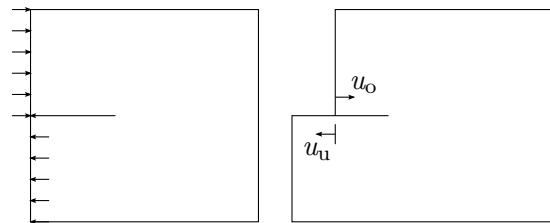


Schneebrett

©Wikimedia Commons (Saperaud)



Sprung normal zur Versagensfläche



Sprung tangential zur Versagensfläche

**Abbildung 2.6:** Sprung in den Verschiebungen normal zur Versagensfläche (Riss, Gletscherspalte) und Sprung in den Verschiebungen tangential zur Versagensfläche (Schneebrett, Gletschneelawine, Hangrutsch).

In dem Beispiel wird ein eindimensionaler linear entfestigender Zugstab einer bestimmten Länge untersucht. Der Stab ist mit mehreren Elementen derselben Länge diskretisiert. Die Anzahl  $n_{\text{ele}}$  der Elemente, in die der Stab unterteilt ist, wird variiert und das Ergebnis der durch die Schädigung frei gesetzten Bruchenergie  $G_f$  für die unterschiedlichen Diskretisierungen verglichen. Der Stabquerschnitt und die Materialparameter sind über die gesamte Länge konstant. Die dissipierte Bruchenergie kann durch die Fläche unter der Spannungs-Dehnungs-Kurve bestimmt werden. Diese Energie ist von der Rissbreite und einigen anderen Materialparametern abhängig. Bei der numerischen Lösung ergibt sich außerdem eine antiproportionale Abhängigkeit der Bruchenergie von der Anzahl der Elemente, also  $G_f \sim 1/n_{\text{ele}}$ . Demzufolge geht die dissipierte Energie für eine unendlich feine Diskretisierung gegen Null, was unphysikalisch ist.

Um Unabhängigkeit von der Diskretisierung zu erreichen, werden sogenannte Regularisierungsstrategien eingesetzt, bei denen das lokale kontinuumsmechanische Modell entsprechend erweitert wird. Dies kann eine Anreicherung der kinematischen Formulierung sein, wie es z. B. bei der erweiterten Finite-Elemente-Methode (X-FEM) der Fall ist, oder aber durch die Berücksichtigung einer internen Länge in den konstitutiven Glei-

chungen geschehen. In KUHL (2000) werden fünf Methoden vorgestellt, bei denen die konstitutiven Gleichungen angereichert werden.

Die einfachste Möglichkeit, um eine eindeutige netzunabhängige Lösung zu bekommen, ist die Einführung eines netzadaptierten Entfestigungsmoduls. Aus der Forderung nach einer konstanten Bruchenergie kann die Bruchdehnung in Abhängigkeit der Elementgröße und der Rissbreite bestimmt werden. Dadurch wird der Entfestigungsmodul (die Materialtangente bei fortschreitender Schädigung) abhängig von der Elementgröße und ist damit Bestandteil der konstitutiven Gleichungen. Diese Einfachheit hat jedoch auch einen Nachteil: Es funktioniert nur, solange die tatsächliche Rissbreite kleiner ist als die Elementbreite, da sich die berechnete Lokalisierungszone nur über eine Elementbreite erstrecken kann. Weitere Möglichkeiten, die in KUHL (2000) behandelt werden, sind das gradientenerweiterte Kontinuumsmodell, die Berücksichtigung viskoser Effekte, mikropolare Kontinuumstheorien und nichtlokale Integralkontinua. Da dieses Thema jedoch kein Schwerpunkt der vorliegenden Arbeit ist, wird darauf nicht weiter eingegangen.

Werden diskrete Methoden zur Diskretisierung eingesetzt, besteht im Grunde dasselbe Problem. Bei Gittermethoden und bei der Diskrete-Elemente-Methode sind es die Stab- bzw. Balkenelemente, in denen das Material beim Versagen lokalisiert. Diese Elemente bilden entweder direkt die Struktur, wie bei Gittermodellen, oder im Fall der DEM die kohäsiven Verbindungen zwischen den Partikeln. Das globale Materialverhalten ist definiert durch die konstitutiven Beziehungen der Stab- bzw. Balkenelemente. Soll damit ein Kontinuum abgebildet werden, bei dem die Versagenszone eine gewisse Breite hat, dann muss diese in die konstitutiven Gleichungen einfließen bzw. mit der Elementlänge in Bezug gesetzt werden, sodass auch bei solch einem Modell eine konstante Bruchenergie erreicht werden kann.

## 2.5 Diskret-kontinuierliche Kopplungsmethoden

In vielen Disziplinen und Anwendungen numerischer Methoden besteht der Wunsch, Phänomene, die sich auf der Mikroskala eines Materials abspielen, zu simulieren. Auf einige Prozesse, bei denen die Mikroskala wichtig ist, wurde zu Beginn des Kapitels schon verwiesen. Wie deren numerische Umsetzung mithilfe von unterschiedlichen diskreten Methoden bewerkstelligt werden kann, wurde in Abschnitt 2.2 gezeigt. Nun sind die Strukturen oft so groß, dass es mit den derzeitigen Rechnern unmöglich ist, deren gesamte Mikrostruktur vollständig aufzulösen und die Simulation mit einer diskreten Methode durchzuführen. Oft stehen Phänomene im Zentrum des Interesses, bei denen die für das globale Verhalten wichtigen Effekte der Mikrostruktur nur auf einen kleinen Ausschnitt der Struktur begrenzt sind. Dies ist beispielsweise bei einem Riss der Fall

oder bei der Nanoindentierung. In Großteilen des gesamten Gebiets kann die Lösung als glatt bezeichnet werden. In solchen Fällen liegt es nahe, nur diesen kleinen Teil diskret zu modellieren und den verbleibenden Bereich mit einer Kontinuumsmethode zu beschreiben.

Dem Wunsch folgend, immer größere Strukturen zu simulieren und dennoch nicht auf die Einflüsse der Mikrostruktur verzichten zu wollen oder zu können, wurden in den letzten etwa zwanzig Jahren zahlreiche Methoden entwickelt, die diskrete und kontinuierliche Methoden miteinander verknüpfen. Die Forschung zu diesem Thema ist nach wie vor aktuell. Das Ziel ist es, die Genauigkeit eines diskreten Ansatzes mit der Effizienz eines kontinuierlichen zu kombinieren. Prinzipiell sollen die Ergebnisse einer diskreten Methode mit wesentlich geringerem Rechenaufwand erlangt werden. Es ist daher wichtig, dass bei einer Mehrskalensimulation immer das Verhältnis der Genauigkeit zum Rechenaufwand im Vordergrund steht. Ob eine Mehrskalensimulation sinnvoll ist, ist stark problemabhängig. Die ersten und bislang immer noch die meisten Kopplungsansätze findet man im Bereich der Atomistik. Daher ist bei allen im Folgenden vorgestellten Methoden die Mikroskala aus Atomen oder Molekülen aufgebaut. In MILLER UND TADMOR (2009) werden vierzehn Mehrskalensimulationen miteinander verglichen, die alle atomistische und kontinuumsmechanische Modelle miteinander koppeln. Weitere Veröffentlichungen mit übersichtsgebendem Charakter sind beispielsweise CURTIN UND MILLER (2003) und FISH (2006).

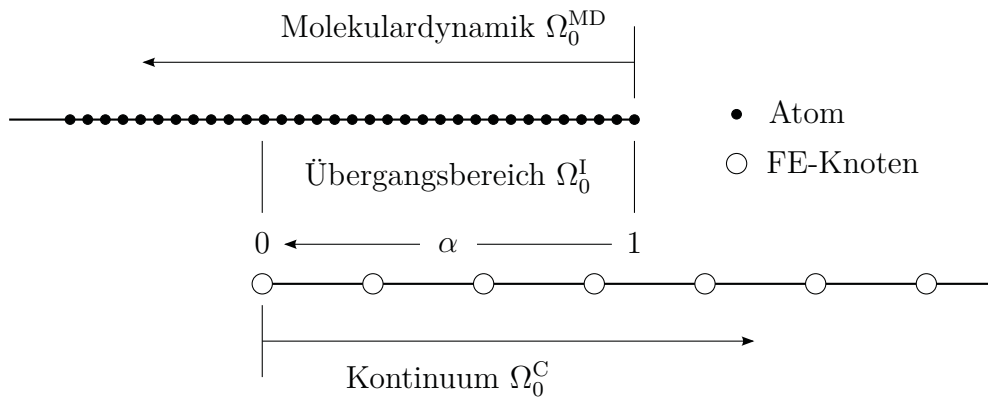
Der zentrale Punkt einer Mehrskalensimulation ist, wie das Problem des Übergangs zwischen dem diskret und dem kontinuierlich modellierten Bereich gelöst ist. Dabei können generell zwei Arten der Kopplung unterschieden werden: die informationsübertragenden Mehrskalensimulationen und die Methoden, bei denen die beiden Diskretisierungsarten simultan vorliegen (engl. „concurrent“).

Bei den informationsübertragenden Mehrskalensimulationen werden Berechnungen auf der feinen Skala durchgeführt und Größen ermittelt, die dann für Berechnungen mit einem anderen Verfahren verwendet werden können, das mehr approximativ oder phänomenologischen Charakter hat, wie z. B. die FEM. Zu den Methoden, die diese Art der Kopplung verwenden, gehören beispielsweise die „Variational Multiscale Method“ (HUGHES U. A. 1998) und die Quasikontinuumsmethode (TADMOR U. A. 1996). Die in Abschnitt 2.3.1 vorgestellte  $FE^2$  gehört im Grunde auch dazu, nur dass die feine Skala dort auch mit der FEM modelliert wird. Methoden, die als „concurrent“ bezeichnet werden, sind unter anderen die Bridging-Domain-Methode (BELYTSCHKO UND XIAO 2003), die der Arlequin-Methode (BEN DHIA 1998) sehr ähnelt, welche allerdings nur Kontinuums-skalen verknüpft, und die Bridging-Scale-Methode (WAGNER UND LIU 2003). Bei diesen Methoden liegen in manchen Bereichen beide Modelle (atomistisch und kontinuierlich) gleichzeitig vor. Im ersten Fall trifft dies auf einen Übergangsbereich zwischen

dem diskret aufgelösten und dem kontinuumsmechanisch modellierten Bereich zu, bei der Bridging-Scale-Methode mehr oder weniger auf das gesamte Gebiet. Um die unterschiedlichen Kopplungsansätze zu verdeutlichen, werden in den folgenden Abschnitten die Bridging-Domain-Methode, die Bridging-Scale-Methode und die Quasikontinuums-methode genauer beschrieben. Zunächst sollen allerdings noch einige Besonderheiten und Probleme bei Mehrskalensimulationen angesprochen werden.

MILLER UND TADMOR (2009) unterscheiden zwei grundlegend unterschiedliche Arten, wie bei diesen Mehrskalmethoden Gleichgewicht erreicht wird. Der erste Ansatz ist ein energiebasierter Ansatz, bei dem ein wohl definiertes Energiefunktional für das Problem aufgestellt wird und die Energie im System minimiert wird. Beim zweiten, kraftbasierten Ansatz werden physikalisch motivierte Kräfte an allen Freiheitsgraden aufgestellt und dafür gesorgt, dass diese während der Berechnung zu Null werden. Auch wenn es so scheint, als wären diese beiden Ansätze identisch, so sind die Kräfte, die man beim energiebasierten Ansatz an den Freiheitsgraden durch Ableitung der Gesamtenergie erhält, nicht dieselben wie die beim kraftbasierten Ansatz. Der Grund dafür sind die sogenannten „ghost-forces“ (TADMOR (1996) und TADMOR U. A. (1996)), die dadurch entstehen, dass ein Teil des Gebiets mit einer lokalen Formulierung (Kontinuum) diskretisiert ist und ein daran angrenzender Bereich einer nichtlokalen Formulierung unterliegt. In Kombination mit der Tatsache, dass Atome nicht nur mit ihren direkten Nachbarn interagieren, sondern weitreichendere Potentiale haben, entstehen am Übergang des lokal formulierten Bereichs zum nichtlokal formulierten Ungleichgewichtskräfte. Ein Atom im lokal formulierten Bereich erfährt eine Kraft aufgrund eines Atoms im nichtlokal formulierten Bereich, aber umgekehrt nicht. Dieses Verhalten ist in SHENOY U. A. (1999) sehr anschaulich dargestellt. Die Methoden mit dem kraftbasierten Ansatz haben den Nachteil, dass sie nur sehr langsam und teils zu einem instabilen Gleichgewichtspunkt konvergieren. Sie sind außerdem nicht energieerhaltend und gelten als numerisch instabil. Alle hier vorgestellten Methoden verfolgen den energiebasierten Ansatz.

Ein weiteres Problem, das dem Übergang einer feinen zu einer groben Diskretisierung geschuldet ist und bei dynamischen Prozessen auftaucht, ist die Tatsache, dass eine grobe Diskretisierung keine so hohen Frequenzen auflösen kann wie eine feine Diskretisierung. Trifft eine Welle aus dem atomistischen Bereich auf die Grenze zum Kontinuum, werden die hochfrequenten Anteile der Welle reflektiert. Dies ist unphysikalisch und sollte z. B. durch Dämpfungsterme verhindert werden. Ebenfalls bei dynamischen Problemen könnten zeitliche Übergänge sinnvoll sein. Je feiner die Diskretisierung, desto kleiner die notwendigen Zeitschritte. Werden diese im gesamten Gebiet umgesetzt, ist die Rechenzeit vergleichsweise hoch. Daher könnte eine adaptive Anpassung der Zeitschrittweiten sinnvoll sein. Hinweise auf Literatur zu diesem Thema findet man z. B. bei FISH (2006).



**Abbildung 2.7:** Kopplung bei der Bridging-Domain-Methode in 1D (nach XIAO UND BELYTSCHKO (2004)).

### 2.5.1 Bridging-Domain-Methode

Die Bridging-Domain-Methode (BDM) von BELYTSCHKO UND XIAO (2003) koppelt die Molekulardynamik mit der Finite-Elemente-Methode. Sie hat dieselben Grundzüge wie die Arlequin-Methode (BEN DHIA 1998), eine allgemeine Methode zur Kopplung unterschiedlicher Methoden, basierend auf einem überblendenden Energiefunktional. Das gesamte Gebiet  $\Omega_0$  ist bei der BDM in zwei Untergebiete aufgeteilt. Ein Teil  $\Omega_0^{\text{C}}$  repräsentiert das Kontinuum, diskretisiert mit der FEM, und der andere ist der diskrete Teil  $\Omega_0^{\text{MD}}$ , welcher mit der Molekulardynamik modelliert ist. Diese beiden Gebiete sind durch einen Übergangsbereich  $\Omega_0^{\text{I}}$  miteinander verbunden, in dem sich die beiden Diskretisierungen überlappen. Die Aufteilung der Gebiete ist in Abbildung 2.7 dargestellt.

Die Kopplung findet über die Energien im System statt. Die Hamilton-Funktion (engl. „Hamiltonian“)  $H$  des gekoppelten Systems wird als Linearkombination der Hamilton-Funktionen des diskreten und des kontinuierlichen Gebiets,  $H^{\text{MD}}$  und  $H^{\text{C}}$ , gebildet

$$H = (1 - \alpha) H^{\text{MD}} + \alpha H^{\text{C}}, \quad (2.3)$$

wobei  $\alpha$  die Funktion hat, die Anteile der beiden Gebiete zur Hamilton-Funktion im gesamten Gebiet wie folgt zu wichten (siehe Abbildung 2.7):

$$\alpha = \begin{cases} 1 & \text{in } \Omega_0^{\text{C}} - \Omega_0^{\text{I}}, \\ (0, 1) & \text{in } \Omega_0^{\text{I}}, \\ 0 & \text{in } \Omega_0^{\text{MD}} - \Omega_0^{\text{I}}. \end{cases} \quad (2.4)$$

Der Einfluss der jeweiligen Diskretisierungsmethode zum gesamten Hamiltonian nimmt also von 100 %, am Rand des Übergangsbereichs, das mit der betrachteten Methode diskretisiert ist, auf 0 %, am Rand zur anderen Diskretisierungsmethode, linear ab. Um



Kompatibilität zwischen den beiden Methoden im Übergangsbereich zu erzwingen, wird von den Atomen gefordert, dass sie sich mit dem Verschiebungsfeld des Kontinuums bewegen. Diese Zusatzbedingung kann z. B. über die Lagrange-Multiplikatoren-Methode oder die erweiterte (augmented) Lagrange-Methode in der Hamilton-Funktion des Übergangsbereichs eingebracht werden. Dies ist eine schwache Kompatibilitätsforderung, bei der kein direkter Zusammenhang zwischen Atompositionen und FE-Knoten bestehen muss. Dadurch ist die Generierung des FE-Netzes deutlich einfacher, reduziert jedoch die Genauigkeit der Methode (MILLER UND TADMOR 2009).

### 2.5.2 Bridging-Scale-Methode

Wie bei der Bridging-Domain-Methode, werden auch bei der Bridging-Scale-Methode (WAGNER UND LIU 2003) molekulardynamische und kontinuumsmechanische Diskretisierungen miteinander gekoppelt. Die Konzepte beider Methoden gehen jedoch weit auseinander. Bei der Bridging-Scale-Methode (BSM) gibt es prinzipiell keine getrennten atomistischen und kontinuumsmechanischen Bereiche. Stattdessen gibt es Verschiebungsfelder für die Fein- und Grobskala im ganzen Gebiet aus denen sich das Gesamtverschiebungsfeld  $\mathbf{u}$  folgendermaßen zusammensetzt:

$$\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} + \mathbf{u}'. \quad (2.5)$$

Diese Art der Skalenzerlegung wurde auch bei der „Variational Multiscale Method“ von HUGHES U. A. (1998) verwendet.  $\bar{\mathbf{u}}$  ist dabei die Lösung der groben Skala, die für die ganze Struktur berechnet wird und mithilfe von FE-Ansatzfunktionen repräsentiert werden kann. Die Feinskalenlösung  $\mathbf{u}'$  wird in Bereichen, die eine volle Auflösung erfordern, hierarchisch aufaddiert. Sie entspricht dem Teil der Lösung, der nicht durch die Grobskalen-Ansatzfunktionen wiedergegeben werden kann. In anderen Worten ist sie die Differenz der Gesamtlösung des Verschiebungsfeldes zur Grobskalenlösung.

Die Freiheitsgrade der Feinskala werden mithilfe einer Laplace-Transformation aus dem Grobskalengebiet eliminiert. Durch die Laplace-Transformation entstehen Terme, durch die die beiden Skalen miteinander gekoppelt sind. Durch einige Terme werden beispielsweise Randbedingungen auf das Feinskalengebiet repräsentiert. Einer dieser Terme, der Faltungskern (engl. „time history kernel“), sorgt außerdem dafür, dass kurze Wellenlängen nicht reflektiert werden, wenn diese aus dem MD-Gebiet austreten wollen, sondern deren Energie dissipiert wird. Im Gegensatz zur Bridging-Domain-Methode ist dies also intrinsisch in der Methode enthalten. Die Fähigkeit der Methode, für die Fein- und Grobskalensimulation jeweils andere Zeitschrittweiten wählen zu können, gilt außerdem als ein großer Vorteil.

### 2.5.3 Quasikontinuumsmethode

Im Gegensatz zur Bridging-Domain- und zur Bridging-Scale-Methode gehört die Quasikontinuumsmethode (QC-Methode) von TADMOR U. A. (1996) nicht zu den „concurrent“-Methoden, sondern ist eine informationsübertragende Methode. Die gekoppelten Methoden sind jedoch auch bei dieser Methode die Finite-Elemente-Methode und die Molekulardynamik, hier mit dem Potential der Embedded-Atom-Methode. Mit der FEM wird die Kinematik festgelegt, und die MD definiert das Konstitutivverhalten.

Die grundlegenden Gleichungen werden bei der QC-Methode mit der FEM gelöst. Die Freiheitsgrade der FE-Knoten sind daher die einzigen im System. Das FE-Netz wird so über die Atome gelegt, dass sich ein FE-Knoten immer an der Position eines Atoms befindet. Dadurch können die FE-Knoten auch als repräsentative Atome betrachtet werden. Atome, die zwischen den FE-Knoten liegen, werden gezwungen, sich mit dem FE-Verschiebungsfeld mitzubewegen (Cauchy-Born-Regel). Die Verschiebungen dieser Atome erhält man durch Interpolation der Knotenverschiebungen über die FE-Ansatzfunktionen. Anders als bei der normalen FEM basiert das Materialgesetz auf den Potentialen zwischen den Atomen, welche von den Verschiebungen der Atome abhängen. Diese Potentiale werden aufsummiert, um das Gesamtpotential im System zu ermitteln. Zweimaliges Ableiten des Gesamtpotentials nach den Freiheitsgraden ergibt die Steifigkeitsmatrix. Die Berechnung der Steifigkeitsmatrix ist daher der einzige Unterschied zur Standard-FEM und wird in Bereichen mit nahezu homogener und stark inhomogener Lösung unterschiedlich umgesetzt.

Da die Deformation des Kontinuums zur Anwendung der Cauchy-Born-Regel homogen sein muss, wird das Finite-Elemente-Netz in Bereichen, in denen die Spannungs- und Verzerrungsgradienten groß sind, adaptiv verfeinert (SHENOY U. A. 1999). Da die FE-Knoten so gewählt werden, dass sie immer auf Atomen liegen, ist das feinste Netz erreicht, wenn jedes Atom durch einen FE-Knoten repräsentiert wird. In diesem Fall hat jedes Atom seine eigenen Freiheitsgrade und kann sich ohne kinematische Einschränkungen bewegen. Wo das Netz bis zur Atomskala aufgelöst ist, ist die Berechnung somit dieselbe wie eine rein atomistische. In Bereichen mit relativ grobem Netz hingegen verhält sich das Material eher wie ein Kontinuum. Beide Methoden sind somit in der QC-Methode enthalten.

In der Literatur ist eine Vielzahl an Varianten dieser Methode vertreten, auch solche, die nicht auf Energien, sondern auf Kräften basieren. MILLER UND TADMOR (2009) bieten dazu einen Überblick und entsprechende Literaturhinweise. Ein Vorteil der QC-Methode ist, dass sie durch die automatische Netz- und Modellanpassung einen glatten Übergang der beiden Diskretisierungsmethoden ermöglicht. Es ist nicht nötig, unterschiedliche Bereiche für die verschiedenen Diskretisierungsansätze oder gar ein Übergangsgebiet zu

definieren und im Fall von lokalen Veränderungen während der Berechnung mitzubewegen. Aufgrund dieses Vorteils wurde die Methode in dieser Arbeit als Grundlage für eine Erweiterung auf Anwendungen in der Strukturmechanik gewählt.



# 3

---

## Grundlagen der Kontinuumsmechanik und der Finite-Elemente-Methode

Dieses Kapitel behandelt die grundlegenden Gleichungen der Kontinuumsmechanik für quasistatische Probleme und deren Lösung mithilfe der Finite-Elemente-Methode. Die Gleichungen bilden die Basis zur mathematisch-mechanischen Beschreibung des Antwortverhaltens eines materiellen Körpers unter Einfluss äußerer Kräfte. Die starke Form des quasistatischen Randwertproblems wird in Abschnitt 3.1 hergeleitet, um in Abschnitt 3.2 in die schwache Form überführt zu werden. Die Gleichungen der schwachen Form lassen sich mit einem numerischen Näherungsverfahren wie der Finite-Elemente-Methode (FEM) lösen. Dazu ist eine Diskretisierung des Problems nötig, die in Abschnitt 3.3 eingeführt wird. Für eine iterative Gleichungslösung im nichtlinearen Fall wird das Newton-Raphson-Verfahren angewendet. Dafür müssen die Gleichungen linearisiert werden. Die Linearisierung wird in Abschnitt 3.4 behandelt. Zur Vervollständigung ist die Beschreibung des Materials von wichtiger Bedeutung. Die hier verwendeten Konstitutivgesetze werden in Abschnitt 3.5 eingeführt. Es werden im ganzen Kapitel lediglich die in dieser Arbeit verwendeten Gleichungen eingeführt. Da keine zeitabhängigen Probleme betrachtet werden sollen, wird auf Komponenten, die zur Beschreibung dynamischer Effekte nötig sind, verzichtet.

Für ein vertiefendes Studium hinsichtlich der Kontinuumsmechanik für elastische Probleme kann z. B. MARS DEN UND HUGHES (1994) herangezogen werden und für den etwas allgemeineren Fall der nichtlinearen Festkörpermechanik z. B. HOLZAPFEL (2000). Im Bereich der Finite-Elemente-Methode zählen ZIENKIEWICZ U. A. (2006), BELYTSCHKO, T. U. A. (2008) und HUGHES (2000) zu den bekanntesten Lehrbüchern. Des Weiteren bieten BISCHOFF U. A. (2006) und KUHL UND MESCHKE (2002) einen Einstieg in die Materie.

### 3.1 Quasistatisches Randwertproblem

Ein materieller Körper ist ein physikalisches Objekt, beschrieben durch eine (unendliche) Menge von materiellen Punkten, das einen, zumindest abschnittsweise, kontinuierlichen Bereich im dreidimensionalen Euklidischen Raum  $\mathbb{R}^3$  einnimmt. Dieser Bereich wird als Gebiet  $\Omega$  bezeichnet. Die Bewegung eines jeden materiellen Punkts wird durch seinen Ortsvektor  $\mathbf{X} = [X_1 \ X_2 \ X_3]^T$  und dessen Positionsänderung, die im Verschiebungsvektor  $\mathbf{u} = [u_1 \ u_2 \ u_3]^T$  festgehalten ist, beschrieben. Den Komponenten der Orts- und Verschiebungsvektoren liegt eine kartesische Basis mit den orthogonalen Einheitsvektoren  $\mathbf{e}_i$  für  $i \in \{1, 2, 3\}$  zugrunde, wodurch die Vektoren durch ihre Komponenten und Basen durch

$$\mathbf{X} = X_i \mathbf{e}_i \quad \text{und} \quad \mathbf{u}(\mathbf{X}) = u_i(\mathbf{X}) \mathbf{e}_i \quad (3.1)$$

beschrieben werden können. Dabei gilt die Einstein'sche Summenkonvention. Die aktuelle Position des betrachteten materiellen Punkts ist durch den Ortsvektor

$$\mathbf{x}(\mathbf{X}) = \mathbf{X} + \mathbf{u}(\mathbf{X}) \quad (3.2)$$

gegeben. Dadurch sind Geometrie und Lage des materiellen Körpers eindeutig bestimmt. Die Deformation des Körpers wird über dessen Verzerrungen bzw. Dehnungen beschrieben. Bei der während der gesamten Arbeit angewandten geometrisch linearen Theorie, also bei kleinen Verzerrungen, kann der nichtlineare Term des Verzerrungstensors vernachlässigt werden. Das Verzerrungsmaß ist dann definiert als der symmetrische Anteil des Verschiebungsgradienten  $\nabla \mathbf{u}$ . Der lineare Verzerrungstensor  $\boldsymbol{\varepsilon}$  ergibt sich demnach zu

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \nabla^{\text{sym}} \mathbf{u} = \frac{1}{2} [u_{i,j} + u_{j,i}] \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \quad \text{in } \Omega. \quad (3.3)$$

Durch den Cauchy'schen Spannungstensor  $\boldsymbol{\sigma}$  wird die mechanische Beanspruchung im Körper ausgedrückt. Mit dem materialspezifischen Konstitutivgesetz

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{q}) \quad \text{in } \Omega \quad (3.4)$$

werden die Verzerrungen, als Funktion der Verschiebungen, mit den Spannungen in Bezug gebracht. Außerdem können die Spannungen von der Belastungsgeschichte abhängen. Die Geschichtsvariablen sind hier für den allgemeinen Fall im Vektor  $\mathbf{q}$  zusammengefasst. Die Beziehung zwischen Spannungen und Verzerrungen besteht ausschließlich lokal am betrachteten materiellen Punkt. An einer Schnittfläche  $\Gamma_n$  des materiellen Körpers mit der Normalen  $\mathbf{n}$  werden die Spannungen  $\mathbf{t}$  frei. Nach dem Cauchy-Theorem wird

dieser Spannungsvektor wie folgt berechnet:

$$\mathbf{t} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} \quad \text{auf } \Gamma_n. \quad (3.5)$$

Der Spannungstensor erfüllt die lokale Impulsbilanz, welche das Gleichgewicht zwischen den inneren Kräften und den äußeren Volumenkräften  $\mathbf{b}$  beschreibt. Aus der Drehimpulsbilanz, die hier nicht weiter aufgeführt wird, kann für Boltzmann-Kontinua Symmetrie des Spannungstensors hergeleitet werden, sodass  $\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}^T$  in  $\Omega$  gilt. Da in dieser Arbeit ausschließlich quasistatische Probleme behandelt werden, können sämtliche Trägheitsterme vernachlässigt werden. Somit lautet die lokale Impulsbilanz:

$$\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{b} = 0 \quad \text{in } \Omega. \quad (3.6)$$

Durch Definition von Randbedingungen erhält das punktweise formulierte Randwertproblem seine Vollständigkeit. Der Gebietsrand  $\Gamma$  wird dazu in disjunkte Untermengen des Dirichlet-Rands  $\Gamma_u$  und des Neumann-Rands  $\Gamma_t$  unterteilt:

$$\Gamma = \Gamma_u \cup \Gamma_t \qquad \Gamma_u \cap \Gamma_t = \emptyset. \quad (3.7)$$

Im Kontext der Elastomechanik werden auf dem Dirichlet-Rand Verschiebungen  $\hat{u}_i$  vorgeschrieben und auf dem Neumann-Rand entsprechend Spannungen  $\hat{t}_i$ . Der Index  $i$  bezeichnet dabei die räumliche Richtung, in der die jeweilige Randbedingung wirken soll. An jedem Punkt und in jede Richtung des Randes kann nur entweder eine Dirichlet- oder eine Neumann-Randbedingung definiert sein:

$$\begin{aligned} u_i &= \hat{u}_i \quad \text{auf } \Gamma_u \\ t_i &= \hat{t}_i \quad \text{auf } \Gamma_t. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Der Satz an Differentialgleichungen, bestehend aus der Gleichgewichtsbedingung (3.6), dem Konstitutivgesetz (3.4) und der Kinematik (3.3), zusammen mit den Randbedingungen (3.8), bildet die sogenannte starke Form des quasistatischen Randwertproblems.

## 3.2 Schwache Form des Randwertproblems

Die Lösung der starken Form des quasistatischen Randwertproblems ist für allgemeine Problemstellungen in der Regel nicht analytisch möglich. Um die Gleichungen numerisch zu lösen, werden sie mithilfe der Methode der gewichteten Residuen in die sogenannte schwache Form überführt. Dazu werden die Gleichgewichtsbedingung (3.6) und die Spannungsrandbedingung (3.8<sub>2</sub>) mit einer vektorwertigen Testfunktion multipliziert und

über das Gebiet  $\Omega$  bzw. den Spannungsrand  $\Gamma_t$  integriert:

$$\int_{\Omega} \delta \mathbf{u} \cdot [\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{b}] \, d\Omega + \int_{\Gamma_t} \delta \mathbf{u} \cdot [\hat{\mathbf{t}} - \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}] \, d\Gamma = 0 \quad \forall \delta \mathbf{u}. \quad (3.9)$$

Als Testfunktion wird die virtuelle Verschiebung  $\delta \mathbf{u}$  gewählt, welche die energetisch konjugierte Größe zu den inneren und äußeren Kräften der Impulsbilanz darstellt. Die Testfunktion kann eine beliebige Funktion sein, die jedoch homogene Verschiebungsrandbedingungen erfüllen soll und außerdem glatt genug sein muss, dass die zur Herleitung der schwachen Form notwendigen Ableitungen definiert sind.

Durch Anwendung des Gauß'schen Integralsatzes nach partieller Integration, Einsetzen der kinematischen und konstitutiven Gleichungen, (3.3) und (3.4), und unter Voraussetzung der Symmetrie des Spannungstensors  $\boldsymbol{\sigma}$ , kann die schwache Form des Randwertproblems durch

$$\delta \Pi = \underbrace{\int_{\Omega} \delta \boldsymbol{\varepsilon} : \boldsymbol{\sigma} \, d\Omega}_{\delta \Pi_{\text{int}}} - \underbrace{\int_{\Omega} \delta \mathbf{u} \cdot \mathbf{b} \, d\Omega + \int_{\Gamma_t} \delta \mathbf{u} \cdot \hat{\mathbf{t}} \, d\Gamma}_{-\delta \Pi_{\text{ext}}} = 0 \quad \forall \delta \mathbf{u} \quad (3.10)$$

neu formuliert werden. In dieser Form werden die Gleichgewichtsbedingung und die Spannungsrandbedingung nicht mehr punktweise stark erfüllt, sondern nur noch im integralen Sinne. Der Vorteil davon ist, dass lokale Fehler zugelassen werden und die Gleichung somit leichter lösbar wird. Die kinematische Bedingung und das Konstitutivgesetz sind auch in der schwachen Formulierung weiterhin an jedem Punkt stark erfüllt. Werden die Testfunktionen als virtuelle Verschiebungen interpretiert, die die homogenen geometrischen Randbedingungen erfüllen, so sind auch die geometrischen Randbedingungen in der schwachen Form punktweise stark erfüllt. Die Wahl der Testfunktionen als virtuelle Verschiebungen bewirkt außerdem, dass die Summanden in Gleichung (3.10) der inneren virtuellen Arbeit  $\delta \Pi_{\text{int}}$  und der äußeren virtuellen Arbeit  $\delta \Pi_{\text{ext}}$  entsprechen. Die schwache Form ist dadurch identisch mit dem Prinzip der virtuellen Verschiebungen, wonach die virtuelle Arbeit  $\delta \Pi$  als Differenz der inneren virtuellen Arbeit und der äußeren virtuellen Arbeit verschwinden muss.

In einer Verschiebungsformulierung, wie sie hier verwendet wird, stellt die Verschiebung  $\mathbf{u}$  die Primärvariable dar, nach der gelöst wird. Die Spannungen können durch das verwendete Konstitutivgesetz (Abschnitt 3.5) aus den Verzerrungen berechnet werden und diese wiederum hängen direkt von den Verschiebungen ab. Es kann nun mithilfe eines Näherungsverfahrens, wie z. B. der Finite-Elemente-Methode, gelöst werden. Ist die genaue Lösung der schwachen Form bekannt, so entspricht sie der Lösung der starken Form.



### 3.3 Diskretisierung

Im Rahmen dieser Arbeit werden nur ebene Problemstellungen behandelt, weshalb im Folgenden alles auf den zweidimensionalen Fall beschränkt ist. Als Diskretisierungsmethode wird die Finite-Elemente-Methode gewählt. Dabei wird das zu analysierende Gebiet  $\Omega$  in  $n_{\text{ele}}$  Teilbereiche  $\Omega^e$  unterteilt, die finiten Elemente:

$$\Omega \approx \Omega^h = \bigcup_{e=1}^{n_{\text{ele}}} \Omega^e \quad \text{mit } \Omega^i \cap \Omega^j = \emptyset \text{ für } i \neq j. \quad (3.11)$$

Der Operator  $\cup$  steht für die Assemblierung der einzelnen Elementbeiträge zur jeweils globalen Größe unter Berücksichtigung der Konnektivität. Mit dem Index h werden diskrete Größen gekennzeichnet im Vergleich zu den kontinuierlichen. Innerhalb eines Elements mit  $n_{\text{node}}$  Knoten werden sowohl die Geometrie als auch sonstige kontinuierliche Feldgrößen, wie z. B. die Verschiebungen, mithilfe von diskreten Knotenwerten und dazwischen liegenden Formfunktionen  $\mathbf{N}$  approximiert. Gemäß des isoparametrischen Konzepts werden für die Geometrie und die Feldgrößen dieselben Formfunktionen gewählt.

Der Ortsvektor eines materiellen Punktes in einem Element ist gegeben durch

$$\mathbf{x} \approx \mathbf{x}^h = \sum_{I=1}^{n_{\text{node}}} N^I \mathbf{x}^I, \quad (3.12)$$

wobei  $\mathbf{x}^I = [x_1^I \ x_2^I]^T$  die Koordinaten des  $I$ -ten Elementknotens sind und  $N^I$  die Formfunktion ist, die den Wert 1 am Knoten  $I$  annimmt und den Wert 0 an allen anderen Knoten hat. Es sei an dieser Stelle darauf hingewiesen, dass hier und im Folgenden eine kartesische Basis zugrunde gelegt und der Übersichtlichkeit halber von nun an auf eine Matrixschreibweise übergegangen wird. Spannungen und Verzerrungen werden außerdem in Voigt-Notation angegeben. Die Formfunktionen werden für ein Einheitsselement in einem ebenfalls zweidimensionalen Parameterraum mit den Koordinaten  $\boldsymbol{\xi} = [\xi_1 \ \xi_2]^T$  definiert und sind somit für alle Elemente mit derselben Geometrie (z. B. Dreieck oder Viereck) und Ansätzen desselben Polynomgrades gleich. Das Bindeglied zwischen dem Element im Parameterraum und im physikalischen Raum bildet die Jacobi-Matrix  $\mathbf{J}$ :

$$\mathbf{J}(\boldsymbol{\xi}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial \xi_1} & \frac{\partial x_2}{\partial \xi_1} \\ \frac{\partial x_1}{\partial \xi_2} & \frac{\partial x_2}{\partial \xi_2} \end{bmatrix} \quad \mathbf{J}^{-1}(\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{|\mathbf{J}(\boldsymbol{\xi})|} \begin{bmatrix} \frac{\partial x_2}{\partial \xi_2} & -\frac{\partial x_2}{\partial \xi_1} \\ -\frac{\partial x_1}{\partial \xi_2} & \frac{\partial x_1}{\partial \xi_1} \end{bmatrix}. \quad (3.13)$$

Wie in Abschnitt 3.2 erwähnt, stellen in einer Verschiebungsformulierung die Verschiebungen die einzige Feldgröße dar, für die gelöst wird. Es ist daher die einzige Größe,

für die, abgesehen von der geometrischen Beschreibung, Ansätze gemacht werden. Die Formfunktionen  $\mathbf{N}$  sind dieselben wie für die Geometrie und im Sinne eines Bubnov-Galerkin-Verfahrens auch dieselben für die virtuellen Verschiebungen:

$$\mathbf{u} \approx \mathbf{u}^h = \bigcup_{e=1}^{n_{\text{ele}}} \mathbf{N}^e \mathbf{d}^e \quad \delta \mathbf{u} \approx \delta \mathbf{u}^h = \bigcup_{e=1}^{n_{\text{ele}}} \mathbf{N}^e \delta \mathbf{d}^e. \quad (3.14)$$

Dabei sind  $\mathbf{d}$  die Knotenverschiebungen bzw.  $\delta \mathbf{d}$  die virtuellen Knotenverschiebungen, zwischen denen interpoliert wird. Unter Voraussetzung eines Boltzmann-Kontinuums hat jeder Knoten im zweidimensionalen zwei Verschiebungsfreiheitsgrade, nämlich in  $\mathbf{e}_1$ - und  $\mathbf{e}_2$ -Richtung. Der Vektor  $\mathbf{d}$  hat somit je Element  $e$  genau wie die Vektoren  $\delta \mathbf{d}$ ,  $\delta \mathbf{u}$  und  $\mathbf{u}$  die Länge  $2 \cdot n_{\text{node}}$ .

Die (virtuellen) Verzerrungen entsprechen dem symmetrischen Anteil des räumlichen Gradienten der (virtuellen) Verschiebungen. Da die Verschiebungen diskrete Knotenwerte sind, muss die Ableitung der Formfunktionen gebildet werden. Diese Ableitungen werden im B-Operator zusammengefasst, wobei die Kettenregel angewendet werden muss, da die Formfunktionen lediglich eine Funktion der Koordinaten des Parameter-raumes sind. Der B-Operator (engl. „strain-displacement matrix“) stellt die (virtuellen) Verzerrungen und (virtuellen) Verschiebungen zueinander in Relation:

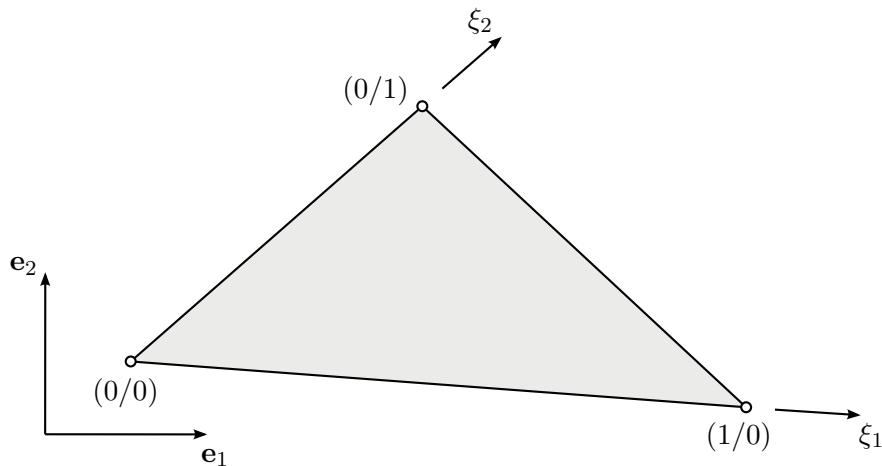
$$\boldsymbol{\varepsilon} \approx \boldsymbol{\varepsilon}^h = \bigcup_{e=1}^{n_{\text{ele}}} \mathbf{B}^e \mathbf{d}^e \quad \delta \boldsymbol{\varepsilon} \approx \delta \boldsymbol{\varepsilon}^h = \bigcup_{e=1}^{n_{\text{ele}}} \mathbf{B}^e \delta \mathbf{d}^e. \quad (3.15)$$

Die diskrete schwache Form des quasistatischen Randwertproblems ergibt sich durch Einsetzen der Ansätze (3.14) und (3.15) in (3.10):

$$\delta \Pi^h = \bigcup_{e=1}^{n_{\text{ele}}} (\delta \mathbf{d}^e)^T \left[ \underbrace{\int_{\Omega^e} \mathbf{B}^T \boldsymbol{\sigma}^h(\mathbf{d}, \mathbf{q}) \, d\Omega}_{\mathbf{f}_{\text{int}}^e(\mathbf{d}^e)} - \underbrace{\int_{\Omega^e} \mathbf{N}^T \mathbf{b} \, d\Omega - \int_{\Gamma_t^e} \mathbf{N}^T \hat{\mathbf{t}} \, d\Gamma}_{-\mathbf{f}_{\text{ext}}^e} \right] = 0 \quad \forall \delta \mathbf{d}^e. \quad (3.16)$$

Es wurde dabei schon berücksichtigt, dass die virtuellen Verschiebungen  $\delta \mathbf{d}$  keine Funktion der räumlichen Koordinaten sind und demnach vor das Integral gezogen werden können. Fordert man, dass Gleichung (3.16) für beliebige  $\delta \mathbf{d}$  erfüllt wird (Fundamentallemma der Variationsrechnung), und führt weiterhin

$$\mathbf{F}_{\text{int}}(\mathbf{D}) = \bigcup_{e=1}^{n_{\text{ele}}} \mathbf{f}_{\text{int}}^e(\mathbf{d}^e), \quad \mathbf{F}_{\text{ext}} = \bigcup_{e=1}^{n_{\text{ele}}} \mathbf{f}_{\text{ext}}^e \quad \text{und} \quad \mathbf{D} = \bigcup_{e=1}^{n_{\text{ele}}} \mathbf{d}^e \quad (3.17)$$



**Abbildung 3.1:** Dreieckselement mit Koordinaten im Parameterraum.

ein, so ergibt sich nachfolgendes, im Allgemeinen nichtlineares, Gleichungssystem zur Bestimmung der unbekannt Knotenverschiebungen  $\mathbf{D}$  des Systems:

$$\mathbf{R}(\mathbf{D}) = \mathbf{F}_{\text{int}}(\mathbf{D}) - \mathbf{F}_{\text{ext}} = \mathbf{0}. \quad (3.18)$$

$\mathbf{F}_{\text{int}}(\mathbf{D})$  ist darin eine Funktion der Knotenverschiebungen, wohingegen für alle im Rahmen dieser Arbeit behandelten Problemstellungen davon ausgegangen wird, dass dies nicht auf die äußeren Kräfte  $\mathbf{F}_{\text{ext}}$  zutrifft. Gleichung (3.18) drückt das Gleichgewicht der inneren und äußeren Kräfte aus. Auf den Index  $h$  wird von nun an verzichtet.

Wird das Prinzip der virtuellen Verschiebungen mithilfe der Finite-Elemente-Methode und der damit verbundenen Ansätze gelöst, entsteht ein Fehler, wodurch die Lösungen der starken und schwachen Form nicht mehr identisch sind. Der sich ergebende Fehler wird Residuum  $\mathbf{R}$  genannt und sollte Null sein. Bei nichtlinearen Problemen wird die Belastung schrittweise aufgebracht. In jedem Schritt können dann mehrere Iterationen nötig sein, um das Residuum bis auf einen zuvor definierten Toleranzwert an Null heranzubringen. In der vorliegenden Arbeit wird zur Iteration das Newton-Raphson-Verfahren verwendet. Dieses Verfahren zeichnet sich bei konsistenter Linearisierung durch quadratische Konvergenz in Lösungsnähe aus.

Im Rahmen dieser Arbeit werden zur Diskretisierung ausschließlich Dreieckselemente mit linearen Lagrange'schen Ansätzen verwendet. Die linearen Formfunktionen

$$N_1 = 1 - \xi_1 - \xi_2 \quad N_2 = \xi_1 \quad N_3 = \xi_2 \quad (3.19)$$

gehören zu einem Einheitselement wie in Bild 3.1 dargestellt. Aufgrund der linearen Verschiebungsansätze besitzen Dreieckselemente die Eigenschaft konstanter Verzerrun-

gen innerhalb eines Elements. Der Deformationsgradient

$$\mathbf{F} = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{I} + \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{X}} \quad (3.20)$$

mit der Einheitsmatrix  $\mathbf{I}$  ist daher ebenfalls konstant im Element. Diese beiden Eigenschaften werden später noch hilfreich sein und werden daher hier schon einmal hervorgehoben.

### 3.4 Linearisierung

Das Residuum aus Gleichung (3.18) bezeichnet die Ungleichgewichtskräfte im System und soll im Laufe der Iterationen, in einem Lastschritt, zu Null werden. Beim Newton-Raphson-Verfahren wird das Residuum am aktuellen Punkt  $\mathbf{D}^i$  linearisiert und der Nullpunkt der Tangente an diesem Punkt gesucht ( $\mathbf{D}^{i+1}$ ), der dann als neuer Ausgangspunkt des nächsten Iterationsschritts dient. Dies wird solange wiederholt, bis die Änderung in einem Iterationsschritt  $\Delta \mathbf{D}^{i+1}$  und/oder das Residuum einen sehr klein gewählten Toleranzwert unterschreiten. Zur Linearisierung wird das Residuum in einer Taylorreihe um die Lösung des Iterationsschritts  $i$  entwickelt. Unter Vernachlässigung aller Terme höherer als erster Ordnung ergibt sich nachfolgendes linearisiertes Residuum:

$$\text{Lin } \mathbf{R}(\mathbf{D}^{i+1}) = \mathbf{R}(\mathbf{D}^i) + \left. \frac{\partial \mathbf{R}(\mathbf{D})}{\partial \mathbf{D}} \right|_{\mathbf{D}^i} \Delta \mathbf{D}^{i+1} = \mathbf{0} \quad \text{mit } \Delta \mathbf{D}^{i+1} = \mathbf{D}^{i+1} - \mathbf{D}^i. \quad (3.21)$$

Der Term  $\left. \frac{\partial \mathbf{R}(\mathbf{D})}{\partial \mathbf{D}} \right|_{\mathbf{D}^i} = \left. \frac{\partial \mathbf{f}_{\text{int}}(\mathbf{D})}{\partial \mathbf{D}} \right|_{\mathbf{D}^i}$  definiert die globale Tangentensteifigkeit  $\mathbf{K}_{\text{tan}}^i$  für die Verschiebungen im  $i$ -ten Iterationsschritt. So erhält man zur Lösung des inkrementellen Verschiebungsvektors  $\Delta \mathbf{D}^{i+1}$  das linearisierte globale Gleichungssystem

$$\mathbf{K}_{\text{tan}}^i \Delta \mathbf{D}^{i+1} = \mathbf{F}_{\text{ext}} - \mathbf{F}_{\text{int}}(\mathbf{D}^i) = -\mathbf{R}(\mathbf{D}^i) \quad (3.22)$$

und damit den aktualisierten Verschiebungsvektor  $\mathbf{D}^{i+1}$ . Die globale Tangentensteifigkeit und das Residuum setzen sich aus den folgenden Elementbeiträgen zusammen

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_{\text{tan}}^i &= \bigcup_{e=1}^{n_{\text{ele}}} \mathbf{k}_{\text{tan}}^{e,i} = \bigcup_{e=1}^{n_{\text{ele}}} \left. \frac{\partial \mathbf{f}_{\text{int}}^e(\mathbf{d}^e)}{\partial \mathbf{d}^e} \right|_{\mathbf{d}^{e,i}} = \bigcup_{e=1}^{n_{\text{ele}}} \int_{\Omega^e} \mathbf{B}^T \mathbf{C}_{\text{tan}}^i \mathbf{B} \, d\Omega \\ \mathbf{R}^i &= \bigcup_{e=1}^{n_{\text{ele}}} [\mathbf{f}_{\text{int}}^{e,i} - \mathbf{f}_{\text{ext}}^e] = \bigcup_{e=1}^{n_{\text{ele}}} \left[ \int_{\Omega^e} \mathbf{B}^T \boldsymbol{\sigma}^i \, d\Omega - \mathbf{f}_{\text{ext}}^e \right], \end{aligned} \quad (3.23)$$

wobei  $\mathbf{C}_{\text{tan}}$  den vierstufigen Materialtensor darstellt, der definiert ist durch die partielle Ableitung der Spannungen nach den Verzerrungen  $\mathbf{C}_{\text{tan}} = \partial \boldsymbol{\sigma} / \partial \boldsymbol{\varepsilon}$ , jeweils im Schritt  $i$ .

Die Tangentensteifigkeit ist somit abhängig vom gewählten Konstitutivgesetz, welches über die Spannungen auch den inneren Kraftvektor beeinflusst. Die Spezifizierung des Spannungstensors und insbesondere auch des Materialtensors wird im nächsten Abschnitt genauer betrachtet.

## 3.5 Konstitutivgesetze

Um ein möglichst realistisches Antwortverhalten zu erreichen, muss das Werkstoffverhalten der äußerst vielfältigen Materialien auf unterschiedlichste Art modelliert werden. Dieses Verhalten wird mit dem Konstitutivgesetz festgelegt, welches die Verknüpfung der Spannungen und der Verzerrungen als Funktion der Verschiebungen darstellt. Als grösste Kategorisierung lassen sich die Materialmodelle in lineare und nichtlineare Materialmodelle unterteilen. Im linearen Fall ist der Materialtensor unabhängig von den Verzerrungen, was bei den nichtlinearen Modellen nicht der Fall ist. In den folgenden beiden Abschnitten werden das linear elastische isotrope Materialmodell und das isotrope Elasto-Schädigungsmodell als Beispiele für ein lineares und ein nichtlineares Materialmodell vorgestellt. Diese beiden Modelle finden ihre Anwendung in den nächsten Kapiteln dieser Arbeit. Einen Überblick über Materialmodelle für nichtlineare lokalisierende Materialien bietet z. B. JIRÁSEK (2012).

### 3.5.1 Lineare Elastizität

Mit einem linear elastischen Materialmodell werden reversible, zeitunabhängige Vorgänge modelliert. Der Spannungszustand hängt dann nur vom momentanen Verzerrungszustand ab und nicht von der Belastungsgeschichte. Es ist also

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\varepsilon}). \quad (3.24)$$

Ist das Material außerdem homogen und sind die Materialeigenschaften richtungsunabhängig, so charakterisiert dies ein isotropes Materialmodell. Das isotrope linear elastische Materialmodell wird mithilfe von zwei Parametern beschrieben. Es gibt dazu mehrere Darstellungsvarianten. Zum einen kann das Materialmodell mithilfe der sogenannten Lamé-Konstanten  $\lambda$  und  $\mu$  dargestellt werden, die wiederum vom Elastizitätsmodul (E-Modul)  $E$  und der Querdehnzahl  $\nu$  abhängen, oder es kann direkt die Darstellung mit  $E$  und  $\nu$  gewählt werden. Die zuletzt genannte Darstellungsform wird im Folgenden verwendet.

Bei linearer Elastizität entspricht der Spannungstensor der Differentiation einer elastischen Potentialfunktion  $\pi(\boldsymbol{\varepsilon})$  bezüglich des Verzerrungstensors, also  $\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\varepsilon}) = \partial\pi(\boldsymbol{\varepsilon})/\partial\boldsymbol{\varepsilon}$ .

Das bedeutet, dass der aktuelle Spannungszustand nur vom aktuellen Verzerrungszustand abhängt, nicht aber vom Spannungspfad. Die Materialtangente  $\mathbf{C}_{\text{tan}}$  entspricht im elastischen Fall der Sekantensteifigkeit  $\mathbf{C}_{\text{sec}}$  und damit  $\mathbf{C}_{\text{tan}} = \mathbf{C}_{\text{sec}} = \mathbf{C}$ . Wie aus Abschnitt 3.4 bekannt, wird der Materialtensor durch partielle Ableitung der Spannungen nach den Verzerrungen erhalten. Es ergeben sich nachfolgende Zusammenhänge in tensorieller bzw. Index-Schreibweise:

$$\mathbf{C} = \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} = \frac{\partial \pi(\boldsymbol{\varepsilon})}{\partial \boldsymbol{\varepsilon} \otimes \partial \boldsymbol{\varepsilon}} = C_{ijkl} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l; \quad \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j. \quad (3.25)$$

Aufgrund der Symmetrie des Spannungs- und des Verzerrungstensors erfüllt der Materialtensor folgende Symmetrieeigenschaften:

$$C_{ijkl} = C_{jikl} = C_{jilk} = C_{ijlk}. \quad (3.26)$$

Im Rahmen der Finite-Elemente-Methode wird zumeist die Darstellung der Spannungen und Verzerrungen in Voigt-Notation verwendet, also in Vektorschreibweise. Es werden somit Spannungen und Verzerrungen mithilfe des Materialtensors wie folgt verknüpft:

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{12} \\ \sigma_{13} \\ \sigma_{23} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{1111} & C_{1122} & C_{1133} & C_{1112} & C_{1113} & C_{1123} \\ C_{2211} & C_{2222} & C_{2233} & C_{2212} & C_{2213} & C_{2223} \\ C_{3311} & C_{3322} & C_{3333} & C_{3312} & C_{3313} & C_{3323} \\ C_{1211} & C_{1222} & C_{1233} & C_{1212} & C_{1213} & C_{1223} \\ C_{1311} & C_{1322} & C_{1333} & C_{1312} & C_{1313} & C_{1323} \\ C_{2311} & C_{2322} & C_{2333} & C_{2312} & C_{2313} & C_{2323} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ 2\varepsilon_{12} \\ 2\varepsilon_{13} \\ 2\varepsilon_{23} \end{bmatrix}. \quad (3.27)$$

Werden auf den zweidimensionalen Raum reduzierte Probleme betrachtet, bei denen die Elemente in der von den Basisvektoren  $\mathbf{e}_1$  und  $\mathbf{e}_2$  aufgespannten Ebene liegen, so muss zwischen dem ebenen Spannungszustand und dem ebenen Verzerrungszustand unterschieden werden. Im Fall des ebenen Spannungszustandes wird angenommen, dass die Spannungskomponenten  $\sigma_{33} = \sigma_{13} = \sigma_{23} = 0$  sind, wohingegen dasselbe beim ebenen Verzerrungszustand für die entsprechenden Verzerrungskomponenten gilt, also  $\varepsilon_{33} = \varepsilon_{13} = \varepsilon_{23} = 0$ . Nach einigen Umformungen und weiteren Annahmen zur Erhaltung der Gültigkeit von Gleichung (3.27) erhält man für die Materialmatrix (C-Matrix) im ebenen Spannungszustand

$$\mathbf{C} = \frac{E}{1 - \nu^2} \begin{bmatrix} 1 & \nu & 0 \\ \nu & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1 - \nu}{2} \end{bmatrix}. \quad (3.28)$$

Im ebenen Verzerrungszustand hat die C-Matrix die Form

$$\mathbf{C} = \frac{E}{(1+\nu)(1-2\nu)} \begin{bmatrix} 1-\nu & \nu & 0 \\ \nu & 1-\nu & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1-2\nu}{2} \end{bmatrix}. \quad (3.29)$$

Das klassische Hooke'sche Gesetz beschreibt im Eindimensionalen die Spannungs-Dehnungs-Beziehung eines Fachwerkstabes bzw. einer Feder

$$\sigma = E \varepsilon, \quad (3.30)$$

wobei alle skalare Größen sind. Die Spannung ist also proportional zur Dehnung und beide Größen stehen im Verhältnis des E-Moduls zueinander.

### 3.5.2 Isotrope Elasto-Schädigung

Mithilfe der Schädigungsmechanik wird zunehmende Materialdegradation aufgrund des Zusammenwachsens von Mikrorissen, Mikrohohlräumen oder ähnlicher Defekte unter Belastung beschrieben. Diese mikrostrukturellen Veränderungen führen auf der Makroskala zur Steifigkeitsabnahme des Materials. Das einfachste Schädigungsmodell ist das isotrope Elasto-Schädigungsmodell mit nur einem Parameter, bei dem angenommen wird, dass die Schädigung in alle Richtungen gleich fortschreitet bzw. die Steifigkeit in alle Richtungen gleich abnimmt, unabhängig von der Belastungsrichtung. Da ein isotropes elastisches Material durch die zwei unabhängigen elastischen Materialkonstanten E-Modul  $E$  und Querdehnzahl  $\nu$  charakterisiert ist, sollte ein allgemeingültiges isotropes Schädigungsmodell ebenfalls aus zwei voneinander unabhängigen Parametern bestehen. Bei dem hier beschriebenen Modell wird jedoch angenommen, dass bei eintretender Schädigung alle Koeffizienten des Steifigkeitstensors gleichermaßen reduziert werden und die Querdehnzahl von der Schädigung unbeeinträchtigt bleibt. Somit kommt diese Formulierung mit nur einem Parameter aus.

Der geschädigte Materialtensor bzw. die Sekantensteifigkeit  $\mathbf{C}_{\text{sec}}$  wird durch ein skalares Vielfaches des ursprünglichen elastischen Materialtensors  $\mathbf{C}_{\text{el}}$  repräsentiert

$$\mathbf{C}_{\text{sec}} = (1 - d)\mathbf{C}_{\text{el}} \quad (3.31)$$

und setzt so die totalen Verzerrungen mit den totalen Spannungen in Verbindung.

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C}_{\text{sec}} \boldsymbol{\varepsilon} = (1 - d)\mathbf{C}_{\text{el}} \boldsymbol{\varepsilon} \quad (3.32)$$

Darin beschreibt  $d$  die Evolution der Schädigung und wird deshalb auch Schädigungsparameter genannt.  $d$  hat im ungeschädigten Zustand den Wert 0 und bei vollständiger Schädigung den Wert 1. Der elastische Bereich sowie die Zustände, in denen die Schädigung zunimmt, sind durch die Belastungsfunktion  $f$  bestimmt. Sie hängt vom Verzerrungstensor  $\boldsymbol{\varepsilon}$  und dem Parameter  $\kappa$  ab:

$$f(\boldsymbol{\varepsilon}, \kappa) = \tilde{\varepsilon}(\boldsymbol{\varepsilon}) - \kappa \quad \text{mit} \quad \kappa(t) = \max_{\tau \leq t} \tilde{\varepsilon}(\tau). \quad (3.33)$$

Die äquivalente Verzerrung  $\tilde{\varepsilon}$  ist ein skalares Maß des Verzerrungszustandes, wie z. B. die euklidische Norm des Verzerrungstensors, und  $\kappa$  bezeichnet den Zustand mit den bis zum Belastungszustand  $t$  maximal erreichten Verzerrungen in der Belastungsgeschichte. Da der Schädigungsfortschritt von den Verzerrungen abhängt und mit steigender Verzerrung zunimmt und außerdem davon ausgegangen wird, dass einmal geschädigtes Material geschädigt bleibt, muss der Schädigungsparameter  $d$  ebenfalls eine Funktion der maximalen Verzerrungen der Belastungsgeschichte  $\kappa$  sein, also

$$d = g(\kappa). \quad (3.34)$$

Zusammengefasst in der Karush-Kuhn-Tucker-Form lauten die Be- und Entlastungsbedingungen

$$f \leq 0, \quad \dot{\kappa} \geq 0, \quad \dot{\kappa} f = 0, \quad (3.35)$$

worin der ersten Bedingung zu entnehmen ist, dass  $\kappa$  nicht kleiner sein kann als  $\tilde{\varepsilon}$ , die zweite bedeutet, dass  $\kappa$  niemals kleiner werden kann und zuletzt, dass  $\kappa$  nur dann größer werden kann, wenn  $\kappa$  und  $\tilde{\varepsilon}$  gleich sind.

Aus Abschnitt 3.4 ist bekannt, dass die partielle Ableitung der Spannungen nach den Verzerrungen die Materialtangente liefert. Mit Ausdruck (3.32) für die Spannungen lässt sich die Materialtangente folgendermaßen bestimmen:

$$\mathbf{C}_{\text{tan}} = \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} = \frac{\partial (\mathbf{C}_{\text{sec}} \boldsymbol{\varepsilon})}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} = \frac{\partial ((1-d)\mathbf{C}_{\text{el}} \boldsymbol{\varepsilon})}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbf{C}_{\text{sec}} - \mathbf{C}_{\text{el}} \boldsymbol{\varepsilon} \otimes \frac{\partial g}{\partial \kappa} \frac{\partial \kappa}{\partial \tilde{\varepsilon}} \frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}. \quad (3.36)$$

Dabei ist  $\partial \kappa / \partial \tilde{\varepsilon} = 1$  im Fall fortschreitender Schädigung, also wenn  $\kappa = \tilde{\varepsilon}$ , und 0 in allen anderen Fällen. In Tabelle 3.1 ist die Materialtangente an unterschiedlichen Punkten des Spannungs-Dehnungs-Diagramms dargestellt. Die aufgeführten Zusammenhänge können direkt aus Gleichung (3.36) abgeleitet werden.



	Schädigungsparameter	äquivalente Verzerrung	Materialtangente
ungeschädigt	$d = 0$		$\mathbf{C}_{\text{tan}} = \mathbf{C}_{\text{el}}$
fortschreitende Schädigung	$0 < d < 1$	$\tilde{\varepsilon} = \kappa$	$\mathbf{C}_{\text{tan}} = \mathbf{C}_{\text{sec}} - \mathbf{C}_{\text{el}} \boldsymbol{\varepsilon} \otimes \frac{\partial g}{\partial \kappa} \frac{\partial \kappa}{\partial \tilde{\varepsilon}} \frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}$
bei Entlastung	$0 < d < 1$	$\tilde{\varepsilon} < \kappa$	$\mathbf{C}_{\text{tan}} = \mathbf{C}_{\text{sec}}$
vollständig geschädigt	$d = 1$		$\mathbf{C}_{\text{tan}} = \mathbf{0}$

**Tabelle 3.1:** Materialtangente an unterschiedlichen Punkten des Spannungs-Dehnungs-Diagramms.

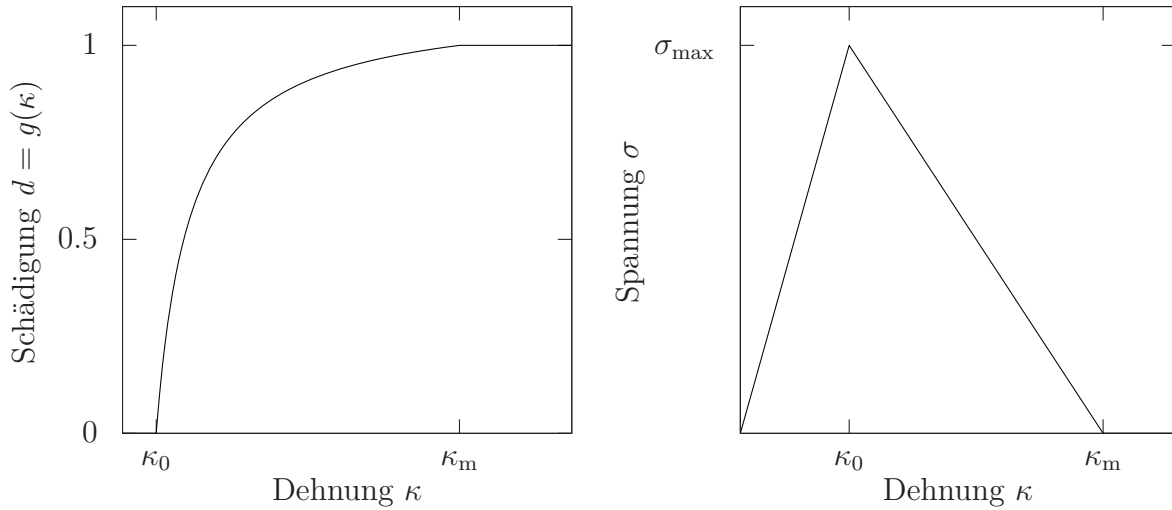
### Einaxiales Schädigungsmodell mit linearer Entfestigung

Da in dieser Arbeit als schädigende Elemente ausschließlich Stabelemente eingesetzt werden, welche nur Normalkräfte in axialer Richtung aufnehmen können, wird das isotrope Schädigungsmodell nur in einer Dimension, also einaxial, benötigt. Das gewählte Schädigungsmodell soll lineares Entfestigungsverhalten aufweisen. Im eindimensionalen Fall kann man sich das Material als ein Faserbündel vorstellen, bei dem die Fasern parallel zur Belastungsrichtung, also zur Stablängsachse, ausgerichtet sind. Ursprünglich verhalten sich all diese Fasern linear elastisch und die Kraft wirkt auf den gesamten ursprünglichen Querschnitt  $A_0$ . Bei stetig steigender Verzerrung fangen ab einer Dehnung  $\kappa_0$  einzelne Fasern an zu reißen und die Kraft im Stab wirkt nur noch auf den effektiven Querschnitt  $A$ . Unter steigender Belastung werden dies immer mehr Fasern, bis bei einer Verzerrung  $\kappa_m$  der gesamte Querschnitt gerissen ist ( $A = 0$ ) und keine Kraft mehr übertragen werden kann. Man unterscheidet die nominelle Spannung  $\sigma$ , bei der die Kraft auf den ursprünglichen Querschnitt  $A_0$  wirkt, und die effektive Spannung  $\sigma_{\text{eff}}$ , welche den Quotienten aus Kraft und effektiver Querschnittsfläche  $A$  bildet. Bei gleicher Kraft im Stab gilt also  $\sigma A_0 = \sigma_{\text{eff}} A$  und damit

$$\sigma = \frac{A}{A_0} \sigma_{\text{eff}} = (1 - d) \sigma_{\text{eff}}. \quad (3.37)$$

Der Schädigungsparameter  $d$  kann als das Verhältnis des geschädigten Querschnitts  $A_d = A_0 - A$  zum ursprünglichen Querschnitt  $A_0$  betrachtet werden und ist eine Funktion des maximal erreichten Verzerrungszustandes in der Belastungsgeschichte  $\kappa$ :

$$d = \frac{A_d}{A_0} = \frac{A_0 - A}{A_0} = 1 - \frac{A}{A_0} = g(\kappa). \quad (3.38)$$



**Abbildung 3.2:** Evolution der Schädigung und Spannungs-Dehnungs-Diagramm eines einzelnen Stabes.

Da sich ursprünglich alle Fasern linear elastisch verhalten, wird die effektive Spannung durch das Hooke'sche Gesetz  $\sigma_{\text{eff}} = E_0 \varepsilon$  bestimmt. Eingesetzt in (3.37) erhält man für die nominelle Spannung

$$\sigma = (1 - d)E_0 \varepsilon. \quad (3.39)$$

Im eindimensionalen Fall entspricht also die elastische Materialtangente  $\mathbf{C}_{\text{el}}$  dem E-Modul des ungeschädigten Materials  $E_0$  und die Sekantensteifigkeit  $\mathbf{C}_{\text{sec}}$  kann wie folgt identifiziert werden:

$$E_{\text{sec}} = (1 - d)E_0. \quad (3.40)$$

Die Dehnung entspricht nun in jeder Faser dem skalaren Wert  $\varepsilon$ . Damit reduziert sich der Verzerrungstensor auf  $\boldsymbol{\varepsilon} = \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} = \varepsilon$  und die Materialtangente  $\mathbf{C}_{\text{tan}}$  vereinfacht sich zu

$$E_{\text{tan}} = E_{\text{sec}} - E_0 \varepsilon \frac{\partial g}{\partial \kappa} \frac{\partial \kappa}{\partial \varepsilon}. \quad (3.41)$$

Die Evolution der Schädigung  $d = g(\kappa)$  bestimmt die Form des Spannungs-Dehnungs-Diagramms und kann mithilfe eines einaxialen Versuchs ermittelt werden. In dieser Arbeit wird das in Abbildung 3.2 qualitativ dargestellte linear entfestigende Schädigungsmodell angewendet (RAMM u. A. 2004). Der Schädigungsparameter entspricht der

nachfolgenden abschnittsweise definierten Funktion:

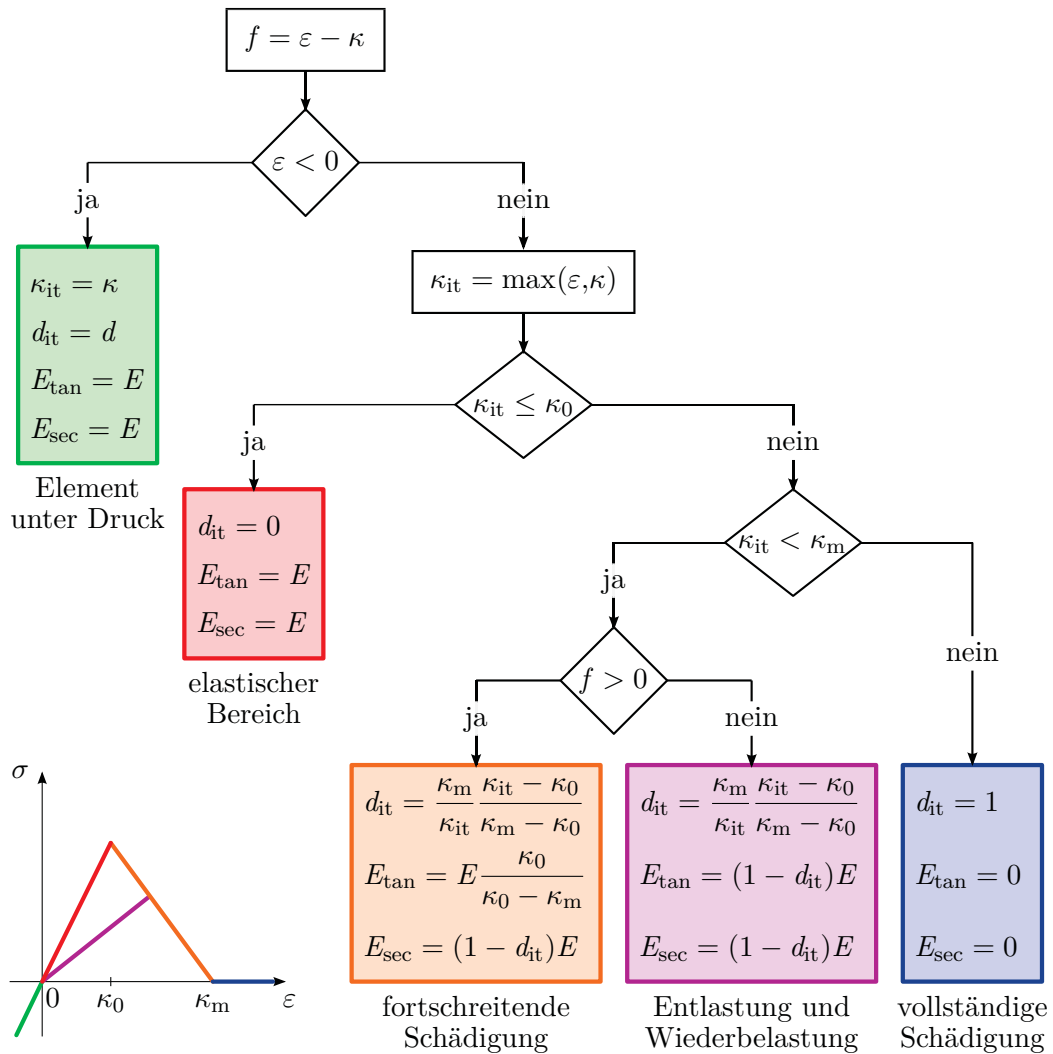
$$d = \begin{cases} 0 & \kappa \leq \kappa_0 \\ \frac{\kappa_m}{\kappa} \frac{\kappa - \kappa_0}{\kappa_m - \kappa_0} & \kappa_0 < \kappa < \kappa_m \\ 1 & \kappa \geq \kappa_m \end{cases} \quad (3.42)$$

Es wird davon ausgegangen, dass die Fasern nur unter Zug schädigen, und dass bei einwirkender Druckbelastung die Kraftübertragung über den gesamten Querschnitt stattfindet. Die Materialtangente soll dann der Tangente des ungeschädigten Materials entsprechen. Für  $\varepsilon < 0$  soll also  $E_{\text{tan}} = E_0$  sein.

Mit der in Abbildung 3.3 dargestellten Routine lassen sich für den aktuellen Schritt bei der Newton-Raphson-Iteration die in der Belastung bis dahin maximal erreichte Verzerrung  $\kappa_{\text{it}}$ , die Schädigung  $d_{\text{it}}$ , sowie die Materialtangente  $E_{\text{tan}}$  und die Materialsekante  $E_{\text{sec}}$  bestimmen. Die unterschiedlichen Zweige definieren die entsprechend farblich gekennzeichneten Abschnitte in der Spannungs-Dehnungs-Kurve. Als Eingangsgrößen für die Routine werden die aktuelle Verzerrung  $\varepsilon$  und die in der Belastungsgeschichte bis dahin maximal erreichte Verzerrung  $\kappa$  benötigt. Am Ende eines jeden Belastungsschritts, also wenn Konvergenz erreicht ist, müssen die Geschichtsvariablen aktualisiert werden, um im nächsten Belastungsschritt zur Verfügung zu stehen. Bei diesem Modell betrifft das die während der Belastungsgeschichte maximal erreichte Verzerrung  $\kappa$ :

$$\kappa = \kappa_{\text{it}} \qquad \kappa_{\text{it}} = 0. \quad (3.43)$$

Die Verzerrung kann während der Iterationen größer werden als sie letztendlich im auskonvergierten Zustand ist. Daher muss zwischen dem auskonvergierten  $\kappa$  und dem  $\kappa_{\text{it}}$  während der Iteration unterschieden werden. Der Schädigungsparameter  $d$  kann in jedem Zustand nach Gleichung (3.42) mithilfe von  $\kappa$  berechnet werden.



**Abbildung 3.3:** Materialroutine zur Bestimmung der in der Belastungsgeschichte bis zur aktuellen Iteration maximal erreichten Verzerrung  $\kappa_{it}$  eines Stabes, der Schädigung  $d_{it}$ , der Materialtangente  $E_{tan}$  und der Materialsekante  $E_{sec}$ .

# 4

---

## Netz- und modelladaptive diskretisierte Partikelmethode

In diesem und den folgenden Kapiteln wird die in dieser Arbeit entwickelte Methode vorgestellt, mit der ermöglicht werden soll, Berechnungen auf einer sehr groben Skala durchzuführen und dabei trotzdem Phänomene auf der Mikroskala nicht zu vernachlässigen. Sie soll beispielsweise der effizienten Modellierung sich ausbreitender Risse oder der Simulation des Bruchverhaltens von Strukturen dienen. Das Besondere dabei ist, dass die Mikro- und die Makroskala sehr nahe beieinander liegen, sodass keine Skalenseparation gilt und viele bekannte Mehrskalener- oder Homogenisierungsmethoden nicht anwendbar sind. Auf der Makroskala, auf der die Struktur als Kontinuum betrachtet werden kann, soll die Finite-Elemente-Methode zur Lösung eingesetzt werden. Der Zuschlag eines Betons oder Sandkörner bilden die diskrete Mikrostruktur, die mit der DEM modelliert werden soll, jedoch nur in Bereichen, in denen die Auflösung der Mikrostruktur tatsächlich erforderlich ist. Diese Bereiche werden während der Rechnung adaptiv aufgelöst.

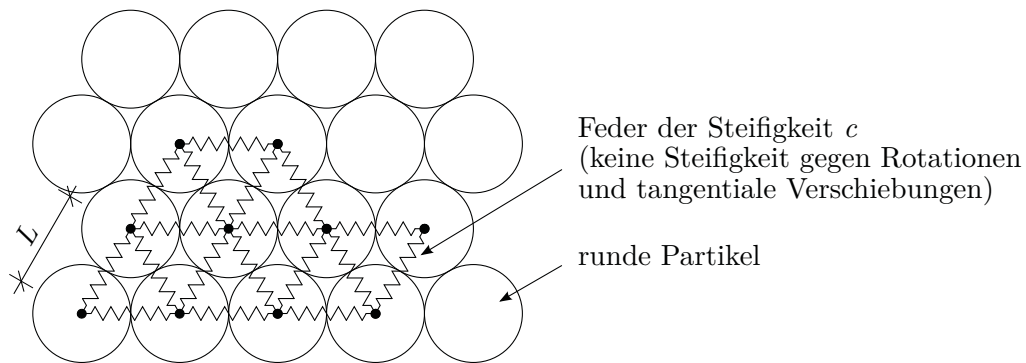
In Abschnitt 2.5 wurden einige Methoden vorgestellt, bei denen ebenfalls kontinuierlich modellierte Bereiche an diskret modellierte Bereiche gekoppelt sind. Allerdings stehen bei diesen Methoden insgesamt Strukturen deutlich kleinerer Skala im Fokus, bei denen die Mikroskala aus Atomen aufgebaut ist. Adaptive Methoden, die diskrete und kontinuierliche Modelle verbinden und bei denen die Feinskala mit der DEM modelliert ist, findet man seltener in der Literatur. Ein Beispiel ist die Arbeit von LABRA GONZÁLEZ (2012), der die Bridging-Domain-Methode von BELYTSCHKO UND XIAO (2003) als Basis dient. Eine Erweiterung der Quasikontinuumsmethode auf Gittermodelle findet man bei BEECH U. A. (2011) und BEECH (2012).

Aus Abschnitt 2.5.3 ist bekannt, dass bei der Quasikontinuuumsmethode (TADMOR U. A. 1996) das diskrete und das kontinuierliche Modell während der gesamten Berechnung parallel existieren, wobei die FEM die Kinematik bestimmt und das Feinskalenmodell das Konstitutivverhalten steuert. Aufgrund dieser Tatsache hat die QC-Methode den großen Vorteil, dass sie einen methodischen Rahmen für einen glatten Übergang vom Kontinuums- zum diskreten Modell liefert. Dieser Übergang findet automatisch statt und erübrigt die Definition eines Übergangsbereiches, der während einer adaptiven Rechnung mitbewegt werden müsste. Dieser Vorteil soll bei der Entwicklung einer adaptiven Kopplungsmethode von diskreten und kontinuierlichen Modellen für kohäsive Reibungsmaterialien genutzt werden. Daher soll das grundlegende Konzept der QC-Methode auf Probleme der Strukturmechanik übertragen werden und anschließend auf Materialien mit heterogener Mikrostruktur erweitert werden.

Zunächst folgt in Abschnitt 4.1 eine allgemeine Beschreibung der Methode, bei der die Modellierungsgrundlagen und das generelle Vorgehen im Vordergrund stehen. Dazu gehört die Beschreibung des verwendeten Feinskalenmodells und die Umsetzung der Adaptivität in dieser Methode, wobei zwischen zwei Arten der Adaptivität unterschieden wird: der Netzadaptivität und der Modelladaptivität. Erstere dient der Verfeinerung des Netzes. Der Netzverfeinerungsalgorithmus und das Kriterium, welches darüber entscheidet, ob verfeinert wird, werden in Abschnitt 4.2 vorgestellt. Durch die Modelladaptivität wird der Übergang zwischen dem kontinuierlichen und dem diskreten Modell geschaffen, was in Abschnitt 4.3 beschrieben wird. Das Kapitel schließt mit einigen Bemerkungen zum Berechnungsablauf für den linearen und den nichtlinearen Fall mit dem Schwerpunkt auf die Einbindung der Adaptivität in die Berechnung.

### 4.1 Grundlagen

In dieser Arbeit wird das Konzept der Quasikontinuuumsmethode von TADMOR U. A. (1996) auf Probleme der Strukturmechanik übertragen und ausgeweitet. Statt atomistischer Berechnungen wird auf der feinen Skala eine diskrete Repräsentation kohäsiver Reibungsmaterialien auf der Basis der DEM eingeführt. Dabei bilden die diskreten Elemente physikalische Partikel des Materials auf der feinen Skala ab. Um auf die Entwicklung eines methodischen Rahmens fokussieren zu können, wird angenommen, dass der Raum auf zwei Dimensionen begrenzt ist und die Partikel alle gleich groß, starr und rund sind sowie nicht rotieren können. Sie sollen außerdem, wie in Abbildung 4.1 dargestellt, regelmäßig angeordnet sein und über quadratische Potentiale auf Druck und Zug miteinander interagieren, also über linear elastische Federn, die zunächst alle die gleiche Steifigkeit  $c$  besitzen. Dies ist ein vereinfachter Fall der Diskrete-Elemente-Methode und entspricht einer Gittermethode (HRENNIKOFF 1941). Wenn im Folgenden von der Po-



**Abbildung 4.1:** Regelmäßige Mikrostruktur aus gleich großen, starren und runden Partikeln – Dreiecksgitter aus Federn der Steifigkeit  $c$ .

sition eines Partikels die Rede ist, so bezieht sich diese Angabe auf dessen Mittelpunkt und ist gleichbedeutend mit einem Punkt im Gitter, an dem sich mehrere Gitterstäbe treffen.

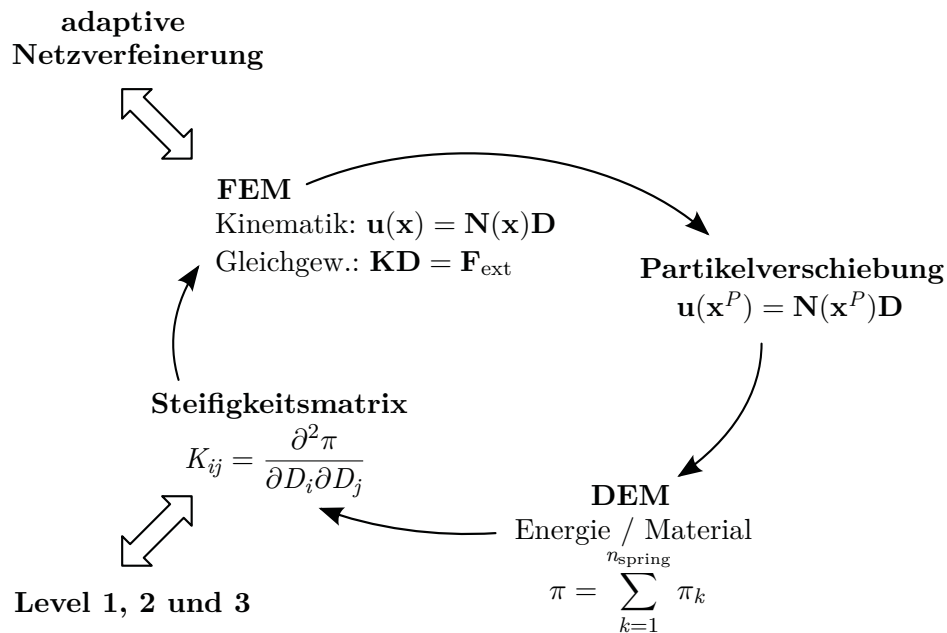
Bei der Quasikontinuumsmethode werden die maßgeblichen Gleichungen mit der FEM gelöst. Es wird ein geometrisch lineares Umfeld gewählt, d. h. die Gleichgewichtsbedingungen beziehen sich auf die undeformierte Konfiguration und das Verzerrungsmaß ist ein lineares. Da keine dynamischen Prozesse betrachtet werden, entspricht dies der Lösung eines quasistatischen Randwertproblems wie in Kapitel 3 beschrieben. Die einzigen Unbekannten im System sind die Knotenverschiebungen.

Die FE-Knoten werden so gewählt, dass sie auf Partikelmittelpunkten liegen, und die Verschiebungen der dazwischen liegenden Partikel ergibt sich durch Interpolation der Knotenverschiebungen mithilfe der FE-Ansatzfunktionen. Die FE-Lösung schreibt somit die Kinematik im System vor. Die konstitutiven Gleichungen beruhen auf den Potentialen zwischen den Partikeln, also dem Feinskalenmodell. Dies sind hier die Federpotentiale, welche wiederum von den Partikelverschiebungen abhängen. Durch zweimaliges Ableiten des Gesamtpotentials  $\pi$ , also der Summe der einzelnen Federpotentiale, nach den Knotenfreiheitsgraden, hier den Knotenverschiebungen  $\mathbf{D}$ , erhält man die globale Steifigkeitsmatrix  $\mathbf{K}$

$$K_{ij} = \frac{\partial^2 \pi}{\partial D_i \partial D_j}. \quad (4.1)$$

Diese geht in die FE-Rechnung ein, womit sich der Kreis schließt. In Abbildung 4.2 ist diese Vorgehensweise schematisch zusammengefasst.

Wie einleitend erwähnt, soll die Methode netz- und modelladaptiv sein. Die Netzadaptivität ist ein allgemein bekanntes Konzept, wonach die Elementgröße während der Berechnung dahingehend angepasst wird, dass in Bereichen mit großen Spannungs- und



**Abbildung 4.2:** Zusammenhang zwischen der FE-Kinematik und dem Konstitutivgesetz des diskreten Materials.

Verzerrungsgradienten das Netz feiner ist als in Bereichen mit glatter Lösung. Bei einem fortschreitenden Riss beispielsweise muss das Netz an der Risspitze sehr fein sein, sodass die Mikrostruktur gut aufgelöst ist. Ist der Riss jedoch weiter fortgeschritten, bleiben die Spannungen und Verzerrungen rechts und links des entstandenen Risses praktisch konstant, und so kann das Netz dort wieder vergrößert werden. Die Adaption kann also sowohl eine Verfeinerung des Netzes bedeuten als auch eine Vergrößerung. Diese Arbeit befasst sich jedoch nur mit der Verfeinerung. Das dazu angewandte Verfahren wird in Abschnitt 4.2 vorgestellt.

Zusätzlich soll diese Methode modelladaptiv sein, also einen adaptiven Übergang von der groben Skala (FEM) zur vollständig aufgelösten feinen Skala (DEM) ermöglichen. Dazu werden drei unterschiedliche Elementarten eingeführt, Level 1 bis Level 3. Die Steifigkeitsmatrix der drei Elemente wird auf verschiedene Art berechnet, wobei die Mikrostruktur mit unterschiedlicher Genauigkeit aufgelöst wird. In Bereichen mit einem groben Netz (Level 1) wird das Material durch ein äquivalentes Kontinuum repräsentiert, dessen Stoffgesetz durch Homogenisierung bestimmt werden kann. Dort, wo das Netz voll aufgelöst ist (Level 3), interagieren die Partikel so, wie es das entsprechende Feinkalenmodell vorgibt. Die Level 2-Elemente bilden den Skalenübergang. Die Kriterien der Modelladaptivität werden in Abschnitt 4.3 behandelt.

Im homogenen Fall, bei dem alle Partikel dieselben Eigenschaften haben, und somit auch die dazwischen liegenden Federn, werden die im Element liegenden Partikel analog



des FE-Verschiebungsfeldes bewegt (Cauchy-Born-Regel). Sind die Partikeleigenschaften heterogen verteilt, haben also die Federn zwischen den Partikeln z. B. unterschiedliche Steifigkeiten oder Festigkeiten, wird ein Unterproblem gelöst. Die Kinematik des finiten Elements liefert die Randbedingungen dazu. In beiden Fällen kann man von einer Partikelmethode sprechen, die auf dem Level der Kinematik mit der Finite-Elemente-Methode diskretisiert ist, also von einer diskretisierten Partikelmethode. Der homogene Fall wird in Kapitel 5 gesondert behandelt und der heterogene in Kapitel 6.

Wie bei der originalen QC-Methode werden Dreieckselemente mit linearen Formfunktionen zur Diskretisierung benutzt (Abschnitt 3.3). Diese haben den Vorteil, dass der Deformationsgradient innerhalb eines Elements konstant ist und daher das Verschiebungsfeld der Partikel innerhalb eines Elements homogen ist. Dadurch wird es einfacher, die Steifigkeitsmatrix zu bestimmen. Ein konstanter Deformationsgradient ist des Weiteren für das Kriterium zur adaptiven Netzverfeinerung vorteilhaft, siehe Abschnitt 4.2.1.

Zur Simulation des Bruchs einzelner Verbindungen zwischen Partikeln auf der feinen Skala wird das einaxiale Schädigungsmodell mit linearer Entfestigung aus Abschnitt 3.5.2 eingesetzt. Die Schädigung einzelner Verbindungen auf der feinen Skala kann in Summe zu makroskopischen Rissen führen. Wenn eine große Anzahl an Verbindungen vollständig geschädigt ist, können sich ganze Teile der Struktur lösen oder Risse in manchen Bereichen wieder schließen. Kontaktgesetze, Trägheitseffekte (Dynamik) und geometrisch nichtlineare Phänomene müssen dann bei der Berechnung berücksichtigt werden. Wie schon erwähnt, werden in dieser Arbeit nur quasistatische Berechnungen durchgeführt. Wenn Teile der Struktur kinematisch werden, wird die Rechnung abgebrochen.

Es wird in dieser Arbeit davon ausgegangen, dass ein Material existiert, dessen Mikrostruktur aus kreisrunden gleich großen Partikeln aufgebaut ist, die mit linear elastischen Federn oder Stäben verbunden sind, und die ab einer Grenzdehnung  $\kappa_0$  anfangen zu schädigen. Bei diesem idealisierten Material stellen die Partikel die kleinste physikalische Einheit der Mikrostruktur dar. Daher werden Lokalisierungsphänomene, wie entstehende Scherbänder oder Risse, für dieses Material automatisch mit der richtigen Breite abgebildet und dabei die Energie entsprechend dissipiert. Die Anwendung von Regularisierungsstrategien, wie aus Abschnitt 2.4.2 bekannt, ist daher unnötig.

## 4.2 Adaptive Netzverfeinerung

Um sicherzustellen, dass das Finite-Elemente-Netz fein genug ist, um die algebraischen Gleichungen des kontinuierlichen Ersatzproblems mit der erforderlichen Genauigkeit zu lösen, wird das Netz innerhalb einer adaptiven Prozedur verfeinert. Sind in einem Bereich alle Partikelmittelpunkte gleichzeitig FE-Knoten, ist das feinste Netz erreicht und

die Berechnung entspricht in diesem Bereich exakt der Berechnung mit dem Gittermodell. Es ist daher wichtig, dass neue Knoten während des Verfeinerungsprozesses immer auf Partikelpositionen liegen. Aus diesem Grund kann kein gängiger Verfeinerungsalgorithmus direkt benutzt werden. Der hier verwendete Algorithmus wird in Abschnitt 4.2.2 vorgestellt. Zur Identifikation der Elemente, die verfeinert werden sollen, wird der Diskretisierungsfehler ermittelt. Überschreitet dieser einen Grenzwert, so ist dies das Kriterium dafür, dass das Element verfeinert werden muss.

### 4.2.1 Kriterium zur Netzverfeinerung

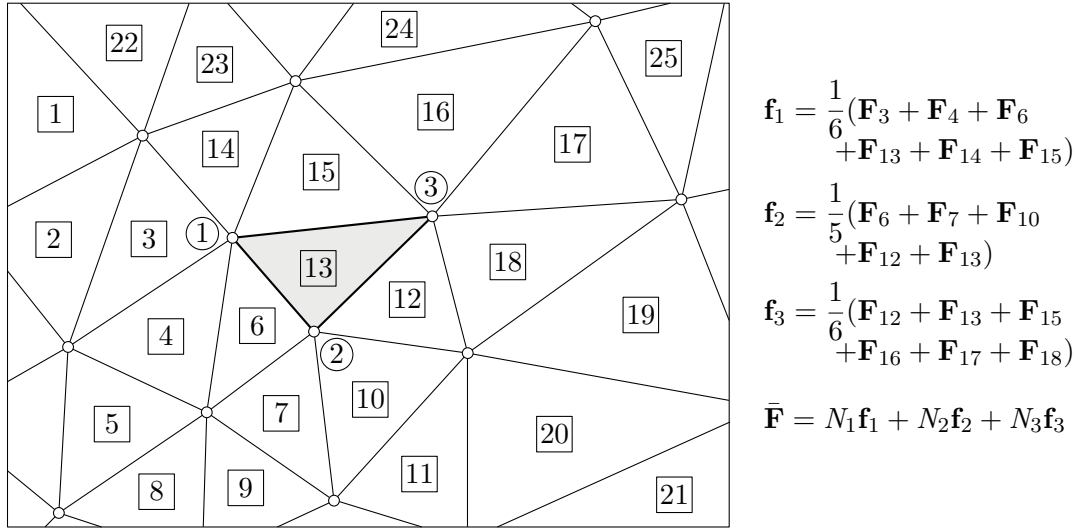
Die Netzverfeinerung wird mithilfe eines einfachen Fehlerindikators durchgeführt, ähnlich dem von ZIENKIEWICZ UND ZHU (1987), basierend auf dem Prinzip des „Superconvergent Patch Recovery“ (ZIENKIEWICZ UND ZHU (1992), ZIENKIEWICZ U. A. (2006)). Zur Ermittlung des Fehlers wäre es am besten, das Ergebnis der Finite-Elemente-Rechnung mit der exakten Lösung zu vergleichen. Da die exakte Lösung jedoch in der Regel unbekannt ist, müssen alternative, genäherte Referenzwerte ermittelt werden. Grundlage des „Superconvergent Patch Recovery“ (SPR) ist, dass es in einem Element superkonvergente Punkte gibt, also Punkte an denen die Lösung um eine Ordnung schneller konvergiert, als an anderen Stellen. Die Lösung an diesen Punkten wird herangezogen, um eine insgesamt bessere Lösung anzunähern. Die Abweichung der tatsächlichen FE-Lösung zu dieser angenäherten besseren Lösung ist ein Indikator für einen Fehler bei der Diskretisierung und wird im Folgenden schlicht Diskretisierungsfehler genannt. Exakt dieselbe angenäherte Lösung wie mit SPR kann bei rechteckigen Elementen durch Mittelwertbildung der an die Knoten extrapolierten Gaußpunktwerte ermittelt werden. Bei Dreieckselementen sind die „optimalen“ Punkte jedoch nur annähernd superkonvergent (ZIENKIEWICZ U. A. 2006) und die Mittelung der extrapolierten Knotenwerte ist somit auch weniger gut, jedoch stets besser als die normale FE-Lösung. Das hier vorgestellte Kriterium beruht auf der Mittelung der extrapolierten Knotenwerte.

Der Einfachheit halber wird ein Kriterium für den Diskretisierungsfehler  $\varepsilon_e$  im Element  $e$  basierend auf den Deformationsgradienten (3.20) des Elements und der umliegenden Elemente aus SHENOY U. A. (1999) übernommen:<sup>1</sup>

$$\varepsilon_e = \left[ \frac{1}{\Omega_e} \int_{\Omega_e} (\bar{\mathbf{F}} - \mathbf{F}_e)^T (\bar{\mathbf{F}} - \mathbf{F}_e) d\Omega \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (4.2)$$

---

<sup>1</sup>Dasselbe Kriterium ergibt sich, wenn statt des Deformationsgradienten der Verschiebungsgradient  $\mathbf{H} = \partial \mathbf{u} / \partial \mathbf{X}$  verwendet wird, da  $\bar{\mathbf{H}} - \mathbf{H}_e = \bar{\mathbf{F}} - \mathbf{I} - (\mathbf{F}_e - \mathbf{I}) = \bar{\mathbf{F}} - \mathbf{F}_e$ .



**Abbildung 4.3:** Ermittlung des geglätteten Deformationsgradienten  $\bar{\mathbf{F}}$  (für Element 13).

Darin ist  $\mathbf{F}_e$  die Finite-Elemente-Lösung für den Deformationsgradienten im Element  $e$ , und  $\bar{\mathbf{F}}$  repräsentiert eine geglättete Lösung ( $L_2$ -Projektion) der Finite-Elemente-Lösung für  $\mathbf{F}$ . In einfachen Worten ausgedrückt, basiert dieses Kriterium auf der Idee, dass die FE-Lösung dann gut ist, wenn sich der Deformationsgradient  $\mathbf{F}_e$  des betrachteten Elements  $e$  von einem über die benachbarten Elemente gemittelten Deformationsgradienten  $\bar{\mathbf{F}}$  nur unwesentlich unterscheidet. Die Berechnung von  $\bar{\mathbf{F}}$  nach

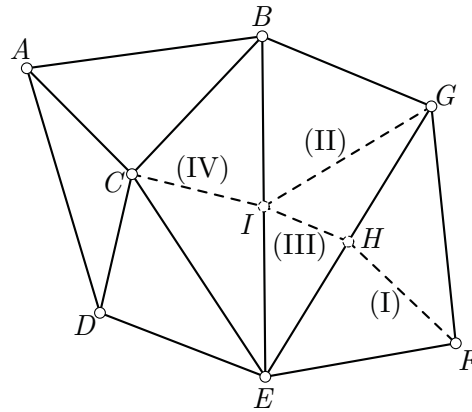
$$\bar{\mathbf{F}}(\xi_1, \xi_2) = \mathbf{N}(\xi_1, \xi_2) \mathbf{f} = \sum_{i=1}^3 [N_i(\xi_1, \xi_2) \mathbf{f}_i], \quad (4.3)$$

wird in Abbildung 4.3 an einem Beispiel veranschaulicht.  $N_i$  sind die linearen Formfunktionen des Dreieckselements und  $\mathbf{f}_i$  die Knotenwerte des projizierten Deformationsgradienten  $\bar{\mathbf{F}}$ . Da der Deformationsgradient innerhalb eines Elements konstant ist, können die Knotenwerte  $\mathbf{f}_i$  durch einfache Mittelung aller Deformationsgradienten der  $m$  am Knoten  $i$  angrenzenden Elemente  $j$  ermittelt werden

$$\mathbf{f}_i = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m \mathbf{F}_j(\xi_1^P, \xi_2^P). \quad (4.4)$$

Der Deformationsgradient  $\mathbf{F}_j$  kann dabei an irgendeinem Punkt  $P$  im Element  $j$  mit den Koordinaten  $\boldsymbol{\xi}^P$  ausgewertet werden, beispielsweise dem Gaußpunkt mit  $\xi_1^P = \xi_2^P = 1/3$ . Das Integral in Gleichung (4.2), worin quadratische Terme von  $\xi_1$  und  $\xi_2$  vorliegen, kann mithilfe von drei Gaußpunkten  $\left[\left(\frac{1}{6}, \frac{1}{6}\right), \left(\frac{2}{3}, \frac{1}{6}\right), \left(\frac{1}{6}, \frac{2}{3}\right)\right]$  numerisch exakt berechnet werden.

Wenn der Diskretisierungsfehler  $\varepsilon_e$  einen gewissen Grenzwert  $\hat{\varepsilon}$  in einem Element überschreitet, also wenn  $\varepsilon_e > \hat{\varepsilon}$ , wird dieses Element verfeinert. Die Berechnung des Grenz-



**Abbildung 4.4:** Verfeinerung von Dreieck  $EFG$  nach Algorithmus 2 (lokal) aus RIVARA (1984).

werts  $\hat{\varepsilon}$  erfolgt wie in ZIENKIEWICZ UND ZHU (1987) vorgeschlagen nach

$$\hat{\varepsilon} = \bar{\eta} \cdot \sqrt{\frac{\sum_{e=1}^{n_{\text{ele}}} \|\bar{\mathbf{F}} - \mathbf{I}\|_e^2}{n_{\text{ele}}}}, \quad (4.5)$$

wobei  $n_{\text{ele}}$  der Anzahl der Elemente entspricht,  $\bar{\eta}$  der frei wählbare maximal zulässige Fehler ist und  $\bar{\mathbf{F}} - \mathbf{I} = \bar{\mathbf{H}}$  der Tensor des durchschnittlichen Verschiebungsgradienten. Der Verschiebungsgradient  $\bar{\mathbf{H}}$  wird dem Deformationsgradienten  $\bar{\mathbf{F}}$  vorgezogen, weil der Grenzwert dadurch problemunabhängig ist.

### 4.2.2 Verfeinerungsalgorithmus

Zur Netzverfeinerung wird die lokale Form des Algorithmus 2 aus RIVARA (1984) verwendet. Bei diesem Algorithmus werden zu verfeinernde Elemente so geteilt, dass in der Mitte der längsten Seite ein neuer Knoten eingefügt und mit dem Knoten der gegenüberliegenden Ecke verbunden wird. Dadurch wird immer der größte Winkel im Dreieck halbiert und sehr spitzwinklige Dreiecke werden vermieden. Durch das Teilen eines Elements an einer Seite und das Einbringen eines neuen Knotens an dieser Stelle entstehen hängende Knoten, sodass das FE-Netz inkompatibel wird. Um diese Inkompatibilitäten zu beseitigen, wird das Nachbarelement, das diese inkompatible Seite teilt, ebenfalls an seiner längsten Seite halbiert und anschließend der neue Knoten mit dem Knoten der inkompatiblen Seite verbunden. Dadurch werden die ursprünglichen Inkompatibilitäten entfernt. Es können jedoch dabei neue Inkompatibilitäten entstehen, weshalb dieser Vorgang so lange wiederholt wird, bis alle Dreiecke konform sind.

Zur Verdeutlichung dieses Vorgehens soll das Beispiel in Abbildung 4.4 dienen. In diesem Netz aus Dreieckselementen soll das Dreieck  $EFG$  verfeinert werden. Dazu wird dessen

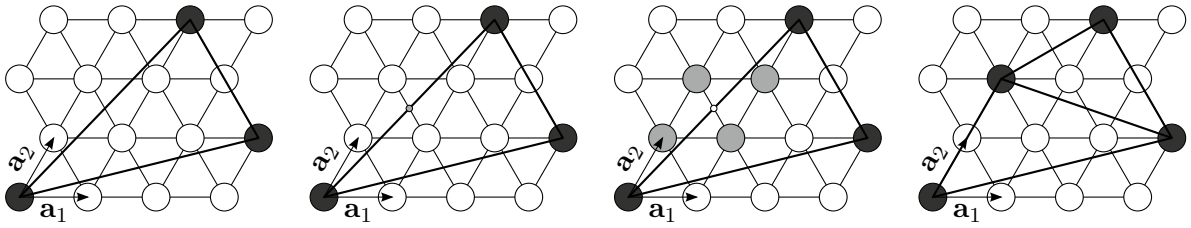


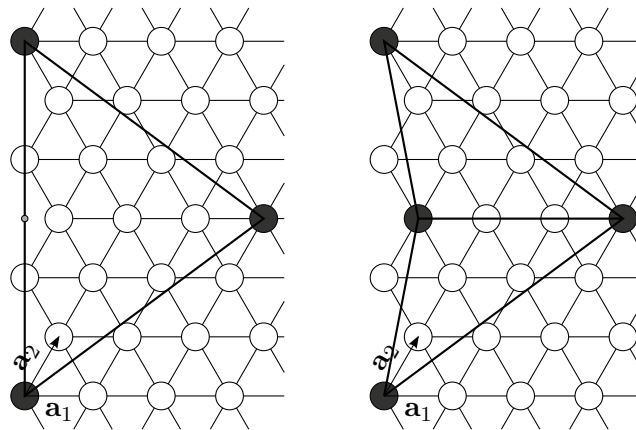
Abbildung 4.5: Netzverfeinerungsalgorithmus – neue Knoten auf Partikelpositionen.

längste Seite  $EG$  geteilt wobei Knoten  $H$  entsteht. Knoten  $H$  und  $F$  werden verbunden (I) und das ursprüngliche Element  $EFG$  ist geteilt. Nun hat Dreieck  $EGB$  einen hängenden Knoten an der Seite  $EG$ . Es wird daher Dreieck  $EGB$  an seiner längsten Seite geteilt und es entsteht Knoten  $I$ . Durch (II) wird das Element  $EGB$  geteilt. Anschließend wird Knoten  $I$  mit Knoten  $H$  verbunden (III). Element  $EFG$  ist somit geteilt und kompatibel mit den Nachbarelementen. Wie Abbildung 4.4 zu entnehmen, ist dabei aber nun ein weiteres Dreieck mit einer inkompatiblen Seite entstanden, Dreieck  $BCE$ , und das Prozedere muss für dieses Dreieck wiederholt werden. Die inkompatible Seite ist bei diesem Dreieck gleichzeitig die längste Seite des Dreiecks, sodass nur noch Knoten  $C$  mit Knoten  $I$  verbunden werden muss (IV) damit alle Dreiecke konform sind.

Eine Besonderheit des in dieser Arbeit verwendeten Algorithmus ist, dass neue Knoten immer auf Partikelpositionen des im Hintergrund liegenden regelmäßigen Gitters liegen müssen. Es genügt daher nicht, einfach nur die längste Seite eines Dreiecks mittig zu teilen und dort den neuen Knoten zu platzieren, sondern es muss die Position des nächsten Partikels zum Seitenmittelpunkt bestimmt werden, siehe Abbildung 4.5. In diesem regelmäßigen Gitter existieren maximal vier Optionen für den neuen Knoten. Zwei Partikel haben dabei häufig analytisch exakt denselben Abstand zum Seitenmittelpunkt. Numerisch ergeben sich jedoch kleine Unterschiede durch Rundungsfehler, wodurch immer ein Knoten eindeutig ausgewählt werden kann.

Die Lage der Partikel, und somit der potentiellen neuen Knoten, ist durch das regelmäßige Raster, in dem die Partikel angeordnet sind, leicht zu ermitteln, ohne dass eine Liste aller Partikel mit ihren Eigenschaften vorliegen muss. Bei Kristallen spricht man von einem Bravais-Gitter, in dem das Gitter im dreidimensionalen durch drei linear unabhängige Vektoren  $\mathbf{a}_i$  und drei ganzzahlige Faktoren  $n_i$ , mit  $i \in \{1, 2, 3\}$ , aufgespannt ist. Dasselbe Prinzip lässt sich hier anwenden. Die Position eines Partikels in der Referenzkonfiguration lässt sich nach Gleichung (4.6) bestimmen, wobei im zweidimensionalen entsprechend die Summe über  $i$  nur von 1 bis 2 reicht.

$$\mathbf{X}(\mathbf{n}) = \sum_{i=1}^2 n_i \mathbf{a}_i \quad (4.6)$$

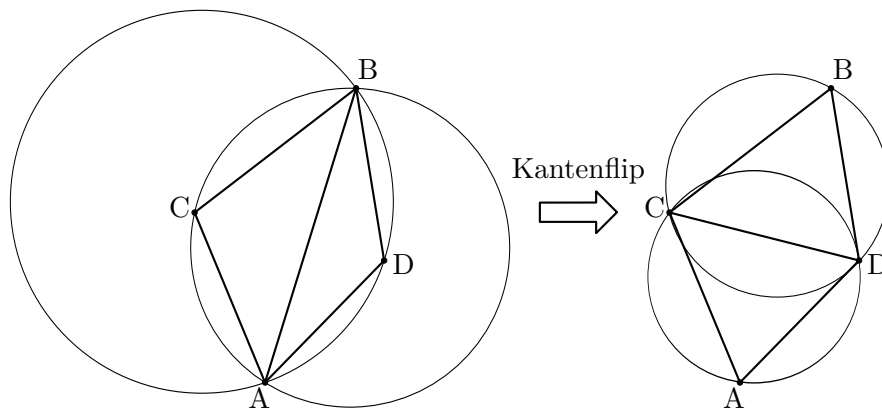


**Abbildung 4.6:** Verfeinerung eines Randelements ohne Erhaltung des Strukturrands.

Abgesehen davon, dass der neue Knoten am besten bei dem Partikel mit dem kleinsten Abstand zum Seitenmittelpunkt positioniert wird, dürfen keine Partikelpositionen doppelt als Knoten vergeben werden. Ist an einer oder mehreren der vier verfügbaren Positionen schon ein FE-Knoten, so scheidet dieser als Kandidat für einen neuen Knoten aus. Soll ein Element, das am Rand der Struktur liegt, an diesem Rand geteilt werden, so ist es nach SHAN (2009) außerdem sinnvoll ein Partikel, das auf dem Rand liegt, bevorzugt als neuen Knoten zu wählen, auch wenn ein anderes Partikel näher am Seitenmittelpunkt liegt. So kann die Geometrie der Struktur während der Rechnung erhalten werden. Dies wurde in der vorliegenden Arbeit jedoch nicht umgesetzt. Wie in Abbildung 4.6 dargestellt, kann es dadurch passieren, dass ein in der adaptiven Rechnung als gerade erscheinender Rand Einschnitte bekommt. Die Partikel der Mikrostruktur liegen nicht an allen Rändern auf einer geraden Linie.

Potentielle neue Knoten haben immer den Abstand  $L$  zueinander (siehe Abbildung 4.1). Insbesondere wenn die Elemente schon fast das Minimum ihrer Größe erreicht haben, kann es passieren, dass ein potentieller neuer Knoten sozusagen auf der falschen Seite des Elements liegt und das Element sich dadurch selbst durchdringt. Dies gilt es zu verhindern und kann mithilfe der Determinante der Jacobi-Matrix (3.13) überprüft werden. Durchdringt sich ein Element selbst, so heißt das bei Dreieckselementen, dass die Knoten im Uhrzeigersinn angeordnet sind und äußert sich in einer negativen Determinante der Jacobi-Matrix. Des Weiteren ist darauf zu achten, dass die drei Knoten eines neuen Elements nicht auf einer Linie liegen.

Bei der adaptiven Netzverfeinerung müssen wichtige Elementeigenschaften des zu teilenden Elements an die neuen Elemente weitergegeben werden. Im materiell nichtlinearen Fall betrifft dies alle Geschichtsvariablen, bei dem hier verwendeten Schädigungsmodell also die maximal erreichte Verzerrung in der Belastungsgeschichte  $\kappa$ .



**Abbildung 4.7:** Kantenflip bei Elementen, deren Umkreis einen Knoten eines Nachbar-elements enthält.

### 4.2.3 Delaunay-Triangulation

Als Dreiecksnetz wird eine Delaunay-Triangulation gewählt. Diese Art der Triangulation kann in verschiedenen Bereichen angewendet werden, z. B. zur Optimierung von Berechnungsnetzen bei der Finite-Elemente-Methode. Eine wesentliche Eigenschaft ist, dass der kleinste Innenwinkel aller Dreiecke maximiert wird und dadurch besonders spitzwinklige Dreiecke vermieden werden. Ist das Seitenverhältnis bei finiten Elementen zu groß, sind die Ansatzräume nicht mehr homogen in allen Richtungen, wodurch die Struktur künstlich anisotrop werden kann.

Bei einer Delaunay-Triangulation erfüllen alle Dreiecke des Netzes die sogenannte Umkreisbedingung. Das bedeutet, dass innerhalb des Umkreises eines Dreiecks keine weiteren Elementknoten liegen dürfen. Ob ein Punkt  $D$  im Dreieck  $ABC$  (siehe Abbildung 4.7) liegt, kann mithilfe der Umkreisbedingung geprüft werden. Die Determinante der nachfolgenden Matrix ist nur dann positiv wenn sich der Punkt  $D$  innerhalb des Umkreises des Dreiecks  $ABC$  befindet (WIKIPEDIA 2014):

$$\begin{vmatrix} A_x & A_y & A_x^2 + A_y^2 & 1 \\ B_x & B_y & B_x^2 + B_y^2 & 1 \\ C_x & C_y & C_x^2 + C_y^2 & 1 \\ D_x & D_y & D_x^2 + D_y^2 & 1 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} A_x - D_x & A_y - D_y & (A_x^2 - D_x^2) + (A_y^2 - D_y^2) \\ B_x - D_x & B_y - D_y & (B_x^2 - D_x^2) + (B_y^2 - D_y^2) \\ C_x - D_x & C_y - D_y & (C_x^2 - D_x^2) + (C_y^2 - D_y^2) \end{vmatrix} > 0. \quad (4.7)$$

$A$ ,  $B$  und  $C$  sind darin die entgegen des Uhrzeigersinns angeordneten Knoten des zu überprüfenden Dreiecks mit den entsprechenden Koordinaten  $A_x$ ,  $A_y$ ,  $B_x$ ,  $B_y$ ,  $C_x$  und  $C_y$ .  $D_x$ ,  $D_y$  sind die Koordinaten des Punktes, für den geprüft wird, ob er sich innerhalb oder außerhalb (Determinante in Gleichung (4.7)  $\leq 0$ ) des Dreiecks befindet.

Zu Beginn der Rechnung wird für jedes Dreieckselement geprüft, ob dessen Umkreis einen weiteren Knoten eines benachbarten Elements einschließt. Ist dies der Fall, wird die gemeinsame Kante dieser beiden Elemente entsprechend Abbildung 4.7 so getauscht (Kantenflip), dass statt der beiden Knoten, die zunächst die gemeinsame Kante verbindet, die beiden anderen Knoten verbunden werden. Nachdem zu Beginn einmal alle Elemente überprüft wurden, werden anschließend nur noch die Elemente geprüft, die sich während eines Berechnungsschrittes verändert haben.

### 4.3 Modelladaptivität

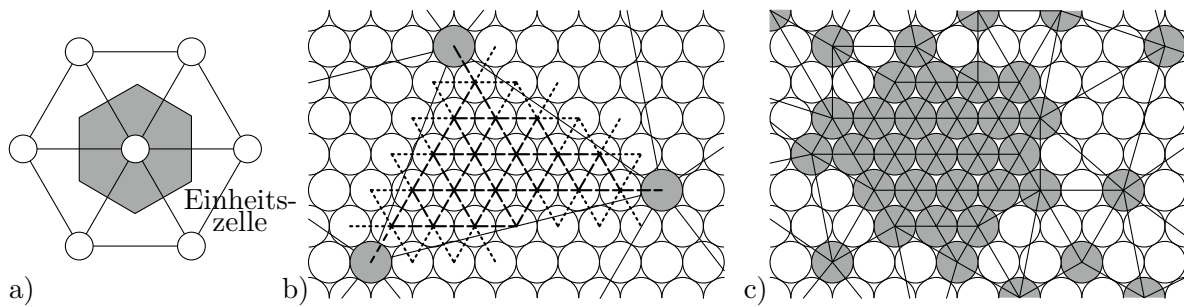
Die adaptive Netzverfeinerung des vorigen Abschnitts betrifft ausschließlich die Größe der Elemente. Je mehr Knoten sich in einem Bereich befinden, desto besser die Lösung. Dies gilt insbesondere auch für reine Kontinuumslösungen. Sowohl bei der Quasikontinuumsmethode als auch bei der hier vorliegenden Erweiterung soll jedoch auch das Modell, welches zur Berechnung der Steifigkeitsmatrix benutzt wird, die Genauigkeit in manchen Bereichen verbessern. Dies geschieht in einem zweiten adaptiven Prozess.

Im Rahmen der adaptiven Problemlösung sind generell drei unterschiedlich zu behandelnde Bereiche erkennbar. Dort, wo die Lösung glatt ist und die Diskretisierung grob, ist ein Kontinuumsmodell ausreichend. In Teilen der Struktur mit konzentriert großen Verzerrungsgradienten, beispielsweise in der Nähe einer Rissspitze, ist die feine Skala komplett aufgelöst. Alle Partikel entsprechen FE-Knoten und das Feinskalenmodell wird automatisch verwendet. Dazwischen gibt es einen Bereich, in dem die Elemente schon zu klein sind und die Lösung nicht mehr glatt genug ist, sodass eine kontinuierliche Lösung nicht genau genug ist. Dort sind aber auch nicht alle Partikel aufgelöst, sodass die Feinskalenmethode nicht verwendet werden kann. Es werden daher Elemente benötigt, die „sehen“, was sich in der Mikrostruktur abspielt, und die in der Lage sind, dieses Verhalten näherungsweise wiederzugeben. Zur Handhabung dieser unterschiedlichen Bereiche werden die folgenden drei, in Abbildung 4.8 dargestellten, Elementtypen eingeführt:

- Level 1: Kontinuumsmodell (Materialgesetz z. B. aus Homogenisierung).
- Level 2: Annäherung des diskreten Modells (z. B. Cauchy-Born-Regel oder Lösung eines Unterproblems).
- Level 3: Vollständig aufgelöstes diskretes Modell.

Die grauen Kreise in Abbildung 4.8 stehen für Partikel, die gleichzeitig FE-Knoten sind, und die weißen entsprechen den dazwischen liegenden Partikeln. In Abbildung 4.8b, dem Level 2-Element, sind die Interaktionen aller zum Element gehörenden Partikel





**Abbildung 4.8:** a) Level 1: Einheitszelle zur Berechnung des homogenen Materialgesetzes für ein Kontinuumsmodell. b) Level 2: Federn, die vollständig im Element liegen (gestrichelt) und zwischen zwei Elementen (gepunktet). c) Level 3: Vollständig aufgelöste Mikrostruktur in der Mitte.

hervorgehoben. Diese Federn bzw. Stäbe stellen die Mikrostruktur im Element dar und sind später entscheidend für die Verknüpfung der Grob- und der Feinskala.

Die Kinematik dieser drei Elementtypen ist durch die Knotenverschiebungen bestimmt, welche das Ergebnis der Lösung des Randwertproblems mithilfe der FEM sind. Die drei Level unterscheiden sich darin, wie das Konstitutivverhalten der Struktur wiedergegeben wird, welches über die Steifigkeitsmatrix der Elemente in die FE-Rechnung eingeht. Die Berechnung der Steifigkeitsmatrix unterscheidet sich demnach für die drei Elementtypen. Diese unterschiedliche Berechnung wird in Kapitel 5 für den homogenen Fall behandelt, bei dem alle Gitterstäbe dieselben Materialeigenschaften haben, und in Kapitel 6 für den heterogenen Fall.

Während sich Level 3 automatisch aus der Netzverfeinerung ergibt, wird, um von Level 1 auf Level 2 zu gelangen, ein Modelladaptivitätskriterium eingeführt, welches Information über die Glattheit der Lösung geben soll. Wird die Lösung inhomogen, so reicht die Kontinuumslösung von Level 1 nicht mehr aus und es wird zu Level 2-Elementen übergegangen. Hierzu wird ebenfalls ein Kriterium aus SHENOY U. A. (1999) herangezogen

$$\max_k |\lambda_a^k - \lambda_b^k| \leq \varepsilon_\lambda, \quad (4.8)$$

worin  $\lambda_a^k$  und  $\lambda_b^k$  den  $k$ -ten Eigenwerten des rechten Strecktensors  $\mathbf{U}$  zweier benachbarter Elemente  $a$  und  $b$  entsprechen und  $\varepsilon_\lambda$  ein zuvor bestimmter empirischer Grenzwert ist. Dieses Kriterium soll ein Maß für die Homogenität der Lösung sein, während das Netzadaptivitätskriterium (4.5) die Genauigkeit der FE-Lösung abschätzt. Bezogen auf die Netzadaptivität wird ein relativer Fehler betrachtet, wohingegen sich das Kriterium für die Modelladaptivität eines absoluten Vergleichswerts bedient.

Das Netz- und das Modelladaptivitätskriterium hängen beide von den Deformationen bzw. den Verzerrungen ab und stehen somit in engem Zusammenhang. Es könnte daher

sinnvoll sein, zukünftig andere, sich stärker unterscheidende Kriterien in Erwägung zu ziehen. Der Einfachheit halber werden in dieser Arbeit die beiden Kriterien aus SHENOY U. A. (1999) übernommen, was, wie sich später zeigen wird, zielführend ist.

### 4.4 Berechnungsablauf

In dieser Arbeit werden zunächst sowohl geometrisch als auch materiell lineare Probleme untersucht, was die methodische Entwicklung deutlich erleichtert. Die linearen Ansätze werden anschließend für materiell nichtlineare Anwendungen erweitert, wobei die Verbindungen zwischen den Partikeln schädigen können.

Im vollständig linearen Fall wird das lineare Gleichungssystem

$$\mathbf{KD} = \mathbf{F}_{\text{ext}} \tag{4.9}$$

gelöst. Der Ablauf der Berechnung ist grundlegend derselbe wie bei einer herkömmlichen linearen FE-Rechnung. Durch die Adaptivität ergeben sich jedoch Unterschiede, die hier kurz hervorgehoben werden sollen. Da nur ein Belastungsschritt gerechnet wird, der direkt gelöst werden kann, sind keine Iterationen wie bei einer nichtlinearen Rechnung notwendig. Im Zuge der Netzverfeinerung ist jedoch nicht zu erwarten, dass schon nach einem Verfeinerungsschritt das optimale Netz erreicht ist, da die Elemente in jedem Schritt lediglich halbiert werden und nur beim Beseitigen von Inkompatibilitäten im Netz eventuell weiter geteilt werden. Daher wird bei einer linearen Rechnung der eine Belastungsschritt mehrmals wiederholt, wobei keine Laststeigerung stattfindet. Die Anzahl an Verfeinerungsschritten muss aus diesem Grund vor der Rechnung festgelegt werden. Alternativ kann die Berechnung auch automatisch abgebrochen werden, indem sie so lange fortgeführt wird, bis das Netzverfeinerungskriterium bei keinem Element mehr erfüllt ist. Wie viele Schritte dazu nötig sind, hängt primär von der Wahl des maximal zulässigen Fehlers  $\bar{\eta}$  in Gleichung (4.5) ab.

Der Berechnungsablauf der linearen Rechnung ist in Abbildung 4.9 dargestellt. Bei diesem Ablauf wurde zuvor eine bestimmte Anzahl an Verfeinerungsschritten  $n_{\text{step}}$  festgelegt. Es fällt auf, dass zunächst das Gleichungssystem einmal gelöst wird, bevor die Schleife über die  $n_{\text{step}} - 1$  Verfeinerungsschritte einsetzt. Der Grund dafür ist, dass zur Berechnung des Netzverfeinerungskriteriums (4.2) der Deformationsgradient benötigt wird, zu dessen Berechnung die Knotenverschiebungen unter gegebener Belastung bekannt sein müssen. Eine weitere Besonderheit der adaptiven Berechnung ist, dass, nachdem das Netz verfeinert wurde, den neuen Knoten neue Freiheitsgrade zugewiesen und sämtliche Vektoren und Matrizen neu initialisiert werden müssen.

Erster Schritt ( $k = 1$ )
Initialisierung $\mathbf{K}$ und $\mathbf{F}_{\text{ext}}$
Assemblierung $\mathbf{K}$ und $\mathbf{F}_{\text{ext}}$
Lösen von $\mathbf{K}\mathbf{D} = \mathbf{F}_{\text{ext}}$
Schleife über Verfeinerungsschritte ( $k = 2$ bis $n_{\text{step}}$ )
Netz- und Modelladaption
Verteilung von Freiheitsgraden an neue Knoten
Neuinitialisierung $\mathbf{K}$ und $\mathbf{F}_{\text{ext}}$
Assemblierung $\mathbf{K}$ und $\mathbf{F}_{\text{ext}}$
Lösen von $\mathbf{K}\mathbf{D} = \mathbf{F}_{\text{ext}}$

**Abbildung 4.9:** Berechnungsablauf im linearen Fall mit Netzverfeinerung.

Der Ablauf der materiell nichtlinearen Berechnung kann Abbildung 4.10 entnommen werden. Da die Gleichung  $\mathbf{R} = \mathbf{F}_{\text{int}}(\mathbf{D}) - \mathbf{F}_{\text{ext}} = \mathbf{0}$  aufgrund der nichtlinearen Abhängigkeit des inneren Kraftvektors von den Verschiebungen nicht direkt gelöst werden kann, wird diese Gleichung zunächst, wie in Abschnitt 3.4 beschrieben, mit dem Newton-Raphson-Verfahren linearisiert. Dadurch ergibt sich Gleichung (3.22), die iterativ gelöst wird. Am Ende jeder Iteration  $i$  wird der Verschiebungsvektor  $\mathbf{D}$  um die Änderung  $\Delta\mathbf{D}$  der entsprechenden Iteration aktualisiert. Der auskonvergierte Zustand ist erreicht, wenn die Norm des Residuums einen sehr klein gewählten Toleranzwert  $\varepsilon_{\text{tol}}$  unterschreitet.

Der Berechnungsablauf unterscheidet sich praktisch nicht von dem einer Rechnung ohne Adaptivität, außer dass, wie im linearen Fall, zunächst ein Schritt gerechnet werden muss, bevor mit der Netzverfeinerung begonnen werden kann. Im Gegensatz zur linearen Rechnung gibt es nun jedoch keine zusätzliche Schleife über die Verfeinerungsschritte. Es wird in jedem Lastschritt nur einmal verfeinert und anschließend so lange iteriert, bis Konvergenz erreicht ist. Nach der Netzverfeinerung müssen auch hier den neuen Knoten vor der Assemblierung Freiheitsgrade zugewiesen werden und die Vektoren und Matrizen mit ihrer neuen Größe initialisiert werden.

Handelt es sich um materielle Nichtlinearität, so müssen nach jedem auskonvergierten Schritt die Geschichtsvariablen, die den aktuellen Zustand des Materials beschreiben, aktualisiert werden. Bei dem hier verwendeten Schädigungsmodell betrifft dies die in der

$k = 1$ , erster Schritt		
Berechnung des Lastfaktors $\lambda = k \cdot \Delta\lambda$		
	Initialisierung $\mathbf{K}_{\text{tan}}^i$ , $\mathbf{F}_{\text{int}}(\mathbf{D}^i)$ , $\mathbf{F}_{\text{ext}}(\lambda)$ und $\mathbf{R}(\mathbf{D}^i)$	Newton-Raphson
	Assemblierung $\mathbf{K}_{\text{tan}}^i$ , $\mathbf{F}_{\text{int}}(\mathbf{D}^i)$ und $\mathbf{F}_{\text{ext}}(\lambda)$	
	Lösen von $\mathbf{K}_{\text{tan}}^i \Delta\mathbf{D}^{i+1} = -\mathbf{R}(\mathbf{D}^i)$ (Gl. (3.22))	
	Aktualisierung $\mathbf{D}^{i+1} = \mathbf{D}^i + \Delta\mathbf{D}^{i+1}$	
Iterationsschleife über $i$ – Konvergenz prüfen: $\ \mathbf{R}\  < \varepsilon_{\text{tol}}$		
Aktualisierung der Geschichtsvariablen $\kappa$		
Schleife über Lastschritte ( $k = 2$ bis $n_{\text{step}}$ )		
Netz- und Modelladaption		
Verteilung von Freiheitsgraden an neue Knoten		
Erhöhen des Lastfaktors $\lambda = k \cdot \Delta\lambda$		
	Initialisierung $\mathbf{K}_{\text{tan}}^i$ , $\mathbf{F}_{\text{int}}(\mathbf{D}^i)$ , $\mathbf{F}_{\text{ext}}(\lambda)$ und $\mathbf{R}(\mathbf{D}^i)$	Newton-Raphson
	Assemblierung $\mathbf{K}_{\text{tan}}^i$ , $\mathbf{F}_{\text{int}}(\mathbf{D}^i)$ und $\mathbf{F}_{\text{ext}}(\lambda)$	
	Lösen von $\mathbf{K}_{\text{tan}}^i \Delta\mathbf{D}^{i+1} = -\mathbf{R}(\mathbf{D}^i)$ (Gl. (3.22))	
	Aktualisierung $\mathbf{D}^{i+1} = \mathbf{D}^i + \Delta\mathbf{D}^{i+1}$	
Iterationsschleife über $i$ – Konvergenz prüfen: $\ \mathbf{R}\  < \varepsilon_{\text{tol}}$		
Aktualisierung der Geschichtsvariablen $\kappa$		

**Abbildung 4.10:** Berechnungsablauf im materiell nichtlinearen Fall mit Netzverfeinerung.

Belastungsgeschichte maximal erreichte Verzerrung  $\kappa$  aller Stäbe. Die Materialroutine wird bei der Berechnung der Elementsteifigkeitsmatrizen aufgerufen und taucht daher in diesem globalen Ablauf nicht auf. Wie das Material genau Einzug in die Berechnung findet, wird an entsprechender Stelle in den folgenden beiden Kapiteln beschrieben.

# 5

---

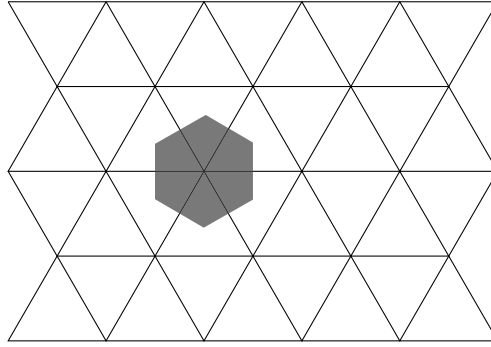
## Adaptive Auflösung der Mikrostruktur für homogenes Material

In dieser Arbeit wird zwischen drei Levels von Elementen unterschieden, bei denen die Mikrostruktur jeweils bis zu einem anderen Grad aufgelöst ist. Level 1 entspricht einem Kontinuumsmodell, Level 3 einem Feinskalenmodell und Level 2 bildet den Übergang dazwischen. In allen drei Levels werden die bei der Finite-Elemente-Methode üblichen Dreieckselemente mit linearen Ansatzfunktionen verwendet. Die Kinematik ist durch die Verschiebungen der FE-Knoten bestimmt. Der Unterschied der drei Levels bezieht sich ausschließlich auf das Konstitutivverhalten und spiegelt sich in der Elementsteifigkeitsmatrix wieder. Über diese stehen das Feinskalenmodell und das Kontinuumsmodell miteinander in Beziehung.

Im Folgenden wird die Ermittlung der Steifigkeitsmatrix für die drei Levels vorgestellt. Dazu wird zunächst von einem homogenen Material ausgegangen. Homogen dahingehend, dass alle Stäbe im regelmäßigen Gitter dieselben Materialeigenschaften aufweisen. Des Weiteren wird darauf eingegangen, wie das linear entfestigende Schädigungsmodell aus Abschnitt 3.5.2 bei den drei Elementtypen integriert wird.

### 5.1 Kontinuumsmodell (Level 1)

Level 1-Elemente werden in Bereichen mit glatter Lösung eingesetzt. Diese Bereiche haben einen gewissen Abstand zur eigentlichen Prozesszone. Es passiert dort also verhältnismäßig wenig und die Lösung mit einem Kontinuumsmodell ist ausreichend genau.



**Abbildung 5.1:** Regelmäßiges Dreiecksgitter mit hexagonaler Einheitszelle.

### 5.1.1 Elementsteifigkeitsmatrix

Die Mikrostruktur aus regelmäßig angeordneten kreisrunden Partikeln derselben Größe, deren Mittelpunkte über Federn miteinander verbunden sind, wird durch ein regelmäßiges Dreiecksgitter repräsentiert (siehe Abbildung 4.1). In diesem Gitter wiederholt sich die in Abbildung 5.1 dargestellte hexagonale Einheitszelle periodisch. Um daraus ein Kontinuumsmodell herzuleiten, wird Äquivalenz der in solch einer Einheitszelle gespeicherten Verzerrungsenergie und deren Pendant im Kontinuum gefordert:

$$\pi_{\text{cell}} = \frac{1}{2} \sum_{b=1}^6 (c \mathbf{u} \cdot \mathbf{u})^{(b)} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon} = \pi_{\text{continuum}}. \quad (5.1)$$

Das Potential der Einheitszelle wird als Summe über die sechs halben Federn, die sich innerhalb der Einheitszelle befinden, berechnet. Darin ist  $c^{(b)}$  die Steifigkeit einer Feder mit halber Länge ( $L/2$ ), also der Länge des Teils der Feder, der sich innerhalb der Einheitszelle befindet. Unter der Annahme, die Steifigkeit  $c^{(b)}$  aller Federn sei gleich, ergibt sich z. B. nach OSTOJA-STARZEWSKI (2002) für ein Gitter aus gleichseitigen Dreiecken mit den drei Gitterrichtungen  $0^\circ$ ,  $60^\circ$  und  $120^\circ$ :

$$C_{1111} = C_{2222} = \frac{9}{8\sqrt{3}}c \quad C_{1122} = C_{2211} = \frac{3}{8\sqrt{3}}c \quad C_{1212} = \frac{3}{8\sqrt{3}}c. \quad (5.2)$$

In Voigt-Notation ausgedrückt ist dies

$$\mathbf{C} = \frac{3}{8\sqrt{3}}c \begin{bmatrix} 3 & 1 & 0 \\ 1 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (5.3)$$

Die Federkonstante wird zu  $c = EA / (L/2)$  gewählt, wobei  $E$ ,  $A$  und  $L$ , dem Elastizitätsmodul, der Querschnittsfläche und der Länge eines die Feder ersetzenden Stabes entsprechen.

Ist die Materialmatrix  $\mathbf{C}$  ermittelt, kann die Elementsteifigkeitsmatrix  $\mathbf{k}^{(L1)}$  der Level 1-Elemente wie die eines herkömmlichen linearen verschiebungsbasierten Dreieckselements folgendermaßen berechnet werden:

$$\mathbf{k}^{(L1)} = \int_{\Omega^e} \mathbf{B}^T \mathbf{C} \mathbf{B} \, d\Omega. \quad (5.4)$$

Darin ist  $\mathbf{B}$  der B-Operator eines Dreieckselements mit linearen Ansatzfunktionen, kurz eines CST-Elements (engl. „constant strain triangle“).

### 5.1.2 Materielle Nichtlinearität

Bei Dreieckselementen mit linearen Ansatzfunktionen sind die Verzerrungen innerhalb eines Elements konstant. In einem regelmäßigen Dreiecksgitter, wie dem hier vorliegenden, gibt es drei Richtungen, in denen Stäbe angeordnet sind. In Kombination bedeutet das, dass die Verzerrungen aller Stäbe, die in eine Richtung zeigen, dieselben sind, vorausgesetzt alle haben die gleichen Materialeigenschaften. Erreicht ein Stab in einer Richtung die Grenzverzerrung  $\kappa_0$ , bei der der Stab anfängt zu schädigen, geschieht dies bei allen Stäben in derselben Richtung gleichzeitig. Es muss also nur die Verzerrung eines einzelnen Stabes je Richtung berechnet werden, um die Verzerrung aller Stäbe im Element zu berechnen und festzustellen, ob Schädigung eingesetzt hat.

Entfestigung einzelner Stäbe kann in Kontinuums-elementen generell nicht abgebildet werden. Wollte man die Schädigung einzelner Gitterrichtungen zumindest verschmiert abbilden, bräuchte man dazu ein anisotropes Stoffgesetz. Es ist jedoch davon auszugehen, dass die Elemente, in denen die Stäbe anfangen zu entfestigen, der Prozesszone sehr nahe liegen. In der Nähe der Prozesszone liegen in der Regel Level 2- und Level 3-Elemente vor, bei denen die Schädigung einzelner Stäbe im Stoffgesetz enthalten ist. Daher wird bei den Level 1-Elementen darauf verzichtet, Schädigung zu berücksichtigen. Überschreitet die Verzerrung eines Stabes in einem Level 1-Element in einer Richtung den Grenzwert  $\kappa_0$ , so wird dieses Element in ein Level 2-Element umgewandelt.

In einer nichtlinearen Berechnung wird zur Gleichungslösung der innere Kraftvektor benötigt (siehe Abschnitt 4.4). Die Anteile aller Elemente werden zum globalen inneren Kraftvektor  $\mathbf{F}_{\text{int}}$  assembliert. Wie Gleichung (3.16) zu entnehmen ist, kann der Kraftvektor eines Kontinuums-elementes, wozu auch die Level 1-Elemente gehören, folgendermaßen berechnet werden:

$$\mathbf{f}_{\text{int}}^{(L1)} = \int_{\Omega^e} \mathbf{B}^T \boldsymbol{\sigma} \, d\Omega. \quad (5.5)$$

Die Spannungen  $\sigma$  ergeben sich aus Gleichung (3.25) und die Verzerrungen, die zur Berechnung der Spannungen benötigt werden, aus Gleichung (3.15).

## 5.2 Approximiertes diskretes Modell (Level 2)

Level 2-Elemente werden in Bereichen eingesetzt, die zwischen dem ganz fein aufgelösten und dem kontinuierlichen Bereich liegen. Sie approximieren die Feinskalenlösung genauer als die Kontinuumselemente und bilden somit den Übergang der beiden Modelle. Wenn die Lösung nicht mehr ausreichend glatt ist und somit ein kontinuierliches, elastisches und isotropes Stoffgesetz, wie das der Level 1-Elemente, nicht mehr gerechtfertigt ist, wird ein Level 1-Element in ein Level 2-Element umgewandelt. Dies ist dann der Fall, wenn der Grenzwert  $\varepsilon_\lambda$  in Gleichung (4.8) überschritten wird. Des Weiteren können Level 2-Elemente die Entfestigung der Stäbe im Element abbilden und werden gebraucht, sobald in einem Level 1-Element der Grenzwert  $\kappa_0$  der Verzerrungen überschritten wird. In Level 2 werden mechanische Prozesse innerhalb eines Elements basierend, auf den Interaktionen aller diskreten Elemente, die es beinhaltet, berechnet.

### 5.2.1 Elementsteifigkeitsmatrix

Die globale Steifigkeitsmatrix lässt sich nach Gleichung (4.1) durch zweimaliges Ableiten des Gesamtpotentials aller Stäbe nach den Knotenfreiheitsgraden, hier den Knotenverschiebungen, berechnen. Dies lässt sich entsprechend auf die Ermittlung der Elementsteifigkeitsmatrix übertragen, nur dass statt des Gesamtpotentials aller Stäbe im System lediglich die Summe des Potentials der Stäbe im Element gebildet wird und diese zweimal nach den sechs Knotenverschiebungen  $\mathbf{d}$  des Dreieckselements abgeleitet wird.

Zur Berechnung des Potentials eines Stabes, der zwei Partikel (1 und 2) verbindet, werden die Verschiebungen  $\tilde{\mathbf{d}} = [\tilde{\mathbf{d}}^{(1)T} \tilde{\mathbf{d}}^{(2)T}]^T$  dieser beiden Partikel benötigt. Haben alle Stäbe dieselben Materialeigenschaften, so lassen sich diese Partikelverschiebungen durch Interpolation der Knotenverschiebungen  $\mathbf{d}$  mithilfe der Ansatzfunktionen berechnen:<sup>1</sup>

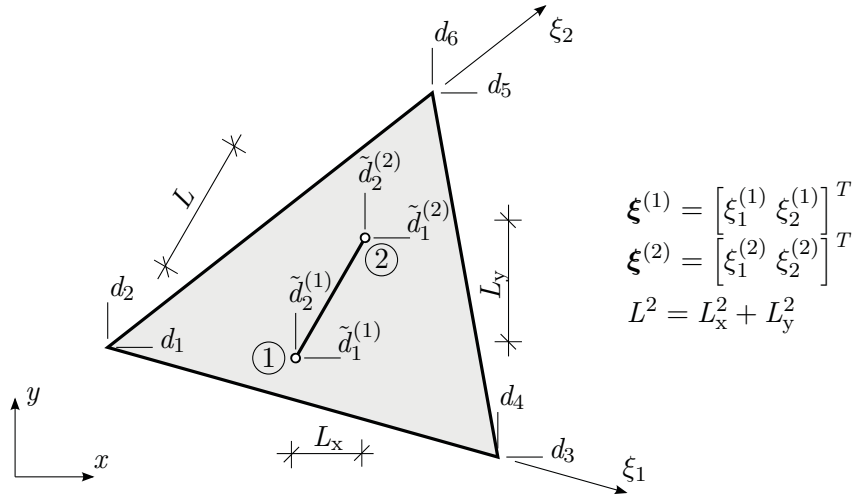
$$\tilde{\mathbf{d}}^P(\boldsymbol{\xi}^P) = \mathbf{N}(\boldsymbol{\xi}^P)\mathbf{d}. \quad (5.6)$$

Dazu werden die Koordinaten der Partikel 1 und 2 innerhalb des Elements  $\boldsymbol{\xi}^{(1)}$  und  $\boldsymbol{\xi}^{(2)}$  (im Parameterraum) benötigt. Diese sind in einem regelmäßigen Gitter mithilfe der Vek-

---

<sup>1</sup>Diese Herangehensweise ist nur gerechtfertigt, solange alle Stäbe dieselben Materialeigenschaften haben, da sonst die Stäbe der Mikrostruktur nicht im Gleichgewicht wären. Darauf wird im Zuge der Erweiterung auf eine heterogene Verteilung der Materialeigenschaften in Kapitel 6 genauer eingegangen, wo aus diesem Grund ein anderer Ansatz zur Bestimmung der Steifigkeitsmatrix gewählt wird.





**Abbildung 5.2:** Stab in einem Element mit Knoten- und Partikelverschiebungen.

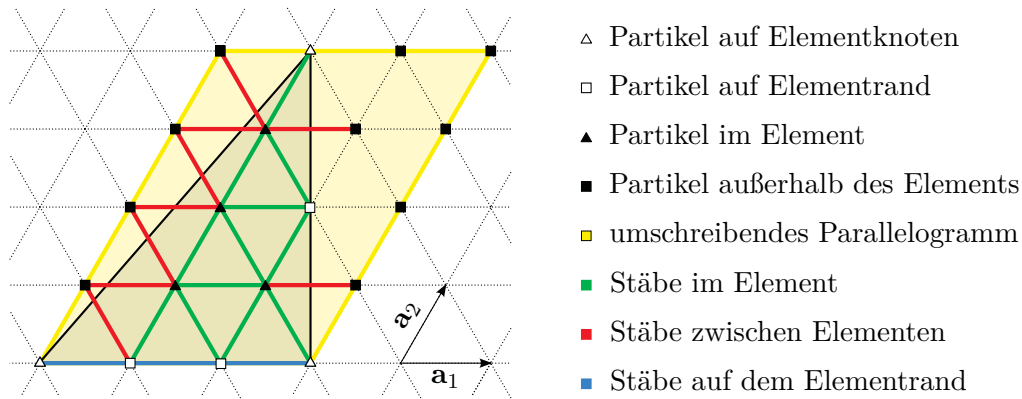
toren  $\mathbf{a}_1$  und  $\mathbf{a}_2$  leicht zu ermitteln. Wie in Abschnitt 4.2.2 beschrieben, definieren diese beiden Vektoren den Abstand zweier Partikel in den Gitterrichtungen. Da die räumliche Lage der FE-Knoten bekannt ist und deren Lage mit der Lage von Partikeln zusammenfällt, können die Positionen aller anderen Partikel im Element einfach generiert werden.

Das Potential eines Stabes zwischen zwei Partikeln ist das einer Feder  $\pi_S = \frac{1}{2}c\Delta u^2$  mit der Federsteifigkeit  $c$  und der Relativverschiebung der Partikel in axialer Richtung  $\Delta u = u_2 - u_1$ . Dieses Potential wird nun exemplarisch für den in Abbildung 5.2 dargestellten Stab hergeleitet. Der Stab befindet sich innerhalb des Elements mit den Knotenfreiheitsgraden  $d_1$  bis  $d_6$  und verbindet die Partikel 1 und 2 der Mikrostruktur des Elements. Im Parameterraum des Elements haben diese Partikel die Koordinaten  $\boldsymbol{\xi}^{(1)}$  und  $\boldsymbol{\xi}^{(2)}$ . Die Verschiebungen der Partikel, zerlegt in  $x$ - und  $y$ -Richtung, sind  $\tilde{\mathbf{d}}^{(1)} = [\tilde{d}_1^{(1)} \ \tilde{d}_2^{(1)}]^T$  und  $\tilde{\mathbf{d}}^{(2)} = [\tilde{d}_1^{(2)} \ \tilde{d}_2^{(2)}]^T$ . Der Stab hat die Länge  $L$  (ebenfalls zerlegbar in  $L_x$  und  $L_y$ ), den E-Modul  $E$  und die Querschnittsfläche  $A$ . Die Relativverschiebung der Partikel, projiziert auf die Richtung der Stabachse, ergibt sich wie folgt

$$\Delta u(\tilde{\mathbf{d}}) = \frac{(\tilde{d}_1^{(2)} - \tilde{d}_1^{(1)})L_x + (\tilde{d}_2^{(2)} - \tilde{d}_2^{(1)})L_y}{L}, \quad (5.7)$$

wobei die Partikelverschiebungen  $\tilde{\mathbf{d}}^P$  wiederum eine Funktion der Partikelposition  $\boldsymbol{\xi}^P$  im Element und der Knotenverschiebungen  $\mathbf{d}$  sind (Gleichung (5.6) und (A.1)). Das Potential eines einzelnen Stabes  $S$  im Element ergibt sich mit Gleichung (5.7) zu

$$\pi_S(\tilde{\mathbf{d}}) = \frac{1}{2}c\Delta u^2 = \frac{1}{2} \frac{EA}{L} \frac{[(\tilde{d}_1^{(2)} - \tilde{d}_1^{(1)})L_x + (\tilde{d}_2^{(2)} - \tilde{d}_2^{(1)})L_y]^2}{L^2}. \quad (5.8)$$



**Abbildung 5.3:** Sortierung der Partikel und Stäbe hinsichtlich ihrer Lage zum Element im umschreibenden Parallelogramm.

Durch zweimaliges Ableiten dieses Potentials nach den Knotenverschiebungen  $\mathbf{d}$  des Level 2-Elements kann daraus der Beitrag zur Steifigkeitsmatrix eines einzelnen Stabes in Abhängigkeit der lokalen Koordinaten des Anfangs- und Endpartikels ( $\xi^{(1)}$  und  $\xi^{(2)}$ ) des Stabes ermittelt werden. Dieser Beitrag eines Stabes  $\mathbf{k}^{(L2,S)}$  zur Steifigkeitsmatrix  $\mathbf{k}^{(L2)}$  des Level 2-Elements kann Gleichung (A.2) entnommen werden.

Anstatt zuerst das Gesamtpotential aller Stäbe im Element zu berechnen und dieses nach den Knotenverschiebungen abzuleiten, kann auch das Potential eines einzelnen Stabes nach den Knotenverschiebungen abgeleitet werden. Anschließende Assemblierung der Einzelbeiträge aller Stäbe des Elements ergibt die Elementsteifigkeitsmatrix

$$\mathbf{k}^{(L2)} = \bigcup_{S=1}^{n_{\text{truss}}} \omega_S \cdot \mathbf{k}^{(L2,S)}. \quad (5.9)$$

Da, wie aus Abbildung 5.3 ersichtlich, nicht alle Stäbe, die zur Steifigkeitsmatrix eines Elements beitragen, vollständig innerhalb dieses Elements liegen, wird der Faktor  $\omega_S$  in Gleichung (5.9) benötigt. Es gibt Stäbe, die über den Elementrand hinaus ragen und dementsprechend Bestandteil zweier Elemente sind. Würden diese Stäbe mit voller Steifigkeit in die Steifigkeitsmatrix der beiden benachbarten Elemente eingehen, wäre das System insgesamt zu steif. Zur Vereinfachung wird in dieser Arbeit angenommen, dass die Steifigkeit eines Stabes, der zu zwei Elementen gehört, je zur Hälfte in die Steifigkeitsmatrix der beiden Elemente einght. Es wird also  $\omega_S = 0,5$  gewählt, sobald ein Stab zu zwei Elementen gehört.

Abgesehen von Stäben zwischen zwei Elementen, die den gemeinsamen Elementrand kreuzen (rot dargestellt in Abbildung 5.3), gibt es Stäbe, die direkt auf dem Elementrand liegen (blau). Diese gehören dann ebenfalls zu zwei Elementen, wenn das Element am entsprechenden Rand ein Nachbarelement hat. Der Faktor bei der Assemblierung

Stabposition		Faktor $\omega_S$
im Element		1,0
zwischen zwei Elementen		0,5
auf dem Elementrand	mit Nachbar	0,5
	ohne Nachbar	1,0

**Tabelle 5.1:** Faktor  $\omega_S$  für den Beitrag zur Elementsteifigkeitsmatrix eines Stabes in Abhängigkeit dessen Position im Element.

entspricht dann ebenfalls  $\omega_S = 0,5$  und ist in dem Fall keine Näherung. Ist dort kein Nachbarelement vorzufinden, gehört der Stab vollständig zu einem Element und der Faktor ist  $\omega_S = 1,0$ . Die verschiedenen Faktoren abhängig von der Stabposition sind in Tabelle 5.1 zusammengefasst.

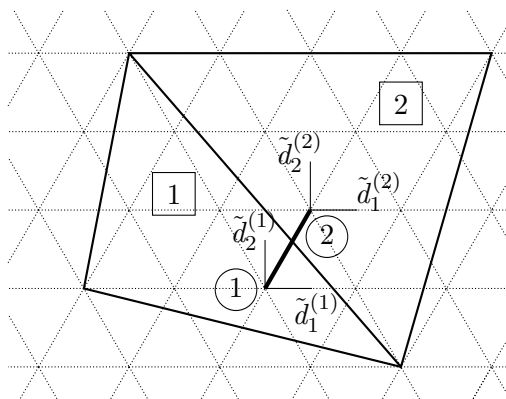
Um die Stabsteifigkeiten mit den richtigen Faktoren assemblieren zu können, muss die Lage der Stäbe bezogen auf das Element bekannt sein. Aufgrund der Gitterregelmäßigkeit lässt sich deren Lage bei Bedarf einfach ermitteln, ohne dass explizit Listen mit diesen Informationen vorliegen müssen. Dazu werden unter Zuhilfenahme der Koordinaten im Parameterraum zunächst die Partikel daraufhin sortiert, ob sie

- im Element liegen,
- mit einem Elementknoten zusammenfallen,
- auf dem Elementrand liegen oder
- sich außerhalb des Elements befinden.

Die Stabposition ergibt sich aufgrund der Listen, in welchen sich das Anfangs- und das Endpartikel eines Stabes jeweils befinden. Zur eindeutigen Bestimmung des Faktors  $\omega_S$  nach Tabelle 5.1 muss zusätzlich bekannt sein, auf welchen Seiten des Elements sich Nachbarelemente befinden.

Damit nicht alle Partikel und Stäbe der gesamten Mikrostruktur auf ihre Lage relativ zum Element überprüft werden müssen, werden nur die Partikel eines das Element umschreibenden Parallelogramms (Abbildung 5.3) in Betracht gezogen. Das Parallelogramm wird so gewählt, dass die Kanten parallel zu den Vektoren  $\mathbf{a}_1$  und  $\mathbf{a}_2$  verlaufen und durch die drei Elementknoten gehen.

Zur Berechnung der Steifigkeitsmatrix eines Stabes  $\mathbf{k}^{(L2,S)}$  werden die Verschiebungen der Partikel 1 und 2 benötigt, also  $\tilde{\mathbf{d}}^{(1)}$  und  $\tilde{\mathbf{d}}^{(2)}$ , welche man nach Gleichung (5.6) durch Interpolation der Knotenverschiebungen erhält. Liegt nun, wie in Abbildung 5.4 dargestellt, Partikel 2 in Element 2, also außerhalb von Element 1 so müssten die Verschiebungen von Partikel 2 durch Interpolation der Knotenverschiebungen von Element 2



**Abbildung 5.4:** Die Steifigkeitsmatrix von Stab  $S$  wird für Element 1 und 2 gebraucht. Sie zählt jeweils mit einem Faktor 0,5 zur Elementsteifigkeitsmatrix der beiden Elemente.

ermittelt werden. Da die Steifigkeitsmatrix von Element 1 ausschließlich von den Verschiebungsfreiheitsgraden von Element 1 abhängen soll, wird in dieser Arbeit angenommen, dass auch Partikel 2 sich analog des Verschiebungsfeldes von Element 1 bewegt. Umgekehrt gilt dies für Partikel 1 bei der Berechnung der Steifigkeitsmatrix von Element 2. Dadurch ergeben sich für den Stab  $S$  zwei unterschiedliche Steifigkeitsmatrizen

$$\mathbf{k}_{(1)}^{(L2,S)} \approx \mathbf{k}_{(2)}^{(L2,S)} \approx \mathbf{k}^{(L2,S)}, \quad (5.10)$$

von denen jedoch angenommen wird, dass sie im Mittel ungefähr der Steifigkeitsmatrix  $\mathbf{k}^{(L2,S)}$  entsprechen, die man bekäme, wenn man die Verschiebungen  $\tilde{\mathbf{d}}^{(1)}$  und  $\tilde{\mathbf{d}}^{(2)}$  der Partikel 1 und 2 entsprechend des Verschiebungsfeldes des Elements berechnete, in dem sich der jeweilige Partikel befindet.

## 5.2.2 Materielle Nichtlinearität

Im materiell linearen Fall sind bei homogener Verteilung der Materialeigenschaften der Stäbe die Ergebnisse mit Level 1- und Level 2-Elementen nahezu identisch. Es gibt lediglich kleine Unterschiede durch unterschiedliche Annahmen bei der Berechnung der Elementsteifigkeitsmatrix. In Level 1 gilt ein homogenisiertes Stoffgesetz, und in Level 2 wird angenommen, dass sich Partikel außerhalb eines Elements, die mit Partikeln innerhalb des Elements verbunden sind, mit dem Verschiebungsfeld des Elements bewegen. Erst wenn Schädigung der Stäbe der Mikrostruktur hinzukommt, oder wenn die Stäbe heterogene Materialeigenschaften haben, gewinnen die Level 2-Elemente an Bedeutung.

Den Stäben wird in dieser Arbeit das einaxiale Schädigungsmodell mit linearer Entfestigung aus Abschnitt 3.5.2 zugewiesen. Setzt in einem Stab Schädigung ein, wird dessen

Steifigkeit reduziert. Durch die aktuelle Verzerrung  $\varepsilon$  und die in der Belastungsgeschichte bis dahin maximal erreichte Verzerrung  $\kappa$  lassen sich entsprechend der Routine in Abbildung 3.3 die in der Belastungsgeschichte bis zur aktuellen Iteration maximal erreichte Verzerrung  $\kappa_{it}$ , die Schädigung  $d_{it}$ , die Materialtangente  $E_{tan}$  und die Materialeikante  $E_{sec}$  bestimmen. Zur Berechnung des Beitrags eines Stabes zur Elementsteifigkeitsmatrix kann die Matrix  $\mathbf{k}^{(L2,S)}$  aus Gleichung (A.2) benutzt werden, allerdings nun mit der Materialtangente  $E_{tan}$ . Die Materialeikante  $E_{sec}$  wird zur Berechnung des inneren Kraftvektors  $\mathbf{f}_{int}^{(L2,S)}$  benötigt. Die Werte von  $d_{it}$ ,  $E_{tan}$  und  $E_{sec}$  können sich während der Iterationen laufend ändern. Am Ende eines jeden Belastungsschritts, also wenn Konvergenz erreicht ist, muss die Geschichtsvariable  $\kappa$  aller Stäbe entsprechend Gleichung (3.43) aktualisiert werden, um im nächsten Belastungsschritt zur Verfügung zu stehen.

Wie in Abschnitt 5.1.2 schon erläutert, sind die Stäbe in dem regelmäßigen Gitter in drei Richtungen angeordnet. Da sich die Verzerrungen aller Stäbe einer Richtung im Verschiebungsfeld eines linearen Dreieckselements entsprechen, erfahren sie alle dieselbe Schädigung, vorausgesetzt sie haben alle dieselben Materialeigenschaften. Um zu prüfen, ob Schädigung eingetreten ist oder wie weit sie fortgeschritten ist, genügt es demnach, die Verzerrung für einen Stab je Richtung zu berechnen. Die Geschichtsvariable  $\kappa$  muss daher in jedem Element auch nur einmal für jede dieser drei Richtungen gespeichert werden. Wird ein Element verfeinert, werden die Elementeigenschaften an die neuen Elemente weitergegeben.

Der bei einer materiell nichtlinearen Rechnung zur Gleichungslösung benötigte innere Kraftvektor ist aus Gleichung (3.16) in diskretisierter Form bekannt. Für einen ein-dimensionalen Stab ist der innere Kraftvektor eine Funktion der Verschiebungen der Stabenden  $\tilde{\mathbf{d}} = [\tilde{\mathbf{d}}^{(1)T} \tilde{\mathbf{d}}^{(2)T}]^T$ , die in Abbildung 5.2 dargestellt sind

$$\mathbf{f}_{int}^{(L2,S)} = \int_{\Omega} \frac{\partial \varepsilon(\tilde{\mathbf{d}})}{\partial \tilde{\mathbf{d}}} \sigma(\tilde{\mathbf{d}}) d\Omega = \frac{\partial \varepsilon(\tilde{\mathbf{d}})}{\partial \tilde{\mathbf{d}}} E_{sec} \varepsilon(\tilde{\mathbf{d}}) AL. \quad (5.11)$$

Er repräsentiert exakt die Kraft in einem Stab, der nur an den Enden belastet ist. Die Verzerrungen für den geometrisch linearen Fall, lassen sich zu

$$\varepsilon(\tilde{\mathbf{d}}) = \frac{\Delta u(\tilde{\mathbf{d}})}{L} = \frac{(\tilde{d}_1^{(2)} - \tilde{d}_1^{(1)})L_x + (\tilde{d}_2^{(2)} - \tilde{d}_2^{(1)})L_y}{L^2} \quad (5.12)$$

bestimmen, wobei  $\Delta u$  nach Gleichung (5.7) der Längenänderung des Stabes entspricht. Da sich der Stab im Dreieckselement befindet, hängen die Verschiebungen von den Knotenverschiebungen  $\mathbf{d}$  ( $d_1$  bis  $d_6$ ) und den Positionen der beiden Stabenden ( $\boldsymbol{\xi}^{(1)}$  und  $\boldsymbol{\xi}^{(2)}$ ) im Parameterraum des Elements ab. Durch Einsetzen von (A.1) in (5.12) erhält man die Verzerrung eines Stabes in Abhängigkeit der Knotenverschiebungen  $\varepsilon(\mathbf{d})$  und

Gleichung (5.11) ändert sich damit zu

$$\mathbf{f}_{\text{int}}^{(\text{L2},S)} = \frac{\partial \varepsilon(\mathbf{d})}{\partial \mathbf{d}} E_{\text{sec}} \varepsilon(\mathbf{d}) AL. \quad (5.13)$$

Der Beitrag eines Stabes  $\mathbf{f}_{\text{int}}^{(\text{L2},S)}$  zum inneren Kraftvektor  $\mathbf{f}_{\text{int}}^{(\text{L2})}$  eines Level 2-Elements in ausführlicher Form kann Gleichung (A.3) entnommen werden. Die Assemblierung der Einzelbeiträge aller Stäbe des Elements ergibt den inneren Kraftvektor

$$\mathbf{f}_{\text{int}}^{(\text{L2})} = \bigcup_{S=1}^{n_{\text{truss}}} \omega_S \cdot \mathbf{f}_{\text{int}}^{(\text{L2},S)}. \quad (5.14)$$

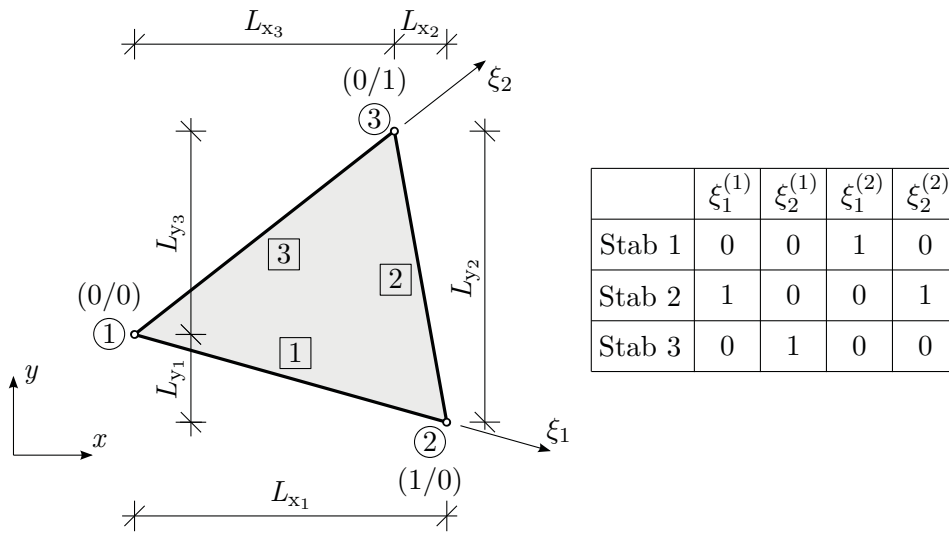
Der Faktor  $\omega_S$  entspricht dem für die Steifigkeitsmatrix in (5.9).

## 5.3 Vollständig aufgelöstes diskretes Modell (Level 3)

Am Ende der Modelladaptivität stehen die Level 3-Elemente. Sie repräsentieren die Mikroskala des Materials. Wenn jeder Partikelmittelpunkt gleichzeitig ein FE-Knoten ist und sich keine weiteren Partikel mehr im Element befinden, ist das Level 3 erreicht. Das Ergebnis einer Rechnung, bei der die Mikrostruktur ausschließlich aus Level 3-Elementen zusammengesetzt ist, entspricht exakt dem Ergebnis einer Rechnung, bei der das Gitter aus Stabelementen aufgebaut ist. Bei einer materiell nichtlinearen Rechnung, bei der einzelne Verbindungen zwischen Partikeln reißen können, muss sichergestellt sein, dass dieses Level erreicht ist, bevor vollständige Schädigung eintritt, da sonst alle Stäbe derselben Richtung im Element gleichzeitig reißen würden. Dies kann beispielsweise durch die Wahl des Grenzwertes zur Netzverfeinerung in Gleichung (4.5) beeinflusst werden.

### 5.3.1 Elementsteifigkeitsmatrix

Da die Level 3-Elemente grundsätzlich nur verfeinerte, vollständig aufgelöste Level 2-Elemente sind, entspricht der Beitrag eines einzelnen Stabes zur Elementsteifigkeitsmatrix dem eines Stabes in einem Level 2-Element aus Gleichung (A.2). Es müssen ebenfalls lediglich die Koordinaten  $\boldsymbol{\xi}$  der Knoten im Parameterraum sowie die  $x$ - und  $y$ -Komponenten der Länge eines jeden Stabes entsprechend Abbildung 5.5 substituiert werden. Da es nur drei Stäbe gibt, deren Anfangs- und Endpartikel die Elementknoten sind, und diese im Parameterraum immer dieselben Koordinaten haben, sind bei Level 3-Elementen nur die  $x$ - und  $y$ -Komponenten der Stablängen von Element zu Element variabel.



**Abbildung 5.5:** Level 3-Element mit den Knotenkoordinaten im Parameterraum (hier für ein beliebig im Raum orientiertes Gitter gezeichnet).

Die Assemblierung der Einzelbeiträge der drei Stäbe des Elements ergibt die Elementsteifigkeitsmatrix

$$\mathbf{k}^{(L3)} = \bigcup_{S=1}^3 \omega_S \cdot \mathbf{k}^{(L3,S)}. \quad (5.15)$$

Für den Faktor  $\omega_S$  ist lediglich entscheidend, ob das Element am entsprechenden Rand ein Nachbarelement hat; dann ist für den Stab auf diesem Rand  $\omega_S = 0,5$ . Liegt ein Stab auf dem Strukturrand, muss für diesen Stab  $\omega_S = 1,0$  gewählt werden.

### 5.3.2 Materielle Nichtlinearität

Wie zur Berechnung der Elementsteifigkeitsmatrix können auch für die inneren Kraftvektoren die Gleichungen der Level 2-Elemente übernommen werden. Durch Einsetzen der Knotenkoordinaten im Parameterraum und der  $x$ - und  $y$ -Komponenten der Stablänge in Gleichung (A.3) erhält man die Beiträge der Stäbe  $\mathbf{f}_{\text{int}}^{(L3,S)}$  zum inneren Kraftvektor des Elements

$$\mathbf{f}_{\text{int}}^{(L3)} = \bigcup_{S=1}^3 \omega_S \cdot \mathbf{f}_{\text{int}}^{(L3,S)}. \quad (5.16)$$

Die Steifigkeitsmatrix wird im materiell nichtlinearen wie im linearen Fall berechnet, allerdings mit der Materialtangente  $E_{\text{tan}}$  statt dem linearen E-Modul  $E$ . Zur Berechnung des inneren Kraftvektors wird die Materialsekante  $E_{\text{sec}}$  benötigt. Diese beiden

Materialeigenschaften können, ausgehend von der aktuellen Verzerrung  $\varepsilon$  und der in der Belastungsgeschichte maximal erreichten Verzerrung  $\kappa$  des jeweiligen Stabes, mit der Materialroutine aus Abbildung 3.3 bestimmt werden. Die Geschichtsvariable  $\kappa$  aller Stäbe wird, nachdem Konvergenz erreicht wurde, zusammen mit dem Aktualisierung der Level 2-Elemente, entsprechend Gleichung (3.43) aktualisiert.

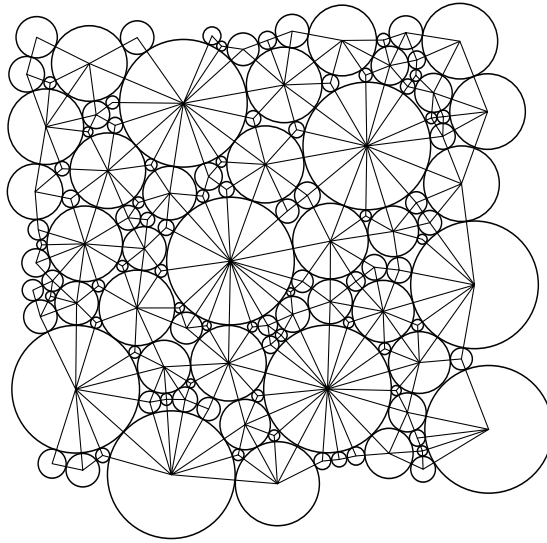


---

## Erweiterung auf heterogene Materialien

Die Grundlagen zur Berechnung einer Struktur, deren Mikrostruktur ein regelmäßiges Dreiecksgitter darstellt, bei dem anfänglich alle Stäbe dieselben Materialeigenschaften haben und einzelne Stäbe linear entfestigen können, wurden im letzten Kapitel geschaffen. Durch Einführung der drei Level wird ermöglicht, dass die Mikrostruktur während der Rechnung nicht überall vollständig aufgelöst werden muss, sondern nur in Bereichen mit großen Verzerrungsgradienten. Bei der Ermittlung der Steifigkeitsmatrix von Level 1- und Level 2-Elementen wurde jedoch für einige Schritte vorausgesetzt, dass alle Gitterstäbe dieselben Materialeigenschaften haben. Außerdem wurde, insbesondere bei der Netzverfeinerung, aber auch bei der Berechnung der Steifigkeitsmatrizen, von der regelmäßigen Geometrie des Gitters Gebrauch gemacht, wobei die Partikelpositionen bei Bedarf generiert werden können. Solch eine homogene Mikrostruktur, die mit einem regelmäßigen Gitter modelliert werden kann, bei dem alle Gitterstäbe dieselben Materialeigenschaften haben, ist nur bei perfekten kristallinen Materialien wiederzufinden. Kohäsive Reibungsmaterialien oder granulare Materialien, deren Verhalten hier simuliert werden soll, sind von Natur aus heterogen. Sollen die Steifigkeitsmatrizen bei heterogenen Materialien nach demselben Verfahren wie in Kapitel 5 berechnet werden, tauchen dabei einige Schwierigkeiten auf. Es ist daher erforderlich, die bisher beschriebene Methode auf die Anwendung für heterogene Materialien auszuweiten.

Zunächst wird in Abschnitt 6.1 das verwendete Modell zur Repräsentation der heterogenen Mikrostruktur beschrieben. In den Abschnitten 6.2 bis 6.4 wird anschließend ein alternativer Lösungsansatz zur Berechnung der Steifigkeitsmatrix der unterschiedlichen Elementtypen vorgestellt. Dabei wird auch auf die Problematik eingegangen, die sich ergibt, wenn derselbe Ansatz wie in Kapitel 5 verfolgt wird.



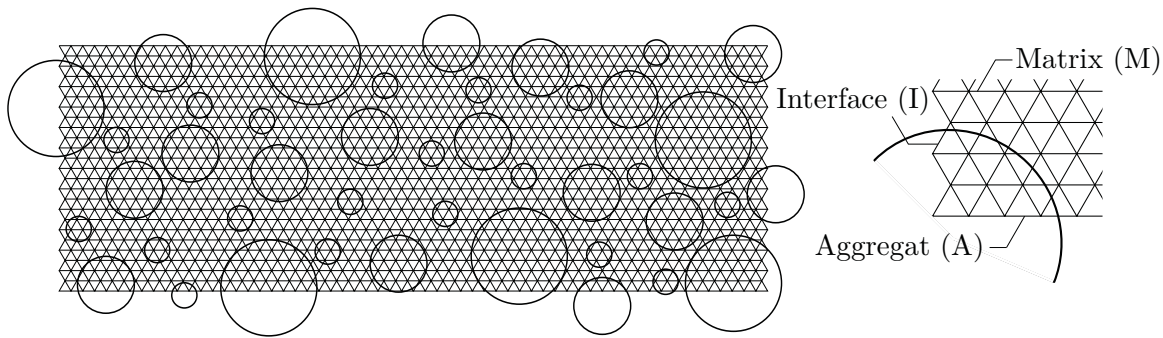
**Abbildung 6.1:** Starre, kreisrunde Partikel unterschiedlicher Größe, deren Kohäsion über Stabelemente abgebildet wird.

### 6.1 Heterogene Mikrostruktur

Es gibt zu viele unterschiedliche heterogene Materialien, als dass alle mit demselben Modell abzudecken wären. Bei der Wahl der in dieser Arbeit verwendeten heterogenen Mikrostruktur diente Beton als gedankliches Modell. Beton besteht aus Aggregaten unterschiedlicher Größe, die sich in einer Matrix aus Zement befinden, der die kohäsive Verbindung zwischen den Aggregaten bildet. Dieser physikalische Aufbau des Materials lässt sich mindestens auf die folgenden zwei, grundlegend unterschiedlichen Arten modellieren.

Die erste Möglichkeit eines Betonmodells ist, nur die Aggregate ab einer gewissen Größe als starre Partikel abzubilden, deren kohäsive Verbindung beispielsweise mithilfe von Stab- oder Balkenelementen repräsentiert wird. Diese Aggregate können, wie in Abbildung 6.1 dargestellt, durch Kreise angenähert sein.

Unter der Voraussetzung, dass die Materialeigenschaften der Stäbe gut gewählt sind, entsteht ein sehr realitätsnahes, diskretes Betonmodell. Da alle Partikel als starr angenommen werden, ist es mit diesem Modell allerdings nicht möglich, brechende Aggregate abzubilden, was statistisch gesehen bei den meisten Betonsorten selten auftritt. Heterogenität taucht bei diesem Modell in zweierlei Hinsicht auf: In der Geometrie durch die unterschiedliche Größe der Aggregate und bei den Materialeigenschaften der Stäbe zwischen den Aggregaten. Ein homogenes Stoffgesetz für die Level 1-Elemente für dieses Modell zu finden, ist jedoch nicht trivial. Des Weiteren bilden die Stäbe bei diesem Modell oft ein kinematisches System, was eine dynamische Berechnung erfordert.



**Abbildung 6.2:** Projektion eines Betonquerschnitts auf ein regelmäßiges Dreiecksgitter (nach SCHLANGEN UND VAN MIER (1992)).

Abbildung 6.2 zeigt die zweite Variante, die aus SCHLANGEN UND VAN MIER (1992) bekannt ist. Dort bleibt das regelmäßige Gitter bestehen. Ein idealisierter Betonquerschnitt aus einigen kreisrunden, unterschiedlich großen und zufällig verteilten Aggregaten, wird auf dieses Gitter projiziert. Wie bei dem vorigen Modell werden dabei ebenfalls nur Aggregate ab einer gewissen Größe berücksichtigt. Den Stäben werden, abhängig von ihrer Position relativ zu Aggregaten und Matrix, verschiedene Materialeigenschaften zugewiesen. In der Regel haben bei einem Beton die Aggregate (A) die größte Festigkeit. Am schwächsten sind die Flächen (bzw. im zweidimensionalen die Linien), die den Übergang zwischen den Aggregaten und der Matrix bilden, das sogenannte Interface (I). Die Festigkeit der Matrix (M) liegt dazwischen. In der numerischen Umsetzung kann dies beispielsweise einer Variation des E-Moduls ( $E^A$ ,  $E^M$ ,  $E^I$ ) entsprechen, also der Steifigkeit der Stäbe, und/oder einer unterschiedlichen Verzerrung ( $\kappa_0^A$ ,  $\kappa_0^M$ ,  $\kappa_0^I$ ), bei der das Material anfängt zu entfestigen. Unabhängig davon, welche Größe variiert wird, bezieht sich die Heterogenität lediglich auf die Materialeigenschaften der Stäbe und nicht wie zuvor auch auf die Geometrie. Risse können in der gesamten Struktur abgebildet werden, also auch durch Aggregate hindurch. Die Lösung mit diesem Modell ist jedoch stark von den Richtungen der Gitterstruktur abhängig und dadurch weniger realitätsnah. Aufgrund dessen, dass bei dieser Variante der Algorithmus zur Netzadaption beibehalten werden kann, und somit der Fokus auf der Lösung des Problems bei der Berechnung der Steifigkeitsmatrizen liegen kann, wird dennoch dieses Modell der Mikrostruktur gewählt.

Das Gitter kann in der Form einer Diskretisierung verwendet werden. In dieser Arbeit soll jedoch auch hier davon ausgegangen werden, dass ein Material mit einer solchen Gitterstruktur, bei dem die Partikel bzw. die dazwischen liegenden Stäbe die kleinste physikalische Einheit abbilden, existiert. Somit werden Lokalisierungsphänomene dieses an Beton angelehnten Materials richtig abbildet. Regularisierungsstrategien, wie die in Abschnitt 2.4.2 erwähnten, erübrigen sich dadurch.

Position der Partikel	Lage des Stabes
beide im selben Aggregat	Aggregat
beide in unterschiedlichen Aggregaten	Interface
beide in der Matrix	Matrix
einer im Aggregat, einer in der Matrix	Interface

**Tabelle 6.1:** Zuweisung der Lage eines Gitterstabes aufgrund der Position der beiden Partikel, die er verbindet.

Zur Erzeugung der Mikrostruktur werden in einer separaten Rechnung Aggregate unterschiedlicher Größe zufällig in einem rechteckigen Gebiet verteilt. Die Ausdehnung des Gebietes in  $x$ - und  $y$ -Richtung muss zuvor gewählt werden und sollte genauso groß oder größer als das von der Struktur eingenommene Gebiet sein. Mithilfe der Siebkurve eines Betons kann festgelegt werden, wie viele Aggregate eines bestimmten Durchmessers enthalten sein sollen. Sie haben idealisiert die Form von Kreisen und werden zufällig in dem zuvor bestimmten Gebiet verteilt. Zunächst werden die größten Aggregate verteilt und anschließend der Größe nach absteigend die kleineren. Dabei wird darauf geachtet, dass sich die Aggregate nicht überschneiden. Der Abstand der Mittelpunkte zweier Aggregate wird so gewählt, dass er größer ist als das 1,1-fache der Summe ihrer Radien. Das Ergebnis dieser Nebenrechnung sind die Koordinaten der Mittelpunkte der Aggregate und deren entsprechende Radien.

Da in solch einem heterogenen Gitter jeder Stab ein eigenes Material hat und somit auch eine individuelle Belastungsgeschichte, können nun die Gitterstäbe nicht mehr nur nach Bedarf generiert werden, sondern müssen während der gesamten Berechnung individuell vorliegen. Daher wird zusätzlich zur Finite-Elemente-Diskretisierung ein Hintergrundgitter angelegt, auf dem die Lage sämtlicher Partikel sowie die Lage und das Material der dazwischen liegenden Stäbe gespeichert sind. Die Lage der Stäbe, und somit deren Material, kann, wie in Tabelle 6.1 zusammengefasst, aufgrund der Position der Partikel festgelegt werden. Daher muss zunächst für jedes Partikel festgestellt werden, ob es sich innerhalb oder außerhalb eines Aggregats befindet und falls innerhalb, in welchem. Dies geschieht, indem der Abstand des Mittelpunkts des Partikels zu den Mittelpunkten der Aggregate mit deren Radien verglichen wird. Ist der Abstand kleiner als der Radius, befindet sich das Partikel innerhalb des Aggregats, andernfalls außerhalb.<sup>1</sup> Befinden sich zwei benachbarte Partikel im selben Aggregat, dann befindet sich der dazwischen liegende Stab ebenfalls innerhalb des Aggregats. Befinden sich die Partikel hingegen in zwei unterschiedlichen Aggregaten, so bildet der Stab dazwischen das Interface. Sind beide Partikel in der Matrix, befindet sich der Stab ebenfalls in der Matrix. Ist ein Partikel

<sup>1</sup>Entspricht der Abstand der Mittelpunkte von Aggregat und Partikel exakt dem Radius des Aggregats, so wird dieses Partikel als in der Matrix liegend betrachtet.

innerhalb eines Aggregats und das andere in der Matrix, dann liegt erneut ein Interface vor.

Wie dieses Hintergrundgitter, also die globale Mikrostruktur, in die Berechnung der jeweiligen Steifigkeitsmatrix auf den unterschiedlichen Levels eingeht, wird in den Abschnitten 6.2 bis 6.4 erläutert.

## 6.2 Kontinuumsmodell (Level 1)

Voraussetzung dafür, dass ein Material als kontinuierlich betrachtet werden kann, ist die Skalenseparation (siehe Abschnitt 2.3), dass also die Mikro- und die Makroskala weit genug auseinander liegen. Ein kleines Teilgebiet  $d\Omega$  muss immer noch so groß sein, dass alle darin befindlichen Partikel bzw. andere Teile der Struktur, wie hier die Gitterstäbe, im Mittel dieselben Eigenschaften aufweisen wie ein beliebiges größeres Teilgebiet oder das ganze Gebiet  $\Omega$ . Bei dem regelmäßigen Gitter des letzten Kapitels mit homogen verteilten Materialeigenschaften ist dies schon für die kleine Einheitszelle aus Abbildung 5.1 der Fall. Ist der Werkstoff heterogen, wie beispielsweise Beton, so muss dieser Ausschnitt deutlich größer gewählt werden. Die kleinste Einheit, die sich im Mittel so verhält wie ein deutlich größerer Ausschnitt, wird im Zusammenhang mit rechnerischen Homogenisierungsverfahren oder der  $FE^2$  als repräsentatives Volumenelement (RVE) bezeichnet. Verschiedene Definitionen eines RVEs sind in GITMAN U. A. (2007) zusammengefasst. Im Kern stimmen diese Definitionen jedoch alle, wie folgt, überein: Die Größe eines RVE entspricht der kleinsten Zelle der Mikrostruktur, die die Forderung nach statistischer Homogenität erfüllt. Ein Element, bei dem ein Kontinuum als Stoffgesetz gewählt werden kann, also ein Level 1-Element, muss somit mindestens die Größe des RVE des Materials haben. Ist ein Element zu klein, so bietet ein homogenes Stoffgesetz keine gute Näherung des Werkstoffverhaltens. Das Element wird dann in ein Level 2-Element, bei dem die Mikrostruktur zur Berechnung der Steifigkeitsmatrix explizit berücksichtigt wird, umgewandelt.

Heterogenität kann auf verschiedene Art in das regelmäßige Gitter eingebracht werden. Aufgrund der Lage eines Stabes kann beispielsweise die Stabsteifigkeit variiert werden, indem den Stäben ein unterschiedlicher E-Modul ( $E^A$ ,  $E^M$  und  $E^I$ ) zugewiesen wird. In diesem Kontext werden in dieser Arbeit allerdings keine Level 1-Elemente zur Diskretisierung verwendet, da die gewählten Beispiele zu klein sind, sodass selbst die Mikrostruktur der größten Elemente nicht repräsentativ ist. Sie werden nicht größer gewählt, um direkte numerische Simulationen zu ermöglichen, welche als Referenzlösung dienen sollen und die volle Auflösung der Mikrostruktur erfordern. In Abschnitt 6.2.1 soll dennoch gezeigt werden, wie die Steifigkeitsmatrix  $\mathbf{k}^{(L1)}$  dieser Elemente bestimmt werden kann.

Eine Variation der Festigkeit ergibt sich durch die Wahl verschiedener Werte für die Verzerrung, bei der ein Stab anfängt zu schädigen ( $\kappa_0^A$ ,  $\kappa_0^M$  und  $\kappa_0^I$ ), was allerdings eine materiell nichtlineare Berechnung erfordert.

### 6.2.1 Elementsteifigkeitsmatrix

Bei einer Variation der Steifigkeit werden den Stäben unterschiedliche E-Moduln  $E^A$ ,  $E^M$  und  $E^I$  zugewiesen. Zur Ermittlung eines homogenen Stoffgesetzes aus der Äquivalenz der in einer Einheitszelle gespeicherten Verzerrungsenergie und deren Pendant im Kontinuum entsprechend Abschnitt 5.1.1 genügt es, einen repräsentativen mittleren E-Modul  $E_m$  für eine Gitterrichtung zu finden. Da sowohl Beton als auch dieses Modellmaterial auf der Makroskala als homogene, isotrope Werkstoffe betrachtet werden können, sind die E-Moduln der anderen beiden Richtungen dieselben.

Zur Ermittlung eines repräsentativen mittleren E-Moduls  $E_m$  wird eine Reihe von Stäben in einer Gitterrichtung benötigt, bei der Stäbe aller drei Phasen anteilig so vertreten sind, dass diese Reihe repräsentativ für alle Reihen und Gitterrichtungen ist. Die Stäbe dieser Reihe entsprechen in Reihe geschalteten Federn mit einer Gesamtlänge  $L_{\text{tot}}$ . Alle Stäbe innerhalb eines Aggregats aneinander gereiht haben die Länge  $L_A$ . Für die Stäbe, die sich in der Matrix befinden, ergibt sich die Länge  $L_M$  und die, die ein Interface bilden, haben zusammen die Länge  $L_I$ . Die Gesamtlänge  $L_{\text{tot}}$  entspricht der Summe aus  $L_A$ ,  $L_M$  und  $L_I$ , siehe Abbildung 6.3. Die Anteile aus Aggregat, Matrix und Interface an allen Stäben dieser Reihe können damit, wie folgt, ermittelt werden:

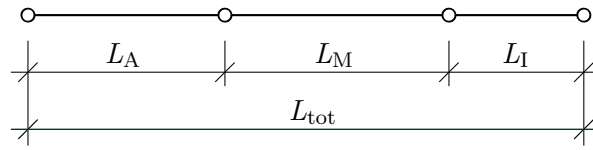
$$\varphi^A = \frac{L_A}{L_{\text{tot}}}, \quad \varphi^M = \frac{L_M}{L_{\text{tot}}} \quad \text{und} \quad \varphi^I = \frac{L_I}{L_{\text{tot}}}. \quad (6.1)$$

Die Kraft einer Feder erhält man im Allgemeinen aus  $F = c \cdot \Delta u$ . Zusammen mit  $\sigma = F/A = E_m \varepsilon = E_m \cdot \Delta u / L_{\text{tot}}$  folgt daraus für die Steifigkeit der Feder  $c = E_m A / L_{\text{tot}}$ . Die Steifigkeit einer Feder, die sich durch in Reihe geschaltete Federn ergibt, lässt sich außerdem durch

$$\frac{1}{c} = \frac{1}{c^A} + \frac{1}{c^M} + \frac{1}{c^I} \quad (6.2)$$

berechnen. Unter der Voraussetzung, dass alle Stäbe dieselbe Querschnittsfläche  $A$  haben, ergibt sich durch Einsetzen von (6.1) und der entsprechenden Federsteifigkeiten  $c^A$ ,  $c^M$  und  $c^I$  in (6.2)

$$\frac{1}{E_m} = \frac{\varphi^A}{E^A} + \frac{\varphi^M}{E^M} + \frac{\varphi^I}{E^I}. \quad (6.3)$$



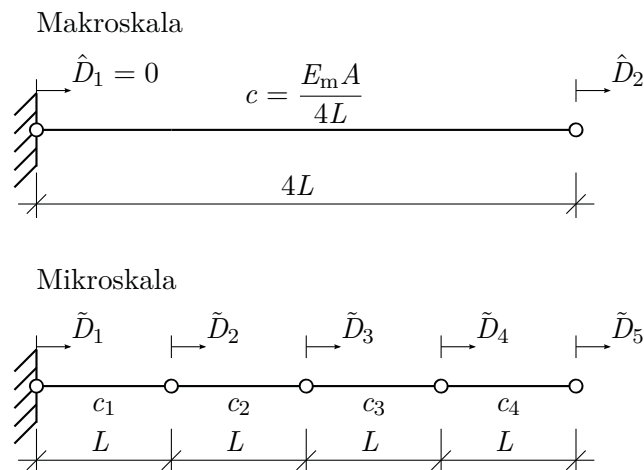
**Abbildung 6.3:** Anteilige Länge der Stäbe in den Aggregaten, der Matrix und den Interfaces.

Dabei wird die Steifigkeit  $c^A$  der Ersatzfeder aller Stäbe im Aggregat durch  $c^A = E^A A / L_A = E^A A / (\varphi^A L_{\text{tot}})$  berechnet und analog die Steifigkeiten  $c^M$  und  $c^I$ . Dieses Vorgehen wurde beispielsweise auch bei BAŽANT U. A. (1990) und MONTERO-CHACÓN UND MEDINA (2013) zur Berechnung des E-Moduls eines Stabes zwischen zwei Partikeln eingesetzt, wobei der Stab durch unterschiedliche Phasen führt und daher aus verschiedenen Materialien besteht.

Nach Gleichung (6.3) genügt es, statistisch gemittelte Werte für die Anteile an Stäben der jeweiligen Phase zu kennen, nämlich  $\varphi^A$ ,  $\varphi^M$  und  $\varphi^I$ . Ist der gemittelte E-Modul  $E_m$  bekannt, kann die Materialmatrix  $\mathbf{C}$  wie in Abschnitt 5.1.1 berechnet werden, allerdings mit  $E_m$  statt  $E$ . Die Steifigkeitsmatrix  $\mathbf{k}^{(L1)}$  erhält man anschließend durch Gleichung (5.4).

## 6.2.2 Materielle Nichtlinearität

Wie im homogenen Fall wird auch bei heterogenem Material in Level 1-Elementen keine Schädigung berücksichtigt. Sobald in einem Level 1-Element ein Stab anfängt zu schädigen, wird das Element in ein Level 2-Element umgewandelt. Dies ist dann der Fall, wenn in einem Stab die Grenzverzerrung  $\kappa_0$  überschritten wird. Haben die Stäbe alle einen unterschiedlichen E-Modul, so werden sie unterschiedlich gedehnt und fangen entsprechend zu einem anderen Zeitpunkt an zu schädigen. Dieser Zeitpunkt kann mit einem Level 1-Element nicht festgestellt werden. Daher wird bei einer materiell nichtlinearen Rechnung ausschließlich die Festigkeit variiert und für alle Stäbe derselbe E-Modul  $E$  angenommen. Das Materialgesetz ist somit bis zu dem Zeitpunkt, an dem Schädigung einsetzt, identisch mit dem homogener Materialien und alle Stäbe einer Richtung erfahren dieselbe Verzerrung. Die Materialmatrix  $\mathbf{C}$  kann, wie in Abschnitt 5.1.1 beschrieben, berechnet werden und damit die Steifigkeitsmatrix  $\mathbf{k}_{\text{tan}}^{(L1)}$ . Der innere Kraftvektor  $\mathbf{f}_{\text{int}}^{(L1)}$  wird nach Gleichung (5.5) berechnet. Ein Element wird in ein Level 2-Element umgewandelt, wenn in einer der drei Gitterrichtungen die kleinste Grenzverzerrung aus  $\kappa_0^A$ ,  $\kappa_0^M$  und  $\kappa_0^I$  überschritten wird.



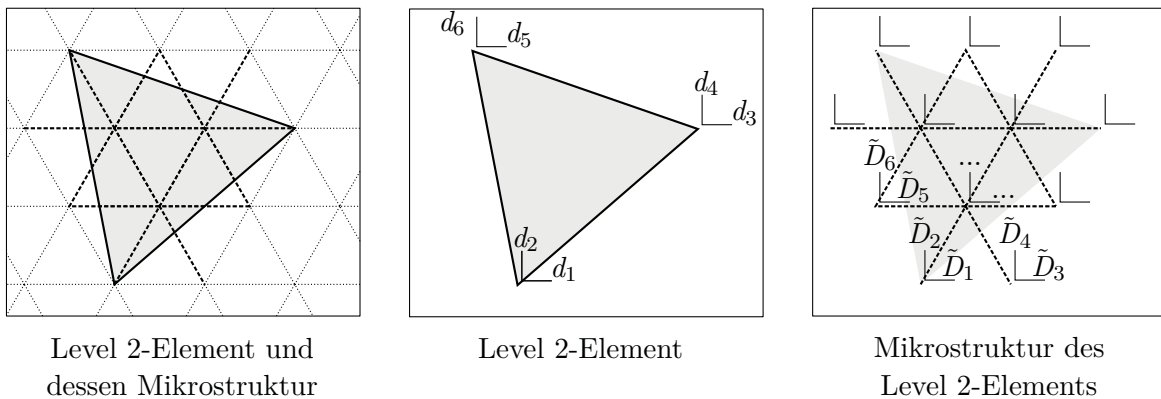
**Abbildung 6.4:** Eindimensionaler Stab aus vier Teilstäben unterschiedlicher Steifigkeit unter Zugbelastung.

### 6.3 Approximiertes diskretes Modell (Level 2)

Wie schon zu Beginn des Kapitels vorweggenommen, ergeben sich bei der Berechnung der Steifigkeitsmatrix von Level 2-Elementen Probleme. Diese treten auf, wenn zur Berechnung der Verschiebungen der Partikel im Element auch bei heterogener Verteilung der Materialeigenschaften die Cauchy-Born-Regel angewendet wird. Das heißt, die Partikel werden mit dem Verschiebungsfeld des finiten Elements mitbewegt. Die Partikelverschiebungen werden demnach durch Interpolation der Verschiebungen der Elementknoten nach Gleichung (5.6) berechnet. Die linearen Ansätze der Dreieckselemente führen dazu, dass alle Stäbe, die in eine Richtung zeigen, gleich stark verzerrt werden. Geschieht dies bei einem heterogenen Material ebenfalls, so führt es dazu, dass sich die Stabkräfte der Mikrostruktur nicht im Gleichgewicht befinden.

Dies kann am Beispiel des in Abbildung 6.4 dargestellten eindimensionalen Stabes der Länge  $4L$  gezeigt werden, dessen linkes Ende unverschieblich gelagert ist ( $\hat{D}_1 = 0$ ) und auf dessen rechtes Ende eine Verschiebung  $\hat{D}_2$  aufgebracht wird. Diese Belastung führt zu einer über die gesamte Länge des Stabes konstanten Kraft. Der Stab besteht auf der Mikroskala aus vier Stäben der Länge  $L$ , die eine unterschiedliche Steifigkeit  $c_i$  ( $i = 1$  bis  $4$ ) besitzen. Die Partikelverschiebungen  $\tilde{D}_1$  bis  $\tilde{D}_5$  können durch lineare Interpolation der Knotenverschiebungen  $\hat{D}_1$  und  $\hat{D}_2$  berechnet werden. Dadurch ergibt sich für alle Stäbe der Mikrostruktur dieselbe Relativverschiebung  $\Delta u = \tilde{D}_{i+1} - \tilde{D}_i$  der Anfangs- und Endpartikel der Stäbe und damit auch dieselbe Verzerrung  $\varepsilon = \Delta u/L$ . Wenn sich die Steifigkeiten  $c_i$  der Stäbe, wie im heterogenen Fall, unterscheiden, erhält man mit  $F_i = c_i \cdot \Delta u$  für alle Stäbe eine andere Kraft und nicht, wie es richtig wäre,





**Abbildung 6.5:** Level 2-Element und dessen Mikrostruktur mit den Verschiebungsfreiheitsgraden  $\mathbf{d}$  und  $\tilde{\mathbf{D}}$ .

eine über alle Stäbe konstante Kraft  $F$ . Der durch die aufgezwungenen Verschiebungen erhaltene Zustand ist somit kein Gleichgewichtszustand.

Unabhängig davon, wie die Heterogenität eingebracht wird, sind bei einem Level 2-Element mit heterogenem Material die Steifigkeiten der Stäbe unterschiedlich, weil sie entweder von Beginn an unterschiedlich zugewiesen werden, oder weil die Stäbe zu unterschiedlichen Zeitpunkten anfangen zu schädigen. Für den Fall einer heterogenen Mikrostruktur muss daher ein alternativer Weg gefunden werden, um die Steifigkeitsmatrix  $\mathbf{k}^{(L2)}$  von Level 2-Elementen zu berechnen.

### 6.3.1 Elementsteifigkeitsmatrix

Da zur Berechnung der Steifigkeitsmatrix von Level 2-Elementen die im Hintergrund des Elements liegende Mikrostruktur mit einbezogen werden soll, liegt es nahe, diese als eigenständiges Unterproblem zu behandeln, das seine Randbedingungen vom Makroelement übergeben bekommt. Aufgrund der Unabhängigkeit der Mikrostruktur eines Level 2-Elements von der Mikrostruktur anderer Level 2-Elemente, können die Steifigkeitsmatrizen der Level 2-Elemente parallel berechnet werden.

In Abbildung 6.5 ist auf der linken Seite beispielhaft ein auf dem Hintergrundgitter<sup>2</sup> liegendes Level 2-Element mit seiner Mikrostruktur dargestellt. Dieses Gesamtproblem lässt sich aufteilen in das Problem auf der Makroebene und das auf der Mikroebene, wie in der Mitte und rechts in Abbildung 6.5 gezeigt. Auf der Makroebene wird zur globalen Gleichungslösung das Level 2-Element benötigt, welches einem Dreieckselement mit den sechs Verschiebungsfreiheitsgraden  $\mathbf{d}$  entspricht. Die Mikrostruktur des Elements wird

<sup>2</sup>Im Folgenden bezeichnet das Hintergrundgitter die Mikrostruktur im gesamten Gebiet, während mit der Bezeichnung „Mikrostruktur“ nur die Mikrostruktur eines Elements gemeint ist.

eigenständig diskretisiert und stellt das zu lösende Unterproblem dar. Es dient dazu, die Steifigkeit der Mikrostruktur zu ermitteln, um diese anschließend an das Makroelement in Form der Steifigkeitsmatrix zurückzugeben. Zur Mikrodiskretisierung eines Elements gehören alle Stäbe, die sich zumindest teilweise im Element befinden. Diese Mikrodiskretisierung muss den Elementen während der Rechnung bekannt sein und wird daher für jedes Level 2-Element neu angelegt. Die Materialeigenschaften der Stäbe sind am Hintergrundgitter gespeichert und werden diesem entnommen. Ändern sich diese im Zuge einer materiell nichtlinearen Berechnung, so werden diese Änderungen auch dem Hintergrundgitter übergeben. So ist sichergestellt, dass die Belastungsgeschichte der Stäbe bei Veränderung des Netzes nicht verloren geht. Das Element behält seine Mikrodiskretisierung solange bei, bis es sich im Zuge der Netzverfeinerung verändert. Der Zusammenhang zwischen der Mikrostruktur eines Level 2-Elements und dessen Steifigkeitsmatrix wird über die Eigenwerte und Eigenvektoren des Elements hergestellt. Die Herleitung dazu wird im Folgenden präsentiert.

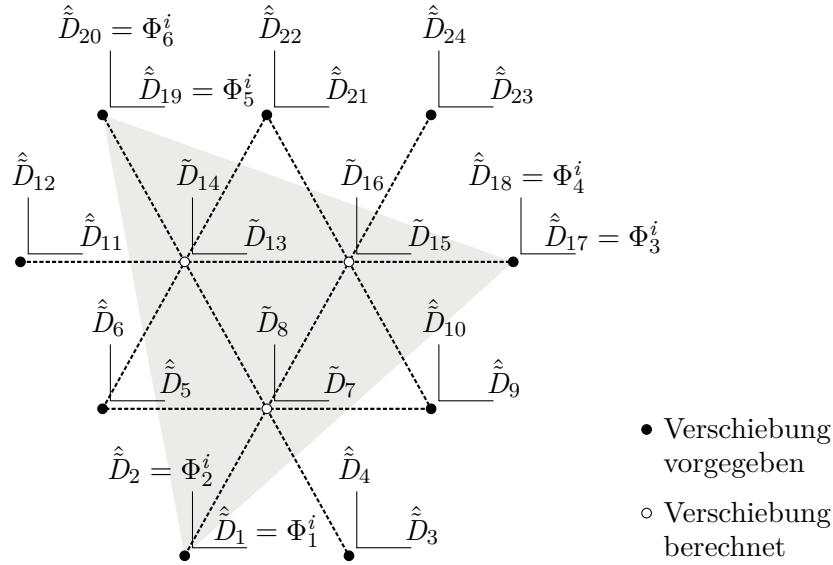
Die Steifigkeitsmatrix ist in ihre Eigenwerte  $\lambda^i$  und (normierten) Eigenvektoren  $\Phi^i$  zerlegbar.  $i$  kann dabei jeden Wert zwischen eins und der Anzahl der Freiheitsgrade annehmen. Die Anzahl der Freiheitsgrade entspricht der Anzahl an Zeilen und Spalten der Steifigkeitsmatrix, in diesem Fall sechs. Die Eigenvektoren geben einen Deformationszustand vor und die Eigenwerte die entsprechende Steifigkeit der Struktur in diesem Zustand. Im Zweidimensionalen sind dabei immer (mindestens) drei Eigenwerte Null. Sie gehören zu den drei Starrkörperbewegungen: Einer horizontalen und einer vertikalen Verschiebung des Elements und seiner Rotation. In den Eigenwerten und Eigenvektoren sind sämtliche Informationen der Matrix enthalten. Sind sie bekannt, so lässt sich die Matrix daher durch

$$\mathbf{k}^{(L2)} = \mathbf{S}\mathbf{\Lambda}\mathbf{S}^{-1} \quad (6.4)$$

aus ihren Eigenwerten und den normierten Eigenvektoren berechnen (STRANG 1986), hier gezeigt für die Level 2-Steifigkeitsmatrix  $\mathbf{k}^{(L2)}$ .  $\mathbf{\Lambda}$  ist dabei eine Diagonalmatrix mit den Eigenwerten  $\lambda^1$  bis  $\lambda^6$  auf der Hauptdiagonalen. Die sechs normierten Eigenvektoren  $\Phi^1$  bis  $\Phi^6$  bilden die Spalten der Matrix

$$\mathbf{S} = \left[ \Phi^1 \ \Phi^2 \ \Phi^3 \ \Phi^4 \ \Phi^5 \ \Phi^6 \right]. \quad (6.5)$$

Ist die Matrix nicht bekannt, so sind dies auch weder ihre Eigenwerte noch ihre Eigenvektoren. Um den Weg über die Eigenwerte und Eigenvektoren zur Ermittlung der Steifigkeitsmatrix dennoch gehen zu können, wird die Annahme getroffen, dass die Eigenvektoren der Level 2-Elemente identisch mit den Eigenvektoren entsprechender Level 1-Elemente sind. Je homogener die Mikrostruktur des Elements tatsächlich ist, desto besser passt diese Annahme. Das Element wird also zunächst so behandelt wie ein Le-



**Abbildung 6.6:** Mikrodiskretisierung eines Level 2-Elements mit Randbedingungen.

vel 1-Element, als besäße es ein homogenes bzw. homogenisiertes Stoffgesetz. Es wird die Steifigkeitsmatrix  $\mathbf{k}^{(L1)}$  wie im vorigen Abschnitt berechnet und daraus die Eigenvektoren  $\Phi^1$  bis  $\Phi^6$ . Die Matrix  $\mathbf{S}$  ist damit, zumindest als Näherung, bekannt.

Zur Bestimmung der Eigenwerte des Level 2-Elements werden Unterprobleme auf der Ebene der Mikrostruktur betrachtet. Da es insgesamt sechs Eigenwerte gibt, ist die Lösung von insgesamt sechs Unterproblemen erforderlich. Das Ziel ist es, die Steifigkeit der Mikrostruktur in den sechs Eigenformen zu ermitteln und als Eigenwerte  $\lambda^i$  auf das Makroelement zu übertragen. Der  $i$ -te Eigenvektor beschreibt die Deformation des Makroelements und gleichzeitig den Zustand, der über Randbedingungen an das Stabwerk der Mikrodiskretisierung übertragen werden muss. Dies geschieht über Verschiebungsrandbedingungen. Die Verschiebungen der Knoten des Level 2-Elements werden, wie in Abbildung 6.6 dargestellt, an den direkt unter diesen Knoten liegenden Partikeln als Verschiebungsrandbedingung aufgebracht. Damit kein kinematisches System entsteht, werden an allen Knoten der Mikrodiskretisierung, die den Rand der Struktur bilden, die Verschiebungen  $\hat{\mathbf{D}}^i$  vorgeschrieben. Diese vorgeschriebenen Verschiebungen werden für jedes Partikel  $P$  zwischen den Knotenverschiebungen  $\Phi^i$  interpoliert:

$$\hat{\mathbf{d}}^{P,i}(\boldsymbol{\xi}^P) = \mathbf{N}(\boldsymbol{\xi}^P)\Phi^i. \quad (6.6)$$

Wie im homogenen Fall werden auch hier die außerhalb des Elements liegenden Knoten vereinfachend mit dem Verschiebungsfeld des Elements bewegt. Werden die Randbedingungen wie oben vorgeschlagen aufgebracht, sind in dem Beispiel aus Abbildung 6.6 die drei im Element liegenden Knoten die einzigen, deren Verschiebungen unbekannt sind und für die gelöst werden muss. Wenn die Elemente verhältnismäßig klein sind und in

der Mikrodiskretisierung nur wenige oder gar keine Knoten ohne Verschiebungsrandbedingungen existieren, ist zu erwarten, dass sich die Struktur steifer verhält als in der vollständig aufgelösten Referenzlösung.

Da es sich bei den hier aufgebrachten Verschiebungszuständen um keine Zustände handelt, die während der Belastungsgeschichte durchlaufen werden, wird sowohl im linear elastischen als auch im materiell nichtlinearen Fall auf der Mikroebene die lineare Gleichung

$$\underbrace{\tilde{\mathbf{K}}\tilde{\mathbf{D}}^i}_{\tilde{\mathbf{F}}_{\text{int}}^i} = \tilde{\mathbf{F}}_{\text{ext}}^i \quad (6.7)$$

gelöst. Schädigungsfortschritt findet daher in diesen Zuständen nicht statt und wird, wie in Abschnitt 6.3.2 zu sehen, separat behandelt.  $\tilde{\mathbf{K}}$  ist die aus den Steifigkeitsmatrizen aller Stabelemente  $\tilde{\mathbf{k}}$  assemblierte Steifigkeitsmatrix des Unterproblems:

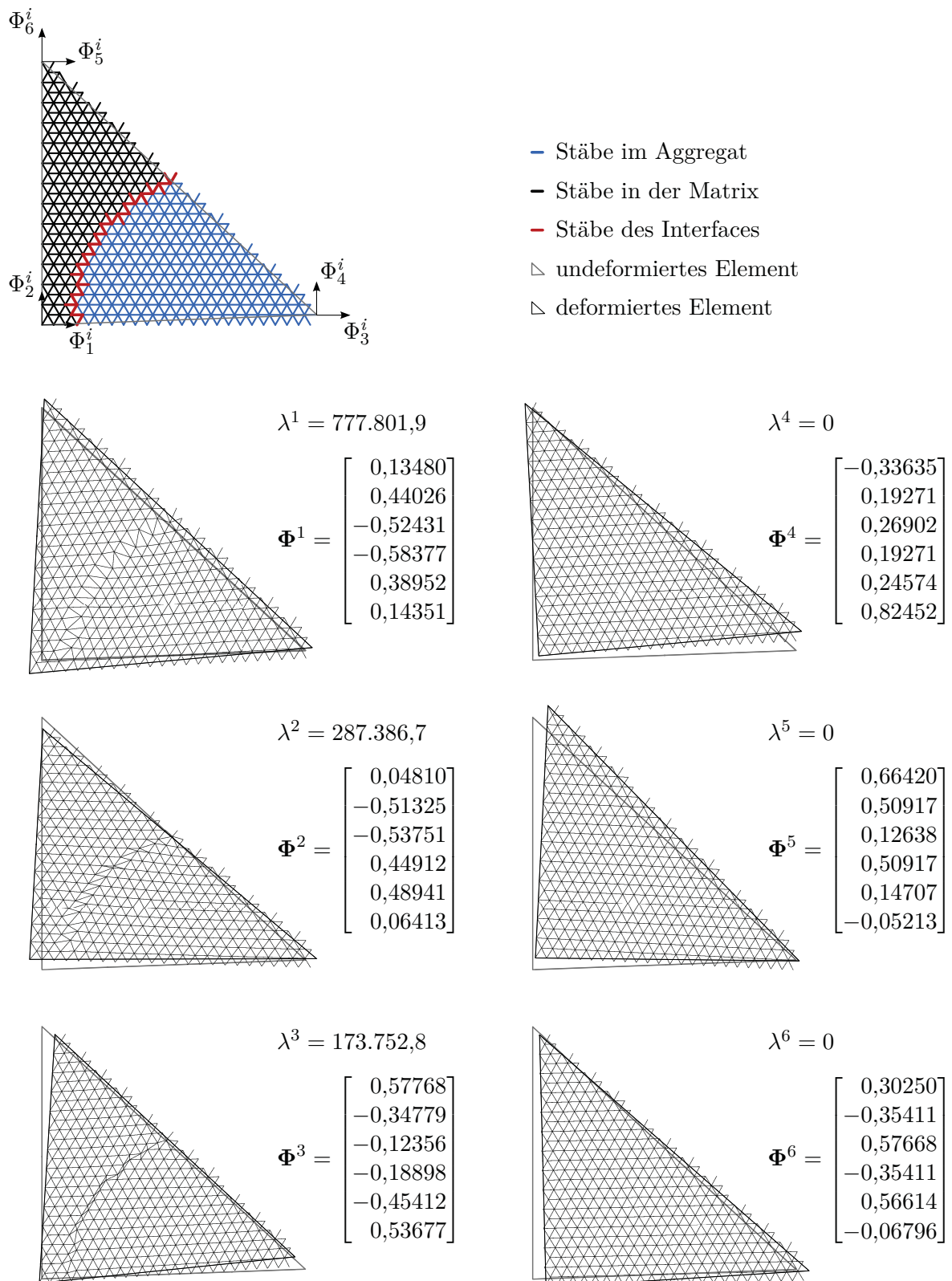
$$\tilde{\mathbf{K}} = \bigcup_{e=1}^{n_{\text{truss}}} \tilde{\mathbf{k}}^e \quad \text{mit} \quad \tilde{\mathbf{k}} = \frac{EA}{L} \begin{bmatrix} L_x^2 & L_x L_y & -L_x^2 & -L_x L_y \\ L_x L_y & L_y^2 & -L_x L_y & -L_y^2 \\ -L_x^2 & -L_x L_y & L_x^2 & L_x L_y \\ -L_x L_y & -L_y^2 & L_x L_y & L_y^2 \end{bmatrix}. \quad (6.8)$$

Je nach Position des Stabes, also im Aggregat, in der Matrix oder im Interface, nimmt der E-Modul  $E$  bei einer Variation der Steifigkeit die Werte  $E^A$ ,  $E^M$  oder  $E^I$  an. Die Mikrostruktur wird hier somit exakt abgebildet. Das heißt die Materialeigenschaften der Stäbe sind dieselben wie im vollständig aufgelösten Modell.

In Abbildung 6.7 sind die sechs Eigenformen eines Elements mit heterogener Mikrostruktur dargestellt. Das Element stammt aus dem Beispiel in Abschnitt 7.2.1 und ist das Element 52 in Abbildung 7.2. Den Stäben der Mikrostruktur im Aggregat (blau) wurde die größte Steifigkeit zugewiesen und denen des Interfaces (rot) die kleinste. Die Steifigkeit der Stäbe in der Matrix (schwarz) liegt dazwischen. Die auf der rechten Seite dargestellten Eigenformen (4, 5 und 6) geben die Starrkörperbewegungen wieder. An den zu den Eigenvektoren 1, 2 und 3 gehörenden Verschiebungsformen ist zu sehen, dass bei der Lösung der Unterprobleme die heterogene Mikrostruktur berücksichtigt wird.

Um die beiden Ebenen, also das Makroelement und seine Mikrostruktur, miteinander in Bezug zu setzen, wird gefordert, dass sich die Energien im Feinskalenmodell und im Grobskalenmodell entsprechen. Somit erhält man folgende Energiegleichung:

$$\frac{1}{2}(\mathbf{f}_{\text{int}}^i)^T \boldsymbol{\Phi}^i = \frac{1}{2}(\tilde{\mathbf{F}}_{\text{int}}^i)^T \tilde{\mathbf{D}}^i. \quad (6.9)$$



**Abbildung 6.7:** Die Mikrostruktur von Element 52 (siehe Abbildung 7.2) aus dem Beispiel in Abschnitt 7.2.1 in den sechs Eigenformen (20-fach überhöht).

$\mathbf{f}_{\text{int}}^i$  ist darin der innere Kraftvektor des Level 2-Elements.  $\tilde{\mathbf{F}}_{\text{int}}^i$  und  $\tilde{\mathbf{D}}^i$  sind die Kraft- und Verschiebungsvektoren der Mikrodiskretisierung des entsprechenden Elements in der  $i$ -ten Eigenform.

Wird der  $i$ -te Eigenvektor  $\Phi^i$  als Knotenverschiebungen auf das Level 2-Element aufgebracht, so kann der Kraftvektor für diesen Verschiebungszustand, wie nachfolgender Gleichung entnommen werden kann, entweder über die Elementsteifigkeitsmatrix  $\mathbf{k}^{(L2)}$  berechnet werden, oder schlicht durch den zugehörigen Eigenwert  $\lambda^i$ :

$$\mathbf{k}^{(L2)} \Phi^i = \underbrace{\lambda^i \Phi^i}_{\mathbf{f}_{\text{int}}^i} = \mathbf{f}_{\text{ext}}^i. \quad (6.10)$$

Wird Gleichung (6.10) in Gleichung (6.9) eingesetzt, ergibt sich folgende Gleichung<sup>3</sup> zur Berechnung der Eigenwerte  $\lambda^i$ :

$$\frac{1}{2} \lambda^i (\Phi^i)^T \Phi^i = \frac{1}{2} (\tilde{\mathbf{F}}_{\text{int}}^i)^T \tilde{\mathbf{D}}^i \quad \Rightarrow \quad \lambda^i = \frac{(\tilde{\mathbf{F}}_{\text{int}}^i)^T \tilde{\mathbf{D}}^i}{(\Phi^i)^T \Phi^i}. \quad (6.11)$$

Können die drei Eigenvektoren, die zu den drei Starrkörperbewegungen gehören und deren Eigenwerte Null sind, zuvor identifiziert werden, so genügt dreimaliges Lösen von Gleichung (6.11) für die anderen drei Eigenformen. Die Eigenwerte geben die Steifigkeit der Mikrostruktur für diese Zustände wieder.

Damit ist die Matrix  $\Lambda$  nun bekannt und Gleichung (6.4) ergibt die Steifigkeitsmatrix des Level 2-Elements  $\mathbf{k}^{(L2)}$ . In Abbildung 6.8 ist der Ablauf zur Berechnung der Level 2-Steifigkeitsmatrix im Fall einer heterogenen Mikrostruktur mit linearem Stoffgesetz zusammengefasst.

### 6.3.2 Materielle Nichtlinearität

Wie im linearen wird auch im nichtlinearen Fall die Steifigkeitsmatrix bei Materialien mit heterogener Mikrostruktur aus den Eigenwerten und Eigenvektoren berechnet und unterscheidet sich damit grundlegend von der Berechnung der Steifigkeitsmatrix bei homogenen Materialien. Im Unterschied zur in Abschnitt 6.3.1 berechneten Steifigkeitsmatrix kommt nun hinzu, dass einzelne Stäbe schädigen können. Es reicht nun nicht mehr aus, den Grad der Schädigung lediglich für die drei Stabrichtungen zu bestimmen. Da sich die Materialeigenschaften von Stab zu Stab unterscheiden und daher Stäbe unterschiedlich gedehnt werden können, muss jeder einzelne Stab individuell schädigen können.

---

<sup>3</sup>Da die Eigenvektoren normiert sind, gilt  $(\Phi^i)^T \Phi^i = 1 \text{ m}^2$  und Gleichung (6.11) lässt sich vereinfachen zu  $\lambda^i = (\tilde{\mathbf{F}}_{\text{int}}^i)^T \tilde{\mathbf{D}}^i \cdot (1/\text{m}^2)$ .

Berechnung von $\mathbf{k}^{(L1)}$ analog Abschnitt 5.1.1 mit $E = E_m$ (6.3)	
Berechnung der 6 normierten Eigenvektoren $\Phi^i$ von $\mathbf{k}^{(L1)} \rightarrow$ Spalten von $\mathbf{S}$ (6.5)	
Schleife über die 6 Eigenvektoren ( $i = 1$ bis 6)	
Randbedingungen $\hat{\mathbf{D}}^i$ aufbringen (6.6)	Mikroebene
Assemblierung $\tilde{\mathbf{K}}$ und $\tilde{\mathbf{F}}_{\text{ext}}^i$	
Lösen von $\tilde{\mathbf{K}}\tilde{\mathbf{D}}^i = \tilde{\mathbf{F}}_{\text{ext}}^i = \tilde{\mathbf{F}}_{\text{int}}^i$	
Berechnung des Eigenwerts $\Lambda_{ii} = \frac{(\tilde{\mathbf{F}}_{\text{int}}^i)^T \tilde{\mathbf{D}}^i}{(\Phi^i)^T \Phi^i}$	
Berechnung der Level 2-StEIFigkeitsmatrix $\mathbf{k}^{(L2)} = \mathbf{S}\mathbf{A}\mathbf{S}^{-1}$	

**Abbildung 6.8:** Ablauf der Berechnung der Steifigkeitsmatrix eines Level 2-Elements im Fall einer heterogenen Mikrostruktur und einem linearen Stoffgesetz.

Die Berechnung der Steifigkeitsmatrix eines Level 2-Elements  $\mathbf{k}_{\text{tan}}^{(L2)}$  mit heterogener Mikrostruktur und schädigenden Stäben und des zur Lösung des linearisierten globalen Gleichungssystems (3.22) benötigten inneren Kraftvektors  $\mathbf{f}_{\text{int}}^{(L2)}$  findet in drei Abschnitten statt. Der erste Teil der Berechnung dient der Ermittlung der aktuellen Schädigung der Stäbe der Mikrostruktur und der Aktualisierung der Geschichtsvariablen  $\kappa$  der Stäbe. Im zweiten Abschnitt wird die Tangentensteifigkeitsmatrix  $\mathbf{k}_{\text{tan}}^{(L2)}$  ermittelt und im letzten Teil der innere Kraftvektor  $\mathbf{f}_{\text{int}}^{(L2)}$ . Diese drei Abschnitte werden im Folgenden genauer betrachtet. Abbildung 6.9 veranschaulicht den Berechnungsablauf.

### Aktualisierung der Geschichtsvariablen

Um festzustellen, wie weit die Schädigung in den Stäben der Mikrostruktur des Elements fortgeschritten ist, wird die Mikrostruktur als eigenständiges Berechnungsproblem betrachtet und gelöst. Die aktuellen Knotenverschiebungen  $\mathbf{d}$  des globalen Level 2-Dreieckselements bilden die Randbedingungen dieses Unterproblems. Sie werden, zwischen den Knoten interpoliert und auf alle am Rand der Mikrostruktur liegenden Knoten entsprechend Gleichung (6.6) als Verschiebungsrandbedingungen  $\hat{\mathbf{D}}$  aufgebracht.

Die materielle Nichtlinearität erfordert die Lösung eines linearisierten Gleichungssystems entsprechend Gleichung (3.22)

$$\tilde{\mathbf{K}}_{\text{tan}}^i \Delta \tilde{\mathbf{D}}^{i+1} = -\tilde{\mathbf{R}}(\tilde{\mathbf{D}}^i) = \tilde{\mathbf{F}}_{\text{ext}} - \tilde{\mathbf{F}}_{\text{int}}(\tilde{\mathbf{D}}^i), \quad (6.12)$$

Geschichtsaktualisierung	Randbedingungen $\hat{\mathbf{D}}$ auf das Mikroproblem aufbringen		Mikroebene
		Assemblierung $\tilde{\mathbf{K}}_{\text{tan}}^i, \tilde{\mathbf{F}}_{\text{int}}(\tilde{\mathbf{D}}^i), \tilde{\mathbf{F}}_{\text{ext}}$ und $\tilde{\mathbf{R}}(\tilde{\mathbf{D}}^i)$	
		Lösen von $\tilde{\mathbf{K}}_{\text{tan}}^i \Delta \tilde{\mathbf{D}}^{i+1} = -\tilde{\mathbf{R}}(\tilde{\mathbf{D}}^i)$	
		Aktualisierung $\tilde{\mathbf{D}}^{i+1} = \tilde{\mathbf{D}}^i + \Delta \tilde{\mathbf{D}}^{i+1}$	
	Iterationsschleife über $i$ – Konvergenz prüfen: $\ \tilde{\mathbf{R}}\  < \varepsilon_{\text{tol}}$		
Aktualisierung der Geschichtsvariablen $\kappa$ (3.43)			
Tangentensteifigkeitsmatrix	Berechnung von $\mathbf{k}^{(L1)}$ analog Abschnitt 5.1.1 mit $E = E_{\text{m}}$ (6.3)		Mikroebene
	Berechnung der 6 normierten Eigenvektoren $\Phi^i$ von $\mathbf{k}^{(L1)} \rightarrow$ Spalten von $\mathbf{S}$ (6.5)		
	Schleife über die 6 Eigenvektoren ( $i = 1$ bis 6)		
		Randbedingungen $\hat{\mathbf{D}}^i$ aufbringen (6.6)	
		Assemblierung $\tilde{\mathbf{K}}_{\text{tan}} (E = E_{\text{tan}})$ und $\tilde{\mathbf{F}}_{\text{ext}}^i$	
	Lösen von $\tilde{\mathbf{K}}_{\text{tan}} \tilde{\mathbf{D}}^i = \tilde{\mathbf{F}}_{\text{ext}}^i = \tilde{\mathbf{F}}_{\text{int}}^i$		
	Berechnung des Eigenwerts $\Lambda_{ii} = \frac{(\tilde{\mathbf{F}}_{\text{int}}^i)^T \tilde{\mathbf{D}}^i}{(\Phi^i)^T \Phi^i}$		
Berechnung der Tangentensteifigkeitsmatrix $\mathbf{k}_{\text{tan}}^{(L2)} = \mathbf{S} \Lambda \mathbf{S}^{-1}$			
interner Kraftvektor	Schleife über die 6 Eigenvektoren ( $i = 1$ bis 6)		Mikroebene
		Randbedingungen $\hat{\mathbf{D}}^i$ aufbringen (6.6)	
		Assemblierung $\tilde{\mathbf{K}}_{\text{sec}} (E = E_{\text{sec}})$ und $\tilde{\mathbf{F}}_{\text{ext}}^i$	
		Lösen von $\tilde{\mathbf{K}}_{\text{sec}} \tilde{\mathbf{D}}^i = \tilde{\mathbf{F}}_{\text{ext}}^i = \tilde{\mathbf{F}}_{\text{int}}^i$	
		Berechnung des Eigenwerts $\Lambda_{ii} = \frac{(\tilde{\mathbf{F}}_{\text{int}}^i)^T \tilde{\mathbf{D}}^i}{(\Phi^i)^T \Phi^i}$	
Berechnung der Sekantensteifigkeitsmatrix $\mathbf{k}_{\text{sec}}^{(L2)} = \mathbf{S} \Lambda \mathbf{S}^{-1}$			
Berechnung des internen Kraftvektors $\mathbf{f}_{\text{int}}^{(L2)} = \mathbf{k}_{\text{sec}}^{(L2)} \mathbf{d}$			

**Abbildung 6.9:** Ablauf der Berechnung der Steifigkeitsmatrix und des inneren Kraftvektors eines Level-2-Elements im Fall einer heterogenen Mikrostruktur und eines nichtlinearen Stoffgesetzes.



jedoch nicht auf globaler Ebene, sondern auf der Ebene der Mikrostruktur des Elements, für das die Level 2-Steifigkeitsmatrix berechnet werden soll. Die Steifigkeitsmatrix  $\tilde{\mathbf{K}}_{\text{tan}}$  erhält man durch Assemblierung der Steifigkeitsmatrizen  $\tilde{\mathbf{k}}_{\text{tan}}$  aller Stäbe der Mikrostruktur und die inneren Kraftvektoren  $\tilde{\mathbf{f}}_{\text{int}}$  werden zum inneren Kraftvektor  $\tilde{\mathbf{F}}_{\text{int}}(\tilde{\mathbf{D}})$  assembliert. Mit der Materialroutine aus Abbildung 3.3 werden der aktuelle Schädigungsparameter  $d$  und die aktuelle Stabsteifigkeit berechnet. Dies beinhaltet sowohl die Materialtangente  $E_{\text{tan}}$  als auch die Materialsekante  $E_{\text{sec}}$ . Die Materialtangente  $E_{\text{tan}}$  wird zur Berechnung der Steifigkeitsmatrix  $\tilde{\mathbf{k}}_{\text{tan}}$  eines Stabes im System benötigt und ersetzt den elastischen E-Modul  $E$  in Gleichung (6.8). Die Berechnung der inneren Kraftvektoren  $\tilde{\mathbf{f}}_{\text{int}}$  der einzelnen Stäbe findet nach Gleichung (5.11) statt, wozu die Materialsekante  $E_{\text{sec}}$  benötigt wird. Die Eingangsgrößen für die Materialroutine sind die aktuelle Verzerrung  $\varepsilon$  und die in der Belastungsgeschichte bis dahin maximal erreichte Verzerrung  $\kappa$  des jeweiligen Stabes. Damit sind alle Größen, die zur Lösung von Gleichung (6.12) benötigt werden, bekannt.

Das Ergebnis der Newton-Raphson-Iteration sind die Verschiebungen  $\tilde{\mathbf{D}}$  der innen liegenden Knoten der Mikrostruktur, für die das Stabwerk unter den gegebenen Verschiebungsrandbedingungen im Gleichgewicht ist. Sind alle Knotenverschiebungen der Mikrostruktur bekannt, so können nach Gleichung (5.12) die Verzerrungen  $\varepsilon(\tilde{\mathbf{d}})$  der Stäbe und damit deren Schädigungsfortschritt berechnet werden. Bevor mit der Rechnung fortgefahren werden kann, muss nach Erreichen von Konvergenz die Geschichtsvariable  $\kappa$  aller Stäbe wie in Gleichung (3.43) aktualisiert werden. Sie wird während der Rechnung sowohl in den Elementen der Mikrodiskretisierung gespeichert und aktualisiert als auch in dem zu Beginn angelegten Hintergrundgitter. Dadurch ist garantiert, dass die Informationen der Belastungsgeschichte eines Stabes bei Veränderung des Netzes an neue Elemente richtig übergeben werden können. Gehört ein Stab zu zwei unterschiedlichen Elementen, so wird an dem Stab des Hintergrundgitters nur die Verzerrung  $\kappa$  gespeichert, die aus dem Element stammt, dessen Steifigkeitsmatrix zuletzt berechnet wurde. Aufgrund des Netzverfeinerungskriteriums ist davon auszugehen, dass die in der Belastungsgeschichte maximal aufgetretenen Verzerrungen  $\kappa$  des Stabes der beiden benachbarten Elemente und somit auch deren Schädigungsfortschritt ähnlich sind. Würden sich die Verzerrungen stark unterscheiden, würden die Elemente verfeinert.

### Berechnung der Tangentensteifigkeitsmatrix $\mathbf{k}_{\text{tan}}^{(L2)}$

Wie im linearen Fall wird die Tangentensteifigkeitsmatrix  $\mathbf{k}_{\text{tan}}^{(L2)}$  nach Gleichung (6.4) aus ihren Eigenwerten und Eigenvektoren berechnet. Dazu werden ebenfalls die Eigenvektoren der Steifigkeitsmatrix  $\mathbf{k}^{(L1)}$  übernommen, welche unter der Annahme eines nicht schädigenden homogenisierten Materials berechnet wird. Zur Berechnung der Eigenwer-

te wird auch hier die Mikrostruktur als ein separates Unterproblem behandelt, das für jede der sechs Eigenformen ( $i = 1$  bis 6) einmal gelöst wird.

Da diese aufgebrauchten Verschiebungszustände unabhängig von der Belastungsgeschichte sind, schreitet die Schädigung bei der Berechnung der Steifigkeitsmatrix nicht weiter fort, und es wird in der Schleife über die sechs Eigenformen jeweils ein lineares Gleichungssystem gelöst. Die Berechnung von  $\mathbf{k}_{\text{tan}}^{(L2)}$  ist dadurch fast identisch mit der Berechnung in Abschnitt 6.3.1. Der kleine Unterschied ist, dass für den E-Modul der Stäbe die auskonvergierte Materialtangente  $E_{\text{tan}}$  aus der Aktualisierung der Geschichtsvariablen eingesetzt wird. Diese kann sich von Belastungsschritt zu Belastungsschritt ändern.

### Berechnung des inneren Kraftvektors $\mathbf{f}_{\text{int}}^{(L2)}$

Auch im Teil zur Berechnung des inneren Kraftvektors  $\mathbf{f}_{\text{int}}^{(L2)}$  schreitet die Schädigung nicht weiter fort. Der innere Kraftvektor kann daher durch Lösung eines linearen Gleichungssystems entsprechend Gleichung (4.9) bestimmt werden. Da das Residuum stets Null sein muss, ist der innere gleich dem äußeren Kraftvektor und es gilt:

$$\mathbf{f}_{\text{int}}^{(L2)} = \mathbf{k}_{\text{sec}}^{(L2)} \mathbf{d}. \quad (6.13)$$

Zur Berechnung des inneren Kraftvektors muss jedoch, wie Gleichung (5.11) entnommen werden kann, die Materialsekante  $\mathbf{k}_{\text{sec}}^{(L2)}$  benutzt werden. Die Sekantensteifigkeitsmatrix  $\mathbf{k}_{\text{sec}}^{(L2)}$  erhält man durch Wiederholung der Berechnung der Tangentensteifigkeitsmatrix  $\mathbf{k}_{\text{tan}}^{(L2)}$ . Allerdings wird diesmal bei der Ermittlung der Elementsteifigkeitsmatrix auf Stabebene nach Gleichung (6.8) die Materialsekante  $E_{\text{sec}}$  statt der Materialtangente  $E_{\text{tan}}$  eingesetzt.

Da die Eigenvektoren  $\Phi_i$  denen der Berechnung der Tangentensteifigkeitsmatrix entsprechen, brauchen diese nicht erneut berechnet werden.

## 6.4 Vollständig aufgelöstes diskretes Modell (Level 3)

In Level 3 wird die vollständig aufgelöste Mikrostruktur repräsentiert, bei der es lediglich drei Stäbe gibt, die in den drei Gitterrichtungen angeordnet sind. Das heißt, auch im homogenen Fall sind schon alle Stäbe individuell in die Berechnung eingegangen. Sowohl die Steifigkeitsmatrix  $\mathbf{k}_{\text{tan}}^{(L3)}$  als auch der innere Kraftvektor  $\mathbf{f}_{\text{int}}^{(L3)}$  werden daher analog zum homogenen Fall in Abschnitt 5.3 berechnet, mit dem Unterschied, dass die Stabsteifigkeiten auch schon bei materieller Linearität unterschiedlich sein können und dem Hintergrundgitter entnommen werden. Der aktuelle Wert der in der Belastungs-

geschichte maximal erreichten Verzerrung  $\kappa$  wird bei Level 3-Elementen ebenfalls auf dem Hintergrundgitter gespeichert. An die Level 3-Elemente können Level 2-Elemente grenzen, die mit dem Level 3-Element einen gemeinsamen Rand haben und daher diese Information benötigen.



# 7

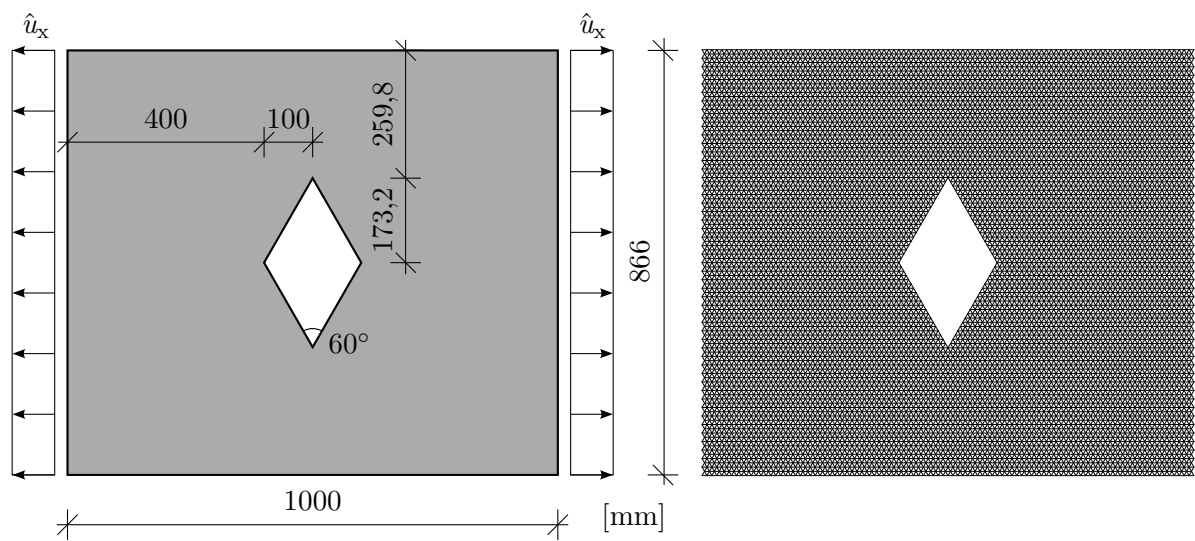
---

## Numerische Beispiele

Anhand von vier Beispielen soll in diesem Kapitel die netz- und modelladaptive Methode demonstriert werden. Dabei wird insbesondere auf die Vorteile der adaptiven Methode gegenüber einer Feinskalenrechnung eingegangen. Zunächst werden in Abschnitt 7.1 zwei Beispiele betrachtet, bei denen alle Stäbe der Mikrostruktur dieselben Materialeigenschaften haben. Die Berechnung der Steifigkeitsmatrizen der drei Elementlevel findet dabei wie in Kapitel 5 beschrieben statt. Die heterogene Mikrostruktur der folgenden beiden Beispiele in Abschnitt 7.2 wird analog Kapitel 6 gebildet und die Steifigkeitsmatrizen entsprechend berechnet. Für den homogenen und den heterogenen Fall werden jeweils ein linear elastisches und ein materiell nichtlineares Beispiel, bei dem die Stäbe schädigen können, simuliert. Die Ergebnisse der adaptiven Rechnungen werden jeweils mit den Ergebnissen von Berechnungen mit vollständig aufgelöstem Gitter verglichen, also ausschließlich bestehend aus Level 3-Elementen. In Analogie zur Fluidmechanik, wo feinskalige Turbulenzphänomene durch eine sehr feine Diskretisierung der Navier-Stokes-Gleichung aufgelöst werden, wird darauf im Folgenden mit dem Begriff „direkte numerische Simulation“ (DNS) Bezug genommen. Dies stellt die Referenzlösung dar.

### 7.1 Homogen verteilte Stabsteifigkeiten

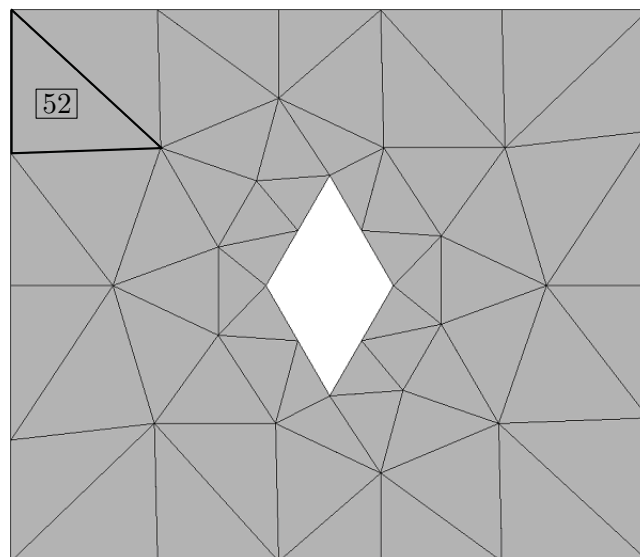
Die in Abbildung 7.1 links dargestellte zweidimensionale rechteckige Struktur mit einem rautenförmigen Loch in der Mitte wird für die Berechnung der folgenden zwei Beispiele gewählt. Die vertikal ausgerichteten Seiten werden durch eine horizontale Verschiebung  $\hat{u}_x$  belastet. Die somit aufgebrachte horizontale Dehnung verursacht Spannungskonzentrationen an den scharfen Ecken der Öffnung. Dadurch ist zu erwarten, dass



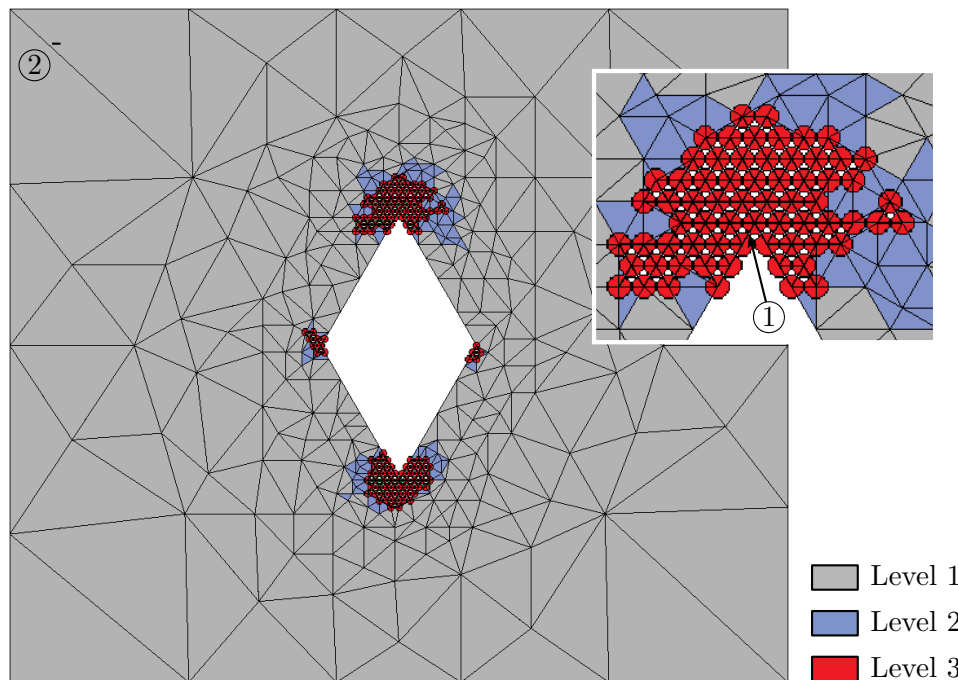
**Abbildung 7.1:** Strukturabmessungen und Belastung links, Mikrostruktur rechts.

sowohl das Netz als auch das Modell an diesen Stellen stark verfeinert werden, und, im Fall der materiell nichtlinearen Rechnung, die Stäbe dort anfangen zu schädigen.

Das in Abbildung 7.1 rechts dargestellte regelmäßige Gitter aus Stäben bildet die zugrundeliegende Mikrostruktur. Die Stäbe sind unter  $0^\circ$ ,  $60^\circ$  und  $120^\circ$  gegenüber der Horizontalen geneigt. Sie haben alle die Länge  $L = 10 \text{ mm}$ , die Querschnittsfläche  $A = 70 \text{ mm}^2$  und den E-Modul  $E = 30.000 \text{ N/mm}^2$ . Abbildung 7.2 zeigt das Berechnungsnetz, das sowohl für die lineare als auch für die materiell nichtlineare adaptive Rechnung den Ausgang bildet. Alle Elemente darin gehören zu Level 1.



**Abbildung 7.2:** Ausgangsnetz aus Level 1-Elementen.

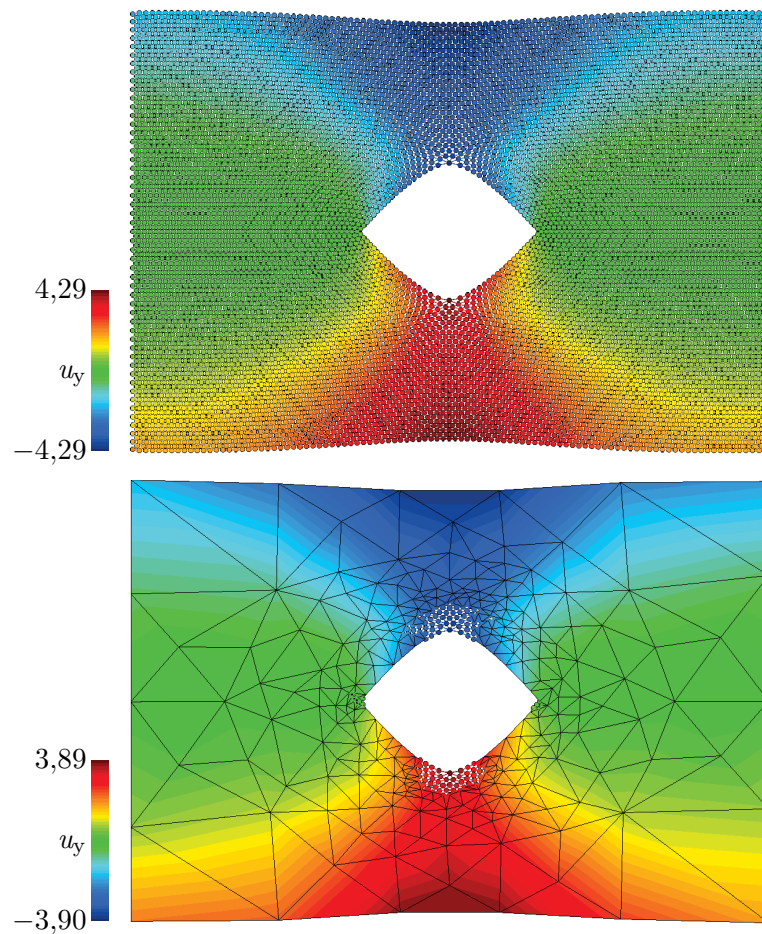


**Abbildung 7.3:** Netz nach der Verfeinerung mit Elementen aller drei Level. Zwei Stäbe im Modell sind markiert.

### 7.1.1 Linear elastische Berechnungen

Zunächst soll mit einem linearen Beispiel die Funktionalität des Netzverfeinerungsalgorithmus demonstriert werden. Die Verschiebungen aller Knoten des linken und rechten vertikalen Randes der Struktur werden mit  $\hat{u}_x = \pm 10$  mm vorgeschrieben, wodurch die Struktur horizontal gezogen wird. Um Starrkörperverschiebungen zu vermeiden, werden die linke und rechte Ecke der Aussparung in vertikaler Richtung gehalten. Die Verfeinerungsprozedur wird wiederholt, solange es aufgrund des Kriteriums aus Gleichung (4.2) Elemente gibt, die verfeinert werden müssen. Zur Berechnung des Grenzwertes nach Gleichung (4.5) wird  $\bar{\eta} = 0,24$  gewählt. Der Grenzwert für die Modelladaptation aus Gleichung (4.8) wird zu  $\varepsilon_\lambda = 0,10$  gewählt. Der Ablauf der Berechnung wurde in Abschnitt 4.4 beschrieben.

Nach zehn Verfeinerungsschritten konvergiert die Lösung zu dem Netz in Abbildung 7.3 mit 730 Freiheitsgraden. Das Gitter der Referenzlösung hat zum Vergleich 19.580 Freiheitsgrade. Das Resultat entspricht den Erwartungen: Die Netzverfeinerung findet konzentriert an den scharfen Ecken der Aussparung statt, dort wo die Verzerrungen einen großen Gradienten aufweisen. Um die Qualität der adaptiven Annäherung beurteilen zu können, wird das Ergebnis mit dem einer Rechnung mit vollständig aufgelöster Mikrostruktur (DNS) verglichen. Die deformierte Struktur der beiden Berechnungen nach zehn Lastschritten ist in 10-facher Überhöhung in Abbildung 7.4 zu sehen. Farblich



**Abbildung 7.4:** Vertikalverschiebungen  $u_y$  (in mm) in der deformierten Konfiguration (10-fach überhöht). Oben: DNS, unten: adaptive Simulation.

dargestellt sind die Vertikalverschiebungen. Qualitativ sind bei den beiden Ergebnissen keine signifikanten Unterschiede zu erkennen. Für einen quantitativen Vergleich der adaptiven Rechnung und der DNS werden drei Größen herangezogen. Dies ist einerseits die Kraft in zwei einzelnen Gitterstäben, wovon sich einer im Bereich der hohen Spannungskonzentrationen befindet,  $F_{\text{int}}^{(1)}$ , und der andere weit davon entfernt in einem Bereich mit sehr grobem Netz,  $F_{\text{int}}^{(2)}$ . Diese beiden Stäbe sind in Abbildung 7.3 markiert. Zur Ermittlung von  $F_{\text{int}}^{(2)}$  werden die Verschiebungen der Stabenden aus den Knotenverschiebungen des Level 1-Elements interpoliert. Abgesehen von diesen beiden lokalen Größen wird die vertikale Verschiebung  $u_y$  der oberen Ecke der Aussparung als eine globale Größe herangezogen. Aufgrund des unsymmetrischen Netzes im Fall der adaptiven Rechnung ist ein minimaler Unterschied bei den Verschiebungen der oberen und unteren Ecke der Aussparung trotz der symmetrischen Strukturgeometrie zu erkennen. Die Ergebnisse sind in Tabelle 7.1 zusammengefasst.



	DNS	adaptiv
$u_y$	$\pm 4,29$ mm	$\pm 3,89$ mm
$F_{\text{int}}^{(1)}$	89,3 kN	87,9 kN
$F_{\text{int}}^{(2)}$	42,1 kN	44,0 kN

**Tabelle 7.1:** Vergleich der Ergebnisse für  $u_y$ ,  $F_{\text{int},1}$  und  $F_{\text{int},2}$  aus der DNS und der adaptiven Simulation.

Die Kräfte der beiden Lösungen stimmen gut überein. Die Abweichung von der Referenzlösung beträgt 4,5 % im Fall von  $F_{\text{int}}^{(2)}$  und lediglich 1,6 % für  $F_{\text{int}}^{(1)}$ . Die Abweichung, die sich für die Vertikalverschiebung  $u_y$  ergibt, ist 9,3 %. Wie üblich bei der FEM, werden die Verschiebungen mit einer gröberen Diskretisierung unterschätzt. Die Ergebnisqualität lässt sich durch ein feineres Netz verbessern, hier also durch die Wahl eines strengeren Grenzwerts bei der Netzverfeinerung. Dies bedeutet jedoch, dass die Größe des zu lösenden Gleichungssystems wächst und damit die Rechenzeit ansteigt.

Ein direkter Vergleich der Anzahl der Freiheitsgrade der adaptiven Rechnung und der DNS bringt keine gute Abschätzung für die benötigte Rechenzeit. Während die DNS in einem Schritt durch Lösung eines großen Gleichungssystems zum Ergebnis kommt, werden im adaptiven Fall zehn Schritte benötigt, in denen ein jeweils deutlich kleineres Gleichungssystem gelöst wird. Betrachtet man die Echtzeit („wall clock time“), die zur Lösung benötigt wurde, so ist dennoch ein signifikanter Unterschied zu erkennen: Während die DNS 4,9 s zur Lösung gebraucht hat, dauerte die adaptive Rechnung 1,4 s. Im Kontext einer nichtlinearen Rechnung wird iterativ gelöst und es sind auch bei der Feinskalenrechnung mehrere Schritte zur Lösung nötig. Das Ergebnis ist dann besser vergleichbar. Abgesehen von der Rechenzeit ist jedoch bei der DNS auch die Speicherkapazität ein limitierender Faktor, sobald die Probleme größer werden.

Der lineare Fall, bei dem die Materialeigenschaften aller Stäbe gleich sind und es sich dadurch im Grunde um ein isotropes, homogenes Material handelt, ist ein Fall, bei dem das eigentliche Potential der Level 2-Elemente noch nicht genutzt wird. Erst dann, wenn das Material in irgendeiner Form inhomogen wird, oder zumindest, wenn es durch Eintritt von Schädigung in einer Richtung anisotrop wird, kommen die Vorteile der Level 2-Elemente zum Vorschein. Würden bei diesem Beispiel ausschließlich Level 1-Elemente verwendet und nur das Netz verfeinert, aber nicht das Modell, so würde sich das Ergebnis nicht wesentlich von dem der modelladaptiven Rechnung unterscheiden. Dennoch wären die Ergebnisse nicht identisch. Bei den Level 2-Elementen wird die vereinfachende Annahme getroffen, dass die Stäbe, die zu zwei Elementen gehören, jeweils zur Hälfte Teil der beiden Elemente sind. Sie werden nicht entsprechend der realen Anteile aufgeteilt. Dadurch ergibt sich für den homogenen Fall ein eher schlechteres Ergebnis als mit

einem homogenen Stoffgesetz. Zudem sind die Level 2-Elemente teurer, da zur Berechnung der Steifigkeitsmatrix alle Stäbe im Element einzeln aufgerufen werden müssen. Allerdings können die Level 2-Elemente Effekte am Strukturrand auch im homogenen Fall besser abbilden, da die Stäbe am Rand mit ihrer vollen Steifigkeit eingehen und nicht verschmiert wie in Level 1.

### 7.1.2 Materiell nichtlineare Berechnungen

Als nächstes wird ein materiell nichtlineares Szenario betrachtet, wobei das Modell schädigen kann. Die Verschiebung wird nun inkrementell in 270 Schritten von  $\Delta \hat{u}_x = \pm 10^{-3}$  mm auf alle Knoten des linken und rechten Strukturrandes aufgebracht, sodass die Struktur horizontal gedehnt wird. Um Starrkörperverschiebungen zu vermeiden, werden nun diese Knoten zusätzlich in vertikaler Richtung gehalten. Würden die Knoten der beiden Ecken der Aussparung wie beim letzten Beispiel gelagert werden, so entstünden dadurch Spannungskonzentrationen an diesen Stellen, die das eigentliche Ergebnis verfälschten. Das zugrunde liegende Gitter hat dieselbe Geometrie und dieselben Materialparameter wie zuvor bei der linear elastischen Simulation. Für die Schädigung einzelner Gitterstäbe müssen nun zwei zusätzliche Materialparameter eingeführt werden: Die Verzerrung, bei der ein Stab anfängt zu schädigen, wird zu  $\kappa_0 = 3,5 \cdot 10^{-4}$  gewählt, und die Verzerrung, bei der ein Stab vollständig versagt, ist  $\kappa_m = 5 \cdot 10^{-2}$ . Aufgrund der materiellen Nichtlinearität muss nun eine unsymmetrische Systemantwort im Strukturinneren erwartet werden. Um bei der Feinskalenrechnung die Symmetrie zu brechen, wird einem Stab an der unteren Ecke der Aussparung eine 10 % geringere Festigkeit zugewiesen als allen anderen Stäben, also  $\kappa_0 = 3,15 \cdot 10^{-4}$ . Der betreffende Stab ist in Abbildung 7.6 rot markiert. Infolge des unsymmetrischen Netzes ist dies bei der adaptiven Rechnung nicht notwendig.

Zur Berechnung des Grenzwerts der Netzverfeinerung nach Gleichung (4.5) wird  $\bar{\eta} = 0,13$  gewählt und für den Grenzwert für die Modelladaption  $\varepsilon_\lambda = 0,10$ . Verglichen mit der linear elastischen Rechnung fällt die Wahl für  $\bar{\eta}$  nun auf einen relativ niedrigen Wert. Dies ist notwendig, um ein ausreichend feines Netz an der Risspitze zu erhalten. Dafür wird auf eine zusätzliche Schleife, die solange durchlaufen wird, bis nach dem Verfeinerungskriterium aus Gleichung (4.2) keine Elemente mehr verfeinert werden müssen, verzichtet. Das Netz wird nur einmal je Lastinkrement verfeinert. Der Berechnungsablauf der nichtlinearen Rechnung wurde in Abschnitt 4.4 beschrieben. Am Ende der Rechnung erhält man das in Abbildung 7.5 dargestellte Netz.

Abbildung 7.6 vergleicht das Referenzergebnis der DNS mit dem Ergebnis der adaptiven Rechnung nach 270 Schritten. Beide Ergebnisse ähneln sich sehr. Bei der adaptiven Rechnung tritt die Schädigung jedoch nicht so konzentriert in einer Stabreihe auf wie

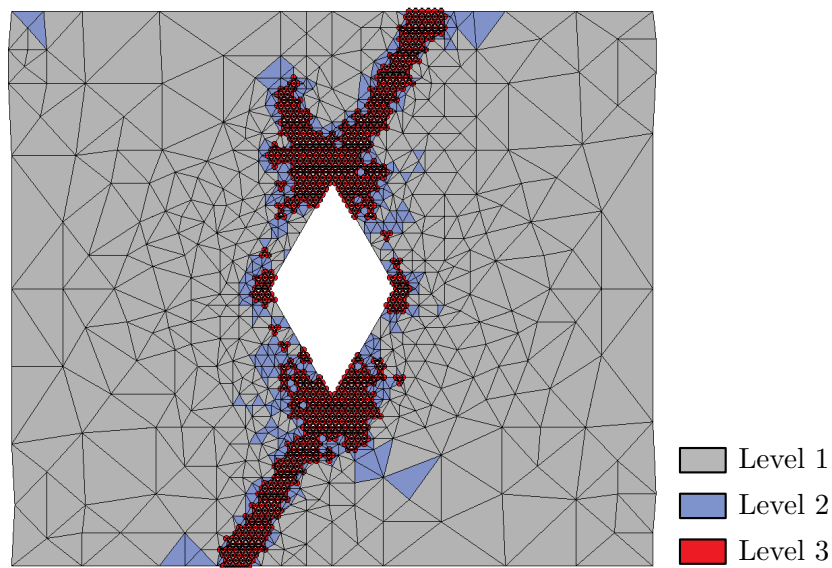


Abbildung 7.5: Netz nach 270 Belastungsschritten mit Elementen aller drei Level.

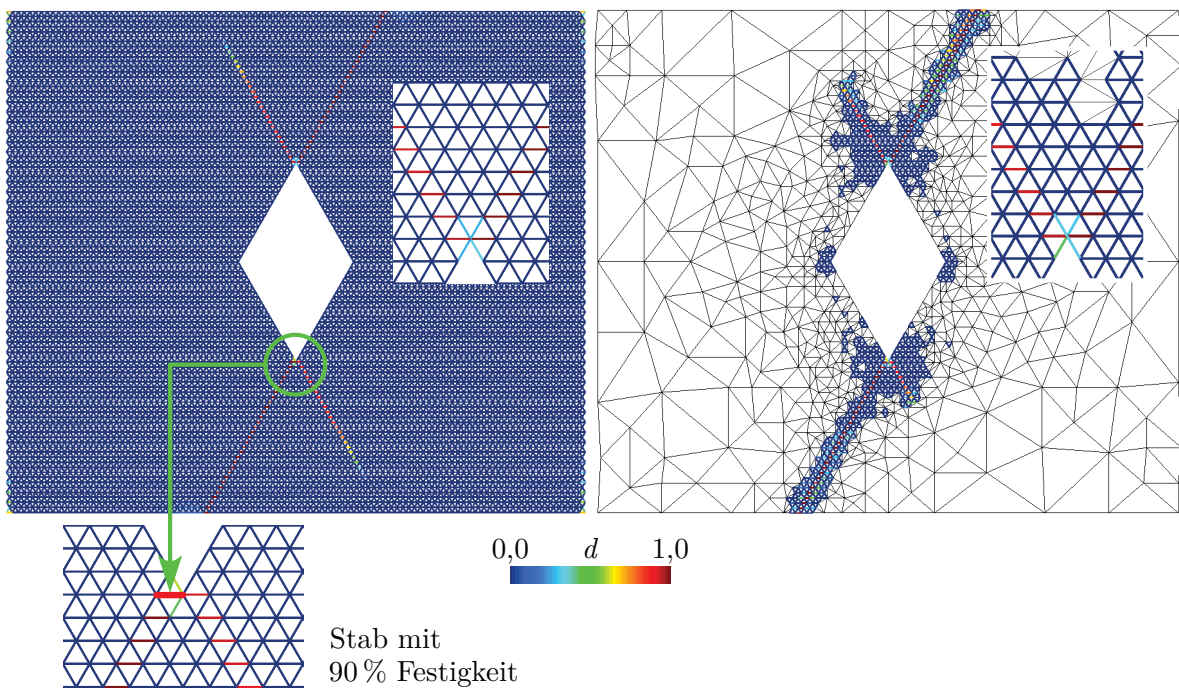
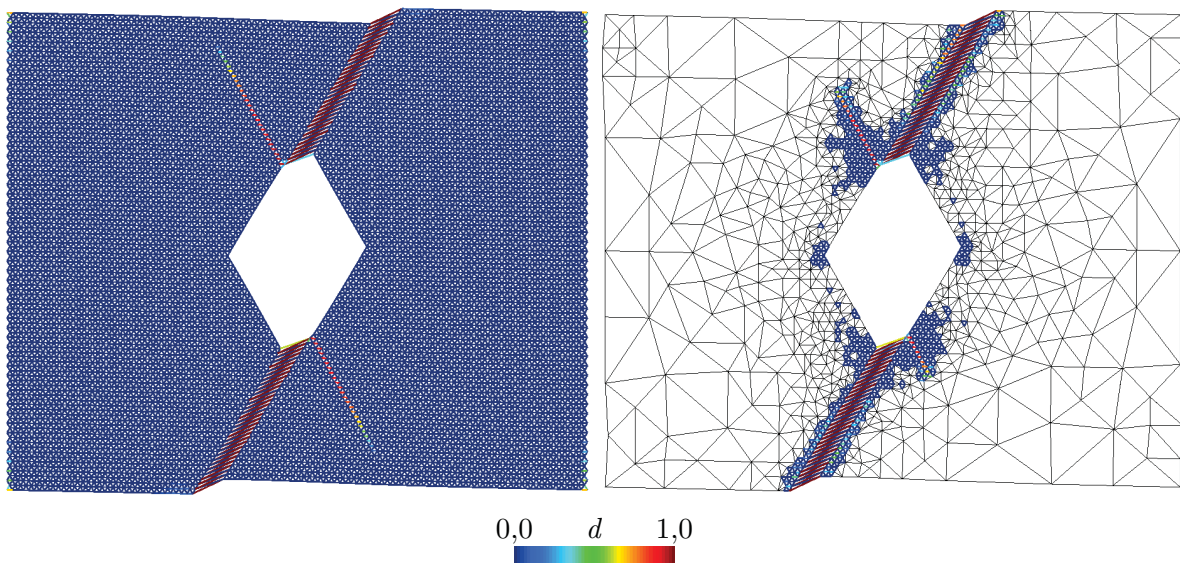


Abbildung 7.6: Schädigungsfortschritt nach 270 Schritten in der undeformierten Konfiguration. Links: DNS, rechts: adaptive Simulation.

bei der Feinskalenrechnung, sondern eher diffus. Dies könnte zu einer Überschätzung der dissipierten Energie führen oder sogar Einfluss auf die Versagensform haben. Die Ursache dieses Phänomens ist, dass es bei den Level 2-Elementen, deren Steifigkeitsmatrix unter Einsatz der Cauchy-Born-Regel berechnet wird, mehr als einen Gitterstab je Richtung



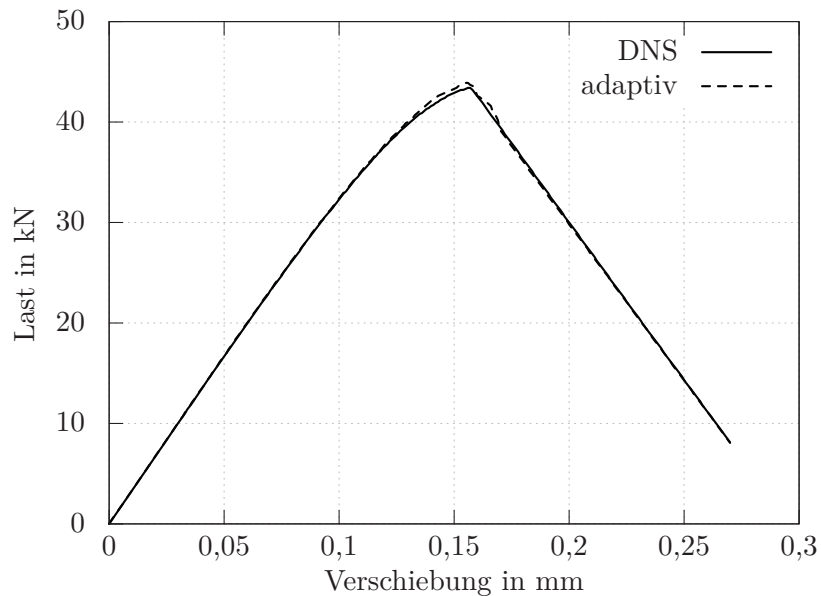
**Abbildung 7.7:** Schädigungsfortschritt nach 270 Schritten in der deformierten Konfiguration (100-fach überhöht). Links: DNS, rechts: adaptive Simulation.

gibt. Alle diese Stäbe werden gleich gedehnt und fangen deshalb zur selben Zeit an zu schädigen. Nur Level 3-Elemente besitzen die Fähigkeit, eine konzentrierte Schädigung wie bei der DNS darzustellen.

Anhand der deformierten Konfiguration in Abbildung 7.7 und den Last-Verschiebungs-Kurven in Abbildung 7.8 ist zu erkennen, dass die etwas diffuse Schädigung der adaptiven Rechnung kaum einen Einfluss auf das Gesamtergebnis hat. Die Deformationen und die Last-Verschiebungs-Kurven der beiden Simulationen sind sehr ähnlich. Auf der horizontalen Achse der Last-Verschiebungs-Kurven ist die horizontale Verschiebung abgebildet, die als Randbedingung auf die Knoten des rechten Strukturrandes aufgebracht wurde. Die vertikale Achse repräsentiert die Summe aller Reaktionskräfte an diesen Knoten in horizontaler Richtung.

Am Ende der Rechnung werden bei der adaptiven Simulation 2.428 Freiheitsgrade benutzt. Nachdem bei der adaptiven Prozedur bisher nur Elemente hinzukommen, werden in allen vorherigen Schritten weniger Freiheitsgrade verwendet. Verglichen mit dem Modell der DNS mit 19.580 Freiheitsgraden beansprucht die adaptive Rechnung deutlich weniger Speicherkapazität, wodurch die Effizienz gesteigert wird. Mit einem herkömmlichen Arbeitsplatzrechner wurden 8 min 13 s für die DNS benötigt und lediglich 52 s für die adaptive Simulation.

Es sollte jedoch an dieser Stelle erwähnt werden, dass die Berechnung nur soweit durchgeführt werden konnte, weil zwischendurch trotz einiger Konvergenzprobleme weitergerechnet wurde. Bei benachbarten Stäben tritt gelegentlich der Fall auf, dass mal der eine Stab eine leichte Schädigung erfährt und in der nächsten Iteration der benachbarte. So



**Abbildung 7.8:** Last-Verschiebungs-Kurven der DNS und der adaptiven Simulation.

werden während der Iterationen praktisch endlos sich ständig wiederholende Zustände durchlaufen, ohne dass die Rechnung konvergiert. Zu erkennen ist dies unter anderem am Residuum, bei dem dieselben Werte in derselben Reihenfolge immer wieder auftauchen. Einerseits ist mit Sicherheit die Regelmäßigkeit und Homogenität der hier gewählten Mikrostruktur ein Grund für die Konvergenzprobleme, andererseits gibt es für diesen Fall geeignetere Kontrollarten als die Lastkontrolle. Dies genauer zu untersuchen und dafür eine Lösung zu finden, steht nicht im Zentrum dieser Arbeit und wurde daher nicht weiter verfolgt. Eine sich mit dieser Thematik befassende Arbeit ist die ebenfalls am Institut für Baustatik und Baudynamik entstandene Dissertation von POHL (2014).

Um ohne längeres Suchen nach einer geeigneten Kontrollroutine die oben beschriebene Endlosschleife zu unterbrechen, wird in die Iterationen eingegriffen. Von den sich wiederholenden Zuständen wird derjenige mit dem kleinsten Residuum als ausreichend konvergierter Zustand akzeptiert und anschließend direkt zum nächsten Belastungsschritt übergegangen. Es handelt sich dabei immer nur um einzelne Schritte, in denen die Rechnung nicht konvergiert. In den folgenden Schritten wird wieder ein Gleichgewichtspfad getroffen. Dies hat sicherlich Auswirkung auf die Lösung und mag den Unterschied der beiden Last-Verschiebungs-Kurven an deren Spitze, etwa bei einer Verschiebung zwischen 0,12 mm und 0,17 mm, zur Folge haben. Da dieser Unterschied gering ist, wird davon ausgegangen, dass der Einfluss dieser Maßnahme ebenfalls gering ist.

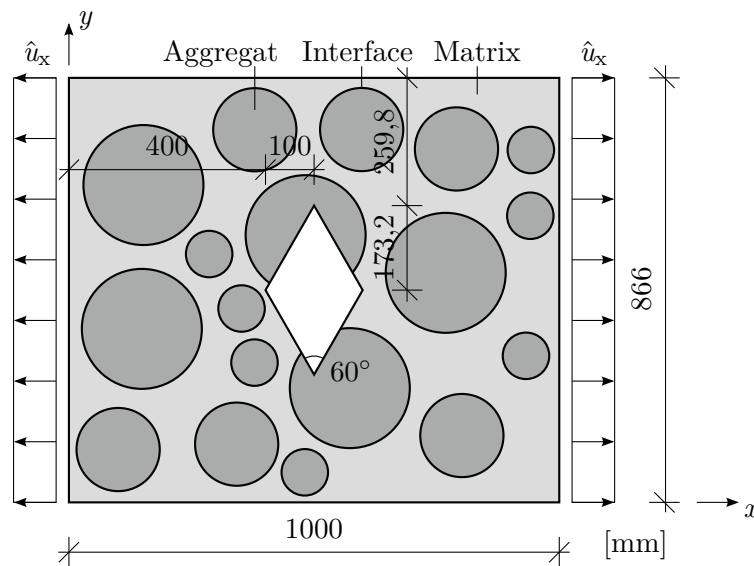


Abbildung 7.9: Strukturabmessungen, Belastung und Verteilung der Aggregate.

## 7.2 Heterogen verteilte Stabsteifigkeiten

Um Heterogenität in die Struktur zu bringen, wird, wie in Abschnitt 6.1 beschrieben, ein idealisierter Betonquerschnitt bestehend aus 18 unterschiedlich großen kreisförmigen Aggregaten auf die Mikrostruktur projiziert. Die Aggregate sind entsprechend Abbildung 7.9 in der Struktur verteilt. Die Koordinaten  $x$  und  $y$  der Aggregatsmittelpunkte relativ zur linken unteren Ecke der Struktur und deren Radien  $r$  können Tabelle 7.2 entnommen werden. Die zugrunde liegende Mikrostruktur ist dieselbe wie bei den homogenen Beispielen. Die Stäbe haben alle die Länge  $L = 10$  mm und die Querschnittsfläche  $A = 70$  mm<sup>2</sup>. Je nachdem, ob die Stäbe der Mikrostruktur in einem Aggregat liegen, sich in der Matrix befinden oder das Interface dazwischen bilden, werden ihnen entsprechend andere Materialeigenschaften zugewiesen. Im linear elastischen Beispiel in Abschnitt 7.2.1 werden dazu unterschiedliche E-Moduln verwendet und im materiell nichtlinearen Beispiel in Abschnitt 7.2.2 wird die Verzerrung  $\kappa_0$ , bei der Schädigung eintritt, variiert.

### 7.2.1 Linear elastische Berechnungen mit Variation der Steifigkeit

Bei diesem Beispiel wird für die Stäbe, entsprechend ihrer Lage, eine unterschiedliche Steifigkeit gewählt und dadurch Heterogenität in die Mikrostruktur eingebracht. Den Stäben innerhalb eines Aggregats wird mit dem E-Modul von  $E^A = 100.000$  N/mm<sup>2</sup> die größte Steifigkeit zugewiesen. Für die Stäbe in der Matrix wird  $E^M = 30.000$  N/mm<sup>2</sup> gewählt und für die, die das Interface bilden,  $E^I = 2.000$  N/mm<sup>2</sup>. Zur Berechnung ei-

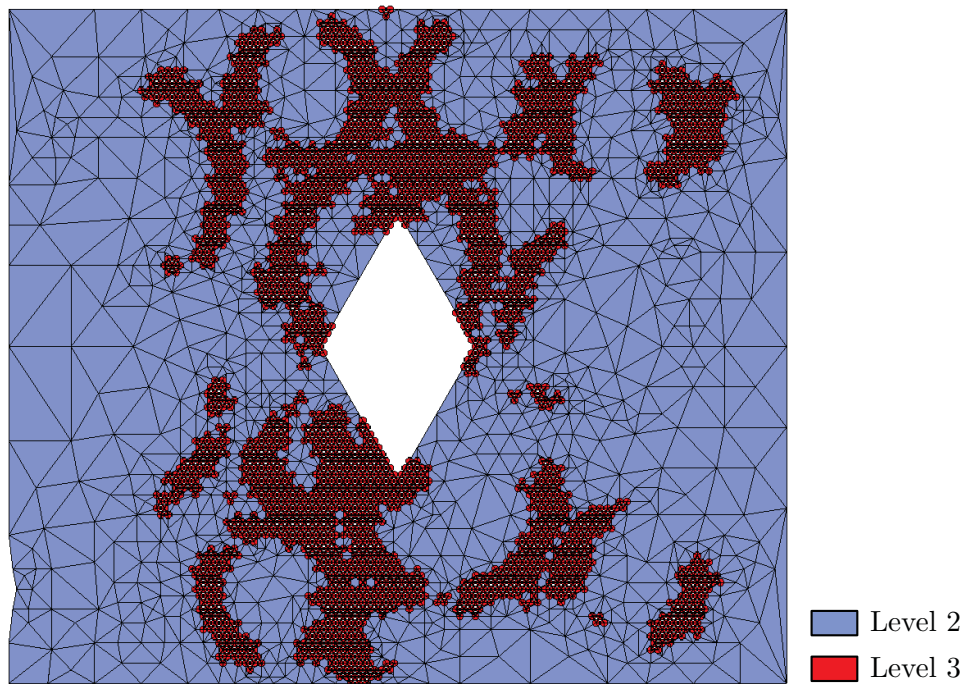
Nr.	$x$	$y$	$r$	Nr.	$x$	$y$	$r$
1	147,7	355,5	125	10	380,5	758,5	85
2	570,5	234,2	125	11	597,4	759,0	85
3	482,7	543,6	125	12	939,8	582,2	50
4	767,2	466,4	125	13	941,2	716,4	50
5	154,6	648,3	125	14	379,2	282,7	50
6	800,7	135,4	85	15	931,4	297,1	50
7	789,0	718,7	85	16	354,8	391,6	50
8	100,1	106,6	85	17	286,3	504,2	50
9	340,0	118,8	85	18	479,8	60,3	50

**Tabelle 7.2:**  $x$ - und  $y$ -Koordinaten der Mittelpunkte der Aggregate und deren Radien  $r$ .  
Alle Angaben in mm.

nes homogenen Stoffgesetzes für die Level 1-Steifigkeitsmatrix  $\mathbf{K}^{(L1)}$  wird außerdem der gemittelte E-Modul  $E_m$  benötigt. Wie in Abschnitt 6.2 schon angesprochen wurde, ist das Beispiel zu klein, sodass für diesen Fall kein repräsentativer Ausschnitt zur Ermittlung einer Level 1-Steifigkeitsmatrix gefunden werden kann. Daher werden hier keine Level 1-Elemente zur Diskretisierung verwendet. Das Netz zu Beginn der Rechnung ist das Netz aus Abbildung 7.2, jedoch mit Level 2-Elementen diskretisiert. Die Level 1-Steifigkeitsmatrix wird lediglich zur Bestimmung der Eigenvektoren  $\Phi^1$  bis  $\Phi^6$  bei der Berechnung der Level 2-Steifigkeitsmatrix benötigt. Da im isotropen Fall diese Eigenvektoren jedoch unabhängig vom absoluten Wert des E-Moduls sind, wird für  $E_m$  ein mittlerer E-Modul von Beton von  $30.000 \text{ N/mm}^2$  angenommen.

Die Struktur wird erneut durch die Verschiebungsrandbedingung  $\hat{u}_x = \pm 10 \text{ mm}$  aller Knoten des rechten und linken vertikalen Randes belastet. Die linke und rechte Ecke der Aussparung werden zur Vermeidung von Starrkörperverschiebungen in vertikaler Richtung gehalten. Der Grenzwert zur Modelladaption beträgt  $\varepsilon_\lambda = 0,10$  und es wird  $\bar{\eta} = 0,225$  zur Berechnung des Grenzwertes für die Netzadaption nach Gleichung (4.5) gewählt. Der Berechnungsablauf ist derselbe wie bei dem linear elastischen Beispiel in Abschnitt 7.1.1, außer dass nun die Anzahl an Verfeinerungsschritten von zehn auf  $n_{\text{step}} = 14$  erhöht wird.

Nach den 14 Verfeinerungsschritten ergibt sich das in Abbildung 7.10 dargestellte Netz aus Level 2- und Level 3-Elementen. Wie zuvor erwartet werden konnte, wird das Netz an den Rändern der meisten Aggregate stark verfeinert, sodass die Mikrostruktur am Interface vollständig aufgelöst wird. Die Aggregate sind steifer als die Matrix und beide sind steifer als das Interface. Der Verzerrungsgradient ist daher beim Interface am größten und das Netz wird an diesen Stellen verfeinert. Zu Beginn der adaptiven Rechnung hat das Netz, so wie es in Abbildung 7.10 zu sehen ist, 84 Freiheitsgrade und am Ende,



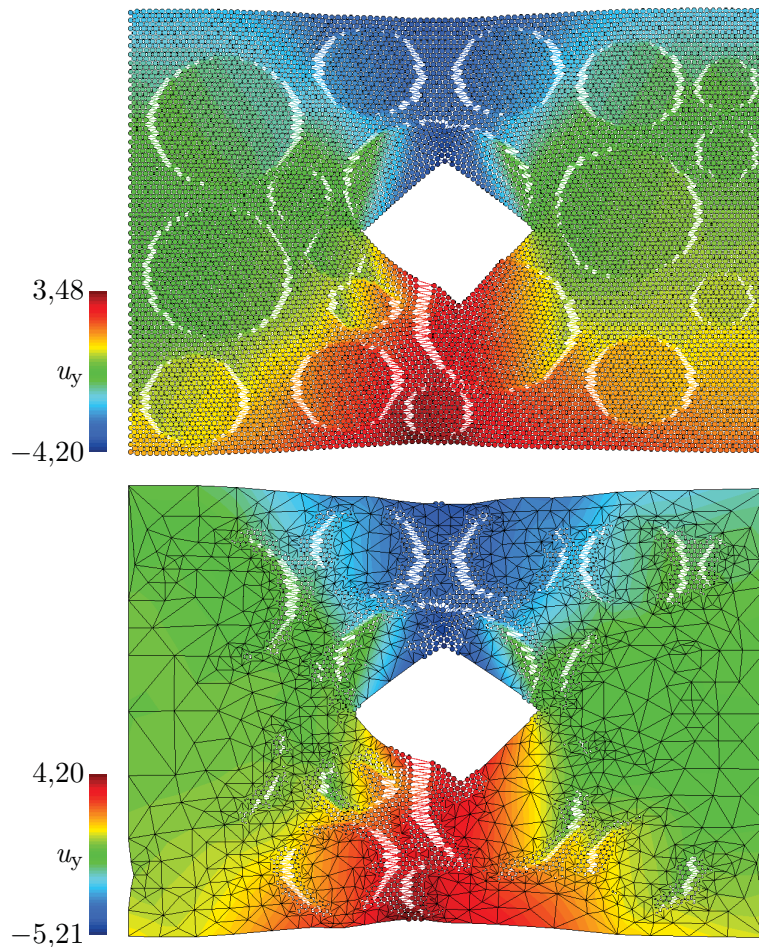
**Abbildung 7.10:** Netz nach der Verfeinerung mit Elementen aus Level 2 und Level 3.

6.084 Freiheitsgrade. Das Gitter der Feinskalenrechnung hat 19.580 Freiheitsgrade. Es wurden demnach 69 % der Freiheitsgrade eingespart.

Die Berechnung wird diesmal jedoch nicht so lange durchgeführt, bis anhand des Netzverfeinerungskriteriums kein Element mehr verfeinert werden muss. Würde die Berechnung weiter fortgesetzt, würden wahrscheinlich auch die restlichen Interfaces weiter aufgelöst. Das ursprüngliche Ziel war jedoch nicht, bis zur Feinskala zu verfeinern, sondern schon nach wenigen Schritten mit einem verhältnismäßig groben Netz ein gutes Ergebnis zu bekommen. Deshalb wird die Rechnung nach 14 Schritten abgebrochen und dieses Ergebnis mit dem der Feinskalenrechnung (DNS) verglichen.

Die vertikalen Verschiebungen  $u_y$  der Struktur, die sich aus der adaptiven Simulation und der DNS ergeben, sind farblich in Abbildung 7.11 in der deformierten Konfiguration (10-fach überhöht) dargestellt. Die Ränder der Aggregate sind darin noch deutlicher zu erkennen. Bei der adaptiven Rechnung werden sie im mittleren Bereich sehr gut aufgelöst und die Deformationen werden qualitativ richtig wiedergegeben. Es ist jedoch auch zu erkennen, dass die Aggregate in den Randbereichen weniger bis gar nicht aufgelöst werden. Am Farbverlauf der Randbereiche ist zu sehen, dass sich die Deformation der Randbereiche leicht unterscheidet. Bei der Deformation der Aussparung gibt es ebenfalls leichte Unterschiede, was an den Minimal- und Maximalwerten der Farbskala zu erkennen ist. Dennoch ist dieses Ergebnis zufriedenstellend. Es wurde gezeigt, dass die





**Abbildung 7.11:** Vertikalverschiebungen  $u_y$  (in mm) in der deformierten Konfiguration (10-fach überhöht). Oben: DNS, unten: adaptive Simulation.

heterogene Mikrostruktur von den Level 2-Elementen und dem gesamten Verfeinerungsprozess wahrgenommen und richtig aufgelöst wird.

Auf einem herkömmlichen Arbeitsplatzrechner wurden für die 14 Schritte der adaptiven Rechnung 60 s benötigt. Die Feinskalenrechnung war nach 35 s beendet. Damit scheint die adaptive Rechnung auf den ersten Blick ineffizienter zu sein als die Feinskalenrechnung. Wie schon bei dem homogenen linearen Beispiel können diese Werte auch hier nur schlecht miteinander verglichen werden, da bei einer linearen Rechnung zur Lösung des Feinskalenproblems lediglich ein Schritt gerechnet werden muss und bei der adaptiven Rechnung immer mehrere Schritte nötig sind. Die adaptive Rechnung zeigt außerdem insbesondere dann ihre volle Stärke, wenn die Lokalisierung nur in einem kleinen Bereich stattfindet und große Teile grob diskretisiert bleiben können. Das ist bei dem hier gewählten Beispiel nicht der Fall, sondern es musste fast im ganzen Gebiet verfeinert werden. Dadurch wird auch diese Diskretisierung verhältnismäßig fein und das in jedem

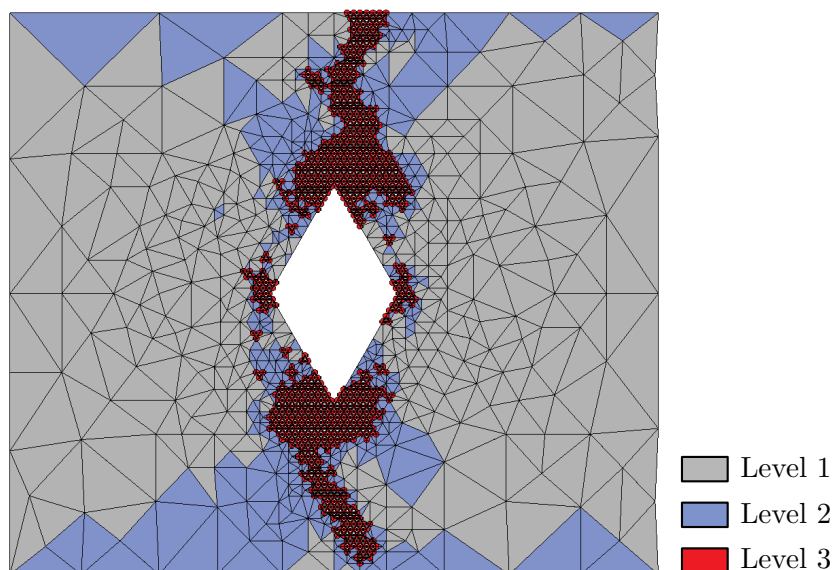
Schritt zu lösende Gleichungssystem entsprechend größer. Was die Rechnung beschleunigen kann, hier jedoch nicht implementiert ist, ist die Tatsache, dass die adaptive Rechnung gut parallelisierbar ist. Jedes einzelne Level 2-Element stellt ein eigenständiges, mehrfach zu lösendes Unterproblem dar. Diese können parallel gelöst werden. Wenn die Strukturen insgesamt sehr groß werden, sodass eine Berechnung, bei der die Mikrostruktur vollständig aufgelöst wird, die verfügbare Speicherkapazität übersteigt, kann eine adaptive Rechnung ein Lösungsweg sein.

### 7.2.2 Materiell nichtlineare Berechnungen mit Variation der Festigkeit

Bei diesem Beispiel wird erneut materiell nichtlinear gerechnet, wobei den Stäben das linear entfestigende Materialgesetz aus Kapitel 3 zugewiesen wird. Anstatt einer Variation der Steifigkeit bzw. des E-Moduls wird nun die Festigkeit variiert. Dazu wird den Stäben der Mikrostruktur eine unterschiedliche Verzerrung  $\kappa_0$  zugewiesen, bei der sie anfangen zu schädigen. Stäbe, die sich innerhalb eines Aggregats befinden, fangen bei einer Verzerrung von  $\kappa_0^A = 5,5 \cdot 10^{-4}$  an zu schädigen, die in der Matrix bei  $\kappa_0^M = 3,5 \cdot 10^{-4}$  und Stäbe, die das Interface bilden, bei  $\kappa_0^I = 2,5 \cdot 10^{-4}$ . Vollständiges Versagen tritt bei allen Stäben bei einer Verzerrung von  $\kappa_m = 5 \cdot 10^{-2}$  ein. Sie haben außerdem alle den E-Modul  $E = 30.000 \text{ N/mm}^2$ . Die Belastung entspricht der des nichtlinearen Beispiels mit homogener Mikrostruktur aus Abschnitt 7.1.2. Durch inkrementelle Belastung der Knoten des linken und rechten Strukturrandes mit einer Verschiebung von  $\Delta \hat{u}_x = \pm 10^{-3} \text{ mm}$  wird die Struktur horizontal gedehnt. Zur Vermeidung von Starrkörperverschiebungen werden diese Knoten zudem in vertikaler Richtung gehalten. Da die Mikrostruktur nun nicht mehr symmetrisch ist, kann auf das Einführen einer Imperfektion bei der Feinskalenrechnung verzichtet werden.

Es werden insgesamt 200 Schritte gerechnet, bei denen das Netz jeweils einmal verfeinert wird. Zu Beginn der Rechnung entspricht das Netz erneut dem aus Abbildung 7.2. Wird ausschließlich die Festigkeit variiert, so ist das Material bis zum Beginn der Entfestigung homogen, und es können Level 1-Elemente verwendet werden. Sobald Schädigung einsetzt, werden die entsprechenden Elemente zu Level 2-Elementen umgewandelt. Mit  $\bar{\eta} = 0,13$  und  $\varepsilon_\lambda = 0,10$  werden die Grenzwerte zur Netz- und Modelladaption wie in Abschnitt 7.1.2 gewählt.

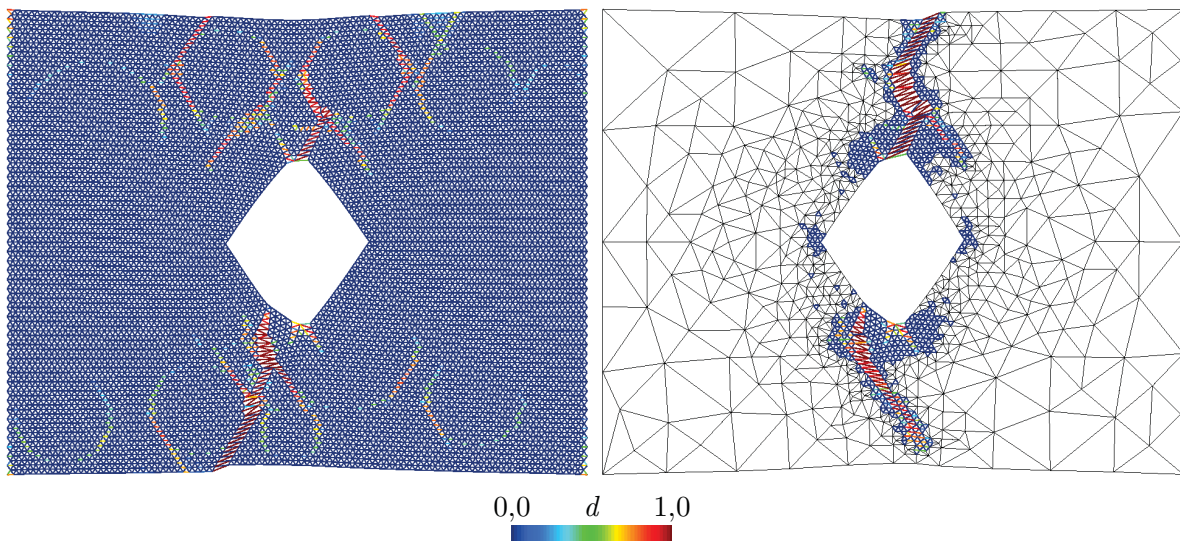
Am Ende der Rechnung erhält man das in Abbildung 7.12 dargestellte Netz mit Elementen aus allen drei Leveln. Dieses Netz hat 2.322 Freiheitsgrade. Verglichen mit der Feinskalenrechnung wurden demnach 88% der Freiheitsgrade eingespart. Es ist sofort zu erkennen, dass sich dieses Ergebnis deutlich von dem Ergebnis der Rechnung mit homogenem Materialgesetz unterscheidet. Während in Abbildung 7.5 ein Riss zu sehen ist,



**Abbildung 7.12:** Netz nach 200 Belastungsschritten mit Elementen aller drei Level.

der sich von der oberen und unteren Ecke der Aussparung in einer geraden, diagonalen Linie zu den Rändern hin ausbreitet, scheint der Riss bei der heterogenen Rechnung in Abbildung 7.12 nun um die Aggregate herumzulaufen. Da die Stäbe der Interfaces bei der niedrigsten Verzerrung bereits schädigen und die in den Aggregaten erst bei deutlich größeren Verzerrungen, entspricht dies den Erwartungen.

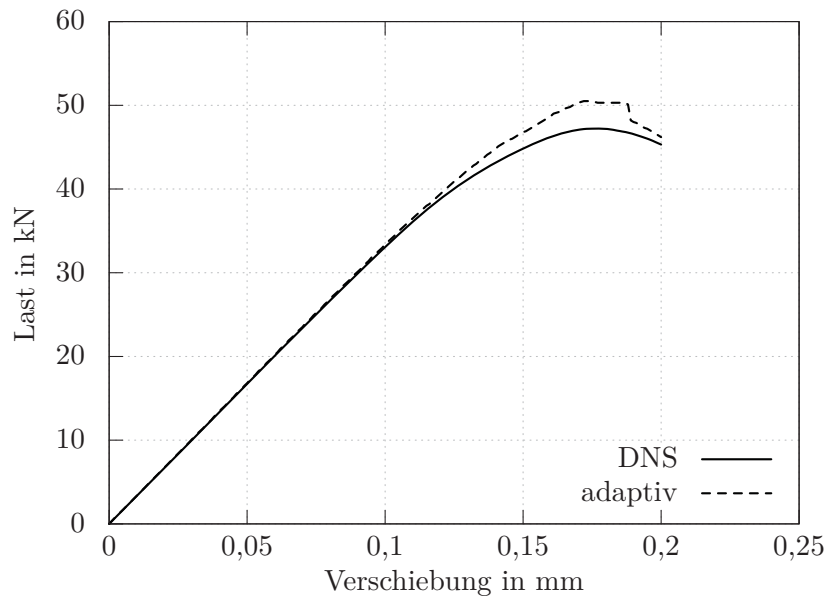
In Abbildung 7.13 wird das Ergebnis der adaptiven Rechnung dem Ergebnis der Feinskalenrechnung gegenübergestellt. In beiden Fällen ist die Schädigung der Stäbe nach 200 Belastungsschritten farbig in der 200-fach überhöhten deformierten Konfiguration dargestellt. Insbesondere beim Ergebnis der DNS links ist deutlich zu sehen, wie der Riss an den Aggregaträndern entlang verläuft. Es kann aber auch beobachtet werden, dass die Versagensform in beiden Fällen eine andere ist. Der Riss, der der oberen Ecke entspringt, nimmt in beiden Fällen denselben Weg, wobei die Schädigung bei der adaptiven Rechnung schon etwas weiter fortgeschritten ist. Im unteren Bereich hingegen beginnt der Riss zwar an derselben Stelle, geht aber bei der DNS nach Kurzem links ab und bei der adaptiven Rechnung nach rechts. In diesem Fall ist die Schädigung bei der DNS weiter fortgeschritten. Des Weiteren ist zu erkennen, dass die Schädigung der Bereiche abseits des Hauptrisses von der adaptiven Rechnung nicht wahrgenommen werden. Nach Abbildung 7.12 sind die meisten Elemente in diesem Bereich noch Level 1-Elemente, die gar nicht in der Lage sind, Schädigung zu repräsentieren. Da die in der Feinskalenlösung in Abbildung 7.13 links dargestellten Deformationen der schädigenden Stäbe der Interfaces verglichen mit den Deformationen der schädigenden Stäbe des Hauptrisses klein sind, wird dieser Schädigung weniger Beachtung geschenkt.



**Abbildung 7.13:** Schädigungsfortschritt nach 200 Schritten in der deformierten Konfiguration (200-fach überhöht). Links: DNS, rechts: adaptive Simulation.

In den Last-Verschiebungs-Kurven in Abbildung 7.14 wird, wie zuvor in Abbildung 7.8, die Summe der horizontalen Reaktionskräfte an den Knoten des rechten Strukturrandes über der horizontal aufgebrachten Verschiebungsrandbedingung wiedergegeben. Diesen Kurven kann entnommen werden, dass sich die Unterschiede der beiden Berechnungen nach Verlassen des elastischen Bereiches bei Einsatz von Schädigung entwickeln. Das Maximum der Kurve des adaptiven Beispiels ist größer. Dies lässt darauf schließen, dass das System insgesamt steifer ist. Einerseits liegt das daran, dass das Netz deutlich gröber ist, andererseits hat sicherlich auch die fehlende Schädigung abseits des Hauptrisses darauf einen Einfluss.

Ein Grund für die Abweichungen der beiden Rechnungen im Bereich des Hauptrisses können Imperfektionen im System sein, die allein durch numerische Rundungsdifferenzen zustande kommen können. Ein minimaler Unterschied des Schädigungsfortschritts in den Stäben kann dazu führen, dass der Riss in die eine oder andere Richtung fortschreitet und sich eine andere Versagensform einstellt. Ein weiterer, nicht zu vernachlässigender Grund können die schon in Abschnitt 7.1.2 beschriebenen Konvergenzprobleme sein, die auch bei diesem nichtlinearen Beispiel auftreten. Es kann vorkommen, dass durch das vorgenommene Eingreifen in die Rechnung der eigentliche Gleichgewichtspfad verfehlt und stattdessen ein anderer, benachbarter Gleichgewichtspfad getroffen wird. Dennoch zeigt dieses Beispiel, dass durch die Level 2-Elemente die heterogene Mikrostruktur wahrgenommen wird und auch ein fortschreitender Riss durch diese Mikrostruktur richtig wiedergegeben werden kann.



**Abbildung 7.14:** Last-Verschiebungs-Kurven der DNS und der adaptiven Simulation.

Die Berechnung des Feinskalenproblems (DNS) hat auf einem normalen Arbeitsplatzrechner 7 min 9 s in Anspruch genommen. Die Berechnungszeit der adaptiven Rechnung liegt mit 2 min 58 s etwa 59% darunter. Es hat sich gezeigt, dass die Berechnung der Steifigkeitsmatrizen der Level 2-Elemente durch das erforderliche sechsmalige Lösen eines Unterproblems je Element zur Bestimmung der Eigenwerte sehr rechenintensiv ist. Durch Parallelisierung der Lösung der Unterprobleme kann die Rechnung jedoch noch beschleunigt werden. Die Lösung dieser Unterprobleme benötigt zwar viel Rechenzeit, verglichen mit der Feinskalenrechnung ist die benötigte Speicherkapazität hingegen gering. Dies ist ein Vorteil bei der Berechnung von großen Problemen, für die eine Feinskalenrechnung nicht mehr möglich ist.



---

## Zusammenfassung und Ausblick

### 8.1 Zusammenfassung

Das Ziel dieser Arbeit war die Entwicklung einer Methode, die Simulationen des Bruchverhaltens kohäsiver Reibungsmaterialien mit einer Form der Diskrete-Elemente-Methode ermöglicht, ohne dass dazu die gesamte Struktur mit Partikeln aufgelöst sein muss. Zur Umsetzung wird eine Kopplung der Finite-Elemente-Methode und der Diskrete-Elemente-Methode vorgeschlagen, bei der die Effizienz der FEM mit der Präzision der DEM kombiniert wird. Bei den im Fokus stehenden Materialien, wie beispielsweise Beton, liegen die geometrischen Skalen der Mikro- und der Makrostruktur in den lokalisierenden Bereichen nur ein bis zwei Größenordnungen auseinander. Daher gilt keine Skalenseparation und einige gängige Mehrskalmethoden können nicht angewendet werden. Das vorgeschlagene Konzept übernimmt Ideen der Quasikontinuuumsmethode und überträgt sie auf Probleme in der Strukturmechanik.

Ausgehend von einem ursprünglich groben FE-Netz wird durch adaptive Netzverfeinerung und eine automatische Anpassung des Berechnungsmodells mithilfe von drei Elementtypen (Level 1 bis Level 3), die die Mikrostruktur mit unterschiedlicher Genauigkeit repräsentieren, ein glatter Übergang vom Kontinuumsmodell (FEM) zum diskreten Modell (DEM) garantiert. Dieser glatte Übergang entwickelt sich automatisch und es ist nicht nötig, einen Übergangsbereich zwischen dem kontinuierlichen und dem diskreten Bereich zu definieren und diesen bei einem adaptiven Prozess mitzubewegen. Da in Bereichen der Level 2-Elemente die Partikelverschiebungen im Element aus den Knotenverschiebungen der Elemente berechnet werden, kann diese Strategie als eine diskretisierte Partikelmethode bezeichnet werden.

Während sich bei einem homogenen Material die Partikelverschiebungen im Element einfach durch Interpolation der Knotenverschiebungen des Makroelements berechnen lassen, musste für heterogene Materialien ein alternativer Weg zur Berechnung der Steifigkeitsmatrix von Level 2-Elementen gefunden werden. Es wurde dazu ein Verfahren entwickelt, bei dem die Steifigkeitsmatrix aus Eigenwerten und Eigenvektoren berechnet wird. Die Eigenvektoren einer Steifigkeitsmatrix mit homogenisiertem Stoffgesetz bilden die Verschiebungsrandbedingungen für die Unterprobleme zur Berechnung der Eigenwerte.

Die Anwendbarkeit dieses Konzepts wurde anhand von vier Beispielen demonstriert, jeweils zwei Beispiele für ein homogenes und ein heterogenes Material. Bei einem Beispiel wurde den Stäben der Mikrostruktur jeweils ein linear elastisches Materialgesetz zugewiesen, und beim zweiten konnten einzelne Stäbe nach einem einaxialen Schädigungsmodell linear entfestigen.

Mit den linear elastischen Beispielen konnte gezeigt werden, dass das Ergebnis der adaptiven Berechnung sehr nahe am Ergebnis der Feinskalenrechnung liegt. Im homogenen Fall wurden bei der adaptiven Simulation deutlich weniger Freiheitsgrade benötigt als bei einer Vergleichsrechnung mit vollständig aufgelöster Mikrostruktur, es sind jedoch einige Schritte zur Netzverfeinerung erforderlich. Dennoch war in diesem Fall die adaptive Rechnung dreieinhalb mal schneller als die Feinskalenrechnung (Echtzeit).

Im heterogenen Fall benötigte jedoch die DNS mit 35 s gegenüber der adaptiven Rechnung mit 60 s weniger Rechenzeit. Bei diesem Beispiel wurde das Netz während der adaptiven Prozedur im gesamten Gebiet sehr stark verfeinert, wodurch sich verhältnismäßig viele Freiheitsgrade ergeben. In Kombination mit mehreren nötigen Verfeinerungsschritten verlängert dies die Berechnungszeit. Des Weiteren hat sich gezeigt, dass die Berechnung der Steifigkeitsmatrizen der Level 2-Elemente durch das erforderliche sechsmalige Lösen eines Unterproblems je Element rechenintensiv ist. Bei diesem Beispiel wurden im ganzen Gebiet nur Level 2- und Level 3-Elemente benutzt und es musste auf die effizienten Level 1-Elemente verzichtet werden. Es konnte mit diesem Beispiel jedoch gezeigt werden, dass die heterogene Mikrostruktur von dem gesamten Verfeinerungsprozess und insbesondere den Level 2-Elementen wahrgenommen und richtig aufgelöst wird.

Mit den materiell nichtlinearen Beispielen konnte ebenfalls gezeigt werden, dass die Ergebnisse der adaptiven Simulation gut mit denen der numerischen Referenzlösung übereinstimmen. Die Heterogenität der Mikrostruktur wird auch hier durch den Verfeinerungsprozess richtig aufgelöst und der entstehende Riss verläuft um die festeren Aggregate herum. Während im heterogenen Fall mit der adaptiven Rechnung 59 % der Rechenzeit eingespart werden konnten, so waren dies mit einem homogenen Material so-



gar 89 %. In beiden Fällen gab es allerdings bei der Berechnung in einigen Lastschritten Konvergenzprobleme.

Aus den Ergebnissen dieser vier Beispiele lässt sich schließen, dass die Methode dann ihre volle Stärke zeigen kann, wenn die Lokalisierungsphänomene nur in kleinen Bereichen auftreten und in großen Teilen Kontinuumselemente (Level 1) eingesetzt werden können. Verglichen mit dem Feinskalenproblem können viele Freiheitsgrade eingespart werden. Eine effiziente Berechnung großer Strukturen ist somit möglich, ohne dass zur Abbildung von Phänomenen auf der Ebene der Mikrostruktur die gesamte Mikrostruktur aufgelöst werden muss.

## 8.2 Ausblick

Ein Faktor, der sich im Fall eines heterogenen Materials negativ auf die Geschwindigkeit der adaptiven Rechnung auswirkt, ist der, dass für jedes Element zur Ermittlung der Eigenwerte der Steifigkeitsmatrix ein Unterproblem sechs mal gelöst werden muss. Ein Unterproblem bezieht sich immer nur auf ein Element. Daher sind die Probleme voneinander unabhängig und können parallel gelöst werden. Davon wurde bisher kein Gebrauch gemacht. Eine dahingehende Änderung der Implementierung trägt sicherlich zur Beschleunigung der Rechnung bei.

Zur Lösung des Unterproblems bei Level 2-Elementen mit heterogener Mikrostruktur wurden die Verschiebungsrandbedingungen auf alle Knoten, die den Rand der Struktur bilden, aufgebracht. Dies bedeutet insbesondere bei verhältnismäßig kleinen Elementen einen starken Zwang hinsichtlich der verbleibenden Deformationsmöglichkeiten und führt dazu, dass die Struktur steifer reagiert als im diskreten Modell. Wird hingegen nur eine durchschnittliche Übereinstimmung der Verschiebungen der Randpartikel und der FE-Knoten gefordert, könnte dies eine weichere Strukturantwort begünstigen, die näher am diskreten Modell ist. Umgesetzt werden könnte dies beispielsweise mit Lagrange-Multiplikatoren.

Zur Modellierung realer Materialien, deren Mikrostruktur in der Regel keinem regelmäßigen Dreiecksgitter entspricht, muss die Methode auf eine Anwendung für komplexere Mikrostrukturen ausgeweitet werden. Ein erster Schritt in diese Richtung wäre, sie für unregelmäßige Gitter zugänglich zu machen. Dazu ist zunächst eine Änderung des Netzverfeinerungsalgorithmus erforderlich. In einem unregelmäßigen Gitter ist es schwieriger, die möglichen Positionen für einen neuen Knoten zu finden. Bei heterogenen Materialien wird ein Hintergrundgitter angelegt, auf dem die Informationen über das Material der Gitterstäbe und deren Position gespeichert sind. Diesem Hintergrundgitter können die zur Netzverfeinerung benötigten Partikelpositionen entnommen werden. In einem wei-

teren Schritt könnten die Interaktionsgesetze zwischen den Partikeln erweitert werden, indem beispielsweise komplexere Materialmodelle eingesetzt werden.

Bei der Modellierung von Fragmentierung müssen dynamische Effekte, geometrische Nichtlinearitäten und Kontakt berücksichtigt werden. Des Weiteren ist es sinnvoll, eine Anwendung auf dreidimensionale Strukturen zu ermöglichen.

# A

## Anhang

### A.1 Beitrag eines Stabes zur Elementsteifigkeitsmatrix

Partikelverschiebungen  $\tilde{\mathbf{d}}$  in Abhängigkeit der Partikelpositionen im Element  $\xi$  und der Knotenverschiebungen  $\mathbf{d}$ :

$$\begin{aligned}\tilde{d}_1^{(1)} &= (1 - \xi_1^{(1)} - \xi_2^{(1)})d_1 + \xi_1^{(1)}d_3 + \xi_2^{(1)}d_5 \\ \tilde{d}_2^{(1)} &= (1 - \xi_1^{(1)} - \xi_2^{(1)})d_2 + \xi_1^{(1)}d_4 + \xi_2^{(1)}d_6 \\ \tilde{d}_1^{(2)} &= (1 - \xi_1^{(2)} - \xi_2^{(2)})d_1 + \xi_1^{(2)}d_3 + \xi_2^{(2)}d_5 \\ \tilde{d}_2^{(2)} &= (1 - \xi_1^{(2)} - \xi_2^{(2)})d_2 + \xi_1^{(2)}d_4 + \xi_2^{(2)}d_6\end{aligned}\tag{A.1}$$

(A.1) eingesetzt in (5.8) und zweimal abgeleitet nach den Knotenverschiebungen ergibt den Beitrag einer Feder  $\mathbf{k}^{(L2,S)}$  zur Steifigkeitsmatrix eines Level 2-Elements  $\mathbf{k}^{(L2)}$  in Abhängigkeit der lokalen Koordinaten des Anfangspartikels eines Stabes im Element  $\xi^{(1)} = [\xi_1^{(1)} \ \xi_2^{(1)}]^T$  und des entsprechenden Endpartikels  $\xi^{(2)} = [\xi_1^{(2)} \ \xi_2^{(2)}]^T$ :

$$\begin{aligned}k_{11}^{(L2,S)} &= EA/L^3 \cdot (-\xi_1^{(2)} - \xi_2^{(2)} + \xi_1^{(1)} + \xi_2^{(1)})^2 L_x^2 \\ k_{12}^{(L2,S)} &= EA/L^3 \cdot (-\xi_1^{(2)} - \xi_2^{(2)} + \xi_1^{(1)} + \xi_2^{(1)})^2 L_y L_x \\ k_{13}^{(L2,S)} &= EA/L^3 \cdot (\xi_1^{(2)} - \xi_1^{(1)}) (-\xi_1^{(2)} - \xi_2^{(2)} + \xi_1^{(1)} + \xi_2^{(1)}) L_x^2 \\ k_{14}^{(L2,S)} &= EA/L^3 \cdot (\xi_1^{(2)} - \xi_1^{(1)}) (-\xi_1^{(2)} - \xi_2^{(2)} + \xi_1^{(1)} + \xi_2^{(1)}) L_x L_y \\ k_{15}^{(L2,S)} &= EA/L^3 \cdot (\xi_2^{(2)} - \xi_2^{(1)}) (-\xi_1^{(2)} - \xi_2^{(2)} + \xi_1^{(1)} + \xi_2^{(1)}) L_x^2 \\ k_{16}^{(L2,S)} &= EA/L^3 \cdot (\xi_2^{(2)} - \xi_2^{(1)}) (-\xi_1^{(2)} - \xi_2^{(2)} + \xi_1^{(1)} + \xi_2^{(1)}) L_x L_y \\ k_{21}^{(L2,S)} &= k_{12}^{(L2,S)} \\ k_{22}^{(L2,S)} &= EA/L^3 \cdot (-\xi_1^{(2)} - \xi_2^{(2)} + \xi_1^{(1)} + \xi_2^{(1)})^2 L_y^2 \\ k_{23}^{(L2,S)} &= EA/L^3 \cdot (\xi_1^{(2)} - \xi_1^{(1)}) (-\xi_1^{(2)} - \xi_2^{(2)} + \xi_1^{(1)} + \xi_2^{(1)}) L_x L_y\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
k_{24}^{(L2,S)} &= EA/L^3 \cdot (\xi_1^{(2)} - \xi_1^{(1)}) (-\xi_1^{(2)} - \xi_2^{(2)} + \xi_1^{(1)} + \xi_2^{(1)}) L_y^2 \\
k_{25}^{(L2,S)} &= EA/L^3 \cdot (\xi_2^{(2)} - \xi_2^{(1)}) (-\xi_1^{(2)} - \xi_2^{(2)} + \xi_1^{(1)} + \xi_2^{(1)}) L_x L_y \\
k_{26}^{(L2,S)} &= EA/L^3 \cdot (\xi_2^{(2)} - \xi_2^{(1)}) (-\xi_1^{(2)} - \xi_2^{(2)} + \xi_1^{(1)} + \xi_2^{(1)}) L_y^2 \\
k_{31}^{(L2,S)} &= k_{13}^{(L2,S)} \\
k_{32}^{(L2,S)} &= k_{23}^{(L2,S)} \\
k_{33}^{(L2,S)} &= EA/L^3 \cdot (\xi_1^{(2)} - \xi_1^{(1)})^2 L_x^2 \\
k_{34}^{(L2,S)} &= EA/L^3 \cdot (\xi_1^{(2)} - \xi_1^{(1)})^2 L_x L_y \\
k_{35}^{(L2,S)} &= EA/L^3 \cdot (\xi_2^{(2)} - \xi_2^{(1)}) (\xi_1^{(2)} - \xi_1^{(1)}) L_x^2 \\
k_{36}^{(L2,S)} &= EA/L^3 \cdot (\xi_2^{(2)} - \xi_2^{(1)}) (\xi_1^{(2)} - \xi_1^{(1)}) L_x L_y \\
k_{41}^{(L2,S)} &= k_{14}^{(L2,S)} \\
k_{42}^{(L2,S)} &= k_{24}^{(L2,S)} \\
k_{43}^{(L2,S)} &= k_{34}^{(L2,S)} \\
k_{44}^{(L2,S)} &= EA/L^3 \cdot (\xi_1^{(2)} - \xi_1^{(1)})^2 L_y^2 \\
k_{45}^{(L2,S)} &= EA/L^3 \cdot (\xi_2^{(2)} - \xi_2^{(1)}) (\xi_1^{(2)} - \xi_1^{(1)}) L_x L_y \\
k_{46}^{(L2,S)} &= EA/L^3 \cdot (\xi_2^{(2)} - \xi_2^{(1)}) (\xi_1^{(2)} - \xi_1^{(1)}) L_y^2 \\
k_{51}^{(L2,S)} &= k_{15}^{(L2,S)} \\
k_{52}^{(L2,S)} &= k_{25}^{(L2,S)} \\
k_{53}^{(L2,S)} &= k_{35}^{(L2,S)} \\
k_{54}^{(L2,S)} &= k_{45}^{(L2,S)} \\
k_{55}^{(L2,S)} &= EA/L^3 \cdot (\xi_2^{(2)} - \xi_2^{(1)})^2 L_x^2 \\
k_{56}^{(L2,S)} &= EA/L^3 \cdot (\xi_2^{(2)} - \xi_2^{(1)})^2 L_x L_y \\
k_{61}^{(L2,S)} &= k_{16}^{(L2,S)} \\
k_{62}^{(L2,S)} &= k_{26}^{(L2,S)} \\
k_{63}^{(L2,S)} &= k_{36}^{(L2,S)} \\
k_{64}^{(L2,S)} &= k_{46}^{(L2,S)} \\
k_{65}^{(L2,S)} &= k_{56}^{(L2,S)} \\
k_{66}^{(L2,S)} &= EA/L^3 \cdot (\xi_2^{(2)} - \xi_2^{(1)})^2 L_y^2
\end{aligned} \tag{A.2}$$

## A.2 Beitrag eines Stabes zum inneren Kraftvektor

(A.1) eingesetzt in (5.12) und das Ergebnis wiederum eingesetzt in (5.13) ergibt den Beitrag einer Feder  $\mathbf{f}_{\text{int}}^{(L2,S)}$  zum inneren Kraftvektor eines Level 2-Elements  $\mathbf{f}_{\text{int}}^{(L2)}$  in Abhängigkeit der lokalen Koordinaten des Anfangspartikels eines Stabes im Element  $\boldsymbol{\xi}^{(1)} = [\xi_1^{(1)} \ \xi_2^{(1)}]^T$  und des entsprechenden Endpartikels  $\boldsymbol{\xi}^{(2)} = [\xi_1^{(2)} \ \xi_2^{(2)}]^T$ :

$$\mathbf{f}_{\text{int}}^{(L2,S)} = \omega_S \cdot fac \cdot \frac{E_{\text{sec}} A}{L^3} \begin{bmatrix} L_x (\xi_1^{(2)} + \xi_2^{(2)} - \xi_1^{(1)} - \xi_2^{(1)}) \\ L_y (\xi_1^{(2)} + \xi_2^{(2)} - \xi_1^{(1)} - \xi_2^{(1)}) \\ L_x (\xi_1^{(1)} - \xi_1^{(2)}) \\ L_y (\xi_1^{(1)} - \xi_1^{(2)}) \\ L_x (\xi_2^{(1)} - \xi_2^{(2)}) \\ L_y (\xi_2^{(1)} - \xi_2^{(2)}) \end{bmatrix} \quad (\text{A.3})$$

$$\begin{aligned} fac = & L_x d_1 \xi_1^{(2)} + L_x d_1 \xi_2^{(2)} - L_x d_3 \xi_1^{(2)} - L_x d_5 \xi_2^{(2)} - L_x d_1 \xi_1^{(1)} - L_x d_1 \xi_2^{(1)} \\ & + L_x d_3 \xi_1^{(1)} + L_x d_5 \xi_2^{(1)} + L_y d_2 \xi_1^{(2)} + L_y d_2 \xi_2^{(2)} - L_y d_4 \xi_1^{(2)} - L_y d_6 \xi_2^{(2)} \\ & - L_y d_2 \xi_1^{(1)} - L_y d_2 \xi_2^{(1)} + L_y d_4 \xi_1^{(1)} + L_y d_6 \xi_2^{(1)} \end{aligned}$$



---

# Literaturverzeichnis

ALDER UND WAINWRIGHT 1957

ALDER, B. J. ; WAINWRIGHT, T. E.: Phase transition for a hard sphere system. In: *The Journal of Chemical Physics* 27 (1957), S. 1208–1209

ALDER UND WAINWRIGHT 1959

ALDER, B. J. ; WAINWRIGHT, T. E.: Studies in molecular dynamics: I. general method. In: *The Journal of Chemical Physics* 31 (1959), S. 459–466

ARGYRIS 1960

ARGYRIS, J. H.: *Energy theorems and structural analysis*. London : Butterworth, 1960. – Neuauflage aus Artikeln in *Aircraft Engineering* 1954–1955

BAŽANT U. A. 1990

BAŽANT, Z. ; TABBARA, M. ; KAZEMI, M. ; PIJAUDIER-CABOT, G.: Random particle model for fracture of aggregate or fiber composites. In: *Journal of Engineering Mechanics* 116 (1990), Nr. 8, S. 1686–1705

BEEEX 2012

BEEEX, L. A. A.: *Multiscale quasicontinuum modelling of fibrous materials*. Technische Universiteit Eindhoven, PhD Thesis, 2012

BEEEX U. A. 2011

BEEEX, L. A. A. ; PEERLINGS, R. H. J. ; GEERS, M. G. D.: A quasicontinuum methodology for multiscale analyses of discrete microstructural models. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 87 (2011), S. 701–718

BELYTSCHKO UND XIAO 2003

BELYTSCHKO, T. ; XIAO, S.P.: Coupling methods for continuum model with molecular model. In: *International Journal for Multiscale Computational Engineering* 1 (2003), S. 115–126

BELYTSCHKO, T. U. A. 2008

BELYTSCHKO, T. ; LIU, W. K. ; MORAN, B.: *Nonlinear finite elements for continua and structures*. Chichester : Wiley, 2008

BEN DHIA 1998

BEN DHIA, H.: Problèmes mécaniques multi-échelles : la méthode Arlequin. In: *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences, Série II b* 326 (1998), S. 899–904

BEUTH 2012

BEUTH, L.: *Formulation and application of a quasi-static material point method*. Institut für Geotechnik, Universität Stuttgart, Dissertation, 2012

BISCHOFF U. A. 2006

BISCHOFF, M. ; RAMM, E. ; SCHNEIDER, B.: *Computational mechanics of structures*. Unterlagen zur Vorlesung, Wintersemester 2006/2007, Universität Stuttgart, Deutschland. 2006

CUNDALL UND STRACK 1979

CUNDALL, P. A. ; STRACK, O. D. L.: A discrete numerical model for granular assemblies. In: *Géotechnique* 29 (1979), Nr. 1, S. 47–65

CURTIN UND MILLER 2003

CURTIN, W. A. ; MILLER, R. E.: Atomistic/continuum coupling in computational materials science. In: *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* 11 (2003), S. R33–R68

DAW UND BASKES 1983

DAW, M. S. ; BASKES, M. I.: Semiempirical, Quantum Mechanical Calculation of Hydrogen Embrittlement in Metals. In: *Physical Review Letters* 50 (1983), Nr. 17, S. 1285–1288

DAW UND BASKES 1984

DAW, M. S. ; BASKES, M. I.: Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals. In: *Physical Review B* 29 (1984), Nr. 12, S. 6443–6453

DE BORST 1986

DE BORST, R.: *Non-linear analysis of frictional materials*. Technische Universität Delft, Niederlande, Dissetation, 1986



DEUFLHARD UND BORNEMANN 2008

DEUFLHARD, P. ; BORNEMANN, F.: *Numerische Mathematik 2, Gewöhnliche Differentialgleichungen*. 3. Auflage. Berlin : de Gruyter, 2008

FISH 2006

FISH, J.: Bridging the scales in nano engineering and science. In: *Journal of Nanoparticle Research* 8 (2006), S. 577–594

GALVANETTO UND ALIABADI 2010

GALVANETTO, U. ; ALIABADI, F. M. H.: *Multiscale modeling in solid mechanics computational approaches*. London : Imperial College Press, 2010 (Computational and Experimental Methods in Structures – Vol. 3)

GINGOLD UND MONAGHAN 1977

GINGOLD, R. A. ; MONAGHAN, J. J.: Smoothed particle hydrodynamics–Theory and application to nonspherical stars. In: *Royal Astronomical Society, Monthly Notices* 181 (1977), S. 375–889

GITMAN U. A. 2007

GITMAN, I. M. ; ASKES, H. ; SLUYS, L. J.: Representative volume: existence and size determination. In: *Engineering Fracture Mechanics* 74 (2007), Nr. 16, S. 2518–2534

HARLOW U. A. 1964

HARLOW, F. H. ; ELLISON, M. A. ; REID, J. H.: The particle-in-cell computing method for fluid dynamics. In: *Methods in Computational Physics* 3 (1964), S. 319–343

HOLZAPFEL 2000

HOLZAPFEL, G. A.: *Nonlinear solid mechanics: A continuum approach for engineering*. Chichester : Wiley, 2000

HRENNIKOFF 1941

HRENNIKOFF, A.: Solution of problems in elasticity by the framework method. In: *Journal of Applied Mechanics* 8 (1941), Nr. 4, S. 169–175

HUGHES U. A. 1998

HUGHES, T. J. R. ; FEIJOO, G. R. ; MAZZEI, L. ; QUINCY, J.-B.: The variational multiscale method - paradigm for computational mechanics. In: *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 166 (1998), S. 3–24

HUGHES 2000

HUGHES, T.J.R.: *The finite element method: Linear static and dynamic finite element analysis*. New York : Dover, 2000

HUND 2007

HUND, A. S.: *Hierarchische Mehrskalenmodellierung des Versagens von Werkstoffen mit Mikrostruktur*. Bericht Nr. 48, Institut für Baustatik und Baudynamik, Universität Stuttgart, Dissertation, 2007

JIRÁSEK 2012

JIRÁSEK, M.: *Modeling of localized inelastic deformation: Lecture notes*. Short course, 17.-21. September 2012, Czech Technical University, Prag, Tschechien. 2012

KUHL UND MESCHKE 2002

KUHL, D. ; MESCHKE, G.: *Finite Elemente Methoden I & II*. Unterlagen zur Vorlesung, Wintersemester 2002/2003, Ruhr-Universität Bochum, Deutschland. 2002

KUHL 2000

KUHL, E.: *Numerische Modelle für kohäsive Reibungsmaterialien*. Bericht Nr. 32, Institut für Baustatik, Universität Stuttgart, Dissertation, 2000

LABRA GONZÁLEZ 2012

LABRA GONZÁLEZ, C. A.: *Advances in the development of the discrete element method for excavation processes*. Universitat Politècnica de Catalunya, PhD Thesis, 2012

LI UND LIU 2004

LI, S. ; LIU, W. K.: *Meshfree particle methods*. Berlin; New York : Springer, 2004

LIBERSKY UND PETSCHKEK 1991

LIBERSKY, L. D. ; PETSCHKEK, A. G.: Smooth particle hydrodynamics with strength of materials. In: *Lecture Notes in Physics* 395 (1991), S. 248—257

LIU U. A. 2006

LIU, W. K. ; PARK, H. S. ; PARKOV, E. G.: *Nano mechanics and materials: theory, multiscale methods and applications*. Chichester : Wiley, 2006

LUCY 1977

LUCY, L. B.: A numerical approach to testing of the fission hypothesis. In: *Astronomical Journal* 82 (1977), S. 1013–1024

LUDING 1998

LUDING, S.: Collisions & contacts between two particles. In: HERRMANN, H. J. (Hrsg.) ; HOVI, J.-P. (Hrsg.) ; LUDING, S. (Hrsg.): *Physics of dry granular media – NATO ASI Series E 350*. Dordrecht : Kluwer Academic Publishers, 1998

MARSDEN UND HUGHES 1994

MARSDEN, J. E. ; HUGHES, T. J. R.: *Mathematical foundations of elasticity*. New York : Dover, 1994

## MIEHE U. A. 2011

MIEHE, C. ; DETTMAR, J. ; ZÄH, D.: Homogenization and multiscaling of granular media for different microscopic constraints. In: DE BORST, R. (Hrsg.) ; RAMM, E. (Hrsg.): *Multiscale Methods in Computational Mechanics, Lecture Notes in Applied and Computational Mechanics, Vol. 55*. Dordrecht : Springer, 2011, S. 155–177

## MILLER UND TADMOR 2009

MILLER, R. E. ; TADMOR, E. B.: A unified framework and performance benchmark of fourteen multiscale atomistic/continuum coupling methods. In: *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* 17 (2009), S. 1–51

## MONTERO-CHACÓN UND MEDINA 2013

MONTERO-CHACÓN, F. ; MEDINA, F.: A lattice-particle approach to determine the RVE size for quasi-brittle materials. In: *Engineering Computations* 30 (2013), Nr. 2, S. 246–262

## OSTOJA-STARZEWSKI 2002

OSTOJA-STARZEWSKI, M.: Lattice models in micromechanics. In: *Applied Mechanics Reviews* 55 (2002), Nr. 1, S. 35–60

## POHL 2014

POHL, T. E.: *Adaptive Methoden zur Pfadverfolgung bei Entfestigung*. Bericht Nr. 62, Institut für Baustatik und Baudynamik, Universität Stuttgart, Dissertation, 2014

## PÖSCHEL UND SCHWAGER 2005

PÖSCHEL, T. ; SCHWAGER, T.: *Computational Granular Dynamics: models and algorithms*. Berlin : Springer, 2005

## RAMM U. A. 2004

RAMM, E. ; LEUKART, M. ; HETTICH, T. ; HUND, A.: *Nichtlineare Finite Elemente für Tragwerksberechnungen*. Unterlagen zur Vorlesung, Sommersemester 2004, Universität Stuttgart, Deutschland. 2004

## RIVARA 1984

RIVARA, M. C.: Algorithms for refining triangular grids suitable for adaptive and multigrid techniques. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 20 (1984), S. 745–756

## SCHLANGEN UND VAN MIER 1992

SCHLANGEN, E. ; VAN MIER, J. G. M.: Simple lattice models for numerical simulation of concrete materials and structures. In: *Materials and Structures* 25 (1992), S. 534–542

SCHNEIDER 2012

SCHNEIDER, B. J.: *Polygonale diskrete Elemente zur Modellierung heterogener Materialien*. Bericht Nr. 56, Institut für Baustatik und Baudynamik, Universität Stuttgart, Dissertation, 2012

SHAN 2009

SHAN, W.: *Multiscale coupling based on the Quasicontinuum framework, with application to contact problems*. Bericht Nr. F 09/3, Institut für Baumechanik und Numerische Mechanik, Gottfried Wilhelm Leibniz Universität Hannover, Dissertation, 2009

SHENOY U. A. 1999

SHENOY, V. B. ; MILLER, R. ; TADMOR, E. B. ; RODNEY, D. ; PHILLIPS, R. ; ORTIZ, M.: An adaptive finite element approach to atomic-scale mechanics - the quasicontinuum method. In: *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 47 (1999), S. 611–642

STRANG 1986

STRANG, Gilbert: *Introduction to applied mathematics*. Wellesley, Massachusetts : Wellesley-Cambridge Press, 1986

SULSKY U. A. 1994

SULSKY, D. ; CHEN, Z. ; SCHREYER, H. L.: A particle method for history-dependent materials. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 118 (1994), Nr. 1–2, S. 179–196

TADMOR 1996

TADMOR, E. B.: *The quasicontinuum method*. Brown University, PhD Thesis, 1996

TADMOR U. A. 1996

TADMOR, E. B. ; ORTIZ, M. ; PHILLIPS, R.: Quasicontinuum analysis of defects in solids. In: *Philosophical Magazine A* 73 (1996), S. 1529–1563

TURNER U. A. 1956

TURNER, M. J. ; CLOUGH, H. C. ; MARTIN, H. C. ; TOPP, L. J.: Stiffness and deflection analysis of complex structures. In: *Journal of the Aeronautical Sciences* 23 (1956), Nr. 9, S. 805–823

WAGNER UND LIU 2003

WAGNER, G. J. ; LIU, W. K.: Coupling of atomistic and continuum simulations using a bridging scale decomposition. In: *Journal of Computational Physics* 190 (2003), S. 249–274

## WIKIPEDIA 2014

WIKIPEDIA: *The free encyclopedia*. 2014. – URL [http://en.wikipedia.org/wiki/Delaunay\\_triangulation#Algorithms](http://en.wikipedia.org/wiki/Delaunay_triangulation#Algorithms). – Artikel zu „Delaunay triangulation“

## XIAO UND BELYTSCHKO 2004

XIAO, S.P. ; BELYTSCHKO, T.: A bridging domain method for coupling continua with molecular dynamics. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 193 (2004), S. 1645–1669

## ZIENKIEWICZ UND CHEUNG 1967

ZIENKIEWICZ, O. C. ; CHEUNG, Y. K.: *The finite element method in structural and continuum mechanics: numerical solution of problems in structural and continuum mechanics*. London : McGraw-Hill, 1967

## ZIENKIEWICZ U. A. 2006

ZIENKIEWICZ, O. C. ; TAYLOR, R. L. ; ZHU, J. Z.: *The finite element method: Its basis and fundamentals*. 6. Auflage. Oxford : Elsevier, 2006

## ZIENKIEWICZ UND ZHU 1987

ZIENKIEWICZ, O. C. ; ZHU, J. Z.: A simple error estimator and adaptive procedure for practical engineering analysis. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 24 (1987), S. 337–357

## ZIENKIEWICZ UND ZHU 1992

ZIENKIEWICZ, O. C. ; ZHU, J. Z.: The superconvergent patch recovery and a posteriori error estimates. Part 1: The recovery technique. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 33 (1992), Nr. 7, S. 1331–1364



---

## Lebenslauf

### Persönliche Angaben:

Name: Annika Mareike Sorg  
Geburtsdatum: 3. April 1982  
Geburtsort: Waiblingen  
Familienstand: ledig

### Schulbildung:

09/1988 - 08/1992 Friedensschule, Waiblingen-Neustadt  
09/1992 - 07/2001 Salier Gymnasium, Waiblingen  
07/2001 Allgemeine Hochschulreife

### Universitäre Ausbildung:

10/2001 - 02/2006 Fachhochschule für Technik, Stuttgart  
Studium Bauingenieurwesen  
02/2006 Fachhochschule Stuttgart:  
Diplom-Ingenieur (FH)  
10/2006 - 06/2008 Universität Stuttgart  
Studium „Computational Mechanics of Materials  
and Structures“ (COMMAS)  
06/2008 Universität Stuttgart:  
Master of Science  
07/2008 - 06/2014 Institut für Baustatik und Baudynamik, Universi-  
tät Stuttgart:  
Akademische Mitarbeiterin





---

## Berichte des Instituts für Baustatik und Baudynamik 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 längsversteifter Kreiszylinderschalen unter Axialdruck.
- 4 (1984) **A. Burmeister, F.W. Bornscheuer, E. Ramm:**  
Traglasten von Kugelbehältern mit Stutzen 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 Anwendung 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 Längssteifen axial-belasteter 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) **T.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 Hochhausstragwerken.
- 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. Cirak:**  
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 Strukturodynamik.
- 34 (2001) **S. Schwarz:**  
Sensitivitätsanalyse und Optimierung bei nichtlinearem Strukturverhalten.
- 35 (2001) **A. Haufe:**  
Dreidimensionale Simulation bewehrter Flächentragwerke aus Beton mit der Plastizitätstheorie.
- 36 (2001) **D.P. Mok:**  
Partitionierte Lösungsverfahren in der Strukturodynamik 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 Versagensanalyse 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.A. 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 transienter Impaktvorgänge bei nichtlinearem Materialverhalten.
- 45 (2005) **M. Leukart:**  
Kombinierte anisotrope Schädigung und Plastizität bei kohäsiven Reibungsmaterialien.
- 46 (2006) **F. Huber:**  
Nichtlineare dreidimensionale Modellierung von Beton- und Stahlbetontragwerken.
- 47 (2007) **A. Lipka:**  
Verbesserter Materialeinsatz innovativer Werkstoffe durch die Topologieoptimierung.
- 48 (2007) **A.S. Hund:**  
Hierarchische Mehrskalenmodellierung des Versagens von Werkstoffen mit Mikrostruktur.
- 49 (2007) **S. Hartmann:**  
Kontaktanalyse dünnwandiger Strukturen bei großen Deformationen.
- 50 (2007) **T.M. Hettich:**  
Diskontinuierliche Modellierung zur Versagensanalyse von Verbundmaterialien.
- 51 (2007) **C. Förster:**  
Robust Methods for Fluid-Structure Interaction with Stabilised Finite Elements.
- 52 (2009) **M. von Scheven:**  
Effiziente Algorithmen für die Fluid-Struktur-Wechselwirkung.
- 53 (2010) **J. Kato:**  
Material Optimization for Fiber Reinforced Composites applying a Damage Formulation.

- 54 (2010) **C.F. Hilchenbach:**  
Optimierung von Mehrphasenstrukturen mit lokalem Schädigungsverhalten.
- 55 (2011) **I. Bruss:**  
Dreidimensionale Schädigungsmodellierung heterogener Materialien.
- 56 (2012) **B.J. Schneider:**  
Polygonale diskrete Elemente zur Modellierung heterogener Materialien.
- 57 (2012) **R. Etlender:**  
Modellierung und Simulation der Wellenausbreitung in flexiblen hydraulischen Leitungen.
- 58 (2012) **T. Cichosz:**  
Stabile und konsistente Kontaktmodellierung in Raum und Zeit.
- 59 (2013) **R. Echter:**  
Isogeometric Analysis of Shells.
- 60 (2013) **A. Tkachuk:**  
Variational Methods for Consistent Singular and Scaled Mass Matrices.
- 61 (2013) **J. Irslinger:**  
Mechanische Grundlagen und Numerik dreidimensionaler Schalenelemente.
- 62 (2014) **T. Pohl:**  
Adaptive Methoden zur Pfadverfolgung bei Entfestigung.





**Annika Sorg**

In der vorliegenden Arbeit wird zunächst die unterschiedliche Struktur von Materialien auf verschiedenen Skalen diskutiert. Abhängig von der Skala, auf der ein Material betrachtet wird, eignen sich unterschiedliche Modellierungsansätze. Zur Modellierung diskreter Strukturen und Kontinua werden jeweils verschiedene Methoden vorgestellt, sowie einige Methoden, die diskrete und kontinuierliche Modelle miteinander koppeln.

Den Kern dieser Arbeit bildet die Entwicklung einer netz- und modelladaptiven Methode. Bei praktisch gleicher Genauigkeit ermöglicht die Methode Simulationen des Bruchverhaltens kohäsiver Reibungsmaterialien mit einer Form der Diskrete-Elemente-Methode (DEM), ohne die gesamte Struktur mit Partikeln aufzulösen. Um der Erfordernis einer Modellierung von Phänomenen auf unterschiedlichen geometrischen Skalen in einer Simulation gerecht zu werden, wird eine Kopplung der Finite-Elemente-Methode (FEM) und der DEM vorgeschlagen. Es werden Ideen der Quasikontinuumsmethode (TADMOR U.A., 1996) übernommen und auf eine Anwendung für Probleme in der Strukturmechanik kohäsiver Reibungsmaterialien übertragen.

Bei der entwickelten Methode liefert die FEM die Kinematik des Systems und die DEM das Konstitutivverhalten. Runde, gleich große und regelmäßig angeordnete Partikel, die über Stäbe miteinander verbunden sind, bilden die Mikrostruktur (in 2D). Es werden drei unterschiedliche Elementtypen eingeführt, die die Mikrostruktur mit unterschiedlicher Genauigkeit auflösen. Im homogenen Fall, bei dem alle Stäbe dieselbe Steifigkeit besitzen, kann die Cauchy-Born-Regel auf die Mikrostruktur angewendet werden, um die Ersatzsteifigkeit der Übergangselemente zu bestimmen. Bei einer heterogenen Steifigkeitsverteilung ist dies jedoch nicht möglich. Für solche Fälle wird eine neue Strategie vorgeschlagen, bei der für jedes Übergangselement ein lokales Unterproblem gelöst wird.