Polygonale diskrete Elemente zur Modellierung heterogener Materialien

Benjamin J. Schneider

Polygonale diskrete Elemente zur Modellierung heterogener Materialien

von

Benjamin J. Schneider



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

Tel.: +49 (0)711 685 - 66123Fax: +49 (0)711 685 - 66130

E-Mail: 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 978-3-00-038440-0

Polygonale diskrete Elemente zur Modellierung heterogener Materialien

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

vorgelegt von

Benjamin J. Schneider

aus Würzburg

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

Mitberichter: Prof. Nenad Bićanić, Regius Prof. of Civil Engineering, Glasgow

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

Tag der mündlichen Prüfung: 4. Mai 2012

Institut für Baustatik und Baudynamik der Universität Stuttgart

Kurzfassung

Die vorliegende Arbeit befasst sich mit der Modellierung des mechanischen Verhaltens heterogener Materialien, die auf der mikroskopischen oder einer gröberen Skala aus festen Teilchen aufgebaut sind. Um auf dieser Skala auftretende Vorgänge abzubilden, wird der heterogene Materialaufbau aus Teilchen explizit dargestellt. Hierzu wird eine Diskrete-Element-Methode eingesetzt, die Materialien durch abgegrenzte, miteinander interagierende Partikel beschreibt. Die vorgestellte Methode verwendet starre polygonale Partikel, eine weiche Modellierung der Partikelinteraktionen durch Kontakt und haftende Verbindung sowie ein explizites Lösungsverfahren in der Zeit. Ziel der Arbeit ist zum einen, die Modelle für die Interaktion der Partikel weiterzuentwickeln. Da die numerischen Kosten der Methode oftmals hoch sind, sollen die Modelle bei akzeptablem numerischem Aufwand die wichtigen mechanischen Eigenschaften der Interaktionen wiedergeben. Zum anderen soll die Leistungsfähigkeit der entwickelten Methode analysiert werden.

Bei der Modellierung des Partikelkontakts wird ein elastisches Normalkraftmodell zur Abbildung der repulsiven Kraft eingesetzt, das um ein viskoses Modell ergänzt wird. In tangentialer Richtung wird sowohl Haften als auch Gleiten durch ein elasto-plastisches Kontaktmodell abgebildet. Zusätzlich wird Haften und Gleiten aufgrund der Reibung zwischen einem Partikel und einem ebenen Untergrund durch ein neues, ebenfalls elasto-plastisches Kontaktmodell beschrieben. Zur Modellierung der haftenden Verbindung zwischen Partikeln wird ein elasto-schädigendes Balkenmodell entwickelt, das unterschiedliche Versagensarten der Partikelverbindung bei numerisch akzeptablem Aufwand wiedergeben kann. Dieses Balkenmodell wird um ein Potenzmodell für die ratenabhängige Festigkeit erweitert, so dass ein Festigkeitsanstieg der haftenden Verbindung bei Erhöhung der Dehnrate dargestellt werden kann.

Um die Leistungsfähigkeit der entwickelten Methode möglichst direkt analysieren zu können, werden Konzeptexperimente durchgeführt. Dies sind einerseits experimentelle Druckversuche an einem granularen Modellmaterial. In Simulationen können mit den Kontaktmodellen charakteristische Phänomene wie Scherbänder dargestellt werden. Andererseits werden experimentelle Druckversuche an einem Modellmaterial aus miteinander verklebten Teilchen ausgeführt. In den Simulationen kann gezeigt werden, dass mit dem Balkenmodell für die haftende Verbindung wesentliche Eigenschaften des Versagensverhaltens wiedergegeben werden können. Abschließend wird die Methode zur Simulation von Beton eingesetzt. Dabei können typische Eigenschaften des Betonversagens wie die Lokalisierung der Deformation und das Versagensmuster qualitativ abgebildet werden. Mit dem Modell für die ratenabhängige Balkenfestigkeit kann ein Anstieg der Probenfestigkeit bei Erhöhung der Belastungsgeschwindigkeit beschrieben werden.

Abstract

The present work addresses the modeling of the mechanical behavior of heterogeneous materials that are composed of solid particles on the microscopic or a coarser scale. To reproduce phenomena emerging on this scale, the heterogeneous material constitution out of particles is described in an explicit way. For this purpose a discrete element method is used, which models materials by separated, interacting particles. The introduced method employs rigid polygonal particles, a soft modeling of the particle interactions by contact and adhering bond as well as an explicit solution method in time. The aim of this work is, on the one hand, to enhance the models for the interaction between the particles. Since the numerical expense of the method is often high, the models shall depict the important mechanical characteristics of the interactions having acceptable numerical costs. On the other hand, the capability of the developed method is to be analyzed.

For the contact of the particles an elastic normal force model is adopted to represent the repulsive force. It is supplemented by a viscous model. In tangential direction sticking as well as sliding is described by an elasto-plastic contact model. Additionally, sticking and sliding due to friction between a particle and a plane background is modeled by a new, also elasto-plastic contact model. For the adhering bond between the particles an elasto-damage beam model is presented, which is able to reproduce different types of bond failure having acceptable numerical costs. This beam model is extended by a power-law model for the rate-dependent strength so that an increase of the bond strength can be depicted for an increase of the strain rate.

In order to analyze the capability of the developed method in a direct way, conceptual experiments are carried out. Those are, firstly, compression experiments on a granular model material. Using the contact models, characteristic phenomena like shear bands can be described in the simulations. Secondly, compression experiments on a model material out of glued particles are performed. It is demonstrated in the simulations that essential properties of the failure behavior can be represented using the beam model for the adhering bond. Finally, the method is used to simulate concrete. Typical properties of the concrete failure like the localization of the deformation and the failure pattern can be reproduced qualitatively. Using the model for the rate-dependent beam strength, an increase of the specimen strength can be shown for an increase of the loading velocity.

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Baustatik und Baudynamik der Universität Stuttgart. Vielen Dank an die Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) für die Förderung des Projekts "Fragmentierung kohäsiver Reibungsmaterialien mit diskretem Partikelmodell" (RA 218/22-1) sowie des Projekts "Discrete Element Modeling of Failure at Mesoscopic Scale" im Rahmen des Exzellenzclusters Simulation Technology (EXC 310/1) an der Universität Stuttgart.

Mein besonderer Dank gilt Herrn Professor Ekkehard Ramm. Als Doktorvater hat er mir die Möglichkeit gegeben, in einem hervorragenden Arbeitsumfeld tätig zu sein, und mich auf vielfältige Weise gefördert. Sowohl in fachlicher und methodischer als auch in persönlicher Hinsicht durfte ich sehr viel von ihm lernen.

Vielen Dank an Herrn Professor Nenad Bićanić für das Interesse an meiner Arbeit und die Übernahme des Mitberichts. An Herrn Professor Manfred Bischoff herzlichen Dank ebenfalls für die Übernahme des Mitberichts sowie für die fortwährende Unterstützung und die Möglichkeit, an seinem Institut tätig zu sein.

Bei Herrn Dr. Walter Haase, Herrn Jürgen Braig und Herrn Markus Berndt am Institut für Leichtbau Entwerfen und Konstruieren der Universität Stuttgart bedanke ich mich für die Unterstützung bei den Experimenten. Danke an Herrn Professor Christoph Gehlen und Herrn Dr. Sven Mönnig für die Möglichkeit, die Experimente an dem verklebten Modellmaterial am Institut für Werkstoffe im Bauwesen der Universität Stuttgart durchführen zu können. Herrn Professor Hans Jürgen Herrmann möchte ich für die Bereitstellung des Quellcodes danken. Großen Dank an Herrn Dr. Gian Antonio D'Addetta dafür, dass ich auf seine Forschungsergebnisse zurückgreifen konnte und er mich fortlaufend unterstützt hat. Ein herzliches Dankeschön an ihn, Frau Annika Sorg und Frau Susanne Werner für die Durchsicht der Arbeit sowie an Herrn Thomas Cichosz, Herrn Anton Tkachuk und Herrn Dr. Malte von Scheven für die Durchsicht einzelner Abschnitte.

Ich möchte mich bei den Kolleginnen und Kollegen am Institut für Baustatik und Baudynamik herzlich bedanken: für das tolle Arbeitsklima, die kollegiale Zusammenarbeit und ihre Hilfe, aber auch für die unterhaltsamen Pausen und Freizeitaktivitäten.

Bei meiner lieben Familie und meiner lieben Susanne bedanke ich mich von ganzem Herzen für den Rückhalt und die Unterstützung jeglicher Art.

Stuttgart, im Juni 2012

Benjamin J. Schneider

Inhaltsverzeichnis

A	bbild	lungsv	erzeichnis	ix
T_i	abelle	enverz	eichnis	XV
\mathbf{A}	bkür	zunger	n und Bezeichnungen	xvi
1	Ein	leitung		1
	1.1	Motiv	ation und Zielsetzung	1
	1.2		erung	3
2	Gru	\mathbf{ndlege}	ende Gleichungen	5
	2.1	Kinen	natik des materiellen Körpers	5
		2.1.1	Kinematik des deformierbaren Körpers	5
		2.1.2	Kinematik des Starrkörpers	7
	2.2	Mecha	anische Bilanzgleichungen	8
		2.2.1	Massenbilanz	Ĝ
		2.2.2	Impulsbilanz	Ĝ
		2.2.3	Drehimpulsbilanz	10
		2.2.4	Energiebilanz	12
	2.3	Anfan	gs- und Randbedingungen	13
		2.3.1	Anfangsbedingungen	13
		2.3.2	Randbedingungen	14
3	Dis	krete-I	Element-Methode	15
	3.1	Einfül	hrung	15
	3.2	Diskre	etes Modell im Raum	21
		3.2.1	Diskrete Elemente	21
		3.2.2	Interaktion der diskreten Elemente	27
		3.2.3	Resultierendes Anfangswertproblem	29
		3.2.4	Eigenschaften des diskreten Modells im Raum	32
	3.3	Diskre	etisierung in der Zeit	34
		3.3.1	Schrittweise Verfahren zur Lösung des Anfangswertproblems $\ . \ .$.	35
		3.3.2	Eigenschaften der Diskretisierung in der Zeit	43

4	Mo	dellier	ung des Kontakts zwischen Partikeln	47
	4.1	Konta	ktermittlung	. 48
	4.2	Model	lle für die Normalkraft	. 52
		4.2.1	Übersicht	. 53
		4.2.2	Elastisches Kontaktmodell mit viskoser Dämpfung	. 55
		4.2.3	Eigenschaften	. 57
	4.3	Model	lle für die Tangentialkraft	. 59
		4.3.1	Übersicht	. 59
		4.3.2	Elasto-plastisches Kontaktmodell	. 61
		4.3.3	Eigenschaften	. 65
	4.4	Model	lle für die Kraft zwischen Partikel und ebenem Untergrund	. 66
		4.4.1	Übersicht	. 67
		4.4.2	Elasto-plastisches Kontaktmodell	. 68
		4.4.3	Eigenschaften	. 72
5	Mo	dellier	ung der haftenden Verbindung zwischen Partikeln	75
	5.1	Model	lle für die Kraft aus haftender Verbindung	. 76
		5.1.1	Übersicht	. 76
		5.1.2	Elasto-schädigendes Balkenmodell	. 80
		5.1.3	Eigenschaften	. 87
	5.2	Model	lle für die ratenabhängige Festigkeit	. 97
		5.2.1	Übersicht	. 98
		5.2.2	Potenzmodell für das elasto-schädigende Balkenmodell	. 98
		5.2.3	Eigenschaften	. 102
6	Unt	ersuch	nungen an granularen Materialien	109
	6.1	Exper	imente an Modellmaterial – Aufbau	. 110
	6.2	Simula	ationen von Modellmaterial – Aufbau	. 112
	6.3	Exper	imente und Simulationen an Modellmaterial – Ergebnisse	. 114
		6.3.1	Druckversuche an Probekörpern mit Fehlstelle	. 114
		6.3.2	Druckversuche an Probekörpern ohne Fehlstelle	. 117
		6.3.3	Zusammenfassung	. 122
7	Unt	ersuch	nungen an heterogenen Festkörpern	125
	7.1	Exper	imente an Modellmaterial – Aufbau	. 126
	7.2		ationen von Modellmaterial – Aufbau	
	7.3		imente und Simulationen an Modellmaterial – Ergebnisse	
		7.3.1	Druckversuche an kleinen Probekörpern	
		7.3.2	Druckversuche an großen Probekörpern	
		7.3.3	Zusammenfassung	

	7.4	Simulationen von Beton – Aufbau		136	
	7.5	Simula	ationen von Beton – Ergebnisse		138
		7.5.1	Zugversuche bei verschiedenen Belastungsgeschwindigkeiten .		139
		7.5.2	Druckversuche bei verschiedenen Belastungsgeschwindigkeiten		142
		7.5.3	Zusammenfassung		144
8	Zusa	ammer	nfassung und Ausblick		147
	8.1	Zusam	menfassung		147
	8.2	Ausbli	ck		148
\mathbf{A}	Anh	nang			151
	A.1	Strukt	ogramme		151
Li	terat	urverz	eichnis		155

Abbildungsverzeichnis

1.1	Holzpellets und (b) Beton	2
2.1	Deformierbarer Körper: Referenzkonfiguration und aktuelle Konfiguration.	6
2.2	Starrkörper: Referenzkonfiguration und aktuelle Konfiguration	7
3.1	Arten der Diskrete-Element-Methode: Verwendete Art grau hinterlegt	19
3.2	Vorgestellte Diskrete-Element-Methode: Modellierung und Fehler nach	
	Ramm (2003)	21
3.3	Generierungsverfahren (fett) für verschiedene Anordnungen diskreter Ele-	
	mente	26
3.4	Diskretes Element: (a) Position und Orientierung in der aktuellen Konfi-	
	guration sowie (b) Kraft und Moment	29
3.5	Struktogramm des Prädiktor-Korrektor-Verfahrens nach GEAR (1971).	41
3.6	Struktogramm des gestaffelten Lösungsverfahrens	42
3.7	Beispiele mit einem Freiheitsgrad: (a) Harmonischer Oszillator und (b)	4.0
	Kollision einer Masse mit einer linearen Feder.	43
3.8	Fehler der Lösungsverfahren: Harmonischer Oszillator.	45
3.9	Fehler der Lösungsverfahren: Kollision einer Masse mit einer linearen Feder.	46
4.1	Kontakt für verschiedene Partikelformen in 2D mit übertriebenen Über-	
	schneidungen: (a) Kreise, (b) Ellipsen und (c) konvexe Polygone	49
4.2	Mehrstufiges, netzbasiertes "linked-cell"-Verfahren zur Kontaktsuche nach	
	TILLEMANS UND HERRMANN (1995): (a) Einsortieren in Netzzellen, (b)	
	Überschneidung der einhüllenden Kreise, (c) Überschneidung des einhül-	
	lenden Kreises mit dem Kreis um die Partikelkante und (d) Schnittpunkt	
	der Partikelkanten	50
4.3	Kinematische Größen bei der Kontaktermittlung.	51
4.4	Kontaktmodell für die Normalkraft: (a) Kinematische Größen und (b)	
	Kraft auf Partikel I	55
4.5	Kontaktmodell für die Normalkraft: Sprung der Kraft bei der Bewegung	- ~
	einer Partikelkante über eine parallele Kante des Kontaktpartners	58

4.6	Kontaktmodell für die Tangentialkraft: (a) Kinematische Größen und (b) Kraft auf Partikel I
4.7	Kontaktmodell für die Tangentialkraft: (a) Fließfläche und (b) Kraft-Verschiebungsdiagramm
4.8	Kontakt zwischen einem ebenen Partikel und einem ebenen Untergrund
4.9	Kontaktmodell für die Kraft zwischen Partikel und ebenem Untergrund: (a) Kinematische Größen und (b) Schubspannung auf das Partikel
4.10	Kontaktmodell für die Kraft zwischen Partikel und ebenem Untergrund: (a) Fließfläche und (b) Schubspannungs-Verschiebungsdiagramm
4.11	Kontaktmodell für die Kraft zwischen Partikel und ebenem Untergrund: Numerische Integration der Schubspannung über die Kontaktfläche durch
	Gauß-Quadratur an einzelnen Dreiecken
5.1	Balkenmodell für die Kraft aus haftender Verbindung: (a) Ausgangszustand und generalisierte Verschiebungen sowie (b) generalisierte Kräfte auf die Partikel
5.2	Motivation des Balkenmodells für die Kraft aus haftender Verbindung: (a) Elastisches Balkenmodell mit sprödem Versagen aus Kun und Herrmann (1996), (b) elasto-schädigendes Balkenmodell aus dieser Arbeit und (c) elasto-plastisches Interfacemodell mit Entfestigung aus D'Addetta
	$(2004). \dots \dots$
5.3	Balkenmodell für die Kraft aus haftender Verbindung: (a) Verzerrungen und (b) resultierende Spannungsgrößen in Balkenmitte (M)
5.4	Elasto-schädigendes Balkenmodell für die Kraft aus haftender Verbindung: (a) Anfängliche Schädigungsfläche und (b) Kraft-Verzerrungsdia-
	gramm für axiale Belastung.
5.5	Balkenmodell für die Kraft aus haftender Verbindung: (a) Generalisierte
	Balkenendverschiebungen und (b) generalisierte Kräfte im mitbewegten und mitgedrehten Koordinatensystem
5.6	Zug- und Drucktest mit dem elasto-schädigenden Balkenmodell: (a) An-
5.0	sicht der Probe und (b) Parameter
5.7	Last-Verschiebungsdiagramm des Zug- und des Drucktests mit dem elas-
J.,	to-schädigenden Balkenmodell
5.8	Versagensverhalten im Zugtest mit dem elasto-schädigenden Balkenmodell: Schädigung der Balken zu den vier in Abbildung 5.7 markierten
	Zuständen (z1), (z2), (z3) und (z4)
5.9	Balkenverzerrungen im Zugtest mit dem elasto-schädigenden Balkenmodell zum Zustand (z3) aus Abbildung 5.7

5.10	Versagensverhalten im Drucktest mit dem elasto-schädigenden Balken- modell: Schädigung der Balken zu den vier in Abbildung 5.7 markierten	
	Zuständen (d1), (d2), (d3) und (d4)	94
5.11	Balkenverzerrungen im Drucktest mit dem elasto-schädigenden Balken-	05
5 19	modell zu einem Zustand zwischen (d2) und (d3) aus Abbildung 5.7 Last-Verschiebungsdiagramm der Zugtests mit dem elasto-schädigenden	95
0.12	Balkenmodell: Variation der Parameter κ_0 und $\kappa_{\rm m}$	96
5.13	Last-Verschiebungsdiagramm der Drucktests mit dem elasto-schädigen-	00
0.10	den Balkenmodell: Variation der Parameter κ_0 und $\kappa_{\rm m}$	97
5.14	Ratenabhängiges elasto-schädigendes Balkenmodell für die Kraft aus haf-	
	tender Verbindung: Festigkeitsanstiegs-Verzerrungsratendiagramm bei (a)	
	Variation von $\dot{\varepsilon}_0$ und (b) Variation von α	99
5.15	Ratenabhängiges elasto-schädigendes Balkenmodell für die Kraft aus haf-	
	tender Verbindung: (a) Anfängliche Schädigungsfläche und (b) Kraft-Ver-	100
	zerrungs-Verzerrungsratendiagramm für axiale Belastung	100
5.16	Balkenmodell für die Kraft aus haftender Verbindung: Generalisierte Bal-	
	kenendgeschwindigkeiten im mitbewegten und mitgedrehten Koordina-	101
F 17	tensystem	101
5.17	Last-Verschiebungsdiagramm der Zug- und der Drucktests mit dem ra-	
	tenunabhängigen (ru) und dem ratenabhängigen (ra) elasto-schädigenden Balkenmodell	103
5 18	Versagensverhalten im Zugtest mit dem ratenabhängigen elasto-schädi-	100
0.10	genden Balkenmodell: Schädigung der Balken zu den vier in Abbildung	
	5.17 markierten Zuständen (z1), (z2), (z3) und (z4)	104
5.19	Versagensverhalten im Drucktest mit dem ratenabhängigen elasto-schä-	
	digenden Balkenmodell: Schädigung der Balken zu den vier in Abbildung	
	5.17 markierten Zuständen (d1), (d2), (d3) und (d4)	105
5.20	Last-Verschiebungsdiagramm der Zugtests mit dem ratenunabhängigen	
	(ru) und dem ratenabhängigen (ra) elasto-schädigenden Balkenmodell:	100
F 01	Variation der Parameter α und $\dot{\varepsilon}_0$	106
5.21	Last-Verschiebungsdiagramm der Drucktests mit dem ratenunabhängigen	
	(ru) und dem ratenabhängigen (ra) elasto-schädigenden Balkenmodell:	107
	Variation der Parameter α und $\dot{\varepsilon}_0$	107
6.1	Experimente an granularem Modellmaterial: (a) Probe in der Prüfma-	
	schine und (b) Ausschnitt einer Probe	111
6.2	Experimente an granularem Modellmaterial: (a) Aufsicht der Probe mit	
	Fehlstelle, (b) Aufsicht der Probe ohne Fehlstelle und (c) Parameter	112
6.3	Simulationen von granularem Modellmaterial: (a) Aufsicht der Probe mit	
	Fehlstelle, (b) Aufsicht der Probe ohne Fehlstelle und (c) Parameter	113

6.4	Versagensverhalten der Proben aus granularem Modellmaterial mit Fehlstelle zu drei Zeitpunkten: (links) Experiment mit markierten Bändern größerer Deformation bei $t=12.9\mathrm{s}$ und markierten Scherbändern bei	
6.5	$t=19.4\mathrm{s}$ sowie (rechts) Simulation mit Geschwindigkeit in \mathbf{e}_2 -Richtung Translationsgeschwindigkeit der Partikel in der Simulation der Probe aus	
6.6	granularem Modellmaterial mit Fehlstelle zum Zeitpunkt $t=12.9\mathrm{s.}$ Ausschnitt um die Fehlstelle der Proben aus granularem Modellmaterial zum Zeitpunkt $t=19.4\mathrm{s}$ mit Markierung der gleichen vier Partikel: (links) Experiment und (rechts) Simulation mit Geschwindigkeit in \mathbf{e}_2 - Richtung	
6.7	Richtung	
6.8	ment Nr. 2 mit markierten Scherbändern	119
6.9	bändern und (rechts) Simulation mit Geschwindigkeit in ${\bf e}_2$ -Richtung Translationsgeschwindigkeit der Partikel in der Simulation der Probe aus granularem Modellmaterial ohne Fehlstelle zum Zeitpunkt (a) $t=5.9{\rm s}$ und (b) $t=20.2{\rm s}$	
7.1	Experimente an verklebtem Modellmaterial: (a) Probe in der Prüfmaschine und (b) Ausschnitt einer Probe.	127
7.2	Experimente an verklebtem Modellmaterial: (a) Ansicht der kleinen Probe, (b) Ansicht der großen Probe und (c) Parameter	128
7.3	Simulationen von verklebtem Modellmaterial: (a) Ansicht der kleinen Probe, (b) Ansicht der großen Probe und (c) Parameter	
7.4	Last-Verschiebungsdiagramm der kleinen Proben aus verklebtem Modellmaterial: Experimente, arithmetisches Mittel der Last aus den drei Ex-	130
7.5	Versagensverhalten der kleinen Probe aus verklebtem Modellmaterial: Simulation mit Schädigung der Balken zu den drei in Abbildung 7.4 mar-	
7.6	kierten Zuständen (a), (b) und (c)	132
	Verschiebung $\hat{u}_2 = -0.15 \mathrm{cm}$: Experiment Nr. 1, Nr. 2 und Nr. 3 sowie Simulation mit Schädigung der Balken	132
7.7	Last-Verschiebungsdiagramm der großen (gr) und der kleinen (kl) Proben aus verklebtem Modellmaterial: Experimente und Simulationen	133
7.8	Rissmuster der großen Proben aus verklebtem Modellmaterial bei der Verschiebung $\hat{u}_2 = -0.15$ cm: Experiment Nr. 1 und Nr. 2 sowie Simulation	100
	mit Schädigung der Balken	135

7.9	Simulationen von Beton: (a) Ansicht der Probe und (b) Parameter	137
7.10	Spannungs-Dehnungsdiagramm der Zugversuche an Beton mit zwei unter-	
	schiedlichen Verzerrungsraten: Simulationen mit dem ratenunabhängigen	
	(ru) sowie dem ratenabhängigen (ra) Balkenmodell	139
7.11	Schädigung in den Zugversuchen an Beton mit zwei unterschiedlichen Ver-	
	zerrungsraten am Ende der Spannungs-Dehnungskurven aus Abbildung	
	7.10: Simulationen mit dem ratenunabhängigen (ru) sowie dem ratenab-	
	hängigen (ra) Balkenmodell	141
7.12	Spannungs-Dehnungsdiagramm der Druckversuche an Beton mit zwei un-	
	terschiedlichen Verzerrungsraten: Simulationen mit dem ratenunabhängi-	
	gen (ru) sowie dem ratenabhängigen (ra) Balkenmodell	142
7.13	Schädigung in den Druckversuchen an Beton mit zwei unterschiedlichen	
	Verzerrungsraten am Ende der Spannungs-Dehnungskurven aus Abbil-	
	dung 7.12: Simulationen mit dem ratenunabhängigen (ru) sowie dem ra-	
	tenabhängigen (ra) Balkenmodell	144
A.1	Vereinfachtes Struktogramm des gestaffelten Lösungsverfahrens bei der	
	vorgestellten Diskrete-Element-Methode	151
A.2	Vereinfachtes Struktogramm für das vorläufige Update der Geschichtsva-	
	riablen und die Funktionsauswertung aus Abbildung A.1	152
A.3	Vereinfachtes Struktogramm für das endgültige Update der Geschichts-	
	variablen aus Abbildung A.1	153

Tabellenverzeichnis

3.1	Vorgestellte Diskrete-Element-Methode: Übersicht	18
3.2	Geometrische Eigenschaften eines Partikels	22
3.3	Geometrische Formen diskreter Elemente: Übersicht mit den zur Beschrei-	
	bung der Form nötigen Parametern	24
3.4	Eigenschaften einer Anordnung von diskreten Elementen	25
3.5	Eigenschaften eines Interaktionsmodells	28
3.6	Motivation der Modellannahmen im Raum	32
3.7	Möglichkeiten der Adaptivität bei Diskrete-Element-Methoden (verglei-	
	che Feng und Owen 2008)	38
5.1	Anstieg der Balkenfestigkeit und der Traglast im Zug- und im Drucktest	
	vom ratenunabhängigen (ru) zum ratenabhängigen (ra) elasto-schädigen-	
	den Balkenmodell: Variation der Parameter α und $\dot{\varepsilon}_0$	108

Abkürzungen und Bezeichnungen

Abkürzungen Abschnitt a ax axial BDF "backward-differentiation-formulas" CEB Richtlinie Comité Euro-International du Béton (1993) DEM Diskrete-Element-Methode dr Dreieck e Ende EE explizites Euler-Verfahren el elastisch elasto-schädigend es ext externe Lasten fhg Freiheitsgrad g generalisiert ge Geschichtsvariable gp Gaußpunkt gr groß h haftende Verbindung iak Interaktion int innere k Kontakt kb Kontaktbeginn kin kinetisch kl klein koz Koordinationszahl ks Kontaktsuche l links L Lastplatte last Lasten M Balkenmitte mak makroskopisch

MD Molekulardynamik

	ME	modifiziertes Euler-Verfahren
	n	Normalenrichtung des Kontakts
	0	Oberflächenlasten
	p	Partikel
	pd	Prädiktor
	pg	Probengenerierung
	pk	potentielles Kontaktpaar
	PK	Prädiktor-Korrektor-Verfahren
	pl	plastisch
	r	rechts
	ra	ratenabhängig
	rel	relativ
	rot	rotatorisch
	ru	ratenunabhängig
	S	Sechskantschraubenmutter
	SPH	"smoothed particle hydrodynamics"
	sys	System
	t	Tangentialrichtung des Kontakts
	tl	Traglast
	tot	total
	tr	"trial"
	tra	translatorisch
	u	Untergrund
	U	Untergrundplatte
	v	Volumenlasten
	vi	viskos
	ZD	Zentrale-Differenzen-Verfahren
78	/	TAT 4 4*
IV.	Iathematische	
	` . /	in der Referenzkonfiguration
		partielle Ableitung
	` '	Zeitableitung
	$(\ddot{\bullet})$	zweimalige Zeitableitung
	$(\bullet)^{(iii)}$	dreimalige Zeitableitung
	$(\bullet)^{(iv)}$	viermalige Zeitableitung
	$(\bullet)^{(v)}$	fünfmalige Zeitableitung
	17 (.)	

 $\frac{\overline{D}}{Dt}(\bullet)$ materielle Zeitableitung

 $\langle \bullet \rangle$ Macaulay-Klammern

 $\det(\bullet)$ Determinante

∥ • ∥	Euklidische Norm
×	Vektorprodukt
⊗	Tensorprodukt
$sgn(\bullet)$	Signumfunktion

Lateinische Buchstaben

ateinische Buc	nstaben
da	infinitesimales Flächenelement in der aktuellen Konfiguration
\hat{a}	vorgegebene Beschleunigung
a	Beschleunigung
A	Fläche
$A_{h,Q}$	Schubquerschnitt des Balkens
b	Volumenlasten
<i>B</i>	Breite
<i>c</i>	Moment
$\bar{c}_{ m h}$	Moment aus haftender Verbindung im mitbewegten und mitgedreh-
	ten Koordinatensystem
c	Moment
C	Konstante
$\mathbf{C}_{h} \;\; \dots \dots$	Konstitutivgesetz des Balkens
d	Schädigung
\check{d}	Hilfsgröße bei der Ermittlung der Schädigung
D	Deformationsrate
e_{int}	innere Energie pro Masseneinheit
$\dot{e}_{ m int}$	materielle Zeitableitung der inneren Energie pro Masseneinheit
e	Basisvektor des ortsfesten kartesischen Koordinatensystems
$\bar{e} \ \dots \dots$	Basisvektor des mitbewegten und mitgedrehten kartesischen Koor-
	dinatensystems
$\tilde{e}\ \dots\dots\dots$	Basisvektor des translatorisch mitbewegten kartesischen Koordina-
	tensystems
$ ilde{ ilde{ ilde{e}}}$	Basisvektor des körperfesten kartesischen Koordinatensystems
E	Energie
$E_{\rm ci}$	Elastizitätsmodul von Beton
$E_{\rm h}$	Elastizitätsmodul des Balkens
E^{mak}	makroskopischer Elastizitätsmodul einer Probe
E	Basisvektor des ortsfesten kartesischen Koordinatensystems
\mathcal{E}	Evolutionsfunktion
f	Kraft, Funktion
$f_{\rm cm}$	Mittelwert der Zylinderdruckfestigkeit von Beton
$f_{\rm ctm}$	Mittelwert der Zugfestigkeit von Beton

<u></u>	Kraft aus haftender Verbindung im mitbewegten und mitgedrehten
Jii · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	Koordinatensystem
f	Kraft, Funktion
F	materieller Deformationsgradient
\mathcal{F}	Fließfunktion
$g \dots g$	
-	Geschichtsvariablen
$G_{\rm h}$	
$\mathcal{G}_{ m h,ax}$	dissipierte Energie pro Einheit Balkenquerschnitt bei axialer Belas-
9n,ax ·····	tung
h	Gitterweite
<i>H</i>	Höhe
	Heaviside-Funktion
$I_{ m h}$	Flächenträgheitsmoment des Balkens
$f{I}$	zweistufiger Identitätstensor
<i>J</i>	Jacobi-Determinante
<i>k</i>	
\mathcal{K}	Steifigkeit, Strafparameter Vantalitzunkt
1	Kontaktpunkt
	Drehimpuls
<i>L</i>	Länge
m	Masse
M	Moment
M	Massenmatrix
	Massenmittelpunkt
n	
n	
N	Normalkraft
0	Ordnung
O	Ursprung des ortsfesten kartesischen Koordinatensystems
$p \dots p$	Konsistenzordnung eines Verfahrens
p	Impuls
<i>P</i>	Leistung
$q_{\rm pg}$	Faktor für die Gitterweite bei der Probengenerierung
Q	Querkraft
r	Hebelarm vom Massenmittelpunkt zum Kontaktpunkt
R	Drehtensor
S	Koeffizienten des Korrektors
S	Koeffizienten des Prädiktors
<i>t</i>	Zeit
Δt	Schrittweite

	$\mathbf{t} \ \dots \dots \dots$	Oberflächenlasten (Kapitel 2), Tangente (sonst)
	T	Dicke
	u	Verschiebung, Überschneidungstiefe
	\hat{u}	vorgegebene Verschiebung
	$\bar{u}_{\rm h}$	Balkenendverschiebung im mitbewegten und mitgedrehten Koordi-
		natensystem
	$\dot{\bar{u}}_{ m h}$	Balkenendgeschwindigkeit im mitbewegten und mitgedrehten Koor-
		dinatensystem
	u	Verschiebung
	<i>v</i>	Geschwindigkeit
	$\mathrm{d}v$	infinitesimales Volumenelement in der aktuellen Konfiguration
	\hat{v}	vorgegebene Geschwindigkeit
	v	Geschwindigkeit
	<i>V</i>	Volumen
	dV	infinitesimales Volumenelement in der Referenzkonfiguration
	<i>x</i>	Position in der aktuellen Konfiguration
	\dot{x}	Geschwindigkeit
	\ddot{x}	Beschleunigung
	$\Delta \check{x}$	Differenz für den Korrektor
	x	Position in der aktuellen Konfiguration
	$\dot{x} \dots \dots \dots$	Geschwindigkeit
	$\ddot{x} \dots \dots$	Beschleunigung
	$\check{x} \dots \dots$	Nordsieck-Vektor
	$\tilde{x} \dots \dots$	Position im translatorisch mitbewegten Koordinatensystem
	\mathbf{X}	Position in der Referenzkonfiguration
\mathbf{G}	riechische Buc	hstaben
	α	Exponent des Modells für die ratenabhängige Festigkeit
	$\alpha_{\rm Q}$	Schubkorrekturfaktor
	γ	Schubverzerrung
	γ_n	viskoser Parameter des Kontaktmodells für die Normalkraft
	ϵ	Rechengenauigkeit
	ε	Verzerrung
	$\varepsilon_{\rm ax}$	axiale Verzerrung
	$\varepsilon_{\rm c1}$	Verzerrung von Beton bei Erreichen der Druckfestigkeit

 $\dot{\varepsilon}_0$ Schwellenwert des Modells für die ratenabhängige Festigkeit

 $\varepsilon_{\rm v}$ äquivalente Verzerrung

 $\dot{\varepsilon}_{\rm ax}$ axiale Verzerrungsrate

 $\dot{\varepsilon}$ Verzerrungsrate

$arepsilon_{ m h}$	Verzerrungsgrößen des Balkens
η	Hilfsgröße bei der Lösung der Balkengleichungen
θ	Verdrehung
$ar{ heta}_{ m h}$	Balkenendverdrehung im mitbewegten und mitgedrehten Koordina-
	tensystem
$ar{ heta}_{ m h}$	Balkenenddrehgeschwindigkeit im mitbewegten und mitgedrehten Ko-
	ordinatensystem
Θ	Massenträgheitsmoment
Θ	Massenträgheitstensor
и	Krümmung
κ	maximal erreichte Verzerrung
$\kappa_0 \ldots \ldots$	Verzerrung bei Schädigungsbeginn
$\kappa_{\rm m}$	Verzerrung bei Versagen
$\Delta\lambda$	Inkrement des plastischen Multiplikators
$\dot{\lambda}$	plastischer Multiplikator
μ	Reibungskoeffizient
ν _c	Querdehnzahl von Beton
ν_h	Querdehnzahl des Balkens
ν^{mak}	makroskopische Querdehnzahl einer Probe
ρ	Massendichte
σ	Normalspannung
σ	Cauchy-Spannungstensor
$\sigma_{ m h}$	resultierende Spannungsgrößen des Balkens
τ	Zeit
au	Schubspannung
ϕ	Variable zur Beschreibung der Orientierung im Raum
$ \stackrel{\cdot}{\phi} \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots $	Drehgeschwindigkeit
$\ddot{\phi}$	Drehbeschleunigung
ϕ	Variablen zur Beschreibung der Orientierung im Raum
$\Phi \ \dots \dots \dots$	freie Energie
<i>χ</i>	Bewegung des materiellen Körpers
ω	Drehgeschwindigkeit
$\dot{\omega}$	Drehbeschleunigung
Ω	Gebiet
$\partial\Omega$	Rand des Gebiets
$\partial\Omega_{\mathrm{pu}}$	
$\partial\Omega_{t}$	Neumann-Rand
$\partial\Omega_{\mathrm{u}}$	Dirichlet-Rand

1 Einleitung

1.1 Motivation und Zielsetzung

Materialien sind auf unterschiedlichen Skalen "aus Teilchen aufgebaut". In dieser Arbeit sollen heterogene Materialien modelliert werden, die, außer auf der atomaren und subatomaren Skala, auch auf der mikroskopischen oder einer gröberen Skala aus festen Teilchen bestehen. Daher bezeichnet ein Teilchen im Folgenden stets einen abgegrenzten materiellen Festkörper mindestens mikroskopischer Größenordnung und nicht etwa ein Molekül oder Atom. Ein Beispiel für ein solches heterogenes Material aus nichtverbundenen Teilchen ist das Granulat aus Holzpellets in Abbildung 1.1 (a). Beton hingegen ist ein Beispiel für ein heterogenes Material, bei dem die einzelnen Teilchen, die Zuschlagskörner, durch die Zementmatrix haftend miteinander verbunden sind, siehe Abbildung 1.1 (b).

In der vorliegenden Arbeit soll der heterogene Materialaufbau aus Teilchen, im Gegensatz zu einer verschmierten kontinuierlichen Modellierung, explizit abgebildet werden. Dafür wird eine Diskrete-Element-Methode ("discrete element method", DEM) eingesetzt. Diskrete-Element-Methoden modellieren Materialien durch feste, abgegrenzte, miteinander interagierende Körper. Sie können einer größeren Gruppe von Methoden zugeordnet werden, den Partikel-Methoden. Dieser Begriff wird für verschiedene Methoden verwendet, vergleiche z. B. die Tagungsbände der Konferenz "particle-based methods" (OÑATE UND OWEN 2009 und OÑATE UND OWEN 2011). Dies können zum einen Methoden mit "physikalischen Partikeln" zur Abbildung wirklicher Teilchen sein wie die Diskrete-Element-Methode mit ihrer ursprünglichen Motivation, siehe z. B. CUNDALL UND STRACK (1979). Zum anderen können Partikel-Methoden "numerische Partikel" als Teil eines räumlichen Diskretisierungsverfahrens benutzen wie die "smoothed particle hydrodynamics" (SPH), siehe z. B. Li und Liu (2007).

Diskrete-Element-Methoden werden in unterschiedlichen Fachdisziplinen wie der Physik, der Strukturmechanik, der Materialwissenschaft und der Verfahrenstechnik eingesetzt. Ihre Vorteile entstehen im Wesentlichen aus der Darstellung der Partikel. Dabei können auf der Partikelskala auftretende Vorgänge wie Stöße, Reibung, Abrollen, Aneinanderhaften und Bruch von Partikeln oder Partikelverbindungen modelliert werden. Durch

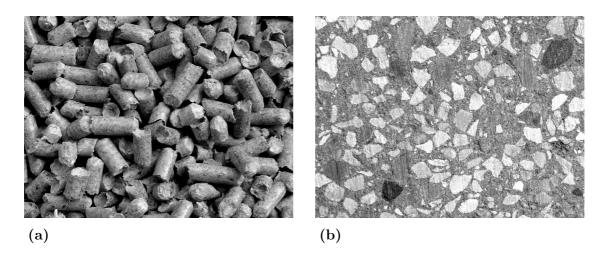


Abbildung 1.1: Beispiele heterogener Materialien aus festen Teilchen: (a) Granulat aus Holzpellets und (b) Beton.

dieses explizite Abbilden können einerseits Phänomene auf einer gröberen Skala wiedergegeben werden. Beispiele sind Versagensprozesse mit Lokalisierung in Scherbändern oder Rissen sowie Fragmentierungsprozesse. Andererseits können durch die Simulationen detaillierte Einblicke in Phänomene gewonnen werden, die in Experimenten nur schwer darstellbar sind. In dieser Arbeit kann auf die umfassenden Arbeiten zur Diskrete-Element-Methode in einem vorangegangenen Forschungsprojekt am hiesigen Institut zurückgegriffen werden, das in Kun u. a. (1999), D'Addetta u. a. (2002), D'Addetta (2004), D'Addetta u. a. (2004), D'Addetta und Ramm (2006) und D'Addetta u. a. (2006) ausführlich dokumentiert ist.

Aus der Darstellung der Partikel entsteht jedoch auch ein Hauptnachteil der Diskrete-Element-Methode, nämlich die oftmals hohen numerischen Kosten. Daher werden häufig einfach zu beschreibende kreis- bzw. kugelförmige diskrete Elemente eingesetzt, die allerdings bei komplexeren Teilchenformen eine starke Vereinfachung darstellen. Auch zur Interaktionsmodellierung zwischen den Partikeln werden meist relativ einfache Modelle verwendet, die numerisch effizient umsetzbar sind. Dabei ist entscheidend, dass die maßgeblichen Eigenschaften der Teilcheninteraktionen abgebildet werden. Ein weiteres Problem bei Diskrete-Element-Methoden ist häufig die Validierung der Methoden durch den Vergleich von Simulationen und Experimenten. Hierzu sind Experimente mit möglichst genauen Informationen über das heterogene Material, wie zu den Teilchenformen, der Teilchenanordnung und den Teilcheninteraktionen, nötig.

In dieser Arbeit werden einige der genannten Problematiken bei Diskrete-Element-Methoden aufgegriffen. Das Ziel der Arbeit ist zum einen, aufbauend auf dem vorhandenen Modell mit polygonalen diskreten Elementen aus D'ADDETTA (2004), die Interaktionsmodellierung weiterzuentwickeln. Die Modelle sollen bei akzeptablem numerischem

Aufwand die wichtigen mechanischen Eigenschaften der Interaktionen abbilden. Zum anderen soll die Leistungsfähigkeit der entwickelten Methode bei der Modellierung heterogener Materialien sowohl aus nichtverbundenen als auch aus anfangs verbundenen Teilchen analysiert werden. Um dies möglichst direkt tun zu können, werden Konzeptexperimente an Modellmaterialien durchgeführt, mit denen die Simulationen verglichen werden. Anschließend wird die Methode zur Modellierung von Beton eingesetzt. Dabei soll die Abbildung des Versagensverhaltens, insbesondere unter verschiedenen Belastungsgeschwindigkeiten, untersucht werden.

1.2 Gliederung

Die vorliegende Arbeit besteht im Wesentlichen aus drei Teilen, die jeweils zwei Kapitel umfassen. Den ersten Teil bildet die Einführung der mechanischen Grundlagen und darauf aufbauend der Diskrete-Element-Methode in den Kapiteln 2 und 3. Anschließend wird in den Kapiteln 4 und 5 der erste Schwerpunkt dieser Arbeit vorgestellt, die Weiterentwicklung von Modellen zur Abbildung der Partikelinteraktion. Als zweiter Schwerpunkt wird dann in den Kapiteln 6 und 7 die Leistungsfähigkeit der entwickelten Methode bei der Modellierung heterogener Materialien untersucht. Die wichtigsten Inhalte der Kapitel 3 bis 7 werden jeweils am Kapitelbeginn in einem Absatz in Kursivschrift zusammengefasst.

In Kapitel 2 werden zunächst die grundlegenden Gleichungen der Newton'schen Mechanik für das Kontinuum eingeführt. Sie bilden die Basis der Diskrete-Element-Methoden, die in Kapitel 3 vorgestellt werden. Dabei wird eine strukturierte Kategorisierung der verschiedenen Arten von Methoden vorgenommen, die unter der Bezeichnung Diskrete-Element-Methode zusammengefasst sind, und danach die in dieser Arbeit eingesetzte Diskrete-Element-Methode beschrieben.

Anschließend werden in Kapitel 4 die Modelle zur Abbildung des Kontakts zwischen Partikeln eingeführt und ihre Eigenschaften diskutiert. Im Anschluss daran wird in Kapitel 5 das entwickelte Balkenmodell zur Abbildung der haftenden Verbindung zwischen Partikeln vorgestellt und getestet.

Bei den Untersuchungen an granularen Materialien in Kapitel 6 werden die Konzeptexperimente an einem granularen Modellmaterial sowie deren Simulationen mit der entwickelten Methode vorgestellt. In Kapitel 7 werden die Untersuchungen an heterogenen Festkörpern aus haftend miteinander verbundenen Teilchen beschrieben. Hierzu werden ebenfalls eigene experimentelle Ergebnisse an einem verklebten Modellmaterial mit den Simulationen verglichen. Anschließend werden die Simulationen von Beton bei verschiedenen Belastungsgeschwindigkeiten dargestellt.

1 Einleitung

Abschließend werden die Ergebnisse der Arbeit in Kapitel 8 zusammengefasst und ein Ausblick auf weitere Forschungsthemen gegeben.

2 Grundlegende Gleichungen

In diesem Kapitel werden die grundlegenden Gleichungen der Newton'schen Mechanik für das Kontinuum eingeführt. Sie bilden die Basis des mechanisch-mathematischen Modells zur Beschreibung eines materiellen Körpers. Zuerst wird in Abschnitt 2.1 die Kinematik des materiellen Körpers beschrieben. Anschließend werden in Abschnitt 2.2 die mechanischen Bilanzgleichungen formuliert. Um die daraus resultierenden Differentialgleichungen lösen zu können, sind Anfangs- und/oder Randbedingungen nötig, die in Abschnitt 2.3 dargestellt werden. Hier werden lediglich die in dieser Arbeit benötigten Gleichungen in der gewählten Notation eingeführt. Dabei wird auf die ausführlichen Beschreibungen für deformierbare Körper in MALVERN (1969), ALTENBACH UND ALTENBACH (1994), MARSDEN UND HUGHES (1994) und HOLZAPFEL (2000) sowie für starre Körper in LANDAU UND LIFSCHITZ (1987), NOLTING (1993), HAUGER U.A. (1999) und EHLERS (2000) zurückgegriffen.

2.1 Kinematik des materiellen Körpers

Im Folgenden wird in Abschnitt 2.1.1 die kinematische Beschreibung des materiellen Körpers für den allgemeinen Fall des deformierbaren Körpers vorgestellt und in Abschnitt 2.1.2 auf den starren Körper eingeschränkt.

2.1.1 Kinematik des deformierbaren Körpers

Ein materieller Körper ist eine zusammenhängende, zumindest abschnittsweise kontinuierliche Verteilung von Materie im Raum und in der Zeit und besteht aus materiellen Punkten. Er wird zu jedem Zeitpunkt t in den dreidimensionalen Euklidischen Raum eingebettet. Hierzu werden die beiden koinzidenten, kartesischen, ortsfesten Koordinatensysteme mit dem Ursprung \mathcal{O} und den Basisvektoren \mathbf{E}_i und \mathbf{e}_i mit i=1,2,3 eingeführt, wie in Abbildung 2.1 dargestellt. Der materielle Körper belegt zum Referenzzeitpunkt $t=t_0$ das Gebiet Ω_0 mit dem Rand $\partial\Omega_0$. Diese Anordnung wird als Referenzkonfiguration bezeichnet. Zum Zeitpunkt $t>t_0$ befindet sich der Körper in der aktuellen Konfiguration und nimmt das Gebiet Ω mit dem Rand $\partial\Omega$ ein.

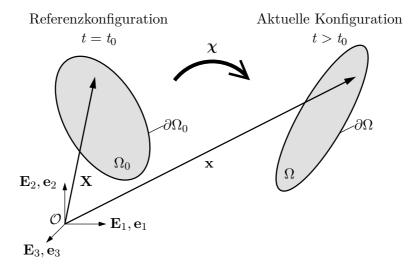


Abbildung 2.1: Deformierbarer Körper: Referenzkonfiguration und aktuelle Konfiguration

Die Position des materiellen Punkts in der Referenzkonfiguration wird durch den Positionsvektor $\mathbf{X} = X^i \mathbf{E}_i$ mit den materiellen Koordinaten X^i beschrieben. In der aktuellen Konfiguration bezeichnet der Positionsvektor $\mathbf{x} = x^i \mathbf{e}_i$ mit den räumlichen Koordinaten x^i die Lage des materiellen Punkts. Da in dieser Arbeit ausschließlich kartesische Koordinatensysteme verwendet werden, sind ko- und kontravariante Basisvektoren bzw. Koordinaten identisch. Zur besseren Lesbarkeit werden in der weiteren Arbeit die Indizes der Raumrichtungen immer tiefgestellt.

Die Bewegung χ des Körpers ist die stetige zeitliche Aufeinanderfolge von Konfigurationen. Sie wird durch Bewegung der materiellen Punkte des Körpers dargestellt. Hierzu wird die Position des materiellen Punkts in der aktuellen Konfiguration $\mathbf{x} = \chi(\mathbf{X},t)$ als Funktion der Referenzposition und der Zeit ausgedrückt. \mathbf{X} und t sind die unabhängigen Variablen, in welchen die abhängigen Variablen wie beispielsweise die Massendichteverteilung $\rho(\chi(\mathbf{X},t),t) = \rho(\mathbf{x},t)$ beschrieben werden. Diese Beschreibung wird materielle oder Lagrange'sche Beschreibung genannt, da die Änderung der Eigenschaften des materiellen Punkts betrachtet wird. Im weiteren Verlauf der Arbeit werden die Abhängigkeiten der Größen zur Übersichtlichkeit meist weggelassen.

Zur kinematischen Beschreibung werden die Geschwindigkeit ${\bf v}$ und die Beschleunigung ${\bf a}$ des materiellen Punkts mit

$$\mathbf{v} = \dot{\mathbf{x}} = \frac{\mathbf{D}}{\mathbf{D}t}\mathbf{x}$$

$$\mathbf{a} = \ddot{\mathbf{x}} = \frac{\mathbf{D}}{\mathbf{D}t}\mathbf{v}$$
(2.1)

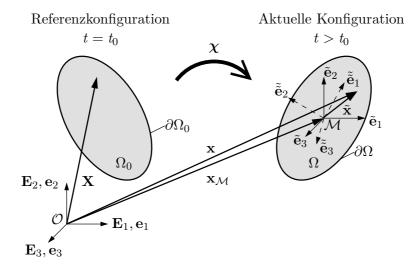


Abbildung 2.2: Starrkörper: Referenzkonfiguration und aktuelle Konfiguration.

bestimmt, wobei $\frac{\mathrm{D}}{\mathrm{D}t}$ die materielle Zeitableitung bezeichnet. Die Jacobi-Determinante

$$J = \frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}V} = \det(\mathbf{F}) \quad \text{mit } \mathbf{F} = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{X}}$$
 (2.2)

ist die Determinante des materiellen Deformationsgradienten ${\bf F}$. Sie beschreibt das Verhältnis zwischen dem infinitesimalen Volumenelement in der aktuellen Konfiguration dv und dem in der Referenzkonfiguration dV. Die Deformationsrate ist mit

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2} \left(\left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{x}} \right)^{\mathrm{T}} + \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{x}} \right) \tag{2.3}$$

definiert, wobei $(\bullet)^T$ die Transponierte bezeichnet.

2.1.2 Kinematik des Starrkörpers

Bei der Einschränkung auf einen starren Körper vereinfacht sich die Beschreibung der Kinematik. Hierzu werden zusätzlich ein translatorisch mit dem Materialpunkt \mathcal{M} mitbewegtes Koordinatensystem mit den Basisvektoren $\tilde{\mathbf{e}}_i$ sowie ein körperfestes Koordinatensystem mit den Basisvektoren $\tilde{\mathbf{e}}_i$ und dem Ursprung in \mathcal{M} eingeführt, siehe Abbildung 2.2. Dadurch kann die Position des materiellen Punkts

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_{\mathcal{M}} + \tilde{\mathbf{x}} \tag{2.4}$$

in die Position $\mathbf{x}_{\mathcal{M}}$ des Punkts \mathcal{M} und den Vektor $\tilde{\mathbf{x}}$ von \mathcal{M} zum betrachteten Punkt aufgeteilt werden. Im Folgenden wird als Punkt \mathcal{M} der Massenmittelpunkt des Starrkörpers gewählt.

Die Bewegung des gesamten Starrkörpers kann – bei bekannter, unveränderlicher geometrischer Form – durch die aktuelle Position des Massenmittelpunkts $\mathbf{x}_{\mathcal{M}}$ mit drei Variablen und die aktuelle Orientierung im Raum mit drei weiteren Variablen beschrieben werden. Die Orientierung im Raum kann dabei durch die endliche Rotation $\tilde{\mathbf{e}}_i = \mathbf{R}\tilde{\mathbf{e}}_i$ des translatorisch mitbewegten in das körperfeste Koordinatensystem dargestellt werden, siehe z.B. Holzapfel (2000). Zur Beschreibung des Drehtensors R können wiederum verschiedene Variablensätze verwendet werden, die jeweils in dem n-Tupel $\phi = [\phi_1 \dots \phi_n]^T$ zusammengefasst werden, vergleiche z. B. BÜCHTER UND RAMM (1992). Eine Möglichkeit ist die Beschreibung durch die drei Euler'schen Winkel, wobei allerdings Singularitäten auftreten können. Eine Alternative bilden Quaternionen, wobei eine vierte Variable und eine zusätzliche Bedingung eingesetzt werden, so dass keine Singularitäten auftreten, siehe z. B. Allen und Tildesley (1987) und Rapaport (2007). Bei ebener bzw. zweidimensionaler Betrachtung reduzieren sich die Variablen auf zwei für die Position des Massenmittelpunkts und eine für die Orientierung im Raum. In dieser Arbeit wird bei ebener Betrachtung immer die Bewegung in der e_1 - e_2 -Ebene mit der Rotation um eine Achse in die e_3 -Richtung angesehen.

Die Geschwindigkeit und die Beschleunigung des materiellen Punkts wird mit der Beziehung (2.4) zu

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_{\mathcal{M}} + \boldsymbol{\omega} \times \tilde{\mathbf{x}}$$

$$\mathbf{a} = \mathbf{a}_{\mathcal{M}} + \dot{\boldsymbol{\omega}} \times \tilde{\mathbf{x}} + \boldsymbol{\omega} \times (\boldsymbol{\omega} \times \tilde{\mathbf{x}}).$$
(2.5)

Darin ist $\boldsymbol{\omega}$ die Drehgeschwindigkeit, $\dot{\boldsymbol{\omega}} = \frac{\mathrm{D}}{\mathrm{D}t}\boldsymbol{\omega}$ die Drehbeschleunigung und \times das Vektorprodukt. Aufgrund der Undeformierbarkeit bleibt beim Starrkörper die Jacobi-Determinante (2.2) zu jeder Zeit J=1 und die Deformationsrate (2.3) zu jedem Zeitpunkt $\mathbf{D}=\mathbf{0}$.

2.2 Mechanische Bilanzgleichungen

In den folgenden Abschnitten 2.2.1 bis 2.2.4 werden die Bilanzgleichungen für Masse, Impuls, Drehimpuls und Energie jeweils zuerst für den deformierbaren Körper eingeführt und anschließend auf den Starrkörper eingeschränkt. Die Bilanzgleichungen besitzen zu jedem Zeitpunkt für jeden Körper und jeden Teil eines Körpers, unabhängig von dessen konstitutivem Verhalten, Gültigkeit. Bleibt die zu bilanzierende Größe zeitlich unverändert, so wird die Bilanzgleichung Erhaltungssatz genannt. Da sich die Betrachtungen in

dieser Arbeit auf rein mechanische Probleme beschränken, werden ausschließlich mechanische Anteile berücksichtigt.

2.2.1 Massenbilanz

Die Masse des Körpers

$$m(t) = \int_{\Omega} \rho(\mathbf{x}, t) \, dv \tag{2.6}$$

ist als Integral der Massendichteverteilung ρ über die aktuelle Konfiguration definiert. Die globale Massenbilanz betrachtet die Änderung der Masse mit der Zeit. Aufgrund der Annahme, dass weder Massenaustausch über die Oberfläche des Körpers noch Erzeugung oder Verlust von Masse im Körper stattfinden, bleibt die Masse des Körpers konstant und der globale Massenerhaltungssatz lautet

$$\frac{\mathbf{D}}{\mathbf{D}t}m = 0. ag{2.7}$$

Durch Umwandlung kann daraus die lokale Form der Massenerhaltung

$$\rho_0 - \rho J = 0 \tag{2.8}$$

gebildet werden. Zur Herleitung wird z. B. auf HOLZAPFEL (2000) verwiesen. ρ_0 bezeichnet darin die Massendichte in der Referenzkonfiguration.

Da beim Starrkörper zu jeder Zeit J=1 gilt, bleibt die Massendichte ρ jedes materiellen Punkts nach (2.8) in der Zeit konstant und somit die Masse m des Starrkörpers erhalten.

2.2.2 Impulsbilanz

Der Impuls des Körpers

$$\mathbf{p}(t) = \int_{\Omega} \rho(\mathbf{x}, t) \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) dv$$
 (2.9)

ist als Integral der Massendichte und der Geschwindigkeit über die aktuelle Konfiguration definiert. Das zweite Newton'sche Axiom besagt, dass die zeitliche Änderung des Impulses einer Masse gleich der Summe der angreifenden Kräfte ist. Die Anwendung des Axioms auf den kontinuierlichen Körper ergibt die globale Impulsbilanz

$$\frac{\mathbf{D}}{\mathbf{D}t}\mathbf{p} = \int_{\Omega} \rho \mathbf{b} \, \mathrm{d}v + \int_{\partial\Omega} \mathbf{t} \, \mathrm{d}a. \tag{2.10}$$

Darin setzen sich die angreifenden Kräfte aus dem Integral der Massendichte und der Volumenlasten \mathbf{b} auf den Körper aus Fernwirkung sowie dem Integral der Oberflächenlasten \mathbf{t} auf den Körper aus Nahwirkung zusammen. da bezeichnet das infinitesimale Flächenelement in der aktuellen Konfiguration.

Um die Impulsbilanz für den Starrkörper zu erhalten, wird Gleichung (2.5) in die Impulsbilanz (2.10) eingesetzt. Anwendung des Reynold'schen Transporttheorems (siehe z.B. Altenbach und Altenbach 1994) zusammen mit der Massenerhaltung (2.8) liefert die Impulsbilanz des Starrkörpers

$$m \mathbf{a}_{\mathcal{M}} = \underbrace{\int_{\Omega} \rho \mathbf{b} \, \mathrm{d}v}_{\mathbf{f}_{\mathbf{v}}} + \underbrace{\int_{\partial \Omega} \mathbf{t} \, \mathrm{d}a}_{\mathbf{f}_{\mathbf{o}}} = \mathbf{f}. \tag{2.11}$$

Die resultierende Kraft aus Volumenlasten \mathbf{f}_v und die resultierende Kraft aus Oberflächenlasten \mathbf{f}_o werden zu der Kraft \mathbf{f} zusammengefasst. Die Kraft wird in der Regel als Funktion der aktuellen Position (und der Geschwindigkeit) definiert, so dass (2.11) ein System aus drei gewöhnlichen Differentialgleichungen zweiter Ordnung für die aktuelle Position des Massenmittelpunkts ist. Die Impulsbilanz des Starrkörpers wird auch als Newton'sche Bewegungsgleichung des Starrkörpers bezeichnet.

2.2.3 Drehimpulsbilanz

Der Drehimpuls des Körpers um den Ursprung des ortsfesten Koordinatensystems

$$\mathbf{l}_{\mathcal{O}}(t) = \int_{\Omega} \mathbf{x} \times \rho(\mathbf{x}, t) \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) dv$$
(2.12)

ist als Integral des Vektorprodukts aus der Position mit der Massendichte und der Geschwindigkeit über die aktuelle Konfiguration definiert. Das zweite Newton'sche Axiom für Drehbewegungen, auch Euler'scher Drehimpulssatz genannt, besagt, dass die zeitliche Änderung des Drehimpulses in Bezug auf einen Punkt gleich dem Drehmoment aus den angreifenden Kräften um denselben Punkt ist. Damit wird die globale Drehimpulsbilanz des kontinuierlichen Körpers um \mathcal{O} zu

$$\frac{\mathbf{D}}{\mathbf{D}t}\mathbf{I}_{\mathcal{O}} = \int_{\Omega} \mathbf{x} \times \rho \mathbf{b} \, \mathrm{d}v + \int_{\partial\Omega} \mathbf{x} \times \mathbf{t} \, \mathrm{d}a. \tag{2.13}$$

Um den Drehimpuls des Starrkörpers zu erhalten, werden (2.4) und (2.5) in die Definition des Drehimpulses (2.12) eingesetzt. Zudem wird der Drehimpuls statt um den Ursprung

des Koordinatensystems \mathcal{O} um den Massenmittelpunkt \mathcal{M} des Körpers ermittelt:

$$\mathbf{l}_{\mathcal{M}} = \underbrace{\int_{\Omega} \rho((\tilde{\mathbf{x}} \cdot \tilde{\mathbf{x}}) \, \mathbf{I} - \tilde{\mathbf{x}} \otimes \tilde{\mathbf{x}}) \, \mathrm{d}v}_{\boldsymbol{\Theta}_{\mathcal{M}}} \, \boldsymbol{\omega}, \tag{2.14}$$

siehe z. B. Ehlers (2000). Hierin sind I der zweistufige Identitätstensor, $\Theta_{\mathcal{M}}$ der Massenträgheitstensor des Körpers bezüglich seines Massenmittelpunkts und \otimes das Tensorprodukt. Damit wird die Drehimpulsbilanz für den Starrkörper um den Massenmittelpunkt zu

$$\underbrace{\frac{\mathbf{\Theta}_{\mathcal{M}}\dot{\boldsymbol{\omega}} + \boldsymbol{\omega} \times (\mathbf{\Theta}_{\mathcal{M}}\boldsymbol{\omega})}_{\mathbf{D}t} = \underbrace{\int_{\Omega} \tilde{\mathbf{x}} \times \rho \mathbf{b} \, \mathrm{d}v}_{\mathbf{C}_{\mathcal{M},v}} + \underbrace{\int_{\partial\Omega} \tilde{\mathbf{x}} \times \mathbf{t} \, \mathrm{d}a}_{\mathbf{C}_{\mathcal{M},o}} = \mathbf{c}_{\mathcal{M}}.$$
(2.15)

Das resultierende Moment um den Massenmittelpunkt aus Volumenlasten $\mathbf{c}_{\mathcal{M},v}$ und das aus Oberflächenlasten $\mathbf{c}_{\mathcal{M},o}$ werden zu dem Moment $\mathbf{c}_{\mathcal{M}}$ zusammengefasst. Die Drehimpulsbilanz (2.15) bildet ein System aus drei gekoppelten, nichtlinearen, gewöhnlichen Differentialgleichungen erster Ordnung für die Drehgeschwindigkeit.

Die Drehimpulsbilanz (2.15) wird meist in einem körperfesten Koordinatensystem mit dem Ursprung im Massenmittelpunkt formuliert, in dem die Komponenten des Massenträgheitstensors zeitunabhängig sind. Wird das körperfeste Koordinatensystem als Hauptachsensystem des Trägheitstensors gewählt, werden die Ausdrücke für die Drehimpulsbilanz in den Hauptrichtungen auch als die Euler'schen Gleichungen bezeichnet. Die Drehung in das körperfeste Koordinatensystem wird durch den Drehtensor ${\bf R}$ dargestellt, siehe Abschnitt 2.1.2. Die Evolution von ${\boldsymbol \phi}$ zur Beschreibung des Drehtensors wird durch ein weiteres System gewöhnlicher Differentialgleichungen erster Ordnung beschrieben, in das die Winkelgeschwindigkeit ${\boldsymbol \omega}$ aus (2.15) eingeht. Beispielsweise in Allen und Tildesley (1987) und Rapaport (2007) wird vorgestellt, wie die beiden Systeme erster Ordnung direkt in ein System aus vier gekoppelten, nichtlinearen, gewöhnlichen Differentialgleichungen zweiter Ordnung für die Quaternionen zusammengefasst werden können. Dieses System kann nun analog zur Impulsbilanz (2.11) numerisch gelöst werden.

Für den ebenen Fall vereinfacht sich die Drehimpulsbilanz um den Massenmittelpunkt (2.15) zu

$$\Theta_{\mathcal{M}} \ddot{\phi} = c_{\mathcal{M}} \quad \text{in } \tilde{\mathbf{e}}_3\text{-Richtung.}$$
 (2.16)

Darin ist $\Theta_{\mathcal{M}} = \Theta_{\mathcal{M},33}$ das Massenträgheitsmoment, $\ddot{\phi} = \dot{\omega}_3$ die Drehbeschleunigung und $c_{\mathcal{M}} = c_{\mathcal{M},3}$ das Drehmoment. ϕ beschreibt den Winkel um die $\tilde{\mathbf{e}}_3$ -Achse zwischen

dem translatorisch mitbewegten und dem körperfesten Koordinatensystem, vergleiche Abschnitt $2.1.2.^1$ Ist das Drehmoment eine Funktion der Orientierung im Raum (und der Drehgeschwindigkeit), so stellt (2.16) eine skalare, gewöhnliche Differentialgleichung zweiter Ordnung für ϕ dar.

2.2.4 Energiebilanz

Für die betrachteten rein mechanischen Problemstellungen ist die totale Energie des Körpers

$$E_{\text{tot}}(t) = \underbrace{\int_{\Omega} \frac{1}{2} \rho(\mathbf{x}, t) \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) \, dv}_{E_{\text{kin}}} + \underbrace{\int_{\Omega} \rho(\mathbf{x}, t) e_{\text{int}}(\mathbf{x}, t) \, dv}_{E_{\text{int}}}$$
(2.17)

als die Summe aus dessen kinetischer Energie $E_{\rm kin}$ und dessen innerer Energie $E_{\rm int}$ definiert. $e_{\rm int}$ bezeichnet die innere Energie pro Masseneinheit. Die Energiebilanz entspricht dem ersten Hauptsatz der Thermodynamik und besagt, dass die zeitliche Änderung der totalen Energie gleich der Leistung $P_{\rm last}$ der Volumen- und Oberflächenlasten ist:

$$\frac{\mathbf{D}}{\mathbf{D}t}E_{\text{tot}} = \underbrace{\int_{\Omega} \rho \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} \, \mathrm{d}v + \int_{\partial \Omega} \mathbf{t} \cdot \mathbf{v} \, \mathrm{d}a}_{P_{\text{last}}}.$$
(2.18)

Durch Umwandlung kann aus dieser globalen Form die lokale Form

$$\rho \dot{e}_{\rm int} = \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D}$$
 (2.19)

gebildet werden, siehe z.B. die Herleitung in Altenbach und Altenbach (1994). Darin gilt $\dot{e}_{\rm int} = \frac{\rm D}{{\rm D}t} e_{\rm int}$ und σ ist der Cauchy-Spannungstensor. Die rechte Seite ist die Spannungsleistung des materiellen Punkts. Integration über die Zeit liefert die innere Energie des materiellen Punkts $e_{\rm int}$. Da die mechanische Energiebilanz auch aus der Impulsbilanz und der Massenerhaltung hergeleitet werden kann, stellt sie kein eigenständiges Axiom dar, siehe z.B. Holzapfel (2000).

Beim Starrkörper ist die Deformationsrate $\mathbf{D} = \mathbf{0}$. Damit wird die Spannungsleistung zu null, so dass die innere Energie des materiellen Punkts e_{int} und damit auch die innere Energie des materiellen Körpers E_{int} konstant bleiben. Einsetzen von (2.5) in (2.17)

¹Im Folgenden werden die beiden Koordinatensysteme im Ausgangszustand identisch gewählt, so dass für die Orientierung im Raum $\phi(t=t_0)=0$ gilt und damit die Orientierung im Raum der Verdrehung um die $\tilde{\mathbf{e}}_3$ -Achse entspricht.

ergibt die totale Energie des Starrkörpers

$$E_{\text{tot}} = \underbrace{\frac{1}{2} m \mathbf{v}_{\mathcal{M}} \cdot \mathbf{v}_{\mathcal{M}}}_{E_{\text{kin}}^{\text{tra}}} + \underbrace{\frac{1}{2} \boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{\Theta}_{\mathcal{M}} \boldsymbol{\omega}}_{E_{\text{kin}}^{\text{rot}}} + E_{\text{int}} (t = t_0).$$
(2.20)

Darin ist $E_{\rm kin}^{\rm tra}$ die kinetische Energie der Translationsbewegung und $E_{\rm kin}^{\rm rot}$ die der Rotationsbewegung, die zusammen die kinetische Energie des Starrkörpers $E_{\rm kin} = E_{\rm kin}^{\rm tra} + E_{\rm kin}^{\rm rot}$ bilden. Die Energiebilanz (2.18) wird mit (2.5) zu

$$\frac{\mathrm{D}}{\mathrm{D}t} \left(E_{\mathrm{kin}}^{\mathrm{tra}} + E_{\mathrm{kin}}^{\mathrm{rot}} \right) = \underbrace{\mathbf{f} \cdot \mathbf{v}_{\mathcal{M}} + \mathbf{c}_{\mathcal{M}} \cdot \boldsymbol{\omega}}_{P_{\mathrm{last}}}. \tag{2.21}$$

2.3 Anfangs- und Randbedingungen

Für den deformierbaren Körper resultieren die Bilanzgleichungen aus Abschnitt 2.2 zusammen mit einem Verzerrungsmaß und einem Konstitutivgesetz in einem System aus partiellen Differentialgleichungen zur Beschreibung der Bewegung des materiellen Punkts $\mathbf{x} = \chi(\mathbf{X},t)$. Dies wird hier jedoch nicht weiter beschrieben, siehe dafür z. B. ALTENBACH UND ALTENBACH (1994). Um eine eindeutige Lösung des Systems aus partiellen Differentialgleichungen zu ermöglichen, werden in der Regel zeitliche Anfangsbedingungen und räumliche Randbedingungen festgelegt. Das zu lösende Problem ist damit ein Anfangs-Randwertproblem.

Um beim Starrkörper die Position des Massenmittelpunkts $\mathbf{x}_{\mathcal{M}}(t)$ und die Orientierung im Raum mit den Variablen $\phi(t)$ zu erhalten, sind die Impuls- und die Drehimpulsbilanz aus Abschnitt 2.2 zu lösen. Diese sind Systeme aus gewöhnlichen Differentialgleichungen. Um eine eindeutige Lösung zu ermöglichen, werden in der Regel zeitliche Anfangsbedingungen festgelegt, so dass das zu lösende Problem ein Anfangswertproblem ist.

2.3.1 Anfangsbedingungen

Beim deformierbaren Körper können als zeitliche Anfangsbedingungen die Verschiebung und die Geschwindigkeit jedes materiellen Punkts zum Zeitpunkt $t=t_0$ vorgegeben werden:

$$\mathbf{u} (t = t_0) = \mathbf{u}_0$$

$$\mathbf{v} (t = t_0) = \mathbf{v}_0.$$
(2.22)

Alternativ können zwei andere Felder wie die Cauchy-Spannung σ_0 zusammen mit der Geschwindigkeit \mathbf{v}_0 vorgeschrieben werden, siehe z.B. BELYTSCHKO U. A. (2008).

Beim Starrkörper vereinfacht sich die Festlegung der Anfangsbedingungen. Es reicht aus, die Position und die Geschwindigkeit des Massenmittelpunkts sowie die Orientierung im Raum und die Drehgeschwindigkeit vorzugeben:

$$\mathbf{x}_{\mathcal{M}}(t=t_0) = \mathbf{x}_{\mathcal{M},0} \qquad \qquad \phi(t=t_0) = \phi_0$$

$$\mathbf{v}_{\mathcal{M}}(t=t_0) = \mathbf{v}_{\mathcal{M},0} \qquad \qquad \omega(t=t_0) = \omega_0.$$
(2.23)

2.3.2 Randbedingungen

Als räumliche Randbedingungen für den deformierbaren Körper kann an jedem Punkt des Rands $\partial\Omega$ in drei unabhängige Richtungen entweder die Verschiebung (Dirichlet-Randbedingung) oder die Randlast (Neumann-Randbedingung) vorgegeben werden. Für den Dirichlet-Rand $\partial\Omega_u$ und den Neumann-Rand $\partial\Omega_t$ müssen $\partial\Omega_u \cup \partial\Omega_t = \partial\Omega$ und $\partial\Omega_u \cap \partial\Omega_t = 0$ erfüllt sein. Alternativ kann statt der Verschiebung auch die Geschwindigkeit vorgeschrieben werden, siehe z. B. Belytschko u. A. (2008).

Beim Starrkörper sind zur Lösung des Anfangswertproblems keine räumlichen Randbedingungen nötig. Die Vorgabe der Position eines Randpunkts in eine Richtung reduziert die Anzahl der freien Variablen, für die schließlich das Anfangswertproblem zu lösen ist. Dies geschieht auch durch die Vorgabe einer Variablen zur Beschreibung der Orientierung im Raum. Vorgegebene Randlasten sind Oberflächenlasten. Die Oberflächenlasten bilden zusammen mit den Volumenlasten die Kraft und das Moment auf der rechten Seite des Differentialgleichungssystems.

3 Diskrete-Element-Methode

Zusammenfassung: In der Einführung in die Klasse der Diskrete-Element-Methoden erfolgt deren Kategorisierung nach den Modellannahmen im Raum sowie der Lösung der Bewegungsgleichung. Da die diskreten Elemente in dieser Arbeit stets physikalisch motivierte Teilchen darstellen, wird eine klare Unterteilung der vorgestellten Methode durchgeführt: in das diskrete Modell im Raum aus unbrechbaren polygonalen Starrkörpern und aus deren weich modellierten Interaktionen aufgrund von Kontakt und haftender Verbindung, sowie in die Diskretisierung in der Zeit durch ein explizites Verfahren.

Aufbauend auf dem grundlegenden Modell der Newton'schen Mechanik aus Kapitel 2 wird in diesem Kapitel die Diskrete-Element-Methode eingeführt. Zuerst wird in Abschnitt 3.1 eine Einführung in die Klasse von Methoden gegeben, die mit dem Begriff Diskrete-Element-Methode bezeichnet wird. Anschließend wird die in dieser Arbeit eingesetzte Variante vorgestellt. Sie setzt sich aus einem diskreten Modell im Raum (Abschnitt 3.2) und einer Diskretisierung in der Zeit (Abschnitt 3.3) zusammen.

3.1 Einführung

Die Bezeichnung Diskrete-Element-Methode umfasst eine Klasse von Methoden, die Materialien durch feste, abgegrenzte, miteinander interagierende Körper, die diskreten Elemente, beschreibt. In dieser Arbeit wird der folgende Vorschlag zur Definition der Diskrete-Element-Methode übernommen: "We propose that the name discrete element method should apply to a computer program only if it:

- (a) allows finite displacements and rotations of discrete bodies, including complete detachment, and
- (b) recognizes new contacts automatically as the calculation progresses."

(Cundall und Hart 1992). Ein Überblick über die Klasse der Diskrete-Element-Methoden wird in Cundall und Hart (1992), Bićanić (2004), Munjiza (2005) und Bićanić (2006) gegeben.

Mechanisches Grundmodell

Nachfolgend werden Diskrete-Element-Methoden vorgestellt, die ausschließlich auf die Beschreibung von mechanischen Problemstellungen begrenzt sind. Neben rein mechanischen gibt es eine Reihe weiterer Problemstellungen, die mit Diskrete-Element-Methoden oder darauf aufbauenden Methoden simuliert werden. Beispiele sind thermische, thermomechanische oder magneto-mechanische Probleme. Das zugrundeliegende mechanische Modell ist die Newton'sche Mechanik, deren Gleichungen in Kapitel 2 eingeführt wurden.

Modellannahmen im Raum

Diskrete-Element-Methoden modellieren Materialien durch miteinander interagierende diskrete Elemente. Die diskreten Elemente stellen in dieser Arbeit stets physikalisch motivierte Teilchen dar, deren Ausdehnung zumindestens von mikroskopischer Größenordnung ist. Damit bilden die interagierenden diskreten Elemente ein diskretes Modell im Raum. In Abschnitt 3.2.4 werden verschiedene Motivationsmöglichkeiten für die interagierenden diskreten Elemente diskutiert sowie die Abgrenzung dieser als ein diskretes Modell im Raum zum Einsatz als Diskretisierung eines kontinuierlichen räumlichen Modells. Im Folgenden beschreiben die diskreten Elemente ausschließlich feste Körper. Eventuell vorhandene, dazwischenliegende Flüssigkeiten oder Gase werden nicht abgebildet.

Die diskreten Elemente sind entweder deformierbare oder starre Körper, meist mit einfachen geometrischen Formen. Bei deformierbaren Körpern kann man mit einem Verzerrungsmaß und einem Konstitutivgesetz für jedes Partikel ein eigenes Anfangs-Randwertproblem aufstellen. Dies kann mittels Diskretisierung im Raum z.B. durch finite Elemente oder durch Überlagerung bestimmter Deformationsmodi in eine semidiskrete Form überführt werden, die dann ein Anfangswertproblem in der Zeit bildet. Die Annahme starrer Körper hingegen macht die Einführung eines Verzerrungsmaßes und eines Konstitutivgesetzes innerhalb der Partikel überflüssig, so dass direkt ein Anfangswertproblem in der Zeit formuliert werden kann. Ein diskretes Element kann zudem die Möglichkeit eines Bruchs in mehrere diskrete Elemente besitzen, wozu ein Bruch-

¹In dieser Arbeit wird die Bezeichnung "Teilchen" für einen festen, abgegrenzten materiellen Körper in der Wirklichkeit gewählt, während "diskretes Element" für einen solchen Körper im Modell steht. Der Begriff "Partikel" kann beides bezeichnen.

kriterium und eine Bruchregel festgelegt werden. Im Rahmen dieser Arbeit werden die diskreten Elemente als starr und unbrechbar angenommen.

Die einzelnen Partikel interagieren, indem sie Kräfte aufgrund verschiedener Ursachen aufeinander ausüben. Diese Kräfte können durch unterschiedliche Modelle approximiert werden. Beim Abbilden des Kontakts zwischen Partikeln wird dabei zwischen harter und weicher Modellierung unterschieden. Harter Kontakt bedeutet, dass die Nebenbedingung der Undurchdringbarkeit von Körpern erfüllt wird, während bei weichem Kontakt ein (leichtes) gegenseitiges Überschneiden erlaubt wird. Durch Einführung einer Art konstitutiver Beziehung erhält man aus einem Maß für die Überschneidung die Kontaktkraft. Der weiche Kontakt kann auch als Umsetzung des harten Kontakts im Sinne einer Strafterm-Methode oder als Regularisierung des harten Kontakts angesehen werden. Analog gilt dies für die Reibungsnebenbedingung bei reibungsbehaftetem Kontakt sowie für die Nebenbedingung aus starrer haftender Verbindung zwischen Partikeln. Daher wird die Unterteilung in harte und weiche Modellierung nachfolgend für alle Interaktionsmodelle verwendet. In dieser Arbeit werden der (reibungsbehaftete) Kontakt sowie die haftende Verbindung weich modelliert. In Abschnitt 3.2 wird das räumliche diskrete Modell der vorgestellten Diskrete-Element-Methode ausführlich beschrieben.

Lösung der Bewegungsgleichung

Da die Lösung des Anfangswertproblems aus der semidiskreten Form bei deformierbaren Körpern oder aus der Impuls- und der Drehimpulsbilanz der Partikel selbst bei Starrkörpern nur für sehr einfache Fälle in geschlossener analytischer Form möglich ist, werden approximative numerische Verfahren verwendet. Bei Diskrete-Element-Methoden erfolgt diese Diskretisierung in der Zeit meist durch ein schrittweises Verfahren, wobei zwischen expliziten und impliziten Verfahren unterschieden wird.

Nimmt man für starre Partikel mit hartem Kontakt an, dass zu jedem Zeitpunkt höchstens eine Partikelkollision von infinitesimaler Dauer stattfindet, so kann die Bewegung der einzelnen Partikel statt mit einem zeitgesteuerten Verfahren mit einem ereignisgesteuerten Verfahren ermittelt werden. Eine andere Annahme bildet die Vernachlässigung der Trägheitsterme sowie vorhandener geschwindigkeits- und zeitabhängiger Terme in den zu lösenden Gleichungen. Dies resultiert in der statischen Gleichgewichtsbedingung als zu lösendes Gleichungssystem. In dieser Arbeit wird allerdings keine dieser beiden Annahmen getroffen und ein explizites Verfahren eingesetzt, das in Abschnitt 3.3 beschrieben wird.

Modell		Abschn.
Mathematisches Modell		
Mechanisches Grundmodell	Newton'sche Mechanik	2
• mechanische Bilanzgleichungen		2.2
• Anfangs-, Randbedingungen		2.3
Modellannahmen im Raum	diskretes Modell im Raum	3.2
\bullet diskrete Elemente	starr, unbrechbar,	3.2.1
	geom. Form: eben, konvex, polygonal	3.2.1
• Interaktion der diskr. Elemente	weich (Kontakt, haftende Verbindung):	3.2.2
	– elast., plast., visk. Kontaktmodell	4
	– elast., schäd., ratenabh. Balkenmodell	5
Lösungsmodell		
Lösung der Bewegungsgleichung	Diskretisierung in der Zeit	3.3
• schrittweise Verfahren	explizit: Prädiktor-Korrektor	3.3.1

Tabelle 3.1: Vorgestellte Diskrete-Element-Methode: Übersicht.

Arten der Diskrete-Element-Methode

In Abbildung 3.1 sind die verschiedenen Arten aus der Klasse der Diskrete-Element-Methode zusammengefasst, vergleiche hierzu die Kategorisierung in Cundall und Hart (1992). Die dort aufgelisteten Beispiele sind teilweise vereinfachte Diskrete-Element-Methoden. Vereinfacht bedeutet hier, dass eine Methode nicht alle Anforderungen der gewählten, oben genannten Definition erfüllt, wie z. B. beim Nichtabbilden endlicher Rotationen. Die in dieser Arbeit verwendete Art der Diskrete-Element-Methode, charakterisiert durch starre, unbrechbare Partikel, weiche Interaktion und ein explizites Lösungsverfahren, ist in Abbildung 3.1 grau hinterlegt. Diese Art wurde erstmals in Cundall (1971) und anschließend in Cundall und Strack (1979) unter dem Namen "distinct element method" eingeführt. Die Methode wird auch als "(soft particle) molecular dynamics" bezeichnet, da der Aufbau der Methode analog zur Molekulardynamik (MD) ist. Die Partikel stellen jedoch keine Atome oder Moleküle, sondern materielle Körper mit größerer Ausdehnung dar. Einführungen in die verwendete Art der Diskrete-Element-Methode findet man beispielsweise in Cundall und Strack (1979), Pöschel und Schwager (2005) und Rapaport (2007).

Die spezielle Diskrete-Element-Methode, die in dieser Arbeit vorgestellt wird, ist als Übersicht in Tabelle 3.1 größtenteils vorab zusammengefasst. Die einzelnen Bestandteile sind in den angegebenen Abschnitten beschrieben, so dass diese Übersicht auch als

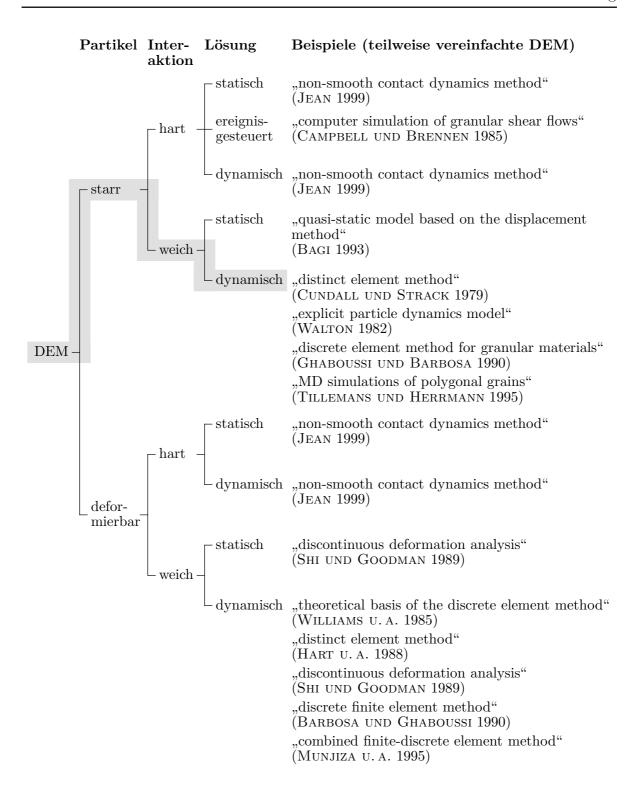


Abbildung 3.1: Arten der Diskrete-Element-Methode: Verwendete Art grau hinterlegt.

Leitfaden für die Vorstellung der Diskrete-Element-Methode in dieser Arbeit angesehen werden kann.

Anwendungsgebiete der Diskrete-Element-Methode

Diskrete-Element-Methoden eignen sich zum einen zur Beschreibung von Materialien, die auf einer bestimmten Skala – zwischen mikroskopisch und astronomisch liegend – aus nichtverbundenen, festen Teilchen bestehen wie granulare Materialien oder Pulver. Einige Beispiele aus der Vielzahl solcher Materialien sind natürlicher Herkunft wie Sand, Geröll, Getreide und Schnee, andere von Menschen produziert wie Zucker, Pellets, Mehl und Granulate für verfahrenstechnische Prozesse. Untersuchungen an granularen Materialien werden in Kapitel 6 vorgestellt. Zum anderen werden Diskrete-Element-Methoden eingesetzt, um Materialien aus festen Teilchen, die durch Adhäsion bzw. Kohäsion miteinander verbunden sind, zu beschreiben. Beispiele für diese heterogenen Festkörper können natürlichen Ursprungs sein wie Mergel, Ton und Fels, aber auch künstlich hergestellt sein wie Keramik, Beton und Mauerwerk. Untersuchungen an heterogenen Festkörpern werden in Kapitel 7 gezeigt. Zusätzlich werden Diskrete-Element-Methoden zur Modellierung von Festkörpern verwendet, die auf einer bestimmten Skala im Ausgangszustand als kontinuierlich angesehen werden können, bei Versagen aber in diskrete Fragmente zerfallen wie beispielsweise Glas und Eis.

Typische Anwendungen sind die Modellierung von granularem Fluss und Lokalisierungsphänomenen wie Scherbändern bei granularen Materialien sowie von Rissen und Fragmentierung bei Festkörpern. Einen Überblick über die Vielzahl der modellierten Materialien und Anwendungen findet man beispielsweise in den Sonderbänden der Zeitschrift Engineering Computations Owen u. a. (1992) und Kuhn (2004), in den Tagungsbänden Cook und Jensen (2002) und Oñate und Owen (2009) sowie auf den Internetseiten der Anbieter kommerzieller Programme wie Itasca (2011) und DEM Solutions (2011).

Grenzen der Diskrete-Element-Methode

Einerseits beschränkt die Rechnerkapazität die Größe eines simulierbaren Problems. Dies gilt sowohl für die Anzahl der Freiheitsgrade als "Größe im Raum" als auch für die Anzahl der Zeitschritte als "Größe in der Zeit". Andererseits ergeben sich die Grenzen der Anwendbarkeit von Diskrete-Element-Methoden aus dem verwendeten mathematischen Modell und dem eingesetzten Lösungsmodell. Jedes Modell stellt eine Approximation dar und führt zu Abweichungen des Modellverhaltens vom Verhalten in der Wirklichkeit. Bei der jeweiligen Anwendung sollte der Einfluss der einzelnen Approximationen

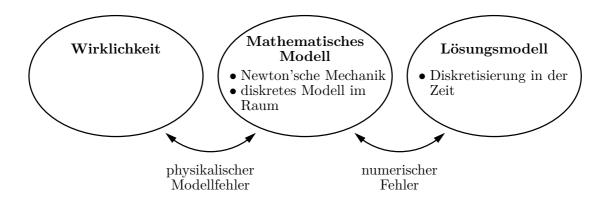


Abbildung 3.2: Vorgestellte Diskrete-Element-Methode: Modellierung und Fehler nach RAMM (2003).

untersucht oder zumindest abgeschätzt werden. Für die vorgestellte Diskrete-Element-Methode sind Modellierung und Fehler nach RAMM (2003) in Abbildung 3.2 skizziert, vergleiche dazu auch Tabelle 3.1. Der Fehler aus dem mathematischen Modell ist der physikalische Modellfehler aus der Abweichung zwischen mathematischem Modell und Wirklichkeit, während der Fehler aus dem Lösungsmodell hier numerischer Art ist.

3.2 Diskretes Modell im Raum

In diesem Abschnitt wird das räumlich diskrete Modell der vorgestellten Diskrete-Element-Methode eingeführt, siehe auch Tabelle 3.1. Es besteht zum einen aus der Approximation eines Materials durch die diskreten Elemente, die in Abschnitt 3.2.1 vorgestellt werden. Zum anderen wird die Interaktion der einzelnen Partikel approximiert, was in Abschnitt 3.2.2 dargestellt wird. Dabei wird jeweils zuerst ein Überblick über die Modellierungsmöglichkeiten bei der verwendeten Art der Diskrete-Element-Methode (starre, unbrechbare Partikel, weiche Interaktion und explizites Lösungsverfahren) gegeben und anschließend ein Modell ausgewählt. Aus den Modellannahmen erhält man das zu lösende Anfangswertproblem, das in Abschnitt 3.2.3 formuliert wird. Abschließend werden in Abschnitt 3.2.4 die Eigenschaften des Modells im Raum diskutiert.

3.2.1 Diskrete Elemente

Unbrechbare Starrkörper

Die einzelnen diskreten Elemente werden als starre Körper approximiert. Zudem werden die diskreten Elemente als unbrechbar angenommen, so dass im Laufe einer Simulation

Merkmal	Ausprägungen
Kreis-/Kugelform	ja, nein
Kontinuierliche Krümmung Konvexität	ja, nein (eckig, "angularity") ja, nein (konkave Abschnitte)
Topologischer Zusammenhang	einfach, nicht einfach
Vollständige Raumausfüllung durch monodisperse Teilchen	möglich, nicht möglich

Tabelle 3.2: Geometrische Eigenschaften eines Partikels.

keine neuen diskreten Elemente durch den Bruch anfänglicher Elemente hinzukommen können.

Geometrische Formen

Die Form eines diskreten Elements kann auf der betrachteten Skala entweder die Form eines wirklichen (vermessenen) Teilchens approximieren oder die Form eines fiktiven Teilchens darstellen. In beiden Fällen ist die Form geometrisch zu beschreiben. Bei der Auswahl der geometrischen Form gibt es die zwei folgenden Hauptziele, die in Konkurrenz zueinander stehen:

Auf der einen Seite wird versucht, den numerischen Aufwand aus Speicherbedarf und Rechenzeit möglichst gering zu halten. Dies fordert einfache geometrische Formen, die durch wenige Parameter beschrieben werden können. Vor allem beeinflusst die geometrische Beschreibung aber die Interaktionsermittlung, insbesondere durch Kontakt, die den Großteil der Rechenzeit beansprucht. Daher werden Formen angestrebt, die eine möglichst einfache Bestimmung des Kontakts erlauben. Die Kontaktermittlung wird in Abschnitt 4.1 vorgestellt.

Auf der anderen Seite ist es das Ziel, die Geometrie der Teilchen und das daraus resultierende mechanische Verhalten möglichst wirklichkeitsgetreu abzubilden. Wichtige geometrische Eigenschaften von Partikeln, die das mechanische Verhalten beeinflussen können, sind in Tabelle 3.2 zusammengefasst. Dies fordert geometrische Formen, die möglichst große Freiheit und Flexibilität bei der Anpassung an verschiedene Teilchenformen erlauben, was durch eine Erhöhung der Parameteranzahl erreicht werden kann.

Aufgrund der meist hohen Anzahl sowohl der diskreten Elemente als auch der Zeitschritte bei einer Simulation werden geometrische Formen verwendet, die möglichst numerisch effizient umsetzbar, aber je nach Anwendung ausreichend anpassbar sind. Wichtige Ar-

ten der geometrischen Beschreibung sind (vergleiche HOGUE 1998 und FENG UND OWEN 2008):

• Kontinuierliche Funktion

Die Geometrie des diskreten Elements wird in geschlossener analytischer Beschreibung durch eine kontinuierliche, meist implizite Funktion dargestellt. Beispiele in 3D sind die Kugel, das Ellipsoid und das Superellipsoid.

• Diskrete Darstellung

Das diskrete Element wird durch Ecken, gerade Kanten und in 3D zusätzlich ebene Flächen sowie deren Konnektivität beschrieben.² Beispiele in 3D sind das gleichseitige Tetraeder und alle Polyeder.

• Zusammengesetzte Form

Ein Partikel wird durch die Vereinigung mehrerer, meist einfacher geometrischer Formen abgebildet. Die einzelnen Formen werden ohne oder mit Überschneidung zueinander positioniert. Zwischen den einzelnen Formen sind keine Relativbewegungen möglich, so dass diese zusammen ein diskretes Element bilden. Beispiele in 3D sind das Zusammensetzen mehrerer Kugeln oder Tetraeder zu einem diskreten Element.

• Kombination kontinuierlicher Funktionen

Die Partikelgeometrie wird durch die Kombination mehrerer Funktionen dargestellt, die jeweils in einem bestimmten Abschnitt definiert sind und einen Teilbereich des diskreten Elements beschreiben. Beispiele in 3D sind der Aufbau eines diskreten Elements aus zwei Kugelsegmenten mit zwischenliegendem Zylinder und eine Kugel mit zylindrischem Loch. Die diskrete Darstellung ist ein Sonderfall dieser Beschreibung, wobei ausschließlich Geradengleichungen (2D) bzw. Ebenengleichungen (3D) kombiniert werden. Die zusammengesetzte Form bildet ebenfalls einen Sonderfall, da die Vereinigung von Formen eine Möglichkeit der Kombination ist.

In Tabelle 3.3 wird eine Übersicht über gebräuchliche geometrische Formen diskreter Elemente in 2D und 3D gegeben. Darin sind auch die Parameter aufgelistet, die zur eindeutigen Beschreibung der Form nötig sind. Zusammen mit der Position des Massenmittelpunkts und der Orientierung im Raum kann die Bewegung des starren Partikels beschrieben werden, siehe Abschnitt 2.1.2.

In dieser Arbeit wird eine zweidimensionale Modellierung mit polygonalen, konvexen, topologisch einfach zusammenhängenden diskreten Elementen nach TILLEMANS UND

²Die Darstellungsweise "discrete function representation" in WILLIAMS UND O'CONNOR (1995), die in 2D den Partikelrand durch Punkte und Geraden diskretisiert, kann ebenfalls als diskrete Darstellung angesehen werden.

2D	3D	Form 2D/3D	Parameter
		Kreis/ Kugel	Radius
		Ellipse/ Ellipsoid	Radien der Hauptachsen
		Superellipse/ Superellipsoid	Radien der Hauptachsen, Exponenten
		gleichseitiges Dreieck/Tetraeder	Seitenlänge
		Polygon/ Polyeder	Position Ecken, Konnektivität
		zusammengesetzte Kreise/Kugeln	Radien, relative Lage
		Kreis-/Kugelsegmente mit Rechteck/Zylinder	Parameter der Funktionen, Definitionsbereiche

Tabelle 3.3: Geometrische Formen diskreter Elemente: Übersicht mit den zur Beschreibung der Form nötigen Parametern.

HERRMANN (1995) gewählt, die eine vollständige Raumausfüllung durch monodisperse Partikel ermöglicht. Die Geometrie wird mittels diskreter Darstellung beschrieben. Diese Modellierung ist numerisch relativ aufwendig, obwohl die zweidimensionale im Vergleich zur dreidimensionalen Abbildung schon starke Vereinfachungen ergibt. Die Beschreibung erlaubt jedoch relativ große Freiheit und Flexibilität zur Anpassung an konvexe Teilchenformen, die als ebene Formen modelliert werden können.

Merkmal	Ausprägungen
Ursprung	wirklich, fiktiv
Schema	regelmäßig, zufällig
Packung	raumfüllend, nichtraumfüllend
Anzahl der Partikel	$n_{ m p}$
Größenverteilung	monodispers, polydispers
Formen der Partikel	gleichartig, unterschiedlich
Koordinationszahl	$n_{ m koz}$
Orientierung der Kontakte/Verbindungen	isotrop, anisotrop
Kontakt im Ausgangszustand	ohne, mit Überschneidung

Tabelle 3.4: Eigenschaften einer Anordnung von diskreten Elementen.

Generierung numerischer Probekörper

Um aus den diskreten Elementen einen numerischen Probekörper zu generieren, werden diese räumlich angeordnet. Dabei werden die einzelnen Partikel eines numerischen Probekörpers fast immer durch die gleiche geometrische Beschreibungsart abgebildet, um eine effiziente numerische Umsetzung, insbesondere der Kontaktermittlung, zu ermöglichen. Ein Generierungsverfahren zur Anordnung der Partikel sollte nicht nur numerisch effizient sein, sondern es sollte auch bestimmte Eigenschaften einer Anordnung gezielt erzeugen können, da die Eigenschaften großen Einfluss auf das Verhalten der Materialprobe haben können. Wichtige Eigenschaften einer Anordnung von diskreten Elementen sind in Tabelle 3.4 zusammengefasst.

In Abbildung 3.3 wird eine Übersicht über Generierungsverfahren für verschiedene Anordnungen diskreter Elemente gegeben. Die verschiedenen Verfahren zur Generierung einer Anordnung können auch kombiniert werden.

Die Anordnung der Partikel kann einerseits die wirkliche Anordnung einer experimentellen Probe approximieren. Hierzu erfolgt die **Vermessung** eines wirklichen Probekörpers, beispielsweise manuell oder mittels bildgebender Verfahren, und darauf basierend die Anordnung der Partikel. Andererseits können die Partikel in einer fiktiven Formation angeordnet werden, die jedoch meist bestimmte Eigenschaften wirklicher Anordnungen besitzen soll.

Die einfachste Art der fiktiven Anordnung ist, die Partikel regelmäßig nach einem bestimmten **Muster** zu positionieren, wohingegen die Erzeugung einer zufälligen Anord-

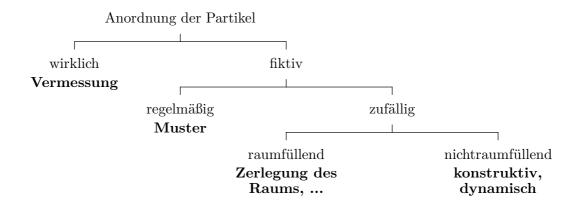


Abbildung 3.3: Generierungsverfahren (fett) für verschiedene Anordnungen diskreter Elemente.

nung aufwendiger ist. Beispiele für eine regelmäßige Anordnung sind die hexagonal dichteste und die kubisch flächenzentrierte Kugelpackung.

Bei zufälliger Anordnung der Partikel wird zwischen raumfüllender und nichtraumfüllender Anordnung unterschieden. Einen Überblick über Verfahren zur Generierung zufälliger, nichtraumfüllender Anordnungen findet man in Stoyan (2002), Cui und O'Sullivan (2003) und Bagi (2005). Verwendet ein Verfahren für nichtraumfüllende Anordnungen nur geometrische Berechnungen, um Probekörper zu erzeugen, wird es konstruktiv genannt. Ein Verfahren heißt hingegen dynamisch, wenn – nach einer vorläufigen, oft stark vereinfachten Anordnung der Partikel – die Lösung der Bewegungsgleichungen durch die Diskrete-Element-Methode eingesetzt wird, um die Partikelanordnung zu erzeugen (siehe Bagi 2005).

Um letztlich eine zufällige, raumfüllende Anordnung zu erzeugen, ist zusätzlich die Bedingung zu erfüllen, dass alle Poren in einer zufälligen Anordnung geschlossen werden. Eine Möglichkeit hierfür, bei der die Partikel ohne Überschneidung angeordnet werden, ist die **Zerlegung des Raums**, beispielsweise durch ein Voronoi-Diagramm.

In dieser Arbeit werden zum einen wirkliche Probekörper manuell vermessen und deren Teilchen mit polygonalen diskreten Elementen approximiert. Zum anderen werden fiktive, zufällige, raumfüllende Anordnungen betrachtet, die durch Zerlegung des Raums mittels Voronoi-Diagramm mit dem Verfahren aus MOUKARZEL UND HERRMANN (1992) erzeugt werden. Das Verfahren besteht im Wesentlichen aus folgenden drei Schritten:

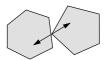
(a) Zuerst wird ein quadratisches Gitter mit der Gitterweite h_{pg} über das Gebiet des zu erzeugenden Probekörpers gelegt. In dieser Arbeit wird stets $h_{pg} = 1$ cm gewählt, so dass die durchschnittliche Partikelgröße 1 cm^2 beträgt, siehe D'ADDETTA (2004).

- (b) Nun wird in jeder Gitterzelle ein Punkt positioniert. Die Positionierung erfolgt zufällig und gleichverteilt in einem Quadrat um den Zellenmittelpunkt. Die Seitenlänge dieses Quadrats $q_{pg}h_{pg}$ kann höchstens die Größe der Gitterzelle annehmen $(q_{pg}=1,0)$, so dass die maximale Unordnung auftritt. Im Minimum $(q_{pg}=0,0)$ reduziert sich dieses Quadrat auf den Zellenmittelpunkt, so dass eine regelmäßige Anordnung entsteht.
- (c) Anschließend wird das Voronoi-Diagramm der Punkteverteilung ermittelt, das die konvexen, polygonalen Partikel bildet.

3.2.2 Interaktion der diskreten Elemente

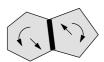
Die einzelnen Partikel eines Probekörpers können aufgrund verschiedener Ursachen miteinander interagieren. Mögliche mechanische Interaktionsursachen sind:

• Kontakt zwischen Partikeln



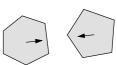
Die Modellierung des Kontakts zwischen Partikeln ist ein charakteristischer Bestandteil einer Diskrete-Element-Methode und wurde bereits in der ersten Veröffentlichung von Cundall und Strack (1979) modelliert. Sie wird in Kapitel 4 beschrieben.

• Haftende Verbindung zwischen Partikeln



Durch Adhäsion bzw. Kohäsion können die Partikel direkt oder durch ein dazwischenliegendes Material miteinander verbunden sein. Die Modellierung der haftenden Verbindung zwischen Partikeln wird in Kapitel 5 vorgestellt.

• Gravitation der Partikel aufeinander



Die gegenseitige Anziehung der Partikel durch die Gravitationskraft wird in dieser Arbeit nicht modelliert. Allerdings kann die Erdanziehungskraft als externe Last auf die Partikel abgebildet werden.

Wie erwähnt werden weder nichtmechanische Interaktionsursachen, wie die elektrische Ladung der Partikel, noch die Interaktion aufgrund von Fluiden zwischen den Partikeln, wie bei Flüssigkeitsbrücken, berücksichtigt. In dieser Arbeit erfolgt die Abgrenzung zwischen Kontakt und haftender Verbindung durch das Kriterium, ob bei einer Interaktion bzw. einem Interaktionsmodell Zugkräfte auftreten können (haftende Verbindung) oder

Merkmal	Ausprägungen
Modellursprung	analytische Lösung, einfache Modellannahme
Reichweite	zwischen benachbarten Partikeln, bis zu gewissem Abstand, unbegrenzt
Anzahl der Partikel	zwei (paarweises Interaktionsmodell), mehrere
Topologie des Interaktionsnetzwerks	fix, variierend
Kinematische Beschreibung	Überschneidung, Relativverschiebung, Relativgeschwindigkeit der Partikel
Konstitutive Beschreibung	elastisch, plastisch, schädigend, ratenabhängig,
Geometrische Form der Partikel	(s. Abschn. 3.2.1)

Tabelle 3.5: Eigenschaften eines Interaktionsmodells.

nicht (Kontakt). Dabei können Partikel in einem betrachteten Zustand entweder durch Kontakt oder durch haftende Verbindung, nicht aber durch beides zugleich interagieren.

Modelle für die Interaktion

Um eine Interaktion zwischen Partikeln abzubilden, wird ein Interaktionsmodell aufgestellt. Dies ermittelt die Kraft und das Moment auf ein diskretes Element als Funktion von Variablen und Parametern und kann durch die Eigenschaften in Tabelle 3.5 charakterisiert werden.

Die Ermittlung aller Partikelinteraktionen ist im Allgemeinen der numerisch teuerste Teil einer Diskrete-Element-Methode, so dass die Interaktionsmodelle die numerische Effizienz der Methode maßgeblich bestimmen. Daher soll die Interaktionsermittlung einerseits mit möglichst geringem numerischen Aufwand durchführbar sein. Andererseits sollen die Interaktionsmodelle das wirkliche mechanische Verhalten der Partikelinteraktionen möglichst genau abbilden, da dies das mechanische Verhalten des gesamten Probekörpers maßgeblich beeinflusst. Zudem haben die Interaktionsmodelle Einfluss auf die mathematischen Eigenschaften der zu lösenden Gleichungen, so dass die Interaktionsmodelle das Herzstück einer Diskrete-Element-Methode bilden.

Da die Neu- und Weiterentwicklung von Interaktionsmodellen einen Schwerpunkt dieser Arbeit darstellt, wird die Modellierung des Kontakts und der haftenden Verbindung zwischen Partikeln separat in den Kapiteln 4 und 5 beschrieben. Dort wird jeweils zuerst ein Überblick über die verschiedenen Modelle gegeben. Anschließend werden die im Rahmen dieser Arbeit entwickelten und eingesetzten Modelle vorgestellt und ihre Eigenschaften diskutiert.

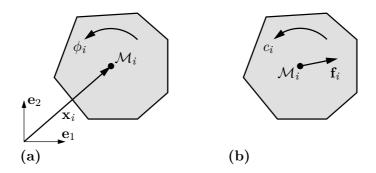


Abbildung 3.4: Diskretes Element: (a) Position und Orientierung in der aktuellen Konfiguration sowie (b) Kraft und Moment.

Parameter eines Interaktionsmodells

Die verschiedenen Parameter eines Interaktionsmodells können zum einen durch die Untersuchung der Interaktion einzelner Partikel in experimentellen Tests oder in Simulationen auf einer feineren Skala ermittelt werden. Zum anderen können sie durch den Vergleich von Experiment und Simulation am gesamten Probekörper mittels inverser Analyse bestimmt werden. Zudem können Parameter auch nach gewissen Anforderungen festgesetzt werden, um beispielsweise große Partikelüberschneidungen durch das Kontaktmodell zu vermeiden.

Ein Parameter wird für alle einzelnen Interaktionen innerhalb eines Probekörpers entweder identisch oder verschieden angenommen. Durch eine nichtkonstante, räumliche Verteilung der Parameter, wie beispielsweise beim gezielten Einbringen von Schwachstellen sowie bei einer Normalverteilung oder einer Weibull-Verteilung, kann eine bestimmte Unregelmäßigkeit innerhalb eines Probekörpers erzeugt werden.

3.2.3 Resultierendes Anfangswertproblem

Mit der Annahme starrer, unbrechbarer diskreter Elemente aus Abschnitt 3.2.1 und weicher Interaktionsmodellierung aus Abschnitt 3.2.2 bilden die Impulsbilanz (2.11) und die Drehimpulsbilanz (2.15) für jedes Partikel i die zu lösenden Gleichungen. Für die in dieser Arbeit gewählte zweidimensionale Modellierung werden die Koordinaten des Massenmittelpunkts in der aktuellen Konfiguration und die aktuelle Orientierung im Raum zur generalisierten Position des diskreten Elements

$$\mathbf{x}_{i}^{g} = \begin{bmatrix} x_{1,i} & x_{2,i} & \phi_{i} \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \tag{3.1}$$

zusammengefasst, siehe Abbildung 3.4(a). Der Index \mathcal{M} für den Massenmittelpunkt wird hier und auch im Weiteren weggelassen. Aus der Geschwindigkeit des Massen-

mittelpunkts und der Drehgeschwindigkeit wird die generalisierte Geschwindigkeit des Partikels

$$\dot{\mathbf{x}}_{i}^{g} = \begin{bmatrix} \dot{x}_{1,i} & \dot{x}_{2,i} & \dot{\phi}_{i} \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \tag{3.2}$$

gebildet. Die Impulsbilanz (2.11) in die \mathbf{e}_1 - und die \mathbf{e}_2 -Richtung sowie die Drehimpulsbilanz (2.16) werden zur Bewegungsgleichung des Partikels

$$\underbrace{\begin{bmatrix} m_i & 0 & 0 \\ 0 & m_i & 0 \\ 0 & 0 & \Theta_i \end{bmatrix}}_{\mathbf{M}_i^g} \underbrace{\begin{bmatrix} \ddot{x}_{1,i} \\ \ddot{x}_{2,i} \\ \ddot{\phi}_i \end{bmatrix}}_{\mathbf{\ddot{x}}_i^g} = \underbrace{\begin{bmatrix} f_{1,i} \\ f_{2,i} \\ c_i \end{bmatrix}}_{\mathbf{f}_i^g} \tag{3.3}$$

zusammengesetzt. Darin stellt \mathbf{M}_{i}^{g} die generalisierte Massenmatrix aus der Masse und dem Massenträgheitsmoment dar und $\ddot{\mathbf{x}}_{i}^{g}$ die generalisierte Beschleunigung des Partikels.

Die generalisierte Kraft \mathbf{f}_{i}^{g} besteht aus der Kraft auf das diskrete Element und das Moment um den Massenmittelpunkt, wie in Abbildung 3.4 (b) dargestellt. Sie setzt sich aus einem Anteil aus den Partikelinteraktionen $\mathbf{f}_{\text{iak},i}^{g}$ und einem Anteil aus den externen Lasten $\mathbf{f}_{\text{ext},i}^{g}$ zusammen:

$$\mathbf{f}_{i}^{g} = \underbrace{\mathbf{f}_{k,i}^{g} + \mathbf{f}_{h,i}^{g}}_{\mathbf{f}_{iak,i}^{g}} + \mathbf{f}_{ext,i}^{g}. \tag{3.4}$$

In dieser Arbeit werden generalisierte Kräfte aus der Interaktion durch Kontakt $\mathbf{f}_{k,i}^g$ abgebildet, die in Kapitel 4 vorgestellt werden, sowie aus der Interaktion durch haftende Verbindung $\mathbf{f}_{h,i}^g$, die in Kapitel 5 eingeführt werden.

Für ein System aus n_p diskreten Elementen werden die generalisierten Positionen (3.1) der Partikel zur generalisierten Position des Systems

$$\mathbf{x}_{\text{sys}}^{\text{g}} = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_{1}^{\text{g}} & \mathbf{x}_{2}^{\text{g}} & \dots & \mathbf{x}_{n_{\text{p}}}^{\text{g}} \end{bmatrix}^{\text{T}}$$

$$(3.5)$$

und die generalisierten Geschwindigkeiten der Partikel (3.2) zur generalisierten Geschwindigkeit des Systems

$$\dot{\mathbf{x}}_{\text{sys}}^{\text{g}} = \begin{bmatrix} \dot{\mathbf{x}}_{1}^{\text{g}} & \dot{\mathbf{x}}_{2}^{\text{g}} & \dots & \dot{\mathbf{x}}_{n_{\text{p}}}^{\text{g}} \end{bmatrix}^{\text{T}}$$

$$(3.6)$$

zusammengefasst. Die Bewegungsgleichungen (3.3) aller $n_{\rm p}$ diskreten Elemente bilden ein System aus $n_{\rm fhg}$ Gleichungen, wobei $n_{\rm fhg}=3n_{\rm p}$ die Anzahl aller Partikelfreiheitsgrade

ist:

$$\underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{M}_{1}^{g} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{M}_{2}^{g} & \cdots & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{M}_{n_{p}}^{g} \end{bmatrix}}_{\mathbf{M}_{sys}^{g}} \underbrace{\begin{bmatrix} \ddot{\mathbf{x}}_{1}^{g} \\ \ddot{\mathbf{x}}_{2}^{g} \\ \vdots \\ \ddot{\mathbf{x}}_{n_{p}}^{g} \end{bmatrix}}_{\ddot{\mathbf{x}}_{sys}^{g}} = \underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{f}_{1}^{g} \\ \mathbf{f}_{2}^{g} \\ \vdots \\ \mathbf{f}_{n_{p}}^{g} \end{bmatrix}}_{\mathbf{f}_{sys}^{g}}.$$
(3.7)

Darin besteht die generalisierte Systemmassenmatrix $\mathbf{M}_{\mathrm{sys}}^{\mathrm{g}}$ aus den generalisierten Massenmatrizen der einzelnen Partikel und aus Nullmatrizen $\mathbf{0}$. $\ddot{\mathbf{x}}_{\mathrm{sys}}^{\mathrm{g}}$ beschreibt die generalisierte Beschleunigung des Systems und $\mathbf{f}_{\mathrm{sys}}^{\mathrm{g}}$ die generalisierte Kraft auf das System.

Das resultierende Anfangswertproblem besteht aus der Bewegungsgleichung des Systems (3.7) sowie den Anfangsbedingungen (2.23) für alle Partikel und kann in kompakter Form wie folgt dargestellt werden:

$$\ddot{\mathbf{x}}_{\text{sys}}^{\text{g}} = \left(\mathbf{M}_{\text{sys}}^{\text{g}}\right)^{-1} \mathbf{f}_{\text{sys}}^{\text{g}} \tag{3.8a}$$

$$\mathbf{x}_{\text{sys}}^{\text{g}}(t=t_0) = \mathbf{x}_{\text{sys},0}^{\text{g}}$$

$$\dot{\mathbf{x}}_{\text{sys}}^{\text{g}}(t=t_0) = \dot{\mathbf{x}}_{\text{sys},0}^{\text{g}}.$$
(3.8b)

Werden Positionen bzw. Orientierungen von Partikeln durch Randbedingungen vorgegeben, so werden die zugehörigen Gleichungen aus dem Anfangswertproblem (3.8) herausgenommen und die Anzahl der Freiheitsgrade n_{fhg} reduziert sich. Die vorgeschriebenen Positionen und Orientierungen können aber als gegebene, eventuell zeitlich veränderliche Parameter in die Interaktionsermittlung eingehen.

In dieser Arbeit kann die generalisierte Kraft auf das System $\mathbf{f}_{\mathrm{sys}}^{\mathrm{g}}$ eine Funktion der generalisierten Position aller Partikel $\mathbf{x}_{\mathrm{sys}}^{\mathrm{g}}$, der generalisierten Geschwindigkeit aller Partikel $\dot{\mathbf{x}}_{\mathrm{sys}}^{\mathrm{g}}$ sowie der Zeit t sein.³ Damit ist (3.8a) ein System aus n_{fhg} gewöhnlichen Differentialgleichungen zweiter Ordnung in expliziter Form. Die einzelnen Gleichungen sind nur durch $\mathbf{f}_{\mathrm{sys}}^{\mathrm{g}}$ auf der rechten Seite gekoppelt.

Zusätzlich kann die generalisierte Kraft auf das System $\mathbf{f}_{\text{sys}}^{\text{g}}$ in dieser Arbeit von Geschichtsvariablen \mathbf{g}_{sys} abhängen, die bei den elasto-plastischen und elasto-schädigenden Interaktionsmodellen auftreten. Dabei fasst

$$\mathbf{g}_{\text{sys}} = \begin{bmatrix} g_1 & g_2 & \dots & g_{n_{\text{ge}}} \end{bmatrix}^{\text{T}} \tag{3.9}$$

 $^{^3}$ Die generalisierten Kräfte aus Interaktion sind bei frei beweglichen Partikeln keine Funktionen der Zeit, so dass $\mathbf{f}_{\mathrm{sys}}^{\mathrm{g}}$ nur dann eine Funktion der Zeit ist, wenn externe Lasten oder vorgegebene Positionen bzw. Orientierungen bestimmter Partikel von der Zeit abhängig sind.

Diskontinuierliches Material

- jedes Teilchen ≠ ein diskretes Element
 → diskretes Modell

Kontinuierliches Material

- ein kontinuierlicher Körper $\hat{=}$ mehrere diskrete Elemente
 - → diskretes Modell, Diskretisierung

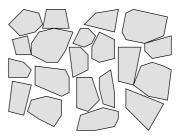
Tabelle 3.6: Motivation der Modellannahmen im Raum.

alle $n_{\rm ge}$ Geschichtsvariablen aus den modellierten Interaktionen im Partikelsystem zusammen. Die Evolution der einzelnen Geschichtsvariablen aus den unterschiedlichen Interaktionsmodellen wird bei deren Einführung in den Kapiteln 4 und 5 vorgestellt. Hierdurch entstehen weitere zu lösende Gleichungen, die von den Bewegungen der diskreten Elemente abhängig sind, wodurch eine Kopplung mit den Bewegungsgleichungen (3.8a) auftritt.

Das resultierende Anfangswertproblem ist somit ein System aus $n_{\text{fhg}} + n_{\text{ge}}$ gekoppelten Gleichungen für die generalisierte Position aller Partikel $\mathbf{x}_{\text{sys}}^{\text{g}}(t)$ und alle Geschichtsvariablen $\mathbf{g}_{\text{sys}}(t)$. Da das Anfangswertproblem nur für wenige einfache Fälle analytisch lösbar ist, werden approximative, numerische Lösungsverfahren eingesetzt, die in Abschnitt 3.3 beschrieben werden.

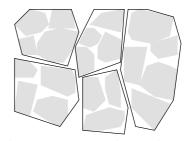
3.2.4 Eigenschaften des diskreten Modells im Raum

Die ursprüngliche Motivation des Modells im Raum ist es, jedes materielle Teilchen eines diskontinuierlich aufgebauten Materials durch ein diskretes Element abzubilden. Ein Material wird in dieser Arbeit als diskontinuierlich bezeichnet, wenn es auf der betrachteten Skala aus festen, abgegrenzten Teilchen zusammengesetzt ist, wie granulares Material aus Körnern oder Mauerwerk aus Steinen. Jedes einzelne Teilchen wird dabei als kontinuierlicher Körper angesehen, d. h. seine (diskrete) Struktur wird in dieser Arbeit nicht aufgelöst. Im Gegensatz dazu wird ein Material kontinuierlich genannt, wenn es auf der modellierten Skala als kontinuierlich aufgebaut betrachtet werden kann, wie Glas oder Eis auf mesoskopischer Skala. Neben der ursprünglichen Motivation der Modellannahmen im Raum gibt es noch weitere Motivationsmöglichkeiten, bei denen nicht jedes materielle Teilchen durch ein diskretes Element modelliert wird, siehe Tabelle 3.6:



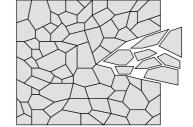
• Jedes Teilchen $\hat{=}$ ein diskretes Element

Die explizite Darstellung jedes materiellen Teilchens eines diskontinuierlichen Materials durch ein diskretes Element ist die naheliegendste Motivation der diskreten Elemente. Die Interaktionsmodelle beschreiben die Interaktion der einzeln abgebildeten Teilchen. Dabei stellt das Modell ein diskretes, mathematisches Modell der Wirklichkeit im Raum dar.



ullet Jedes Teilchen $\not\equiv$ ein diskretes Element

Wird nicht jedes Teilchen eines diskontinuierlich aufgebauten Materials explizit durch ein einzelnes diskretes Element modelliert, so wird die geometrische Ähnlichkeit zwischen dem wirklichen und dem numerischen Probekörper verletzt. Dies bringt zusätzliche physikalische Modellfehler (vergleiche Abbildung 3.2) in das diskrete, mathematische Modell im Raum ein, siehe FENG U. A. (2007). Es besteht beispielsweise die Möglichkeit, aus Effizienzgründen relativ kleine Teilchen nicht einzeln abzubilden. Diese können dann vernachlässigt, in den Interaktionsmodellen mitberücksichtigt oder durch Zusammenfassung mehrerer kleiner Teilchen zu einem diskreten Element dargestellt werden. Ebenfalls aus Effizienzgründen können nicht nur mehrere relativ kleine Teilchen, sondern generell mehrere Teilchen jeder Größe zu einem diskreten Element zusammengefasst werden. Entsprechend ändert sich die Bedeutung der Interaktionsmodelle, die nun z. B. den Einfluss der kleinen, nicht explizit modellierten Teilchen mitabbilden oder die Interaktion von zusammengefassten Teilchen beschreiben.



• Ein kontinuierlicher Körper $\hat{=}$ mehrere diskrete Elemente

Wird ein kontinuierliches Material modelliert, so bildet jedes diskrete Element einen Teil des kontinuierlichen Körpers ab. Hier fehlt eine direkte physikalische Motivation der diskreten Elemente. Wird allerdings der Zerfall eines kontinuierlichen Materials in einzelne Teilchen beispielsweise durch Versagen der Partikelverbindungen simuliert, können die diskreten Elemente entstandene Fragmente darstellen. Die Größe der diskreten Elemente kann z. B. aufgrund der Bruchstückgröße bei Glasbruch oder der Spangröße bei Zerspanen von Stahl gewählt werden. Die Interaktionsmodelle beschreiben als Teil des räumlichen Modells das Verhalten des kontinuierlich aufgebauten Materials, bei Zerfall aber auch die Interaktion der Fragmente. Dabei kann das Modell im Raum einerseits als diskretes, mathematisches Modell zur Abbildung der kontinuierlichen Wirklichkeit gegebenenfalls mit Übergang zu einem diskontinuierlichen Material aufgefasst werden.

Andererseits kann das gleiche Modell auch als Diskretisierung eines kontinuierlichen, mathematischen Modells und damit als Lösungsmodell angesehen werden. Die Lösung dieser Diskretisierung sollte bei Verfeinerung gegen die exakte Lösung konvergieren. Auch wenn das räumliche Modell eigentlich kein Verfahren zur Lösung der partiellen Differentialgleichungen im Raum aus der Kontinuumsmechanik ist, wie beispielsweise die Finite-Element-Methode, können die Eigenschaften des Modells mit denen des kontinuumsmechanischen Modells verglichen werden. Theoretische Vergleiche reiner Stabwerksmodelle, für den statischen Fall und ohne explizite Verwendung von Partikeln und Rotationen, mit dem elastischen Standard-Kontinuum gibt es bereits in WIEGHARDT (1906) und HRENNIKOFF (1941). Vergleiche diskreter Modelle, die verschiedene Interaktionsmodelle mit und ohne Rotationsfreiheitsgrade verwenden, mit dem elastischen Standard-Kontinuum sowie mit elastischen mikropolaren, nichtlokalen und gradientenerweiterten Kontinua findet man beispielsweise in POTAPOV U. A. (1995), KUHL U. A. (2000), CHANG U. A. (2002) und OSTOJA-STARZEWSKI (2002).

Da ein diskretes Element in dieser Arbeit stets ein physikalisch motiviertes Teilchen abbildet, ist das Modell im Raum hier ein diskretes mathematisches Modell. Das vorgestellte diskrete Modell im Raum stellt dabei ein mathematisches Modell mit vergleichsweise starken Vereinfachungen dar, das Materialien allerdings auf einer relativ feinen Skala abbildet und dadurch seine Leistungsfähigkeit erhält.

3.3 Diskretisierung in der Zeit

In diesem Abschnitt wird die zeitliche Diskretisierung des Anfangswertproblems dargestellt, das aus dem diskreten Modell im Raum aus Abschnitt 3.2 resultiert. Zunächst wird in Abschnitt 3.3.1 das hierzu verwendete, schrittweise Verfahren vorgestellt und anschließend werden in Abschnitt 3.3.2 dessen Eigenschaften anhand kleiner Beispiele gezeigt.

3.3.1 Schrittweise Verfahren zur Lösung des Anfangswertproblems

Im Folgenden wird zuerst ein Überblick über schrittweise Verfahren für Anfangswertprobleme gewöhnlicher Differentialgleichungen gegeben und anschließend das PrädiktorKorrektor-Verfahren dargestellt, das hier zur Lösung der Bewegungsgleichungen (3.8a)
eingesetzt wird. Durch die Interaktionsmodelle werden in dieser Arbeit zusätzlich Geschichtsvariablen (3.9) eingeführt. Deren Evolution wird zum Teil mit schrittweisen Verfahren gelöst, die ebenfalls beschrieben werden. Zusammen mit dem Prädiktor-Korrektor-Verfahren bilden diese Verfahren dann das gestaffelte Lösungsverfahren, das abschließend vorgestellt wird.

Verfahren für Anfangswertprobleme gewöhnlicher Differentialgleichungen

Die schrittweisen Verfahren zur Lösung von Anfangswertproblemen gewöhnlicher Differentialgleichungen in expliziter Form werden im Folgenden für das Anfangswertproblem

$$\dot{x} = f(x,t)$$

$$x(t = t_0) = x_0$$
(3.10)

aus einer skalaren Differentialgleichung erster Ordnung und einer Anfangsbedingung dargestellt, wobei f in diesem Abschnitt eine Funktion bezeichnet. Die Verfahren unterteilen das betrachtete Intervall $t \in [t_0, t_{\rm e}]$, wobei t nicht notwendigerweise die Zeit ist, in $n_{\rm a}$ Abschnitte und liefern zu jedem (Zeit-)Punkt t_l für $l=1,\ldots,n_{\rm a}$ eine Approximation x_l der exakten Lösung $x(t_l)$. $\Delta t_l = t_l - t_{l-1}$ bezeichnet die Schrittweite, die im Weiteren konstant zu $\Delta t = (t_{\rm e} - t_0)/n_{\rm a}$ gewählt wird. Eine Übersicht über diese Verfahren findet man beispielsweise in Gear (1971), Ascher und Petzold (1998) und Deuflhard und Bornemann (2008) sowie in den Vorlesungsunterlagen Wohlmuth (2005). Eine sehr umfangreiche Zusammenstellung bieten Hairer u. A. (1993) und Hairer und Wanner (1996).

Nachfolgend sind wichtige Merkmale von Verfahren aufgeführt, wobei auf HAIRER U. A. (1993), WOHLMUTH (2005) und DEUFLHARD UND BORNEMANN (2008) zurückgegriffen wird:

• Explizit, implizit

Explizite Verfahren benötigen zur Ermittlung der approximierten Lösung x_l nur die Werte x_{l-i} mit $i \geq 1$, nicht aber x_l . Sie können zur Lösung nichtsteifer Probleme effizient eingesetzt werden. Wird auch x_l verwendet, so ist das Verfahren implizit. Dann muss in der Regel in jedem Schritt eine nichtlineare Gleichung oder ein nichtlineares Gleichungssystem gelöst werden. Dies kann beispielsweise iterativ durch gradientenfreie Fixpunktiterationsverfahren oder durch das gradientenbasierte Newton-Verfahren erfolgen.

• Einschrittverfahren, Mehrschrittverfahren

Einschrittverfahren verwenden zur Ermittlung von x_l im expliziten Fall x_{l-1} und im impliziten Fall zusätzlich x_l , nicht aber die Lösungen x_{l-i} mit i>1. Beispiele sind Runge-Kutta-Verfahren, die noch nach ihrer **Stufenzahl**, d. h. der Anzahl ineinandergeschachtelter Funktionsauswertungen innerhalb eines Schritts, differenziert werden können. Werden die Lösungen x_{l-i} mit i>1 eingesetzt, so ist das Verfahren ein Mehrschrittverfahren. Mehrschrittverfahren können gegenüber Einschrittverfahren den Vorteil haben, dass die Verfahrensordnung ohne zusätzliche Funktionsauswertungen in einem Schritt (und bei impliziten Verfahren bei einer Iteration der Lösung des Gleichungssystems) erhöht werden kann. Allerdings können sie den Nachteil besitzen, dass eine Anlaufrechnung erforderlich ist, um die benötigten Werte x_{l-i} mit i>1 für die ersten Schritte zur Verfügung zu stellen.

Lineare Mehrschrittverfahren ermitteln die Lösung x_l als Linearkombination von x_{l-i} mit i > 0 und $f(x_{l-i}, t_{l-i})$ mit $i \geq 0$. Beispiele sind Adams-Verfahren und "backward-differentiation-formulas", kurz BDF-Verfahren. Erstere approximieren die rechte Seite f(x,t), letztere die Lösung x(t) durch ein Interpolationspolynom. Prädiktor-Korrektor-Verfahren, bei denen auf einen Prädiktor mit einem expliziten Adams-Verfahren eine meist festgelegte Anzahl an Korrektoren mit einem impliziten Adams-Verfahren folgt, sind hingegen Beispiele für nichtlineare Verfahren.

Um bei Adams- und BDF-Verfahren unkompliziert die Ordnung adaptiv wechseln zu können, kann die **Newton-Darstellung** des Interpolationspolynoms durch Rückwärtsdifferenzen gewählt werden. Um unkompliziert die Schrittweite adaptiv wechseln zu können, kann hingegen die **Nordsieck-Darstellung** eingesetzt werden. Dabei wird anstatt der Informationen zu den Punkten t_{l-i} mit $i \geq 1$ der Nordsieck-Vektor mit skalierten Ableitungen zum Zeitpunkt t_{l-1} verwendet, so dass das Verfahren nur Informationen des letzten Zeitpunkts benutzt.

• Für Differentialgleichungen erster Ordnung, höherer Ordnung

Eine explizite Differentialgleichung der Ordnung k kann in ein System aus k Differentialgleichungen erster Ordnung umgewandelt werden und dann mit den Verfahren für Differentialgleichungen erster Ordnung gelöst werden. Es gibt allerdings

auch Verfahren für Differentialgleichungen höherer Ordnung, wie die Nyström- und die Newmark-Verfahren für Differentialgleichungen zweiter Ordnung. Solche Verfahren können den Vorteil besitzen, einerseits weniger Werte speichern zu müssen und andererseits, wie Nyström-Verfahren für $\ddot{x} = f(x,t)$, weniger Rechenoperationen zu benötigen. Dabei ist zu unterscheiden, ob ein Verfahren für eine **allgemeine rechte Seite** wie in $\ddot{x} = f(x,t)$ oder nur für eine **spezielle rechte Seite** wie in $\ddot{x} = f(x,t)$ verwendet werden kann.

• Konsistenzordnung

Ein Verfahren erzeugt zum einen einen lokalen und daraus resultierend einen globalen Verfahrensfehler. Zum anderen entstehen Fehler durch Abschneiden und Runden. Bei exakten Anfangswerten bilden diese zusammen den Fehler $|x(t_l) - x_l| \le C_1(\Delta t^p) + C_2(\epsilon/\Delta t)$ für $l = 1, \ldots, n_a$. Darin sind C_1 und C_2 die Fehlerkonstanten, ϵ die Rechengenauigkeit und p die Ordnung des globalen Verfahrensfehlers, auch Konsistenzordnung oder Ordnung des Verfahrens genannt. Bei großer Schrittweite dominiert der Verfahrensfehler, bei sehr kleiner der Fehler aus Abschneiden und Runden.

• Stabilität

A-stabile, auch unbedingt stabil genannte Verfahren sind für jede Schrittweite stabil und in Kombination mit dem Newton-Verfahren zur Lösung des nichtlinearen Gleichungssystems für steife Probleme geeignet. Allerdings können nur implizite Verfahren A-stabil sein, während explizite Verfahren immer lediglich für begrenzte Schrittweiten, die von der Problemstellung abhängen, stabil sind.

Bei Systemen gewöhnlicher Differentialgleichungen können einerseits unterschiedliche Schrittweiten zur Lösung verschiedener Variablen verwendet werden. Anwendung findet dies z.B. bei der Lösung strukturdynamischer Probleme mit expliziten Finite-Element-Methoden unter der Bezeichnung "subcycling" oder "multi-time-step"-Verfahren (ER-HART 2004). Andererseits können verschiedene Variablen mit unterschiedlichen Verfahren gelöst werden. Möglichkeiten der Adaptivität bei Diskrete-Element-Methoden sind beispielhaft in Tabelle 3.7 dargestellt, vergleiche FENG UND OWEN (2008).

Bei der verwendeten Art der Diskrete-Element-Methode werden explizite Verfahren eingesetzt, da die zu lösenden Differentialgleichungen im Allgemeinen nicht sehr steif sind. Die Funktionsauswertung ist in der Regel der mit Abstand aufwendigste Teil der Methode, weshalb Verfahren mit wenigen, bestenfalls einer einzigen, Funktionsauswertungen je Schritt bevorzugt werden. Daher werden oft einstufige Verfahren mit einer Funktionsauswertung pro Schritt gegenüber mehrstufigen Verfahren vorgezogen. Da die Rechenzeit meist von der Funktionsauswertung dominiert wird, können ohne wesentlichen Anstieg des Rechenaufwands auch aufwendige Verfahren höherer Ordnung genutzt werden, solange sie nicht mehr Funktionsauswertungen pro Schritt benötigen. Häufig kommen

	Unterschiedliche Schrittweiten	Unterschiedliche Verfahren
in der Zeit	kleine Schrittweite bei Stoßbelastung, große bei anschließender quasistatischer Belastung	explizites Verfahren bei Stoßbelastung, implizites bei anschließender quasistatischer Belastung
für verschiedene Freiheitsgrade	kleine Schrittweite für "steife" Freiheitsgrade, große für "wei- che" Freiheitsgrade	explizites Verfahren für Partikel um Rissspitze, implizites für da- von entfernt liegende Partikel

Tabelle 3.7: Möglichkeiten der Adaptivität bei Diskrete-Element-Methoden (vergleiche Feng und Owen 2008).

Verfahren für Differentialgleichungen zweiter Ordnung zum Einsatz. Bei bestimmten Interaktionsmodellen können auch Verfahren für eine spezielle rechte Seite verwendet werden. Im Falle reversibler Systeme können Verfahren mit symmetrischer Eigenschaft, auch als zeitreversibel bezeichnet, attraktiv sein, vergleiche HAIRER U. A. (2002). Oftmals wird die Klasse der Verlet- und "leap-frog"-Verfahren, auch Störmer-Verfahren genannt, als Verfahren mit niedriger Ordnung eingesetzt. Hierzu zählt auch das Zentrale-Differenzen-Verfahren. Zudem finden Prädiktor-Korrektor-Verfahren Anwendung, meist basierend auf Adams-Verfahren mit einer festgelegten Anzahl an Korrektoren, siehe RAPAPORT (2007).

Verwendetes Prädiktor-Korrektor-Verfahren für die Bewegungsgleichungen

In dieser Arbeit wird ein Prädiktor-Korrektor-Verfahren nach GEAR (1971) zur Lösung der Bewegungsgleichungen (3.8a) mit den Anfangsbedingungen (3.8b) verwendet. Es ist ein nichtlineares Mehrschrittverfahren in Nordsieck-Darstellung für Differentialgleichungen zweiter Ordnung mit einer allgemeinen rechten Seite. Der Prädiktor ist analog zu einem expliziten, der Korrektor analog zu einem impliziten Adams-Verfahren für Differentialgleichungen erster Ordnung aufgebaut. Das Verfahren ist nicht A-stabil, also nur bedingt stabil, und hat die Ordnung fünf. Für eine spezielle rechte Seite ohne explizite Abhängigkeit von der ersten Zeitableitung kann es sogar sechste Ordnung erreichen. Hier wird es mit gleicher, konstanter Zeitschrittweite für alle Freiheitsgrade der Bewegungsgleichungen im gesamten betrachteten Zeitintervall angewandt. Bei den einzelnen Beispielen dieser Arbeit wird die Zeitschrittweite jeweils auf Basis vereinfachender Abschätzungen an einem einzelnen Kontakt bzw. einer einzelnen haftenden Verbindung

gewählt. Im Folgenden wird das Verfahren für ein skalares Anfangswertproblem

$$\ddot{x} = f(x, \dot{x}, t)$$

$$x(t = t_0) = x_0$$

$$\dot{x}(t = t_0) = \dot{x}_0$$

$$(3.11)$$

dargestellt.

Das Verfahren verwendet die abhängige Variable x und deren Zeitableitungen bis einschließlich der fünften Ableitung, die in dem Nordsieck-Vektor

$$\check{\mathbf{x}} = \begin{bmatrix} x & \dot{x}\Delta t & \ddot{x}\frac{\Delta t^2}{2} & x^{(iii)}\frac{\Delta t^3}{6} & x^{(iv)}\frac{\Delta t^4}{24} & x^{(v)}\frac{\Delta t^5}{120} \end{bmatrix}^{\mathrm{T}}$$
(3.12)

zusammengefasst werden. Ab der dritten Zeitableitung ist die Zeitableitung nicht durch Punkte, sondern hochgestellt in Klammern gekennzeichnet. Zum Zeitpunkt t_0 werden die Anfangswerte

$$\dot{\mathbf{x}}_0 = \begin{bmatrix} x_0 & \dot{x}_0 \Delta t & \ddot{x}_0 \frac{\Delta t^2}{2} & x_0^{(iii)} \frac{\Delta t^3}{6} & x_0^{(iv)} \frac{\Delta t^4}{24} & x_0^{(v)} \frac{\Delta t^5}{120} \end{bmatrix}^{\mathrm{T}}$$
(3.13)

festgelegt. Zusätzlich zu den gegebenen Anfangsbedingungen x_0 und \dot{x}_0 müssen also die Anfangswerte $\ddot{x}_0, x_0^{(iii)}, x_0^{(iv)}$ und $x_0^{(v)}$ bestimmt werden. In dieser Arbeit wird, wenn nicht anders angegeben, angenommen, dass alle Partikel zu $t=t_0$ vollständig in Ruhe sind, d. h. die Anfangswerte aller Zeitableitungen sind $\dot{x}_0=\ddot{x}_0=x_0^{(iii)}=x_0^{(iv)}=x_0^{(v)}=0$. Dadurch ist keine Anlaufrechnung nötig. Die Anfangswerte werden dabei so gewählt, dass sie die Differentialgleichung $\ddot{x}_0=f(x_0,\dot{x}_0,t_0)$ erfüllen.

In jedem Zeitschritt von t_{l-1} nach t_l für $l=1,\ldots,n_{\rm a}$ wird nun zuerst der explizite Prädiktor

$$\check{\mathbf{x}}_{l}^{\text{pd}} = \mathbf{S}\check{\mathbf{x}}_{l-1} \quad \text{mit } \mathbf{S} = \begin{bmatrix}
1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\
0 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\
0 & 0 & 1 & 3 & 6 & 10 \\
0 & 0 & 0 & 1 & 4 & 10 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 5 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1
\end{bmatrix}$$
(3.14)

durchgeführt. Er bildet eine Polynomextrapolation fünften Grads mit der bekannten Lösung des letzten Zeitpunkts, ohne dabei die Funktion auszuwerten.

Die extrapolierten Werte $\check{\mathbf{x}}_l^{\mathrm{pd}}$ aus dem Prädiktor bilden nun die Startwerte für die Fixpunktiteration des impliziten Korrektor-Verfahrens. Dabei wird in jedem Iterationsschritt zuerst eine Funktionsauswertung mit der approximierten Lösung aus dem vor-

herigen Iterationsschritt ausgeführt und anschließend die Lösung korrigiert. Dies kann fortgesetzt werden, bis die Differentialgleichung zum Zeitpunkt t_l erfüllt wird. In Abhängigkeit von der Ordnung des Prädiktor-Verfahrens und der Ordnung des Korrektor-Verfahrens kann allerdings die maximal mögliche Verfahrensordnung bereits nach einer bestimmten Anzahl an Korrektor-Iterationen erreicht werden. Daher ist es besonders attraktiv, nur eine festgelegte Anzahl an Korrektor-Iterationen, insbesondere nur eine einzelne, durchzuführen, so dass das Prädiktor-Korrektor-Verfahren ein explizites Verfahren ist.

In dieser Arbeit wird eine einzelne Korrektor-Iteration je Schritt durchgeführt. Zunächst wird also die Funktion mit der extrapolierten Lösung des Prädiktors ausgewertet:

$$f_l^{\text{pd}} = f\left(x_l^{\text{pd}}, \dot{x}_l^{\text{pd}}, t_l\right) \quad \text{mit } x_l^{\text{pd}} = \check{x}_{1,l}^{\text{pd}} \qquad \dot{x}_l^{\text{pd}} = \check{x}_{2,l}^{\text{pd}}/\Delta t.$$
 (3.15)

Darin sind $\check{x}_{1,l}^{\mathrm{pd}}$ und $\check{x}_{2,l}^{\mathrm{pd}}$ die ersten beiden Einträge des Nordsieck-Vektors (3.12) aus dem Prädiktor.

Anschließend wird $\Delta \check{x}_l$ als Differenz zwischen der ausgewerteten Funktion $f_l^{\rm pd}$ und der zweiten Zeitableitung $\ddot{x}_l^{\rm pd}$ aus dem Prädiktor, multipliziert mit $\Delta t^2/2$, ermittelt. Diese wird mit festgelegten Faktoren, die in **s** zusammengefasst sind, multipliziert und zur extrapolierten Lösung des Prädiktors addiert:

$$\Delta \check{\mathbf{x}}_{l} = \left(f_{l}^{\mathrm{pd}} - \ddot{\mathbf{x}}_{l}^{\mathrm{pd}}\right) \frac{\Delta t^{2}}{2} \quad \text{mit } \ddot{\mathbf{x}}_{l}^{\mathrm{pd}} = \check{\mathbf{x}}_{3,l}^{\mathrm{pd}} \frac{2}{\Delta t^{2}}$$

$$\check{\mathbf{x}}_{l} = \check{\mathbf{x}}_{l}^{\mathrm{pd}} + \mathbf{s} \Delta \check{\mathbf{x}}_{l} \quad \text{mit } \mathbf{s} = \begin{bmatrix} \frac{3}{20} & \frac{251}{360} & 1 & \frac{11}{18} & \frac{1}{6} & \frac{1}{60} \end{bmatrix}^{\mathrm{T}}.$$

$$(3.16)$$

Hierin ist $\check{x}_{3,l}^{\mathrm{pd}}$ der dritte Eintrag des Nordsieck-Vektors (3.12) aus dem Prädiktor. s wird dabei so gewählt, dass Stabilität und Genauigkeit erreicht werden (GEAR 1971).⁴ In Abbildung 3.5 ist das Verfahren zusammengefasst.

Verwendete Verfahren für die Evolution der Geschichtsvariablen

Die Lösung für die Geschichtsvariablen (3.9) wird in dieser Arbeit ebenfalls schrittweise zu den gleichen Zeitpunkten t_l für $l=1,\ldots,n_a$ ermittelt wie die Lösung der Bewegungsgleichungen mit dem Prädiktor-Korrektor-Verfahren. Die dabei eingesetzten Verfahren werden bei der Vorstellung der Interaktionsmodelle in den Kapiteln 4 und 5 beschrieben.

⁴In Allen und Tildesley (1987) wird zu dem Verfahren angegeben, dass zur Korrektur der Faktor $s_1 = \frac{3}{20}$ für die spezielle rechte Seite f(x) verwendet werden soll, allerdings für die rechte Seite $f(x,\dot{x})$ der Faktor $s_1 = \frac{3}{16}$. In Gear (1971) wird ausschließlich $s_1 = \frac{3}{20}$ für eine allgemeine rechte Seite verwendet und keine Angaben zu speziellen rechten Seiten gemacht. Daher wird in dieser Arbeit unabhängig von der Art der rechten Seite die Version $s_1 = \frac{3}{20}$ nach Gear (1971) eingesetzt.

$\hat{\mathbf{x}}_0$ fangswerte	
aleife über alle Schritte $n=1,\dots,n_{\mathrm{a}}$	
Prädiktor $\check{\mathbf{x}}_l^{\mathrm{pd}} = \mathbf{S}\check{\mathbf{x}}_{l-1}$	
Funktionsauswertung $f_l^{\text{pd}} = f\left(x_l^{\text{pd}}, \dot{x}_l^{\text{pd}}, t_l\right)$	
Korrektor $\Delta \check{x}_l = \left(f_l^{\text{pd}} - \ddot{x}_l^{\text{pd}} \right) \frac{\Delta t^2}{2}$ $\check{\mathbf{x}}_l = \check{\mathbf{x}}_l^{\text{pd}} + \mathbf{s} \Delta \check{x}_l$	

Abbildung 3.5: Struktogramm des Prädiktor-Korrektor-Verfahrens nach GEAR (1971).

Es soll hier vorweggenommen werden, dass als schrittweise Verfahren das Trapez-Verfahren zur Ermittlung der tangentialen Verschiebung (Abschnitt 4.3.2) und das implizite Euler-Verfahren zur Lösung der elasto-plastischen Gleichungen (Abschnitte 4.3.2 und 4.4.2) eingesetzt werden. Die ratenunabhängige Elasto-Schädigung (Abschnitt 5.1.2) sowie die ratenabhängige Elasto-Schädigung (Abschnitt 5.2.2) können zu den Zeitpunkten explizit ausgewertet werden, ohne dass dafür Lösungsverfahren nötig sind.

Gestaffeltes Verfahren für die Bewegungsgleichungen und die Evolution der Geschichtsvariablen

Die Lösung der Bewegungsgleichungen und der Evolution der Geschichtsvariablen kann nun simultan oder gestaffelt erfolgen. In dieser Arbeit wird ein gestaffeltes Lösungsverfahren gewählt. Dies wird beispielhaft an einem gekoppelten Anfangswertproblem aus einer gewöhnlichen Differentialgleichung zweiter Ordnung (Bewegungsgleichung) und einer noch nicht näher spezifizierten Differentialgleichung erster Ordnung (Evolutionsgleichung für eine Geschichtsvariable g) vorgestellt:

$$\ddot{x} = f(x, \dot{x}, g, t)$$

$$\dot{g} = \mathcal{E}(x, \dot{x}, g, t)$$

$$x(t = t_0) = x_0$$

$$\dot{x}(t = t_0) = \dot{x}_0$$

$$g(t = t_0) = g_0.$$
(3.17)

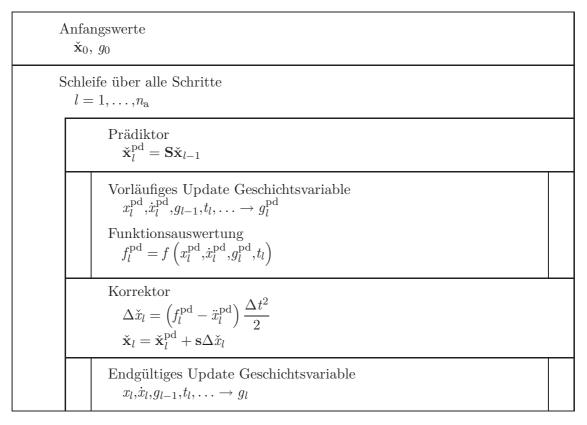


Abbildung 3.6: Struktogramm des gestaffelten Lösungsverfahrens.

Darin beschreibt die Funktion \mathcal{E} die Evolution der Variablen g.

Das gestaffelte Lösungsverfahren ist in Abbildung 3.6 dargestellt. In jedem Schritt wird zuerst der Prädiktor (3.14) für die Bewegungsgleichung ausgeführt. Anschließend erfolgt das vorläufige Update der Geschichtsvariablen. Hierzu werden die extrapolierten Werte des Prädiktors, die Geschichtsvariable aus dem vorherigen Zeitschritt, die Zeit und je nach Verfahren weitere bekannte Werte aus vorherigen Zeitschritten verwendet. Die temporäre Geschichtsvariable $g_l^{\rm pd}$ wird zur Funktionsauswertung benutzt, aber nicht für den folgenden Zeitschritt gespeichert.

Mit der ausgewerteten Funktion wird der Korrektor (3.16) der Bewegungsgleichung durchgeführt. Zuletzt erfolgt das endgültige Update der Geschichtsvariablen, nun mit den endgültigen Werten des Korrektors, der Geschichtsvariable aus dem vorherigen Zeitschritt, der Zeit und eventuell weiteren bekannten Werten aus vorherigen Zeitschritten. Durch die gestaffelte Lösung können die Verfahren für die Geschichtsvariablen als explizite Verfahren formuliert werden, so dass das gesamte gestaffelte Lösungsverfahren ein explizites Verfahren ist.

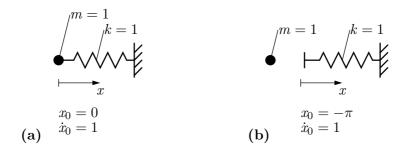


Abbildung 3.7: Beispiele mit einem Freiheitsgrad: (a) Harmonischer Oszillator und (b) Kollision einer Masse mit einer linearen Feder.

Implementierung

Das gestaffelte Lösungsverfahren für ein System aus $n_{\rm fhg}$ Freiheitsgraden der Partikelbewegungen und $n_{\rm ge}$ Geschichtsvariablen, das aus dem diskreten Modell im Raum resultiert, ist im Anhang in Abbildung A.1 vereinfacht dargestellt. Zur Übersichtlichkeit ist die Darstellung auf freie Partikel, deren Freiheitsgrade nicht durch Randbedingungen vorgegeben werden, sowie zeitlich konstante generalisierte Kräfte aus externen Lasten beschränkt. Im Anhang werden ebenfalls die Unterprogramme "vorläufiges Update Geschichtsvariablen, Funktionsauswertung" (Abbildung A.2) und "endgültiges Update Geschichtsvariablen" (Abbildung A.3) für das System vereinfacht zusammengefasst. Die einzelnen Teile daraus werden in den folgenden Kapiteln 4 und 5 Schritt für Schritt vorgestellt, wobei dort in den Absätzen zur Implementierung jeweils auf die beiden Abbildungen A.2 und A.3 verwiesen wird.

Das Verfahren ist als sequentielles Programm in der Programmiersprache Fortran implementiert. Es basiert auf einem Programm der Gruppe von Professor Hans Jürgen Herrmann, das im Rahmen eines vorangegangenen Forschungsprojekts am hiesigen Institut von Dr. Gian Antonio D'Addetta weiterentwickelt wurde, siehe TILLEMANS UND HERRMANN (1995) und D'ADDETTA (2004).

3.3.2 Eigenschaften der Diskretisierung in der Zeit

Um das schrittweise Lösungsverfahren für die Bewegungsgleichungen zu testen, wurden die zwei einfachen Beispiele mit einem Freiheitsgrad in Abbildung 3.7 betrachtet. Beide Beispiele wurden mit den folgenden expliziten Verfahren untersucht:

⁵In Abbildung A.1 wird unter "Funktionsauswertung" nur die generalisierte Kraft auf das System $\mathbf{f}_{\text{sys}}^{\text{g}}$ ermittelt. Die Vormultiplikation mit der Inversen der Systemmassenmatrix $\mathbf{M}_{\text{sys}}^{\text{g}}$ nach Gleichung (3.8a) erfolgt hier erst bei der Ermittlung von $\Delta \check{x}$.

- explizites Euler-Verfahren (EE) mit der Konsistenzordnung eins, siehe z. B. Deuflhard und Bornemann (2008)
- modifiziertes Euler-Verfahren (ME) mit der Konsistenzordnung zwei, siehe z.B. Deuflhard und Bornemann (2008) unter "Verfahren von C. Runge"
- Zentrale-Differenzen-Verfahren (ZD) mit der Konsistenzordnung zwei, siehe z.B. RAMM (2002)
- Prädiktor-Korrektor-Verfahren (PK) mit der Konsistenzordnung fünf aus Abbildung 3.5 nach GEAR (1971)

Der harmonische Oszillator mit einer linearen Feder der Federsteifigkeit k in Abbildung 3.7(a) wird durch das Anfangswertproblem

$$\ddot{x} = -x \quad \text{mit } x_0 = 0 \qquad \dot{x}_0 = 1$$
 (3.18)

mit der analytischen Lösung

$$x(t) = \sin(t) \tag{3.19}$$

für $t_0=0$ beschrieben. Das Anfangswertproblem (3.18) wurde nun für $t\in[0,3\pi]$ mit unterschiedlicher Schrittweite gelöst. Zur Lösung mit dem expliziten Euler-Verfahren und dem modifizierten Euler-Verfahren wurde die skalare Differentialgleichung zweiter Ordnung in ein System aus zwei Differentialgleichungen erster Ordnung umgewandelt. Zur Lösung mit der Zentrale-Differenzen-Methode und dem Prädiktor-Korrektor-Verfahren wurden die benötigten zusätzlichen Anfangswerte aus der analytischen Lösung ermittelt. In Abbildung 3.8 ist der Fehler der Lösungsverfahren über die Anzahl der Zeitschritte doppeltlogarithmisch aufgetragen. Wie erwartet erreichen die Verfahren ihre Konsistenzordnung, wobei das Prädiktor-Korrektor-Verfahren aufgrund der speziellen rechten Seite f(x) sogar die Ordnung $O(\Delta t^6)$ erzielt. Bei sehr kleinen Schrittweiten werden bei allen Verfahren mit Ausnahme des expliziten Euler-Verfahrens die Rundungsund Abschneidefehler dominant, so dass der dargestellte Fehler wieder zunimmt.

Die Kollision einer Masse mit einer linearen Feder in Abbildung $3.7\,(b)$ wird durch das Anfangswertproblem

$$\ddot{x} = \begin{cases} 0 & \text{für } x \le 0 \\ -x & \text{für } x > 0 \end{cases} \quad \text{mit } x_0 = -\pi \qquad \dot{x}_0 = 1$$
 (3.20)

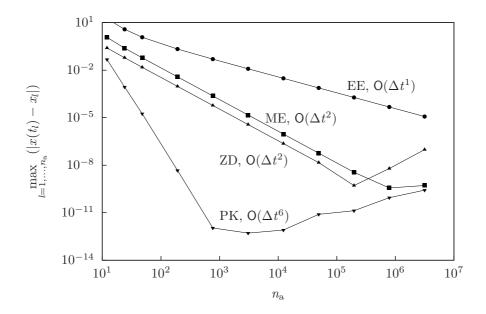


Abbildung 3.8: Fehler der Lösungsverfahren: Harmonischer Oszillator.

mit der analytischen Lösung

$$x(t) = \begin{cases} t - \pi & \text{für } t \le \pi \\ -\sin(t) & \text{für } \pi < t < 2\pi \\ -t + 2\pi & \text{für } t \ge 2\pi \end{cases}$$

$$(3.21)$$

für $t_0 = 0$ beschrieben. Das Anfangswertproblem (3.20) wurde in gleicher Weise für $t \in [0,3\pi]$ mit den vier Verfahren mit unterschiedlicher Schrittweite gelöst. In Abbildung 3.9 ist der Fehler der Lösungsverfahren aufgetragen. Da die analytische Lösung (3.21) nur zweimal stetig differenzierbar ist und nicht wie die Lösung des harmonischen Oszillators (3.19) unendlich oft, erreicht das Prädiktor-Korrektor-Verfahren seine Konsistenzordnung nicht, sondern nur zweite Ordnung. Dennoch liegt der Fehler etwas unterhalb des Fehlers aus dem modifizierten Euler-Verfahren sowie dem Zentrale-Differenzen-Verfahren.

Weitere, umfangreichere Untersuchungen zu expliziten Verfahren bei Diskrete-Element-Methoden findet man z.B. in Munjiza (2005). Dort werden verschiedene Verfahren am harmonischen Oszillator auf Fehler in der Amplitude und der Periode getestet. In Feng und Owen (2008) wird an einer Kollision eines Partikels mit einer Wand in 1D der Einfluss der Dämpfung und des Kontaktbeginns auf die Lösung mit dem Zentrale-Differenzen-Verfahren betrachtet. An einer Kollision zwischen einem Partikel und einer

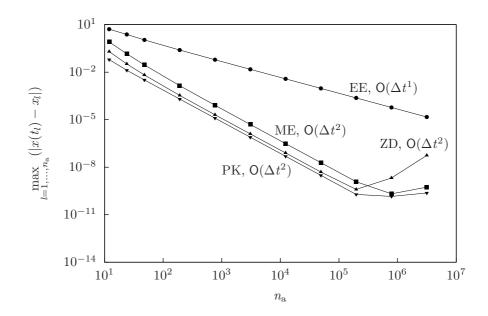


Abbildung 3.9: Fehler der Lösungsverfahren: Kollision einer Masse mit einer linearen Feder.

Wand in 2D wird in Kruggel-Emden (2008) eine Vielzahl verschiedener Verfahren untersucht.

4 Modellierung des Kontakts zwischen Partikeln

Zusammenfassung: In diesem Kapitel werden Kontaktmodelle vorgestellt, die wesentliche Eigenschaften des Partikelkontakts bei numerisch akzeptablem Aufwand wiedergeben. Die repulsive Kraft zwischen den Partikeln wird durch ein elastisches Normalkraftmodell dargestellt, das um ein viskoses Modell erweitert wird. In tangentialer Richtung wird sowohl Haften als auch Gleiten durch ein elasto-plastisches Kontaktmodell abgebildet. Zur Modellierung von Haften und Gleiten aufgrund der Reibung zwischen Partikel und ebenem Untergrund wird ein neues, ebenfalls elasto-plastisches Kontaktmodell entwickelt.

Die Modellierung der Partikelinteraktion durch Kontakt, die in diesem Kapitel vorgestellt wird, ist laut der Definition aus Abschnitt 3.1 Bestandteil jeder Diskrete-Element-Methode. Sind zwei Teilchen in Kontakt, dann deformieren sie sich aufgrund der Undurchdringbarkeit der Körper zumindest lokal in Oberflächennähe und es entstehen repulsive Spannungen normal zu den Kontaktflächen. Die Oberflächen können sich durch ihre Rauheit auf feineren Skalen verhaken, so dass Reibung in tangentialer Richtung auftritt. Außerdem können weitere Phänomene beobachtet werden wie z. B. die Energiedissipation durch Dämpfung. Ein Kontakt zwischen Partikeln kann ein Stoßvorgang von kurzer Dauer oder langanhaltend sein. Dabei wird das Kontaktverhalten durch Vorgänge auf feineren Skalen bestimmt, die durchaus komplex sind.

Um die wesentlichen mechanischen Eigenschaften des Kontakts mit der Diskrete-Element-Methode abzubilden, werden mathematische Modelle aufgestellt. Sie definieren die Funktionen für die generalisierte Kraft auf das diskrete Element i aus dem Kontakt j, wobei hier zwischen Modellen für die generalisierte Normalkraft $\mathbf{f}_{n,ij}^g$ und die generalisierte Tangentialkraft $\mathbf{f}_{t,ij}^g$ unterschieden wird. Die generalisierten Kräfte aus allen $j=1,\ldots,n_{k,i}$ Kontakten des Partikels werden aufsummiert. In dieser Arbeit wird bei der ebenen Betrachtungsweise zusätzlich die generalisierte Kraft $\mathbf{f}_{u,i}^g$ aus dem Kontakt des Partikels mit einem ebenen Untergrund separat modelliert. Als Summe erhält man

die generalisierte Kraft auf das Partikel aus Kontakt

$$\mathbf{f}_{k,i}^{g} = \sum_{j=1}^{n_{k,i}} \left(\mathbf{f}_{n,ij}^{g} + \mathbf{f}_{t,ij}^{g} \right) + \mathbf{f}_{u,i}^{g}.$$
(4.1)

Gemeinsam mit den generalisierten Kräften aus haftender Verbindung und externen Lasten bildet sie nach Gleichung (3.4) die generalisierte Kraft auf das diskrete Element. Zudem können weitere Modelle für Kräfte und Momente aus Kontakt erstellt werden, die allerdings in dieser Arbeit nicht vorgestellt werden. Beispiele sind Modelle für ein Torsionsmoment zwischen Partikeln oder für Rollreibung, siehe z.B. IWASHITA UND ODA (1998) und FENG UND OWEN (2008).

Im nächsten Abschnitt 4.1 wird zunächst die nötige Vorstufe zur Berechnung der Kontaktkräfte, die Kontaktermittlung vorgestellt. Anschließend werden in Abschnitt 4.2 die Modelle für die Normalkraft und in Abschnitt 4.3 die Modelle für die Tangentialkraft zwischen den Partikeln präsentiert. Zuletzt werden in Abschnitt 4.4 die Modelle für die Kraft zwischen dem Partikel und einem ebenen Untergrund beschrieben.

4.1 Kontaktermittlung

Die Topologie des Netzwerks aus Kontakten in einem Probekörper ist in der Regel nicht fix und jedes der $n_{\rm p}$ Partikel kann potentiell mit jedem anderen Partikel in Kontakt gelangen. Die Topologie variiert je nach Partikelanordnung und -bewegung unterschiedlich schnell. Bevor also zum betrachteten Zustand die Kontaktkräfte berechnet werden können, sind alle vorhandenen Kontakte zu ermitteln.

Die Kontaktermittlung besteht zum einen aus der Kontaktsuche, d. h. der Überprüfung, ob zwei diskrete Elemente I und II in Kontakt sind. Bei der verwendeten Art der Diskrete-Element-Methode mit weichem Kontakt bedeutet dies, dass sich die Partikel (leicht) überschneiden, siehe Abbildung 4.1. Zum anderen werden bei der Kontaktermittlung die kinematischen Größen ermittelt, die für die eingesetzten Kontaktmodelle benötigt werden. Dies sind in der Regel die Normalenrichtung \mathbf{n} und die Tangentialrichtungen \mathbf{t} (2D) bzw. \mathbf{t}_1 und \mathbf{t}_2 (3D) sowie die Punkte, an denen die Kontaktkräfte angreifen. Hinzu kommen je nach Modell weitere kinematische Größen, beispielsweise die Überschneidungstiefe in Normalenrichtung u_n oder die Überschneidungsbreite B_n und die Überschneidungsfläche A_n . Die Kontaktermittlung bei dreidimensionaler Betrachtung ist häufig, insbesondere bei komplexeren Partikelformen, deutlich aufwendiger als bei zweidimensionaler Betrachtung.

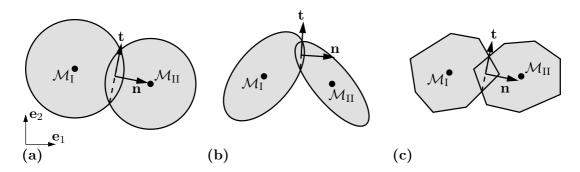


Abbildung 4.1: Kontakt für verschiedene Partikelformen in 2D mit übertriebenen Überschneidungen: (a) Kreise, (b) Ellipsen und (c) konvexe Polygone.

Verfahren zur Kontaktermittlung

Da die gegenseitige Kontaktprüfung jedes Partikels mit jedem anderen Partikel mit einem Aufwand $O(n_p^2)$ bei jeder Kontaktauswertung¹ bereits bei relativ geringer Anzahl an Partikeln und Auswertungen nicht mehr praktikabel ist, werden effizientere Verfahren eingesetzt. Dies sind meist hierarchische Verfahren mit mindestens zwei Stufen. Dabei wird in der ersten Stufe eine Liste mit potentiellen Kontaktpaaren aufgestellt. Aufbauend auf der eventuell in weiteren Stufen ausgedünnten Liste werden schließlich in der letzten Stufe die sich tatsächlich kontaktierenden diskreten Elemente sowie die benötigten kinematischen Größen ermittelt. Die Effizienz eines Verfahrens ist einerseits von der geometrischen Form der diskreten Elemente abhängig, andererseits von der Anordnung, insbesondere der Packungsdichte und der Größenverteilung, sowie von der Bewegung der diskreten Elemente. Eine Übersicht über verschiedene Verfahren zur Kontaktermittlung bei Diskrete-Element-Methoden findet man beispielsweise in WILLIAMS UND O'CONNOR (1995), BIĆANIĆ (2004), BIĆANIĆ (2006) und FENG UND OWEN (2008).

In der ersten Stufe werden, insbesondere bei komplexen Partikelformen, häufig einfache Formen als "bounding volumes" verwendet. Dabei kommen beispielsweise rechteckige (2D) bzw. quaderförmige (3D) "bounding boxes" oder kreisförmige (2D) bzw. kugelförmige (3D) "bounding spheres" zum Einsatz, vergleiche Munjiza (2005) und Feng und Owen (2008). Das einfachste Verfahren prüft bei jeder Auswertung die Interaktion jedes Partikels oder jedes "bounding volumes" mit allen anderen ab, wobei doppelte Überprüfungen vermieden werden können, d. h. bei Betrachtung "Partikel I in Kontakt mit II" ist die Untersuchung "Partikel II in Kontakt mit II" überflüssig. Effizientere Verfahren können in körper- und raumbasierte Verfahren kategorisiert werden, wobei die raumbasierten weiter in netz- und baumbasierte Verfahren unterteilt werden können, siehe Bićanić (2004) und Feng und Owen (2008). Zusätzlich kann bei der Ermittlung po-

¹Die Kontaktauswertung kann je nach Lösungsverfahren zur Diskretisierung in der Zeit auch mehr als einmal pro Zeitschritt erforderlich sein, siehe Abschnitt 3.3.1.

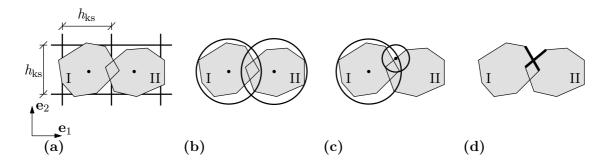


Abbildung 4.2: Mehrstufiges, netzbasiertes "linked-cell"-Verfahren zur Kontaktsuche nach Tillemans und Herrmann (1995): (a) Einsortieren in Netzzellen, (b) Überschneidung der einhüllenden Kreise, (c) Überschneidung des einhüllenden Kreises mit dem Kreis um die Partikelkante und (d) Schnittpunkt der Partikelkanten.

tentieller Kontaktpartner ein Pufferabstand zwischen den Partikeln oder den "bounding volumes" eingeführt werden. Dann werden in die Liste potentieller Kontaktpaare alle Partikelpaare aufgenommen, die näher als dieser Abstand beieinanderliegen. Dadurch vergrößert sich in der Regel zwar die Anzahl der potentiellen Kontaktpaare, die Liste muss aber nicht mehr bei jeder Auswertung erstellt werden, sondern beispielsweise erst, wenn das schnellste Partikel sich um die Hälfte dieser Pufferzone weiterbewegt hat, vergleiche z. B. PÖSCHEL UND SCHWAGER (2005) und RAPAPORT (2007).

In der feinsten Stufe unterscheiden sich die Verfahren nach der geometrischen Form und Beschreibung der diskreten Elemente sowie den zu ermittelnden kinematischen Größen, vergleiche Hogue (1998), Bićanić (2004) und Feng und Owen (2008). Am einfachsten ist die Berechnung der Überschneidungstiefe bei Kreisen (2D) bzw. Kugeln (3D), da hier lediglich der Mittelpunktsabstand und die Summe der Partikelradien zu vergleichen sind. Bei diskreter Darstellung sind die Kanten (2D) bzw. Ebenen (3D) der Oberfläche eines Partikels mit denen des potentiellen Kontaktpartners auf Schnittpunkte (2D) bzw. Schnittlinien (3D) zu überprüfen. Bei konvexen Partikelformen vereinfacht sich die Kontaktermittlung, da multiple Kontakte ausgeschlossen sind. Zur Kontaktermittlung kann bei komplexen Partikelformen eine Diskretisierung der Oberfläche durchgeführt werden, vergleiche Williams und O'Connor (1995) und Hogue (1998).

Verwendetes mehrstufiges, netzbasiertes "linked-cell"-Verfahren

In dieser Arbeit wird das mehrstufige, netzbasierte "linked-cell"-Verfahren für konvexe polygonale Partikel nach TILLEMANS UND HERRMANN (1995) zur Kontaktsuche eingesetzt. Es besteht aus folgenden Stufen, siehe auch Abbildung 4.2:

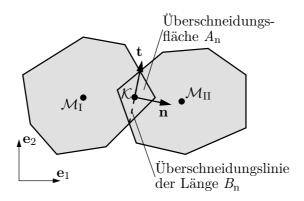


Abbildung 4.3: Kinematische Größen bei der Kontaktermittlung.

- (a) Zuerst wird ein quadratisches Netz der Gitterweite $h_{\rm ks}$ über das betrachtete räumliche Gebiet gelegt. Alle diskreten Elemente werden in die Netzzelle einsortiert, in der ihr Flächenmittelpunkt liegt. Für Proben, die mit dem Verfahren nach MOUKARZEL UND HERRMANN (1992) aus Abschnitt 3.2.1 erzeugt wurden, wird das Gitter aus der Probengenerierung mit $h_{\rm ks} = h_{\rm pg} = 1\,\rm cm$ verwendet und hier auch für anders generierte Proben beibehalten.
- (b) Nun wird als "bounding volume" ein Kreis um den Flächenmittelpunkt eingesetzt. Der Radius ist der maximale Abstand vom Flächenmittelpunkt zu einer Polygonecke. Dieser einhüllende Kreis jedes Partikels wird mit denen der Partikel in der gleichen Zelle sowie in den Nachbarzellen auf Überschneidung überprüft. Bei Überschneidung wird das Partikelpaar in die Liste potentieller Kontaktpaare aufgenommen. Je nach maximaler Partikelgröße besteht der Suchbereich aus so vielen Nachbarzellen, dass kein Kontakt übersehen werden kann. Um Partikelpaare nicht doppelt zu untersuchen, werden nur Partner angesehen, deren Partikelnummer kleiner als die des betrachteten Partikels ist.
- (c) Für jedes der $n_{\rm pk}$ potentiellen Kontaktpaare aus (b) wird nun der einhüllende Kreis des Partikels I mit den Kreisen um die Mittelpunkte aller Kanten des Partikels II auf Überschneidungen überprüft und umgekehrt. Nur bei sich überschneidenden Kreisen kann die Kante potentiell die Oberfläche des anderen Partikels schneiden.
- (d) In der feinsten Stufe werden die in (c) ausgewählten Kanten auf Schnittpunkte überprüft.

Wird Kontakt festgestellt, so werden die kinematischen Größen berechnet. Dies sind die Normale \mathbf{n} , die Tangente \mathbf{t} , der Kontaktpunkt \mathcal{K} , an dem die Normal- und die Tangentialkräfte angreifen, als Mittelpunkt der Überschneidungslinie mit der Länge B_n sowie die Überschneidungsfläche A_n , siehe Abbildung 4.3. Zudem werden die Relativgeschwindigkeiten am Kontaktpunkt in Normalenrichtung v_n und in Tangentialrichtung v_t ermittelt.

Der numerische Aufwand des Verfahrens ist $O(n_p)$. Für die betrachteten dichten Anordnungen von Partikeln mit der gleichen Größenordnung von 1 cm \times 1 cm sind die Partikel gleichmäßig über die Zellen verteilt und das verwendete Verfahren ist gut geeignet. Der numerische Aufwand steigt zudem mit der Kantenanzahl der Polygone, die hier aber relativ gering ist. Allerdings könnte durch die Einführung eines Pufferabstands zwischen den Partikeln eine Effizienzsteigerung möglich sein, da die Stufen (a) und (b) aus Abbildung 4.2 nicht mehr bei jeder Auswertung ausgeführt werden müssten. Anhand von Abbildung 4.2 wird auch der erhöhte Aufwand der Kontaktsuche bei konvexen Polygonen im Vergleich zu Kreisen sichtbar, da für diese die Kontaktsuche bereits bei (b) abgeschlossen ist.

Implementierung

Bei dem vorläufigen Update der Geschichtsvariablen und der Funktionsauswertung erfolgt die Kontaktsuche mit den vorläufigen generalisierten Partikelpositionen aus dem Prädiktor, siehe Abbildung A.2. Die Ermittlung der kinematischen Größen wird dann innerhalb der jeweiligen Kontaktmodelle vorgenommen.

Um das endgültige Update der Geschichtsvariablen durchzuführen, wird eine zweite Kontaktsuche in jedem Zeitschritt, nun mit den endgültigen Partikelpositionen aus dem Korrektor, erforderlich, siehe Abbildung A.3. Die Kontaktsuche erfolgt jeweils nach der Betrachtung der haftenden Verbindungen, so dass in Stufe (b) aus Abbildung 4.2 nur solche Partikelpaare in die Liste potentieller Kontaktpaare aufgenommen werden, die nicht (mehr) durch eine haftende Verbindung zusammenhängen.

4.2 Modelle für die Normalkraft

Im Folgenden wird in Abschnitt 4.2.1 zunächst eine Übersicht über die verschiedenen Modelle für die Normalkraft gegeben. Anschließend wird in Abschnitt 4.2.2 das weiterentwickelte elastische Kontaktmodell mit viskoser Dämpfung vorgestellt und in Abschnitt 4.2.3 einige seiner Eigenschaften diskutiert.

4.2.1 Übersicht

Die Eigenschaften häufig eingesetzter Normalkraftmodelle werden anhand der Merkmale aus Tabelle 3.5 vorgestellt:

• Modellursprung

Bereits in HERTZ (1882) wurde für den Kontakt elastischer Körper mit gekrümmten Oberflächen unter bestimmten Annahmen die analytische Lösung für die Normalkraft nach der Elastizitätstheorie vorgestellt, siehe auch JOHNSON (2003). Einige Modelle verwenden die analytische Lösung nach Hertz, während andere Modelle ohne eine solche Grundlage aufgestellt werden.

• Reichweite

Bei Kontakt entstehen auf die Teilchen Oberflächenlasten aus Nahwirkung. Daher ist die Reichweite der eingesetzten Modelle auf benachbarte Partikel beschränkt.

• Anzahl der Partikel

Die gängigen Normalkraftmodelle sind paarweise Modelle, d.h. die generalisierten Kräfte werden durch die Bewegung der beiden sich kontaktierenden Partikel festgelegt, ohne weitere Partikel zu berücksichtigen.

• Topologie des Interaktionsnetzwerks

In der Regel ist die Topologie des Kontaktnetzwerks nicht fix, so dass in der Kontaktsuche (siehe Abschnitt 4.1) ermittelt werden muss, welche Partikel im betrachteten Zustand in Kontakt sind.

• Kinematische Beschreibung

Die Modelle bilden aus den generalisierten Positionen und Geschwindigkeiten der sich kontaktierenden diskreten Elemente kinematische Größen. Aus diesen kinematischen Größen werden über ein Konstitutivgesetz dann die dynamischen Größen, letztlich die Kräfte und Momente auf die Freiheitsgrade der beiden Partikel, ermittelt. Hierzu werden in der Regel die Normalenrichtung \mathbf{n} und die Punkte, an denen die Kräfte angreifen, festgelegt, vergleiche Abbildung 4.1. Als kinematische Maße für die Überschneidung der Partikel können die Überschneidungstiefe in Normalenrichtung u_n , die Überschneidungsbreite B_n , die Überschneidungsfläche A_n und das Überschneidungsvolumen V_n eingesetzt werden. Zusätzlich wird die Relativgeschwindigkeit in Normalenrichtung v_n verwendet. Bei der Bestimmung der kinematischen Größen ist zu beachten, dass endliche Verschiebungen und Verdrehungen der diskreten Elemente auftreten können.

• Konstitutive Beschreibung

Das Konstitutivgesetz bildet den Zusammenhang zwischen den kinematischen und den dynamischen Größen. Meist werden relativ einfache rheologische Modelle eingesetzt. Die repulsive Kraft zwischen den Partikeln wird oftmals durch ein lineares oder nichtlineares elastisches Modell abgebildet. Außerdem kommen Modelle mit unterschiedlicher Steifigkeit bei Be- und Entlastung zum Einsatz. Diese Modelle werden häufig mit viskosen Modellen zur Abbildung von Dämpfung kombiniert.

• Geometrische Form der Partikel

Aufgrund unterschiedlicher kinematischer Maße zur Beschreibung der Überschneidung unterscheiden sich die Modelle für verschiedene geometrische Formen teilweise. Der Übergang zwischen einem dreidimensionalen Modell und dem entsprechenden zweidimensionalen Modell ist oftmals mit relativ geringen Modifikationen durchführbar.

Einen Überblick über die verschiedenen Normalkraftmodelle für die unterschiedlichen Partikelformen findet man beispielsweise in Pöschel und Schwager (2005) und Feng und Owen (2008). Die am häufigsten verwendeten geometrischen Formen sind Kreise (2D) bzw. Kugeln (3D), für die es auch die meisten unterschiedlichen Normalkraftmodelle gibt. Das einfachste Modell für die repulsive Kraft, das bereits in Cundall und Strack (1979) verwendet wird, bildet einen linear-elastischen Zusammenhang zwischen der Normalkraft und der Überschneidungstiefe. Ebenfalls weit verbreitet ist das nichtlinear-elastische Hertz'sche Modell, das die analytische Lösung aus Hertz (1882) verwendet. Eine Übersicht über die Vielzahl der Modelle für Kreise und Kugeln gibt es z. B. in Schäfer (1996), Schäfer u. A. (1996), Luding (1998), Stevens und Hrennya (2005) und Kruggel-Emden (2008). Da die Kraft in der Verbindungslinie der Massenmittelpunkte wirkt, entstehen hier keine Momente auf die Partikel. Bei Ellipsen (2D) bzw. Ellipsoiden (3D) sowie Superellipsen (2D) bzw. Superellipsoiden (3D) hingegen kann die Kontaktkraft ein Moment um den Massenmittelpunkt erzeugen. Modelle für Superellipsoide werden z. B. in Wriggers und Wellmann (2008) vorgestellt.

Bei Polygonen (2D) bzw. Polyedern (3D) werden verschiedene Überschneidungsmaße zur Ermittlung der elastischen, repulsiven Kraft eingesetzt. Ein Modell, das für Polygone die Überschneidungstiefe in Normalenrichtung einsetzt, wird in Walton (1982) beschrieben. Modelle mit einer Kraft proportional zur Überschneidungsfläche für Polygone werden in Potapov u. A. (1995) und Tillemans und Herrmann (1995) vorgestellt. Modelle mit einem elastischen Potential für die repulsive Kraft als Funktion der Überschneidungsfläche werden für Dreiecke in Pöschel und Schwager (2005) und für konvexe Polygone in Feng und Owen (2004) dargestellt. Eine Auflistung weiterer Modelle findet man beispielsweise in Tillemans und Herrmann (1995).

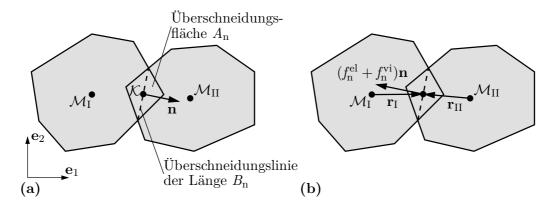


Abbildung 4.4: Kontaktmodell für die Normalkraft: (a) Kinematische Größen und (b) Kraft auf Partikel I.

4.2.2 Elastisches Kontaktmodell mit viskoser Dämpfung

In dieser Arbeit wird das elastische Modell für die repulsive Normalkraft des Kontakts konvexer Polygone nach FENG UND OWEN (2004) eingesetzt und um ein neuentwickeltes viskoses Modell erweitert. Hierzu wird ein einzelner Kontakt zwischen Partikel I und Partikel II betrachtet, wobei I und II für die Partikelnummern der jeweiligen diskreten Elemente stehen, siehe Abbildung 4.4.

Elastisches Modell

Nach Feng und Owen (2004) kann die freie Energie Φ_n^{el} des elastischen Kontakts in Normalenrichtung als monoton steigende Funktion der Überschneidungsfläche A_n definiert werden. In dieser Arbeit wird die quadratische Potenzfunktion

$$\Phi_{\rm n}^{\rm el}(A_{\rm n}) = \frac{1}{2} k_{\rm n} A_{\rm n}^2 T \tag{4.2}$$

mit dem Strafparameter k_n und der Partikeldicke T verwendet. Die generalisierte elastische Normalkraft $\mathbf{f}_{n,I}^{g,el}$ auf das Partikel I ist als negative Ableitung nach dessen generalisierter Position \mathbf{x}_I^g festgelegt:

$$\mathbf{f}_{\mathrm{n,I}}^{\mathrm{g,el}} = -\frac{\partial \Phi_{\mathrm{n}}^{\mathrm{el}}}{\partial \mathbf{x}_{\mathrm{I}}^{\mathrm{g}}} = \underbrace{-k_{\mathrm{n}} A_{\mathrm{n}} B_{\mathrm{n}} T}_{f_{\mathrm{n}}^{\mathrm{el}}} \begin{bmatrix} n_{1} \\ n_{2} \\ r_{1,\mathrm{I}} n_{2} - r_{2,\mathrm{I}} n_{1} \end{bmatrix}. \tag{4.3}$$

Darin beschreibt die Breite B_n die Länge der Überschneidungslinie und die Kontaktnormale $\mathbf{n} = [n_1 \ n_2]^T$ die Normale auf die Überschneidungslinie, siehe Abbildung 4.4 (a). Zur Herleitung der Gleichung (4.3) wird auf FENG UND OWEN (2004) verwiesen. Die

so definierte Kraft der Größe $f_n^{\rm el} \leq 0$ greift am Kontaktpunkt \mathcal{K} , dem Mittelpunkt der Überschneidungslinie, an und erzeugt mit dem Hebelarm $\mathbf{r}_{\rm I} = [r_{1,\rm I} \ r_{2,\rm I}]^{\rm T}$ vom Massenmittelpunkt $\mathcal{M}_{\rm I}$ zum Kontaktpunkt \mathcal{K} ein Moment um den Massenmittelpunkt, siehe Abbildung 4.4 (b). Das Paar aus Kraft und Moment ist in der generalisierten Kraft $\mathbf{f}_{\rm n,\rm I}^{\rm g,el}$ zusammengefasst. Der Strafparameter des Kontakts

$$k_{\rm n} = \frac{2k_{\rm n,I}k_{\rm n,II}}{k_{\rm n,I} + k_{\rm n,II}} \tag{4.4}$$

wird aus den Parametern $k_{n,I}$ und $k_{n,II}$ berechnet, die den beiden Partikeln zugeordnet sind. Diese Reihenschaltung ist mit dem Faktor Zwei multipliziert, um bei identischen Parametern $k_{n,I} = k_{n,II}$ deren Wert auch als resultierenden Strafparameter k_n zu erhalten, vergleiche PÖSCHEL UND SCHWAGER (2005).

Durchdringen sich zwei diskrete Elemente, d. h. ein Partikel tritt auf der "Rückseite" des Kontaktpartners wieder aus, so kann das Modell mit Erweiterungen ebenfalls angewandt werden, siehe Feng und Owen (2004). Diese Erweiterungen wurden im Rahmen der vorliegenden Arbeit allerdings nicht implementiert. Bei der seltenen Durchdringung wird hier die Überschneidungslinie nach Tillemans und Herrmann (1995) als maximaler Abstand zweier Schnittpunkte der Partikeloberflächen definiert und damit wie bisher verfahren.

Viskoses Modell

Um Energiedissipation durch Dämpfung abzubilden, wird das elastische Modell um ein viskoses Modell ergänzt:

$$\mathbf{f}_{n,I}^{g,vi} = \underbrace{\gamma_n A_n B_n v_n T}_{f_n^{vi}} \begin{bmatrix} n_1 \\ n_2 \\ r_{1,I} n_2 - r_{2,I} n_1 \end{bmatrix}. \tag{4.5}$$

Die viskose Kraft ist proportional zur Relativgeschwindigkeit der beiden Partikel am Kontaktpunkt in die Normalenrichtung

$$v_{\rm n} = \mathbf{v}_{\rm rel} \cdot \mathbf{n} \tag{4.6}$$

mit

$$\mathbf{v}_{\text{rel}} = \begin{bmatrix} \dot{x}_{1,\text{II}} \\ \dot{x}_{2,\text{II}} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \dot{x}_{1,\text{I}} \\ \dot{x}_{2,\text{I}} \end{bmatrix} - \dot{\phi}_{\text{I}} \begin{bmatrix} -r_{2,\text{I}} \\ r_{1,\text{I}} \end{bmatrix} + \dot{\phi}_{\text{II}} \begin{bmatrix} -r_{2,\text{II}} \\ r_{1,\text{II}} \end{bmatrix}. \tag{4.7}$$

Die Kraft der Größe f_n^{vi} greift ebenfalls am Kontaktpunkt \mathcal{K} an und wirkt in die Normalenrichtung \mathbf{n} , siehe Abbildung 4.4(b). Die Multiplikation des klassischen, linearviskosen Modells mit den kinematischen Größen A_n und B_n passt das neuentwickelte viskose Modell an das elastische Modell (4.3) an. Der viskose Parameter

$$\gamma_{\rm n} = \frac{\gamma_{\rm n,I} + \gamma_{\rm n,II}}{2} \tag{4.8}$$

wird als arithmetisches Mittel der Parameter $\gamma_{n,I}$ und $\gamma_{n,II}$ ermittelt, die den beiden Partikeln zugeordnet sind, siehe PÖSCHEL UND SCHWAGER (2005). Dadurch wird Energie dissipiert, sobald einer der beiden Parameter ungleich null ist.

"Tension Cutoff"

Da die Summe aus elastischer und viskoser Kraft Zugkräfte am Kontaktpunkt ergeben könnte, wird die Normalkraft beim Auftreten von Zugkräften abgeschnitten ("tension cutoff"), d. h. nach oben durch null begrenzt (PÖSCHEL UND SCHWAGER 2005). Damit erhält man die generalisierte Normalkraft

$$\mathbf{f}_{n,I}^{g} = \begin{cases} \mathbf{f}_{n,I}^{g,el} + \mathbf{f}_{n,I}^{g,vi} & \text{für } f_{n}^{el} + f_{n}^{vi} \leq 0\\ \mathbf{0} & \text{für } f_{n}^{el} + f_{n}^{vi} > 0. \end{cases}$$
(4.9)

Die Kraft auf das Partikel II besitzt den gleichen Betrag, aber die entgegengesetzte Richtung der Kraft auf Partikel I. Mit dem Hebelarm \mathbf{r}_{II} , siehe Abbildung 4.4 (b), errechnet sich daraus das Moment auf Partikel II. Die generalisierten Kräfte $\mathbf{f}_{n,\text{II}}^g$ und $\mathbf{f}_{n,\text{II}}^g$ aus dem betrachteten Kontakt werden dann zu den generalisierten Kräften auf die beiden Partikel aus Kontakt addiert.

Implementierung

Die Ermittlung der generalisierten Normalkräfte $\mathbf{f}_{n,I}^g$ und $\mathbf{f}_{n,II}^g$ erfolgt in der Schleife über alle potentiellen Kontaktpaare aus der Kontaktsuche, siehe Abbildung A.2. Wird Kontakt festgestellt, so werden aus den generalisierten Partikelpositionen und -geschwindigkeiten des Prädiktors die kinematischen Größen und daraus die generalisierten Normalkräfte ermittelt.

4.2.3 Eigenschaften

Das elastische Kontaktmodell aus Abschnitt 4.2.2 bildet eine repulsive Kraft proportional zur Überschneidungsfläche A_n und der Überschneidungsbreite B_n zwischen den

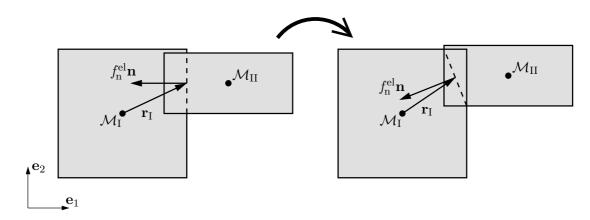


Abbildung 4.5: Kontaktmodell für die Normalkraft: Sprung der Kraft bei der Bewegung einer Partikelkante über eine parallele Kante des Kontaktpartners.

Partikeln ab. Mit der Definition der freien Energie Φ_n^{el} nach Gleichung (4.2) ist das elastische Modell energieerhaltend. Die elastische generalisierte Kraft $\mathbf{f}_{n,I}^{g,el}$ in Gleichung (4.3) ist dabei eine im Allgemeinen nichtlineare Funktion der generalisierten Partikelpositionen \mathbf{x}_I^g und \mathbf{x}_{II}^g der beiden sich kontaktierenden diskreten Elemente. Da die Überschneidungsfläche bei Kontaktbeginn von null ansteigt und bei Kontaktende auch wieder auf null abfällt, entstehen dabei keine Sprünge in Kraft und Moment.

Allerdings kann die generalisierte elastische Normalkraft in (seltenen) Situationen eine Diskontinuität besitzen, wie beispielhaft in Abbildung 4.5 dargestellt. Hier bewegt sich eine Partikelkante über eine parallele Kante des Kontaktpartners, wodurch die Kontaktlinie einen Sprung aufweist. Dadurch haben die Normalenrichtung \mathbf{n} , die Überschneidungsbreite $B_{\rm n}$ und der Hebelarm $\mathbf{r}_{\rm I}$ vom Massenmittelpunkt $\mathcal{M}_{\rm I}$ zum Kontaktpunkt \mathcal{K} eine Diskontinuität. Daher springt die Kraft in Richtung und Betrag sowie auch das Moment.

Da das elastische Modell eine Strafterm-Methode zur Umsetzung der Nebenbedingung der Undurchdringbarkeit von Körpern darstellt (vergleiche auch BIĆANIĆ 2006), sollte die Überschneidungsfläche A_n zweier diskreter Elemente "gering" im Bezug auf die Größe der Partikel bleiben. In den Simulationen wird daher überprüft, wie groß die maximale Überschneidungsfläche zweier diskreter Elemente wird. In der Regel führt die Erhöhung des Strafparameters k_n zu geringeren Überschneidungsflächen, aber die Lösung der resultierenden Gleichungen wird aufwendiger, da die Gleichungen steifer werden.

Mit dem viskosen Kontaktmodell aus Abschnitt 4.2.2 kann Energiedissipation während des Kontakts abgebildet werden. Bei der Erweiterung eines klassischen viskosen Modells ("Kraft als lineare Funktion der Geschwindigkeit") durch Multiplikation mit A_n und B_n entstehen bei Kontaktbeginn und -ende keine Sprünge in der generalisierten viskosen Normalkraft $\mathbf{f}_{n,I}^{g,vi}$ in Gleichung (4.5). Dadurch bleibt auch die generalisierte Normalkraft

 $\mathbf{f}_{n,I}^g$ im kombinierten Modell mit "tension cutoff" nach Gleichung (4.9) ohne Sprung bei Kontaktbeginn und -ende.

4.3 Modelle für die Tangentialkraft

Im Folgenden wird zunächst in Abschnitt 4.3.1 eine Übersicht über die verschiedenen Modelle für die Tangentialkraft gegeben. Anschließend wird in Abschnitt 4.3.2 das eingesetzte, elasto-plastische Kontaktmodell beschrieben und in Abschnitt 4.3.3 einige seiner Eigenschaften besprochen.

4.3.1 Übersicht

Die Eigenschaften häufig eingesetzter Modelle für die Tangentialkraft werden anhand der Merkmale aus Tabelle 3.5 dargestellt:

• Modellursprung

Aufbauend auf MINDLIN (1949) wurde in MINDLIN UND DERESIEWICZ (1953) für den Kontakt elastischer Kugeln eine analytische Lösung für die Tangentialkraft unter Berücksichtigung von Haft- und Gleitreibung vorgestellt. Einige der komplexeren Modelle basieren hierauf, während andere, meist einfachere Modelle, ohne eine solche Grundlage aufgestellt werden.

• Reichweite

(siehe Abschnitt 4.2.1)

• Anzahl der Partikel

Wie die Normalkraftmodelle aus Abschnitt 4.2.1 sind auch die Tangentialkraftmodelle paarweise Modelle.

• Topologie des Interaktionsnetzwerks

(siehe Abschnitt 4.2.1)

• Kinematische Beschreibung

Die Tangentialrichtungen \mathbf{t} (2D) bzw. \mathbf{t}_1 und \mathbf{t}_2 (3D) werden meist durch die Normalenrichtung \mathbf{n} des Normalkraftmodells bestimmt, auf der sie senkrecht stehen, siehe Abbildung 4.1. Die Tangentialkräfte können entweder vereinfacht an den Oberflächen der Partikel oder an den gleichen Punkten wie die Normalkräfte angreifen. Als weitere kinematischen Maße werden die tangentiale Relativgeschwindigkeit v_t (2D) bzw. \mathbf{v}_t (3D) der zwei Partikel sowie die tangentiale Re-

lativverschiebung u_t (2D) bzw. \mathbf{u}_t (3D), die von der Kontaktgeschichte abhängt, eingesetzt.

• Konstitutive Beschreibung

Als Konstitutivgesetze werden sowohl elastische als auch viskose Modelle sowie Kombinationen aus den beiden eingesetzt. Meist wird die Kraft durch die Coulomb'sche Reibungskraft begrenzt, wodurch das Tangentialkraftmodell vom Normalkraftmodell abhängig ist.

• Geometrische Form der Partikel

Die meisten Modelle können ohne oder mit nur geringen Modifikationen für unterschiedliche geometrische Formen verwendet werden, da die eingesetzten kinematischen Maße für verschiedene Formen oft in identischer oder sehr ähnlicher Weise ermittelt werden können. Der Übergang zwischen einem dreidimensionalen Modell und dem entsprechenden zweidimensionalen Modell ist meist mit der Reduzierung der Tangentialebene auf eine Tangentialrichtung und weiteren, relativ geringen Änderungen durchführbar.

Einen Überblick über die Vielzahl verschiedener Tangentialkraftmodelle findet man z. B. in Schäfer (1996), Schäfer u. A. (1996), Pöschel und Schwager (2005) und Kruggel-Emden (2008). Die einfachsten Modelle bringen auf die Partikel entweder eine Reibungskraft (Schäfer und Wolf 1995) oder eine viskose Dämpfungskraft proportional zur tangentialen Geschwindigkeit (GALLAS U. A. 1992) auf. Die Kraft wirkt entgegen der tangentialen Relativgeschwindigkeit. Eine Kombination der beiden Modelle als Minimum aus Reibungskraft und viskoser Kraft wird in THOMPSON UND GREST (1991) und in Tillemans und Herrmann (1995) vorgestellt. Ein elastisches Modell mit Begrenzung durch die Reibungskraft wird bereits in CUNDALL UND STRACK (1979) eingeführt. Gleichartige spätere Modelle wie in Brendel und Dippel (1998) unterscheiden sich zum Teil in der Bestimmung der (elastischen) tangentialen Relativverschiebung, vergleiche die Diskussion in Kruggel-Emden (2008). Modelle zur Abbildung der Reibung, die auf der Lösung in MINDLIN UND DERESIEWICZ (1953) basieren, werden beispielsweise in Walton und Braun (1986), Thornton und Randall (1988), Is-SA UND NELSON (1992), TSUJI U. A. (1992) und DI RENZO UND DI MAIO (2005) dargestellt. Das Modell in Wriggers und Wellmann (2008) baut auf der Lösung in MINDLIN (1949) auf. Modelle, die nach einer festgelegten Relativverschiebung die Tangentialkraft immer wieder zu null setzen, sind in KOHRING U. A. (1995) und BRIL-LIANTOV U. A. (1996) beschrieben.

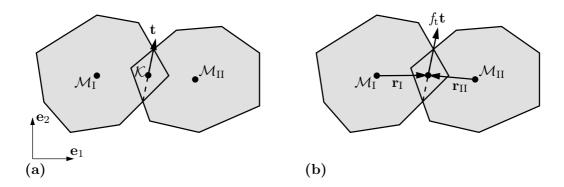


Abbildung 4.6: Kontaktmodell für die Tangentialkraft: (a) Kinematische Größen und (b) Kraft auf Partikel I.

4.3.2 Elasto-plastisches Kontaktmodell

In der vorliegenden Arbeit wird die Kontaktkraft in tangentiale Richtung als Funktion der tangentialen Relativverschiebung beschrieben und durch die Reibungskraft begrenzt, wie bereits in Cundall und Strack (1979) in inkrementeller Form vorgestellt. In kontinuierlicher Form kann das Modell als eindimensionales, elasto-plastisches Modell mit der Reibungskraft zur Definition der Fließfläche dargestellt werden, siehe z. B. Dettmar (2006). Im Folgenden wird wieder ein einzelner Kontakt zwischen Partikel I und Partikel II betrachtet, siehe Abbildung 4.6.

Sind die Partikel in Kontakt, so wird die tangentiale Relativverschiebung

$$u_{t}(t) = \int_{t_{kh}}^{t} v_{t}(\tau) d\tau \tag{4.10}$$

als Integral der tangentialen Relativgeschwindigkeit am Kontaktpunkt

$$v_{\rm t} = \mathbf{v}_{\rm rel} \cdot \mathbf{t} \tag{4.11}$$

vom letzten Kontaktbeginn $t_{\rm kb}$ der beiden Partikel bis zum aktuellen Zeitpunkt t bestimmt. Der Kontaktpunkt \mathcal{K} sowie die Tangentialrichtung \mathbf{t} senkrecht auf der Normalenrichtung \mathbf{n} werden durch das Normalkraftmodell aus Abschnitt 4.2.2 festgelegt. Da die tangentiale Relativverschiebung von der Bewegungsgeschichte der beiden Partikel bis zum aktuellen Zeitpunkt abhängt, bildet $u_{\rm t}$ eine Geschichtsvariable, die in (3.9) eingeht. Bei jedem Beginn eines Kontakts gilt die Anfangsbedingung $u_{\rm t}(t_{\rm kb})=0$.

Elasto-plastisches Modell

Nachfolgend wird der elasto-plastische Zusammenhang zwischen der tangentialen Relativverschiebung u_t und der Tangentialkraft f_t bei sich kontaktierenden Partikeln vorgestellt. Eine ausführliche Darstellung elasto-plastischer Modelle findet man beispielsweise in SIMO UND HUGHES (1998) und JIRÁSEK (2007).

Zuerst wird die Verschiebung

$$u_{\rm t} = u_{\rm t}^{\rm el} + u_{\rm t}^{\rm pl}$$
 (4.12)

additiv in einen elastischen Anteil $u_{\rm t}^{\rm el}$ und einen plastischen Anteil $u_{\rm t}^{\rm pl}$ aufgeteilt. Die plastische tangentiale Relativverschiebung $u_{\rm t}^{\rm pl}$ bildet eine weitere Geschichtsvariable in (3.9), für die bei jedem Beginn eines Kontakts die Anfangsbedingung $u_{\rm t}^{\rm pl}(t_{\rm kb}) = 0$ gilt.

Die freie Energie des Kontakts in Tangentialrichtung wird nun mit

$$\Phi_{t}\left(u_{t}, u_{t}^{\text{pl}}\right) = \frac{1}{2}k_{t}\left(u_{t} - u_{t}^{\text{pl}}\right)^{2}T\tag{4.13}$$

festgelegt. Die Ableitung nach der elastischen Verschiebung liefert die Tangentialkraft

$$f_{t} = \frac{\partial \Phi_{t}}{\partial u_{t}^{\text{el}}} = k_{t} \left(u_{t} - u_{t}^{\text{pl}} \right) T. \tag{4.14}$$

Die Steifigkeit des Kontakts

$$k_{\rm t} = \frac{2k_{\rm t,I}k_{\rm t,II}}{k_{\rm t,I} + k_{\rm t,II}} \tag{4.15}$$

wird analog zum Strafparameter (4.4) des Normalkraftmodells als Kombination der Parameter $k_{t,I}$ und $k_{t,II}$ berechnet, die den beiden Partikeln zugeordnet sind.

Die kraftbasierte Fließfunktion

$$\mathcal{F}_{t}\left(f_{t}, f_{n}^{\text{el}}\right) = |f_{t}| - \mu_{t}|f_{n}^{\text{el}}| \le 0 \tag{4.16}$$

vergleicht den Betrag der Tangentialkraft mit der Reibungskraft. Sie legt den elastischen Bereich mit der Fließfläche als Rand fest, wie in Abbildung 4.7 (a) gezeigt. Die Reibungskraft ermittelt sich aus dem Reibungskoeffizient

$$\mu_{\rm t} = \frac{2\mu_{\rm t,I}\mu_{\rm t,II}}{\mu_{\rm t,I} + \mu_{\rm t,II}} \tag{4.17}$$

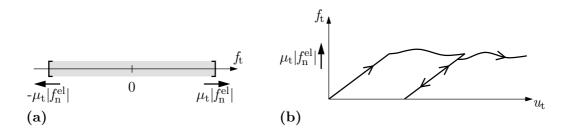


Abbildung 4.7: Kontaktmodell für die Tangentialkraft: (a) Fließfläche und (b) Kraft-Verschiebungsdiagramm.

mit den Parametern $\mu_{t,I}$ und $\mu_{t,II}$ der beiden Partikel und dem Betrag der elastischen Normalkraft f_n^{el} aus Gleichung (4.3). Da die elastische Normalkraft im Allgemeinen nicht konstant ist, variiert die Fließfläche.

Die Fließregel

$$\dot{u}_{t}^{pl} = \dot{\lambda}_{t} \frac{\partial \mathcal{F}_{t}}{\partial f_{t}} = \dot{\lambda}_{t} \operatorname{sgn}(f_{t})$$
(4.18)

definiert die Evolution der plastischen Verschiebung. Der plastische Multiplikator λ_t bestimmt die Fließgeschwindigkeit und die Normalenrichtung $\partial \mathcal{F}_t/\partial f_t$ auf die Fließfläche die Fließrichtung.

Komplettiert wird das elasto-plastische Modell durch die Be- und Entlastungsbedingungen in Kuhn-Tucker-Form

$$\mathcal{F}_{t} \le 0$$
 $\dot{\lambda}_{t} \mathcal{F}_{t} = 0$ (4.19)

sowie die Konsistenzbedingung

$$\dot{\lambda}_{t}\dot{\mathcal{F}}_{t} = 0. \tag{4.20}$$

In Abbildung 4.7 (b) wird ein möglicher Kraft-Verschiebungsverlauf für eine nichtkonstante elastische Normalkraft gezeigt.

Die Kraft f_t wird nun am Kontaktpunkt \mathcal{K} in die Tangentialrichtung $\mathbf{t} = [t_1 \ t_2]^T$ auf das Partikel I aufgebracht, siehe Abbildung 4.6 (b). Durch den Hebelarm $\mathbf{r}_I = [r_{1,I} \ r_{2,I}]^T$ erzeugt sie ein Moment um den Massenmittelpunkt \mathcal{M}_I . Die Kraft und das Moment werden dann in der generalisierten Tangentialkraft

$$\mathbf{f}_{t,I}^{g} = f_{t} \begin{bmatrix} t_{1} \\ t_{2} \\ r_{1,I}t_{2} - r_{2,I}t_{1} \end{bmatrix}$$
(4.21)

zusammengefasst. Die Kraft auf das Partikel II besitzt den gleichen Betrag, aber die entgegengesetzte Richtung der Kraft auf das Partikel I. Mit dem Hebelarm \mathbf{r}_{II} errechnet sich daraus das Moment auf das Partikel II. Die generalisierten Kräfte $\mathbf{f}_{t,\text{I}}^g$ und $\mathbf{f}_{t,\text{II}}^g$ aus dem betrachteten Kontakt werden dann zu den generalisierten Kräften auf die beiden Partikel aus Kontakt addiert.

Verwendetes Verfahren zur Ermittlung der Tangentialverschiebung

In einem Zeitschritt von t_{l-1} nach t_l wird nun zunächst die tangentiale Relativverschiebung (4.10) ermittelt. Hierzu wird das Trapez-Verfahren eingesetzt, siehe z. B. ASCHER UND PETZOLD (1998) und DEUFLHARD UND BORNEMANN (2008), wodurch die Evolution der Verschiebung mit

$$u_{t,l} = u_{t,l-1} + \Delta t_l \frac{v_{t,l-1} + v_{t,l}}{2}$$
(4.22)

berechnet wird. Die Geschichtsvariable $u_{t,l-1}$ und die Geschwindigkeit $v_{t,l-1}$ zum vorherigen Zeitpunkt sind bekannt.² Die Geschwindigkeit $v_{t,l}$ zum aktuellen Zeitpunkt ist bei der gestaffelten Lösung ebenfalls bekannt (siehe Abschnitt 3.3.1), so dass (4.22) in expliziter Form ausgewertet werden kann.

Verwendetes Verfahren zur Lösung der elasto-plastischen Gleichungen

Mit der ermittelten Verschiebung $u_{t,l}$ wird nun das beschränkte Evolutionsproblem der Elasto-Plastizität aus (4.14), (4.16), (4.18), (4.19) und (4.20) gelöst. Hierzu wird das implizite Euler-Verfahren eingesetzt, siehe z.B. ASCHER UND PETZOLD (1998) und DEUFLHARD UND BORNEMANN (2008), das als klassischer "return-mapping"-Algorithmus implementiert wird, siehe z.B. SIMO UND HUGHES (1998) und RAMM U.A. (2004).

Hierzu wird zuerst ein "trial"-Schritt durchgeführt. Dieser wird als ein rein elastischer Schritt angenommen, d. h. die plastische Verschiebung bleibt unverändert:

$$f_{t,l}^{tr} = k_t \left(u_{t,l} - u_{t,l-1}^{pl} \right) T$$

$$\mathcal{F}_{t,l}^{tr} = |f_{t,l}^{tr}| - \mu_t |f_{n,l}^{el}|.$$
(4.23)

Darin sind die Geschichtsvariable $u_{t,l-1}^{\rm pl}$ zum vorherigen Zeitpunkt und die Verschiebung $u_{t,l}$ zum aktuellen Zeitpunkt bekannt.³ Die Normalkraft $f_{{\rm n},l}^{\rm el}$ wird jeweils vor der Tangentialkraft ermittelt.

 $[\]overline{{}^2\text{Ist}\ t_l\ \text{der}\ \text{erste}\ \text{Zeitpunkt}\ \text{nach}\ \text{dem}\ \text{Kontaktbeginn,}\ \text{gilt}\ u_{\text{t},l-1}=v_{\text{t},l-1}=0.$

 $^{^3}$ Ist t_l der erste Zeitpunkt nach dem Kontaktbeginn, gilt $u_{\mathrm{t},l-1}^{\mathrm{pl}}=0.$

Anschließend wird überprüft, ob der "trial"-Zustand zulässig ist ($\mathcal{F}_{t,l}^{tr} \leq 0$), so dass der Schritt tatsächlich elastisch ist, oder ob Fließen auftritt ($\mathcal{F}_{t,l}^{tr} > 0$), so dass die plastische Verschiebung aktualisiert und die Kraft auf die Fließfläche zurückprojiziert wird:

$$\Delta \lambda_{t,l} = \begin{cases}
0 & \text{für } \mathcal{F}_{t,l}^{\text{tr}} \leq 0 \\
\frac{\mathcal{F}_{t,l}^{\text{tr}}}{k_{t} T} & \text{für } \mathcal{F}_{t,l}^{\text{tr}} > 0
\end{cases}$$

$$u_{t,l}^{\text{pl}} = \begin{cases}
u_{t,l-1}^{\text{pl}} & \text{für } \mathcal{F}_{t,l}^{\text{tr}} \leq 0 \\
u_{t,l-1}^{\text{pl}} + \Delta \lambda_{t,l} \text{sgn} \left(f_{t,l}^{\text{tr}} \right) & \text{für } \mathcal{F}_{t,l}^{\text{tr}} > 0
\end{cases}$$

$$f_{t,l} = \begin{cases}
f_{t,l}^{\text{tr}} & \text{für } \mathcal{F}_{t,l}^{\text{tr}} \leq 0 \\
f_{t,l}^{\text{tr}} - \Delta \lambda_{t,l} k_{t} T \text{sgn} \left(f_{t,l}^{\text{tr}} \right) & \text{für } \mathcal{F}_{t,l}^{\text{tr}} > 0.
\end{cases}$$

$$(4.24)$$

Dies ist hier in expliziter Form möglich, so dass die Kombination aus (4.23) und (4.24) ein explizites Verfahren ergibt.

Implementierung

Das vorläufige Update der Geschichtsvariablen u_t und $u_t^{\rm pl}$ sowie die Ermittlung der generalisierten Tangentialkräfte $\mathbf{f}_{t,\rm I}^{\rm g}$ und $\mathbf{f}_{t,\rm II}^{\rm g}$ erfolgt in der Schleife über alle potentiellen Kontaktpaare aus der Kontaktsuche nach der Ermittlung der Normalkräfte, siehe Abbildung A.2. Für jedes Kontaktpaar wird dabei mit den generalisierten Positionen und Geschwindigkeiten des Prädiktors zuerst das Update der tangentialen Relativverschiebung durchgeführt, wobei zusätzlich die tangentiale Relativgeschwindigkeit zum vorherigen Zeitpunkt benötigt wird. Anschließend wird damit das Update der plastischen Verschiebung ausgeführt. Mit diesen temporären Geschichtsvariablen werden die generalisierten Tangentialkräfte berechnet.

Das endgültige Update der Geschichtsvariablen erfolgt ebenfalls in der Schleife über alle potentiellen Kontaktpaare, siehe Abbildung A.3. Dabei wird nun mit den endgültigen generalisierten Positionen und Geschwindigkeiten wieder für jedes Kontaktpaar zuerst das Update der tangentialen Relativverschiebung und damit dann das der plastischen Verschiebung durchgeführt.

4.3.3 Eigenschaften

Das elasto-plastische Kontaktmodell aus Abschnitt 4.3.2 kann Haften und Gleiten in tangentialer Richtung abbilden. Die Tangentialkraft f_t aus Gleichung (4.14) steigt bei Kontaktbeginn von null an. In Kombination mit dem Kontaktmodell für die Normalkraft

aus Abschnitt 4.2.2 fällt die tangentiale Kraft aufgrund der Kopplung mit $f_n^{\rm el}$ durch die Fließfunktion (4.16) bei Kontaktende stets ebenfalls auf null ab.

Allerdings kann bei einer Diskontinuität in der generalisierten Normalkraft wie bei der in Abbildung 4.5 dargestellten Situation auch ein Sprung in der generalisierten Tangentialkraft $\mathbf{f}_{t,I}^{g}$ aus Gleichung (4.21) auftreten. In der Abbildung springen die Normale \mathbf{n} und damit die Tangente \mathbf{t} sowie der Hebelarm \mathbf{r}_{I} . Zusätzlich kann dabei f_{t} aufgrund der Kopplung mit der hier diskontinuierlichen elastischen Normalkraft f_{n}^{el} einen Sprung aufweisen.

Ähnlich dem elastischen Normalkraftmodell aus Abschnitt 4.2.2 kann das elastische Modell in tangentialer Richtung als Methode zur Regularisierung, hier der Reibungsnebenbedingung statt der Nebenbedingung der Undurchdringbarkeit, angesehen werden, vergleiche Bićanić (2006). Die elastische tangentiale Relativverschiebung $u_{\rm t}^{\rm el}$ aus Gleichung (4.12) sollte während der Simulationen "gering" im Vergleich zur Größe der diskreten Elemente bleiben. Bei den Anwendungen wird jeweils der maximale Betrag ermittelt, der in der Simulation auftreten konnte.

Das vorgestellte elasto-plastische Modell kann den Übergang zwischen Gleiten und Haften sowie die Umkehr der tangentialen Bewegungsrichtung am Kontaktpunkt auch nach längerem Gleiten und für variierende elastische Normalkraft abbilden. Hierzu sei an dieser Stelle auf die Thematik der Ermittlung der elastischen Tangentialverschiebung während des Gleitens bei verschiedenen Tangentialkraftmodellen verwiesen, siehe z. B. die Diskussion in KRUGGEL-EMDEN (2008).

4.4 Modelle für die Kraft zwischen Partikel und ebenem Untergrund

Ein Kontakt zwischen einem Partikel und einer festgehaltenen Untergrundplatte, die als ein "großes Partikel" dargestellt werden kann, kann bei dreidimensionalen Modellen als Standardkontakt mit den Kontaktmodellen für die Normal- und Tangentialkraft beschrieben werden. Aufgrund der ebenen Betrachtungsweise in dieser Arbeit wird die Kraft zwischen einem ebenen Partikel und einem ebenen Untergrund, wie in Abbildung 4.8 gezeigt, jedoch mit einem eigenen Modell abgebildet. Dabei werden die Kraft in der e_1 - e_2 -Ebene und das Moment um die e_3 -Achse modelliert, die aus der tangentialen Schubspannung entstehen und auf das Partikel wirken. Alle weiteren Komponenten der Kraft und des Moments werden vernachlässigt.

Im Folgenden wird zunächst in Abschnitt 4.4.1 eine kurze Übersicht über die verschiedenen Modelle für die Kraft zwischen Partikel und ebenem Untergrund gegeben. An-

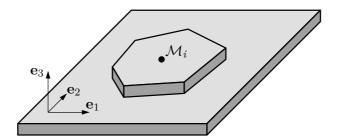


Abbildung 4.8: Kontakt zwischen einem ebenen Partikel und einem ebenen Untergrund.

schließend wird in Abschnitt 4.4.2 das neuentwickelte elasto-plastische Kontaktmodell vorgestellt und in Abschnitt 4.4.3 einige seiner Eigenschaften diskutiert.

4.4.1 Übersicht

Die Modellierung des Kontakts zwischen Partikel und ebenem Untergrund erfolgt durch einfache elastische und viskose Modelle, wobei die Reibungskraft bzw. -spannung als Begrenzung eingesetzt werden kann. Der Kontakt wird zwischen einem einzelnen Partikel und dem Untergrund modelliert und bleibt fix, so dass hier keine Kontaktsuche nötig ist.

Bereits in Cundall und Strack (1979) wird bei kreisförmigen diskreten Elementen eine viskose Dämpfungskraft auf die Translationsfreiheitsgrade sowie ein Dämpfungsmoment auf den Rotationsfreiheitsgrad modelliert. Kraft bzw. Moment sind lineare Funktionen der Translations- bzw. Drehgeschwindigkeit und wirken ihr entgegen. Dies kann nach Cundall und Strack (1979) als Verbindung zwischen dem Partikel und dem Untergrund durch Dämpfer verstanden werden. Die Dämpfungsparameter werden darin proportional zur Masse bzw. Massenträgheit gewählt. In Luding (2004) wird die Hintergrundreibung für kreisförmige Partikel ebenfalls durch ein viskoses Modell abgebildet, das einen linearen Zusammenhang zwischen der Translationsgeschwindigkeit und der Kraft beschreibt. In Lätzel (2003) werden die Kraft und das Moment aus Untergrundreibung auf kreisförmige Partikel durch eine Kombination aus elastischem und viskosem Modell, begrenzt durch die Reibungskraft, dargestellt.

⁴Die viskose Dämpfung als Funktion der Translations- bzw. Rotationsgeschwindigkeiten wird, zusammen mit der viskosen Dämpfung als Funktion der Relativgeschwindigkeiten bei den Interaktionen, oftmals auch dazu verwendet, die kinetische Energie aus einem System "herauszudämpfen" und es in eine Ruhelage zu bringen.

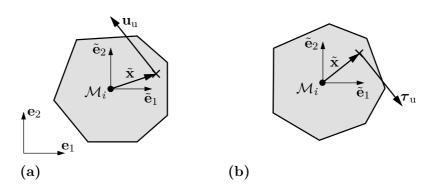


Abbildung 4.9: Kontaktmodell für die Kraft zwischen Partikel und ebenem Untergrund:
(a) Kinematische Größen und (b) Schubspannung auf das Partikel.

4.4.2 Elasto-plastisches Kontaktmodell

In dieser Arbeit wird ein neuentwickeltes elasto-plastisches Kontaktmodell vorgestellt. Hierzu wird permanenter, vollflächiger Kontakt zwischen dem ebenen Partikel und der ebenen Untergrundplatte angenommen. Als kinematische Größe wird das Relativverschiebungsfeld $\mathbf{u}_{\mathbf{u}}(\tilde{\mathbf{x}})$ zwischen den materiellen Punkten der Partikeloberfläche und des Untergrunds verwendet, siehe Abbildung 4.9. Zur Beschreibung wird das translatorisch mit dem Massenmittelpunkt mitbewegte Koordinatensystem $\tilde{\mathbf{e}}_i$ eingesetzt. Aus der Relativverschiebung wird die Schubspannung $\boldsymbol{\tau}_{\mathbf{u}}(\tilde{\mathbf{x}})$ auf das Partikel ermittelt und anschließend über die Kontaktfläche zur generalisierten Kraft auf das Partikel integriert.

Elasto-plastisches Modell

Im Folgenden wird der elasto-plastische Zusammenhang zwischen der Relativverschiebung $\mathbf{u}_{\mathrm{u}} = [u_{\mathrm{u},1} \ u_{\mathrm{u},2}]^{\mathrm{T}}$ und der Schubspannung $\boldsymbol{\tau}_{\mathrm{u}} = [\tau_{\mathrm{u},1} \ \tau_{\mathrm{u},2}]^{\mathrm{T}}$ vorgestellt, siehe z.B. SIMO UND HUGHES (1998) und JIRÁSEK (2007) für elasto-plastische Modelle. Hierzu wird ein einzelner, den Untergrund kontaktierender, materieller Punkt der Partikeloberfläche betrachtet.

Die Verschiebung

$$\mathbf{u}_{\mathrm{u}} = \mathbf{u}_{\mathrm{u}}^{\mathrm{el}} + \mathbf{u}_{\mathrm{u}}^{\mathrm{pl}} \tag{4.25}$$

wird additiv in einen elastischen Anteil $\mathbf{u}_{\mathrm{u}}^{\mathrm{el}}$ und einen plastischen Anteil $\mathbf{u}_{\mathrm{u}}^{\mathrm{pl}}$ aufgeteilt. Die plastische Verschiebung $\mathbf{u}_{\mathrm{u}}^{\mathrm{pl}}$ zwischen Partikel und Untergrund ist eine Geschichtsvariable, für die die Anfangsbedingung $\mathbf{u}_{\mathrm{u}}^{\mathrm{pl}}(t_0) = \mathbf{0}$ gilt.

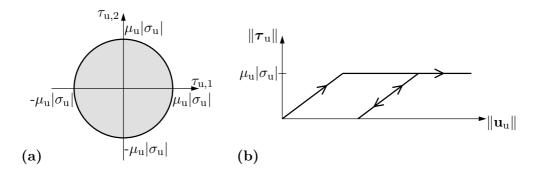


Abbildung 4.10: Kontaktmodell für die Kraft zwischen Partikel und ebenem Untergrund: (a) Fließfläche und (b) Schubspannungs-Verschiebungsdiagramm.

Die freie Energie des Kontakts mit dem Untergrund wird mit

$$\Phi_{\mathrm{u}}\left(\mathbf{u}_{\mathrm{u}},\mathbf{u}_{\mathrm{u}}^{\mathrm{pl}}\right) = \frac{1}{2}k_{\mathrm{u}}\left(\mathbf{u}_{\mathrm{u}} - \mathbf{u}_{\mathrm{u}}^{\mathrm{pl}}\right)^{\mathrm{T}}\left(\mathbf{u}_{\mathrm{u}} - \mathbf{u}_{\mathrm{u}}^{\mathrm{pl}}\right)$$

$$(4.26)$$

festgelegt. Darin bezeichnet $k_{\rm u}$ die Steifigkeit des Kontakts mit dem Untergrund, die an jedem Punkt der Partikeloberfläche gleich angenommen wird. Die negative Ableitung der freien Energie nach der elastischen Verschiebung liefert die Schubspannung, die auf das Partikel wirkt:

$$\boldsymbol{\tau}_{\mathrm{u}} = -\frac{\partial \Phi_{\mathrm{u}}}{\partial \mathbf{u}_{\mathrm{u}}^{\mathrm{el}}} = -k_{\mathrm{u}} \left(\mathbf{u}_{\mathrm{u}} - \mathbf{u}_{\mathrm{u}}^{\mathrm{pl}} \right). \tag{4.27}$$

Die spannungsbasierte Fließfunktion

$$\mathcal{F}_{\mathbf{u}}(\boldsymbol{\tau}_{\mathbf{u}}) = \|\boldsymbol{\tau}_{\mathbf{u}}\| - \mu_{\mathbf{u}}|\sigma_{\mathbf{u}}| \le 0 \tag{4.28}$$

vergleicht die Schubspannung mit der Reibungsspannung $\mu_u | \sigma_u |$. Darin ist $\| \bullet \|$ die Euklidische Norm. Die Fließfunktion legt den elastischen Bereich mit der Fließfläche als Rand fest, wie in Abbildung 4.10 (a) dargestellt. Die Reibungskraft wird aus dem Reibungskoeffizient μ_u und der vorgegebenen Drucknormalspannung $\sigma_u \leq 0$ senkrecht zur Kontaktfläche zwischen Partikel und Untergrund ermittelt. μ_u und σ_u werden über die Kontaktfläche konstant angenommen.

Die Fließregel

$$\dot{\mathbf{u}}_{\mathrm{u}}^{\mathrm{pl}} = -\dot{\lambda}_{\mathrm{u}} \frac{\partial \mathcal{F}_{\mathrm{u}}}{\partial \boldsymbol{\tau}_{\mathrm{u}}} = -\dot{\lambda}_{\mathrm{u}} \frac{\boldsymbol{\tau}_{\mathrm{u}}}{\|\boldsymbol{\tau}_{\mathrm{u}}\|},\tag{4.29}$$

mit dem plastischen Multiplikator $\dot{\lambda}_u$ und der Normalenrichtung auf die Fließfläche $\partial \mathcal{F}_u/\partial \boldsymbol{\tau}_u$, definiert die Evolution der plastischen Verschiebung in dem assoziierten Plastizitätsmodell. Das Minuszeichen tritt auf, da die Schubspannung auf das Partikel (4.27) der elastischen Verschiebung entgegengerichtet ist.

Komplettiert wird das elasto-plastische Modell durch die Be- und Entlastungsbedingungen in Kuhn-Tucker-Form

$$\mathcal{F}_{\mathbf{n}} < 0 \qquad \qquad \dot{\lambda}_{\mathbf{n}} > 0 \qquad \qquad \dot{\lambda}_{\mathbf{n}} \mathcal{F}_{\mathbf{n}} = 0 \tag{4.30}$$

und die Konsistenzbedingung

$$\dot{\lambda}_{\mathbf{u}}\dot{\mathcal{F}}_{\mathbf{u}} = 0. \tag{4.31}$$

Ein möglicher Schubspannungs-Verschiebungsverlauf, der aus dem Modell resultieren kann, ist in Abbildung 4.10 (b) dargestellt.

Verwendetes Verfahren zur Integration der Schubspannung über die Kontaktfläche

Um die Kraft auf das betrachtete Partikel i zu ermitteln, wird die Schubspannung über die Kontaktfläche $\partial\Omega_{\mathrm{pu},i}$ des Partikels mit der Untergrundplatte, also die Polygonfläche, integriert. Zur Berechnung des Moments um den Massenmittelpunkt geht zudem der Hebelarm $\tilde{\mathbf{x}}$ in das Integral ein:

$$f_{\mathbf{u},1,i} = \int_{\partial\Omega_{\mathrm{pu},i}} \tau_{\mathbf{u},1} \, \mathrm{d}a$$

$$f_{\mathbf{u},2,i} = \int_{\partial\Omega_{\mathrm{pu},i}} \tau_{\mathbf{u},2} \, \mathrm{d}a$$

$$c_{\mathbf{u},i} = \int_{\partial\Omega_{\mathrm{pu},i}} \tilde{x}_1 \tau_{\mathbf{u},2} - \tilde{x}_2 \tau_{\mathbf{u},1} \, \mathrm{d}a.$$

$$(4.32)$$

Die Kraft und das Moment werden in der generalisierten Kraft $\mathbf{f}_{\mathrm{u},i}^{\mathrm{g}} = [f_{\mathrm{u},1,i} \ f_{\mathrm{u},2,i} \ c_{\mathrm{u},i}]^{\mathrm{T}}$ zusammengefasst und dann zur generalisierten Kraft auf das Partikel aus Kontakt addiert.

Da die Integrationen in (4.32) im Allgemeinen nicht in geschlossener Form durchführbar sind, werden sie numerisch durch die Gauß-Quadratur approximiert. Dazu wird das konvexe, polygonale Partikel in $n_{\mathrm{dr},i}$ Dreiecke unterteilt, siehe Abbildung 4.11. Jedes Dreieck wird durch den Massenmittelpunkt des Partikels und zwei aufeinanderfolgende Polygonecken festgelegt. Die Gauß-Quadratur erfolgt über jede Dreiecksfläche mit sieben Gaußpunkten pro Dreieck, die eine Polynomfunktion bis zur fünften Ordnung exakt

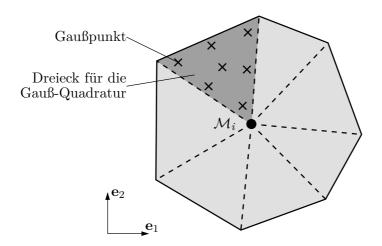


Abbildung 4.11: Kontaktmodell für die Kraft zwischen Partikel und ebenem Untergrund: Numerische Integration der Schubspannung über die Kontaktfläche durch Gauß-Quadratur an einzelnen Dreiecken.

integrieren, siehe Cowper (1973), Hughes (2000) und Zienkiewicz u. A. (2006). Anschließend werden die Integralwerte der einzelnen Dreiecke zur Kraft bzw. zum Moment auf das Partikel aufsummiert. Die plastischen Verschiebungen $\mathbf{u}_{\mathrm{u},k}^{\mathrm{pl}} = [u_{\mathrm{u},1,k}^{\mathrm{pl}} \ u_{\mathrm{u},2,k}^{\mathrm{pl}}]^{\mathrm{T}}$ in beide Richtungen mit $k = 1, \ldots, n_{\mathrm{gp},i}$ an allen $n_{\mathrm{gp},i} = 7n_{\mathrm{dr},i}$ Gaußpunkten des Partikels bilden nun weitere Geschichtsvariablen in (3.9).

Verwendetes Verfahren zur Lösung der elasto-plastischen Gleichungen

In einem Zeitschritt von t_{l-1} nach t_l wird das beschränkte Evolutionsproblem der elastoplastischen Gleichungen (4.27) bis (4.31) nun an jedem Gaußpunkt gelöst. Hierzu wird, wie beim Tangentialkraftmodell in Abschnitt 4.3.2, das implizite Euler-Verfahren eingesetzt, das als "return-mapping"-Algorithmus implementiert wird, siehe z. B. SIMO UND HUGHES (1998) und RAMM U. A. (2004).

Dabei wird zuerst ein rein elastischer "trial"-Schritt durchgeführt:

$$\boldsymbol{\tau}_{\mathbf{u},l}^{\mathrm{tr}} = -k_{\mathbf{u}} \left(\mathbf{u}_{\mathbf{u},l} - \mathbf{u}_{\mathbf{u},l-1}^{\mathrm{pl}} \right)$$

$$\boldsymbol{\mathcal{F}}_{\mathbf{u},l}^{\mathrm{tr}} = \| \boldsymbol{\tau}_{\mathbf{u},l}^{\mathrm{tr}} \| - \mu_{\mathbf{u}} | \sigma_{\mathbf{u},l} |.$$

$$(4.33)$$

Darin sind die plastische Verschiebung $\mathbf{u}_{\mathrm{u},l-1}^{\mathrm{pl}}$ zum vorherigen Zeitpunkt und bei der gestaffelten Lösung (siehe Abschnitt 3.3.1) ebenfalls die gesamte Verschiebung $\mathbf{u}_{\mathrm{u},l}$ zum aktuellen Zeitpunkt bekannt.

Anschließend wird überprüft, ob der "trial"-Zustand zulässig ist $(\mathcal{F}_{\mathbf{u},l}^{\mathrm{tr}} \leq 0)$ oder ob Fließen auftritt $(\mathcal{F}_{\mathbf{u},l}^{\mathrm{tr}} > 0)$:

$$\Delta \lambda_{\mathbf{u},l} = \begin{cases}
0 & \text{für } \mathcal{F}_{\mathbf{u},l}^{\text{tr}} \leq 0 \\
\mathcal{F}_{\mathbf{u},l}^{\text{tr}} & \text{für } \mathcal{F}_{\mathbf{u},l}^{\text{tr}} > 0
\end{cases}$$

$$\mathbf{u}_{\mathbf{u},l}^{\text{pl}} = \begin{cases}
\mathbf{u}_{\mathbf{u},l-1}^{\text{pl}} & \text{für } \mathcal{F}_{\mathbf{u},l}^{\text{tr}} \leq 0 \\
\mathbf{u}_{\mathbf{u},l-1}^{\text{pl}} - \Delta \lambda_{\mathbf{u},l} \frac{\boldsymbol{\tau}_{\mathbf{u},l}^{\text{tr}}}{\|\boldsymbol{\tau}_{\mathbf{u},l}^{\text{tr}}\|} & \text{für } \mathcal{F}_{\mathbf{u},l}^{\text{tr}} > 0
\end{cases}$$

$$\boldsymbol{\tau}_{\mathbf{u},l} = \begin{cases}
\boldsymbol{\tau}_{\mathbf{u},l}^{\text{tr}} & \text{für } \mathcal{F}_{\mathbf{u},l}^{\text{tr}} \geq 0 \\
\boldsymbol{\tau}_{\mathbf{u},l}^{\text{tr}} - \Delta \lambda_{\mathbf{u},l} k_{\mathbf{u}} \frac{\boldsymbol{\tau}_{\mathbf{u},l}^{\text{tr}}}{\|\boldsymbol{\tau}_{\mathbf{u},l}^{\text{tr}}\|} & \text{für } \mathcal{F}_{\mathbf{u},l}^{\text{tr}} > 0.
\end{cases}$$
(4.34)

Dies ist hier in expliziter Form möglich, so dass die Kombination aus (4.33) und (4.34) ein explizites Verfahren ergibt.

Implementierung

Das vorläufige Update der Geschichtsvariablen $\mathbf{u}_{\mathrm{u},k}^{\mathrm{pl}}$ sowie die Ermittlung der generalisierten Kraft $\mathbf{f}_{\mathrm{u},i}^{\mathrm{g}}$ aus Kontakt mit dem Untergrund erfolgen in zwei geschachtelten Schleifen über alle Partikel und alle Gaußpunkte, siehe Abbildung A.2. Darin wird mit der generalisierten Position aus dem Prädiktor das Update der plastischen Verschiebung durchgeführt und damit dann die Schubspannung ermittelt, die numerisch zur generalisierten Kraft integriert wird.

Das endgültige Update der Geschichtsvariablen erfolgt ebenfalls in zwei geschachtelten Schleifen über alle Partikel und alle Gaußpunkte. Dabei wird die endgültige generalisierte Position verwendet, siehe Abbildung A.3.

4.4.3 Eigenschaften

Das neuentwickelte elasto-plastische Kontaktmodell aus Abschnitt 4.4.2 kann, wie das Tangentialkraftmodell aus Abschnitt 4.3.2, Haften und Gleiten abbilden, nun allerdings zwischen dem Partikel und dem ebenen Untergrund. Das elastische Modell kann hier als Methode zur Regularisierung der Reibungsnebenbedingung (vergleiche BIĆANIĆ 2006) an jedem betrachteten Gaußpunkt aufgefasst werden. Dabei sollte die elastische Relativverschiebung $\mathbf{u}_{\mathrm{u}}^{\mathrm{el}}$ zwischen dem materiellen Punkt der Partikeloberfläche und des Untergrunds aus Gleichung (4.25) "gering" in Relation zur Größe der diskreten Elemente bleiben. Bei vorgegebenem σ_{u} und μ_{u} wird k_{u} in den Anwendungen vorab so festge-

legt, dass nach den Gleichungen (4.27) und (4.28) $\|\mathbf{u}_{\mathbf{u}}^{\mathrm{el}}\| \leq \mu_{\mathbf{u}} |\sigma_{\mathbf{u}}|/k_{\mathbf{u}}$ einen akzeptablen Grenzwert nicht übersteigen kann.

Der numerische Aufwand des entwickelten Modells steigt mit der Anzahl der Gaußpunkte bei der numerischen Integration. Bei den gewählten sieben Gaußpunkten pro Dreieck wird eine relativ hohe Genauigkeit (exakte Integration einer Polynomfunktion bis zur fünften Ordnung) erzielt, wodurch das Modell aber numerisch relativ aufwendig ist. Falls nötig, kann der numerische Aufwand jedoch durch die Verwendung von weniger Gaußpunkten je Dreieck leicht gesenkt werden, wobei aber die Genauigkeit der numerischen Integration in der Regel abnimmt.

5 Modellierung der haftenden Verbindung zwischen Partikeln

Zusammenfassung: In diesem Kapitel wird ein elasto-schädigendes Balkenmodell zur Abbildung der haftenden Verbindung zwischen Partikeln entwickelt. Das numerisch effiziente Modell kann sowohl Zug- und Biegeversagen
als auch Schubversagen sowie kombiniertes Versagen der Partikelverbindung
abbilden. In Tests kann damit Zug- und Druckversagen auf Probenebene wiedergegeben werden. Um einen Festigkeitsanstieg der haftenden Verbindung
bei Erhöhung der Dehnrate darzustellen, wird das Balkenmodell um ein Potenzmodell für die ratenabhängige Festigkeit erweitert. Damit kann in Tests
ein Anstieg der Probenfestigkeit modelliert werden.

Neben der Partikelinteraktion durch Kontakt wird in der vorliegenden Arbeit die Interaktion durch die haftende Verbindung zwischen Partikeln modelliert. Eine haftende Verbindung kann zum einen durch das direkte Anhaften der Teilchen aneinander entstehen. Zum anderen können Partikel durch ein dazwischenliegendes Material miteinander verbunden sein. Das Verhalten der haftenden Verbindung wird durch Adhäsion und Kohäsion bestimmt und ist häufig komplex. Anfängliche, geringe Deformationen sind oftmals reversibel. Bei weiterer Belastung können irreversible Vorgänge auftreten, wobei die haftende Verbindung letztlich versagen kann. Im Gegensatz dazu können haftende Verbindungen aber auch neuentstehen. Das Verhalten der haftenden Verbindung kann dabei von der Belastungsrate und -dauer abhängen, wie bei ratenabhängigem Versagensverhalten und Kriechen.

Das mathematische Modell für die haftende Verbindung definiert die Funktionen zur Ermittlung der generalisierten Kraft $\mathbf{f}_{\mathrm{h},ij}^{\mathrm{g}}$ auf das diskrete Element i aus der haftenden Verbindung j. Die generalisierten Kräfte aus allen $j=1,\ldots,n_{\mathrm{h},i}$ haftenden Verbindungen des Partikels werden zu der generalisierten Kraft auf das Partikel aus haftender

Verbindung aufsummiert:

$$\mathbf{f}_{h,i}^{g} = \sum_{j=1}^{n_{h,i}} \mathbf{f}_{h,ij}^{g}.$$
 (5.1)

Zusammen mit den generalisierten Kräften aus Kontakt und externen Lasten bildet sie nach Gleichung (3.4) die generalisierte Kraft auf das diskrete Element.

Im Folgenden werden in Abschnitt 5.1 die Modelle für die Kraft aus haftender Verbindung vorgestellt. Da ein Schwerpunkt dieser Arbeit auf der Abbildung des Versagensverhaltens insbesondere unter verschiedenen Belastungsraten liegt, werden in Abschnitt 5.2 die eingesetzten Modelle für die ratenabhängige Festigkeit der haftenden Verbindung separat betrachtet.

5.1 Modelle für die Kraft aus haftender Verbindung

In Abschnitt 5.1.1 wird zunächst eine Übersicht über die verschiedenen Modelle für die Kraft aus haftender Verbindung gegeben. Anschließend wird in Abschnitt 5.1.2 das im Rahmen dieser Arbeit neuentwickelte elasto-schädigende Balkenmodell vorgestellt und in Abschnitt 5.1.3 auf seine Eigenschaften hin untersucht.

5.1.1 Übersicht

Die Eigenschaften von Modellen für die Kraft aus haftender Verbindung werden anhand der Merkmale aus Tabelle 3.5 vorgestellt:

Modellursprung

Die Modelle verwenden meist einfache Annahmen zur Beschreibung des in Wirklichkeit komplexen Verhaltens der haftenden Verbindung.

• Reichweite

Bei der haftenden Verbindung entstehen auf die Teilchen Oberflächenlasten aus Nahwirkung. Daher ist die Reichweite der Modelle in der Regel auf benachbarte Partikel beschränkt.

• Anzahl der Partikel

Fast alle Modelle für die haftende Verbindung sind paarweise Modelle.

• Topologie des Interaktionsnetzwerks

Im Ausgangszustand ist ein Netzwerk aus haftenden Verbindungen vorgegeben.

Können diese weder versagen noch neue Verbindungen entstehen, ist das Netzwerk fix. Können die Verbindungen versagen, dann können Verbindungen aus dem anfänglichen Netzwerk entfernt werden. Jedoch erst, wenn haftende Verbindungen neuentstehen können, wird eine Suche nach neuen Interaktionspartnern durch haftende Verbindungen nötig.¹

• Kinematische Beschreibung

Verwendete kinematische Maße sind relative Verschiebungen und Verdrehungen sowie relative Translations- und Drehgeschwindigkeiten zwischen den Partikeln. Bei bestimmten Modellen wie Balkenmodellen werden daraus Deformationsmaße sowie Deformationsraten der haftenden Verbindung abgeleitet. Bei der Bestimmung der kinematischen Größen ist zu beachten, dass endliche Verschiebungen und Verdrehungen der diskreten Elemente auftreten können. Dabei sind jedoch die relativen Verschiebungen und Verdrehungen sowie die abgeleiteten Deformationsgrößen vor dem Versagen der haftenden Verbindung oftmals klein.

• Konstitutive Beschreibung

Als Konstitutivgesetze werden einfache rheologische Modelle, Traktions-Verschiebungsgesetze und Konstitutivgesetze aus der Kontinuumsmechanik eingesetzt, die jeweils an die verwendeten kinematischen und dynamischen Größen angepasst werden. Um das anfänglich reversible Verhalten abzubilden, wird meist ein linear-elastisches Gesetz benutzt. Zur Abbildung des irreversiblen Verhaltens werden perfekt-spröde Versagensmodelle, Plastizitäts- und Schädigungsmodelle angewandt. Um das Verhalten unter verschiedenen Belastungsraten wiederzugeben, können einerseits viskose Modelle genutzt werden. Andererseits können Modelle mit ratenabhängigen Materialparametern wie der Zugfestigkeit verwendet werden. Für das Neuentstehen haftender Verbindungen sind Kriterien und Regeln zum Einbau einer neuen Verbindung festzulegen. Dies wird allerdings im Folgenden nicht weiter betrachtet.

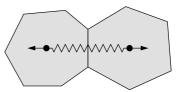
• Geometrische Form der Partikel

Viele Modelle können ohne oder mit nur geringen Modifikationen für unterschiedliche geometrische Formen verwendet werden, da die eingesetzten kinematischen Maße für verschiedene Formen oft in identischer oder sehr ähnlicher Weise ermittelt werden können. Beim Übergang zwischen einem dreidimensionalen Modell und dem entsprechenden zweidimensionalen Modell sind meist relativ geringe Modifikationen durchzuführen.

¹Unabhängig von den haftenden Verbindungen ist zu untersuchen, ob Partikel durch Kontakt miteinander interagieren. Wenn Kontaktinteraktionen ausgeschlossen werden können, kann die Kontaktsuche aus Abschnitt 4.1 entfallen.

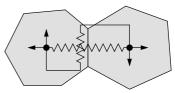
Die gängigen Modelle für die haftende Verbindung bilden eine Normalkraft in die Verbindungsrichtung der Partikel, eine Querkraft senkrecht dazu und/oder ein Moment zwischen zwei Partikeln ab. Dabei unterscheiden sich die Punkte oder Flächen, an denen die Partikel "haftend verbunden" werden, d. h. zwischen denen die kinematischen Größen wie die Relativverschiebung ermittelt werden und an denen die dynamischen Größen wie die Kraft angreifen. Dies können die Massenmittelpunkte der Partikel, Punkte auf den Oberflächen der Partikel oder Teile der Partikeloberflächen sein. Nachfolgend sind einige Modelle aufgelistet, die zur Modellierung der haftenden Verbindung eingesetzt werden können:

• Normalkraft zwischen den Massenmittelpunkten



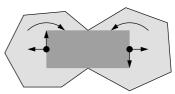
Das einfachste Modell bildet lediglich eine Normalkraft in die axiale Verbindungsrichtung der Massenmittelpunkte zwischen den Massenmittelpunkten ab, was einem Stabmodell entspricht. In reinen Netzwerkmodellen – d. h. ohne explizite Abbildung von Partikeln und deren Kontakt, in der Regel ohne große Verschiebungen (und Verdrehungen) und als statisches Modell – wird dies als "central-force lattice" oder Fachwerkmodell bezeichnet. Linear-elastische Fachwerkmodelle wurden bereits in WIEGHARDT (1906) und HRENNIKOFF (1941) vorgestellt. Bei der verwendeten Art der Diskrete-Element-Methode wird beispielsweise in Donzé u. A. (1994) eine linear-elastische Normalkraft mit linearer Entfestigung unter Zug modelliert.

• Normalkraft und Querkraft zwischen den Massenmittelpunkten



Zusätzlich zur Normalkraft kann eine Querkraft senkrecht zur axialen Verbindungsrichtung zwischen den Massenmittelpunkten abgebildet werden. Wie auch bei reiner Normalkraft entstehen dabei keine Momente um die Massenmittelpunkte. Beispielsweise in Hentz u. A. (2004) wird die haftende Verbindung durch eine linear-elastische Normalkraft mit Zugversagen und eine Querkraft modelliert.

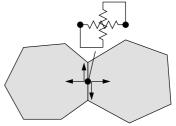
• Normalkraft, Querkraft und Moment zwischen den Massenmittelpunkten



Modelle, die zusätzlich noch ein Moment zwischen den Massenmittelpunkten abbilden, sind häufig kombinierte Stab-Balkenmodelle. Dabei können schubsteife oder

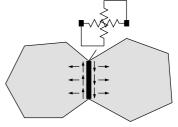
schubweiche Balkenmodelle, im Dreidimensionalen mit einem Torsionsmodell, verwendet werden. Stab-Balkenmodelle werden auch in Netzwerkmodellen eingesetzt, siehe hierzu die Übersicht in VAN MIER (1997). Für die verwendete Art der Diskrete-Element-Methode wird beispielsweise in Kun und Herrmann (1996) ein Stab-Balkenmodell mit einem spröden, kombinierten Versagenskriterium aus der axialen Deformation und den Balkenendrotationen benutzt.

• Normalkraft und Querkraft zwischen zwei Punkten auf den Oberflächen



Anstatt der Massenmittelpunkte können auch Punkte auf den Partikeloberflächen miteinander verbunden werden. Durch den Hebelarm vom Massenmittelpunkt eines Partikels zum Angriffspunkt der Kraft kann dabei ein Moment um den Massenmittelpunkt entstehen. Vereinfachend können die Kräfte auch nicht direkt an den Oberflächen selbst, sondern beispielsweise in der Mitte zwischen den Oberflächen modelliert werden. Bei der vereinfachten Diskrete-Element-Methode in Cusatis (2001), ohne explizite Betrachtung von Partikelkontakten, wird die haftende Verbindung durch eine Normalkraft und eine Tangentialkraft zwischen den Partikeloberflächen abgebildet. Dabei wird ein komplexes, elasto-plastisches Konstitutivgesetz eingesetzt.

• Normalspannungen und Schubspannungen zwischen den Oberflächen



Zudem können die Partikel nicht nur an zwei Punkten, sondern an Teilen der Oberfläche durch ein kontinuierliches Interface, das Normal- und Schubspannungen abbildet, miteinander verbunden werden. Als Näherung kann dabei eine Linie (2D) bzw. Ebene (3D) zwischen den Partikeloberflächen verwendet werden. Interfacemodelle werden auch bei Finite-Element-Methoden genutzt, siehe z. B. Hund (2007). Für die verwendete Art der Diskrete-Element-Methode wird beispielsweise in D'Addetta (2004) ein elasto-plastisches Interfacemodell eingesetzt, wobei die Integration der Spannungen über das Interface numerisch erfolgt.

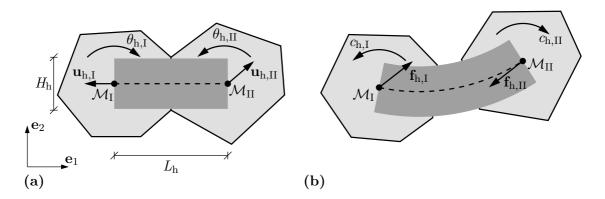


Abbildung 5.1: Balkenmodell für die Kraft aus haftender Verbindung: (a) Ausgangszustand und generalisierte Verschiebungen sowie (b) generalisierte Kräfte auf die Partikel.

5.1.2 Elasto-schädigendes Balkenmodell

In dieser Arbeit wird ein elasto-schädigendes Stab-Balkenmodell zwischen den Massenmittelpunkten entwickelt, um die haftende Verbindung zwischen zwei Partikeln abzubilden. Dazu wird eine einzelne haftende Verbindung zwischen Partikel I und Partikel II betrachtet, siehe Abbildung 5.1. Hierbei modelliert ein Dehnstabmodell die Normalkraft in axiale Verbindungsrichtung der beiden Massenmittelpunkte und ein schubweiches Balkenmodell, auch Timoshenko-Balkenmodell genannt, die Querkraft senkrecht zur Verbindungsrichtung und das Moment.

Ein derartiges Modell wurde, ausgehend von dem reinen Netzwerkmodell in HERRMANN U. A. (1989), erstmals in TILLEMANS UND HERRMANN (1995) und anschließend in KUN UND HERRMANN (1996) sowie in D'ADDETTA (2004) zur Abbildung der haftenden Verbindung verwendet. Bei dem elastischen Stab-Balkenmodell aus KUN UND HERRMANN (1996) tritt das Versagen der haftenden Verbindung unmittelbar und damit spröde auf, sobald ein kombiniertes Versagenskriterium aus axialer Deformation und Verdrehungen an den beiden Balkenenden erreicht wird, wie in Abbildung 5.2 (a) skizziert. Im Gegensatz zu diesem relativ stark vereinfachenden, jedoch numerisch effizient umsetzbaren Modell wurde in D'ADDETTA (2004) ein komplexeres Interfacemodell eingesetzt. Es bildet die haftende Verbindung wirklichkeitsnah zwischen den Oberflächen der beiden verbundenen Partikel ab, wobei ein elasto-plastisches Konstitutivgesetz mit Entfestigung benutzt wird, siehe Abbildung 5.2 (c). Allerdings ist dieses Modell in der Regel numerisch aufwendiger.

Die Motivation für die Entwicklung des elasto-schädigenden Stab-Balkenmodells in dieser Arbeit ist es nun, die numerische Effizienz des spröde versagenden Stab-Balkenmodells mit der Genauigkeit des Interfacemodells zu kombinieren. Hierzu wird die Balken-

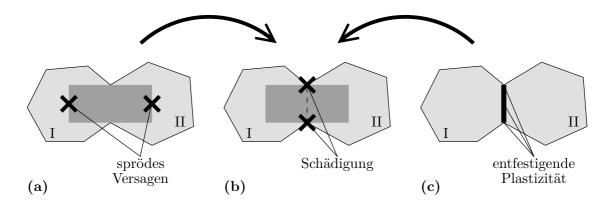


Abbildung 5.2: Motivation des Balkenmodells für die Kraft aus haftender Verbindung:

(a) Elastisches Balkenmodell mit sprödem Versagen aus Kun und Herrmann (1996), (b) elasto-schädigendes Balkenmodell aus dieser Arbeit und (c) elasto-plastisches Interfacemodell mit Entfestigung aus D'Addetta (2004).

mitte als Approximation der wirklichen Position der haftenden Verbindung zwischen den Partikeloberflächen herangezogen. Am Mittelquerschnitt wird dann das elasto-schädigende Modell zur Abbildung des sukzessiven Versagens in der potentiell höchstbeanspruchten Randfaser ausgewertet, wie in Abbildung 5.2 (b) skizziert. Im Folgenden wird das Modell ausführlich vorgestellt.

Dehnstab und schubweicher Balken

Die ebene, gerade Stab-Balkenverbindung, im Weiteren als Balken bezeichnet, ist masselos. Im Ausgangszustand ist der Balken undeformiert und spannungsfrei. Er besitzt die Länge $L_{\rm h}$ und einen konstanten Rechteckquerschnitt der Fläche $A_{\rm h}=H_{\rm h}T_{\rm h}$, siehe Abbildung 5.1 (a). Bei den in dieser Arbeit betrachteten Partikelanordnungen liegen die Kanten benachbarter diskreter Elemente im Ausgangszustand stets aufeinander. Alle sich so anfänglich berührenden Partikel werden durch Balken miteinander verbunden. Die Balkenhöhe $H_{\rm h}$ entspricht der Länge der aufeinanderliegenden Partikelkanten und die Balkentiefe $T_{\rm h}=T$ der Partikeldicke. Der Querschnittsmittelpunkt des jeweiligen Balkenendes hängt mit dem Massenmittelpunkt des jeweiligen Partikels fest eingespannt zusammen. Der Balken wird somit ausschließlich durch die Verschiebungen $\mathbf{u}_{\rm h,I/II}$ und die Verdrehungen $\theta_{\rm h,I/II}$ der Partikel als aufgebrachte Verschiebungs- und Verdrehrandbedingungen belastet. Aus der Deformation des Balkens wirken dann die Kräfte $\mathbf{f}_{\rm h,I/II}$ und die Momente $c_{\rm h,I/II}$ auf die Partikel.

Im Folgenden werden lediglich die benötigten Größen der ebenen Stabtheorie und der ebenen, schubweichen Balkentheorie beschrieben. Eine ausführliche Herleitung findet man beispielsweise in RAMM UND HOFMANN (1996). Unter Annahme kleiner Defor-

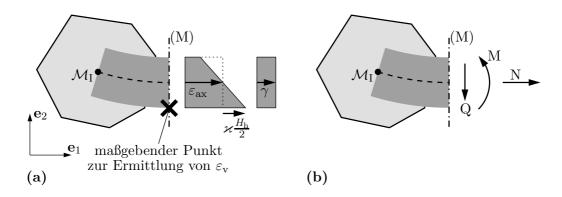


Abbildung 5.3: Balkenmodell für die Kraft aus haftender Verbindung: (a) Verzerrungen und (b) resultierende Spannungsgrößen in Balkenmitte (M).

mationen wird der einaxiale Deformationszustand aus dem Stabmodell mit dem ebenen Deformationszustand aus dem schubweichen Balkenmodell überlagert und durch die Verzerrungsgrößen axiale Verzerrung $\varepsilon_{\rm ax}$ (> 0 bei Zug), Schubverzerrung γ und Krümmung \varkappa beschrieben, die in $\varepsilon_{\rm h} = [\varepsilon_{\rm ax} \ \gamma \ \varkappa]^{\rm T}$ zusammengefasst werden, siehe Abbildung 5.3 (a). Der einaxiale Spannungszustand aus dem Stabmodell und der ebene Spannungszustand aus dem schubweichen Balkenmodell werden zusammen über den Querschnitt zu den resultierenden Spannungsgrößen Normalkraft N, Querkraft Q und Biegemoment M integriert und mit $\sigma_{\rm h} = [N \ Q \ M]^{\rm T}$ bezeichnet, siehe Abbildung 5.3 (b).

Das Material des kontinuierlichen Balkens wird homogen und isotrop angenommen. Für linear-elastisches Materialverhalten wird die über die Querschnittsfläche integrierte, freie Energie zu

$$\Phi_{\mathrm{h}}^{\mathrm{el}}\left(\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathrm{h}}\right) = \frac{1}{2}\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathrm{h}}^{\mathrm{T}}\mathbf{C}_{\mathrm{h}}^{\mathrm{el}}\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathrm{h}} \quad \text{mit } \mathbf{C}_{\mathrm{h}}^{\mathrm{el}} = \begin{bmatrix} E_{\mathrm{h}}A_{\mathrm{h}} & 0 & 0\\ 0 & G_{\mathrm{h}}A_{\mathrm{h,Q}} & 0\\ 0 & 0 & E_{\mathrm{h}}I_{\mathrm{h}} \end{bmatrix}$$

$$(5.2)$$

festgelegt. Darin stellt C_h^{el} das über den Balkenquerschnitt integrierte, linear-elastische Konstitutivgesetz dar. Der Schubquerschnitt $A_{h,Q} = \alpha_Q A_h$ wird durch Multiplikation des Balkenquerschnitts mit dem Schubkorrekturfaktor $\alpha_Q = 5/6$ für Rechteckquerschnitte ermittelt. $I_h = T_h H_h^3/12$ ist das Flächenträgheitsmoment des ebenen Balkens. Das konstitutive Verhalten kann durch die beiden Parameter Elastizitätsmodul E_h und Querdehnzahl ν_h bestimmt werden, aus denen sich der Schubmodul $G_h = E_h/(2(1+\nu_h))$ ableiten lässt.

Elasto-schädigendes Modell

Um das sukzessive Versagen der haftenden Verbindung abzubilden, wird das linear-elastische Materialverhalten um ein isotropes, einparametriges Schädigungsmodell erweitert. Die eingesetzte Schädigungsformulierung basiert auf dem Konzept der effektiven Spannungen und der Hypothese der Verzerrungsäquivalenz, siehe die ausführlichen Darstellungen über Schädigungsmodelle beispielsweise in LEMAITRE (1996), KUHL (2000) und JIRÁSEK (2007).

Die über die Querschnittsfläche integrierte, freie Energie für den elasto-schädigenden Balken wird zu

$$\Phi_{\mathrm{h}}^{\mathrm{es}}\left(\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathrm{h}},d\right) = \frac{1}{2}\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathrm{h}}^{\mathrm{T}}\mathbf{C}_{\mathrm{h}}^{\mathrm{es}}\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathrm{h}} \quad \text{mit } \mathbf{C}_{\mathrm{h}}^{\mathrm{es}} = \begin{bmatrix} (1-\mathcal{H}d)E_{\mathrm{h}}A_{\mathrm{h}} & 0 & 0\\ 0 & (1-d)G_{\mathrm{h}}A_{\mathrm{h,Q}} & 0\\ 0 & 0 & (1-d)E_{\mathrm{h}}I_{\mathrm{h}} \end{bmatrix}$$

$$(5.3)$$

festgelegt. Die Ableitung der freien Energie nach den Verzerrungsgrößen ergibt die resultierenden Spannungsgrößen

$$\sigma_{\rm h} = \frac{\partial \Phi_{\rm h}^{\rm es}}{\partial \varepsilon_{\rm h}}.\tag{5.4}$$

Die freie Energie (5.3) ist nicht nur von der Verzerrung, sondern zusätzlich von der skalaren Schädigung $d \in [0,1]$ abhängig. In der Kontinuumsschädigungsmechanik ist d ein, in diesem Fall skalares, Feld und kann an jedem materiellen Punkt unterschiedlich sein. Im Gegensatz dazu wird hier vereinfachend angenommen, dass der skalare Wert d ein Kriterium für die Schädigung des gesamten Balkens darstellt und somit alle materiellen Punkte des Balkens die identische Schädigung d besitzen. Daher wird der Elastizitätsmodul in der elasto-schädigenden Sekantensteifigkeit $\mathbf{C}_{\mathrm{h}}^{\mathrm{es}}$ durch Multiplikation mit dem Faktor (1-d) abgemindert.

Bei der axialen Steifigkeit in C_h^{es} aus (5.3) wird die Schädigung zusätzlich mit der Heaviside-Funktion

$$\mathcal{H}\left(\varepsilon_{\mathrm{ax,M}}\right) = \begin{cases} 0 & \text{für } \varepsilon_{\mathrm{ax,M}} < 0\\ 1 & \text{für } \varepsilon_{\mathrm{ax,M}} \ge 0 \end{cases}$$

$$(5.5)$$

multipliziert. Dies bewirkt, dass die Normalkraft lediglich bei axialem Zug in der Balkenmitte (M), d. h. bei $\varepsilon_{ax,M} \geq 0$, mit dem reduzierten Elastizitätsmodul errechnet wird. Bei axialem Druck in der Balkenmitte ($\varepsilon_{ax,M} < 0$) hingegen wird die axiale Steifigkeit nicht abgemindert.

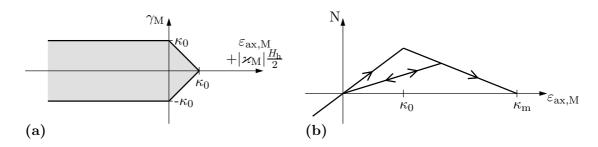


Abbildung 5.4: Elasto-schädigendes Balkenmodell für die Kraft aus haftender Verbindung: (a) Anfängliche Schädigungsfläche und (b) Kraft-Verzerrungsdiagramm für axiale Belastung.

Die Evolution der Schädigung

$$d(\kappa) = \begin{cases} 0 & \text{für } \kappa \le \kappa_0 \\ \frac{\kappa_{\text{m}}}{\kappa} \frac{\kappa - \kappa_0}{\kappa_{\text{m}} - \kappa_0} & \text{für } \kappa_0 < \kappa < \kappa_{\text{m}} \\ 1 & \text{für } \kappa \ge \kappa_{\text{m}} \end{cases}$$
(5.6)

ist eine Funktion des maximal erreichten Verzerrungslevels κ (RAMM U. A. 2004). Bevor der Schwellenwert κ_0 , der die Balkenfestigkeit festlegt, erreicht wird, ist der Balken ungeschädigt (d=0). Zwischen κ_0 und $\kappa_{\rm m}$ entfestigt der Balken. Für axiale Belastung ist in Abbildung 5.4 (b) das Kraft-Verzerrungsdiagramm mit linearer Entfestigung dargestellt. Darin ist auch eine Entlastung, bei der die Normalkraft ohne bleibende axiale Verzerrung auf null zurückgeht, sowie eine Wiederbelastung miteingezeichnet. Für Druckbelastung wird hier die axiale Steifigkeit aufgrund der Multiplikation mit der Heaviside-Funktion (5.5) nicht abgemindert. Bei dem Verzerrungslevel $\kappa_{\rm m}$ ist der Balken schließlich komplett geschädigt (d=1). Durch die Variation von $\kappa_{\rm m}$ kann unterschiedlich duktiles Versagen abgebildet und die bis zum Bruch dissipierte Energie verändert werden. Bei axialer Zugbelastung bildet die Fläche unter der Kurve in Abbildung 5.4 (b), multipliziert mit der Balkenlänge $L_{\rm h}$, die bis zum Versagen dissipierte Energie. Bei d=1 versagt die Balkenverbindung und wird inaktiv, so dass die beiden bis dahin verbundenen Partikel durch Kontakt miteinander interagieren können, siehe Kapitel 4.

Die maximal erreichte Verzerrung

$$\kappa\left(t\right) = \max_{t_0 \le \tau \le t} \varepsilon_{\mathbf{v}}\left(\tau\right) \tag{5.7}$$

bildet eine Geschichtsvariable, die in (3.9) eingeht und für die die Anfangsbedingung $\kappa(t_0) = 0$ gilt. Sie kann in expliziter Form als das bisher erreichte Maximum der äqui-

valenten Verzerrung

$$\varepsilon_{\rm v} = \langle \varepsilon_{\rm ax,M} + | \varkappa_{\rm M} | \frac{H_{\rm h}}{2} \rangle + | \gamma_{\rm M} |$$
 (5.8)

ermittelt werden. Die äquivalente Verzerrung wird als Kombination der Schubverzerrung γ und der Normalverzerrung aus der axialen Verzerrung $\varepsilon_{\rm ax}$ sowie der maximalen Biegenormalverzerrung in der Randfaser $|\varkappa|H_{\rm h}/2$ festgelegt. Dabei werden die Verzerrungen an dem Querschnitt in Balkenmitte ausgewertet, siehe Abbildung 5.3 (a) mit Markierung des maßgebenden Punkts zur Ermittlung von $\varepsilon_{\rm v}$. Die Balkenmitte wird als Approximation des Orts herangezogen, an dem das tatsächliche Versagen der haftenden Verbindung zwischen den Partikeloberflächen auftritt. Durch die Macaulay-Klammern $\langle \bullet \rangle = \max(0, \bullet)$ wird nur die positive Normalverzerrung, d. h. die Zugnormalverzerrung berücksichtigt, ermittelt in der Randfaser mit dem maximalen Wert. Die Schubverzerrung hingegen geht im Betrag ein, siehe die anfängliche Schädigungsfläche in Abbildung 5.4 (a). Durch das neuentwickelte Modell kann der Balken sowohl Zug- und Biegeversagen als auch Schubversagen sowie kombiniertes Versagen abbilden.

Lösung der Balkengleichungen

Das Aufstellen und Lösen der Gleichungen aus dem Stab-Balkenmodell wird nachfolgend nicht vorgestellt. Hierfür wird beispielsweise auf RAMM UND HOFMANN (1996) verwiesen. Es soll lediglich erwähnt werden, dass zum Aufstellen die kinematischen Gleichungen in das vorgestellte elasto-schädigende Konstitutivgesetz eingesetzt werden und dies wiederum in die statischen – da der Balken masselos angenommen wird – Gleichgewichtsbedingungen. Das Randwertproblem im Raum mit den Verschiebungs- und Verdrehrandbedingungen an den beiden Enden wird dann analytisch gelöst.

Da die diskreten Elemente endliche Verschiebungen und Verdrehungen ausführen können, erfolgt die Beschreibung in einem kartesischen Koordinatensystem mit den Basisvektoren $\bar{\mathbf{e}}_i$. Dieses wird mit dem Massenmittelpunkt des Partikels I mitbewegt und so mitgedreht, dass der Basisvektor $\bar{\mathbf{e}}_1$ immer in axiale Verbindungsrichtung der Massenmittelpunkte zeigt, siehe Abbildung 5.5. In Abbildung 5.5 (a) bezeichnen $\bar{u}_{h,1,I/II}$ und $\bar{u}_{h,2,I/II}$ die Balkenendverschiebungen und $\bar{\theta}_{h,I/II}$ die Balkenendverdrehungen, relativ zum undeformierten Balken in Verbindungsrichtung, wobei $\bar{u}_{h,1,I} = \bar{u}_{h,2,I} = \bar{u}_{h,2,II} = 0$ gilt.

Die Verzerrungen in Balkenmitte, die zur Berechnung der Schädigung in (5.6), (5.7) und (5.8) sowie zur Auswertung der Heaviside-Funktion (5.5) benötigt werden, sind:²

²Aufgrund der gegebenen Belastung sind sowohl die axiale Verzerrung als auch die Schubverzerrung in Balkenlängsrichtung konstant, so dass die Kennzeichnung mit M für die Balkenmitte hier entfallen könnte. Der Krümmungsverlauf kann jedoch linear sein.

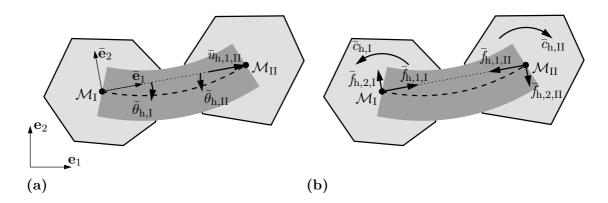


Abbildung 5.5: Balkenmodell für die Kraft aus haftender Verbindung: (a) Generalisierte Balkenendverschiebungen und (b) generalisierte Kräfte im mitbewegten und mitgedrehten Koordinatensystem.

$$\varepsilon_{\text{ax,M}} = \frac{1}{L_{\text{h}}} \qquad \bar{u}_{\text{h,1,II}}$$

$$\gamma_{\text{M}} = \frac{6E_{\text{h}}I_{\text{h}}}{G_{\text{h}}A_{\text{h,Q}}L_{\text{h}}^{2}(1+\eta)} \qquad (\bar{\theta}_{\text{h,I}} + \bar{\theta}_{\text{h,II}})$$

$$\varkappa_{\text{M}} = \frac{1}{L_{\text{h}}} \qquad (-\bar{\theta}_{\text{h,I}} + \bar{\theta}_{\text{h,II}})$$

$$(5.9)$$

mit

$$\eta = \frac{12E_{\rm h}I_{\rm h}}{G_{\rm h}A_{\rm h}OL_{\rm h}^2}.$$
(5.10)

Die Kräfte und Momente auf die Massenmittelpunkte der beiden Partikel werden im mitbewegten und mitgedrehten Koordinatensystem, siehe Abbildung 5.5 (b), zu:

$$\bar{f}_{h,1,I} = (1 - \mathcal{H}d) \quad \frac{E_{h}A_{h}}{L_{h}} \quad \bar{u}_{h,1,II}
\bar{f}_{h,2,I} = -(1 - d) \quad \frac{E_{h}I_{h}}{L_{h}^{3}(1 + \eta)} \quad \left(6L_{h}\bar{\theta}_{h,I} + 6L_{h}\bar{\theta}_{h,II}\right)
\bar{c}_{h,I} = -(1 - d) \quad \frac{E_{h}I_{h}}{L_{h}^{3}(1 + \eta)} \quad \left((4 + \eta)L_{h}^{2}\bar{\theta}_{h,I} + (2 - \eta)L_{h}^{2}\bar{\theta}_{h,II}\right)
\bar{f}_{h,1,II} = -\bar{f}_{h,1,I}
\bar{f}_{h,2,II} = -\bar{f}_{h,2,I}
\bar{c}_{h,II} = -(1 - d) \quad \frac{E_{h}I_{h}}{L_{h}^{3}(1 + \eta)} \quad \left((2 - \eta)L_{h}^{2}\bar{\theta}_{h,I} + (4 + \eta)L_{h}^{2}\bar{\theta}_{h,II}\right).$$
(5.11)

Bis auf die Multiplikation des Elastizitätsmoduls mit dem Faktor 1-d bzw. $1-\mathcal{H}d$ entsprechen sie den Kräften und Momenten aus einem klassischen, linear-elastischen

Stab-Balkenmodell, bei dem $\bar{u}_{h,1,I} = \bar{u}_{h,2,I} = \bar{u}_{h,2,I} = 0$ gilt. Die Kräfte aus (5.11) werden im ortsfesten Koordinatensystem und die Momente aus (5.11) im jeweils translatorisch mit dem Massenmittelpunkt mitbewegten Koordinatensystem beschrieben und zu den generalisierten Kräften $\mathbf{f}_{h,I/II}^{g} = [f_{h,1} f_{h,2} c_h]_{I/II}^{T}$ zusammengefasst, vergleiche Abbildung 5.1 (b). Anschließend werden sie zu den generalisierten Kräften auf die beiden Partikel aus haftender Verbindung addiert.

Implementierung

Das vorläufige Update der Geschichtsvariablen κ und die Ermittlung der generalisierten Kräfte $\mathbf{f}_{h,I}^g$ und $\mathbf{f}_{h,I}^g$ aus haftender Verbindung erfolgt in einer Schleife über alle n_h anfänglich vorhandenen Balken, siehe Abbildung A.2, wobei (ru) das ratenunabhängige Modell aus diesem Abschnitt bezeichnet. Für jeden nichtversagten, aktiven Balken wird mit den generalisierten Partikelpositionen des Prädiktors zuerst das Update der maximal erreichten Verzerrung durchgeführt. Anschließend werden damit die generalisierten Kräfte aus haftender Verbindung berechnet.

Das endgültige Update der Geschichtsvariablen erfolgt ebenfalls in einer Schleife über alle Balken, siehe Abbildung A.3. Für jeden aktiven Balken wird nun mit den endgültigen generalisierten Partikelpositionen das Update der maximal erreichten Verzerrung durchgeführt. Die Betrachtung der haftenden Verbindungen geschieht jeweils vor der Betrachtung der Kontakte, so dass in der Kontaktsuche alle Partikelpaare ohne (aktive) haftende Verbindung im aktuellen Zustand berücksichtigt werden können.

5.1.3 Eigenschaften

Das entwickelte elasto-schädigende Stab-Balkenmodell aus Abschnitt 5.1.2 stellt ein einfaches aber numerisch effizientes Modell zur Abbildung der haftenden Verbindung zwischen Partikeln dar. Da der Balken in dieser Arbeit lediglich ein Modell und kein materieller Körper ist, wird akzeptiert, dass die schubweiche Balkentheorie bei den auftretenden Verhältnissen von Balkenhöhe zu Balkenlänge in der Regel nicht gerechtfertigt ist. Durch die Erweiterung des elastischen Modells um das Schädigungsmodell kann die Degradation und das duktile Versagen einer einzelnen haftenden Verbindung unter Zug-, Biege- und Schubbelastung sowie unter kombinierter Belastung abgebildet werden. Da keine Differenzierung der Schädigung über die Balkenhöhe und die Balkenlänge erfolgt, bleibt das Modell numerisch effizient.

Die Kraft und das Moment auf ein Partikel aus dem Balkenmodell besitzen bis zum Balkenversagen keine Sprünge. Allerdings kann beim Versagen der haftenden Verbindung

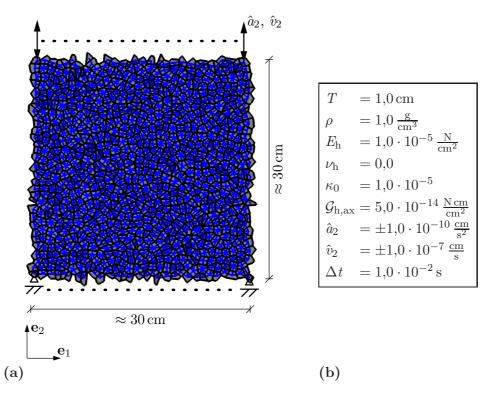


Abbildung 5.6: Zug- und Drucktest mit dem elasto-schädigenden Balkenmodell: (a) Ansicht der Probe und (b) Parameter.

und bei anschließender Aktivierung des Kontaktmodells ein Sprung in der generalisierten Kraft auftreten. Ein Beispiel ist schubdominiertes Balkenversagen unter axialem Druck, bei dem sich die verbundenen Partikel überschneiden. Beim "Umschalten" vom Balkenmodell auf die Kontaktmodelle für die Normal- und die Tangentialkraft aus den Abschnitten 4.2.2 und 4.3.2 entstehen in der Regel voneinander abweichende generalisierte Kräfte.

Aufbau der Tests

Um grundlegende Eigenschaften des elasto-schädigenden Balkenmodells bei der Modellierung von Probekörpern aus haftend verbundenen Partikeln zu untersuchen, werden ein einaxialer Zugtest und ein einaxialer Drucktest an einem fiktiven Material simuliert, wie in Abbildung 5.6 (a) dargestellt. Die Probe besteht aus 900 diskreten Elementen der Dicke $T=1,0\,\mathrm{cm}$ und der Dichte $\rho=1,0\,\mathrm{g/cm^3}$, die mit 2568 Balken verbunden sind. Die Balken sind als blaue Linien zwischen den Massenmittelpunkten der verbundenen Partikel eingezeichnet, wobei die Balkenhöhe nicht visualisiert ist.

Die fiktive Anordnung der Partikel wird mit dem in Abschnitt 3.2.1 beschriebenen Verfahren aus Moukarzel und Herrmann (1992) generiert. Die diskreten Elemente sind

die Voronoi-Zellen um die Punkte, die in 30×30 Gitterzellen positioniert sind. Dabei wird die Gitterweite $h_{\rm pg}=1,0\,{\rm cm}$ und der Faktor $q_{\rm pg}=0,999$ gewählt. Die Anordnung der konvexen Polygone ist raumfüllend, wobei sich die diskreten Elemente im Ausgangszustand ohne Durchdringung berühren, vergleiche Tabelle 3.4. Die Balkenverbindungen der sich im Ausgangszustand berührenden Partikel bilden im Inneren der Probe ein Dreiecksnetz.

Die Partikelinteraktion durch haftende Verbindung wird mit dem elasto-schädigenden Balkenmodell aus Abschnitt 5.1.2 abgebildet. Da hier dieses Modell getestet werden soll, werden der Kontakt zwischen Partikeln, die nicht (mehr) haftend miteinander verbunden sind, sowie das Eigengewicht der Partikel nicht modelliert.

Für alle haftenden Verbindungen werden die Balkenparameter $E_{\rm h}=1.0\cdot 10^{-5}\,{\rm N/cm^2}$, $\nu_{\rm h}=0.0$ und $\kappa_0=1.0\cdot 10^{-5}$ gewählt.³ Die vom Balken bei axialer Belastung bis zum Versagen dissipierte Energie pro Einheit Balkenquerschnitt ist

$$\mathcal{G}_{h,ax} = \frac{1}{2} E_h \kappa_0 \kappa_m L_h, \tag{5.12}$$

vergleiche Abbildung 5.4 (b). Sie wird für alle Balken zu $\mathcal{G}_{h,ax} = 5.0 \cdot 10^{-14} \, \text{N cm/cm}^2$ festgelegt. Für einen Balken der Länge $L_h = 1.0 \, \text{cm}$ tritt damit das Versagen bei $\kappa_m = 1.0 \cdot 10^{-3}$ ein. Ein kürzerer Balken versagt entsprechend bei einem höheren Verzerrungsniveau und ein längerer bei einem niedrigeren. Dabei ist zu kontrollieren, ob für jeden Balken $\kappa_m \geq \kappa_0$ gilt, da sonst eine Art "snap-back" in der konstitutiven Beschreibung auftritt.

Am Anfang der Simulationen sind die Geschwindigkeiten aller Freiheitsgrade und deren Zeitableitungen null. Als Randbedingungen werden die Massenmittelpunkte der Partikel in der oberen Reihe zu Beginn mit $\hat{a}_2 = \pm 1,0 \cdot 10^{-10}\,\mathrm{cm/s^2}$ beschleunigt, wobei das positive Vorzeichen Zugbelastung und das negative Vorzeichen Druckbelastung bedeutet. Sobald die Geschwindigkeit $\hat{v}_2 = \pm 1,0 \cdot 10^{-7}\,\mathrm{cm/s}$ erreicht ist, werden die Partikel mit dieser Geschwindigkeit weiterbewegt. Die Belastungsgeschwindigkeit ist so gering gewählt, dass vor dem Beginn der Schädigung im Probekörper die kinetische Energie der Partikel viel kleiner ist als die elastische Energie der Balken. Die Massenmittelpunkte der diskreten Elemente in der unteren Reihe werden in \mathbf{e}_2 -Richtung unverschieblich gehalten. Die Translationsbewegung in \mathbf{e}_1 -Richtung sowie die Rotation sind weder für die Partikel in der oberen noch für die in der unteren Reihe vorgegeben. Die Zeitschrittweite wird zu $\Delta t = 1,0 \cdot 10^{-2}\,\mathrm{s}$ festgelegt. In Abbildung 5.6 (b) sind die verwendeten Parameter zusammengefasst.

 $^{^3}$ Der Wert $E_h = 1.0 \cdot 10^{-5} \, \text{N/cm}^2 = 1.0 \, \text{g/(cm s}^2)$ entsteht beim Festlegen des Balkenelastizitätsmoduls im gewählten Einheitensystem aus cm, g und s zu eins.

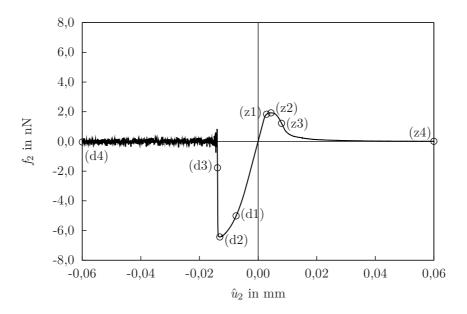


Abbildung 5.7: Last-Verschiebungsdiagramm des Zug- und des Drucktests mit dem elasto-schädigenden Balkenmodell.

Ergebnisse der Tests

In Abbildung 5.7 sind die Last-Verschiebungskurven des Zugtests ($\hat{u}_2 \geq 0$) und des Drucktests ($\hat{u}_2 \leq 0$) dargestellt. Darin bezeichnet \hat{u}_2 die vorgegebene Verschiebung auf die obere Partikelreihe. f_2 ist die Summe der Kräfte aus den Balken auf die Partikel der oberen Reihe in \mathbf{e}_2 -Richtung, wobei das Vorzeichen umgedreht ist. Sowohl im Zug- als auch im Drucktest verhält sich die Probe zu Beginn elastisch mit annähernd linearem Kurvenverlauf. Im Zugtest folgt darauf ein kurzer erkennbar nichtlinearer Bereich vor dem Erreichen der Traglast in Zustand (z2). Nach dem Maximum zeigt sich ein duktiles Versagensverhalten, wobei die Kurve sehr langsam gegen null strebt. Im Drucktest wird die Kurve nach dem anfänglichen annähernd linearen Bereich flacher und erreicht den Maximalbetrag der Last in Zustand (d2). Anschließend versagt die Probe spröde und eine Oszillation der Last verbleibt. Die Traglast besitzt den 3,34-fachen Betrag der Traglast im Zugtest.

In Abbildung 5.8 wird das Versagensverhalten im Zugtest zu den vier in Abbildung 5.7 markierten Zuständen (z1) bis (z4) gezeigt. Zur Übersichtlichkeit sind die Partikelränder nicht miteingezeichnet. Die Balken sind als gerade Linien zwischen den Partikelmassenmittelpunkten dargestellt, so dass die Schub- und die Biegedeformation der Balken nicht visualisiert werden. Die im Laufe der Simulation versagten und daher inaktiven Balkenverbindungen werden zur Anschaulichkeit weiterhin abgebildet. In Zustand (z1) sind bereits einige meist vertikal ausgerichtete Balken geschädigt, weshalb der Last-Verschiebungsverlauf in Abbildung 5.7 an dieser Stelle bereits deutlich nichtlinear ist. In Zustand

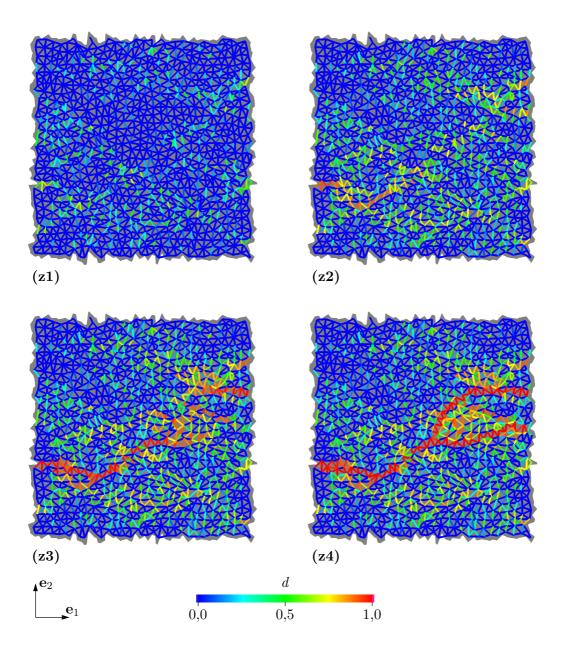


Abbildung 5.8: Versagensverhalten im Zugtest mit dem elasto-schädigenden Balkenmodell: Schädigung der Balken zu den vier in Abbildung 5.7 markierten Zuständen (z1), (z2), (z3) und (z4).

(z2), dem Erreichen der Traglast, ist ein höheres Schädigungsniveau mit einer größeren Anzahl geschädigter Balken erkennbar. Auf der linken Probenseite deutet sich bereits die Lokalisierung der Schädigung an. In Zustand (z3) ist die Lokalisierung vorangeschritten und Risse sind sichtbar. Bis zu Zustand (z4) am Ende der Last-Verschiebungskurve nimmt die Schädigung von Balken hauptsächlich in den Lokalisierungszonen weiter zu. Das Versagensmuster besteht aus einem horizontal ausgerichteten welligen Hauptriss,

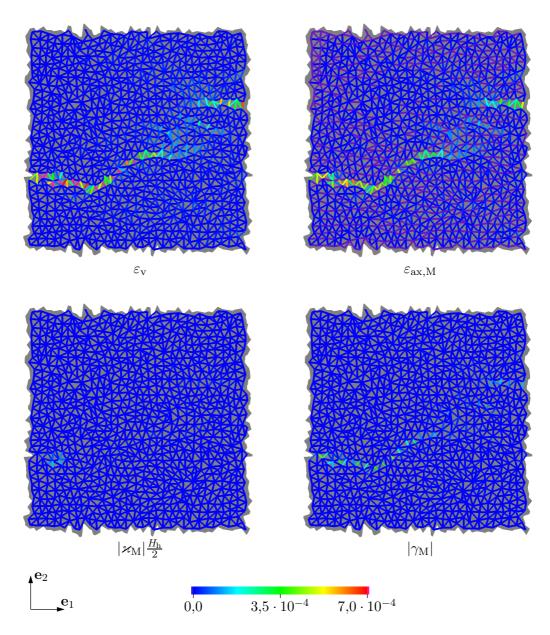


Abbildung 5.9: Balkenverzerrungen im Zugtest mit dem elasto-schädigenden Balkenmodell zum Zustand (z3) aus Abbildung 5.7.

der von links nach rechts durch die Probe fortgeschritten ist, sowie einem darüberliegenden kürzeren Riss auf der rechten Seite, der vom Probenrand ausgehend auf den Hauptriss getroffen ist.

Um das Versagen der Probe genauer zu untersuchen, werden in Abbildung 5.9 die Balkenverzerrungen im Zugtest zum Zustand (z3) aus Abbildung 5.7 betrachtet. Im Bild links oben ist die äquivalente Verzerrung der Balken ε_{v} aus Gleichung (5.8) dargestellt. Darin ist die Lokalisierung klar erkennbar. Im Bild rechts oben wird die axiale Verzerrung der Balken $\varepsilon_{\rm ax,M}$ gezeigt. Tendenziell sind die horizontal ausgerichteten Balken unter Druck ($\varepsilon_{\rm ax,M} < 0$, lila eingefärbt) und die vertikal und diagonal ausgerichteten unter Zug. In den Lokalisierungszonen besitzen hauptsächlich vertikal bis diagonal ausgerichtete Balken eine hohe axiale Verzerrung. Diese bildet hier meist den Hauptanteil der äquivalenten Verzerrung. Die maximale Biegenormalverzerrung in der Randfaser $|\varkappa_{\rm M}|H_{\rm h}/2$ im Bild links unten ist bei fast allen Balken klein. Der Betrag der Schubverzerrung $|\gamma_{\rm M}|$, im Bild rechts unten dargestellt, trägt hingegen bei einigen Balken in den Lokalisierungszonen erkennbar zur äquivalenten Verzerrung bei. Das makroskopische Zugversagen der Probe wird also auf Partikelebene im Wesentlichen durch zugdominiertes Versagen der Balken, teilweise mit einem Schubanteil, abgebildet.

In Abbildung 5.10 ist das Versagensverhalten im Drucktest zu den vier markierten Zuständen (d1) bis (d4) aus Abbildung 5.7 dargestellt. In Zustand (d1) sind etliche, im Gegensatz zum Zugtest meist horizontal bis diagonal ausgerichtete Balken geschädigt, weshalb der Last-Verschiebungsverlauf in Abbildung 5.7 hier bereits erkennbar nichtlinear ist. Die geschädigten Balken sind teilweise in diagonalen Bändern angeordnet. Bei Erreichen der Traglast in Zustand (d2) ist ein höheres Schädigungsniveau vorhanden, wobei auf der linken Probenseite bereits die Lokalisierung der Schädigung in einem diagonalen Band erkennbar ist. Der Zustand (d3) zeigt die Probe während des spröden Versagens. Auf der linken Probenseite ist ein diagonaler Riss entstanden, in dessen Umgebung deutliche Schädigung der Balken auch außerhalb der Lokalisierungszone auftritt. In Zustand (d4) am Ende der Last-Verschiebungskurve ist die Probe mit einem V-förmigen Rissmuster auseinandergebrochen. Im Gegensatz zu Zustand (z4) des Zugtests in Abbildung 5.8 besitzen fast alle Balken deutliche Schädigung. Ein Grund für das im Vergleich zum Zugtest sprödere Versagen besteht darin, dass im Drucktest bei Erreichen der Traglast mit dem 9,91-Fachen mehr elastische Energie in der Probe gespeichert ist.

Die Balkenverzerrungen im Drucktest sind in Abbildung 5.11 zu einem Zustand zwischen (d2) und (d3) aus Abbildung 5.7 dargestellt. Die äquivalente Verzerrung der Balken $\varepsilon_{\rm v}$ im Bild links oben zeigt das diagonale Lokalisierungsband auf der linken Probenseite. Zudem sind kürzere Bänder mit hohen äquivalenten Verzerrungen erkennbar. Im Bild rechts oben ist die axiale Verzerrung der Balken $\varepsilon_{\rm ax,M}$ abgebildet. Im Gegensatz zum Zugtest stehen hier tendenziell die vertikal und diagonal ausgerichteten Balken unter Druck und die horizontal ausgerichteten unter Zug, vergleiche Abbildung 5.9. In den Lokalisierungsbändern besitzen hauptsächlich horizontal bis diagonal ausgerichtete Balken eine hohe axiale Verzerrung. Die maximale Biegenormalverzerrung in der Randfaser $|\varkappa_{\rm M}|H_{\rm h}/2$ im Bild links unten ist bei fast allen Balken klein. Im Bild rechts unten ist der Betrag der Schubverzerrung in den Balken $|\gamma_{\rm M}|$ eingezeichnet. Dieser ist bei meist diagonal ausgerichteten und teilweise unter axialem Druck stehenden Balken in den Lokalisierungszonen hoch. Im Wesentlichen wird das makroskopische Druckversagen der

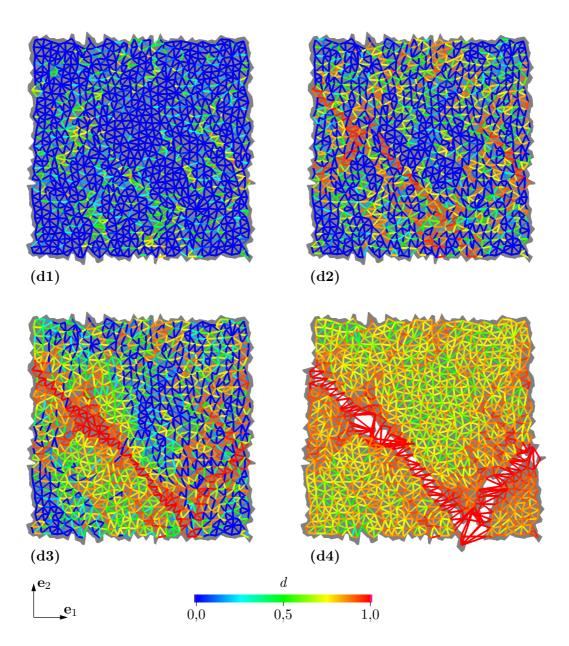


Abbildung 5.10: Versagensverhalten im Drucktest mit dem elasto-schädigenden Balkenmodell: Schädigung der Balken zu den vier in Abbildung 5.7 markierten Zuständen (d1), (d2), (d3) und (d4).

Probe auf Partikelebene durch zugdominiertes Versagen und kombiniertes Zug-Schubversagen der Balken, aber auch durch schubdominiertes Versagen gedrückter Balken wiedergegeben.

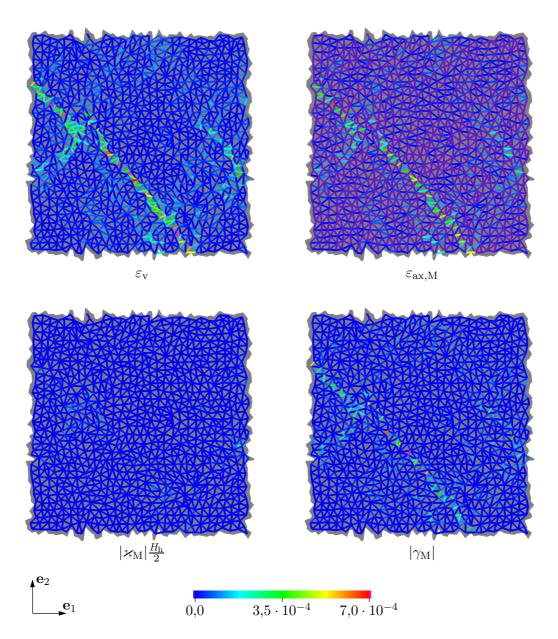


Abbildung 5.11: Balkenverzerrungen im Drucktest mit dem elasto-schädigenden Balkenmodell zu einem Zustand zwischen (d2) und (d3) aus Abbildung 5.7.

Parametereinfluss

Im Folgenden wird der Einfluss der beiden Parameter κ_0 und κ_m auf das Last-Verschiebungsverhalten der Probe untersucht. Hierzu werden der Zug- und der Drucktest aus Abbildung 5.6 mit den dort gewählten Parametern als Referenz verwendet. Davon ausgehend wird jeweils einer der beiden Parameter für alle Balken gleichermaßen abgeändert.

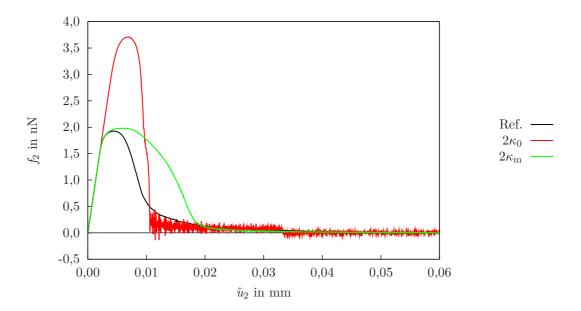


Abbildung 5.12: Last-Verschiebungsdiagramm der Zugtests mit dem elasto-schädigenden Balkenmodell: Variation der Parameter κ_0 und $\kappa_{\rm m}$.

In Abbildung 5.12 sind die Last-Verschiebungskurve des Zugtests mit den Referenzparametern, die bereits in Abbildung 5.7 gezeigt wurde, sowie die Kurven der Zugtests mit zweifachem κ_0 und zweifachem $\kappa_{\rm m}$ dargestellt. Die Verdopplung von κ_0 hat den Schädigungsbeginn jedes Balkens bei doppelter äquivalenter Verzerrung zur Folge. Daher steigt die Last-Verschiebungskurve der Probe länger als die Referenzkurve an und erreicht mit dem 1,93-Fachen nicht ganz die doppelte Traglast. Anschließend versagt die Probe spröder und es entsteht eine sichtbare Oszillation der Last. Die Verdopplung von $\kappa_{\rm m}$ bewirkt das Versagen jedes Balkens bei doppelter äquivalenter Verzerrung. Daher besitzt die Last-Verschiebungskurve der Probe im Vergleich zur Referenzkurve einen ausgeprägteren nichtlinearen Bereich vor Erreichen der leicht erhöhten Traglast und das anschließende Versagensverhalten ist duktiler. Mit dem elasto-schädigenden Balkenmodell auf Partikelebene kann also duktiles Zugversagen der Probe abgebildet werden. Im Vergleich dazu fiel in D'Addetta (2004) das Probenversagen im einaxialen Zugtest mit dem spröde versagenden Balkenmodell aus Kun und Herrmann (1996) spröde aus. Dort wurde erst bei Einsatz des komplexeren Interfacemodells duktiles Versagen der Probe im Zugtest wiedergegeben.

In Abbildung 5.13 sind die bereits in Abbildung 5.7 gezeigte Last-Verschiebungskurve des Drucktests mit den Referenzparametern sowie die Kurven der Drucktests mit zweifachem κ_0 , zweifachem $\kappa_{\rm m}$ und zehnfachem $\kappa_{\rm m}$ dargestellt. Die Verdopplung von κ_0 hat ebenfalls einen längeren Anstieg der Last zur Folge, hier auf das 1,79-Fache der Traglast mit den Referenzparametern. Die Oszillation der Last nach dem Probenversagen besitzt insbesondere anfänglich eine etwas größere Amplitude. Die Verdopplung von $\kappa_{\rm m}$ verur-

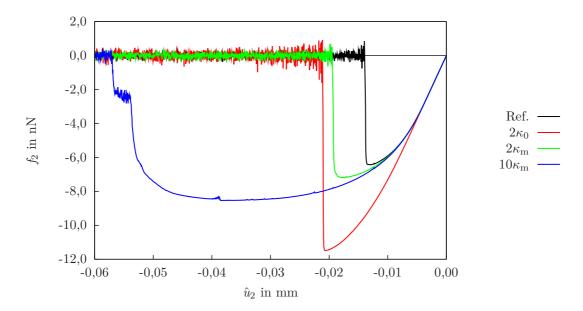


Abbildung 5.13: Last-Verschiebungsdiagramm der Drucktests mit dem elasto-schädigenden Balkenmodell: Variation der Parameter κ_0 und $\kappa_{\rm m}$.

sacht eine Ausdehnung des nichtlinearen Bereichs vor dem Erreichen der Traglast, deren Betrag etwas größer ist als in der Referenzkurve. Danach versagt die Probe ebenfalls spröde, weshalb $\kappa_{\rm m}$ noch weiter erhöht wurde. Die Verzehnfachung von $\kappa_{\rm m}$ im Vergleich zu den Referenzparametern bewirkt ein ausgeprägtes Plateau mit einer im Betrag höheren Traglast. Nun kann auch duktileres Versagen abgebildet werden, wobei am Ende immer noch ein relativ steiler Abfall der Last mit einer Zwischenstufe zu beobachten ist. In D'Addetta (2004) trat bei Einsatz des spröde versagenden Balkenmodells aus Kun und Herrmann (1996) im einaxialen Drucktest wie bereits im Zugtest sprödes Probenversagen auf, während duktileres Versagen erst mit dem komplexeren Interfacemodell wiedergegeben wurde.

5.2 Modelle für die ratenabhängige Festigkeit

Die verwendete Art der Diskrete-Element-Methode löst die Bewegungsgleichung der Partikel, so dass sich einerseits ein verändertes Verhalten unter unterschiedlichen Belastungsraten zeigt, sobald die Trägheit der Partikel Einfluss bekommt. Neben dieser Abhängigkeit von der Belastungsrate können andererseits die Interaktionsmodelle der Partikel ratenabhängig formuliert werden, so dass die generalisierte Kraft aus der Interaktion durch das Konstitutivgesetz von der Rate einer kinematischen Größe abhängt. Eine Möglichkeit hierfür ist das Einbringen von viskosem Verhalten, z.B. durch visko-elastische oder visko-plastische Konstitutivgesetze. Eine weitere Möglichkeit ist, Pa-

rameter des konstitutiven Gesetzes wie Steifigkeiten oder Festigkeiten ratenabhängig festzulegen. In dieser Arbeit wird ein Modell mit einer ratenabhängigen Festigkeit der haftenden Verbindung eingesetzt, um das veränderte Versagensverhalten unter verschiedenen Belastungsraten abzubilden.

Im Folgenden wird zunächst in Abschnitt 5.2.1 eine Übersicht über die verschiedenen Modelle für die ratenabhängige Festigkeit gegeben. Anschließend wird in Abschnitt 5.2.2 das elasto-schädigende Balkenmodell aus Abschnitt 5.1.2 um die ratenabhängige Festigkeit erweitert. In Abschnitt 5.2.3 wird das Modell schließlich auf seine Eigenschaften hin untersucht.

5.2.1 Übersicht

Die Modellierung der haftenden Verbindung zwischen den Partikeln mit ratenabhängiger Festigkeit baut meist auf einem ratenunabhängigen Modell auf, siehe Abschnitt 5.1. Für das darin eingesetzte Konstitutivgesetz formulieren die Modelle für die ratenabhängige Festigkeit dann einen oder mehrere Festigkeitsparameter wie die Zug- oder die Druckfestigkeit als Funktion einer Rate. Als Rate kann die Relativgeschwindigkeit zwischen den Partikeln oder auch die Rate eines Deformationsmaßes verwendet werden.

Beispielsweise wird in Hentz u. A. (2004) die haftende Verbindung durch eine Normal-kraft mit Zugversagen und eine Querkraft abgebildet. Dabei wird der Anstieg der Zugfestigkeit abschnittsweise als Potenzfunktion der axialen Verzerrungsrate beschrieben. Eine vereinfachte Diskrete-Element-Methode ohne Partikelrotationen wird in Brara u. A. (2001) vorgestellt, wobei die haftende Verbindung mit einer Normalkraftfeder und einer Querkraftfeder dargestellt wird. Die Zugfestigkeit wird darin als Potenzfunktion einer Verzerrungsrate formuliert. Bei der vereinfachten Methode in Kusano u. A. (1992) wird die haftende Verbindung durch eine Normalkraft und eine Querkraft modelliert. Dabei wird für die Druck-, die Zug- und die Schubfestigkeit ein "dynamic increase factor", der eine nicht näher spezifizierte Funktion einer Verzerrungsgeschwindigkeit ist, eingesetzt. Bei der vereinfachten Methode in Cusatis (2001) wird eine Normalkraft und eine Tangentialkraft mit einem elasto-plastischen Konstitutivgesetz eingeführt. Dabei vergrößert sich der elastische Bereich als Funktion einer effektiven Verzerrungsrate.

5.2.2 Potenzmodell für das elasto-schädigende Balkenmodell

In diesem Abschnitt wird das elasto-schädigende Stab-Balkenmodell für die haftende Verbindung aus Abschnitt 5.1.2 um die ratenabhängige Festigkeit erweitert. Dabei wird

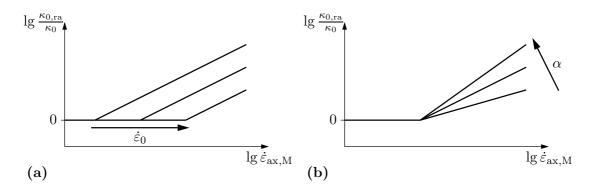


Abbildung 5.14: Ratenabhängiges elasto-schädigendes Balkenmodell für die Kraft aus haftender Verbindung: Festigkeitsanstiegs-Verzerrungsratendiagramm bei (a) Variation von $\dot{\varepsilon}_0$ und (b) Variation von α .

die Festigkeit des Balkenmaterials als Potenzfunktion der axialen Balkenverzerrungsrate beschrieben.

Festigkeit als Potenzfunktion der axialen Verzerrungsrate

Der Schädigungsbeginn und damit die Festigkeit des Balkenmaterials wird beim ratenunabhängigen Modell aus Abschnitt 5.1.2 durch den konstanten Parameter κ_0 festgelegt, vergleiche Abbildung 5.4. Beim ratenabhängigen (ra) Modell wird nun $\kappa_{0,\text{ra}}$ als Potenzfunktion der axialen Verzerrungsrate in Balkenmitte $\dot{\varepsilon}_{\text{ax,M}}$ definiert, mit $\dot{\varepsilon}_{\text{ax,M}} > 0$ für sich voneinander entfernende Massenmittelpunkte der beiden Partikel:

$$\kappa_{0,\text{ra}}\left(\dot{\varepsilon}_{\text{ax,M}}\right) = \begin{cases}
\kappa_0 & \text{für } \dot{\varepsilon}_{\text{ax,M}} \leq \dot{\varepsilon}_0 \\
\kappa_0 \left(\frac{\dot{\varepsilon}_{\text{ax,M}}}{\dot{\varepsilon}_0}\right)^{\alpha} & \text{für } \dot{\varepsilon}_{\text{ax,M}} > \dot{\varepsilon}_0.
\end{cases}$$
(5.13)

Dieses Modell für den Festigkeitsanstieg ist eine Vereinfachung des Modells für Beton aus COMITÉ EURO-INTERNATIONAL DU BÉTON (1993) und dem daraus abgeleiteten Modell für die vorgestellte Art der Diskrete-Element-Methode in HENTZ U. A. (2004). In Gleichung (5.13) entspricht $\kappa_{0,\mathrm{ra}}$ dem Parameter κ_0 des ratenunabhängigen Modells, solange die axiale Verzerrungsrate den Schwellenwert $\dot{\varepsilon}_0$, für den $\dot{\varepsilon}_0 > 0$ gilt, nicht überschreitet. Für eine höhere axiale Verzerrungsrate, d. h. sich schneller voneinander entfernende Massenmittelpunkte, wird die Festigkeit erhöht, wobei der Exponent $\alpha > 0$ festzulegen ist. Für den Spezialfall $\alpha = 0$ erhält man wieder das ratenunabhängige Modell. Der Einfluss der beiden zusätzlichen Parameter $\dot{\varepsilon}_0$ und α auf die Festigkeit ist in Abbildung 5.14 dargestellt. In Abbildung 5.15 (a) ist die Veränderung der anfänglichen Schädigungsfläche mit der axialen Verzerrungsrate skizziert, vergleiche hierzu Abbildung 5.4 (a).

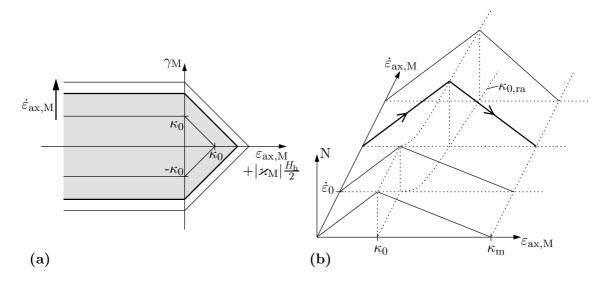


Abbildung 5.15: Ratenabhängiges elasto-schädigendes Balkenmodell für die Kraft aus haftender Verbindung: (a) Anfängliche Schädigungsfläche und (b) Kraft-Verzerrungs-Verzerrungsratendiagramm für axiale Belastung.

Die Schädigung d wird nun nicht mehr durch die Geschichtsvariable maximal erreichte Verzerrung κ aus Gleichung (5.7) festgelegt. Stattdessen wird die Kombination aus äquivalenter Verzerrung $\varepsilon_{\rm v}$ nach Gleichung (5.8) und $\kappa_{0,\rm ra}$ nach Gleichung (5.13) maßgebend, für die

$$\dot{d}\left(\varepsilon_{\mathbf{v}}, \kappa_{0, \mathrm{ra}}\right) = \begin{cases}
0 & \text{für } \varepsilon_{\mathbf{v}} \leq \kappa_{0, \mathrm{ra}} \\
\frac{\kappa_{\mathbf{m}}}{\varepsilon_{\mathbf{v}}} \frac{\varepsilon_{\mathbf{v}} - \kappa_{0, \mathrm{ra}}}{\kappa_{\mathbf{m}} - \kappa_{0, \mathrm{ra}}} & \text{für } \kappa_{0, \mathrm{ra}} < \varepsilon_{\mathbf{v}} < \kappa_{\mathbf{m}} \\
1 & \text{für } \varepsilon_{\mathbf{v}} \geq \kappa_{\mathbf{m}}
\end{cases} (5.14)$$

das Maximum

$$d(t) = \max_{t_0 \le \tau \le t} \check{d}(\tau) \tag{5.15}$$

annimmt. Die Schädigung d kann somit in expliziter Form bestimmt werden und wird zur Geschichtsvariablen, für die die Anfangsbedingung $d(t_0) = 0$ gilt.

Die Gleichungen (5.13), (5.14) und (5.15) ersetzen nun die Gleichungen (5.6) und (5.7) des ratenunabhängigen Modells aus Abschnitt 5.1.2. In Abbildung 5.15 (b) ist für axiale Belastung das Kraft-Verzerrungs-Verzerrungsratendiagramm dargestellt, vergleiche hierzu auch Abbildung 5.4 (b). Darin sind die Potenzfunktion für $\kappa_{0,\text{ra}}$ und der damit verbundene Festigkeitsanstieg sowie das konstante κ_{m} , bei dem die Balkenverbindung versagt, sichtbar.

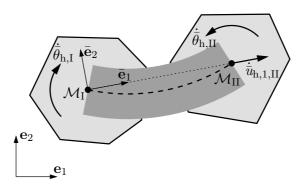


Abbildung 5.16: Balkenmodell für die Kraft aus haftender Verbindung: Generalisierte Balkenendgeschwindigkeiten im mitbewegten und mitgedrehten Koordinatensystem.

Lösung der Balkengleichungen

Die Lösung der Gleichungen erfolgt, bis auf die genannten Änderungen bei der Ermittlung der Schädigung, wie beim ratenunabhängigen Modell aus Abschnitt 5.1.2. Die in Gleichung (5.13) benötigte axiale Verzerrungsrate

$$\dot{\varepsilon}_{\text{ax,M}} = \frac{1}{L_{\text{h}}} \dot{\bar{u}}_{\text{h,1,II}} \tag{5.16}$$

wird ebenfalls im mitbewegten und mitgedrehten Koordinatensystem ermittelt,⁴ siehe Abbildung 5.16. Darin bezeichnen $\dot{\bar{u}}_{h,1,I/II}$ und $\dot{\bar{u}}_{h,2,I/II}$ die Balkenendgeschwindigkeiten und $\dot{\bar{\theta}}_{h,I/II}$ die Balkenenddrehgeschwindigkeiten, relativ zum undeformierten Balken in Verbindungsrichtung, wobei $\dot{\bar{u}}_{h,1,I} = \dot{\bar{u}}_{h,2,I} = \dot{\bar{u}}_{h,2,II} = 0$ gilt.

Implementierung

Sowohl das vorläufige Update der Geschichtsvariablen d und die Ermittlung der generalisierten Kräfte $\mathbf{f}_{h,I}^g$ und $\mathbf{f}_{h,II}^g$ aus haftender Verbindung (Abbildung A.2) als auch das endgültige Update der Geschichtsvariablen (Abbildung A.3) erfolgen beim ratenabhängigen (ra) Modell analog zum ratenunabhängigen (ru) Modell. Statt der maximal erreichten Verzerrung bildet die Schädigung die Geschichtsvariable, zu deren Ermittlung zusätzlich die generalisierten Partikelgeschwindigkeiten verwendet werden.

⁴Aufgrund der gegebenen Belastung ist die axiale Verzerrungsrate in Balkenlängsrichtung konstant, so dass die Kennzeichnung mit M für die Balkenmitte hier entfallen könnte.

5.2.3 Eigenschaften

Das entwickelte ratenabhängige elasto-schädigende Stab-Balkenmodell aus Abschnitt 5.2.2 ist eine relativ einfache Erweiterung des ratenunabhängigen Balkenmodells aus Abschnitt 5.1.2. Durch die Beschreibung des Schädigungsbeginns als Funktion der axialen Verzerrungsrate kann der Festigkeitsanstieg einer einzelnen haftenden Verbindung bei Erhöhung ihrer axialen Verzerrungsrate abgebildet werden.

Aufbau der Tests

Um grundlegende Eigenschaften des ratenabhängigen Balkenmodells bei der Modellierung von Probekörpern aus haftend verbundenen Partikeln zu untersuchen, werden erneut der einaxiale Zugtest und der einaxiale Drucktest aus Abbildung 5.6 (a) simuliert. Allerdings wird zur Abbildung der haftenden Verbindung zwischen den Partikeln nun das ratenabhängige Balkenmodell aus Abschnitt 5.2.2 an Stelle des ratenunabhängigen Balkenmodells aus Abschnitt 5.1.2 eingesetzt. Die Parameter der Partikel und der Balken werden wie in Abbildung 5.6 (b) gewählt. Die beiden zusätzlichen Parameter des ratenabhängigen Modells werden für alle Balken zu $\dot{\varepsilon}_0 = 1,0 \cdot 10^{-8} \, 1/s$ und $\alpha = 0,1$ festgelegt. Die Anfangs- und Randbedingungen werden ebenfalls wie in Abbildung 5.6 festgesetzt. Lediglich die zu Beginn vorgegebene Beschleunigung und die anschließend vorgegebene Geschwindigkeit werden auf $\hat{a}_2 = \pm 1,0 \cdot 10^{-8} \, \text{cm/s}^2$ und $\hat{v}_2 = \pm 1,0 \cdot 10^{-6} \, \text{cm/s}$ erhöht. Die zu lösenden Gleichungen können eine kleinere Zeitschrittweite als beim ratenunabhängigen Modell erfordern, so dass diese auf $\Delta t = 1,0 \cdot 10^{-4} \, \text{s}$ abgemindert wird. Die Verkleinerung der Zeitschrittweite beim ratenabhängigen Modell bringt einen größeren Rechenaufwand mit sich.

Ergebnisse der Tests

In Abbildung 5.17 sind die Last-Verschiebungskurven des Zug- und des Drucktests mit dem ratenabhängigen (ra) Balkenmodell abgebildet. Zum Vergleich wurden die beiden Tests mit der schnelleren Belastung als in Abschnitt 5.1.3 auch mit dem ratenunabhängigen (ru) Balkenmodell simuliert und die Kurven miteingezeichnet. Sowohl im Zug- als auch im Drucktest steigt die Kurve mit dem ratenabhängigen Balkenmodell länger an als die Kurve mit dem ratenunabhängigen Modell und ein Anstieg der Traglast kann wiedergegeben werden. In beiden Tests ist das Verhältnis der Traglast mit dem ratenabhängigen Modell zur Traglast mit dem ratenabhängigen Modell zur Traglast mit dem ratenabhängigen Modell $f_{2,ra}^{tl}/f_{2,ru}^{tl}=1,15$. Zum Vergleich

⁵Zur Ermittlung von $\kappa_{\rm m}$ bei vorgegebenem $\mathcal{G}_{\rm h,ax}$ wird ebenfalls Gleichung (5.12) verwendet, obwohl beim ratenabhängigen Balkenmodell die bei axialer Belastung dissipierte Energie pro Einheit Balkenquerschnitt aufgrund des eventuell höheren $\kappa_{0,\rm ra}$ größer werden kann.

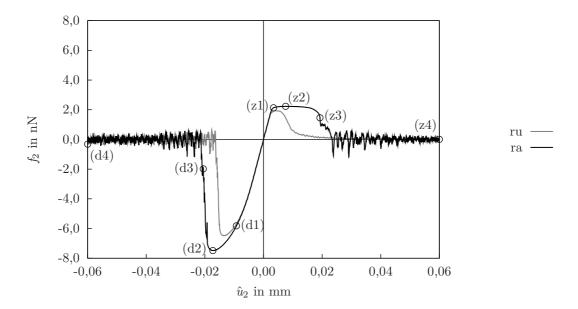


Abbildung 5.17: Last-Verschiebungsdiagramm der Zug- und der Drucktests mit dem ratenunabhängigen (ru) und dem ratenabhängigen (ra) elasto-schädigenden Balkenmodell.

wird die makroskopische nominale Verzerrungsrate $\dot{\varepsilon}_{22}^{\rm mak}=\hat{v}_2/L_2=3,33\cdot 10^{-8}\,1/{\rm s}$ als Quotient der aufgebrachten Belastungsgeschwindigkeit $\hat{v}_2=1,0\cdot 10^{-6}\,{\rm cm/s}$ und der angenommenen ursprünglichen Probenhöhe $L_2=30\,{\rm cm}$ ermittelt. Sie wird nun als axiale Verzerrungsrate $\dot{\varepsilon}_{\rm ax,M}=3,33\cdot 10^{-8}\,1/{\rm s}$ auf einen einzelnen Balken, wie er im Probekörper eingesetzt wird, fiktiv aufgebracht. Das daraus resultierende Verhältnis $\kappa_{0,{\rm ra}}/\kappa_0=1,13,$ das das Verhältnis der Balkenfestigkeit mit dem ratenabhängigen Modell zur Balkenfestigkeit mit dem ratenunabhängigen Modell darstellt, liegt nahe am Verhältnis der Traglasten in den Tests. Die Last-Verschiebungskurve des Zugtests mit dem ratenabhängigen Modell zeigt ein ausgedehntes Plateau. Anschließend fällt die Last stufenweise ab und es entsteht eine sichtbare Oszillation der Last. Bei den beiden Drucktests mit relativ sprödem Versagen unterscheiden sich die Formen der Kurven qualitativ kaum.

Das Versagensverhalten im Zugtest mit dem ratenabhängigen Balkenmodell zu den vier in Abbildung 5.17 markierten Zuständen (z1) bis (z4) ist in Abbildung 5.18 dargestellt. In Zustand (z1) sind einige meist vertikal ausgerichtete Balken bereits geschädigt. Bei Erreichen der Traglast in Zustand (z2) ist ein höheres Schädigungsniveau mit einer größeren Anzahl geschädigter Balken erkennbar, jedoch ohne dass sich eine deutliche Lokalisierung zeigt. Erst in Zustand (z3) ist die Lokalisierung sehr hoher Schädigung mit einem großen Riss auf der linken Probenseite und weiteren kleineren Rissen sichtbar. Bis zu Zustand (z4) am Ende der Last-Verschiebungskurve nimmt die Schädigung sowohl in Zonen mit lokalisierter hoher Schädigung als auch über die Probe verteilt zu. Das

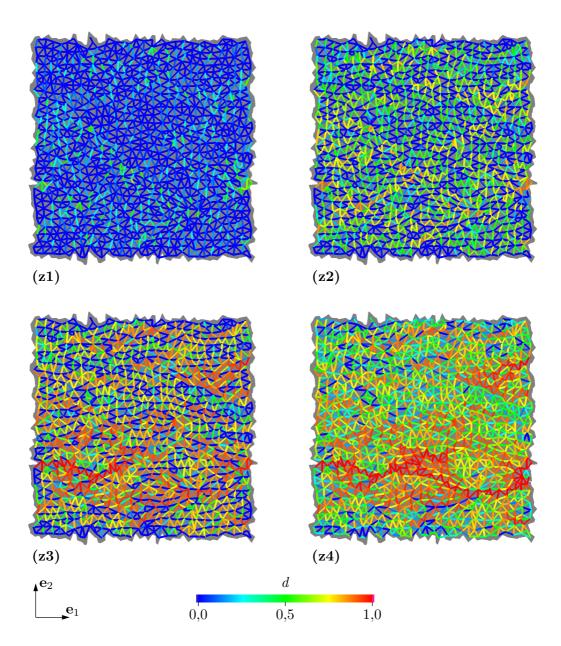


Abbildung 5.18: Versagensverhalten im Zugtest mit dem ratenabhängigen elasto-schädigenden Balkenmodell: Schädigung der Balken zu den vier in Abbildung 5.17 markierten Zuständen (z1), (z2), (z3) und (z4).

Probenversagen im Zugtest erfolgt in einem horizontal ausgerichteten welligen Riss, allerdings nun mit deutlicher Schädigung von Balken im gesamten Probekörper.

In Abbildung 5.19 ist das Versagensverhalten im Drucktest zu den vier markierten Zuständen (d1) bis (d4) aus Abbildung 5.17 dargestellt. In Zustand (d1) sind etliche meist horizontal bis diagonal ausgerichtete Balken geschädigt, die teilweise in diagonalen Bän-

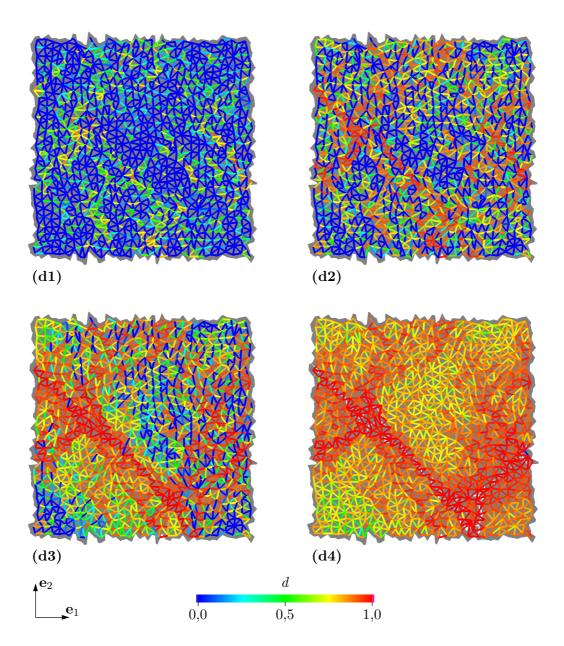


Abbildung 5.19: Versagensverhalten im Drucktest mit dem ratenabhängigen elastoschädigenden Balkenmodell: Schädigung der Balken zu den vier in Abbildung 5.17 markierten Zuständen (d1), (d2), (d3) und (d4).

dern angeordnet sind. In Zustand (d2), dem Erreichen der Traglast, ist ein höheres Schädigungsniveau vorhanden, wobei die Lokalisierung hoher Schädigung in diagonalen Bändern erkennbar ist. In Zustand (d3) sind mehrere kleine Risse sowie ein großer diagonaler Riss auf der linken Probenseite sichtbar, in dessen Umgebung deutliche Schädigung der Balken auch außerhalb der Lokalisierungszone auftritt. Zustand (d4) zeigt die im Drucktest versagte Probe am Ende der Last-Verschiebungskurve. Das Versagensmuster

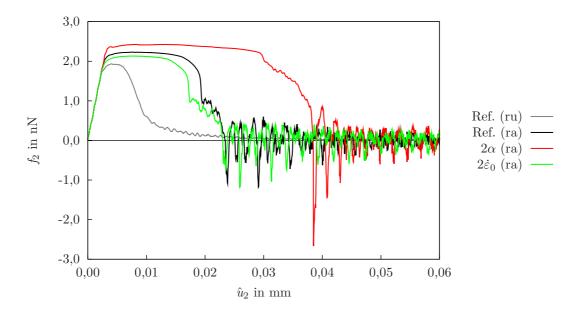


Abbildung 5.20: Last-Verschiebungsdiagramm der Zugtests mit dem ratenunabhängigen (ru) und dem ratenabhängigen (ra) elasto-schädigenden Balkenmodell: Variation der Parameter α und $\dot{\varepsilon}_0$.

besteht aus einem V-förmigen Rissbild mit Nebenrissen, wobei erhebliche Schädigung fast aller Balken des Probekörpers existiert.

Parametereinfluss

Im Folgenden wird der Einfluss der beiden Parameter α und $\dot{\varepsilon}_0$ auf das Last-Verschiebungsverhalten der Probe untersucht. Hierzu werden die zuletzt beschriebenen einaxialen Zug- und Drucktests mit den Last-Verschiebungskurven in Abbildung 5.17 als Referenz verwendet. Davon ausgehend wird in Tests mit dem ratenabhängigen Balkenmodell jeweils einer der beiden Parameter für alle Balken gleichermaßen abgeändert.

In Abbildung 5.20 sind als Referenz die Last-Verschiebungskurven der Zugtests aus Abbildung 5.17 sowie die Kurven der Zugtests mit zweifachem α und zweifachem $\dot{\varepsilon}_0$ dargestellt. Die Verdopplung von α hat für einen Balken mit gleicher axialer Verzerrungsrate $\dot{\varepsilon}_{\rm ax,M} > \dot{\varepsilon}_0$ den Schädigungsbeginn bei höherer äquivalenter Verzerrung zur Folge, vergleiche Abbildung 5.14 (b). Infolgedessen steigt die Last-Verschiebungskurve im Zugtest länger an und erreicht das 1,25-Fache der Traglast mit dem ratenunabhängigen Modell. Dieser Anstieg der Traglast liegt knapp unterhalb des Anstiegs der Balkenfestigkeit auf das 1,27-Fache, der beim Aufbringen der makroskopischen Verzerrungsrate als axiale Verzerrungsrate auf einen einzelnen Balken mit doppeltem α entsteht. Nach dem ausgeprägteren Plateau fällt die Last ab und zeigt eine Oszillation mit anfangs sehr großer

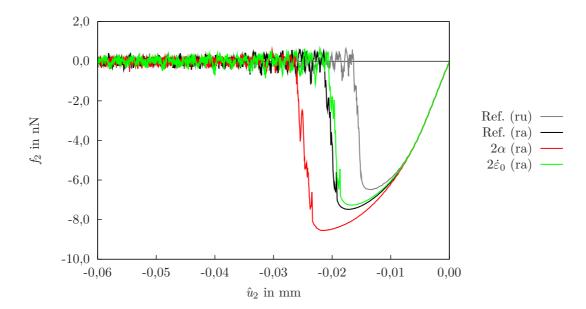


Abbildung 5.21: Last-Verschiebungsdiagramm der Drucktests mit dem ratenunabhängigen (ru) und dem ratenabhängigen (ra) elasto-schädigenden Balkenmodell: Variation der Parameter α und $\dot{\varepsilon}_0$.

Amplitude, die dann aber abnimmt. Da die Verdopplung von α eine kleinere Zeitschrittweite bei doppeltem α auf $\Delta t = 5,0 \cdot 10^{-5}\,\mathrm{s}$ reduziert. Die Verdopplung von $\dot{\varepsilon}_0$ bewirkt für einen Balken erst bei doppelter axialer Verzerrungsrate den Beginn des Festigkeitsanstiegs und damit bei gleicher axialer Verzerrungsrate $\dot{\varepsilon}_{\mathrm{ax,M}} > 2\dot{\varepsilon}_0$ einen geringeren Festigkeitsanstieg, vergleiche Abbildung 5.14 (a). Aus diesem Grund ist der Anstieg der Traglast im Zugtest geringer und die Last erreicht lediglich das 1,10-Fache des ratenunabhängigen Modells. Dies liegt oberhalb des Festigkeitsanstiegs eines Balkens auf das 1,05-Fache, der beim Aufbringen der makroskopischen Verzerrungsrate als axiale Verzerrungsrate auf einen Balken mit doppeltem $\dot{\varepsilon}_0$ auftritt. Im Zugtest fällt das Plateau etwas kürzer aus und es verbleibt ebenfalls eine Oszillation der Last nach dem Versagen.

In Abbildung 5.21 sind als Referenz die bereits in Abbildung 5.17 gezeigten Last-Verschiebungskurven der Drucktests sowie die Kurven der Drucktests mit zweifachem α und zweifachem $\dot{\varepsilon}_0$ dargestellt. Wie im Zugtest steigt die Kurve bei doppeltem α länger an, wobei sie das 1,32-Fache der Traglast mit dem ratenunabhängigen Modell erreicht. Bei doppeltem $\dot{\varepsilon}_0$ fällt der Anstieg der Traglast auch hier etwas geringer aus. Dabei wächst die Last auf das 1,12-Fache der Traglast mit dem ratenunabhängigen Modell an. In den Drucktests unterscheiden sich die Formen der vier Kurven qualitativ nicht sehr stark.

Abschließend sind in Tabelle 5.1 der Anstieg der Balkenfestigkeit sowie der Anstieg der Traglast im Zug- und im Drucktest vom ratenunabhängigen zum ratenabhängigen Mo-

Parameter	$\frac{\kappa_{0,\mathrm{ra}}}{\kappa_0}$ (Balken)	$\frac{f_{2,\mathrm{ra}}^{\mathrm{tl}}}{f_{2,\mathrm{ru}}^{\mathrm{tl}}}$ (Zugtest)	$\frac{f_{2,\mathrm{ra}}^{\mathrm{tl}}}{f_{2,\mathrm{ru}}^{\mathrm{tl}}} $ (Drucktest)
Ref.	1,13	1,15	1,15
2α	$1,\!27$	1,25	1,32
$2\dot{arepsilon}_0$	1,05	1,10	1,12

Tabelle 5.1: Anstieg der Balkenfestigkeit und der Traglast im Zug- und im Drucktest vom ratenunabhängigen (ru) zum ratenabhängigen (ra) elasto-schädigenden Balkenmodell: Variation der Parameter α und $\dot{\varepsilon}_0$.

dell für die unterschiedlichen Parameter zusammengefasst. Qualitativ wird der Anstieg der Balkenfestigkeit im Anstieg der Traglast sowohl im Zug- als auch im Drucktest wiedergegeben. Quantitativ unterscheidet sich der Anstieg auf Probenebene vom Anstieg auf Balkenebene.

6 Untersuchungen an granularen Materialien

Zusammenfassung: In diesem Kapitel werden Konzeptexperimente an einem granularen Modellmaterial aus Sechskantschraubenmuttern vorgestellt. In einaxialen Druckversuchen zeigt das Modellmaterial eine Kombination aus diffusem Aufweiten und Bänderanordnungen mit erhöhter Deformation sowie Versagen in Scherbändern. Durch die direkte Gegenüberstellung der Konzeptexperimente und deren Simulationen wird deutlich, dass die entwickelte Methode diese charakteristischen Eigenschaften des granularen Modellmaterials wiedergeben kann.

In den beiden Kapiteln 6 und 7 soll nun die Leistungsfähigkeit der entwickelten Methode an Beispielen untersucht werden. Als Beispiel aus der ersten typischen Anwendungsklasse für Diskrete-Element-Methoden, den Materialien aus nichtverbundenen festen Teilchen, werden in diesem Kapitel granulare Materialien betrachtet. Diese Arbeit beschränkt sich auf granulare Materialien aus nicht aneinander haftenden Teilchen in raumfüllender bzw. dichter Anordnung. Im nächsten Kapitel werden Beispiele aus der zweiten typischen Anwendungsklasse, den heterogenen Festkörpern aus haftend miteinander verbundenen, festen Teilchen, vorgestellt.

Das Verhalten von granularen Materialien aus nicht aneinander haftenden Teilchen wird durch die Eigenschaften der einzelnen Teilchen und deren Anordnung bestimmt. Dabei hat die Art der externen Belastung großen Einfluss auf die Materialantwort. In Abhängigkeit hiervon können bei granularen Materialien drei Zustände unterschieden werden: ähnlich einem Festkörper, einem Fluid oder einem Gas, siehe z.B. PÖSCHEL UND SCHWAGER (2005). In den verschiedenen Zuständen können unterschiedliche charakteristische Phänomene auftreten. Bei hoher Packungsdichte beispielsweise erfolgt die Lastabtragung häufig über Kraftketten und es können sich Gewölbe bilden. Zudem kann bei granularen Materialien ein dilatantes Verhalten beobachtet werden. Deformation lokalisiert oft in Bändern mit endlicher Breite, wobei die Teilchengröße als intrinsische Längenskala eine entscheidende Rolle spielt. Zur Untersuchung des Verhaltens können

die Anzahl und die Orientierung der Kontakte betrachtet werden. Bei extern angeregtem granularem Material kann zum Beispiel Entmischung und Musterbildung auftreten, wobei die granulare Temperatur ein Maß zur Untersuchung des Verhaltens darstellt, vergleiche z.B. Schäfer (1996).

Zur Modellierung granularer Materialien werden eine Vielzahl unterschiedlicher Methoden und Kombinationen von Methoden verwendet. Beispiele sind die verschiedenen Arten der Diskrete-Element-Methode, vergleiche Abbildung 3.1. Während bei seltenen und kurzen Partikelkollisionen ereignisgesteuerte Verfahren effizient sind, wird bei dichten Partikelanordnungen häufig die hier verwendete Art der Diskrete-Element-Methode eingesetzt. Weitere Beispiele sind auf der Kontinuumsmechanik basierende Methoden, Monte-Carlo-Simulationen und Zelluläre Automaten. Eine Übersicht wird z. B. in SCHÄ-FER (1996) und PÖSCHEL UND SCHWAGER (2005) gegeben.

Das Ziel dieses Kapitels ist es, die Leistungsfähigkeit der Methode bei der Simulation granularer Materialien zu testen und zu analysieren. Insbesondere sollen dabei die Modellierungseigenschaften der polygonalen Elementform sowie der entwickelten Kontaktmodelle betrachtet werden. Um dies möglichst direkt untersuchen zu können, werden Konzeptexperimente an einem vereinfachten Modellmaterial angesehen. Während es eine Vielzahl konzeptioneller Experimente mit runden Teilchen an einzelnen Partikeln z.B. in Goldsmith (1960) und Gorham und Kharaz (2000) sowie an verschiedenartigen Partikelanordnungen mit unterschiedlichen Randbedingungen z.B. in Schneebell (1957), Veje u. A. (1999) und O'Sullivan u. A. (2004) gibt, sind dem Autor keine Tests mit polygonförmigen Partikeln bekannt. Daher werden eigene Konzeptexperimente an einem granularen Modellmaterial aus polygonförmigen Teilchen durchgeführt. In Abschnitt 6.1 wird der Aufbau der Experimente und in Abschnitt 6.2 der Aufbau deren Simulationen dargestellt. Anschließend werden in Abschnitt 6.3 die Ergebnisse aus Experimenten und Simulationen gegenübergestellt.

6.1 Experimente an Modellmaterial – Aufbau

Eine Anforderung an das Modellmaterial ist, dass es aus polygonförmigen, nicht aneinander haftenden Teilchen aufgebaut ist. Dabei sollen einerseits die Unsicherheiten in
den Eigenschaften der Teilchen und deren Anordnung möglichst gering sein. Andererseits soll die Probenerstellung und die Durchführung der Experimente möglichst einfach
sein. Die Experimente sollen zudem als ebene Problemstellungen abbildbar sein. Um
diese Anforderungen zu erfüllen, werden herkömmliche Sechskantschraubenmuttern aus
Stahl als Teilchen gewählt. Diese werden in regelmäßiger Anordnung auf eine Unter-

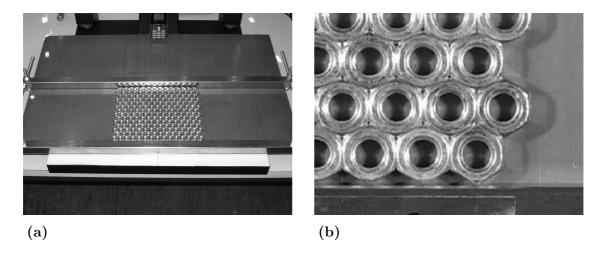


Abbildung 6.1: Experimente an granularem Modellmaterial: (a) Probe in der Prüfmaschine und (b) Ausschnitt einer Probe.

grundplatte aus Stahl gelegt. Die Proben werden in einer Prüfmaschine liegend durch zwei Lastplatten mit einaxialem Druck belastet, wie in Abbildung 6.1 gezeigt.

Die Sechskantmuttern der Größe M 8 besitzen in der Aufsicht eine regelmäßige hexagonale Form, die in Dickenrichtung annähernd konstant ist, und haben ein Gewinde in der Mitte. Im Mittel beträgt die Breite (der Abstand zweier paralleler gegenüberliegender Seiten) in der Aufsicht 1,27 cm, die Tiefe in Dickenrichtung T=0,62 cm und die Partikelmasse m=4,61 g. Zum einen werden Probekörper aus 114 Sechskantmuttern getestet, bei denen in die regelmäßige Teilchenanordnung eine gezielte Fehlstelle eingebaut ist, siehe Abbildung 6.2 (a). Zum anderen werden regelmäßige Anordnungen ohne Fehlstelle aus 217 Partikeln untersucht, wie Abbildung 6.2 (b) dargestellt.

Die Reibungskoeffizienten werden in vereinfachten experimentellen Tests vorab separat gemessen. Der Gleitreibungskoeffizient zwischen Sechskantmutter und Untergrundplatte wird bei Bewegung einzelner Teilchen auf der Untergrundplatte zu $\mu_{\rm S-U}=0.258$ ermittelt. Der Gleitreibungskoeffizient zwischen Sechskantmutter und Lastplatte wird zu $\mu_{\rm S-L}=0.262$ bestimmt. Zwischen den Sechskantmuttern wird der Haftreibungskoeffizient gemessen und anschließend der Gleitreibungskoeffizient durch Abmindern des gemessenen Haftreibungskoeffizienten mit $\mu_{\rm S-S}=0.294$ abgeschätzt.

Zu Beginn der Experimente befinden sich alle Teilchen der Probe in Ruhelage. Die einaxiale, verschiebungsgesteuerte Druckbelastung wird durch die vorgegebene Bewegung der oberen Lastplatte mit konstanter Geschwindigkeit $\hat{v}_2 = -6,23\cdot 10^{-4}\,\mathrm{m/s}$ aufgebracht. Die restlichen Freiheitsgrade der oberen Lastplatte sowie alle Freiheitsgrade der unteren Lastplatte werden festgehalten. In Abbildung 6.2 (c) sind die Parameter der Experimente zusammengefasst.

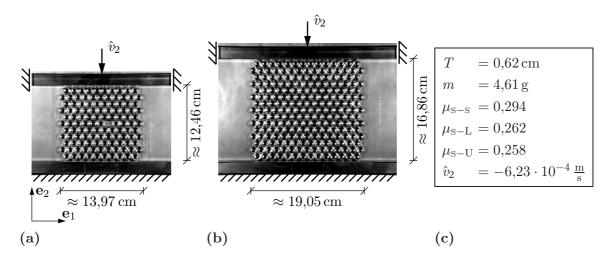


Abbildung 6.2: Experimente an granularem Modellmaterial: (a) Aufsicht der Probe mit Fehlstelle, (b) Aufsicht der Probe ohne Fehlstelle und (c) Parameter.

6.2 Simulationen von Modellmaterial – Aufbau

In den Simulationen der Experimente an granularem Modellmaterial aus Abschnitt 6.1 wird jede einzelne Sechskantmutter sowie die beiden Lastplatten explizit durch ein diskretes Element abgebildet, siehe Abbildung 6.3 (a) und (b). Die diskreten Elemente approximieren die wirkliche Form der Sechskantmuttern als ausgefüllte hexagonale Elemente. Sie besitzen die identische, regelmäßige Geometrie mit der Breite 1,27 cm und der Tiefe T=0,62 cm sowie identische, über das Element konstante Dichte $\rho=5,32\,\mathrm{g/cm^3}$. Die Dichte des diskreten Elements wird durch Verschmieren der Teilchenmasse über die ausgefüllte hexagonale Geometrie bestimmt, da das Gewinde in der Mitte der Sechskantmuttern sowie die leichten Abfasungen der Teilchenkanten vernachlässigt werden. Das Massenträgheitsmoment eines diskreten Elements ist somit allerdings kleiner als das einer Sechskantmutter, da bei der Sechskantmutter die Masse im äußeren Bereich des Partikels angelagert ist. Alle Imperfektionen in Geometrie und Material der Teilchen bleiben unberücksichtigt. Beide Lastplatten werden jeweils als perfektes rechteckiges Element modelliert.

Die hexagonalen diskreten Elemente werden in perfekter Anordnung zur Approximation der wirklichen Anordnung der Sechskantmuttern positioniert. Die Anordnungen sind regelmäßig und raumfüllend, wenn man von der Fehlstelle absieht. Im Ausgangszustand hat ein typisches Element im Inneren einer Probe sechs Kontaktpartner, d. h. die Koordinationszahl $n_{\text{koz}} = 6$, wobei die Kontakte anisotrop in drei Achsen orientiert und ohne Überschneidung sind, vergleiche Tabelle 3.4. Die Lastplatten sind jeweils so angeordnet, dass sie die Probe im Ausgangszustand ohne Überschneidung berühren.

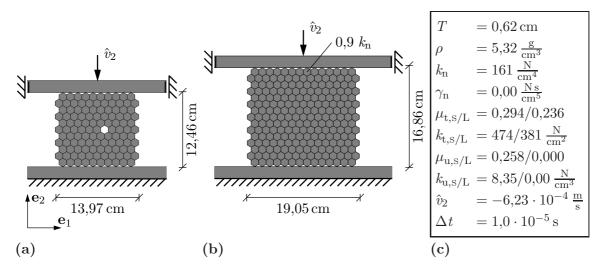


Abbildung 6.3: Simulationen von granularem Modellmaterial: (a) Aufsicht der Probe mit Fehlstelle, (b) Aufsicht der Probe ohne Fehlstelle und (c) Parameter.

In den Experimenten interagieren die einzelnen Sechskantmuttern durch Kontakt miteinander. Zudem wirken auf die Teilchen Kräfte und Momente aus dem Kontakt mit den
Lastplatten sowie mit der Untergrundplatte. Zur Modellierung werden das Kontaktmodell für die Normalkraft aus Abschnitt 4.2.2 und das Kontaktmodell für die Tangentialkraft aus Abschnitt 4.3.2 sowie das Kontaktmodell für die Kraft zwischen Partikel und
ebenem Untergrund aus Abschnitt 4.4.2 eingesetzt. Da die Schraubenmuttern trocken
sind, bleiben die Kräfte und Momente aus Haftung der Partikel aneinander sehr klein
und werden nicht modelliert.

Die Parameter der Interaktionsmodelle werden auf verschiedenen Grundlagen festgelegt. Als Reibungskoeffizienten werden die Werte aus den vereinfachten experimentellen Tests eingesetzt, siehe Abschnitt 6.1. Der tangentiale Reibungskoeffizient der Hexagone wird zu $\mu_{t,s}=0.294$ und der tangentiale Reibungskoeffizient der Lastplatten zu $\mu_{t,L}=0.236$ bestimmt. Damit ergeben sich nach Gleichung (4.17) die Reibungskoeffizienten zwischen zwei Hexagonen sowie zwischen Hexagon und Lastplatte zu den ermittelten Werten μ_{s-s} und μ_{s-L} aus Abbildung 6.2 (c). Der Reibungskoeffizient mit der Untergrundplatte wird nach μ_{s-U} aus Abbildung 6.2 (c) zu $\mu_{u,s}=0.258$ angesetzt und die Erdbeschleunigung zur Bestimmung der Drucknormalspannung $\sigma_{\rm u}$ zwischen Partikel und Untergrund zu 9,81 m/s². Aufgrund der Approximation einer Sechskantmutter als ausgefülltes hexagonales Element unterscheidet sich die kontaktierende Fläche eines Partikels mit dem ebenen Untergrund in Modell und Experiment. Dabei entsteht bei Rotation ein kleineres Moment aus Gleitreibung auf ein diskretes Element als auf eine Sechskantmutter, da die Reibspannungen über die ganze Fläche verschmiert anstatt im äußeren Bereich des Teilchens mit großem Hebelarm konzentriert auftreten. Die Reibung zwischen den Lastplatten und dem ebenen Untergrund wird mit $\mu_{u,L} = 0,000$ vernachlässigt.

Die Strafparameter und Steifigkeiten der Kontaktmodelle werden hingegen nach gewissen Anforderungen vorgegeben. In Normalenrichtung wird nach Ausprobieren verschiedener Werte $k_{\rm n}=161\,{\rm N/cm^4}$ gewählt, so dass die maximale Überschneidung zweier Elemente in den Simulationen kleiner als drei Prozent der Hexagonfläche bleibt, was hier als geringe Überschneidung akzeptiert wird. Die Steifigkeit in Tangentialrichtung wird zu $k_{\rm t,s}=474\,{\rm N/cm^2}$ und $k_{\rm t,L}=381\,{\rm N/cm^2}$ festgelegt. Damit überschreitet in den Simulationen der maximale Betrag der elastischen Relativverschiebung in Tangentialrichtung 0,004 cm nicht. Für den Kontakt mit dem Untergrund wird $k_{\rm u,s}=8,35\,{\rm N/cm^3}$ festgesetzt, so dass der Betrag der elastischen Relativverschiebung zwischen Partikel und Untergrund an einem Gaußpunkt 0,001 cm nicht übertreffen kann. Viskose Dämpfung wird nicht modelliert, so dass $\gamma_{\rm n}=0,00\,{\rm N\,s/cm^5}$ gesetzt wird. Die Parameter der Interaktionsmodelle sind für alle Hexagone identisch, lediglich beim Probekörper ohne Fehlstelle wird $k_{\rm n}$ eines Partikels um zehn Prozent abgemindert, um die Symmetrie der Problemstellung aufzuheben, wie in Abbildung 6.3 (b) markiert.

Am Anfang der Simulationen sind die Geschwindigkeiten aller Freiheitsgrade sowie deren Zeitableitungen null. Die Randbedingungen werden nach den Experimenten gewählt und die Zeitschrittweite zu $\Delta t = 1,0 \cdot 10^{-5} \,\mathrm{s}$ festgelegt. In Abbildung 6.3 (c) sind die in den Simulationen verwendeten Parameter zusammengefasst.

6.3 Experimente und Simulationen an Modellmaterial – Ergebnisse

Im Folgenden werden die Ergebnisse der Experimente aus Abschnitt 6.1 und deren Simulationen aus Abschnitt 6.2 gegenübergestellt. Dabei werden zunächst die Druckversuche an Probekörpern mit Fehlstelle in Abschnitt 6.3.1 und danach an Probekörpern ohne Fehlstelle in Abschnitt 6.3.2 betrachtet. Abschließend werden die Ergebnisse in Abschnitt 6.3.3 zusammengefasst.

6.3.1 Druckversuche an Probekörpern mit Fehlstelle

Das Versagensverhalten des Experiments am Probekörper mit Fehlstelle wird in Abbildung 6.4 (links) gezeigt und wie erwartet von der Fehlstelle bestimmt. Das Modellmaterial reagiert auf die Druckbelastung mit seitlichem Aufweiten, indem sich Kontakte mit der Normalen in \mathbf{e}_1 -Richtung öffnen. Von Beginn an tritt in diagonalen, von der Fehl-

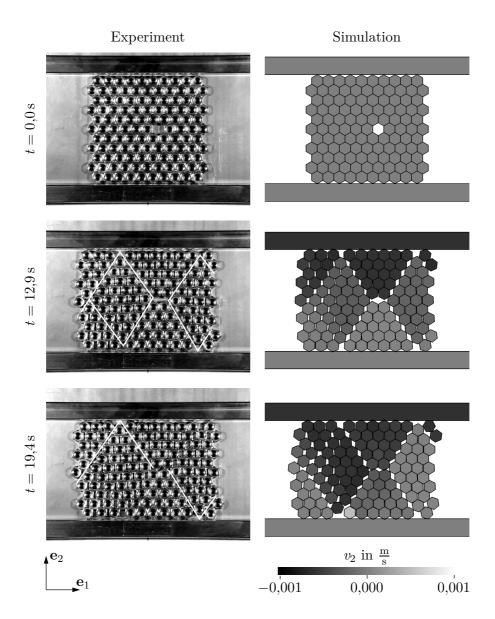


Abbildung 6.4: Versagensverhalten der Proben aus granularem Modellmaterial mit Fehlstelle zu drei Zeitpunkten: (links) Experiment mit markierten Bändern größerer Deformation bei $t=12.9\,\mathrm{s}$ und markierten Scherbändern bei $t=19.4\,\mathrm{s}$ sowie (rechts) Simulation mit Geschwindigkeit in \mathbf{e}_2 -Richtung.

stelle ausgehenden Bändern größere Deformation¹ auf als in der übrigen Probe. Diese Bänder sind zum Zeitpunkt $t=12.9\,\mathrm{s}$ markiert. Das Muster aus zwei sich kreuzenden, zickzackförmigen Reihen bildet sich aus, da ein dreieckiger Block aus Sechskantmuttern oberhalb der Fehlstelle in diese hineingeschoben wird. Die Bänder setzen sich in die

¹Die Deformation bezeichnet hier nicht die Verformung der einzelnen Partikel. Vielmehr wird hier die Deformation der Probe aus granularem Modellmaterial beschrieben, die durch Relativverschiebungen und -verdrehungen der Partikel entsteht.

untere Probenhälfte fort und werden an den Lastplatten reflektiert. Die Neigung der Bänder ist dabei durch die regelmäßige Geometrie und Anordnung der Sechskantmuttern vorgegeben. Zwischen den Bändern entstehen einzelne Blöcke des Probekörpers, in denen die Relativbewegungen kleiner sind als in den Bändern.

Bei weiterer Belastung wird eine der beiden zickzackförmigen Reihen dominant. Dort gleiten die einzelnen Partikel oberhalb eines diagonalen Bands über die Ecken der darunterliegenden Partikel und es entstehen Scherbänder. In Abbildung 6.4 (links) ist zum Zeitpunkt $t=19.4\,\mathrm{s}$ die zickzackförmige Scherbandstruktur als Versagensmuster gekennzeichnet. Die anfängliche Fehlstelle ist bereits fast verschwunden. Die Bewegung der Sechskantmuttern erfolgt dabei hauptsächlich durch Translation. Lediglich dort, wo die Bänder auf einen seitlichen Rand oder eine Lastplatte treffen, können größere Rotationen beobachtet werden. Im weiteren Verlauf des Experiments schließen sich in den Scherbändern entstandene Lücken und die Sechskantmuttern formieren sich wieder zu einer relativ regelmäßigen Anordnung.

Das Experiment an einem zweiten Probekörper zeigt ein identisches Scherbandmuster. Die genauen Bewegungen der einzelnen Partikel sind jedoch, trotz der einfachen Teilchengeometrie, deren regelmäßiger Anordnung und der gezielten Versagensinitierung durch die Fehlstelle, in den beiden Experimenten nicht identisch. Sie sind aufgrund der vorhandenen, aber unbekannten Imperfektionen der Teilchen und deren Anordnung sowie des Versuchsaufbaus und der Versuchsdurchführung nicht reproduzierbar.

Das Versagensverhalten in der Simulation ist in Abbildung 6.4 (rechts) dargestellt. Wie in den Experimenten wird es von der Fehlstelle bestimmt. Das seitliche Aufweiten aufgrund der Druckbelastung erfolgt überwiegend in diagonalen Bändern, wie zum Zeitpunkt $t=12,9\,\mathrm{s}$ erkennbar. An den Partikelgeschwindigkeiten in \mathbf{e}_2 -Richtung kann man deutlich die einzelnen Blöcke des Probekörpers unterscheiden. Das Muster aus zwei sich kreuzenden, zickzackförmigen Reihen entspricht dem in den Experimenten, wobei in der Simulation etwas weniger verteilte Deformation auftritt. Die exakte Bewegung jedes einzelnen Partikels im Experiment kann in der Simulation jedoch nicht genau abgebildet werden.

Bei weiterer Belastung wird ebenfalls eine der beiden Reihen dominant und es bilden sich Scherbänder, auf denen die einzelnen Blöcke der Probe abrutschen, wie in Abbildung $6.4\,(\mathrm{rechts})$ zum Zeitpunkt $t=19,4\,\mathrm{s}$ sichtbar. Allerdings wird in der Simulation nicht die gleiche zickzackförmige Kette zur Scherbandreihe wie in den experimentellen Tests. Wie in den Experimenten besteht die Bewegung der Partikel hauptsächlich aus Translation. Im weiteren Verlauf der Simulation schließen sich in den Scherbändern entstandene Lücken ebenfalls und eine relativ regelmäßige Anordnung der Partikel formt sich.

In Abbildung 6.5 ist die Translationsgeschwindigkeit der diskreten Elemente zum Zeit-

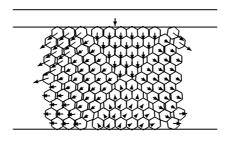


Abbildung 6.5: Translationsgeschwindigkeit der Partikel in der Simulation der Probe aus granularem Modellmaterial mit Fehlstelle zum Zeitpunkt t = 12,9 s.

punkt $t=12.9\,\mathrm{s}$ mit Pfeilen visualisiert. Hier wird deutlich, wie der dreieckige Block aus Partikeln oberhalb der Fehlstelle keilförmig in diese eindringt und dadurch das Muster aus zwei zickzackförmigen Reihen festgelegt wird. Der dreieckige Block unterhalb der Fehlstelle bewegt sich fast nicht, während die übrigen Blöcke zur Seite oder seitlich nach unten geschoben werden.

In Abbildung 6.6 ist der Ausschnitt der Fehlstelle zum Zeitpunkt $t=19,4\,\mathrm{s}$ größer dargestellt. Darin werden die Unterschiede zwischen Experiment und Simulation nochmals sichtbar, die durch die Bildung der Scherbänder aus den verschiedenen zickzackförmigen Reihen mit größerer Deformation entstehen. Die Fehlstelle wird auf unterschiedliche Art geschlossen, so dass sich im Folgenden unterschiedliche Partikelanordnungen ausbilden. Während sich im Experiment die beiden Partikel oberhalb der Fehlstelle rechts von den beiden unterhalb der Fehlstelle befinden, sind diese beiden Partikel in der Simulation links der beiden darunterliegenden. Für die Unterschiede zwischen Experiment und Simulation kann es verschiedene Gründe geben. Zum einen werden in der Simulation die Sechskantmuttern als ausgefüllte hexagonale Elemente approximiert und Imperfektionen nicht berücksichtigt. Zum anderen können die Abweichungen aber aus den Modellen für den in der Wirklichkeit komplexen Teilchenkontakt stammen.

6.3.2 Druckversuche an Probekörpern ohne Fehlstelle

Für die experimentellen Tests an drei Probekörpern ohne Fehlstelle ist das Versagensverhalten in den Abbildungen 6.7 (links), 6.7 (rechts) und 6.8 (links) gezeigt. Bei der "perfekten" Teilchenanordnung ohne Fehlstelle wird die Position der Bänder mit größerer Deformation durch Imperfektionen bestimmt. Daher sind die Versagensmuster in den drei Experimenten zwar gleichartig, aber dennoch unterschiedlich. Wie bei der Probe mit Fehlstelle aus Abschnitt 6.3.1 reagiert das Modellmaterial auf die Druckbelastung mit seitlichem Aufweiten, indem sich Kontakte mit der Normalen in \mathbf{e}_1 -Richtung öffnen.

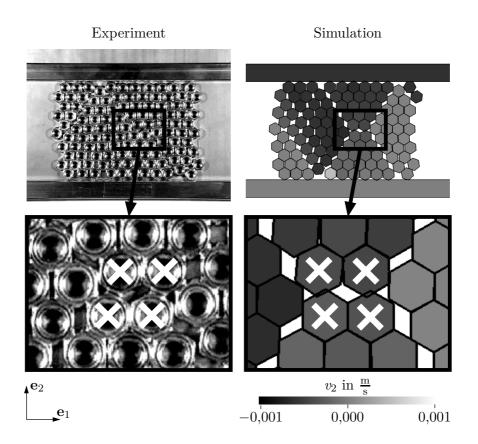


Abbildung 6.6: Ausschnitt um die Fehlstelle der Proben aus granularem Modellmaterial zum Zeitpunkt $t=19.4\,\mathrm{s}$ mit Markierung der gleichen vier Partikel: (links) Experiment und (rechts) Simulation mit Geschwindigkeit in \mathbf{e}_2 -Richtung.

Allerdings ist dies anfangs diffuser über den Probekörper verteilt als bei der Probe mit Fehlstelle. Dabei formen sich bei allen drei Probekörpern zickzackförmige Ketten aus Bändern, in denen die Deformation größer ist. Es treten sowohl sich kreuzende als auch parallel nebeneinander liegende Bänder auf, die zudem unterschiedlich stark ausgeprägt sind.

Bei weiterer Belastung wird bei allen drei Probekörpern eine der Ketten dominant und bildet das primäre Versagensmuster aus einer zickzackförmigen Scherbandreihe, wie zum Zeitpunkt $t=22,4\,\mathrm{s}$ markiert. Das Versagensmuster ist für alle drei Proben von gleicher Art, die Positionen der Scherbänder sind aber nicht identisch. Die einzelnen Blöcke mit geringeren Relativbewegungen der Partikel rutschen auf den Scherbändern ab. Im Anschluss daran werden in den Scherbändern entstandene Lücken geschlossen, so dass sich wieder relativ regelmäßige Anordnungen der Sechskantmuttern formieren, die allerdings nicht mehr so dicht gepackt sind wie die anfänglichen Anordnungen.

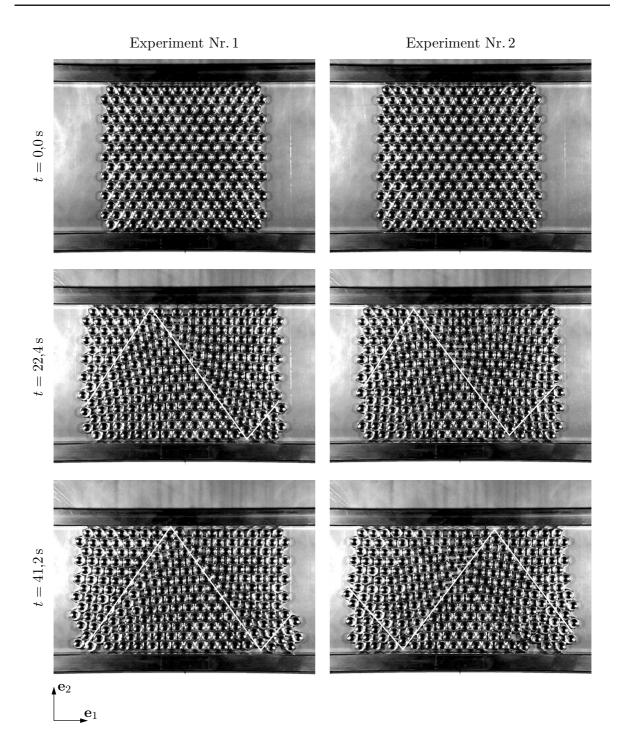


Abbildung 6.7: Versagensverhalten der Proben aus granularem Modellmaterial ohne Fehlstelle zu drei Zeitpunkten: (links) Experiment Nr. 1 und (rechts) Experiment Nr. 2 mit markierten Scherbändern.

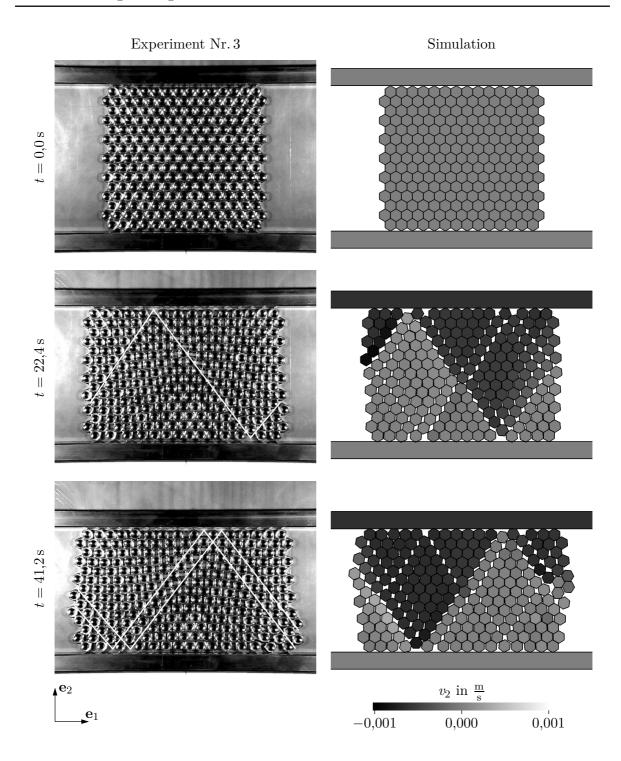


Abbildung 6.8: Versagensverhalten der Proben aus granularem Modellmaterial ohne Fehlstelle zu drei Zeitpunkten: (links) Experiment Nr. 3 mit markierten Scherbändern und (rechts) Simulation mit Geschwindigkeit in **e**₂-Richtung.

Das folgende Verhalten ähnelt dem Anfänglichen. Es ist wieder eine Kombination aus diffusem Aufweiten und Bändern mit größerer Deformation, allerdings unregelmäßiger als zu Beginn. Bei allen drei Probekörpern bilden sich schließlich aus diesen Bändern wieder Scherbänder heraus, wie zum Zeitpunkt $t=41,2\,\mathrm{s}$ markiert. Dieses sekundäre Versagensmuster ist in allen drei Experimenten unterschiedlich und jeweils versetzt positioniert zur primären Scherbandreihe. In Experiment Nr. 3 entstehen zwei zickzackförmige Scherbandreihen nebeneinander. Im weiteren Verlauf der Tests werden die Anordnungen zunehmend ungeordneter, wobei die Kombination aus diffusem Aufweiten und Scherbändern wiedererkennbar ist. Die Bewegung der Sechskantmuttern besteht vor Einstellen des primären Versagensmusters hauptsächlich aus Translation. Im weiteren Verlauf der Tests treten vermehrt Rotationen auf, insbesondere dort, wo die Bänder auf einen seitlichen Rand oder eine Lastplatte treffen, sowie in den Scherbändern.

Das Versagensverhalten in der Simulation ist in Abbildung 6.8 (rechts) dargestellt. Die Simulation zeigt wie die Experimente anfänglich eine Kombination aus diffusem seitlichem Aufweiten der Probe und zickzackförmigen Reihen mit größerer Deformation. Bei weiterer Belastung wird ebenfalls eine Reihe dominant und es entsteht eine zickzackförmige Scherbandreihe als primäres Versagensmuster. Zum Zeitpunkt $t=22,4\,\mathrm{s}$ sind die einzelnen Blöcke anhand der Geschwindigkeit der Partikel in e_2 -Richtung erkennbar, die auf den Scherbändern abrutschen. Das Muster besitzt die gleiche Art wie in den experimentellen Tests. Allerdings ist die Position der einzelnen Scherbänder um einen bzw. zwei Partikel nach links verschoben. Da mit der geringeren Kontaktsteifigkeit eines Partikels eine leichte Asymmetrie in die Probe eingebracht wurde, ist die Systemantwort nicht symmetrisch. Anschließend werden in den Scherbändern entstandene Lücken geschlossen und eine relativ regelmäßige Anordnung der Partikel formiert sich.

Das folgende Verhalten ist wie in den Experimenten erneut eine Kombination aus diffusem Aufweiten und Bändern mit größerer Deformation. Aus diesen bildet sich schließlich eine zweite zickzackförmige Scherbandreihe als sekundäres Versagensmuster, wie zum Zeitpunkt $t=41,2\,\mathrm{s}$ sichtbar. Im weiteren Verlauf werden wieder in den Scherbändern entstandene Lücken geschlossen und die Kombination aus diffuser Ausweitung und Scherbändern wiederholt sich in zunehmend unstrukturierter Weise. Die Bewegung der diskreten Elemente erfolgt ebenfalls zu Beginn hauptsächlich durch Translation, während später, insbesondere in den Scherbändern, größere Rotationen auftreten.

In Abbildung 6.9 (a) ist die Translationsgeschwindigkeit der Partikel aus der Simulation zu einem frühen Zeitpunkt t=5,9 s mit Pfeilen visualisiert. Hier wird das anfänglich diffuse Aufweiten der Probe deutlich. Die Geschwindigkeit ändert sich relativ gleichmäßig von Partikel zu Partikel und ist noch nicht blockweise verteilt mit deutlichen Sprüngen an den Bändern lokalisierter Deformation. In Abbildung 6.9 (b) sind die Partikelgeschwindigkeiten während der Entwicklung der ersten Scherbandreihe zum Zeitpunkt

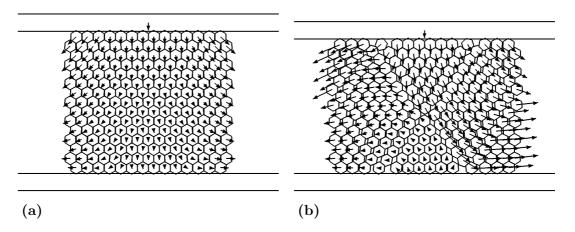


Abbildung 6.9: Translationsgeschwindigkeit der Partikel in der Simulation der Probe aus granularem Modellmaterial ohne Fehlstelle zum Zeitpunkt (a) $t = 5.9 \,\mathrm{s}$ und (b) $t = 20.2 \,\mathrm{s}$.

 $t=20.2\,\mathrm{s}$ dargestellt. Hier ist das Abgleiten in den entstehenden Scherbändern klar erkennbar.

6.3.3 Zusammenfassung

Durch die direkte Gegenüberstellung der durchgeführten Konzeptexperimente und der Simulationen konnte gezeigt werden, dass die polygonalen diskreten Elemente mit den vorgestellten Kontaktmodellen das Verhalten des granularen Modellmaterials aus eckigen Teilchen in Druckversuchen qualitativ zufriedenstellend abbilden können. Dabei können die wesentlichen Eigenschaften der Materialantwort wie die Kombination aus diffusem Aufweiten und Bänderanordnungen mit erhöhter Deformation sowie schließlich das Versagen in Scherbändern dargestellt werden. Dies ist sowohl für Probekörper mit einer gezielten Fehlstelle, die das Verhalten dominiert, als auch für Probekörper ohne Fehlstelle der Fall.

Die genaue Position der Bandstrukturen und die exakte Bewegung der einzelnen Partikel konnte in den Simulationen nicht wiedergegeben werden. Ein Grund hierfür sind zum einen die Imperfektionen, aufgrund derer auch bei verschiedenen Experimenten zwar die Art des Versagensverhaltens, nicht jedoch die Lage der einzelnen Teilchen reproduzierbar war. Um die Imperfektionen in den Simulationen zu berücksichtigen, sind genauere Messungen nötig. Zum anderen können die Unterschiede zwischen Experiment und Simulation auch aus der relativ einfachen Methode aus starren polygonalen Partikeln mit den Kontaktmodellen resultieren, da die Kontaktvorgänge bei eckigen Partikeln in der Wirklichkeit komplex sind. Für eine detailliertere Untersuchung der Kontakt-

modelle könnten beispielsweise verfeinerte Experimente an einzelnen eckigen Teilchen herangezogen werden. Solche Experimente sind jedoch bei eckigen Partikeln aufgrund der verschiedenartigen Kontaktsituationen im Allgemeinen aufwendiger als bei runden Partikeln.

7 Untersuchungen an heterogenen Festkörpern

Zusammenfassung: In diesem Kapitel werden Untersuchungen an heterogenen Festkörpern aus miteinander verbundenen Teilchen vorgestellt. Dabei werden zunächst Konzeptexperimente an einem verklebten Modellmaterial beschrieben. In den einaxialen Druckversuchen tritt duktiles Versagen mit diagonalen Rissen auf. In den Simulationen der Konzeptexperimente können diese Charakteristika des Versagensverhaltens wiedergegeben werden. Anschließend werden Simulationen von Beton unter einaxialer Zug- und Druckbelastung gezeigt. Dabei können typische Eigenschaften des Betonversagens wie die Lokalisierung der Deformation und das Versagensmuster qualitativ abgebildet werden. Bei verschiedenen Belastungsraten kann mit dem ratenabhängigen Balkenmodell ein Anstieg der Festigkeit dargestellt werden.

In diesem Kapitel werden Beispiele aus der zweiten typischen Anwendungsklasse für Diskrete-Element-Methoden, den heterogenen Festkörpern aus haftend miteinander verbundenen festen Teilchen, vorgestellt. Wie bei granularen Materialien hängt das Verhalten dieser Materialien von den Eigenschaften der Teilchen und deren Anordnung ab. Da die Teilchen aber durch Adhäsion bzw. Kohäsion direkt oder durch ein zwischenliegendes Material miteinander verbunden sind, haben zudem die Eigenschaften der Verbindungen und des eventuell vorhandenen Matrixmaterials großen Einfluss. Außerdem kann die Materialantwort von der Art der externen Belastung, z. B. der Belastungsrate, abhängig sein. Der heterogene Materialaufbau aus Teilchen, verbundenen Oberflächen und eventuell Matrixmaterial legt das Verhalten sowohl bei reversiblen als auch bei irreversiblen Vorgängen fest. Das oftmals auftretende, komplexe Versagensverhalten mit Lokalisierungsphänomenen in Prozesszonen und Rissen wird von der diskontinuierlichen Struktur bestimmt. Dabei kann die Teilchengröße als intrinsische Längenskala ebenfalls eine entscheidende Rolle spielen.

Zur Modellierung heterogener Festkörper aus zusammenhängenden Teilchen werden ebenfalls eine Vielzahl unterschiedlicher Methoden und Kombinationen von Methoden eingesetzt. Beispiele, die den heterogenen Aufbau als Kontinuum "verschmiert" modellieren, d. h. die Struktur aus Teilchen nicht explizit abbilden, sind auf der Kontinuumsmechanik basierende Methoden. Jedoch kann der Materialaufbau aus Partikeln mit diesen Methoden auch explizit dargestellt werden, indem die einzelnen Teilchen als kontinuierliche Körper betrachtet werden. Verschiedene Arten der Diskrete-Element-Methode (vergleiche Abbildung 3.1) können verwendet werden, wenn sie über ein Modell für die haftende Verbindung der Partikel verfügen. Ereignisgesteuerte Methoden sind allerdings aufgrund der langanhaltenden haftenden Verbindungen ungeeignet. Weitere Beispiele zur Modellierung heterogener Festkörper aus zusammenhängenden Teilchen sind verschiedene Netzwerkmodelle, siehe z. B. VAN MIER (1997).

Das Ziel dieses Kapitels ist es, die Leistungsfähigkeit der Methode bei der Simulation dieser heterogenen Festkörper und im Speziellen deren Versagensverhalten zu untersuchen. Dabei sollen besonders die Modellierungseigenschaften aufgrund der polygonalen Elementform sowie der entwickelten Modelle für die haftende Verbindung analysiert werden. Hierzu werden zuerst ebenfalls Konzeptexperimente an einem vereinfachten Modellmaterial, nun aus verklebten polygonförmigen Teilchen, betrachtet. In Abschnitt 7.1 wird der Aufbau der Experimente und in Abschnitt 7.2 der Aufbau deren Simulationen vorgestellt. Danach werden die Ergebnisse aus Experimenten und Simulationen in Abschnitt 7.3 gegenübergestellt. Anschließend werden Simulationen von Beton durchgeführt, wobei die Eigenschaften der Methode bei der Versagensabbildung unter unterschiedlichen Belastungsgeschwindigkeiten beurteilt werden. In Abschnitt 7.4 werden der Aufbau und in Abschnitt 7.5 die Ergebnisse der Simulationen von Beton beschrieben.

7.1 Experimente an Modellmaterial – Aufbau

Die Anforderungen an das Modellmaterial sind hier die gleichen wie an das granulare Modellmaterial in Abschnitt 6.1. Der einzige Unterschied ist, dass die polygonförmigen Teilchen nun haftend miteinander verbunden sein sollen. Um diese Anforderungen zu erfüllen, werden die gleichen Sechskantschraubenmuttern wie in Abschnitt 6.1 als Teilchen gewählt und nun mit herkömmlichem Klebstoff in regelmäßiger Anordnung zusammengeklebt. Die Proben werden zwischen zwei durchsichtige Kunststoffplatten gestellt und in der Prüfmaschine durch zwei Lastplatten mit einaxialem Druck belastet, wie in Abbildung 7.1 gezeigt.

Zum Verkleben der Sechskantmuttern wird ein Haushaltsklebstoff verwendet. Die einzelnen Partikelseiten werden von Hand vollflächig miteinander verklebt und die Proben anschließend sieben Tage bei Raumtemperatur getrocknet. Es werden kleine Probekörper aus 22 Sechskantmuttern und größere Probekörper aus 45 Sechskantmuttern ge-

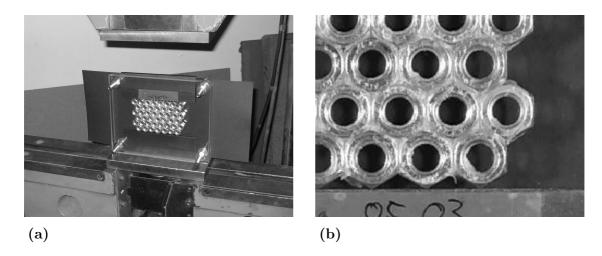


Abbildung 7.1: Experimente an verklebtem Modellmaterial: (a) Probe in der Prüfmaschine und (b) Ausschnitt einer Probe.

testet, wie in Abbildung 7.2 (a) und (b) dargestellt. Die Parameter zur Beschreibung einer Klebeverbindung werden hier nicht vorab separat in vereinfachten experimentellen Tests ermittelt, sondern durch inverse Betrachtung aus den Experimenten an den kleinen Probekörpern gewonnen. Auch der Reibungskoeffizient bei Kontakt zwischen Sechskantmutter und Lastplatte sowie bei Kontakt zwischen zwei Sechskantmuttern mit Klebstoffresten, der nach dem Bruch der Klebeverbindung auftreten kann, werden nicht experimentell bestimmt.

Zu Beginn der Experimente befinden sich alle Teilchen der Probe in Ruhelage. Die einaxiale verschiebungsgesteuerte Druckbelastung wird durch die vorgegebene Bewegung der oberen Lastplatte mit konstanter Geschwindigkeit $\hat{v}_2 = -3.33 \cdot 10^{-5} \,\mathrm{m/s}$ aufgebracht. Die restlichen Freiheitsgrade der oberen Lastplatte sowie alle Freiheitsgrade der unteren Lastplatte werden festgehalten. Durch das Eigengewicht der Vorrichtung zur Lasteinleitung wirkt auf die Probekörper, zusätzlich zur gemessenen Kraft, eine geringe Druckbelastung von $-3.43 \cdot 10^{-3} \,\mathrm{kN}$, die im Folgenden vernachlässigt wird. In Abbildung $7.2 \,\mathrm{(c)}$ sind die bekannten Parameter der Experimente zusammengefasst.

7.2 Simulationen von Modellmaterial – Aufbau

In den Simulationen der Experimente an verklebtem Modellmaterial aus Abschnitt 7.1 wird, wie bei denen an granularem Modellmaterial in Abschnitt 6.2, jede einzelne Sechskantmutter explizit durch ein diskretes Element abgebildet, siehe Abbildung 7.3 (a) und (b). Die Lastplatten werden hier nicht durch diskrete Elemente modelliert, sondern die verschiebungsgesteuerte Belastung direkt auf die obere Partikelreihe aufgebracht und die

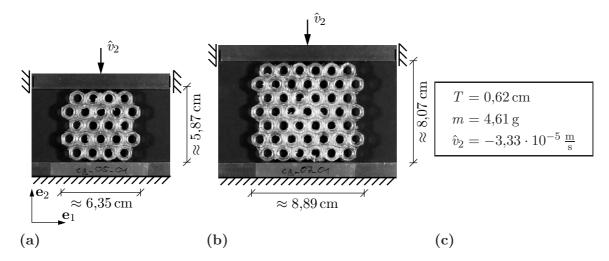


Abbildung 7.2: Experimente an verklebtem Modellmaterial: (a) Ansicht der kleinen Probe, (b) Ansicht der großen Probe und (c) Parameter.

untere Partikelreihe gehalten. Die diskreten Elemente approximieren die wirkliche Form der Sechskantmuttern ebenso wie bei den Simulationen von granularem Modellmaterial in Abschnitt 6.2. Die Masse und die Ausdehnung der dünnen Klebeschicht zwischen den Partikeln bleibt unberücksichtigt und die hexagonalen diskreten Elemente werden in perfekter Anordnung positioniert. Im Ausgangszustand berühren sich die diskreten Elemente ohne Überschneidung und die haftenden Verbindungen sind anisotrop in drei Achsen orientiert, vergleiche Tabelle 3.4.

In den Experimenten interagieren die einzelnen Sechskantmuttern über ihre Verklebung, d. h. durch die Adhäsion zwischen Klebstoff und Sechskantmuttern sowie die Kohäsion des Klebstoffs selbst. Diese haftende Verbindung wird in den Simulationen durch das ratenunabhängige elasto-schädigende Balkenmodell aus Abschnitt 5.1.2 abgebildet. Zwischen Partikeln, die nicht (mehr) haftend miteinander verbunden sind, wird der Kontakt mit den Kontaktmodellen für die Normalkraft aus Abschnitt 4.2.2 und für die Tangentialkraft aus Abschnitt 4.3.2 modelliert. Der Kontakt mit den durchsichtigen Kunststoffplatten, zwischen denen die Probekörper stehen, sowie das Eigengewicht der Partikel und das Eigengewicht der Vorrichtung zur Lasteinleitung werden vernachlässigt.

Die Parameter $E_{\rm h}=4.52\cdot 10^4\,{\rm N/cm^2},\, \kappa_0=1.13\cdot 10^{-3}$ und $\kappa_{\rm m}=2.30\cdot 10^{-1}$ des Balkenmodells werden durch den Vergleich von Experiment und Simulation am gesamten Probekörper mittels vereinfachter inverser Analyse bestimmt. Hierzu wird beim Druckversuch am kleinen Probekörper die Last-Verschiebungskurve der Simulation durch systematisches Ausprobieren an die gemittelte Last-Verschiebungskurve der drei Experimente angepasst. Die makroskopische Querdehnzahl des verklebten Modellmaterials wird in

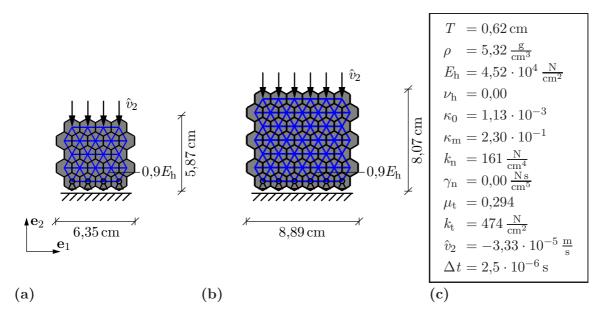


Abbildung 7.3: Simulationen von verklebtem Modellmaterial: (a) Ansicht der kleinen Probe, (b) Ansicht der großen Probe und (c) Parameter.

den Experimenten nicht gemessen, so dass die Querdehnzahl des Balkens nicht mittels inverser Analyse festgelegt wird, sondern zu $\nu_h = 0.00$ angenommen wird.

Für die Kontaktmodelle werden der Strafparameter $k_{\rm n}=161\,{\rm N/cm^4}$, der Reibungskoeffizient $\mu_{\rm t}=0.294$ und die Steifigkeit $k_{\rm t}=474\,{\rm N/cm^2}$ für die Hexagone aus den Simulationen von granularem Modellmaterial aus Abschnitt 6.2 übernommen. Viskose Dämpfung wird nicht modelliert, so dass $\gamma_{\rm n}=0.00\,{\rm N\,s/cm^5}$ gesetzt wird. Die Parameter der Interaktionsmodelle für Kontakt und haftende Verbindung sind für alle Partikelinteraktionen identisch. Um die Symmetrie der Problemstellung aufzuheben, wird jedoch der Elastizitätsmodul eines Balkens in jeder Probe um zehn Prozent abgemindert, wie in Abbildung 7.3 (a) und (b) markiert.

Am Anfang der Simulationen sind die Geschwindigkeiten aller Freiheitsgrade sowie deren Zeitableitungen null. Als Randbedingungen werden die Massenmittelpunkte der Partikel in der oberen Reihe mit konstantem $\hat{v}_2 = -3,33\cdot 10^{-5}\,\mathrm{m/s}$ bewegt und die der Partikel in der unteren Reihe in \mathbf{e}_2 -Richtung unverschieblich gehalten. Die Translationsbewegung in \mathbf{e}_1 -Richtung und die Rotation sind nicht vorgegeben. Die Zeitschrittweite wird zu $\Delta t = 2,5\cdot 10^{-6}\,\mathrm{s}$ gewählt. Die verwendeten Parameter der Simulationen sind in Abbildung 7.3 (c) aufgelistet.

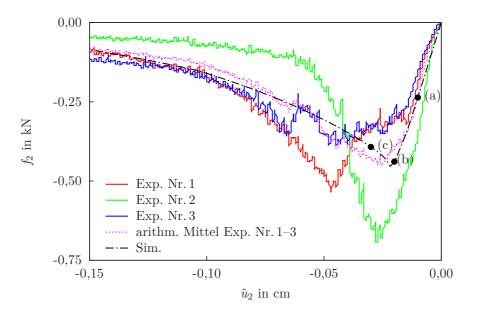


Abbildung 7.4: Last-Verschiebungsdiagramm der kleinen Proben aus verklebtem Modellmaterial: Experimente, arithmetisches Mittel der Last aus den drei Experimenten und Simulation.

7.3 Experimente und Simulationen an Modellmaterial – Ergebnisse

Im Folgenden werden die Ergebnisse der Experimente aus Abschnitt 7.1 und deren Simulationen aus Abschnitt 7.2 gegenübergestellt. Dabei werden zunächst in Abschnitt 7.3.1 die Druckversuche an kleinen Probekörpern beschrieben, anhand derer auch die Parameter des Balkenmodells bestimmt werden. Danach werden in Abschnitt 7.3.2 die Druckversuche an großen Probekörpern vorgestellt und die Ergebnisse abschließend in Abschnitt 7.3.3 zusammengefasst.

7.3.1 Druckversuche an kleinen Probekörpern

In Abbildung 7.4 sind die Last-Verschiebungskurven der Experimente an den drei kleinen Probekörpern dargestellt. Darin ist \hat{u}_2 die mit der konstanten Geschwindigkeit \hat{v}_2 vorgegebene Verschiebung der Lastplatte und f_2 die gemessene Kraft. Trotz der regelmäßigen Anordnung der Sechskantmuttern sind große Abweichungen zwischen den einzelnen Kurven erkennbar. Hierfür sind einerseits die Imperfektionen der Teilchen und deren Anordnung sowie des Versuchsaufbaus und der Versuchsdurchführung verantwortlich. Andererseits haben hier jedoch die Imperfektionen der Partikelverklebung, die hauptsächlich auf den vereinfachten händischen Klebeprozess bei der Probenherstellung zu-

rückzuführen sind, maßgeblichen Einfluss. Dennoch ist das Last-Verschiebungsverhalten in allen drei Experimenten von einem annähernd linearen Bereich zu Beginn und duktilem Versagen geprägt. Beim anfangs linearen Verhalten zeigt Experiment Nr. 2 eine höhere Steifigkeit als die beiden anderen Experimente. Das darauffolgende nichtlineare Verhalten bis zum Erreichen der Traglast ist bei allen Experimenten unterschiedlich. Dabei variieren sowohl die Höhe der Traglast als auch die Verschiebung bei Traglast. Das duktile Versagensverhalten nach Erreichen der Traglast weist mit zunehmender Verschiebung ein immer langsameres Abfallen der Last auf. In Abbildung 7.4 ist zusätzlich das arithmetische Mittel der Last aus den drei Experimenten aufgetragen, das zur Parameterbestimmung verwendet wird.

Die Last-Verschiebungskurve aus der Simulation in Abbildung 7.4 bildet die gemittelte Kurve aus den Experimenten ab. \hat{u}_2 ist darin die vorgegebene Verschiebung der Partikelmassenmittelpunkte in der oberen Reihe und f_2 wird als Summe der ermittelten externen Lasten auf die Partikel der oberen Reihe berechnet. Der Elastizitätsmodul E_h des Balkenmodells ist so angepasst, dass die anfängliche Steifigkeit in der Simulation jener aus dem Mittel der Experimente gleicht. Vor Erreichen der Traglast ist in der Simulation ein leicht nichtlineares Verhalten sichtbar. Die Traglast und die Duktilität des Versagens werden durch Variation der Parameter κ_0 und $\kappa_{\rm m}$ angeglichen. Der dabei ermittelte Wert $\kappa_{\rm m}=2{,}30\cdot10^{-1}$ ist so groß, dass die Annahme kleiner Deformationen für den Balken nicht mehr zutrifft. Da der Balken hier jedoch als "einfaches" Modell für eine haftende Verbindung zweier Teilchen eingesetzt wird, wird dies an dieser Stelle akzeptiert. Die Spitze beim Erreichen der Traglast fällt in der Simulation etwas deutlicher aus als in den Experimenten, was an den unberücksichtigten Imperfektionen liegen kann. Nach Erreichen der Traglast fällt die Last ebenfalls mit zunehmender Deformation langsamer ab.

In Abbildung 7.5 ist das Versagensverhalten in der Simulation zu den drei in Abbildung 7.4 markierten Zuständen dargestellt. Im Zustand (a) sind alle Balken ungeschädigt und die Probe verhält sich elastisch. Im Zustand (b) sind bereits die ersten Balken an den seitlichen Rändern der Probe geschädigt, was sich in der Last-Verschiebungskurve durch das nichtlineare Verhalten vor der Traglast zeigt. Das Erreichen der Traglast ist dadurch gekennzeichnet, dass die Schädigung nicht mehr hauptsächlich an den seitlichen Rändern der Probe auftritt, sondern in dem V-förmigen Rissmuster lokalisiert, wie in Zustand (c) dargestellt. Im Folgenden steigt die Schädigung der Balken in den Rissen bis zum Bruch an, während die übrigen Balken keine weitere Schädigung mehr erfahren.

Die Rissmuster der drei Experimente und der Simulation werden in Abbildung 7.6 gegenübergestellt. Sowohl in den Experimenten als auch in der Simulation tritt lokalisiertes Versagen in diagonalen Rissen auf. Die Rissmuster der experimentellen Tests sind gleichartig, die genauen Positionen der Risse jedoch nicht identisch. Die V-förmigen

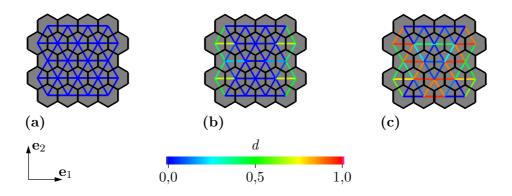


Abbildung 7.5: Versagensverhalten der kleinen Probe aus verklebtem Modellmaterial: Simulation mit Schädigung der Balken zu den drei in Abbildung 7.4 markierten Zuständen (a), (b) und (c).

Muster in Experiment Nr. 1 und Nr. 2 sind gleich, während in Experiment Nr. 3 eine zickzackförmige Reihe entsteht. Die Neigung der Risse ist durch die regelmäßige Geometrie

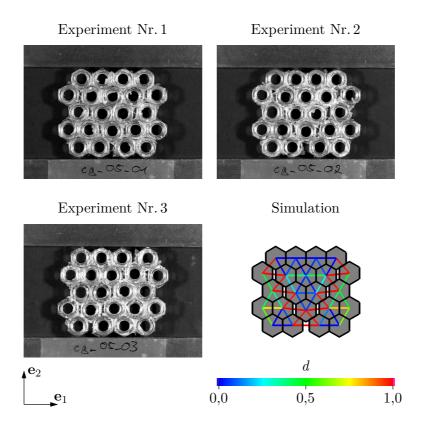


Abbildung 7.6: Rissmuster der kleinen Proben aus verklebtem Modellmaterial bei der Verschiebung $\hat{u}_2 = -0.15\,\mathrm{cm}$: Experiment Nr. 1, Nr. 2 und Nr. 3 sowie Simulation mit Schädigung der Balken.

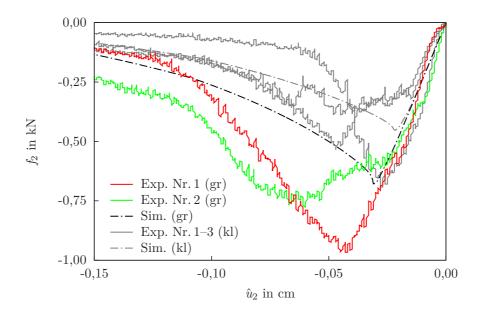


Abbildung 7.7: Last-Verschiebungsdiagramm der großen (gr) und der kleinen (kl) Proben aus verklebtem Modellmaterial: Experimente und Simulationen.

und Anordnung der Sechskantmuttern vorgegeben. In der Simulation wird das V-förmige Rissmuster aus Experiment Nr. 1 und Nr. 2 abgebildet. Das makroskopische Druckversagen der Probekörper wird durch die Kombination zweier Versagensmodi auf der Teilchenebene maßgeblich bestimmt. Diese sind das zugdominierte Versagen der Verklebungen mit der Normalen in e_1 -Richtung und das Versagen der diagonalen Verklebungen hauptsächlich unter Schubbelastung mit Druck in Normalenrichtung. Beide Versagensmodi werden durch das neuentwickelte Balkenmodell wiedergegeben. Die Duktilität der experimentellen Tests stammt hauptsächlich aus dem duktilen Versagensverhalten der Verklebungen bei Schubbelastung mit Druck, während das Versagen auf Zug spröder ist.

7.3.2 Druckversuche an großen Probekörpern

Die Last-Verschiebungskurven der Experimente an den zwei großen (gr) Probekörpern sind in Abbildung 7.7 dargestellt. Zum Vergleich sind zusätzlich die bereits in Abbildung 7.4 gezeigten Kurven der Experimente an kleinen (kl) Probekörpern in grau eingezeichnet. Die beiden Kurven der Experimente an großen Proben weichen ebenfalls stark voneinander ab. Beide Experimente sind jedoch von einem annähernd linearen Bereich und dem duktilen Versagen geprägt. Das arithmetische Mittel der experimentellen Traglasten an den großen Probekörpern beträgt das 1,8-Fache derjenigen an den

kleinen Proben. Das Last-Verschiebungsverhalten nach der Traglast ist bei der kleineren Probengeometrie im Mittel etwas duktiler als bei der größeren.

Die Last-Verschiebungskurve aus der Simulation der großen Probe ist ebenfalls in Abbildung 7.7 dargestellt. Dabei werden die Parameter verwendet, die durch die Anpassung beim kleinen Probekörper ermittelt wurden. Zum Vergleich ist die bereits in Abbildung 7.4 gezeigte Kurve aus der Simulation der kleinen Probe in grau eingezeichnet. Die Kurve aus der Simulation des großen Probekörpers zeigt ebenfalls einen annähernd linearen Bereich, dann einen kurzen nichtlinearen Bereich vor Erreichen der Traglast und anschließend ein duktiles Versagensverhalten. Die Traglast ist etwas niedriger als in Experiment Nr. 2 und deutlich niedriger als in Experiment Nr. 1. Aufgrund der geringen Anzahl an Experimenten mit den großen Abweichungen ist es schwierig, die Ursachen hierfür zu benennen. Ein Grund könnte die Vernachlässigung der Lastplatten in der Simulation sein. Allerdings können die Unterschiede auch aus dem relativ einfachen Balkenmodell für das in der Wirklichkeit komplexe Verhalten der Verklebung stammen. Die Traglast in der Simulation der großen Probe beträgt das 1,5-Fache der Simulation der kleinen Probe. Dies entspricht dem Verhältnis 12/8 der Anzahl versagender diagonaler Balken und ist etwas kleiner als das Verhältnis 11/7 der Anzahl versagender horizontaler Balken in der großen und der kleinen Probe. In der Simulation der größeren Probe ist das Abfallen der Kurve nach der Traglast wie erwartet etwas steiler als bei der kleineren Probe.

Die Rissmuster der beiden Experimente und der Simulation sind in Abbildung 7.8 gegenübergestellt. Wie bei der kleineren Probe tritt in den Experimenten lokalisiertes Versagen in diagonalen Rissen auf. Die Rissmuster der beiden Experimente sind gleichartig. In Experiment Nr. 2 entsteht ein V-förmiges Rissmuster, während das in Experiment Nr. 1 um 180° gedreht ist. In der Simulation wird das V-förmige Rissmuster aus Experiment Nr. 2 wiedergegeben. Das Versagensverhalten in der Simulation ist, wie bei der Simulation der kleinen Probe, von Schädigung hauptsächlich an den seitlichen Rändern vor Erreichen der Traglast und späterer Schädigung der Balken in den Rissen gekennzeichnet.

7.3.3 Zusammenfassung

Die polygonalen diskreten Elemente mit dem vorgestellten, ratenunabhängigen elastoschädigenden Balkenmodell können das Verhalten des verklebten Modellmaterials aus eckigen Teilchen in Druckversuchen qualitativ abbilden. Dies konnte durch die direkte Gegenüberstellung der durchgeführten Konzeptexperimente und der Simulationen gezeigt werden. Dabei können die wesentlichen Charakteristika des Versagensverhaltens wiedergegeben werden. Diese sind die Lokalisierung der Deformation in Rissen mit un-

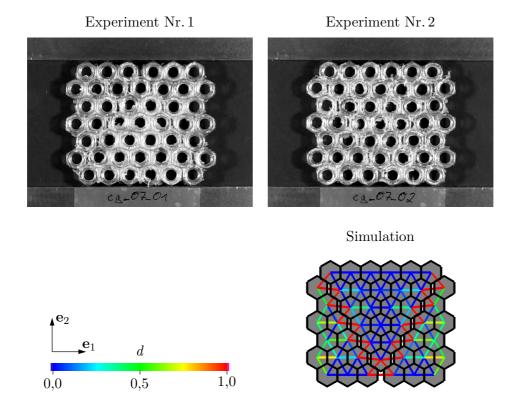


Abbildung 7.8: Rissmuster der großen Proben aus verklebtem Modellmaterial bei der Verschiebung $\hat{u}_2 = -0.15\,\mathrm{cm}$: Experiment Nr. 1 und Nr. 2 sowie Simulation mit Schädigung der Balken.

terschiedlichen Versagensmodi auf der Teilchenebene sowie das duktile Verhalten nach Erreichen der Traglast.

Nach der Parameteranpassung konnte die gemittelte Last-Verschiebungskurve der kleinen Probekörper wiedergeben werden. Die Simulation der größeren Probe ergab jedoch eine zu niedrige Traglast. Eine genauer quantifizierende Bewertung der Unterschiede zwischen Experiment und Simulation ist aufgrund der sehr kleinen Anzahl an Experimenten und deren großer Abweichungen schwierig. Gründe für die Unterschiede können zum einen die vereinfachte Lastaufbringung sowie die unberücksichtigten Imperfektionen sein. Zum anderen können die Unterschiede auch aus der relativ einfachen Methode mit dem Balkenmodell für die haftende Verbindung stammen, da das Verhalten der Verklebungen in der Wirklichkeit komplex ist. Für eine detailliertere Untersuchung des Balkenmodells könnten beispielsweise verfeinerte Experimente an einzelnen, nun verklebten, Teilchen herangezogen werden.

7.4 Simulationen von Beton – Aufbau

Nach den Betrachtungen an verklebtem Modellmaterial in den vorherigen Abschnitten werden nachfolgend Untersuchungen an Beton durchgeführt. Hierbei soll insbesondere untersucht werden, inwieweit die vorgestellte Diskrete-Element-Methode das Versagensverhalten von Beton bei unterschiedlichen Belastungsgeschwindigkeiten sowie den charakteristischen Anstieg der Festigkeit¹ wiedergeben kann.

Diskrete-Element-Methoden werden häufig zur Simulation von Standardtests und kleinen Bauteilversuchen an Beton eingesetzt. Für die Simulation gesamter Tragwerke aus Beton sind Diskrete-Element-Methoden meist numerisch (noch) zu aufwendig. Beispiele für Untersuchungen an Beton mit Diskrete-Element-Methoden finden sich in D'ADDETTA (2004) und WITTEL U. A. (2006) sowie im Speziellen unter hohen Belastungsgeschwindigkeiten mit teilweise vereinfachten Methoden in Kusano u. A. (1992), Magnier und Donzé (1998), Brara u. A. (2001), Cusatis (2001) und Hentz u. A. (2004).

In dieser Arbeit werden einaxiale Zug- und Druckversuche an einer $40 \,\mathrm{cm} \times 40 \,\mathrm{cm}$ großen Betonscheibe der Dicke $T=1 \,\mathrm{cm}$ betrachtet, die mit unterschiedlichen Geschwindigkeiten verschiebungsgesteuert belastet wird. Hierzu werden keine Experimente durchgeführt, weshalb die Ergebnisse der Simulationen in Abschnitt 7.5 mit den makroskopischen Materialeigenschaften von Beton C30 nach der Richtlinie COMITÉ EURO-INTERNATIONAL DU BÉTON (1993), im Folgenden mit CEB abgekürzt, verglichen werden.

In Abbildung 7.9 (a) ist der Probekörper der Simulationen aus 1600 diskreten Elementen dargestellt, die mit 4632 Balken verbunden sind. Darin wird der diskontinuierliche Aufbau eines fiktiven idealisierten Betons aus Zuschlagskörnern gleicher Größenordnung abgebildet. Dabei stellt ein diskretes Element ein Korn und die es umschließende Betonmatrix als ebenes konvexes Polygon der Dicke $T=1,00\,\mathrm{cm}$ dar. Die Anpassung der Partikelgrößen an eine Betonsiebkurve wird nicht durchgeführt. Als über das Element konstante Dichte $\rho=2,40\,\mathrm{g/cm^3}$ wird für alle Partikel die makroskopische Betondichte nach COMITÉ EURO-INTERNATIONAL DU BÉTON (1993) gewählt.

Die Anordnung der diskreten Elemente wird mit dem in Abschnitt 3.2.1 vorgestellten Verfahren aus Moukarzel und Herrmann (1992) erzeugt. Die diskreten Elemente sind die Voronoi-Zellen um die Punkte, die in 40×40 Gitterzellen positioniert sind, wobei die Gitterweite $h_{\rm pg}=1,0\,{\rm cm}$ und der Faktor $q_{\rm pg}=0,999$ gewählt werden.

¹In den Betrachtungen an Beton wird der Begriff "Festigkeit" neben seiner eigentlichen Bedeutung als Materialkennwert ebenfalls im Sinne einer Festigkeit von Probekörpern verwendet. Hierzu wird der Festigkeitswert als durch die Probenquerschnittsfläche dividierte Traglast, also als ein makroskopischer nominaler Spannungswert bestimmt. Dieser Wert kann allerdings Einflüsse aus der Probengeometrie sowie der Lastaufbringung enthalten, so dass eine so ermittelte Festigkeit nicht immer ein reiner Materialkennwert ist.

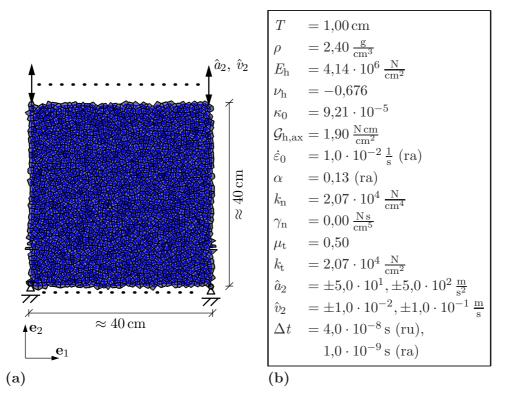


Abbildung 7.9: Simulationen von Beton: (a) Ansicht der Probe und (b) Parameter.

Die Interaktion der einzelnen Zuschlagskörner des Betons durch die haftende Verbindung der sie umgebenden Zementmatrix wird in den Simulationen zuerst durch das ratenunabhängige Balkenmodell aus Abschnitt 5.1.2 abgebildet. Im Anschluss daran wird das erweiterte, ratenabhängige Balkenmodell aus Abschnitt 5.2.2 eingesetzt und die Ergebnisse aus beiden Modellen gegenübergestellt. Der Kontakt zwischen Partikeln, die nicht (mehr) haftend miteinander verbunden sind, wird durch die Kontaktmodelle für die Normalkraft aus Abschnitt 4.2.2 und die Tangentialkraft aus Abschnitt 4.3.2 dargestellt. Das Eigengewicht wird vernachlässigt.

Die Balkenparameter $E_{\rm h}=4,14\cdot 10^6\,{\rm N/cm^2}$ und $\nu_{\rm h}=-0,676$ werden bei der Simulation des einaxialen Zugversuchs mit dem ratenunabhängigen Balkenmodell so angepasst, dass der Elastizitätsmodul $E_{\rm ci}^{\rm CEB}=3,35\cdot 10^4\,{\rm N/mm^2}$ und die Querdehnzahl $\nu_{\rm c}^{\rm CEB}=0,2$ von Beton C30 nach der Richtlinie abgebildet werden. Dabei hat das negative $\nu_{\rm h}$ keine mechanische Bedeutung im Sinne einer negativen makroskopischen Querdehnzahl eines Materials, sondern ist Teil des Balkenmodells auf Partikelebene. Die dissipierte Energie pro Einheit Balkenquerschnitt bei axialer Belastung wird für jeden Balken zu $\mathcal{G}_{\rm h,ax}=1,90\,{\rm N\,cm/cm^2}$ angenommen, so dass für einen Balken der Länge $L_{\rm h}=1,00\,{\rm cm}$ hier $\kappa_{\rm m}=9,97\cdot 10^{-3}$ gilt. Dabei wird $\kappa_0=9,21\cdot 10^{-5}$ so festgelegt, dass in der Simulation der Mittelwert der makroskopischen Betonzugfestigkeit $f_{\rm ctm}^{\rm CEB}=2,9\,{\rm N/mm^2}$ aus der Richtlinie wiedergegeben wird.

Für das ratenabhängige Balkenmodell werden die beiden zusätzlichen Parameter $\dot{\varepsilon}_0 = 1.0 \cdot 10^{-2} \, 1/\mathrm{s}$ und $\alpha = 0.13$ so gewählt, dass die Festigkeitsanstiegs-Verzerrungsratenkurve des ratenabhängigen Balkenmodells (siehe Abbildung 5.14) die makroskopische Festigkeitsanstiegs-Verzerrungsratenkurve für eine vorgegebene Verzerrungsrate aus der Richtlinie approximiert.

Bei der Kontaktmodellierung wird der Reibungskoeffizient zu $\mu_t = 0.50$ angenommen. Für die Normalkraft wird $k_n = 2.07 \cdot 10^4 \, \text{N/cm}^4$ und für die Tangentialkraft $k_t = 2.07 \cdot 10^4 \, \text{N/cm}^2$ gewählt, so dass die maximale Überschneidungsfläche in den Simulationen kleiner als $0.04 \, \text{cm}^2$ und die elastische tangentiale Relativverschiebung kleiner als $0.03 \, \text{cm}$ bleibt. Viskose Dämpfung wird nicht modelliert, so dass $\gamma_n = 0.00 \, \text{N s/cm}^5$ gesetzt wird. Mit Ausnahme des Parameters κ_m , der an die jeweilige Balkenlänge angepasst ist, sind die Parameter für alle Interaktionen identisch vorgegeben.

Am Anfang der Simulationen sind die Geschwindigkeiten aller Freiheitsgrade sowie deren Zeitableitungen null. Als Randbedingungen werden die Massenmittelpunkte der diskreten Elemente in der oberen Reihe mit jeweils zwei unterschiedlichen Belastungsgeschwindigkeiten $\hat{v}_2 = \pm 1,0 \cdot 10^{-2}\,\mathrm{m/s}$ und $\hat{v}_2 = \pm 1,0 \cdot 10^{-1}\,\mathrm{m/s}$ für Zugbelastung (+) und Druckbelastung (-) bewegt. Dabei werden die Partikel zu Beginn der Simulationen jeweils mit angepasstem konstantem $\hat{a}_2 = \pm 5,0 \cdot 10^1\,\mathrm{m/s^2}$ und $\hat{a}_2 = \pm 5,0 \cdot 10^2\,\mathrm{m/s^2}$ beschleunigt, bis sie die vorgegebene Geschwindigkeit \hat{v}_2 erreichen. Die Massenmittelpunkte der Partikel in der unteren Reihe werden in \mathbf{e}_2 -Richtung unverschieblich gehalten. Die Translationsbewegung in \mathbf{e}_1 -Richtung und die Rotation sind weder für die Partikel in der oberen noch für die in der unteren Reihe vorgegeben. Die Zeitschrittweite wird für die Simulationen mit dem ratenunabhängigen Modell zu $\Delta t = 4,0 \cdot 10^{-8}\,\mathrm{s}$ und mit dem ratenabhängigen Modell zu $\Delta t = 1,0 \cdot 10^{-9}\,\mathrm{s}$ gewählt. In Abbildung 7.9 (b) sind die verwendeten Parameter zusammengefasst.

7.5 Simulationen von Beton – Ergebnisse

Im Folgenden werden die Ergebnisse der Simulationen aus Abschnitt 7.4 vorgestellt. Zunächst werden in Abschnitt 7.5.1 die Zugversuche und anschließend in Abschnitt 7.5.2 die Druckversuche bei verschiedenen Belastungsgeschwindigkeiten betrachtet. Dabei werden jeweils zuerst die Simulationen mit dem ratenunabhängigen Balkenmodell und dann die Simulationen mit dem ratenabhängigen Modell beschrieben und miteinander verglichen.

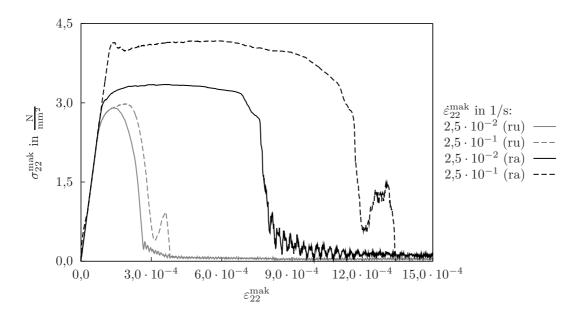


Abbildung 7.10: Spannungs-Dehnungsdiagramm der Zugversuche an Beton mit zwei unterschiedlichen Verzerrungsraten: Simulationen mit dem ratenunabhängigen (ru) sowie dem ratenabhängigen (ra) Balkenmodell.

7.5.1 Zugversuche bei verschiedenen Belastungsgeschwindigkeiten

In Abbildung 7.10 sind die Spannungs-Dehnungskurven der Zugversuche bei zwei verschiedenen Belastungsgeschwindigkeiten dargestellt. Die makroskopische nominale Spannung wird mit $\sigma_{22}^{\text{mak}} = f_2/A_2$ ermittelt. Darin ist f_2 die Summe der Kräfte aus den Interaktionen auf die Partikel der oberen Reihe in \mathbf{e}_2 -Richtung, wobei das Vorzeichen umgedreht ist. Die Probenquerschnittsfläche $A_2 = L_1 T$ wird durch die angenommene ursprüngliche Probenbreite $L_1 = 40 \,\text{cm}$ und die Probendicke T festgelegt. Der Quotient der vorgegebenen Verschiebung auf die obere Partikelreihe \hat{u}_2 und der angenommenen ursprünglichen Probenhöhe $L_2 = 40 \,\text{cm}$ bildet die makroskopische nominale Verzerrung $\varepsilon_{22}^{\text{mak}} = \hat{u}_2/L_2$. Die Verzerrungsrate $\dot{\varepsilon}_{22}^{\text{mak}} = \hat{v}_2/L_2$ wird als Quotient der aufgebrachten Belastungsgeschwindigkeit und der Probenhöhe bestimmt.

An der Simulation des Zugversuchs bei der niedrigen Verzerrungsrate $\dot{\varepsilon}_{22}^{\rm mak} = 2.5 \cdot 10^{-2} \, 1/{\rm s}$ mit dem ratenunabhängigen Balkenmodell wurden dessen Parameter angepasst. Eine noch geringere Belastungsgeschwindigkeit bringt nur noch sehr geringe Unterschiede in der Materialantwort, weshalb diese Belastungsgeschwindigkeit zur Parameterbestimmung gewählt wurde. Die Spannungs-Dehnungskurve zeigt einen annähernd linearen, elastischen Bereich, in dem der Elastizitätsmodul und die Querdehnzahl von Beton wiedergegeben werden. In den Simulationen wird der Elastizitätsmodul mit $E^{\rm mak} =$

 $\sigma_{22}^{\mathrm{mak}}/\varepsilon_{22}^{\mathrm{mak}}$ und die Querdehnzahl mit $\nu^{\mathrm{mak}}=-\varepsilon_{11}^{\mathrm{mak}}/\varepsilon_{22}^{\mathrm{mak}}$ bestimmt. Hierzu wird die Verzerrung $\varepsilon_{11}^{\mathrm{mak}}=(u_{\mathrm{r},1}-u_{\mathrm{l},1})/L_{1}$ mit dem arithmetischen Mittel der Partikelverschiebungen in \mathbf{e}_{1} -Richtung am rechten Rand $u_{\mathrm{r},1}$ und am linken Rand $u_{\mathrm{l},1}$ errechnet.

Die Kurve aus der Simulation der langsamen Belastung mit dem ratenunabhängigen Modell wird anschließend nichtlinear und die Spannung erreicht das Maximum, das die Betonzugfestigkeit wiedergibt und im Folgenden als Referenzwert verwendet wird. Die Verzerrung bei Erreichen der Zugfestigkeit ist in der Simulation mit $\varepsilon_{22}^{\text{mak}} = 1.4 \cdot 10^{-4}$ etwas geringer als $1.5 \cdot 10^{-4}$ aus der Richtlinie. Nach dem Maximum sinkt die Spannung immer steiler auf einen relativ kleinen Wert ab und strebt anschließend sehr langsam gegen null. Ein Grund dafür, dass die Last nicht direkt auf null abfällt, sind wenige noch nicht komplett versagte Balken entlang des Risses. Zudem kann durch Verzahnung der Partikel im Riss Last übertragen werden.

Bei der hohen Verzerrungsrate $\dot{\varepsilon}_{22}^{\rm mak} = 2.5 \cdot 10^{-1} \, 1/{\rm s}$ steigt die Kurve aus dem ratenunabhängigen Modell zu Beginn kurz steiler an, da die Probe aus der Ruhelage stark beschleunigt wird.² Der nichtlineare Bereich vor Erreichen der Zugfestigkeit ist ausgedehnter, so dass die Zugfestigkeit den 1,03-fachen Wert erreicht. Dieser Festigkeitsanstieg ist allerdings relativ klein. Anschließend fällt die Spannung nicht monoton, sondern wächst nochmals kurz an. Ein Grund für die Oszillationen sind die Wellen, die beim schnellen Auseinanderreißen der Probe auftreten.

Da mit dem ratenunabhängigen Balkenmodell kein deutlicher Festigkeitsanstieg abgebildet werden konnte, wird das ratenabhängige Balkenmodell eingesetzt. In Abbildung 7.10 sind zu Beginn keine Unterschiede zum ratenunabhängigen Modell erkennbar. Sobald das Verhalten jedoch deutlich nichtlinear wird, unterscheiden sich die Kurven klar. Beim ratenabhängigen Modell steigt die Spannung bereits bei der geringen Verzerrungsrate $\dot{\varepsilon}_{22}^{\rm mak} = 2.5 \cdot 10^{-2} \, 1/{\rm s}$ länger annähernd linear an. Anschließend bildet die Kurve ein Plateau mit dem 1,15-Fachen des Referenzwerts als Maximalspannung und fällt erst bei deutlich größerer Verzerrung als beim ratenunabhängigen Modell ab. Bei der hohen Verzerrungsrate $\dot{\varepsilon}_{22}^{\rm mak} = 2.5 \cdot 10^{-1} \, 1/{\rm s}$ wächst die Spannung noch länger an und das Plateau ist noch ausgeprägter, wobei die Spannung das 1,44-Fache des Referenzwerts erreicht.

In Abbildung 7.11 ist die Schädigung der Balken in den Zugversuchen jeweils am Ende der Spannungs-Dehnungskurven aus Abbildung 7.10 dargestellt. In allen Versuchen dominiert die Schädigung vertikal ausgerichteter Balken. In den Simulationen mit dem ratenunabhängigen Balkenmodell erfolgt eine deutliche Lokalisierung der Schädigung, während hingegen beim ratenabhängigen Modell mehr diffus verteilte Schädigung zu beobachten ist. Beim ratenunabhängigen Modell bestehen die beiden, sich sehr ähnlichen Versagensmuster aus einem horizontalen Hauptriss und einem kleinen stark geschädigten

 $^{^2}$ In Abbildung 7.10 liegt diese grau gestrichelte Kurve in diesem Bereich unter der schwarz gestrichelten Kurve des ratenabhängigen Modells bei der gleichen Verzerrungsrate.

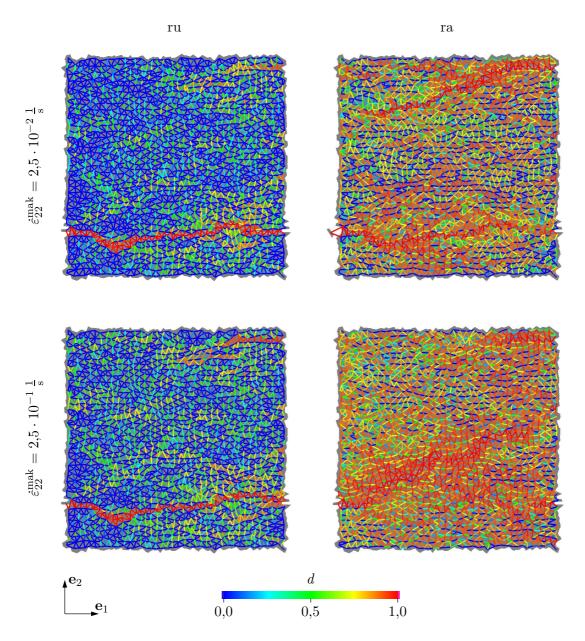


Abbildung 7.11: Schädigung in den Zugversuchen an Beton mit zwei unterschiedlichen Verzerrungsraten am Ende der Spannungs-Dehnungskurven aus Abbildung 7.10: Simulationen mit dem ratenunabhängigen (ru) sowie dem ratenabhängigen (ra) Balkenmodell.

Bereich rechts oben, vergleiche hierzu die Rissbilder von Beton z. B. in VAN MIER (1997). Außerhalb der lokalisierten Bänder tritt etwas Schädigung auf, die bei der hohen Verzerrungsrate ein wenig stärker ausgeprägt ist. Dies zeigt die erhöhte Energiedissipation im Probekörper an.

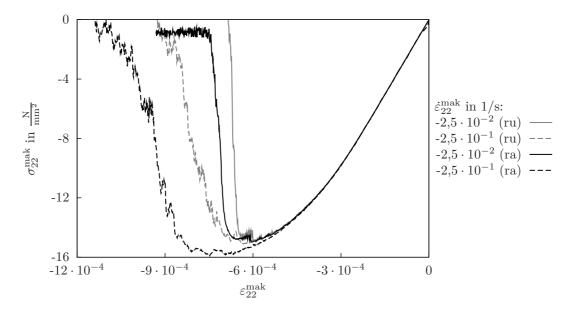


Abbildung 7.12: Spannungs-Dehnungsdiagramm der Druckversuche an Beton mit zwei unterschiedlichen Verzerrungsraten: Simulationen mit dem ratenunabhängigen (ru) sowie dem ratenabhängigen (ra) Balkenmodell.

In den Simulationen mit dem ratenabhängigen Modell hingegen sind größere Bereiche mit sehr starker Schädigung erkennbar. Zudem ist die Schädigung in den übrigen Teilen der Probekörper deutlich ausgeprägter als beim ratenunabhängigen Modell. Tatsächlich kann sich bei Beton unter hohen Belastungsraten eine Vielzahl an verteilten (Mikro-)Rissen entwickeln, siehe z. B. Zieliński (1982). Bei der niedrigen Verzerrungsrate tritt das Versagen in zwei Rissen, einem im oberen und einem im unteren Bereich, auf. Bei der hohen Verzerrungsrate entsteht ein geneigter Hauptriss sowie kleinere Risse am rechten Probenrand. Die diffuse Schädigung ist hier ebenfalls stärker ausgeprägt als bei der langsamen Belastung.

7.5.2 Druckversuche bei verschiedenen Belastungsgeschwindigkeiten

In Abbildung 7.12 sind die Spannungs-Dehnungskurven der Druckversuche bei zwei unterschiedlichen Belastungsgeschwindigkeiten dargestellt. In der Simulation der Verzerrungsrate $\dot{\varepsilon}_{22}^{\rm mak} = -2.5 \cdot 10^{-2} \, 1/{\rm s}$ mit dem ratenunabhängigen Balkenmodell wird die Kurve nach einem anfänglichen annähernd linearen Bereich langsam flacher. Bei leichten Oszillationen erreicht dann die Spannung mit $\sigma_{22}^{\rm mak} = -14.9 \, {\rm N/mm^2}$ ihren Maximalbetrag, was im Folgenden als Referenzwert verwendet wird. Im Betrag ist die erreichte Festigkeit deutlich geringer als der Mittelwert der Zylinderdruckfestigkeit $f_{\rm cm}^{\rm CEB} = 38 \, {\rm N/mm^2}$

aus der Richtlinie.³ Die Verzerrung $\varepsilon_{22}^{\text{mak}} = -5.9 \cdot 10^{-4}$ bei Erreichen der Druckfestigkeit ist betragsmäßig ebenfalls geringer als in der Richtlinie mit $\varepsilon_{\text{cl}}^{\text{CEB}} = -2.2 \cdot 10^{-3}$. Eine Anpassung des Verhältnisses von Druck- zu Zugfestigkeit, das aus dem Modell mit den im Zugversuch bestimmten Parametern resultiert, an das von Beton C30 nach der Richtlinie, beispielsweise durch Erweiterung des Balkenmodells, wird in dieser Arbeit nicht versucht. Nach den leichten Oszillationen fällt die Spannung sehr schnell auf null ab.

Die Kurve aus dem ratenunabhängigen Modell bei der Verzerrungsrate $\dot{\varepsilon}_{22}^{\rm mak} = -2.5 \cdot 10^{-1} \, 1/{\rm s}$ steigt zu Beginn kurz steiler an, da die Probe aus der Ruhelage stark beschleunigt wird.⁴ Die Druckfestigkeit erreicht lediglich das 1,01-Fache des Referenzwerts bei der langsamen Belastung. Das Versagensverhalten nach Erreichen der Festigkeit ist weniger spröde als bei der langsamen Belastung.

Die beiden Druckversuche werden nun ebenfalls mit dem ratenabhängigen Balkenmodell simuliert. Zu Beginn der Belastung sind in Abbildung 7.12 keine Unterschiede zum ratenunabhängigen Balkenmodell erkennbar. Das Versagensverhalten ist allerdings beim ratenabhängigen Modell etwas duktiler. Bei der Verzerrungsrate $\dot{\varepsilon}_{22}^{\rm mak} = -2.5 \cdot 10^{-2} \, 1/{\rm s}$ zeigt die Probe annähernd die gleiche Festigkeit wie beim ratenunabhängigen Modell, versagt aber weniger spröde. Zudem fällt die Spannung nicht auf null ab, sondern oszilliert um eine geringe noch verbleibende Druckspannung. Bei der Verzerrungsrate $\dot{\varepsilon}_{22}^{\rm mak} = -2.5 \cdot 10^{-1} \, 1/{\rm s}$ ist sowohl der nichtlineare Bereich vor Erreichen der Druckfestigkeit ausgeprägter als auch das Versagensverhalten duktiler. Dabei erreicht die Druckfestigkeit das 1,07-Fache des Referenzwerts. Der Festigkeitsanstieg ist also deutlich geringer als bei den Zugversuchen in Abschnitt 7.5.1. In Experimenten an Beton kann beobachtet werden, dass der Festigkeitsanstieg bei Druckbeanspruchung tendenziell weniger stark ausfällt als bei Zugbeanspruchung, vergleiche z. B. HENTZ U. A. (2004).

In Abbildung 7.13 ist die Schädigung der Balken in den Druckversuchen jeweils am Ende der Spannungs-Dehnungskurven aus Abbildung 7.12 dargestellt. In allen Versuchen tritt das makroskopische Druckversagen der Probe in diagonalen Bändern mit hoher Schädigung und unterschiedlicher Breite auf, vergleiche hierzu die experimentellen Bruchbilder beispielsweise in VAN MIER (1997). Daneben sind bei dem relativ spröden Druckversagen der Proben große Bereiche mit deutlicher Schädigung sichtbar. In den Simulationen mit dem ratenunabhängigen Modell sind die Versagensmuster für beide Belastungsraten ähnlich, aber nicht identisch. Die Versagensmuster aus den Simulationen mit dem ratenabhängigen Modell unterscheiden sich davon.

³Die Druckfestigkeit wird in COMITÉ EURO-INTERNATIONAL DU BÉTON (1993) als positiver Wert angegeben, während Druckspannungen in dieser Arbeit ein negatives Vorzeichen haben.

⁴In Abbildung 7.12 liegt diese grau gestrichelte Kurve in diesem Bereich unter der schwarz gestrichelten Kurve des ratenabhängigen Modells bei der gleichen Verzerrungsrate.

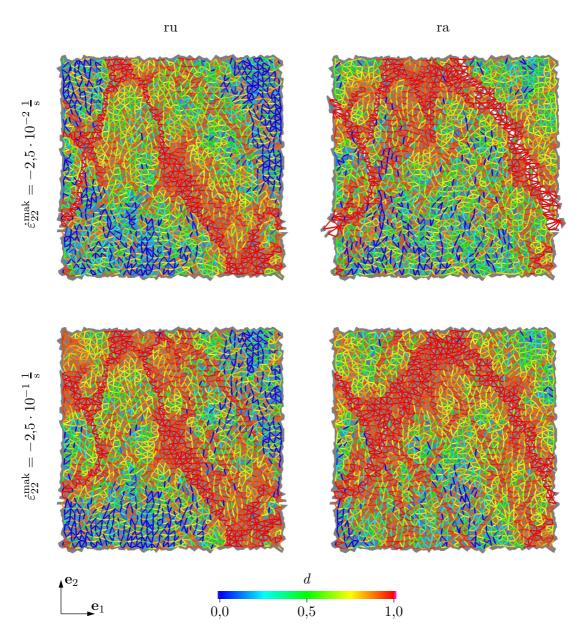


Abbildung 7.13: Schädigung in den Druckversuchen an Beton mit zwei unterschiedlichen Verzerrungsraten am Ende der Spannungs-Dehnungskurven aus Abbildung 7.12: Simulationen mit dem ratenunabhängigen (ru) sowie dem ratenabhängigen (ra) Balkenmodell.

7.5.3 Zusammenfassung

Die vorgestellte Diskrete-Element-Methode kann charakteristische Eigenschaften des Versagensverhaltens von Beton unter einaxialer Belastung wie die Lokalisierung der Deformation und das Versagensmuster qualitativ abbilden. Nach der Parameteranpassung am Zugversuch war es möglich, Elastizitätsmodul, Querdehnzahl und Zugfestigkeit

von Beton wiederzugeben, während die Druckfestigkeit aus dem Modell betragsmäßig zu klein war. Eine Modifikation des Verhältnisses von Druck- zu Zugfestigkeit könnte möglicherweise durch eine Erweiterung bei der Ermittlung der äquivalenten Verzerrung (5.8) des elasto-schädigenden Balkenmodells erreicht werden.

Da mit dem ratenunabhängigen Balkenmodell kein signifikanter Festigkeitsanstieg in den vorgestellten Versuchen mit verschiedenen Verzerrungsraten erkennbar war, wurde das ratenabhängige Balkenmodell eingesetzt. Damit kann ein deutlicher Anstieg der Zugfestigkeit abgebildet werden, während der Anstieg der Druckfestigkeit geringer ausfällt. Eine Angleichung des Festigkeitsanstiegs in den Simulationen an den Festigkeitsanstieg von Beton durch eine Parameteranpassung wurde nicht versucht. Für diese Quantifizierung scheint es sinnvoll, zuerst das Modell so zu modifizieren, dass auch die Betondruckfestigkeit wiedergegeben werden kann.

Für genauere Untersuchungen kann der direkte Vergleich mit Experimenten an Betonscheiben hilfreich sein. Dabei könnten die Partikelgrößen an die eingesetzte Siebkurve aus den Experimenten angepasst werden oder die Partikelanordnungen auf Basis einer Probenvermessung mittels bildgebender Verfahren generiert werden. Dennoch kann die ebene und relativ einfache Methode das komplexe Material Beton letztlich nur bis zu einem gewissen Detaillierungsgrad abbilden.

8 Zusammenfassung und Ausblick

8.1 Zusammenfassung

Ausgehend von einer Diskrete-Element-Methode mit polygonalen starren Partikeln wurden in dieser Arbeit zwei Schwerpunkte behandelt. Den ersten Schwerpunkt bildete die Weiterentwicklung der Modelle für den Kontakt und die haftende Verbindung zwischen den Partikeln mit dem Ziel, bei akzeptablem numerischem Aufwand die wichtigen mechanischen Eigenschaften abzubilden. Als zweiter Schwerpunkt wurde die Leistungsfähigkeit der entwickelten Methode bei der Modellierung heterogener Materialien sowohl aus nichtverbundenen als auch aus verbundenen Teilchen untersucht.

Die verwendeten konvexen polygonalen diskreten Elemente bieten bei ebenen Problemstellungen relativ große Freiheit und Flexibilität zur Anpassung an konvexe Teilchenformen. Im Vergleich mit den häufig eingesetzten kreisförmigen Partikeln steht diesem Vorteil als Hauptnachteil die aufwendigere Kontaktermittlung gegenüber. Wenn nichtrunde Teilchenformen wesentlichen Einfluss auf das Materialverhalten haben, sind jedoch aufwendige Elementformen wie die Polygone zur Modellierung notwendig.

Zur Abbildung heterogener Festkörper aus nichtverbundenen Teilchen ist die Modellierung des Partikelkontakts nötig. Die hierfür verwendeten Modelle können wesentliche Eigenschaften des Teilchenkontakts wiedergeben. Das elastische Normalkraftmodell bildet eine repulsive Kraft zwischen den Partikeln ab und wurde um ein viskoses Modell erweitert. Zur Abbildung von Haften und Gleiten in tangentialer Richtung wurde ein elasto-plastisches Kontaktmodell eingesetzt. Das neuentwickelte elasto-plastische Modell für den Kontakt zwischen Partikel und ebenem Untergrund kann ebenfalls Haften und Gleiten darstellen.

Die Leistungsfähigkeit der Methode aus polygonalen diskreten Elementen und den vorgestellten Kontaktmodellen wurde an Konzeptexperimenten mit einem granularen Modellmaterial aus eckigen Teilchen untersucht. In den Simulationen der Druckversuche konnte gezeigt werden, dass die Methode in der Lage ist, wesentliche Phänomene des granularen Modellmaterials auf Probenebene abzubilden. Es wurde jedoch auch die Problematik verdeutlicht, dass für genaue Quantifizierungen, beispielsweise der Position einzelner Partikel, Informationen zu den Imperfektionen im Experiment erforderlich sind.

Dies gilt insbesondere, wenn das experimentelle Ergebnis stark sensitiv im Bezug auf Imperfektionen in der wirklichen Problemstellung ist.

Um heterogene Festkörper aus haftend miteinander verbundenen Teilchen abzubilden, ist zusätzlich ein Modell für die haftende Verbindung nötig. Hierfür wurde ein elasto-schädigendes Balkenmodell entwickelt, das sowohl Zug- und Biegeversagen als auch Schubversagen sowie kombiniertes Versagen einer Partikelverbindung bei numerisch akzeptablem Aufwand darstellen kann. Durch die direkte Gegenüberstellung der durchgeführten Druckversuche an einem Modellmaterial aus nun miteinander verklebten Sechskantmuttern und deren Simulationen konnte gezeigt werden, dass mit dem Balkenmodell wesentliche Eigenschaften des Versagensverhaltens auf Probenebene wiedergegeben werden können.

Nach den Untersuchungen an Modellmaterialien wurde die entwickelte Methode zur Simulation von Beton eingesetzt. In den einaxialen Zug- und Druckversuchen konnte gezeigt werden, dass die Methode wesentliche Eigenschaften des Versagensverhaltens von Beton qualitativ abbilden kann. Die Anpassung des Verhältnisses von Druck- zu Zugfestigkeit in den Simulationen an das von Beton, beispielsweise durch eine Erweiterung des Balkenmodells, wurde in dieser Arbeit jedoch nicht versucht. Um den charakteristischen Festigkeitsanstieg von Beton bei Erhöhung der Belastungsrate darzustellen, wurde das Balkenmodell mit der Erweiterung um ein Potenzmodell für den Festigkeitsanstieg des Balkens herangezogen. Mit diesem Modell konnte in Zug- und Druckversuchen ein Anstieg der Probenfestigkeit bei Erhöhung der Belastungsgeschwindigkeit wiedergegeben werden.

Für einen Überblick über die Arbeiten zur Diskrete-Element-Methode am hiesigen Institut aus dem vorangegangenen Forschungsprojekt (D'ADDETTA 2004) und dieser Arbeit wird auf die Buchbeiträge RAMM U. A. (2011) und SCHNEIDER U. A. (2011) sowie auf SCHNEIDER U. A. (2010) verwiesen.

8.2 Ausblick

Aufbauend auf der vorgestellten zweidimensionalen Methode mit konvexen Polygonen stellt die Erweiterung auf ein dreidimensionales Modell mit konvexen Polyedern sicherlich eine wichtige Weiterentwicklung dar. Die Kontaktermittlung der Polyeder während einer Simulation ist in der Regel allerdings numerisch nochmals teurer als bisher schon bei den Polygonen. Zudem ist die Implementierung der Kontaktermittlung mit Bestimmung der Überschneidungsebene und der weiteren benötigten Größen aufwendig und nicht durch kleine Modifikationen des vorhandenen Programms umsetzbar.

Die simulierbare Problemgröße bildet – insbesondere bei nichtrunden Partikelformen, die für quantifizierende Aussagen jedoch häufig notwendig sind – oftmals einen stark limitierenden Faktor bei der Anwendung von Diskrete-Element-Methoden. Daher sind, wie für viele andere Methoden auch, effektive parallele numerische Umsetzungen für unterschiedliche Prozessortypen interessant.

Das entwickelte elasto-schädigende Balkenmodell zur Modellierung der haftenden Verbindung zwischen den Partikeln kann auch bei anderen Partikelformen in zweidimensionalen Modellen verwendet werden. Mit Erweiterungen und eventuell einem zusätzlichen Torsionsstabmodell kann es im Dreidimensionalen eingesetzt werden. Eine sinnvolle Weiterentwicklung ist zudem die Erweiterung des Balkenmodells durch Ergänzung des Versagenskriteriums oder die Verwendung weitergehender konstitutiver Modelle. Hierdurch könnte mehr Flexibilität bei der Parameteranpassung des Modells für verschiedene Anwendungen erreicht werden.

Um Modelle für die Interaktion der Partikel zu validieren und deren Parameter wirklichkeitsnah zu bestimmen, aber auch um sie methodisch weiterzuentwickeln, sind detaillierte experimentelle Betrachtungen, z.B. an einzelnen Partikelpaaren, zum direkten Vergleich nützlich. Die Experimente können eventuell zum Teil durch Simulationen auf feineren Skalen ersetzt werden.

Ein Themengebiet, das über die in dieser Arbeit betrachteten rein mechanischen Problemstellungen hinaus geht, ist die Modellierung von Mehrfeld-Problemen mit Methoden, die auf der Diskrete-Element-Methode aufbauen. Eine weiteres Forschungsthema stellt die Kopplung von Diskrete-Element-Methoden mit anderen Methoden, beispielsweise im Rahmen von Mehrskalen-Methoden mit kontinuumsbasierten Methoden, dar. An dieser Stelle soll die Kombination von Diskrete-Element-Methoden und Finite-Element-Methoden hervorgehoben werden, die unter anderem in einem Forschungsprojekt am hiesigen Institut weiterentwickelt wird (SORG UND BISCHOFF 2011). Einen Überblick über weitere aktuelle Forschungsthematiken zur Diskrete-Element-Methode findet man beispielsweise in dem Tagungsband Oñate und Owen (2011).

A Anhang

A.1 Struktogramme

Anfangs	swerte	
$\check{\mathbf{x}}_{0,i}, g$	$g_{0,j}$ für $i = 1, \dots, n_{\text{fhg}}, j = 1, \dots, n_{\text{ge}}$	
Schleife	über alle Schritte	
l=1,	\dots, n_{a}	
S	chleife über alle Freiheitsgrade	
_	$i=1,\dots,n_{ ext{fhg}}$	
	Prädiktor	
	$\check{\mathbf{x}}^{\mathrm{pd}}_{i,l} = \mathbf{S}\check{\mathbf{x}}_{i,l-1}$	
	Vorläufiges Update Geschichtsvariablen $\mathbf{x}_{\mathrm{sys},l}^{\mathrm{g,pd}}, \dot{\mathbf{x}}_{\mathrm{sys},l}^{\mathrm{g,pd}}, \mathbf{g}_{\mathrm{sys},l-1}, \ldots \to \mathbf{g}_{\mathrm{sys},l}^{\mathrm{pd}}$	
F	$\mathbf{f}_{\mathrm{sys},l}^{\mathrm{g,pd}} = \mathbf{f}\left(\mathbf{x}_{\mathrm{sys},l}^{\mathrm{g,pd}}, \dot{\mathbf{x}}_{\mathrm{sys},l}^{\mathrm{g,pd}}, \mathbf{g}_{\mathrm{sys},l}^{\mathrm{pd}}\right)$	
S	chleife über alle Freiheitsgrade	
	$i=1,\dots,n_{ ext{fhg}}$	
	Korrektor $\Delta \check{x}_{i,l} = \left(\frac{1}{M_{\text{sys},ii}^{\text{g}}} f_{\text{sys},i,l}^{\text{g},\text{pd}} - \ddot{x}_{\text{sys},i,l}^{\text{g},\text{pd}}\right) \frac{\Delta t^2}{2}$	
	$\check{\mathbf{x}}_{i,l} = \check{\mathbf{x}}_{i,l}^{\mathrm{pd}} + \mathbf{s}\Delta \check{x}_{i,l}$	
E	Endgültiges Update Geschichtsvariablen $\mathbf{x}_{\mathrm{sys},l}^{\mathrm{g}}, \dot{\mathbf{x}}_{\mathrm{sys},l}^{\mathrm{g}}, \mathbf{g}_{\mathrm{sys},l-1}, \ldots \to \mathbf{g}_{\mathrm{sys},l}$	

Abbildung A.1: Vereinfachtes Struktogramm des gestaffelten Lösungsverfahrens bei der vorgestellten Diskrete-Element-Methode.

$m=1,\dots,n_{ m h}$	
Balken aktiv	
wahr	falsch
Vorläufiges Update Geschichtsvariable Balken $\mathbf{x}_{\mathrm{I},l}^{\mathrm{g,pd}}, \mathbf{x}_{\mathrm{II},l}^{\mathrm{g,pd}}, \kappa_{l-1} \to \kappa_{l}^{\mathrm{pd}} \curvearrowright \mathbf{g}_{\mathrm{sys},l}^{\mathrm{pd}} (\mathrm{ru}),$ $\mathbf{x}_{\mathrm{I},l}^{\mathrm{g,pd}}, \mathbf{x}_{\mathrm{II},l}^{\mathrm{g,pd}}, \dot{\mathbf{x}}_{\mathrm{II},l}^{\mathrm{g,pd}}, \dot{\mathbf{x}}_{\mathrm{II},l}^{\mathrm{g,pd}}, d_{l-1} \to d_{l}^{\mathrm{pd}} \curvearrowright \mathbf{g}_{\mathrm{sys},l}^{\mathrm{pd}} (\mathrm{ra})$	
Kraft aus haftender Verbindung $\mathbf{x}_{\mathrm{I},l}^{\mathrm{g,pd}}, \mathbf{x}_{\mathrm{II},l}^{\mathrm{g,pd}}, \kappa_{l}^{\mathrm{pd}}(\mathrm{ru}), d_{l}^{\mathrm{pd}}(\mathrm{ra}) \to \mathbf{f}_{\mathrm{h,I},l}^{\mathrm{g,pd}}, \mathbf{f}_{\mathrm{h,II},l}^{\mathrm{g,pd}} \curvearrowright \mathbf{f}_{\mathrm{sys},l}^{\mathrm{g,pd}}$	
Kontaktsuche Stufe (a) & (b) $\mathbf{x}_{\mathrm{sys},l}^{\mathrm{g,pd}} \to \mathrm{Liste} \ \mathrm{potentieller} \ \mathrm{Kontaktpaare}$	
Schleife über alle potentiellen Kontaktpaare $m=1,\ldots,n_{\mathrm{pk}}$	
Kontaktsuche Stufe (c) & (d) $\mathbf{x}_{\mathrm{I},l}^{\mathrm{g,pd}}, \mathbf{x}_{\mathrm{II},l}^{\mathrm{g,pd}} \to \mathrm{Kontaktstatus}$	
Kontakt	
wahr	falsch
$\begin{matrix} \text{Normalkraft} \\ \mathbf{x}_{\mathrm{I},l}^{\mathrm{g,pd}}, \!\mathbf{x}_{\mathrm{II},l}^{\mathrm{g,pd}}, \!\dot{\mathbf{x}}_{\mathrm{I},l}^{\mathrm{g,pd}}, \!\dot{\mathbf{x}}_{\mathrm{II},l}^{\mathrm{g,pd}} \rightarrow \mathbf{f}_{\mathrm{n,II},l}^{\mathrm{g,pd}}, \mathbf{f}_{\mathrm{n,II},l}^{\mathrm{g,pd}} \curvearrowright \mathbf{f}_{\mathrm{sys},l}^{\mathrm{g,pd}} \end{matrix}$	
Vorläufiges Update Geschichtsvariablen tangential $\mathbf{x}_{\mathrm{I},l}^{\mathrm{g,pd}}, \mathbf{x}_{\mathrm{II},l}^{\mathrm{g,pd}}, \dot{\mathbf{x}}_{\mathrm{II},l}^{\mathrm{g,pd}}, \dot{\mathbf{x}}_{\mathrm{II},l}^{\mathrm{g,pd}}, u_{\mathrm{t},l-1}, v_{\mathrm{t},l-1} \to u_{\mathrm{t},l}^{\mathrm{pd}} \curvearrowright \mathbf{g}_{\mathrm{sys},l}^{\mathrm{pd}}$ $\mathbf{x}_{\mathrm{I},l}^{\mathrm{g,pd}}, \mathbf{x}_{\mathrm{II},l}^{\mathrm{g,pd}}, u_{\mathrm{t},l}^{\mathrm{pd}}, u_{\mathrm{t},l-1}^{\mathrm{pl}} \to u_{\mathrm{t},l}^{\mathrm{pl,pd}} \curvearrowright \mathbf{g}_{\mathrm{sys},l}^{\mathrm{pd}}$	
$\begin{aligned} & \text{Tangentialkraft} \\ & \mathbf{x}_{\mathrm{I},l}^{\mathrm{g,pd}}, \mathbf{x}_{\mathrm{II},l}^{\mathrm{g,pd}}, u_{\mathrm{t},l}^{\mathrm{pd}}, u_{\mathrm{t},l}^{\mathrm{pl,pd}} \rightarrow \mathbf{f}_{\mathrm{t,II},l}^{\mathrm{g,pd}}, \mathbf{f}_{\mathrm{t,II},l}^{\mathrm{g,pd}} \curvearrowright \mathbf{f}_{\mathrm{sys},l}^{\mathrm{g,pd}} \end{aligned}$	
Schleife über alle Partikel	
$m=1,\ldots,n_{ m p}$	
Schleife über alle Gaußpunkte	
$k=1,\ldots,n_{\mathrm{gp},m}$	
Vorläufiges Update Geschichtsvariablen Untergrun $\mathbf{x}^{\mathrm{g,pd}}_{m,l}, \mathbf{u}^{\mathrm{pl}}_{\mathrm{u},k,l-1} \to \mathbf{u}^{\mathrm{pl,pd}}_{\mathrm{u},k,l} \curvearrowright \mathbf{g}^{\mathrm{pd}}_{\mathrm{sys},l}$	nd
$\mathbf{x}^{\mathrm{g,pd}}_{m,l}, \mathbf{u}^{\mathrm{pl,pd}}_{\mathrm{u},k,l} \to \boldsymbol{\tau}^{\mathrm{pd}}_{\mathrm{u},k,l} \curvearrowright \mathbf{f}^{\mathrm{g,pd}}_{\mathrm{u},m,l} \curvearrowright \mathbf{f}^{\mathrm{g,pd}}_{\mathrm{sys},l}$	
$\mathbf{f}_{\mathrm{ext},m}^{\mathrm{g}} \sim \mathbf{f}_{\mathrm{sys},l}^{\mathrm{g,pd}}$	

Abbildung A.2: Vereinfachtes Struktogramm für das vorläufige Update der Geschichtsvariablen und die Funktionsauswertung aus Abbildung A.1.

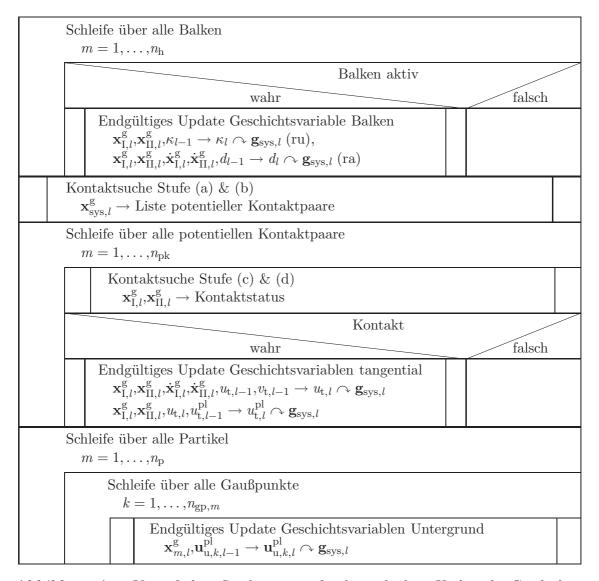


Abbildung A.3: Vereinfachtes Struktogramm für das endgültige Update der Geschichtsvariablen aus Abbildung A.1.

Literaturverzeichnis

ALLEN UND TILDESLEY 1987

Allen, M. P.; Tildesley, D. J.: Computer simulation of liquids. Oxford University Press, Oxford, 1987.

ALTENBACH UND ALTENBACH 1994

Altenbach, J.; Altenbach, H.: Einführung in die Kontinuumsmechanik. Teubner, Stuttgart, 1994.

Ascher und Petzold 1998

Ascher, U. M.; Petzold, L. R.: Computer methods for ordinary differential equations and differential-algebraic equations. Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, 1998.

BAGI 1993

Bagi, K.: A quasi-static numerical model for micro-level analysis of granular assemblies. In: *Mechanics of Materials* 16 (1993), S. 101–110.

Bagi 2005

Bagi, K.: An algorithm to generate random dense arrangements for discrete element simulations of granular assemblies. In: *Granular Matter* 7 (2005), S. 31–43.

Barbosa und Ghaboussi 1990

Barbosa, R. E.; Ghaboussi, J.: Discrete finite element method for multiple deformable bodies. In: *Finite Elements in Analysis and Design* 7 (1990), S. 145–158.

Belytschko u.a. 2008

Belytschko, T.; Liu, W. K.; Moran, B.: Nonlinear finite elements for continua and structures. Wiley, Chichester, 2008.

Bićanić 2004

Bićanić, N.: Discrete element methods. In: Stein, E.; de Borst, R.; Hughes, T. J. R. (Hrsg.): *Encyclopedia of computational mechanics: Volume 1: Fundamentals.* Wiley, Chichester, 2004, Kap. 11, S. 311–337.

Bićanić 2006

Bićanić, N.: Discrete element methods. In: Zienkiewicz, O. C.; Taylor, R. L. (Hrsg.): *The finite element method for solid and structural mechanics*. 6. Auflage. Elsevier, Oxford, 2006, Kap. 9, S. 245–277.

Brara U. A. 2001

Brara, A.; Camborde, F.; Klepaczko, J. R.; Mariotti, C.: Experimental and numerical study of concrete at high strain rates in tension. In: *Mechanics of Materials* 33 (2001), S. 33–45.

Brendel und Dippel 1998

Brendel, L.; Dippel, S.: Lasting contacts in molecular dynamics simulations. In: Herrmann, H. J.; Hovi, J.-P.; Luding, S. (Hrsg.): *Physics of Dry Granular Media: Proceedings of the NATO Advanced Study Institute on Physics of Dry Granular Media, 15.–26. September 1997, Cargèse, Frankreich*, NATO Science Series E, Vol. 350, 1998.

Brilliantov U. A. 1996

Brilliantov, N. V.; Spahn, F.; Hertzsch, J.-M.; Pöschel, T.: Model for collisions in granular gases. In: *Physical Review E* 53 (1996), S. 5382–5392.

BÜCHTER UND RAMM 1992

Büchter, N.; Ramm, E.: Large rotations in structural mechanics – Overview. In: Rammerstorfer, F. G. (Hrsg.): *Nonlinear analysis of shells by finite elements*. CISM Courses and Lectures No. 328, Springer, Wien, 1992, S. 1–13.

Campbell und Brennen 1985

Campbell, C. S.; Brennen, C. E.: Computer simulation of granular shear flows. In: *Journal of Fluid Mechanics* 151 (1985), S. 167–188.

Chang U. A. 2002

Chang, C. S.; Wang, T. K.; Sluys, L. J.; van Mier, J. G. M.: Fracture modeling using a micro-structural mechanics approach—I. Theory and formulation. In: *Engineering Fracture Mechanics* 69 (2002), S. 1941–1958.

Comité Euro-International du Béton 1993

Comité Euro-International du Béton (Hrsg.): CEB-FIP model code 1990: Design code. Thomas Telford, London, 1993.

Cook und Jensen 2002

Cook, B. K.; Jensen, R. P. (Hrsg.): Discrete Element Methods: Numerical Modeling of Discontinua: Proceedings of the Third International Conference, 23.–25. September 2002, Santa Fe, USA. 2002.

Cowper 1973

Cowper, G. R.: Gaussian quadrature formulas for triangles. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 7 (1973), S. 405–408.

Cui und O'Sullivan 2003

Cui, L.; O'Sullivan, C.: Analysis of a triangulation based approach for specimen generation for discrete element simulations. In: *Granular Matter* 5 (2003), S. 135–145.

Cundall 1971

Cundall, P. A.: A computer model for simulating progressive, large-scale movements in blocky rock systems. In: *Proceedings Symp. Int. Soc. Rock Mech.*, Nancy, 1971.

Cundall und Hart 1992

Cundall, P. A.; Hart, R. D.: Numerical modelling of discontinua. In: *Engineering Computations* 9 (1992), S. 101–113.

Cundall und Strack 1979

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

Cusatis 2001

Cusatis, G.: Tridimensional random particle model for concrete, Dipartimento di Ingegneria Strutturale, Politecnico di Milano, Dissertation, 2001.

D'ADDETTA 2004

D'Addetta, G. A.: Discrete models for cohesive frictional materials, Bericht Nr. 42, Institut für Baustatik, Universität Stuttgart, Dissertation, 2004.

D'ADDETTA U. A. 2002

D'Addetta, G. A.; Kun, F.; Ramm, E.: On the application of a discrete model to the fracture process of cohesive granular materials. In: *Granular Matter* 4 (2002), S. 77–90.

D'Addetta und Ramm 2006

D'Addetta, G. A.; Ramm, E.: A microstructure-based simulation environment on the basis of an interface enhanced particle model. In: *Granular Matter* 8 (2006), S. 159–174.

D'ADDETTA U. A. 2004

D'Addetta, G. A.; Ramm, E.; Diebels, S.; Ehlers, W.: A particle center based homogenization strategy for granular assemblies. In: *Engineering Computations* 21 (2004), S. 360–383.

D'ADDETTA U. A. 2006

D'Addetta, G. A.; Schneider, B.; Ramm, E.: Particle models for cohesive frictional materials. In: Meschke, G.; de Borst, R.; Mang, H.; Bićanić, N. (Hrsg.): Computational Modelling of Concrete Structures: Proceedings of EURO-C 2006, 27.–30. März 2006, Mayrhofen, Österreich, Taylor & Francis, London, 2006, S. 269–280.

DEM SOLUTIONS 2011

DEM Solutions, Ltd.: DEM Solutions. 2011. - URL http://www.dem-solutions.com/.

Detember 2006

Dettmar, J.P.: Static and dynamic homogenization analyses of discrete granular and atomistic structures on different time and length scales, Bericht Nr.: I-17, Institut für Mechanik (Bauwesen), Lehrstuhl I, Universität Stuttgart, Dissertation, 2006.

Deuflhard und Bornemann 2008

Deuflhard, P.; Bornemann, F.: Numerische Mathematik 2: Gewöhnliche Differentialgleichungen. 3. Auflage. de Gruyter, Berlin, 2008.

Di Renzo und Di Maio 2005

Di Renzo, A.; Di Maio, F. P.: An improved integral non-linear model for the contact of particles in distinct element simulations. In: *Chemical Engineering Science* 60 (2005), S. 1303–1312.

Donzé u. a. 1994

Donzé, F.; Mora, P.; Magnier, S.-A.: Numerical simulation of faults and shear zones. In: *Geophysical Journal International* 116 (1994), S. 46–52.

EHLERS 2000

Ehlers, W.: Technische Mechanik III: Einführung in die Kinetik der Massenpunkte und der starren Körper. Unterlagen zur Vorlesung, Wintersemester 2000/2001, Universität Stuttgart, Deutschland. 2000.

Erhart 2004

Erhart, T.: Strategien zur numerischen Modellierung transienter Impaktvorgänge bei nichtlinearem Materialverhalten, Bericht Nr. 44, Institut für Baustatik, Universität Stuttgart, Dissertation, 2004.

Feng U.A. 2007

Feng, Y. T.; Han, K.; Owen, D. R. J.; Loughran, J.: Upscaling of discrete element models for particle systems. In: *Proceedings of Discrete Element Methods 07, 27.–29. August 2007, Brisbane, Australien, 2007.*

Feng und Owen 2004

Feng, Y. T.; Owen, D. R. J.: A 2D polygon/polygon contact model: Algorithmic aspects. In: *Engineering Computations* 21 (2004), S. 265–277.

Feng und Owen 2008

Feng, Y. T.; Owen, D. R. J.: Discrete element methods. In: Short Course on Particle-Based Methods: Fundamentals and Applications, 14.–16. Mai 2008, Barcelona, Spanien, 2008.

Gallas u. a. 1992

Gallas, J. A. C.; Herrmann, H. J.; Sokolowski, S.: Molecular dynamics simulation of powder fluidization in two dimensions. In: *Physica A* 189 (1992), S. 437–446.

Gear 1971

Gear, C. W.: Numerical initial value problems in ordinary differential equations. Prentice-Hall Series in Automatic Computation, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1971.

Ghaboussi und Barbosa 1990

Ghaboussi, J.; Barbosa, R.: Three-dimensional discrete element method for granular ma-

terials. In: International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics 14 (1990), S. 451–472.

Goldsmith 1960

Goldsmith, W.: Impact: The theory and physical behaviour of colliding solids. Edward Arnold, London, 1960.

GORHAM UND KHARAZ 2000

Gorham, D. A.; Kharaz, A. H.: The measurement of particle rebound characteristics. In: *Powder Technology* 112 (2000), S. 193–202.

Hairer U. A. 2002

Hairer, E.; Lubich, C.; Wanner, G.: Geometric numerical integration: Structure-preserving algorithms for ordinary differential equations. Springer Series in Computational Mathematics, 31, Springer, Berlin, 2002.

Hairer U. A. 1993

Hairer, E.; Nørsett, S.P.; Wanner, G.: Solving ordinary differential equations I: Nonstiff problems. 2. Auflage. Springer Series in Computational Mathematics, 8, Springer, Berlin, 1993.

Hairer und Wanner 1996

Hairer, E.; Wanner, G.: Solving ordinary differential equations II: Stiff and differential-algebraic problems. 2. Auflage. Springer Series in Computational Mathematics, 14, Springer, Berlin, 1996.

HART U. A. 1988

Hart, R.; Cundall, P. A.; Lemos, J.: Formulation of a three-dimensional distinct element model—part II. Mechanical calculations for motion and interaction of a system composed of many polyhedral blocks. In: *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences & Geomechanics Abstracts* 25 (1988), S. 117–125.

Hauger U. A. 1999

Hauger, W.; Schnell, W.; Gross, D.: *Technische Mechanik: 3 Kinetik.* 6. Auflage. Springer, Berlin, 1999.

Hentz U.A. 2004

Hentz, S.; Donzé, F. V.; Daudeville, L.: Discrete element modelling of concrete submitted to dynamic loading at high strain rates. In: *Computers and Structures* 82 (2004), S. 2509–2524.

HERRMANN U. A. 1989

Herrmann, H. J.; Hansen, A.; Roux, S.: Fracture of disordered, elastic lattices in two dimensions. In: *Physical Review B* 39 (1989), S. 637–648.

Hertz 1882

Hertz, H.: Ueber die Berührung fester elastischer Körper. In: Journal für die reine und angewandte Mathematik 92 (1882), S. 156–171.

HOGUE 1998

Hogue, C.: Shape representation and contact detection for discrete element simulations of arbitrary geometries. In: *Engineering Computations* 15 (1998), S. 374–390.

Holzapfel 2000

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

Hrennikoff 1941

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

Hughes 2000

Hughes, T. J. R.: The finite element method: Linear static and dynamic finite element analysis. Dover, Mineola, 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.

Issa und Nelson 1992

Issa, J. A.; Nelson, R. B.: Numerical analysis of micromechanical behaviour of granular materials. In: *Engineering Computations* 9 (1992), S. 211–223.

ITASCA 2011

Itasca, Consulting Group Inc.: ITASCA. 2011. - URL http://www.itascacg.com/.

IWASHITA UND ODA 1998

Iwashita, K.; Oda, M.: Rolling resistance at contacts in simulation of shear band development by DEM. In: *Journal of Engineering Mechanics* 124 (1998), S. 285–292.

Jean 1999

Jean, M.: The non-smooth contact dynamics method. In: Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 177 (1999), S. 235–257.

Jirásek 2007

Jirásek, M.: *Modeling of localized inelastic deformation: Lecture notes.* Short Course, 24.–28. September 2007, Czech Technical University, Prag, Tschechien. 2007.

Johnson 2003

Johnson, K. L.: Contact mechanics. Cambridge University Press, Cambridge, 2003.

Kohring U. A. 1995

Kohring, G. A.; Melin, S.; Puhl, H.; Tillemans, H. J.; Vermöhlen, W.: Computer simulations of critical, non-stationary granular flow through a hopper. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 124 (1995), S. 273–281.

Kruggel-Emden 2008

Kruggel-Emden, H.: Analysis and improvement of the time-driven discrete element method, Fakultät für Maschinenbau, Ruhr-Universität Bochum, Dissertation, 2008.

Kuhl 2000

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

Kuhl u.a. 2000

Kuhl, E.; D'Addetta, G. A.; Herrmann, H. J.; Ramm, E.: A comparison of discrete granular material models with continuous microplane formulations. In: *Granular Matter* 2 (2000), S. 113–121.

Kuhn 2004

Kuhn, M. R. (Hrsg.): Special edition: The discrete element method: Numerical modelling of discontinua. In: *Engineering Computations* 21 (2004).

Kun u. a. 1999

Kun, F.; D'Addetta, G. A.; Herrmann, H. J.; Ramm, E.: Two-dimensional dynamic simulation of fracture and fragmentation of solids. In: *Computer Assisted Mechanics and Engineering Sciences* 6 (1999), S. 385–402.

Kun und Herrmann 1996

Kun, F.; Herrmann, H. J.: A study of fragmentation processes using a discrete element method. In: Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 138 (1996), S. 3–18.

Kusano u. a. 1992

Kusano, N.; Aoyagi, T.; Aizawa, J.; Ueno, H.; Morikawa, H.; Kobayashi, N.: Impulsive local damage analyses of concrete structure by the distinct element method. In: *Nuclear Engineering and Design* 138 (1992), S. 105–110.

Landau und Lifschitz 1987

Landau, L. D.; Lifschitz, E. M.: Lehrbuch der theoretischen Physik: I Mechanik. 12. Auflage. Akademie, Berlin, 1987.

LÄTZEL 2003

Lätzel, M.: From microscopic simulations towards a macroscopic description of granular media, Institut für Computeranwendungen 1, Universität Stuttgart, Dissertation, 2003.

Lemaitre 1996

Lemaitre, J.: A course on damage mechanics. 2. Auflage. Springer, Berlin, 1996.

Li und Liu 2007

Li, S.; Liu, W. K.: Meshfree particle methods. Springer, Berlin, 2007.

LUDING 1998

Luding, S.: Collisions & contacts between two particles. In: Herrmann, H. J.; Hovi, J.-P.; Luding, S. (Hrsg.): Physics of Dry Granular Media: Proceedings of the NATO Advanced Study Institute on Physics of Dry Granular Media, 15.–26. September 1997, Cargèse, Frankreich, NATO Science Series E, Vol. 350, 1998.

LUDING 2004

Luding, S.: Molecular dynamics simulations of granular materials. In: Hinrichsen, H.; Wolf, D. E. (Hrsg.): *The physics of granular media*. Wiley-VCH, Weinheim, 2004, S. 299–324.

Magnier und Donzé 1998

Magnier, S. A.; Donzé, F. V.: Numerical simulations of impacts using a discrete element method. In: *Mechanics of Cohesive-Frictional Materials* 3 (1998), S. 257–276.

Malvern 1969

Malvern, L. E.: Introduction to the mechanics of a continuous medium. Prentice-Hall Series in Engineering of the Physical Sciences, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1969.

Marsden und Hughes 1994

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

Mindlin 1949

Mindlin, R. D.: Compliance of elastic bodies in contact. In: *Journal of Applied Mechanics* 16 (1949), S. 259–268.

MINDLIN UND DERESIEWICZ 1953

Mindlin, R. D.; Deresiewicz, H.: Elastic spheres in contact under varying oblique forces. In: *Journal of Applied Mechanics* 20 (1953), S. 327–344.

Moukarzel und Herrmann 1992

Moukarzel, C.; Herrmann, H. J.: A vectorizable random lattice. In: *Journal of Statistical Physics* 68 (1992), S. 911–923.

Munjiza 2005

Munjiza, A: The combined finite-discrete element method. Wiley, Chichester, 2005.

Munjiza u.a. 1995

Munjiza, A.; Owen, D.R.J.; Bićanić, N.: A combined finite-discrete element method in transient dynamics of fracturing solids. In: *Engineering Computations* 12 (1995), S. 145–174.

NOLTING 1993

Nolting, W.: Grundkurs: Theoretische Physik: 1 Klassische Mechanik. 3. Auflage. Zimmermann-Neufang, Ulmen, 1993.

Oñate und Owen 2009

Oñate, E.; Owen, D. R. J. (Hrsg.): Proceedings of the International Conference on Particle-Based Methods: Fundamentals and Applications (Particles 2009), 25.–27. November 2009, Barcelona, Spanien. 2009.

Oñate und Owen 2011

Oñate, E.; Owen, D. R. J. (Hrsg.): Proceedings of the II International Conference on Particle-Based Methods: Fundamentals and Applications (Particles 2011), 26.–28. Oktober 2011, Barcelona, Spanien. 2011.

Ostoja-Starzewski 2002

Ostoja-Starzewski, M.: Lattice models in micromechanics. In: *Applied Mechanics Reviews* 55 (2002), S. 35–60.

O'SULLIVAN U.A. 2004

O'Sullivan, C.; Bray, J. D.; Riemer, M.: Examination of the response of regularly packed specimens of spherical particles using physical tests and discrete element simulations. In: *Journal of Engineering Mechanics* 130 (2004), S. 1140–1150.

OWEN U.A. 1992

Owen, D. R. J.; Hinton, E.; Bathe, K. J. (Hrsg.): Special edition: Selected Papers of the 1st U.S. Conference on Discrete Element Methods, Oktober 1989, Colorado, USA. In: *Engineering Computations* 9 (1992).

PÖSCHEL UND SCHWAGER 2005

Pöschel, T.; Schwager, T.: Computational granular dynamics: Models and algorithms. Springer, Berlin, 2005.

Ротароу U. A. 1995

Potapov, A. V.; Hopkins, M. A.; Campbell, C. S.: A two-dimensional dynamic simulation of solid fracture: Part I: Description of the model. In: *International Journal of Modern Physics C* 6 (1995), S. 371–398.

RAMM 2002

Ramm, E.: Stabtragwerke Teil VII: Baudynamik. Unterlagen zur Vorlesung, Wintersemester 2002/2003, Universität Stuttgart, Deutschland. 2002.

RAMM 2003

Ramm, E.: *Lineare Finite Elemente für Tragwerksberechnungen*. Unterlagen zur Vorlesung, Wintersemester 2003/2004, Universität Stuttgart, Deutschland. 2003.

RAMM U.A. 2011

Ramm, E.; Bischoff, M.; Schneider, B.: On some features of a polygonal discrete element model. In: Mueller-Hoeppe, D.; Loehnert, S.; Reese, S. (Hrsg.): *Recent developments and innovative applications in computational mechanics*. Springer, Berlin, 2011, S. 265–273.

RAMM UND HOFMANN 1996

Ramm, E.; Hofmann, T. J.: Stabtragwerke. In: Mehlhorn, G. (Hrsg.): Der Ingenieurbau: Grundwissen: Baustatik, Baudynamik. Ernst & Sohn, Berlin, 1996, S. 1–350.

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.

Rapaport 2007

Rapaport, D.C.: The art of molecular dynamics simulation. 2. Auflage. Cambridge University, Cambridge, 2007.

Schäfer 1996

Schäfer, J.: Rohrfluß granularer Materie: Theorie und Simulationen, Berichte des Forschungszentrums Jülich; 3214, Universität-GH-Duisburg, Dissertation, 1996.

Schäfer u. a. 1996

Schäfer, J.; Dippel, S.; Wolf, D. E.: Force schemes in simulations of granular materials. In: *Journal de Physique I* 6 (1996), S. 5–20.

Schäfer und Wolf 1995

Schäfer, J.; Wolf, D. E.: Bistability in simulated granular flow along corrugated walls. In: *Physical Review E* 51 (1995), S. 6154–6157.

Schneebeli 1957

Schneebeli, G.: Une analogie mécanique pour l'étude de la stabilité des ouvrages en terre à deux dimensions. In: Proceedings of the Fourth International Conference on Soil Mechanics and Foundation Engineering, August 1957, London, England Bd. 2, 1957, S. 228–232.

Schneider u.a. 2010

Schneider, B.; Bischoff, M.; Ramm, E.: Modeling of material failure by the discrete element method. In: *PAMM: Proceedings in Applied Mathematics and Mechanics* 10 (2010), S. 685–688.

Schneider U.A. 2011

Schneider, B.; D'Addetta, G. A.; Ramm, E.: On material modeling by polygonal discrete elements. In: Oñate, E.; Owen, R. (Hrsg.): *Particle-Based methods: Fundamentals and applications*. Computational Methods in Applied Sciences, Vol. 25, Springer, Dordrecht, 2011, S. 159–185.

SHI UND GOODMAN 1989

Shi, G.-H.; Goodman, R. E.: Generalization of two-dimensional discontinuous deformation analysis for forward modelling. In: *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics* 13 (1989), S. 359–380.

Simo und Hughes 1998

Simo, J. C.; Hughes, T. J. R.: *Computational inelasticity*. Interdisciplinary Applied Mathematics: Mechanics and Materials, Volume 7, Springer, New York, 1998.

SORG UND BISCHOFF 2011

Sorg, A.; Bischoff, M.: Adaptive discrete-continuous modelling of evolving discontinuities. In: Oñate, E.; Owen, D. R. J. (Hrsg.): Proceedings of the II International Conference on Particle-Based Methods: Fundamentals and Applications (Particles 2011), 26.–28. Oktober 2011, Barcelona, Spanien, 2011.

Stevens und Hrenya 2005

Stevens, A.B.; Hrenya, C.M.: Comparison of soft-sphere models to measurements of collision properties during normal impacts. In: *Powder Technology* 154 (2005), S. 99–109.

STOYAN 2002

Stoyan, D.: Simulation and characterization of random systems of hard particles. In: *Image Analysis & Stereology* 21 (2002), S. 41–48.

Thompson und Grest 1991

Thompson, P. A.; Grest, G. S.: Granular flow: Friction and the dilatancy transition. In: *Physical Review Letters* 67 (1991), S. 1751–1754.

THORNTON UND RANDALL 1988

Thornton, C.; Randall, C. W.: Applications of theoretical contact mechanics to solid particle system simulation. In: Satake, M.; Jenkins, J. T (Hrsg.): *Micromechanics of Granular Materials: Proceedings of the U.S./Japan Seminar on the Micromechanics of Granular Materials, 26.–30. Oktober 1987, Sendai-Zao, Japan, Studies in Applied Mechanics, 20, Elsevier, Amsterdam, 1988.*

TILLEMANS UND HERRMANN 1995

Tillemans, H.-J.; Herrmann, H. J.: Simulating deformations of granular solids under shear. In: *Physica A* 217 (1995), S. 261–288.

Tsuji u.a. 1992

Tsuji, Y.; Tanaka, T.; Ishida, T.: Lagrangian numerical simulation of plug flow of cohesionless particles in a horizontal pipe. In: *Powder Technology* 71 (1992), S. 239–250.

VAN MIER 1997

van Mier, J. G. M.: Fracture processes of concrete: Assessment of material parameters for fracture models. New Directions in Civil Engineering, CRC Press, Boca Raton, 1997.

Veje u. a. 1999

Veje, C. T.; Howell, D. W.; Behringer, R. P.: Kinematics of a two-dimensional granular Couette experiment at the transition to shearing. In: *Physical Review E* 59 (1999), S. 739–745.

Walton 1982

Walton, O. R.: Explicit particle dynamics model for granular materials. In: Eisenstein, Z. (Hrsg.): Proceedings of the Fourth International Conference on Numerical Methods in Geomechanics, 31. Mai-4. Juni 1982, Edmonton, Kanada, 1982, S. 1261–1268.

Walton und Braun 1986

Walton, O. R.; Braun, R. L.: Viscosity, granular-temperature, and stress calculations for shearing assemblies of inelastic, frictional disks. In: *Journal of Rheology* 30 (1986), S. 949–980.

Wieghardt 1906

Wieghardt, K.: Über einen Grenzübergang der Elastizitätslehre und seine Anwendung auf die Statik hochgradig statisch unbestimmter Fachwerke. In: Verhandlungen des Vereins zur Beförderung des Gewerbefleißes 85 (1906), S. 139–176.

Williams U. A. 1985

Williams, J. R.; Hocking, G.; Mustoe, G. G. W.: The theoretical basis of the discrete element method. In: *Proceedings of the International Conference on Numerical Methods in Engineering: Theory and Applications*, 7.–11. Januar 1985, Swansea, Wales, 1985, S. 897–906.

WILLIAMS UND O'CONNOR 1995

Williams, J. R.; O'Connor, R.: A linear complexity intersection algorithm for discrete element simulation of arbitrary geometries. In: *Engineering Computations* 12 (1995), S. 185–201.

WITTEL U. A. 2006

Wittel, F.K.; Kun, F.; Herrmann, H.J.: Damage simulation of high performance fiber reinforced concrete. (2006). – URL http://www.ndt.net.

WOHLMUTH 2005

Wohlmuth, B.: Numerical algorithms for ODEs and linear systems. Unterlagen zur Vorlesung, Sommersemester 2005, Universität Stuttgart, Deutschland. 2005.

Wriggers und Wellmann 2008

Wriggers, P.; Wellmann, C.: DEM for granular materials. In: Short Course on Particle-Based Methods: Fundamentals and Applications, 14.–16. Mai 2008, Barcelona, Spanien, 2008.

Zieliński 1982

Zieliński, A.J.: Fracture of concrete and mortar under uniaxial impact tensile loading, Technische Hogeschool Delft, Dissertation, 1982.

ZIENKIEWICZ U.A. 2006

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

Lebenslauf

Persönliche Daten

Name Benjamin J. Schneider

Geburtsdatum 15. Februar 1979

Geburtsort Würzburg

Familienstand Ledig

Schulische Ausbildung

09/1985–08/1989 Rudolf-von-Scherenberg-Volksschule Dettelbach

09/1989–06/1998 Egbert-Gymnasium Münsterschwarzach

06/1998 Allgemeine Hochschulreife

Zivildienst

09/1998–09/1999 Mainfränkische Werkstätten, Würzburg

Universitäre Ausbildung

10/1999–12/2004 Universität Stuttgart:

Diplomstudium Bauingenieurwesen

09/2001-02/2002 Universidad Politécnica de Madrid:

Studium Ingeniería de Caminos, Canales y Puertos

12/2004 Universität Stuttgart:

Diplom-Ingenieur

07/2005 Universität Stuttgart:

Emil-Mörsch-Studienpreis für besondere Studienleistungen

03/2005–07/2011 Institut für Baustatik und Baudynamik, Universität Stuttgart:

Wissenschaftlicher Mitarbeiter

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 diskret 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 Anwendungen auf Kugelschalen.

7 (1987) G. Kammler:

Ein finites Elementmodell zur Berechnung von Trägern und Stützen mit offenem, dünnwandigem Querschnitt unter Berücksichtigung der Interaktion zwischen globalem und lokalem Versagen.

8 (1988) A. Matzenmiller:

Ein rationales Lösungskonzept für geometrisch und physikalisch nichtlineare Strukturberechnungen.

9 (1989) D. Tao:

Die Technik der reduzierten Basis bei nichtlinearen finiten Element-Berechnungen.

10 (1989) K.M. Weimar:

Ein nichtlineares Balkenelement mit Anwendung als Längssteifen axialbelasteter Kreiszylinder.

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. de Mesquita Roehl:

Zur Berechnung von großen elastoplastischen Deformationen bei Flächentragwerken und Kontinua.

17 (1994) R. Reitinger:

Stabilität und Optimierung imperfektionsempfindlicher Tragwerke.

18 (1995) R.L.M. Suanno:

Ein dreidimensionales Simulationsmodell für Stahlbeton mit Plastizität und Schädigung.

19 (1995) M. Braun:

Nichtlineare Analysen von geschichteten, elastischen Flächentragwerken.

20 (1996) N. Rehle:

Adaptive Finite Element Verfahren bei der Analyse von Flächentragwerken.

21 (1996) C. Haußer:

Effiziente Dreieckselemente für Flächentragwerke.

22 (1996) D. Kuhl:

Stabile Zeitintegrationsalgorithmen in der nichtlinearen Elastodynamik dünnwandiger Tragwerke.

23 (1998) H. Schmidts:

Zur effizienten Modellierung und Analyse von Hochhaustragwerken.

24 (1998) H. Wang:

Interaktion des lokalen und globalen Stabilitätsverhaltens dünnwandiger Stäbe.

25 (1998) K. Maute:

Topologie- und Formoptimierung von dünnwandigen Tragwerken.

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:

Fehlerkontrolle bei Finite-Element-Methoden in der linearen Strukturdynamik.

34 (2001) S. Schwarz:

Sensitivitätsanalyse und Optimierung bei nichtlinearem Strukturverhalten.

35 (2001) A. Haufe:

Dreidimensionale Simulation bewehrter Flächentragwerke aus Beton mit der Plastizitätstheorie.

36 (2001) D.P. Mok:

Partitionierte Lösungsansätze in der Strukturdynamik und der Fluid-Struktur-Interaktion.

37 (2002) H. Steeb:

Fehlerschätzer für FE-Berechnungen bei entfestigenden Materialien.

38 (2002) K. Krausz:

Tragverhalten gemauerter Tonnengewölbe mit Stichkappen.

39 (2002) M. Hörmann:

Nichtlineare 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.

