

## Teilprojekt

### **D1**

Effiziente parallele Algorithmen zur Simulation des  
Deformationsverhaltens von Bauteilen aus  
elastisch-plastischen Materialien



## **2.1 Teilprojekt D1**

Effiziente parallele Algorithmen zur Simulation des Deformationsverhaltens von Bauteilen aus elastisch-plastischen Materialien

### **2.1.1 Antragsteller**

Prof. Dr. R. Kreißig  
Professur Festkörpermechanik  
Institut für Mechanik  
Fakultät für Maschinenbau  
TU Chemnitz

Prof. Dr. A. Meyer  
Professur Numerische Analysis  
Fakultät für Mathematik  
TU Chemnitz

Prof. Dr. M. Kuna  
Institut für Mechanik und Fluidodynamik  
Fakultät für Maschinenbau, Verfahrens- und Energietechnik  
TU Bergakademie Freiberg

### **2.1.2 Projektbearbeiter**

Dr. U. Benedix  
Professur Festkörpermechanik  
Institut für Mechanik  
Fakultät für Maschinenbau  
TU Chemnitz

Dr. M. Scherzer  
Institut für Mechanik und Fluidodynamik  
Fakultät für Maschinenbau, Verfahrens- und Energietechnik  
TU Bergakademie Freiberg

Dr. A. Bucher  
Professur Festkörpermechanik  
Institut für Mechanik  
Fakultät für Maschinenbau  
TU Chemnitz

DI F. Rabold  
Institut für Mechanik und Fluidodynamik  
Fakultät für Maschinenbau, Verfahrens- und Energietechnik  
TU Bergakademie Freiberg

## 2.2 Ausgangsfragestellung / Einleitung

Die Anwendung numerischer Verfahren zur Berechnung des mechanischen Verhaltens von Bauteilen und Konstruktionen hat eine wesentliche Effizienzsteigerung der Entwicklungsprozesse bewirkt. Insbesondere die Ablösung aufwändiger Versuchsreihen durch numerische Fallstudien und Experimente auf der Basis computergestützter Simulationstechniken hat dazu geführt, dass der Einsatz der Finite-Element Methode (FEM) mittlerweile zum Standard in nahezu allen Industriebereichen geworden ist. Daneben gewinnt die FEM immer stärker in Forschungsgebieten wie z.B. der Biologie und Medizin an Bedeutung, in denen bis dahin wegen der Komplexität der Problemstellungen nur vereinzelt numerische Simulationen Anwendung fanden.

Bei der Entscheidung für eine spezielle Software stehen in der Praxis zwei Kriterien besonders im Blickpunkt – Effektivität (Zeitersparnis) und Genauigkeit. Die Untersuchungen im Rahmen des SFB zeigen den engen Zusammenhang dieser Merkmale. In den ersten beiden Förderungsperioden stand die Effektivitätssteigerung numerischer Simulationen durch konsequente Parallelisierung der Algorithmen im Vordergrund. Die erzielte Zeiteinsparung ermöglicht eine Approximation des realen Bauteilverhaltens durch komplexere Modelle, womit die Genauigkeit der Berechnungen verbessert wird. Die Entwicklung und Nutzung moderner adaptiver Vernetzungsstrategien, denen in der vergangenen und der laufenden Förderungsperiode verstärkte Aufmerksamkeit gewidmet wurde, sind anschaulicher Beweis für das Streben nach einem sinnvollen Kompromiss zwischen Effektivität und Genauigkeit einer numerischen Simulation. Das trifft besonders auf nicht-lineare Problemstellungen zu, die eine immer größere Praxisrelevanz erhalten.

Eine FE-Modellierung besteht im Wesentlichen aus drei großen Komplexen – der Geometriebeschreibung einschließlich Vernetzung, der Definition von Rand- und Anfangsbedingungen sowie der Approximation des realen Werkstoffverhaltens durch Materialmodelle. In der Praxis zeigt sich, dass gerade die Auswahl geeigneter konstitutiver Beziehungen und die Identifikation darin enthaltener Parameter problematisch sind, und in ungünstigen Fällen zu erheblichen Fehlern im Simulationsergebnis führen können.

Die Entwicklung zweckmäßiger Materialgesetze der Elastoplastizität bei kleinen und großen Verzerrungen sowie zuverlässiger Algorithmen zur numerischen Bestimmung von Werkstoffkenngrößen sind seit einer reichlichen Dekade Gegenstand der Forschungen am Lehrstuhl Festkörpermechanik der TU Chemnitz. In den Bereichen Mathematik und Informatik der TU Chemnitz werden seit mehreren Jahren Untersuchungen zum Aufbau und Transport effizienter Datenstrukturen sowie zur effektiven Lösung großdimensionierter linearer algebraischer Gleichungssysteme durchgeführt. Basierend auf diesen Entwicklungen war es das Ziel, im TP D1 des SFB ein FEM-Programm zur Lösung geometrisch und physikalisch nichtlinearer Aufgaben der Festkörpermechanik für sequenzielle und parallele Anwendungen zu realisieren und schrittweise für Praxisanwendungen vorzubereiten. Im Mittelpunkt stand dabei zunächst die Entwicklung effizienter Zeitdiskretisierungsverfahren und Gleichungslöser. Ein weiteres Ziel der Untersuchungen im Teilprojekt war, durch Einbettung des FEM-Programmes in einen Optimierungsalgorithmus die Anpassung von Materialmodellen an gemessene inhomogene Verschiebungsfelder und somit eine verbesserte Materialparameteridentifikation zu erreichen. Ab der zweiten Förderungsperiode wurden diese Berechnungsmethoden für die numerische Simulation und die Parameteroptimierung durch Einbeziehung der TU Bergakademie Freiberg auf Probleme der Schädigungs- und Bruchmechanik erweitert.

Während schnelle Löser bei 2D- und 3D-Elastizitätsproblemen mit hierarchischen oder BPX-Techniken seit längerer Zeit bekannt und in verschiedenen Programmrealisierungen des SFB integriert sind (vgl. TP A3), konnte die Eignung hierarchischer Techniken für Probleme der ebenen Elastoplastizität erstmals im Rahmen von Arbeiten der DFG-Forschergruppe *Scientific Parallel Computing* gezeigt und mit dem Programm SPC-PMEP in der zweiten Förderungsperiode des SFB verfügbar gemacht werden. Damit wurde eine Programmentwicklung für die Bearbeitung elastisch-plastischer Probleme mit isotroper, kinematischer und formativer Verfestigung bei kleinen Verzerrungen in einer parallelen Version realisiert, die auch sequenziell abgearbeitet werden kann.

Der große Anteil rechenintensiver Prozesse, die unabhängig voneinander an unterschiedlichen Orten der Geometrie bearbeitet werden können (z. B. während der Assemblierung in den Integrationsstützstellen der Elemente), bewirkt die natürliche Effizienzsteigerung einer FE-Berechnung durch deren Parallelisierung. Besonders deutlich wird dieser Vorteil gegenüber der sequenziellen Vorgehensweise bei der Simulation nichtlinearer Modelle mittels inkrementell-iterativer Algorithmen und der Lösung von Optimierungsproblemen mit der mehrfachen Wiederholung vollständiger Vorwärtsrechnungen. In diesem Zusammenhang konnte das Programm SPC-PMEP erfolgreich für die Materialparameteridentifikation durch Analyse inhomogener Verschiebungsfelder genutzt werden.

Reale Problemstellungen im Bereich der Elastoplastizität sowie der Bruch- und Schädigungsmechanik (z. B. Simulation von Umformvorgängen, Crash u.a.), lassen sich in der Regel nicht hinreichend zuverlässig mit geometrisch linearen Modellen beschreiben. Im Rahmen der weiteren Untersuchungen zum Teilprojekt erfolgte somit konsequenterweise die Realisierung eines FEM-Programmes zur Berechnung großer elastisch-plastischer Verzerrungen – des Programmes SPC-PMHP. Dabei wurde ein phänomenologisches Materialmodell unter Berücksichtigung einer Substruktur entwickelt und implementiert, das eine makroskopische Beschreibung von Vorgängen auf der Mikroebene ermöglicht. Basiert auf den Annahmen der rationalen Thermodynamik ergibt sich in diesem Zusammenhang ein Satz von Evolutionsgleichungen für innere Variablen zur Beschreibung einer allgemeinen plastischen Anisotropie, der für den Fall kleiner Verzerrungen in die Gleichungen der klassischen Elastoplastizität übergeht.

Von ihrer Struktur her sind die entwickelten Evolutionsgleichungen der assoziierten Fließtheorie differenzialalgebraische Gleichungen (DAE). Die DAEs zur Beschreibung des elastisch-plastischen Materialverhaltens bei großen Verzerrungen sind vergleichbar mit den entsprechenden Beziehungen im geometrisch linearen Fall. Daher konnte bei der Entwicklung von SPC-PMHP auf den algorithmischen Grundstrukturen von SPC-PMEP aufgebaut werden. Zur Lösung des globalen Steifigkeitssystems wurden die aktuellen, effizienten Solver-Entwicklungen aus dem TP A3 genutzt. Die Linearisierungstechniken zur Behandlung der DAEs beruhen wie bei kleinen Verzerrungen auf der Verwendung impliziter Einschrittverfahren. Zur Verbesserung des globalen und lokalen Konvergenzverhaltens erwies sich die Entwicklung und Implementierung geeigneter Dämpfungsalgorithmen für die Linearisierungsverfahren als sinnvoll. Die Materialschnittstelle ist wie bei SPC-PMEP so allgemein und umfassend gestaltet, dass Neuentwicklungen im Bereich der Konstitutivgleichungen ohne massive Eingriffe in die Programmstruktur implementiert werden können. Dieser Umstand wurde bereits für die Einbeziehung von Materialmodellen der duktilen Schädigungsmechanik erfolgreich genutzt. Die Untersuchungen zum elastisch-plastischen Materialverhalten bei großen Verzerrungen wurden letztendlich in der zweiten Förderungsperiode durch die Übertragung und Anpassung der

Algorithmen zur Materialparameteridentifikation auf den geometrisch nichtlinearen Fall erweitert. Somit stand zu Beginn des laufenden Berichtszeitraums ein FEM-Programm mit modernen, effizienten numerischen Algorithmen und einer flexiblen Materialschnittstelle zur Verfügung.

Neben der Auswahl geeigneter Materialmodelle hängt eine realistische numerische Simulation des mechanischen Verhaltens von Bauteilen und Baugruppen auch von der Art der Vernetzung des Gebietes ab. Um eine geforderte Genauigkeit bei der Lösung des Anfangsrandwertproblems zu erreichen, ist es zweckmäßig, in Gebieten mit großen Spannungsgradienten mit feineren Netzen zu arbeiten, während dies in Regionen mit kleineren Gradienten nicht unbedingt notwendig ist. Da die Lage und Größe der kritischen Gebiete in der Regel nur qualitativ festliegt und/oder sich während des Belastungsvorganges verändern kann, ist die Erstellung von a priori angepassten Netzen nicht immer möglich. Aus diesem Grund haben adaptive Vernetzungsstrategien im letzten Jahrzehnt eine immer größere Bedeutung erlangt. Hierbei ist zu erwähnen, dass globale Neuvernetzungsansätze wegen des kompletten Datentransfers auf das neue Netz unter Einbeziehung von Suchstrategien gewöhnlich nicht sehr effektiv und zudem mit Fehlern behaftet sind. Leistungsfähigere Methoden sind lokale, adaptive Strategien zur Netzverfeinerung und -vergrößerung speziell im Fall von nichtlinearen, inkrementellen Lösungsverfahren.

Für eine effektive Modellierung mechanischer Probleme bei großen Verzerrungen ist es günstig, die FE-Berechnung mit einem relativ groben Netz zu beginnen. Im weiteren Belastungsverlauf wird das Netz in Abhängigkeit von den vorhandenen Spannungsgradienten, die über spezielle Fehlerschätzer angezeigt werden, angepasst. Die Möglichkeit zur adaptiven Netzanpassung ist ein Merkmal hoher Leistungsstärke von FEM-Programmen. Aus diesem Grund stand im laufenden Förderungszeitraum die Weiterentwicklung adaptiver Vernetzungs- und Lösungsstrategien für nichtlineare Probleme im Mittelpunkt der Untersuchungen des Teilprojektes. Weiterhin sollte die Praxisrelevanz der FEM-Software durch eine effiziente Modellierung des Kontakts gegen starre Hindernisse, verbunden mit der adaptiven Vorgehensweise, wesentlich verbessert werden.

Die adaptive Netzverfeinerung, welche z. B. bei der Analyse eines sich schließenden Kontakts und der genauen Erfassung plastischer Zonen sowie von Gebieten mit großen Gradienten in den Feldvariablen erforderlich ist, wurde bereits im vergangenen Förderungszeitraum in enger Zusammenarbeit mit dem TP A3 für lineare Elastizität realisiert. Bei der Behandlung nichtlinearer Aufgabenstellungen wird die äußere Last in einzelnen Schritten aufgebracht. Es erfolgt eine örtliche und zeitliche Diskretisierung mit einer jeweils iterativen Lösung. In jedem Lastschritt muss das Materialgesetz auf der Ebene der Gaußpunkte integriert werden. Dabei setzen die verfügbaren Zeitdiskretisierungsverfahren für das lokale Anfangswertproblem das Vorhandensein der Feldgrößenwerte aus dem vorangegangenen Lastschritt in den Stützstellen voraus. Somit ist es bei der adaptiven Netzanpassung erforderlich, eine entsprechende Übertragung der Zustandsgrößen vom alten auf das neue Netz zu gewährleisten. Auf der Grundlage der Arbeiten zu effizienten Sovern und adaptiven Techniken in A3 und des in SPC-PMHP realisierten Materialmodells für anisotropes elastisch-plastisches Werkstoffverhalten wurde das nichtlineare, adaptive FEM-Programm SPC-PM2AdN1 entwickelt. In diesem Zusammenhang konnten neuartige Algorithmen zur Übertragung der Feldgrößen realisiert werden, die auf einer zusätzlichen Lösung des Anfangswertproblems in den Elementknoten basieren.

Beispielsweise im Fall eines sich öffnenden Kontakts, sich bewegender Kontaktregionen

und veränderlicher plastischen Zonen ist es im Sinne einer effektiven Diskretisierung notwendig, das Netz wieder zu vergröbern. Auf der Grundlage hierarchischer Datenstrukturen wurden effiziente Vergröberungsstrategien einschließlich der erforderlichen Übertragungsalgorithmen entwickelt und implementiert. Das Auslöschen von Elementen bei Erreichung eines bestimmten Schädigungsgrades und das Auftrennen von Elementen beim Risswachstum verkörpern weitere Aufgabenstellungen des Teilprojekts im Rahmen der Rissbruchmechanik.

Die klassischen Fehlerschätzer und -indikatoren zur adaptiven Netzanpassung (Minimierung der Unstetigkeit der Feldgrößen an gemeinsamen Elementrändern) eignen sich für die Simulation der Ausbreitung plastischer Zonen sowie des Wachsens von Rissen und Schädigungszonen nur bedingt. Sie wurden deshalb durch lösungsabhängige Indikatoren ergänzt.

Im Rahmen der Behandlung der Kontaktaufgabe erfolgte in Zusammenarbeit mit dem TP A12 die Betrachtung des 2D-Problems bei einem starren Zielkörper. Beginnend mit der Begrenzung durch eine Gerade oder eine Kurve zweiter Ordnung wurde die Beschreibung der Kontakthindernisse im Verlaufe der Bearbeitung des Teilprojektes unter Berücksichtigung konkreter praktischer Erfordernisse auf kubische Splines erweitert. Die zunächst nur für den Beginn der Förderungsperiode vorgesehene Beschränkung auf reibungsfreie Vorgänge wurde ebenfalls aus praktischen Erwägungen für den betrachteten ebenen Fall beibehalten. Sukzessive Erweiterungen, besonders auf 3D-Probleme, sollten im Rahmen eines weiteren Förderungszeitraumes vorgenommen werden.

## 2.3 Forschungsaufgaben / Methoden

Ein Hauptziel der Arbeiten in den beiden ersten Förderungsperioden des Teilprojektes lag in der Entwicklung, Implementierung und praktischen Nutzung von Materialmodellen der Elastoplastizität bei kleinen und großen Verzerrungen einschließlich der Materialparameteridentifikation. Eine besondere Aufmerksamkeit galt dabei der Modellierung einer plastischen Anisotropie.

Zur Berücksichtigung spezieller anisotroper Verfestigungseffekte wurden zunächst für kleine elastisch-plastische Verzerrungen Fließbedingungen unter Verwendung kubischer Ansätze [GK01] und von Mehrflächenmodellen [KK00] untersucht. Bucher [Buch98], [Buch01b] gelang die Herleitung eines thermodynamisch vollständig konsistenten Materialmodells der finiten Elastoplastizität unter Berücksichtigung einer Substruktur. Mit diesem Konzept wird eine phänomenologische, makroskopische Beschreibung mikrostruktureller Vorgänge angestrebt und die Erfassung isotroper, kinematischer und formativer Verfestigung im Rahmen einer quadratischen Fließbedingung ermöglicht.

Das Materialmodell mit Substruktur wurde im Rahmen einer verallgemeinerten inkrementell-iterativen Strategie zur Lösung nichtlinearer Anfangsrandwertprobleme numerisch realisiert ([MM98], [GBKM00b], [Mich01]). Die algorithmische Vorgehensweise basiert auf einem gedämpften Newton-Raphson-Verfahren mit konsistenter Linearisierung und einfacher Lastschrittkontrolle zur numerischen Lösung der Randwertaufgabe. Das thermodynamisch konsistente Materialmodell liegt als System von Differential- und algebraischen Gleichungen (DAE) vor. Die Diskretisierung des Anfangswertproblems erfolgt unter Verwendung von Einschritt-Standard-Verfahren. Zur Lösung der lokalen, nichtlinearen algebraischen Gleichungssysteme dienen gedämpfte Newton-Methoden [Buch01b].

Die allgemeine Struktur der entwickelten Materialmodelle ermöglichte die Definition einer einheitlichen Schnittstelle ([Buch01a], [BGK01]), die offen ist für eine Vielzahl analoger Formulierungen. Auf dieser Grundlage konnten beispielsweise die Schädigungsmodelle von Gurson und Rousselier erfolgreich implementiert werden [MS01]. Außerdem finden die untersuchten Materialmodelle und numerischen Verfahren praktische Anwendung im Rahmen der Parameteridentifikation durch Auswertung inhomogener Verschiebungsfelder ([Krei98a], [Krei98b], [KGK98], [KBG00], [GBK01], [SK03]).

Die erwähnten Materialmodelle wurden zunächst in das (nichtadaptive) FEM-Programm SPC-PMHP für große elastisch-plastische Verzerrungen implementiert. Gleichzeitig fanden in verschiedenen Teilprojekten des Bereiches A Untersuchungen zur Adaptivität und Kontaktmodellierung im Fall der linearen Elastizität statt. In konsequenter Fortsetzung der Aufgabenstellungen des SFB 393 bestand das Ziel des Teilprojekts D1 im laufenden Berichtszeitraum darin, zur Verbesserung der Praxisrelevanz der Programme die adaptiven Methoden einschließlich der Kontaktalgorithmen mit der nichtlinearen Materialmodellierung, der Rissausbreitung und der Schädigungssimulation zu kombinieren.

### **2.3.1 Adaptive Vernetzungsalgorithmen zur Elementteilung und Kantenverdopplung**

Für viele Aufgaben der Rissbruchmechanik (Risswachstum, Rissablenkung, Rissstopp) sind analytische Lösungen nicht verfügbar, weshalb die Anwendung numerischer Methoden notwendig ist. Zur numerischen Simulation von Risswachstum hat sich die Finite-Elemente-Methode als geeignetes Werkzeug etabliert. Bei der Simulation von Rissausbreitung entsteht algorithmisch und implementierungstechnisch das Problem der Bildung neuer belastungsfreier Oberflächen. Der Stand der Forschung wird überwiegend durch ingenieurmäßige, pragmatische Algorithmen charakterisiert [TW03, FR2003], die eine Verschiebung der Rissspitze und eine angepasste Neuvernetzung in ihrer Umgebung realisieren. In Verbindung mit adaptiven Lösungs- und Vernetzungsalgorithmen erweist sich die Modellierung von Risswachstum jedoch als ein anspruchsvolles, schwieriges Problem, das bisher noch wenig behandelt wurde. Insbesondere wenn moderne Löser mit Multi-Level-Struktur verwendet werden sollen, darf bei der Elementteilung und Kantenverdopplung die Hierarchie des Kantenbaums nicht verloren gehen, damit die Leistungsfähigkeit des iterativen PGCM-Lösers erhalten bleibt [MRS04]. Durch Anwendung einer speziellen Projektionstechnik konnte im Rahmen der Projektbearbeitung ein neuer Löser mit Multi-Level-Struktur entwickelt werden, der bei Risswachstum effektiv eingesetzt werden kann.

### **2.3.2 Adaptive Algorithmen und Kriterien zur Simulation der Rissausbreitung**

In der modernen Festigkeitsanalyse nimmt die Bewertung des Bruchverhaltens von Werkstoffen und Bauteilen eine zentrale Rolle ein. Die Bruchmechanik bildet deshalb einen eigenen Forschungszweig der Festkörpermechanik, um die Phänomene von Rissinitiierung, Rissausbreitung und Bruch in Bauteilen zu verstehen und zu bewerten. Das Ziel ist die Entwicklung von Materialien und Bauteilen, die eine hohe Widerstandsfähigkeit und Sicherheit gegenüber Bruchvorgängen aufweisen. Dabei spielt die Simulation von Rissausbreitung eine entscheidende Rolle.

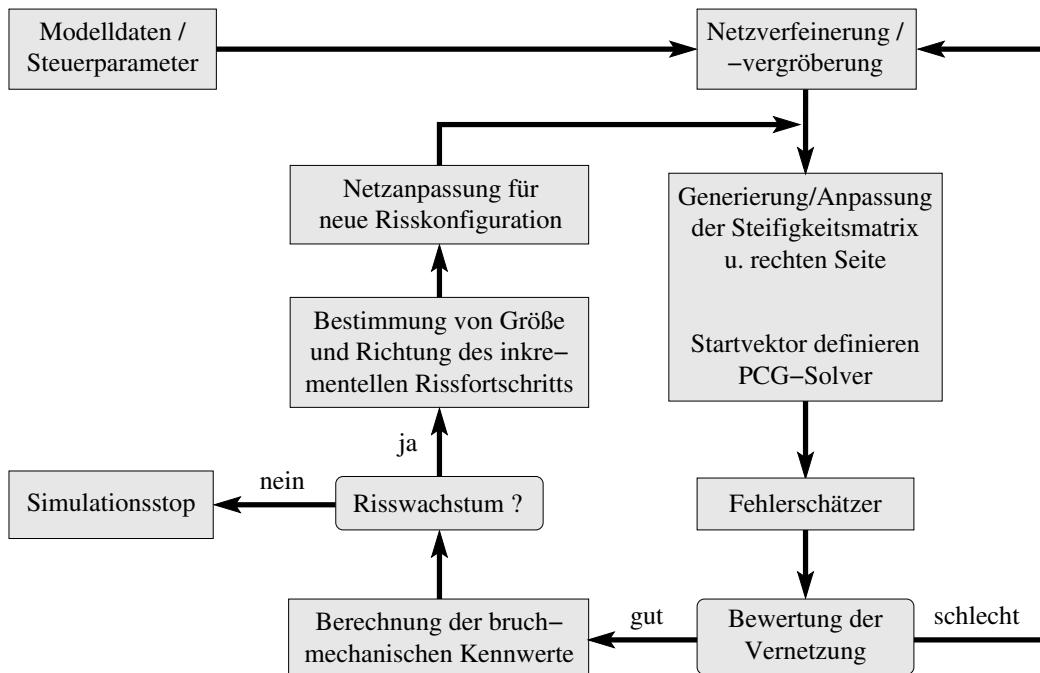


Abbildung 2.1: Programmschema

Vernachlässigt man dynamische Effekte, so ist Risswachstum als eine Folge von linearisierten quasi-statischen Randwertproblemen modellierbar und mittels FEM als eine Sequenz von Einzelrechnungen für unterschiedliche (d.h. stückweise wachsende) Risslängen simulierbar. Die Belastung kann dabei schrittweise aufgebracht werden. Nach jedem Schritt ist es erforderlich, die entsprechenden Bedingungen für Rissfortschritt an der Riss spitze zu prüfen. Sind diese Bedingungen erfüllt, wird der Riss um die inkrementelle Länge  $\Delta a$  in eine vorgegebene Richtung verlängert. Dabei sind  $\Delta a$  und die Richtung vorgegebende Parameter, deren Größen aus kontinuumsmechanischer Sicht vom Material und im Allgemeinen von der konkreten Problemstellung abhängen.

Prinzipiell erfordert die FE-Simulation des Risswachstums die wiederholte Abarbeitung folgender Teilschritte:

1. FE-Analyse der Struktur mit Riss
2. Berechnung der bruchmechanischen Kenngrößen
3. Berechnung der Größen für den inkrementellen Rissfortschritt
4. Neuvernetzung der veränderten Risskonfiguration (weiter mit Punkt 1)

Ein Ziel der Projektbearbeitung war die vollständige Integration dieser Teilschritte zu einem FE-Programm. Somit entstand ein effizientes Werkzeug zur Simulation von Risswachstum, in dessen Rahmen adaptive und bruchmechanisch gesteuerte Vernetzungsstrategien im Verbund mit modernen hierarchischen Gleichungssolvoren angewendet werden. Das entwickelte Programmschema ist in Abbildung 2.1 zu sehen.

Folgende Teilaufgaben mussten dazu bearbeitet werden:

- Weiterentwicklung der vorhandenen adaptiven Vernetzungs- und Lösungsalgorithmen, die eine effektive Simulation von Rissausbreitung ermöglichen
- Erarbeitung von geeigneten FEM-Techniken zur Bestimmung der bruchmechanischen Beanspruchungsparameter
- Festlegung/Findung eines geeigneten Kriteriums zur Rissausbreitung
- Erarbeitung einer bruchmechanisch gesteuerten Vernetzungsstrategie
- Einbau und Erprobung der erarbeiteten Techniken in adaptiv-hierarchische Löser

### 2.3.3 Realisierung von Algorithmen zur Übertragung von Zustandsgrößen bei adaptiver Netzverfeinerung

Bei geometrisch und physikalisch nichtlinearen Problemen wird die äußere Belastung in einzelnen Lastschritten aufgebracht. Wegen der Abhängigkeit von der Belastungsgeschichte ist es bei einer Netzanpassung (Verfeinerung und/oder Vergrößerung) im Rahmen der nichtlinearen FEM erforderlich, die Zustandsgrößen (Spannungen, innere Variablen) vom alten auf das neue Netz zu übertragen. Jedes einzelne Lastinkrement kann im Sinne einer adaptiven Strategie als separates Teilproblem angesehen werden, das folgende Schritte beinhaltet:

- Lösung des Anfangsrandwertproblems
- Fehlerschätzung
- Netzanpassung
- Übertragung der Feldgrößen

In Abbildung 2.2 ist die adaptive Vorgehensweise für lineare und nichtlineare Probleme schematisch dargestellt, wie sie in den FEM-Programmen SPC-PM2Ad (lineare Elastizität) und SPC-PM2AdNl (Simulation großer elastisch-plastischer Verzerrungen) des SFB 393 realisiert wurde.

Vor allem in der Elastoplastizität großer Deformationen (Umformtechnik) hat sich ein Übertragungsalgorithmus bewährt, der besonders bei einer vollständigen Neuvernetzung Anwendung findet [Orti91, Four95]:

- $L^2$ -Projektion der Zustandsgrößen von den Gaußpunkten auf die Knoten des bisherigen Netzes
- Generierung eines neuen Netzes, Ermittlung der lokalen Koordinaten der Knoten des neuen Netzes im alten Netz (Suchprozess, inverse isoparametrische Abbildung)
- Bestimmung der Zustandsgrößen in den Knoten des neuen Netzes durch Interpolation mit den Formfunktionen sowie den Zustandsgrößen in den Knoten des alten Netzes
- Interpolation mit den Formfunktionen des neuen Netzes zur Berechnung der Zustandsgrößen in den Gaußpunkten des neuen Netzes

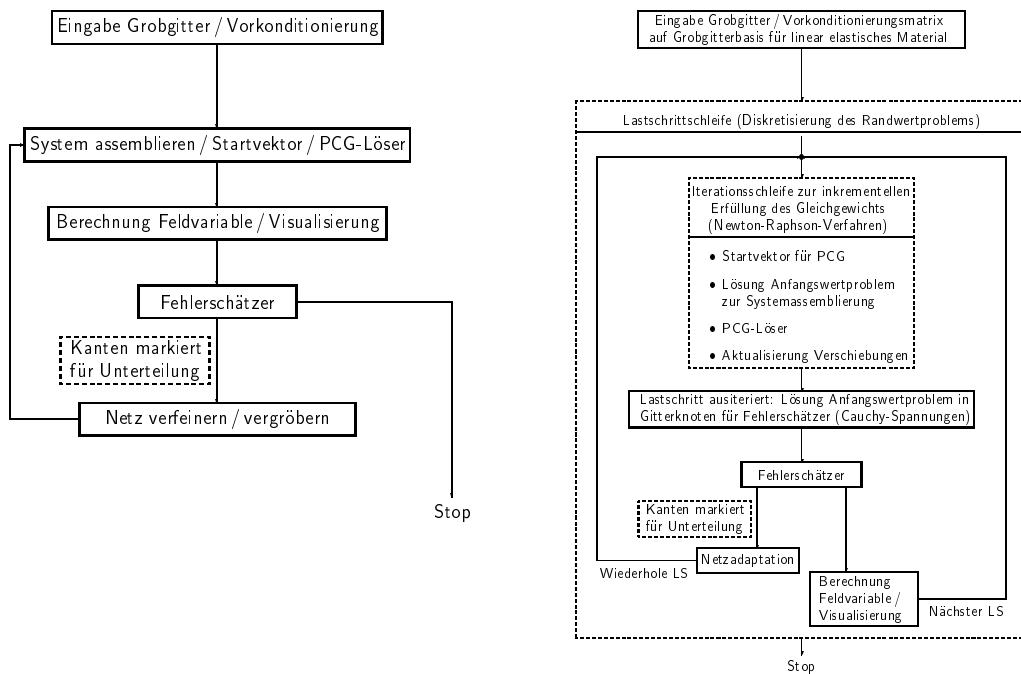


Abbildung 2.2: Allgemeine Schemata adaptiver FE-Algorithmen: Lineares Problem (links), nichtlineares Problem (rechts).

Bei den aus der Literatur bekannten adaptiven Vorgehensweisen erfolgt die Übertragung vom alten auf das neue Netz gewöhnlich mittels spezieller Extrapolationsalgorithmen. Zusätzlich wird an gemeinsamen Knoten unterschiedlicher Elemente eine Glättung der elementbezogenen Feldgrößen durchgeführt [SS03].

In der laufenden Förderungsperiode wurde zur Übertragung der Feldgrößen im Teilprojekt D1 eine neue Strategie entwickelt. Sie unterscheidet sich von herkömmlichen Vorgehensweisen hauptsächlich dadurch, dass das Anfangswertproblem nicht nur in den Gaußpunkten integriert wird, sondern auch in den Elementknoten. Damit werden die Feldgrößen in den Knoten konsistent zu denen in den Stützstellen mit der gleichen Genauigkeit ermittelt. Mit Hilfe der Formfunktionen erfolgt anschließend ihre Übertragung auf die neuen Knoten und Gaußpunkte des verfeinerten Netzes. Die ermittelten Knoten- und Gaußpunktswerte werden elementbezogen abgespeichert. Die Übertragung der Zustandsgrößen führt zur Verletzung des Gleichgewichts und möglicherweise zu lokal nicht ausreichend gut erfüllten Fließbedingungen auf dem neuen Netz.

Erfolgt keine Wiederholung des Lastschrittes, basiert die weitere Berechnung auf einer vom Fehlerschätzer als zu ungenau identifizierten Lösung. Wie beispielsweise Untersuchungen von Habraken und Cescotto [Hab90] ergeben haben, kann der Fehler dabei erheblich sein. Zur Einstellung des Gleichgewichts lässt sich dem nächsten Lastschritt ein Iterationsprozess vorschalten [Han99], der einen entsprechenden numerischen Aufwand erfordert. Weiterhin ist es auch möglich, das "gestörte" Residuum im nächsten Lastschritt zu berücksichtigen.

Im Rahmen der in D1 verfolgten Strategie wird der aktuelle Lastschritt  $[t_n, t_{n+1}]$  generell mit dem verfeinerten Netz wiederholt, wenn die Fehlerschätzung eine unzureichende Güte der Lösung zum Zeitpunkt  $t_{n+1}$  ergibt. Im Rahmen der verwendeten impliziten Einschrittverfahren zur Zeitdiskretisierung müssen daher die Werte der Feldvariablen zu

Beginn des Lastschrittes (bei  $t_n$ ) auf die Knoten und Gaußpunkte der neuen Elemente übertragen werden. Zusätzlich wird zur Verbesserung des Konvergenzverhaltens des Randwertproblems eine Nachiteration zur Zeit  $t_n$  unter konstanter äußerer Belastung durchgeführt.

### 2.3.4 Adaptive Algorithmen zur Vergrößerung von Vernetzungen

Bei adaptiver Netzverfeinerung werden Elementteilungen in Gebieten vorgenommen, die durch die Fehleranalyse als kritisch identifiziert wurden. Andere, homogenere Regionen können mit gröberen Netzen analysiert werden. In bestimmten Fällen kann sich die Lage der Zonen mit größeren Gradienten während der Belastung ändern (Abrollvorgänge, Kontaktprobleme, Risswachstum, Schädigungszonen). Um nicht unnötig feine Netze beizubehalten, gibt es in SPC-PM2AdNI die Möglichkeit, in vorangegangenen Schritten unterteilte Elemente wieder zusammenzufügen und damit das Netz an weniger kritischen Stellen zu vergrößern.

Bei der Vergrößerung treffen an den Eckknoten der Kanten zwischen den ursprünglichen Sohnelementen unterschiedliche Knotenwerte aufeinander. Mit dem arithmetischen Mittel und der Methode der kleinsten Fehlerquadrate wurden zwei Verfahren untersucht, sie zusammenzufügen.

### 2.3.5 Fehlerschätzung bei nichtlinearen Problemen

Im Teilprojekt A3 wurden in den bisherigen Förderungsperioden unterschiedliche Fehlerschätzer entwickelt und getestet. Im Rahmen der linearen Elastizität wurde dabei insbesondere der residuale a posteriori Energienorm-Fehlerschätzer untersucht:

$$\eta_T^2 \approx \frac{h_T^2}{\lambda_D} \int_{\Omega_T} |\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}_h) + \mathbf{f}_h|^2 d\Omega_T + \sum_{E \in \partial\Omega_T} \frac{h_T}{\lambda_D} \int_E \|[\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}_h) \mathbf{n}_E]\|^2 ds_E \quad (2.1)$$

Eine verbesserte Version dieses Fehlerschätzers bezüglich anisotroper Elemente wurde in [Ku00a] veröffentlicht. Weiterhin wurde gemeinsam mit Verfürth gezeigt, dass das Elementresiduum vernachlässigt werden kann und somit allein die Kantensprünge bestimmen sind [KV00]. Diese Aussage gilt bei finiter Elastoplastizität nur noch für die Verwendung von Elementen mit linearen Formfunktionen. Daher ergibt sich bei Elementansätzen höherer Ordnung und großen elastisch-plastischen Verzerrungen die Notwendigkeit, beide Anteile des Fehlerschätzers zu berücksichtigen.

In der linearen Elastizität wird die materialabhängige Konstante  $\lambda_D$  gewöhnlich mit dem Elastizitätsmodul approximiert [AMW93, GKZB83]. Eine exakte Angabe für diese Interpolationskonstante ist im nichtlinearen Fall nicht möglich. Es ist aber zu erwarten, dass sie in der gleichen Größenordnung wie bei linearen Problemen liegt. Daher wird auch im Rahmen des vorgestellten Modells der finiten Elastoplastizität  $\lambda_D$  durch den Elastizitätsmodul angenähert. Da die Fehlerauswertung relativ zu einer vorgegebenen Schranke erfolgt, spielt bei homogenem Material die Größe der Interpolationskonstante keine Rolle für die Netzanpassung. Treten im betrachteten Gebiet beispielsweise elastische und plastische Regionen gleichzeitig auf, wird mit der genannten Approximation von  $\lambda_D$  der Fehler für plastifizierte Elemente unterschätzt. Ausgleichend dazu wurde deshalb zusätzlich ein Fehlerindikator bezüglich der Erfüllung der Fließbedingung implementiert.

### 2.3.6 Bearbeitung des Kontaktproblems unter Berücksichtigung von Adaptivität und Reibung

Beim Kontaktproblem muss das Verschiebungsfeld geeigneten geometrischen Kontaktbedingungen sowie Reibungsrandbedingungen genügen. Die mathematische Formulierung führt gewöhnlich auf Variationsungleichungen. Sie werden diskretisiert mit Finite-Element- [Kiku88] und Rand-Element-Methoden, letztere vorwiegend für den elastischen Kontakt. Für die Lösung der beiden Ansätze werden unterschiedliche Verfahren wie aktive-Mengen-Strategien [Kara89], Fixpunktiterationen [Neca80, Hasl83], Penalty- und Newton-Methoden sowie die Methode der Lagrange-Multiplikatoren [Gwin83, Wrig85, Curn88, Chris99] und auch die Methode der quadratischen Optimierung [Klar86] eingesetzt. Im Falle des elastisch-plastischen Materialverhaltens erfolgte die Anwendung von adaptiven Finite-Element-Methoden [Wrig95], bei speziellen Aufgaben aber auch der Rand-Element-Methode [Hues94]. Die Kombination von Kontaktlösern und adaptiver FEM wird ausführlich in [CSW99] behandelt.

Unter dem Begriff Kontaktkinematik werden die Penetrationsfunktion und der relative Gleitzustand beim reibungsbehafteten Kontakt zusammengefasst. Zur Beschreibung des Kontaktes zweier Körper werden diese in einen Kontakt- und einen Zielkörper eingeteilt, wobei überprüft wird, ob Knoten des Kontaktkörpers in den Zielkörper eindringen. Unter Einführung einer Abstandsfunktion (Ungleichungsnebenbedingung) kann zwischen den Fällen "kein Kontakt", "perfekter Kontakt" und "Penetration" unterschieden werden. Von den eingangs beschriebenen Lösungsmethoden werden im Rahmen kommerzieller Programme zumeist Penalty-Verfahren oder das Verfahren der Lagrange-Multiplikatoren eingesetzt. In diesen Fällen werden die Ungleichungsnebenbedingungen als Gleichungsnebenbedingungen, die sich während des inkrementellen Vorgehens ändern, dargestellt. Aus der Variationsungleichung entsteht dann eine Variationsgleichung mit Kontaktbeiträgen für die aktive Kontaktzone.

Als neue Variante für den Fall des reibungsfreien Kontaktproblems eines elastischen Körpers mit einem festen Hindernis wurde in der laufenden Förderungsperiode im TP A12 für die numerische Lösung ein Projektionsverfahren entwickelt. Dieses nutzt die implementierten Projektionsmethoden für hängende Knoten [Mey99] und spezielle Klassen von Randbedingungen [Mey02] sowie die Einbettung in die adaptive Netzverfeinerung aus (siehe dazu auch die Ausführungen zum TP A12). Im Zusammenwirken mit effektiven Vorkonditionierern zur Lösung des resultierenden Systems ergibt sich auf diese Weise ein effizienter Algorithmus für das lineare Elastizitätsproblem, der offen ist für Erweiterungen auf geometrisch und physikalisch nichtlineare Modelle.

### 2.3.7 Adaptive Algorithmen zur Steuerung und Simulation der Ausbreitung von Schädigungszonen

In den vergangenen zehn Jahren wurden verschiedene schädigungsmechanische Modelle für die Beschreibung des duktilen Versagens metallischer Werkstoffe entwickelt. Am bekanntesten sind die Modelle von Gurson-Tvergaard-Needleman und Rousselier, die die Entstehung, das Wachstum und die Koaleszenz von Mikroporen bis zur makroskopischen Anrißbildung als Folge der plastischen Verformung und Spannungsmehrachsigkeit beschreiben. Diese Modelle wurden bereits erfolgreich auf die Simulation von Umformprozessen (Blechumformung, Massivumformung, Crashsimulation) und von duktilem,

stabilen Risswachstum eingesetzt. Vor allem in der Zähbruchmechanik konnten damit wichtige Fragen des Einflusses der Mehrachsigkeit auf die duktilen Risswiderstandskurven in Bruchproben und Bauteilen gelöst werden. Eine Kombination von adaptiver Vernetzung und Schädigungsmechanik wurde bisher nur in wenigen Publikationen (siehe z. B. [Gel98]) vorgenommen, wobei es sich um das übliche Remeshing nach großen Netzverzerrungen in der Massivumformung handelt.

Da beide Schädigungsmodelle im vorigen Antragszeitraum in SPC-PMHP implementiert wurden und die Struktur der Materialgleichungen mit denjenigen der Elasto-Plasto-Mechanik analog ist, können die dafür im Teilprojekt entwickelten adaptiven Techniken 2.3.3 - 2.3.5 sinngemäß übernommen und effektiv angewandt werden. Damit ist es möglich, in Abhängigkeit vom Lösungsverhalten eines schädigungsmechanischen Problems, den lokalen Fehler a posteriori zu schätzen und das FE-Netz entsprechend zu verfeinern bzw. wieder zu vergrößern und auch die schädigungsmechanischen Zustandsvariablen zu übertragen. Diese Aufgabe des Projektes befindet sich z. Z. in intensiver Bearbeitung und soll bis Mitte des Jahres abgeschlossen sein. Auf dieser Basis sind Anwendungsrechnungen für Probleme mit geringen Gradienten durchführbar, z. B. in der Umformtechnik, um die Ausbreitung von Schädigungsgebieten effizient zu berechnen. Schwieriger verhält sich die Sache hingegen bei der Simulation der duktilen Ausbreitung von Rissen, wo in der Schädigungszone starke Feldgradienten auftreten, die in Verbindung mit den entfestigenden Schädigungsgesetzen zu Lokalisierungen, zum Verlust der Elliptizität [SMS94] und somit zur Netzabhängigkeit der numerischen Lösung führen, die selbst mit Regularisierungsverfahren auf Basis nichtlokaler integraler oder Gradientenmethoden nicht vollständig vermeidbar sind, siehe z. B. [SR00, JK03, Reu03]. Deshalb müssen neben numerischen Fehlerkriterien auch werkstoffmechanische Indikatoren für die Netzanpassung formuliert werden. Das bedeutet im einfachsten Fall die Vorgabe einer einheitlichen, nach unten beschränkten Elementgröße in der Schädigungszone am Riss, die mit einer physikalischen Werkstoffstrukturlänge korreliert. Vom Standpunkt der Kontinuumsmechanik und Numerik wäre es richtiger, aber auch weitaus komplizierter, beim Erreichen des lokalen Versagens in einem Materialpunkt vor der Rissspitze, das z. B. durch die Indefinitheit des akustischen Tensors angezeigt wird, den Bruchprozess durch Trennung des Kontinuums auch im numerischen Modell zu vollziehen. Dafür bieten sich die in 2.3.1 erarbeiteten Algorithmen zur Elementteilung und Kantenverdopplung an. Es wird angestrebt, diese Aufgaben noch bis Ende des Projektzeitraums zu lösen.

## Literaturverzeichnis zu 2.3

- [AMW93] T. Apel, R. Mücke and J.R. Whiteman. An adaptive finite element technique with a-priori mesh grading. Report 9, BICOM Institute of Computational Mathematics, 1993.
- [BGK01] A. Bucher, U.-J. Görke and R. Kreißig. Development of a generalized material interface for the simulation of finite elasto-plastic deformations. *Int. J. Sol. Struct.*, 38/01:9423–9436, 2001.

- [Buch98] A. Bucher. Thermodynamisch konsistente konstitutive Gleichungen zur Beschreibung finiter elasto-plastischer Deformationen. In: *Modellierung und Identifikation*, S. Hartmann, P. Haupt and V. Ulbricht (Eds.), Tagungsband zum 2. Workshop der Graduiertenkollegs Identifikation von Material- und Systemeigenschaften (Kassel) und Kontinuumsmechanik inelastischer Festkörper (Dresden/Chemnitz), Gesamtschul-Bibliothek Kassel, 1998.
- [Buch01a] A. Bucher. Realisierung eines allgemeinen Materialteils für ein “paralleles” FEM-Programm zur Berechnung großer elastisch-plastischer Deformationen. In: *Tagungsband zum 3. Workshop der Graduiertenkollegs Identifikation von Material- und Systemeigenschaften (Kassel) und Kontinuumsmechanik inelastischer Festkörper (Dresden/Chemnitz)*, Gesamtschul-Bibliothek Kassel, 2001.
- [Buch01b] A. Bucher. *Deformationsgesetze für große elastisch-plastische Verzerrungen unter Berücksichtigung einer Substruktur*. Dissertation, TU Chemnitz, Institut für Mechanik, Bericht 4/01, 2001.
- [Chris99] P.W. Christensen and A. Klarbring. *Newton's method for frictional contact problems*, ECCM, 1999.
- [CSW99] C. Carstensen, O. Scherf and P. Wriggers. Adaptive finite elements for elastic bodies in contact. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 20/99:1605–1626, 1999.
- [Curn88] A. Curnier and P. Alart. A generalized newton method for contact problems with friction. *J. Mech. Theor. Appl.*, 7/88:67–82, 1988.
- [Four95] L. Fourment and J.L. Chenot. Error estimators for viscoplastic materials, Application to forming processes. *Int. J. Num. Meth. Engng.*, 38/95:469–490, 1995.
- [FR2003] M. Fullan and H.A. Richard. Finite-element-based fatigue crack growth simulation in real structures. *Key Engineering Materials*, 251/252:79–84, 2003.
- [GBK01] U.-J. Görke, A. Bucher and R. Kreißig. Ein Beitrag zur Materialparameteridentifikation bei finiten elastisch-plastischen Verzerrungen durch Analyse inhomogener Verschiebungsfelder mit Hilfe der FEM. TU Chemnitz, Preprint SFB393/01–03, 2001.
- [GBKM00b] U.-J. Görke, A. Bucher, R. Kreißig and D. Michael. Ein Beitrag zur Lösung von Anfangs-Randwert-Problemen einschließlich der Materialmodellierung bei finiten elastisch-plastischen Verzerrungen mit Hilfe der FEM. TU Chemnitz, Preprint SFB393/00–09, 2000.
- [Gel98] J.C. Gelin Modelling of damage in metal forming processes. *Journal of Materials Processing Technology*, 80/81:24–32, 1998.
- [GK01] G. Grewolls and R. Kreißig. Anisotropic hardening - numerical application of a cubic yield theory and consideration of variable  $r$ -values for sheet metal. *Eur. J. Mech. (A/Sol.)*, 20/01:585–599, 2001.
- [GKZB83] J.P. Gago, D. Kelly, O.C. Zienkiewicz and I. Babuška. A-posteriori error analysis and adaptive processes in the finite element method. Part I: Error analysis. Part II: Adaptive processes. *Int. J. Num. Meth. Engng.*, 19/83:1593–1656, 1983.
- [Gwin83] J. Gwinner. A penalty approximation for a unilateral contact problem in nonlinear elasticity. *Math. Meth. Appl. Sci.*, 11/83:447–458, 1983.

- [Hab90] A. Habraken and S. Cescotto. An automatic remeshing technique for finite element simulation of forming processes. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 30/90:1503–1525, 1990.
- [Han99] C.S. Han. *Eine adaptive Finite-Element-Methode für elasto-plastische Schalenprobleme im unilateralen Kontakt*. Dissertation, Universität Hannover, IBNM-Bericht Nr. F99/2, 1999.
- [Hasl83] J. Haslinger. Approximation of the Signorini problem with friction obeying the Coulomb law. *Math. Meth. Appl. Sci.*, 5/83:422–437, 1983.
- [Hues94] A. Huesmann and G. Kuhn. Behandlung elastoplastischer Kontaktprobleme mit der Randelementmethode. *ZAMM*, 74/94:T254–T256, 1994.
- [JK03] J. Jackiewicz and M. Kuna. Non-local regularisation for FE simulation of damage in ductile materials. *Comp. Mat. Sci.*, 28/03:684–695, 2003.
- [Kara89] G. Karami. *Boundary Element Methods for Two Dimensional Contact Problems*. Springer, New York/Berlin/Heidelberg, 1989.
- [KBG00] R. Kreißig, U. Benedix and U.-J. Görke. About some statistical aspects of the identification of parameters of elasto-plastic material behaviour. *Arch. Appl. Mech.*, 71/01:123–134, 2001.
- [KGK98] S. Kretzschmar, U.-J. Görke and R. Kreißig. Identifikation von Materialparametern durch Auswertung inhomogener Verschiebungsfelder. *ZAMM*, 78/98:S559–S560, 1998.
- [Kiku88] N. Kikuchi and J.T. Oden. *Contact Problems in Elasticity: A Study of Variational Inequalities and Finite Element Methods*. SIAM, Philadelphia, 1988.
- [KK00] I.Yu. Kadashevich and R. Kreißig. Description of cyclic torsion on the basis of the multi-surface model with cross-links. In: *Nelinejnye problemy mechaniki i fiziki deformirujemogo tverdogo tela*, K. F. Černycha (Ed.), Universität St. Petersburg, 2000.
- [Klar86] A. Klarbring. A mathematical programming approach to three-dimensional contact problems with friction. *Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, 58/86:175–200, 1986.
- [Krei98a] R. Kreißig. Auswertung inhomogener Verschiebungsfelder zur Identifikation der Parameter elastisch-plastischer Deformationsgesetze. *Forsch. Ingenieurwes.*, 64/98:99–109, 1998.
- [Krei98b] R. Kreißig. Numerische Methoden für die Parameteridentifikation. *ZAMM*, 78/98:S555–S558, 1998.
- [Ku00a] G. Kunert. An a posteriori residual error estimator for the finite element method on anisotropic tetrahedral meshes. *Numer. Math.*, 86(3):471–490, 2000.
- [KV00] G. Kunert and R. Verfürth. Edge residuals dominate a posteriori error estimates for linear finite element methods on anisotropic triangular and tetrahedral meshes. *Numer. Math.*, 86(2):283–303, 2000.
- [Mey99] A. Meyer. Projected PCGM for Handling Hanging Nodes in Adaptive Finite Element Procedures. TU Chemnitz, Preprint SFB393/99–25, 1999

- [Mey02] A. Meyer. Projection Techniques embedded in the PCGM for Handling Hanging Nodes and Boundary Restrictions. In: *Engineering Computational Technology*, B.H.V. Topping and Z. Bittnar (Eds.), Saxe-Coburg Publ., Stirling, Scotland, 147–165, 2002.
- [Mich01] D. Michael. Kontinuumstheoretische Grundlagen und algorithmische Behandlung von ausgewählten Problemen der assoziierten Fließtheorie. TU Chemnitz, Preprint SFB393/01–06, 2001.
- [MM98] D. Michael and M. Meisel. Some remarks to large deformation elasto-plasticity (continuum formulation). TU Chemnitz-Zwickau, Preprint SFB393/98–28, 1998.
- [MRS04] A. Meyer, F. Rabold and M. Scherzer. Efficient Finite Element Simulation of Crack Propagation. Preprint SFB393/04–01, TU Chemnitz, 2004.
- [MS01] D. Michael and M. Springmann. Zur numerischen Simulation des Versagens duktiler metallischer Werkstoffe. Preprint SFB393/09–01, 2001.
- [Neca80] J. Nečas, J. Jarušek and J. Haslinger. *On the solution of the variational inequality to the Signorini problem with small friction*. Bollettino U.M.I., 17, 1980.
- [Orti91] M. Ortiz and J.J. Quiqley. Adaptive mesh refinement in strain localization problems. *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*, 90/91:781–804, 1991.
- [Reu03] F. Reusch. *Entwicklung und Anwendung eines nicht-lokalen Materialmodells zur Simulation duktiler Schädigung in metallischen Werkstoffen*. Dissertation, Universität Dortmund, 2003.
- [SK03] M. Springmann, M. Kuna. Identification of material parameters of the Rousselier model by non-linear optimization. *Computational Materials Science*, 26:202–209, 2003.
- [SMS94] P. Steinmann, C. Miehe and E. Stein. Comparison of different finite deformation inelastic damage models within multiplicative elasto-plasticity for ductile materials. *Comp. Mech.*, 13/94:458–474, 1994.
- [SR00] T. Svedberg and K. Runesson. An adaptive finite element algorithm for gradient theory of plasticity with coupling to damage. *Int. J. Sol. Struct.*, 48/50:7481–7499, 2000.
- [SS03] E. Stein and M. Schmidt. Adaptive FEM for Elasto-plastic Deformations. In: *Error-controlled Adaptive Finite Elements in Solid Mechanics*, E. Stein (Ed.), John Wiley & Sons, Chichester, 53–107, 2003.
- [TW03] A. Tabiei and J. Wu. Development of the DYNA3D simulation code with automated fracture procedure for brick elements. *Int. J. Num. Meth. Engng.*, 57/03:1979–2006, 2003.
- [Wrig85] P. Wriggers, J. Simo and R. Taylor. Penalty and Augmented Lagrangian Formulations for Contact Problems. In: *Proceedings of NUMETA Conference*, J Middleton and G. Pande (Eds.), Balkema, Rotterdam, 1985.
- [Wrig95] P. Wriggers and O. Scherf. An adaptive finite element algorithm for contact problems in plasticity. *Comp. Mech.*, 17/95:88–97, 1995.

## 2.4 Ergebnisse

### 2.4.1 Adaptive Vernetzungsalgorithmen zur Elementteilung und Kantenverdopplung

#### Weiterentwicklung der vorhandenen adaptiven Vernetzungs- und Lösungsalgorithmen

Das singuläre Lösungsverhalten an der Riss spitze erfordert immer eine Verfeinerung des Netzes in deren Umgebung, welche mit Hilfe einer adaptiven automatischen Verfeinerungs technik realisiert wird. Hierzu wird ein fehlergesteuertes Verfahren angewandt, das auch eine spätere Netzvergrößerung ermöglicht, wenn sich die Riss spitze weiter bewegt. Der allseits bekannte residuumbasierte Fehlerschätzer

$$\eta_T^2 = \sum_{E \subset T} h_E \|\llbracket \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} \rrbracket\|_{L_2(E)}^2 \quad (2.2)$$

kommt als Fehlerindikator für jedes finite Element  $T$  zum Einsatz. Er misst die Größe des Spannungssprungs  $\llbracket \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} \rrbracket$  entlang der Kante  $E$  eines Elements. Im Falle isotroper finiter Elemente ist die Wichtung  $h_E$  gleich dem Verhältnis der Kantenlänge zum Elastizitätsmodul. Dann gibt

$$\eta = \left( \sum_{\forall T} \eta_T^2 \right)^{1/2} \quad (2.3)$$

eine Näherung für die totale  $H^1$ -Fehlergröße (bis auf eine unbekannte Konstante) an. Folglich wird ein Element  $T$  mit

$$\eta_T^2 > \alpha_{\text{refine}} \cdot \eta^2 \quad (2.4)$$

verfeinert, bzw. falls

$$\eta_T^2 < \alpha_{\text{coarse}} \cdot \eta^2 \quad (2.5)$$

gilt, wird das Netz in der Umgebung des Elementes  $T$  vergröbert. Im Folgenden wählen wir  $\alpha_{\text{refine}} \approx 0.8$  und  $\alpha_{\text{coarse}} \approx 10^{-3}$ . Falls nicht genügend Elemente ( $\approx 10\%$ ) zur Verfeinerung gefunden werden, wird  $\alpha_{\text{refine}}$  schrittweise auf 0.05 reduziert. In Abbildung 2.3 sind die beiden implementierten Varianten zur Teilung von Dreieckelementen zu sehen.

Bei der adaptiven Herangehensweise entsteht eine Folge von Netzen. Für jedes dieser Netze muss ein lineares Gleichungssystem iterativ gelöst werden. Deshalb wurde ein sehr zeiteffizientes Lösungsverfahren angestrebt, das in folgender Weise charakterisierbar ist [MRS04, MeRaS04]:

- Für jedes Element werden nur die Elementmatrizen zusammen mit den Elementdaten gespeichert. Der Zusammenbau irgendeiner Gesamtsteifigkeitsmatrix ist nicht

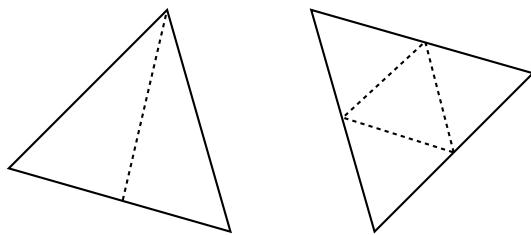


Abbildung 2.3: Elementteilungsvarianten: „grüne“ Teilung (links) und „rote“ Teilung (rechts)

notwendig. Der Lösungsalgorithmus, beruhend auf der vorkonditionierten konjugierten Gradientenmethode (PCGM), „multipliziert“ einfach Element für Element. Das besitzt den Vorteil, dass nur für neue Elemente, die während des Verfeinerungsprozesses entstehen, Elementmatrizen generiert werden müssen.

- Der Vorkonditionierer nutzt die hierarchische Datenstruktur, die durch die Unterteilung der Kanten des Netzes entsteht. Für ebene Problemstellungen führt der einfache „Hierarchische Basis“-Vorkonditionierer (HB) [Yser90] zu einem sehr schnellen Solver, weil:
  - Alle Informationen zur Implementierung des HB, welche von der Netzverfeinerung genutzt werden, im „Kanten-Unterteilungsbaum“ enthalten sind.
  - Die Anzahl der arithmetischen Operationen gleich  $3N$  für  $N$  Unbekannte im vorliegenden Netz ist.
  - Einerseits die Konditionszahl der vorkonditionierten Steifigkeitsmatrix (gleich der Konditionszahl der finiten Elementsteifigkeitsmatrix in Bezug auf die hierarchische Basis des Ansatzraumes) wie  $(\log N)^2$  wächst. Andererseits liegt ein sehr guter Startvektor vor, der in die adaptive Schleife auf jeder neuen Lösung eingebettet wird (nur hochfrequente Fehler). Dies führt zu einer fast konstanten Anzahl von Iterationen während der Verfeinerung.

### Rissausbreitung mittels adaptiv-iterativer Techniken

Durch die bruchmechanische Auswertung der FE-Lösung erhält man die nötigen Informationen für das inkrementelle Risswachstum, d.h. eine Richtung und eine Länge  $\Delta a$ , durch die die neue Rissspitze definiert wird. Damit wird im aktuellen Netz von der aktuellen Rissspitze  $P$  zur neuen Rissspitze  $P_{neu}$  eine Strecke  $L$  ( $|L| \leq \Delta a$ ) erzeugt, an der die neue Rissfläche generiert werden soll. Dazu sind neue Knoten (und somit auch neue Kanten) entlang der Strecke  $L$  zu definieren. Sie können zweierlei Art von Freiheitsgraden besitzen, die den Verschiebungen für die Rissflächen  $u_+$  und  $u_-$  entsprechen. Ein Rissuferelement, welches „-“-Freiheitsgrade enthält, wird dann als „-“-Element bezeichnet. Entsprechend enthalten „+“-Elemente an der gegenüberliegenden neuen Rissfläche „+“-Freiheitsgrade.

Der erste Schritt zur Modellierung der Rissausbreitung ist die Generierung solcher „-“- und „+“-Elemente durch eine Teilung aller Elemente, die durch die Strecke  $L$  geschnitten werden. Dabei wird für jede geschnittene Kante  $E = (\mathbf{a}, \mathbf{b})$  (mit  $\mathbf{a}, \mathbf{b} \in \mathbb{R}^2$  als die Endknoten der Kante) des aktuellen Netzes folgender Algorithmus abgearbeitet:

Es wird der Schnittpunkt  $Q$  der Strecke  $L$  mit der Kante  $E$  berechnet, für den die

Beziehung gilt:

$$\mathbf{Q} = \alpha \mathbf{a} + (1 - \alpha) \mathbf{b}. \quad (2.6)$$

Wenn  $\alpha \approx 1$ , dann wird der Endknoten  $\mathbf{a}$  der Kante E auf den Schnittpunkt Q verschoben. Ist  $\alpha \approx 0$ , wird der Endknoten  $\mathbf{b}$  nach Q verschoben. Trifft keine dieser beiden Bedingungen zu, dann wird die Kante E in die zwei Kanten  $E_1=(\mathbf{a},\mathbf{Q})$  und  $E_2=(\mathbf{Q},\mathbf{b})$  geteilt.

Durch das Verschieben der Endknoten der Kante zum Punkt Q werden ungünstige Elementformen, die durch die folgende Elementteilung entstehen, vermieden. Alle Elemente, bei denen zwei Kanten durch die Strecke L geschnitten werden, sind durch eine gewöhnliche „rot“-Teilung zu verfeinern. Eine „grün“-Teilung erfolgt für die Elemente, welche nur an einer Elementkante geschnitten werden. Die restlichen Elemente bleiben unverändert. Durch diesen einfachen Algorithmus erzeugt man entlang der Strecke L im Netz neue Kanten. In Abbildung 2.4 ist ein entsprechendes Beispiel zu sehen. Abschließend definiert man an den neuen Knoten entlang der Strecke L die „+“- und „-“-Freiheitsgrade.

Bis jetzt ist die hierarchische Datenstruktur durch den Teilungsbaum der Kanten vorgegeben. Durch eine Kantenverdopplung entlang der Strecke L würde diese Datenstruktur zerstört werden, so dass kein effizienter hierarchischer Vorkonditionierer zur Verfügung stünde. Deshalb werden nur die Kanten entlang der Strecke L definiert, die auf die „-“-Knoten verweisen. Für jeden „-“-Knoten existiert dann eine Kopie als „+“-Knoten in der Knotenliste mit einem gegenseitigen Verweis. Ebenso verweist ein „-“-Element auf den Freiheitsgrad eines gewöhnlichen oder „-“-Knotens und die „+“-Elemente verweisen auf gewöhnliche oder „+“-Knoten. Durch die zusätzliche Definition von „-“- und „+“-Knoten erhält man insgesamt folgende Unbekannte:

$n$  Knoten mit  $2n$  gewöhnlichen Knotenfreiheitsgraden

$d$  „-“-Knoten mit  $2d$  Knotenfreiheitsgraden und

$d$  „+“-Knoten mit zusätzlichen  $2d$  Knotenfreiheitsgraden.

Für das aktuelle Netz hat das lineare Gleichungssystem, welches nun gelöst werden muss,  $N = 2(n + d + d)$  Knotenfreiheitsgrade. Der hierarchische Vorkonditionierer  $C^{-1}$  [Yser90], verfügbar durch die Informationen des Kantenbaums, funktioniert jedoch nur für  $2(n + d)$  Knotenfreiheitsgrade. Für die Entwicklung eines effektiven Lösen darf

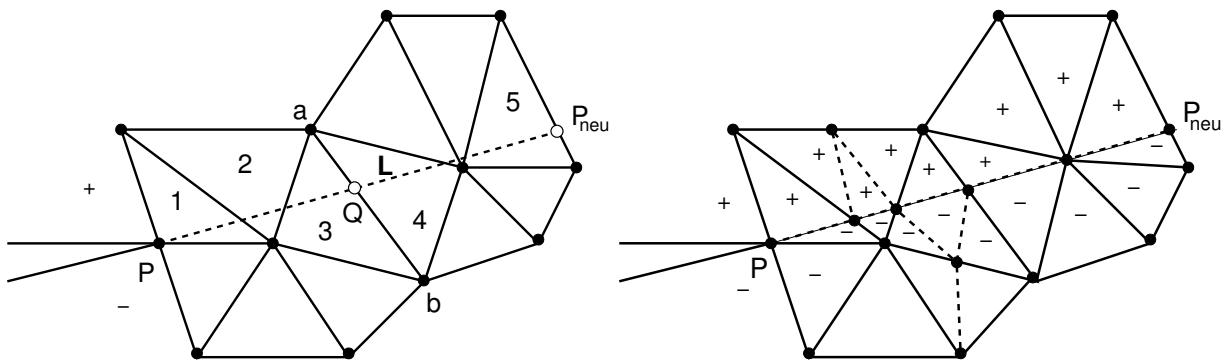


Abbildung 2.4: Netzbehandlung entlang der Strecke L: Element 1 wird „grün“, Elemente 2,3 „rot“ und Elemente 4,5 wieder „grün“ geteilt, nachdem der Knoten verschoben wurde

diese hierarchischen Informationen nicht verloren gehen (wie oben erklärt). Deshalb wird ein Restriktionsoperator  $\mathcal{R}$  mit

$$\mathcal{R} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}I & \mathbb{O} & \frac{1}{2}I & \mathbb{O} \\ \mathbb{O} & I & \mathbb{O} & \mathbb{O} \\ \mathbb{O} & \mathbb{O} & \mathbb{O} & I \end{pmatrix}. \quad (2.7)$$

definiert. Er bildet den fiktiven Raum mit  $2(2n + 2d)$  Knotenfreiheitsgraden auf unseren realen Raum mit  $2(n + 2d)$  Knotenfreiheitsgraden ab. Somit kann der resultierende Vorkonditionierer mittels

$$\mathcal{R} \begin{pmatrix} C^{-1} & \mathbb{O} \\ \mathbb{O} & C^{-1} \end{pmatrix} \mathcal{R}^T. \quad (2.8)$$

in zweifacher Anwendung von  $C^{-1}$  für das Risswachstum eingesetzt werden. Die folgende Vorgehensweise führt zur iterativen Minimierung der Residuen innerhalb des PCGM: Es sei  $\underline{r} = (\underline{r}_0^T, \underline{r}_-^T, \underline{r}_+^T)^T$  der Residuen-Vektor in der  $k$ -ten Iteration im konjugierten Gradienten-Algorithmus mit den Teilvektoren  $\underline{r}_0$ ,  $\underline{r}_-$  und  $\underline{r}_+$ , die zu den normalen sowie „-“-Knoten und „+“-Knoten gehören. Der Vorkonditionierer ermittelt das vorkonditionierte Residuum  $\underline{w}$  als

$$\underline{w} = \mathcal{R} \begin{pmatrix} C^{-1} & \mathbb{O} \\ \mathbb{O} & C^{-1} \end{pmatrix} \mathcal{R}^T \underline{r}, \quad (2.9)$$

das zwei „Vorkonditionierungsaufrufe“ enthält:

$$\begin{pmatrix} \underline{w}_{0,-} \\ \underline{w}_- \end{pmatrix} := C^{-1} \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\underline{r}_0 \\ \underline{r}_- \end{pmatrix} \quad (2.10)$$

und (nach dem Kopieren der  $\underline{r}_+$  zu den „-“-Daten)

$$\begin{pmatrix} \underline{w}_{0,+} \\ \underline{w}_+ \end{pmatrix} := C^{-1} \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\underline{r}_0 \\ \underline{r}_+ \end{pmatrix}. \quad (2.11)$$

Dadurch werden zwei verschiedene Werte für die Residuen an den normalen Knoten berechnet. Das Endresiduum innerhalb der behandelten Iteration ergibt sich dann als deren Mittelwert:

$$\underline{w} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(\underline{w}_{0,+} + \underline{w}_{0,-}) \\ \underline{w}_- \\ \underline{w}_+ \end{pmatrix}. \quad (2.12)$$

Die zwei Solver in (2.10) and (2.11) sind die einfachsten hierarchischen Basis-Vorkonditionierer, angewandt auf die Knotenfreiheitsgrade, welche von den Kantendaten (hierarchische Struktur) bezogen werden. Somit ist im Rahmen eines iterativen Gleichungssolvers Risswachstum modellierbar, ohne die Hierarchie der Datenstruktur zu zerstören. Dieser Solver ist effektiv für bruchmechanische Aufgaben einsetzbar.

## 2.4.2 Adaptive Algorithmen und Kriterien zur Simulation der Rissausbreitung

### Rissausbreitungskriterium

Bei der Betrachtung ebener Probleme der Rissausbreitung sind nur die Moden I und II von Bedeutung, Mode III entfällt. Der kritische Zustand (d.h. Bruch) an der Riss spitze folgt aus dem Zusammenwirken dieser beiden ebenen Moden. Zur Modellierung von Risswachstum existieren eine Reihe von Hypothesen, die sich je nach betrachtetem Material bzw. Versagensmechanismus voneinander unterscheiden. Für isotropes elastisches Materialverhalten und ebene gemischte Beanspruchungen eignet sich das klassische Kriterium der maximalen Umfangsspannung von Erdogan und Sih (1963) [ES63]. Es bestimmt die notwendigen Parameter (Größe und die Richtung der Rissausbreitung sowie die kritische Rissbelastung) anhand der Annahme, dass sich der Riss senkrecht zur maximalen Umfangsspannung  $\sigma_{\varphi \max} = \sigma_{\varphi}(\varphi_0)$  ausbreiten wird, wenn der korrespondierende Spannungsintensitätsfaktor den Wert von  $K_{Ic}$  (Materialparameter) erreicht. Somit ist die Rissausbreitungsrichtung  $\varphi_0$  mit

$$\varphi_0 = 2 \arctan \left( \frac{1 - \sqrt{1 + 8k^2}}{4k} \right), \quad k = \frac{K_{II}}{K_I}. \quad (2.13)$$

definiert.  $\varphi_0$  hängt vom Verhältnis der beiden K-Faktoren ab und die Rissausbreitungsbedingung lautet

$$\frac{1}{4} \left[ K_I \left( 3 \cos \frac{\varphi_0}{2} + \cos \frac{3\varphi_0}{2} \right) - K_{II} \left( 3 \sin \frac{\varphi_0}{2} + 3 \sin \frac{3\varphi_0}{2} \right) \right] - K_{Ic} = 0. \quad (2.14)$$

Letztendlich müssen die Spannungsintensitätsfaktoren  $K_I$  und  $K_{II}$  bestimmt und die Rissausbreitungsbedingung (2.14) geprüft werden. (2.13) liefert dann in Zusammenhang mit einem gegebenen  $\Delta a$  die neue Riss spitze.

### Bestimmung der K-Faktoren

Zur Bestimmung der bruchmechanischen Beanspruchungsparameter  $K_I$  und  $K_{II}$  wurden Zugänge verwendet, die ihre Ermittlung unabhängig von der Struktur der Rissvernetzung (z.B. bezüglich von Symmetrien, Elementgrößen, Knotenpositionen) gestattet. Um eine weitgehend netzunabhängige und sehr genaue Bestimmung der K-Faktoren zu erreichen, bietet sich die Berechnung des J-Integrals an. Dabei ist zu beachten, dass die direkte Anwendung der J-Integraltechnik für Mixed-Mode Belastungen die Auswertung der Spannungs- und Verschiebungsfelder direkt an der Riss spitze notwendig macht ( $x_2$ -Komponente des J-Integrals). Ohne Berücksichtigung des konkreten asymptotischen Verhaltens werden diese Felder mittels FEM immer ungenau wiedergegeben. Selbst durch eine intensive adaptive Netzverfeinerung um die Riss spitze herum kann die Qualität der Approximation nicht entscheidend verbessert werden. Deshalb kam die Interaction-Integral-Technik zum Einsatz. Beim Interaction-Integral werden der FE-Lösung (Index (1)) unterschiedliche asymptotische Lösungen (Index (2)) überlagert und nur die  $x_1$ -Komponente verwendet. Somit können die eben beschriebenen Probleme vermieden werden, da eine J-Integral-Kontur direkt bis zur Riss spitze nicht mehr notwendig

ist, d.h. das Riss spitzennahfeld wird von der Auswertung ausgeschlossen. Man erhält die Bestimmungsgleichungen für die K-Faktoren der FE-Lösung:

$$K_I^{(1)} = \frac{E^*}{2K_I^{(2)}} \int_C \left[ \sigma_{ij}^{(1)} \varepsilon_{ij}^{(2)} \delta_{1k} - \sigma_{ik}^{(1)} u_{i,1}^{(2)} - \sigma_{ik}^{(2)} u_{i,1}^{(1)} \right] n_k \, dC \quad (2.15)$$

$$K_{II}^{(1)} = \frac{E^*}{2K_{II}^{(2)}} \int_C \left[ \sigma_{ij}^{(1)} \varepsilon_{ij}^{(2)} \delta_{1k} - \sigma_{ik}^{(1)} u_{i,1}^{(2)} - \sigma_{ik}^{(2)} u_{i,1}^{(1)} \right] n_k \, dC. \quad (2.16)$$

In (2.15) und in (2.16) werden jeweils entsprechend die Mode I - Eigenlösung und die Mode II - Eigenlösung als Referenzlösung (Index (2)) verwendet ( $E^* = E/(1 - \nu^2)$  - für ebenen Verzerrungszustand).

### Bruchmechanische Vernetzungsstrategie

Das FE-Netz sollte während der Simulation entsprechend der geforderten Genauigkeit der bruchmechanischen Ergebnisse optimiert sein. Da das J-Integral von der Vernetzungstopologie eher unabhängig ist, spielt nur die Netzfeinheit eine entscheidende Rolle. Die Genauigkeit der Lösung an der Riss spitze kann, neben dem verwendeten Element-Fehlerschätzer, über die Auswertung der Wegunabhängigkeit des J-Integrals beurteilt werden. Hierbei handelt es sich um ein globales Fehlermaß. Das Netz wird bis zu dem Niveau verfeinert, bei welchem die relative Abweichung des J-Integrals

$$\epsilon_J = 3 \frac{\text{MAX} (J^{(a)}, J^{(b)}, J^{(c)}) - \text{MIN} (J^{(a)}, J^{(b)}, J^{(c)})}{J^{(a)} + J^{(b)} + J^{(c)}} \quad (2.17)$$

entlang der drei unterschiedlichen Konturen (a),(b) und (c) (siehe Abbildung 2.5) kleiner als ein vorgegebener Wert  $\epsilon$  ist.

Zur Erhöhung der Genauigkeit wurde versuchsweise das Netz innerhalb der Berechnungskontur für das J-Integral zwingend verfeinert. Es zeigte sich aber, dass die normale adaptive Verfeinerung um die Riss spitze oft ausreichend ist.

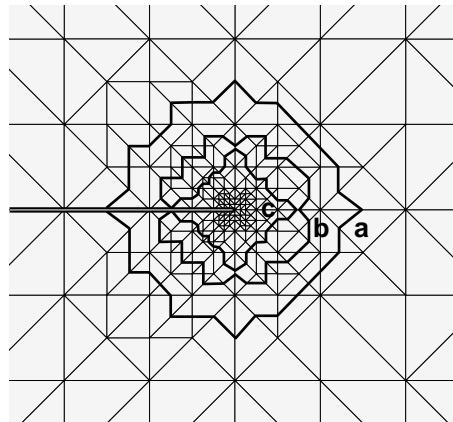


Abbildung 2.5: Finite-Element-Netz mit J-Integral-Konturen

### Rissfortschritt in einer symmetrisch belasteten Probe

Im Folgenden werden einige Testrechnungen von Rissausbreitungssimulationen vorgestellt.

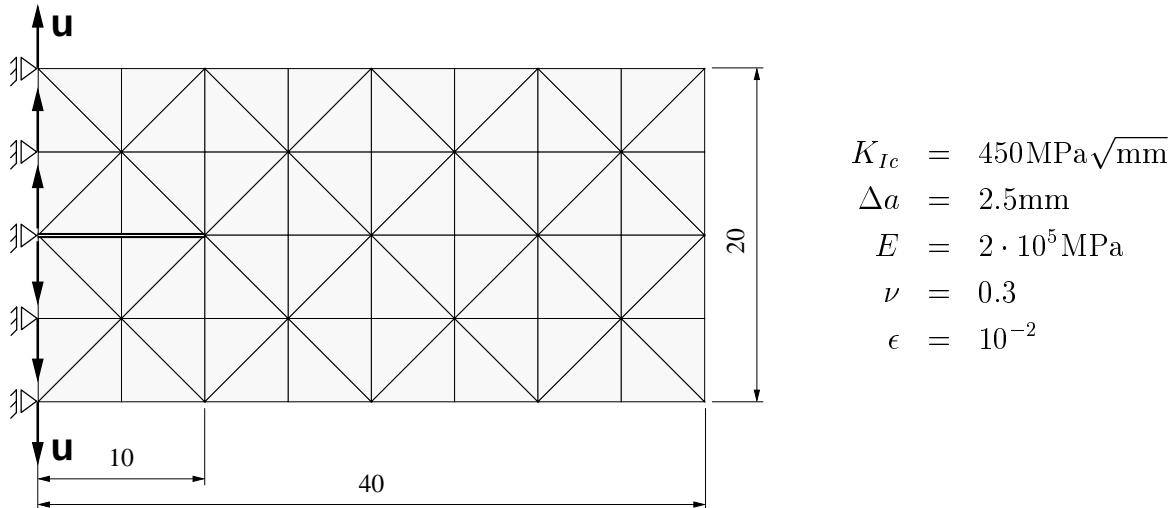


Abbildung 2.6: Symmetrische Zugprobe

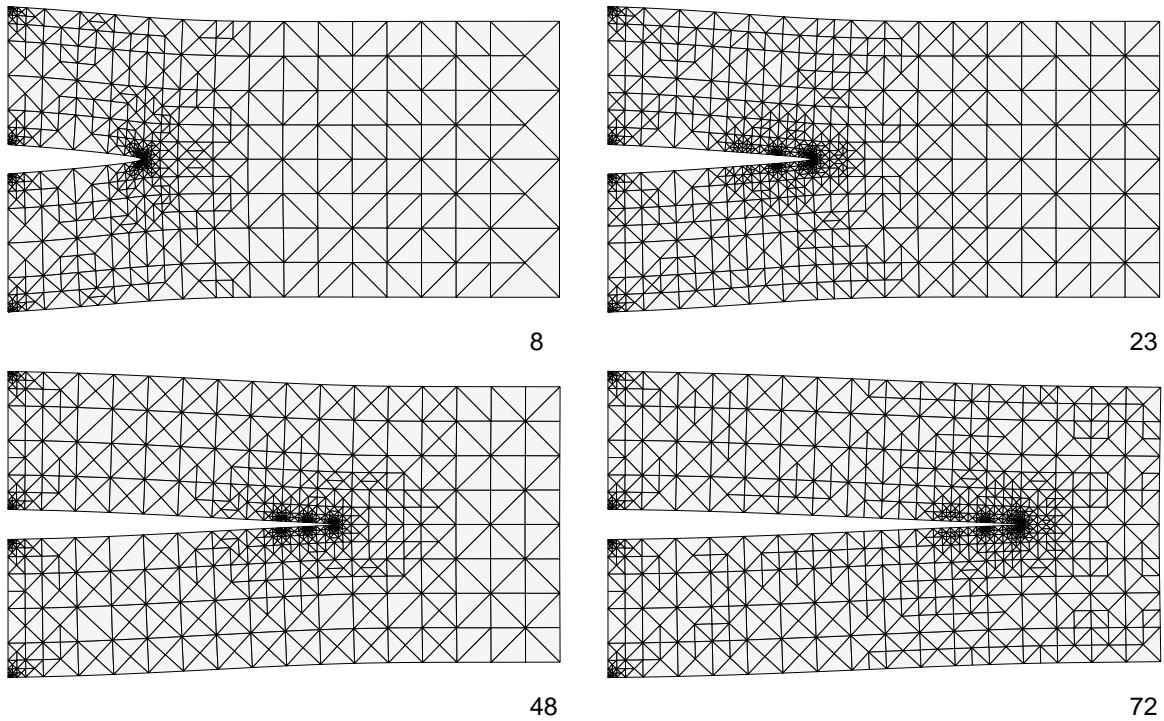


Abbildung 2.7: Phasen der Rissausbreitung unter symmetrischer Belastung

Das erste Testbeispiel betrifft Rissfortschritt in einer symmetrisch belasteten Probe [RMSK04]. In Abbildung 2.6 sind die Geometrie, die Startvernetzung sowie die verwendeten Materialparameter zu sehen. Die Probe wird durch eine gleichmäßige Verschiebung von  $u=0.05\text{mm}$  an der linken Seite der Probe belastet. Die aufgebrachte Belastung ruft

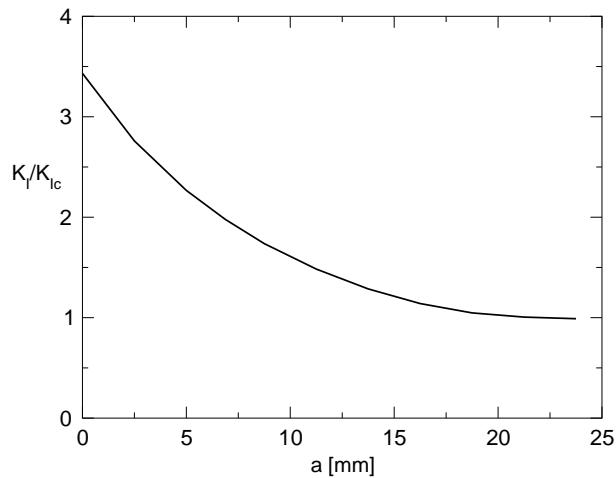


Abbildung 2.8: Änderung des Spannungsintensitätsfaktors während des Risswachstums

ein sofortiges Risswachstum hervor und der Riss wächst kontinuierlich bis zum Rissstopp. In der Abbildung 2.7 sind die adaptiv verfeinerten Vernetzungen der Probe für verschiedene Risslängen zu sehen. Die Zahl unter den Bildern gibt die Anzahl der realisierten FE-Rechnungen bis zur erreichten Risslänge an. Netzverfeinerung und Netzvergrößerung während des Risswachstums sind aus den Bildern ersichtlich. Man erkennt, dass die Vernetzung an Stellen, die von der Rissspitze erreicht wurden, wieder vergrößert wird, wenn ein bestimmter Abstand zur aktuellen Rissspitze überschritten ist. Das vierte Bild in Abbildung 2.7 zeigt die endgültige Position der Rissspitze für die vorgegebenen Materialparameter und Belastung, d.h. der Riss hat angehalten. In Abbildung 2.8 ist die Abhängigkeit des Spannungsintensitätsfaktors bezüglich der Risslänge gezeigt.

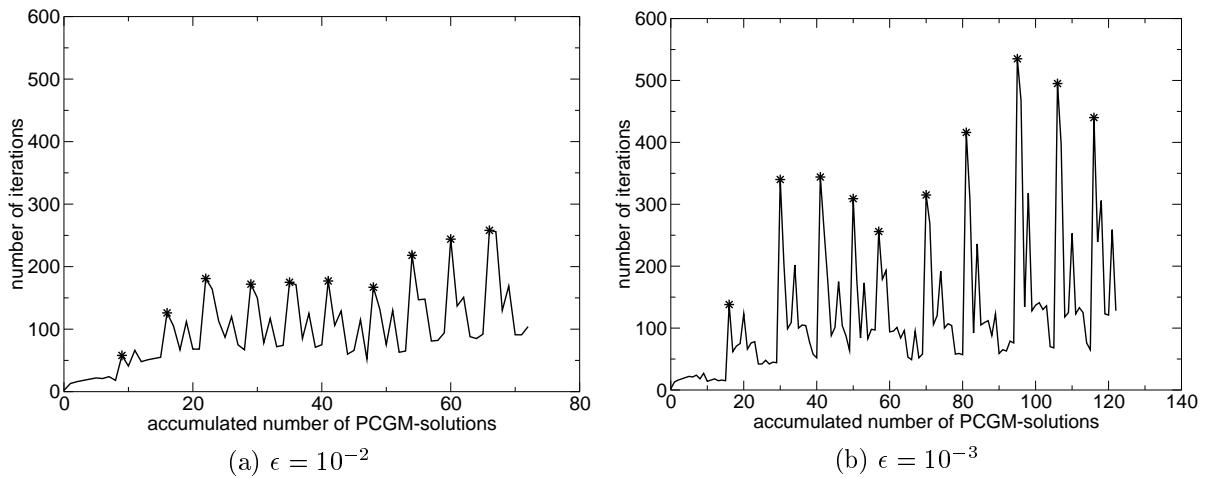


Abb. 2.9: Anzahl der Iterationen des PCGM-Solvers pro FE-Lösung für verschiedene  $\epsilon$

Eine interessante Eigenschaft des PCGM-Solvers ist in Abbildung 2.9a zu sehen, in der die Anzahl der Iterationen für jede FE-Lösung während der Rissforschrittssimulation dargestellt ist. Die markierten Punkte kennzeichnen die FE-Lösung direkt nach einer inkrementellen Rissverlängerung. Man erkennt, dass der Solver mehr Iterationen benötigt, wenn die Rissspitze weiter bewegt wird und das FE-Netz entsprechend der neuen Rissoberfläche angepasst wird. Auf der anderen Seite führt eine folgende Netzverfeinerung

zu einem raschen Abfall der Iterationszahlen. Dieser Sachverhalt zeigt die hohe Effizienz der angewandten Techniken.

Erhöht man die geforderte Genauigkeit von  $\epsilon = 10^{-2}$  auf  $\epsilon = 10^{-3}$ , so wird eine noch feinere Vernetzung um die Riss spitze erzeugt. Das zu lösende Gleichungssystem enthält noch mehr Freiheitsgrade und ist demzufolge noch aufwändiger zu lösen. Die Entwicklung der benötigten Iterationen zur Lösung dieser größeren Gleichungssysteme ist in Abbildung 2.9b zu sehen. Im Unterschied zur Abbildung 2.9a steigen die PCGM-Iterationen für den ersten Lösungsschritt nach der inkrementellen Rissverlängerung ungefähr um das Doppelte. Für die folgenden Verfeinerungsschritte fällt jedoch die Anzahl der Iterationen auf das gleiche Niveau wie in Abbildung 2.9a zurück. Um zukünftig die “Iterations spitzen” der Bilder 2.9a und 2.9b herabzusetzen, ist die korrekte asymptotische Lösung [SM96, Sch97, Sch99, Sch04] in den hierarchischen Löser einzubeziehen.

### Ermüdungsrisswachstum in einer Querkraftbiegeprobe

Ersetzt man bei einer vorgegebenen zyklischen Belastung  $K_I$ ,  $K_{II}$  und  $K_{Ic}$  durch die entsprechenden Schwingbreiten der K-Faktoren  $\Delta K_I$ ,  $\Delta K_{II}$  sowie  $\Delta K_{th}$ , so lassen sich die Gleichungen 2.13 und 2.14 auch auf Ermüdungsrisswachstum anwenden. Allerdings können Effekte wie Riss schließen dabei nicht berücksichtigt werden. Als Simulationsbeispiel wurde die Querkraftbiegeprobe aus [TWB03] gewählt, da hierfür entsprechende experimentelle Vergleichsergebnisse für das Ermüdungsrisswachstum vorliegen. Die Geometrie und die verwendeten Materialparameter sind in Abbildung 2.10 zu sehen. Für den Schwellwert  $\Delta K_{th}$  wird ein sehr kleiner Wert vorgegeben, so dass es in jedem Fall zum Risswachstum während der Simulation kommt.

In Abbildung 2.11 sind die Ergebnisse für verschiedene Risslängen und den zugehörigen, adaptiv erzeugten, FE-Netzen zu sehen. Netzverfeinerung und Netzvergrößerung während des Risswachstums sind deutlich zu erkennen. Die Vergrößerung tritt vor allem im Bereich der Löcher auf, aber auch an den Rissflanken, kurz nachdem die Riss spitze sich weiter bewegt hat. Im Gegensatz zum vorhergehenden Beispiel kann die Vernetzung entlang des entstandenen Risses nicht bis zur Startvernetzung zurück vergröbert werden. Dies ist in der Tatsache begründet, dass der Riss nicht entlang vorhandener Elementkanten des Ausgangsnetzes wächst. Durch die Teilung von Elementen beim inkrementellen Risswachstum wird eine Vergrößerung blockiert, da diese Elemente nicht wieder zusammengefügt werden dürfen.

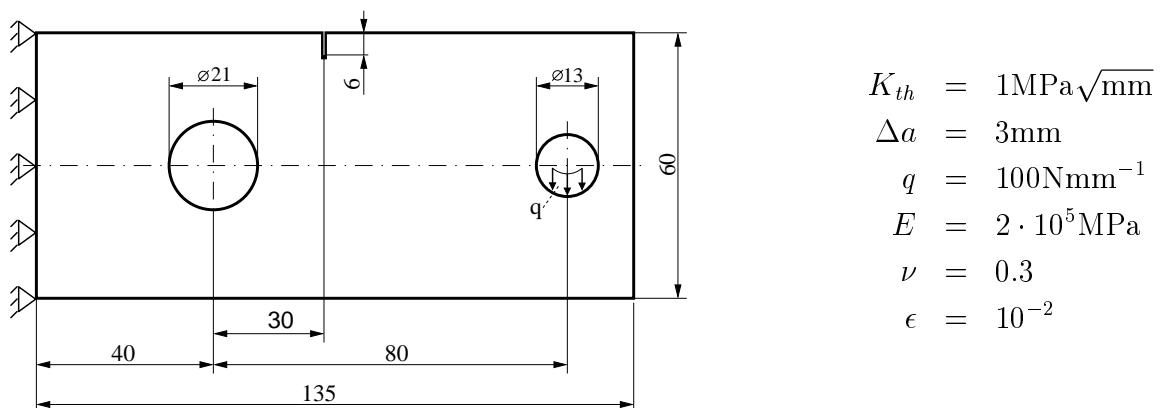


Abbildung 2.10: Querkraftbiegeprobe

Der Vergleich des berechneten Risspfades mit dem experimentell ermittelten wird in Abbildung 2.12 dargestellt. Die Simulation zeigt eine sehr gute Übereinstimmung mit dem Experiment. Die geringen Abweichungen sind auf einen zu groß gewählten Parameter  $\Delta a$  zurückzuführen.

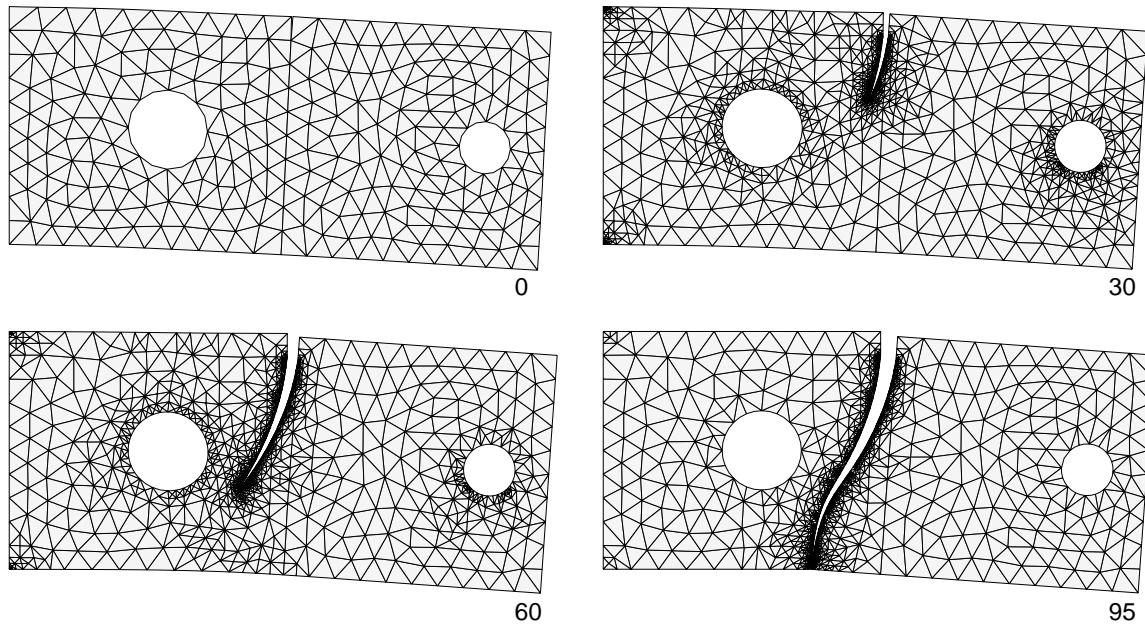


Abbildung 2.11: Phasen des Ermüdungsrisswachstums in der Querkraftbiegeprobe

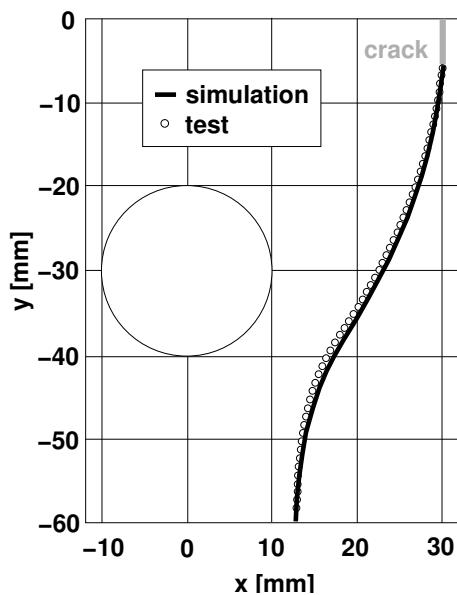


Abbildung 2.12: Vergleich von Simulation mit Experiment

### 2.4.3 Realisierung von Algorithmen zur Übertragung von Zustandsgrößen bei adaptiver Netzverfeinerung

Die Integration des Materialmodells erfolgt im Rahmen der vorgestellten Algorithmen nicht nur in den Gaußpunkten sondern zusätzlich auch in den Elementknoten. Diese Vorgehensweise erleichtert die Übertragung der Knoten- und Gaußpunktswerte vom Vater- auf die Sohnelemente erheblich. In [GBKM00a] und [GBK03] werden die in SPC-PM2AdNl realisierten impliziten Projektionsalgorithmen zur lokalen Lösung des Anfangswertproblems für elastisch-plastisches Materialverhalten bei großen Verzerrungen ausführlich dargestellt.

Allgemein läuft die Verfeinerung für alle realisierten Teilungsarten folgendermaßen ab:

1. Bildung der Sohnelemente (Definition der Kanten und Knoten).
2. Übernahme der Knotenwerte vom Vater- auf die Sohnelemente für die Punkte, bei denen Vater- und Sohnknoten exakt zusammenfallen.
3. Berechnung der Knotenwerte für die neu hinzugekommenen Sohnknoten mittels der Formfunktionen des Vaterelements. Die Übertragung der Knotenverschiebungen

$$\mathbf{u}^{Sonj}(\xi, \eta) = \sum_{k=1}^{N_{el}} h_k(\xi, \eta) \mathbf{u}_k^{Fath} \quad (2.18)$$

führt auf Funktionen, die über die Elementkanten hinweg kontinuierlich sind. Für alle anderen Feldvariablen  $y_i$  mit  $\mathbf{y} = (y_1, y_2, \dots, y_n)^T$  (außer dem Verzerrungstensor im ebenen Verzerrungszustand (EVZ)) ist die Übertragungsvorschrift

$$\mathbf{y}^{Sonj}(\xi, \eta) = \sum_{k=1}^{N_{el}} h_k(\xi, \eta) \mathbf{y}_k^{Fath} \quad (2.19)$$

eine sinnvolle Interpolationsmethode. Im Gegensatz zur Übertragung der Knotenverschiebungen führt der Transfer von  $\mathbf{y}$  entlang der Elementgrenzen auf nicht stetige Funktionen.

4. Nach der Übertragung der Knotenwerte für die Sohnelemente werden die Werte in ihren Gaußpunkten mit Hilfe der Formfunktionen dieser neu generierten Elemente bestimmt.

Die detaillierte Beschreibung der Elementteilungsprozeduren kann [BMGK04b] entnommen werden. An dieser Stelle sei noch ein Sekundärergebnis in Zusammenhang mit der zusätzlichen Lösung des Anfangswertproblems in den Elementknoten erwähnt. Durch diese Vorgehensweise sind neben den Verschiebungen auch lokale Knotenvariablen (Verzerrungen, Spannungen, innere Variablen) a priori verfügbar. Das wurde zu einem Vergleich unterschiedlicher Quadraturformeln für die benötigten Volumenintegrale genutzt. Neben dem in der Regel verwendeten Gauß-Schema gibt es vereinzelte FEM-Anwendungen des so genannten Gauß-Lobatto-Verfahrens. Dieses zeichnet sich dadurch aus, dass die Grenzen eines eindimensionalen Integrationsgebietes als Stützstellen vorgegeben

sind. Die Anzahl und Position weiterer Integrationspunkte sowie die Integrationsgewichte werden in Abhängigkeit von der zu errreichenden Genauigkeit optimiert. Folglich liegen beim Gauß-Lobatto-Verfahren einzelne Stützstellen auf den Kanten eines Finiten Elementes. Insbesondere fallen die Eckknoten immer mit der Position von Integrationspunkten zusammen. Damit reduziert sich die Anzahl der Stützstellen im Inneren des Integrationsgebietes. Wie jedoch in Abbildung 2.13 am Beispiel eines vollständig integrierten 8-Knoten-Viereckelementes deutlich zu sehen ist, nimmt die Gesamtzahl der Stützstellen gegenüber dem Gauß-Verfahren bei gleicher Approximationsgüte für die Berechnung der Integrale zu (16 Integrationspunkte bei Gauß-Lobatto gegenüber 9 bei Gauß).

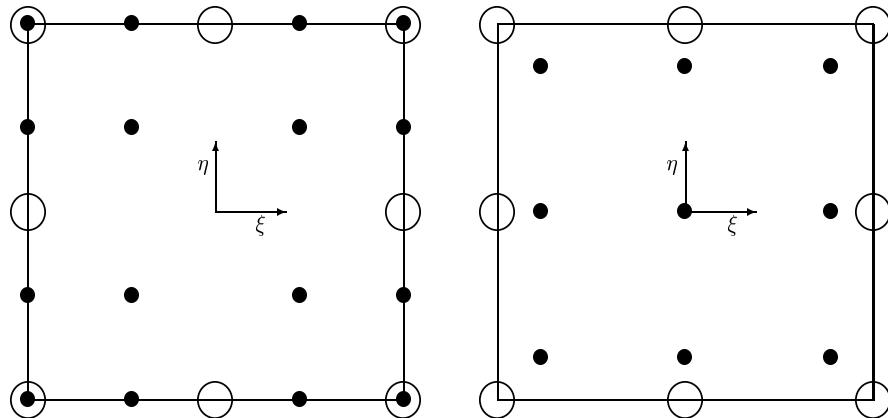


Abbildung 2.13: Position der Integrationsstützstellen (•) und Elementknoten (○) eines 8-Knoten-Viereckelementes bei vollständiger Integration: Gauß-Lobatto-Schema (links), Gauß-Quadratur (rechts).

Numerische Beispielrechnungen mit den in Abbildung 2.13 gezeigten Elementen haben eine sehr gute Übereinstimmung der Simulationsergebnisse gezeigt. Die Verwendung eines reduzierten Gauß-Lobatto-Schemas führte zu größeren Lösungsfehlern (vergleichbar wiederum mit reduzierter Gauß-Integration). Dem Vorteil der verbesserten Effektivität (acht Stützstellen fallen mit den Elementknoten zusammen, lediglich ein Integrationspunkt – im Ursprung des lokalen Elementkoordinatensystems – wäre zusätzlich zu bearbeiten) steht in diesem Fall die nicht akzeptable Genauigkeit gegenüber. Andererseits ist die Verwendung der Gauß-Lobatto-Quadratur bei vollständiger Integration sogar mit einem zusätzlichen Aufwand verbunden, da das Anfangswertproblem in insgesamt 20 Punkten im Element zu lösen ist (gegenüber 17 beim Gauß-Verfahren). Dabei ist zu berücksichtigen, dass im Rahmen der vorgestellten adaptiven Strategie Knotenvariablen immer elementbezogen (und somit bis auf wenige Ausnahmen mehrfach) berechnet und gespeichert werden. Die Unstetigkeiten in den Variablen werden somit bei deren Übertragung auf neue Elemente bewusst beibehalten, um Fehler durch Glättungsalgorithmen zu vermeiden.

## 2.4.4 Adaptive Algorithmen zur Vergrößerung von Vernetzungen

Das FE-Programm SPC-PM2AdN1 erlaubt nur das Vergrößern solcher Elemente, die aus einer früheren Unterteilung hervorgegangen sind. Das bedeutet nichts anderes, als dass in dem Elementbaum, mit dessen Hilfe die Geschichte der Netzanpassung und die

damit verbundene Entwicklung der Elementanzahl nachvollzogen werden kann, von den Blättern zu den Zweigen zurückgegangen wird (vgl. Abb. 2.14).

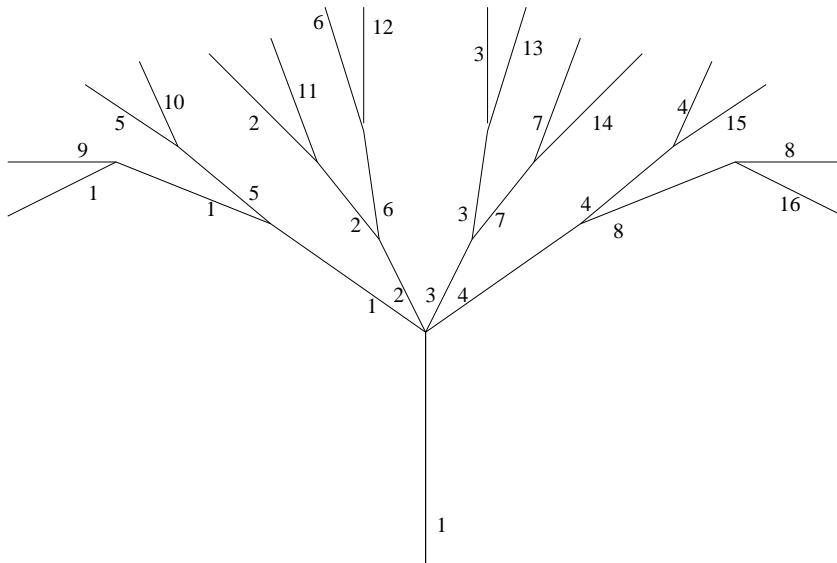


Abbildung 2.14: Elementbaum: Zweige und Blätter. Erste Elementverfeinerung - rot, nachfolgende Unterteilungen - grün. Ziffern: Elementnummern.

Beim Vergröbern müssen Knotenwerte verschiedener Elemente, die zu ein und demselben Knoten gehören, wieder zusammengefügt werden. Für die Art und Weise der Übertragung der Sohnwerte auf das neue Vaterelement existieren verschiedene Methoden. Hier wurden die folgenden zwei verwendet:

- Die Übertragung der Sohnwerte auf das Vaterelement und das damit verbundene Zusammenfügen der Feldvariablen verschiedener Elemente in ein und demselben Knoten erfolgt über das arithmetische Mittel. Diese Vorgehensweise ist die einfachste Art der Übertragung.
- Durch Anwendung der Methode der kleinsten Quadrate kann ein verbesserter Algorithmus zur Bestimmung der Vaterknotenwerte abgeleitet werden. Bei dieser Verfahrensweise ist es möglich, auch Werte von Sohnknoten mit einfließen zu lassen, die im Weiteren durch die Elementvergrößerung gelöscht werden. Dieses Vorgehen ist zweckmäßiger, da mehr Informationen für die Bestimmung der Vaterknotenwerte ausgewertet werden.

Ein weiterer wichtiger Schritt des Vergrößerungsalgorithmus ist die Berechnung der Feldgrößen in den Gaußpunkten des neu gebildeten Vaterelements. Diese Werte werden wie bei der Elementverfeinerung basierend auf den Formfunktionen des neuen Elements ermittelt.

Die entwickelten Vergrößerungsalgorithmen für Vier- und Dreieckelemente wurden in [BMGK04b] ausführlich dargestellt.

## 2.4.5 Fehlerschätzung bei nichtlinearen Problemen

### Fehlerschätzer bezüglich des Gleichgewichts

Für die Simulation des nichtlinearen Werkstoffverhaltens, basierend auf den in SPC-PM2AdN1 realisierten Materialmodellen der anisotropen Elastoplastizität unter Berücksichtigung einer Substruktur (siehe dazu u. a. [Buch01b], [BGK04]) wird der residuale a posteriori Fehlerschätzer gemäß Gleichung (2.1) verwendet.

Kantenorientierte Fehlerschätzer  $\eta_E$  bezüglich der Unstetigkeit der Residualkräfte an gemeinsamen Elementrändern werden an den Einzelkanten in einer Schleife über alle Elemente berechnet. Ein wichtiger Anteil eines elementorientierten Fehlerschätzers für das Element  $T$  ist die Summe der Fehler über alle Kanten  $E$ , die die Elementberandung  $\partial\Omega_T$  bilden (zweiter Teil von Gl. (2.1)):

$$\begin{aligned} \eta_{TE}^2 &= \sum_{E \in \partial\Omega_T} \eta_E^2 = \sum_{E \in \partial\Omega_T} \frac{h_T}{\lambda_D} \| [\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}] \|_{L_2(E)}^2 \\ &= \sum_{E \in \partial\Omega_T} \frac{h_T}{\lambda_D} \int_E |[\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}_h) \mathbf{n}_E]|^2 ds_E \\ &= \sum_{E \in \partial\Omega_T} \frac{h_T}{\lambda_D} \int_E ([\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}_h) \mathbf{n}_E], [\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}_h) \mathbf{n}_E]) ds_E, \end{aligned} \quad (2.20)$$

(vgl. [Ku97, Ku00a, Ku01a, Ku01c]) mit dem Kantensprung der Spannungen  $[\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}]$ . Im Weiteren kann der kantenorientierte Fehler nach Anwendung der Mittelpunktsregel für die Integration vereinfacht werden zu

$$\eta_E^2 = \frac{1}{\lambda_D} |[\boldsymbol{\sigma} \mathbf{E}^\perp]|_{\mathbf{x}_M}^2. \quad (2.21)$$

Hierbei sind  $\mathbf{x}_M$  die Koordinaten des Kantenmittenknotens. Der Vektor  $\mathbf{E}^\perp$  ist entlang der Kantenaußennormale gerichtet. Sein Betrag entspricht der Kantenlänge.

An Kanten mit hängenden Knoten existieren gleichzeitig eine Vaterkante  $E_{Fath}$  (die zu einem ungeteilten Element gehört) und ihre beiden Sohnkanten  $E_{Son_1}$  und  $E_{Son_2}$ , die zu den neu entstandenen Söhnen des Nachbarelementes gehören. Die Bestimmung von Fehlerschätzern an solchen Kanten erfordert eine besondere Behandlung, da an der Vaterkante bezüglich der Seitenmittenknoten der Söhne keine Werte für die Spannungen vorliegen. Durch eine geeignete Approximation müssen diese näherungsweise ermittelt werden (siehe Größen  $\mathbf{f}_{FS1}$  und  $\mathbf{f}_{FS2}$  in Abbildung 2.15).

Für die Berechnung der Fehlerschätzer für diese Vater- und Sohnkanten wird wie folgt verfahren: Der Fehlerschätzer der Vaterkante lautet

$$\begin{aligned} \eta_{E_{Fath}}^2 &= \frac{h_{E_{Fath}}}{\lambda_D} \| [\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}] \|_{L_2(E_{Fath})}^2 \\ &= \frac{h_{E_{Fath}}}{\lambda_D} \int_{E_{Fath}} |[\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}]|^2 d s_{E_{Fath}} \\ &\approx \frac{l_{E_{Fath}}}{\lambda_D} \int_{E_{Fath}} |[\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}]|^2 d s_{E_{Fath}} \end{aligned} \quad (2.22)$$

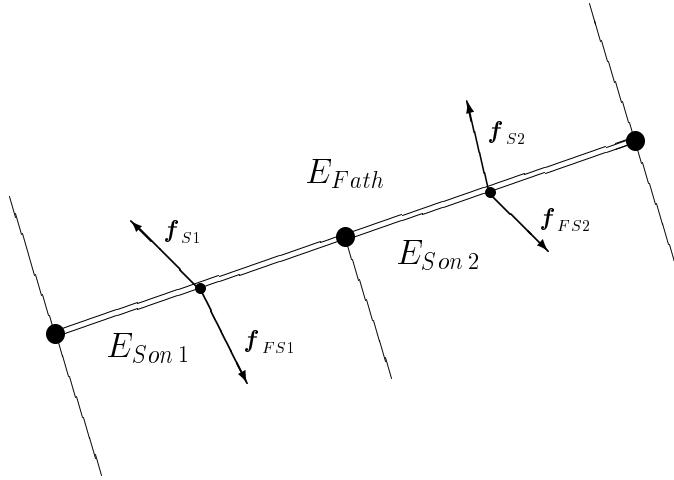


Abbildung 2.15: Kantenkräfte an hängenden Knoten.

Mit  $l_{E_{Son\ 1}} = l_{E_{Son\ 2}} = l_{E_{Son}} = \frac{1}{2} l_{E_{Fath}}$  kann Gleichung (2.22) auch geschrieben werden als

$$\begin{aligned} \eta_{E_{Fath}}^2 &= 2 \frac{l_{E_{Son}}}{\lambda_D} \int_{E_{Fath}} |[\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}]|^2 ds_{E_{Fath}} \\ &= 2 \frac{l_{E_{Son}}}{\lambda_D} \left\{ \int_{E_{Son\ 1}} |[\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}]|^2 ds_{E_{Son\ 1}} + \int_{E_{Son\ 2}} |[\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}]|^2 ds_{E_{Son\ 2}} \right\} \end{aligned} \quad (2.23)$$

Durch Anwenden der Mittelpunktsregel entsteht

$$\eta_{E_{Fath}}^2 = \frac{2}{\lambda_D} \{ \eta_{E_{Son\ 1}}^2 + \eta_{E_{Son\ 2}}^2 \} \quad (2.24)$$

Bei Randkanten mit vorgegebenen Verschiebungsrandbedingungen wird kein lokaler Fehler betrachtet. Der lokale residuale Fehler an Kanten mit Kraftrandbedingungen wird aus dem Sprung der inneren und äußeren Kräfte berechnet.

### Fehlerindikator bezüglich der Fließbedingung

Wie bereits erwähnt, wird durch den oben beschriebenen Fehlerschätzer bei Approximation von  $\lambda_D$  mit dem Elastizitätsmodul der Fehler in vollständig oder teilweise plastisierten Elementen unterschätzt. Aus diesem Grund wurde zusätzlich ein Fehlerindikator bezüglich der Fließbedingung in SPC-PM2AdN1 implementiert, der besonders sensibel auf die Entwicklung der plastischen Zonen reagiert.

Bei der thermodynamisch konsistenten Herleitung des Materialmodells der finiten Elastoplastizität ergibt sich unter anderem die so genannte Kuhn-Tucker-Bedingung:

$$\lambda F = 0 \quad (2.25)$$

Während wegen  $\lambda = 0$  im elastischen Fall, bei Entlastung und neutraler Belastung die Bedingung (2.25) immer gültig ist, führen die verwendeten impliziten Iterationsverfahren für die Lösung des Anfangswertproblems bei Belastung im plastischen Fall nicht zu

einer exakten Erfüllung der Fließbedingung im Rahmen ihrer FE-Approximation  $F_h$ . Wie genau die plastische Zone im aktuellen FE-Netz abgebildet wird, kann mit Hilfe des Fehlerindikators

$$\eta_{KT}^2 = \|\lambda F - \lambda_h F_h\|_{L_2(\Omega)}^2 = \|\lambda_h F_h\|_{L_2(\Omega)}^2 \quad (2.26)$$

bezüglich der Bedingung (2.25) angegeben werden. Die Verwendung dieses Fehlerindikators führt insbesondere an den Rändern der plastischen Zone zu einer Netzverfeinerung, während in deren Kern Netzvergrößerungen bis hin zum Ausgangsgitter auftreten können.

### Strategien zur Fehlerauswertung

In SPC-PM2AdN1 wurden zwei Strategien zur Fehlerauswertung realisiert:

- kantenorientiert bzw.
- elementorientiert.

Während der Gleichgewichtsfehlerschätzer im Rahmen beider Strategien eingesetzt werden kann, ist der Fließbedingungsfehlerindikator lediglich für die elementorientierte Fehlerauswertung geeignet.

Bei der kantenorientierten Vorgehensweise wird ausschließlich der Kantensprunganteil des Gleichgewichtsfehlers ausgewertet. Alle Kanten, die die Beziehung

$$\eta_E^2 \geq \tau_{Tol} \cdot \tilde{\eta}^2 \quad (2.27)$$

erfüllen, werden für eine Unterteilung markiert. Als Vergleichswert  $\tilde{\eta}$  werden der maximale Kantenfehler

$$\tilde{\eta} = \max_{\forall E} \eta_E \quad (2.28)$$

oder alternativ die Fehlersumme

$$\tilde{\eta} = \sum_E \eta_E \quad (2.29)$$

genutzt. Die Art der Elementteilung ist abhängig von der Anzahl und Lage der markierten Kanten im Element.

Im Gegensatz zur kantenorientierten Strategie werden bei der elementorientierten Methode die Elemente markiert. Hierbei können der Fehlerschätzer  $\eta_T$  in der Definition (2.1) und der Fehlerindikator  $\eta_{KT}$  nach (2.26) wahlweise einzeln oder gemeinsam (jedoch unabhängig voneinander) ausgewertet werden. Markiert werden alle Elemente, deren Fehler folgende Beziehungen erfüllen:

$$\eta_T^2 \geq \tau_{Tol_T} \cdot \tilde{\eta}_T^2, \quad \eta_{KT}^2 \geq \tau_{Tol_{KT}} \cdot \tilde{\eta}_{KT}^2. \quad (2.30)$$

Entsprechend der Vorgehensweise beim kantenorientierten Fehlerschätzer können  $\tilde{\eta}_T$  bzw.  $\tilde{\eta}_{KT}$  den Summenfehler oder den Maximalfehler über alle Elemente darstellen.

## Beispiele

Der Test der beschriebenen adaptiven Vernetzungsalgorithmen wurde am Beispiel einer gezogenen Scheibe mit Loch umfassend in [BMGK04b] dokumentiert.

Der residuale Fehlerschätzer gemäß Gleichung 2.1 beinhaltet neben dem Anteil für die Kantensprünge zusätzlich einen Elementresiduumsanteil. Bei linearen Elementen entfällt dieser Anteil wegen

$$\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0}, \quad (2.31)$$

bei quadratischen Elementansätzen kann er nicht a priori vernachlässigt werden. In Abbildung 2.16 ist die Verteilung der beiden Anteile für das Problem der Scheibe mit Loch dargestellt. Bei einer gleichbleibenden Vernetzung entwickeln sich die Anteile proportional zueinander, bei adaptiver Netzanpassung schwankt das Verhältnis. In beiden Fällen überwiegt das Elementresiduum klar.

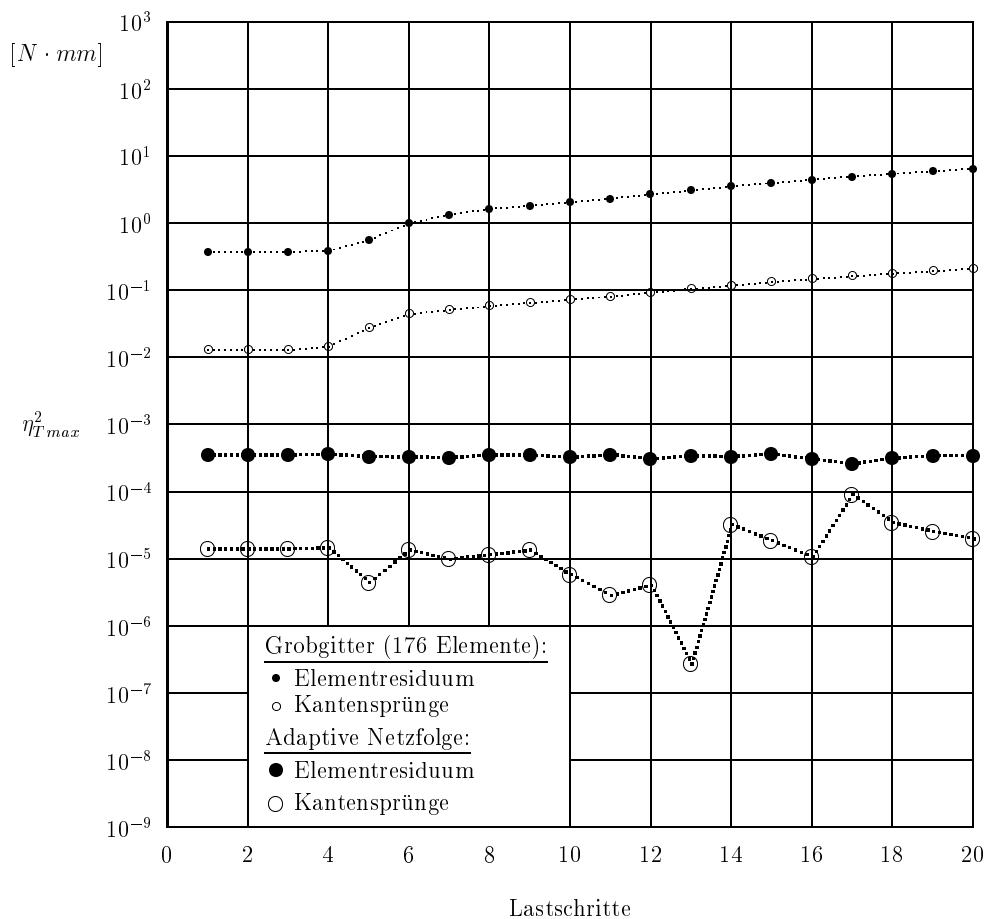


Abbildung 2.16: Scheibe mit Loch. Entwicklung der Fehleranteile Elementresiduum und Kantensprung beim Grobgitter und bei adaptiver Verfeinerung (1330 Elemente im 20. LS). Verschiebung des oberen Scheibenrandes pro Lastschritt um  $10^{-2}$  mm.

Die Effizienz adaptiver Vernetzungsalgorithmen wird anhand der Abbildung 2.17 verdeutlicht. Es ist leicht zu erkennen, dass bei der adaptiven Vorgehensweise eine drastische Fehlerreduzierung bereits mit wesentlich weniger Elementen im Vergleich zu globalen Verfeinerungen erreicht werden kann.

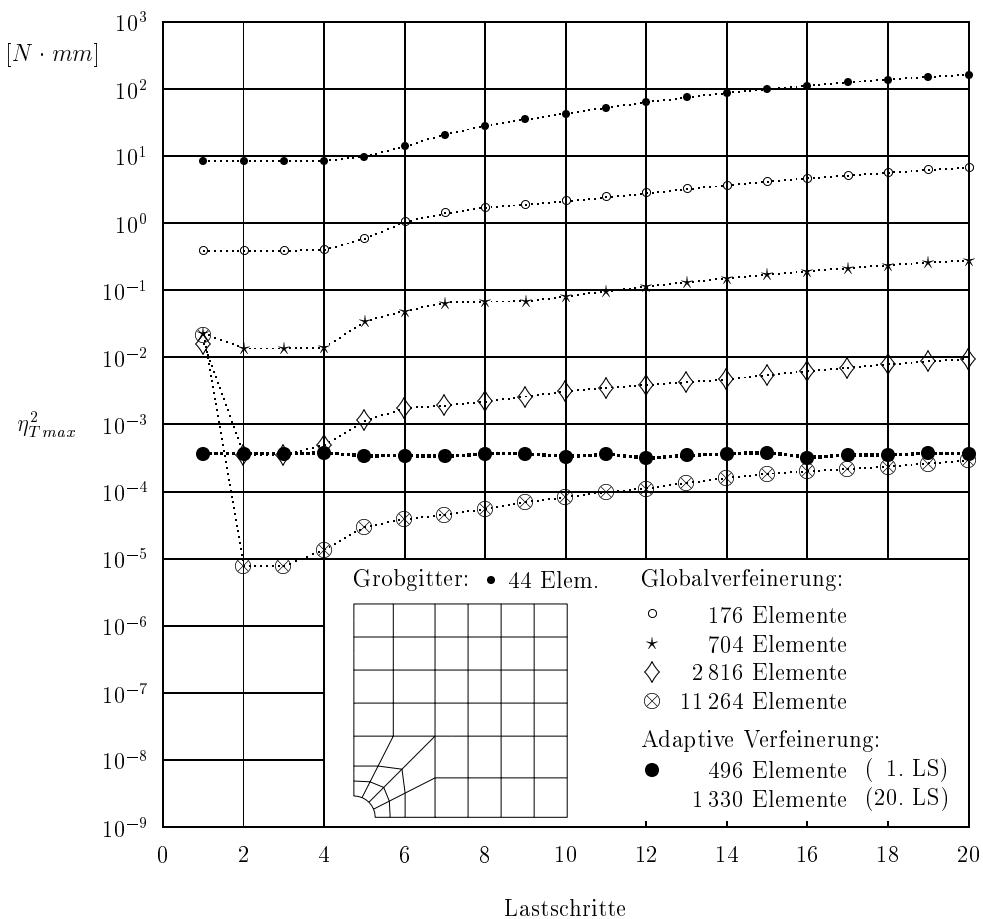


Abbildung 2.17: Scheibe mit Loch: Entwicklung des maximalen Gesamtfehlers  $\eta_T^2$  bei unterschiedlichen Vernetzungen

## 2.4.6 Bearbeitung des Kontaktproblems unter Berücksichtigung von Adaptivität und Reibung

Zu Beginn der Behandlung des Kontakts erfolgte die Betrachtung des 2D-Problems bei einem starren Zielkörper unter der Voraussetzung von Reibungsfreiheit. Für das nichtlineare Materialverhalten wurden dabei die im TP A12 für das lineare Elastizitätsproblem entwickelten hocheffizienten Kontaktalgorithmen angepasst. Deren theoretische und algorithmische Grundlagen sind im Berichtsteil zu A12 und in [MeUn04] ausführlich dargestellt.

Im Rahmen der gewählten Vorgehensweise wird zu Beginn eines jeden Lastschritts für alle noch freien Knoten auf Kanten, die als mögliche Kontakträander in Frage kommen, geprüft, ob diese in das Hindernis eingedrungen sind. Hierzu wurde als starrer Zielkörper zuerst der Halbraum mit konstantem Normalenvektor betrachtet. Weiterhin erfolgte die Einarbeitung von gekrümmten Hindernissen in 2D als quadratische Form ( $F(x_1, x_2) \geq 0$ ) und als Splinekurve.

Penetrierte Knoten werden exakt auf den Zielkörper zurückgezogen. Anschließend werden die Verschiebungen dieser Knoten mit einem Projektor auf spezielle Teilräume (z. B. Erfüllung von homogenen Dirichlet-Randbedingungen) in Richtung der lokalen Tangentialebene am Kontaktpunkt so lange restriktiert, wie der Kontaktfall vorliegt. In Abbil-

dung 2.18 ist beispielhaft der Kontakt einer gestauchten Scheibe mit einem durch Splines begrenzten Hindernis dargestellt.

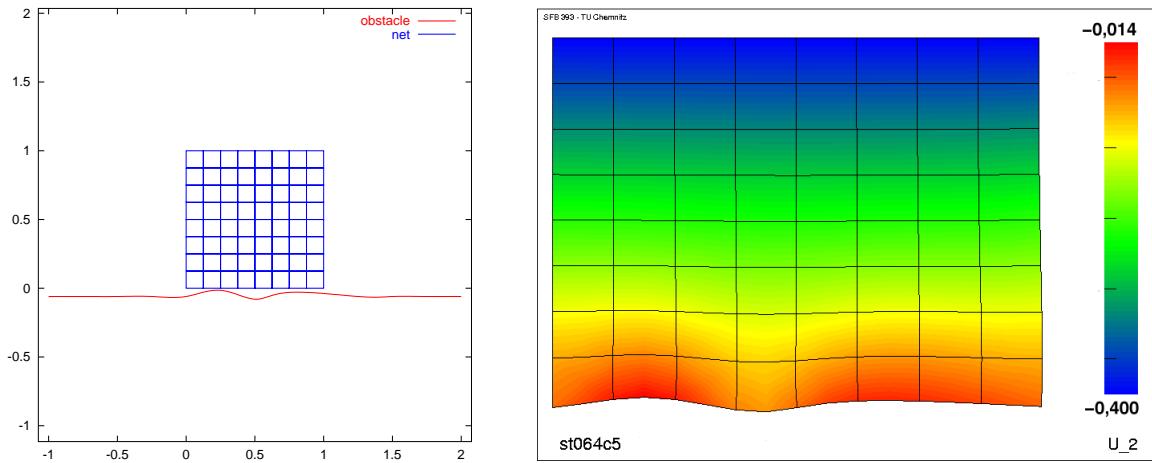


Abbildung 2.18: Stauchen einer Rechteckscheibe gegen ein gekrümmtes, starres Hindernis. Vernetzung einer Hälfte des Scheibenquerschnitts mit 64 Elementen und Geometrie des mit Splines beschriebenen Hindernisses (links). Vertikalverschiebungen bei 40% Stauchung im Fall des reibungsfreien Kontakts (rechts).

Durch die Projektion penetrierter Knoten auf das Hindernis und die damit verbundene Änderung einzelner Komponenten des Verschiebungsvektors kommt es zu einer zusätzlichen, deutlichen Verletzung des zu Beginn des Lastschrittes in der Regel nicht ausiterierten Gleichgewichts. Zur Vermeidung von Oszillationen durch wechselweises Lösen und Penetrieren während der Gleichgewichtsiterationen (die im Extremfall eine Konvergenz der Lösung des Randwertproblems verhindern können) werden Knoten, die erstmals (bzw. erneut nach zwischenzeitlicher Freigabe) in Kontakt kommen, für den gesamten Lastschritt als in Kontakt befindlich markiert und durch den Projektor im PCG-Löser auf dem Hindernis gehalten. Dieser einfache und effiziente Algorithmus zur iterativen Einstellung des Gleichgewichts, verbunden mit einer entsprechenden Korrektur der Position aller inneren Netznoten, hat sich bei moderaten Lastschrittgrößen als außerordentlich stabil erwiesen. Die Größe der Belastungssinkemente ist jedoch bei Kontaktproblemen ohnehin zur Vermeidung der Penetration innerer Netznoten begrenzt. Für Knoten, die sich bereits in Kontakt mit dem Zielkörper befinden, wird am Vorzeichen der Normalkraft zu Beginn des Lastschrittes überprüft, ob sich diese unter Umständen wieder gelöst haben. In diesem Fall werden die Verschiebungsrestriktionen aufgehoben und im Verlauf der weiteren Iterationen des Randwertproblems im Belastungssinkrement nehmen frei gegebene Knoten ihre Gleichgewichtslage ein.

Zum weiteren Vorgehen bei der Realisierung der Kontaktmodellierung im geometrisch und physikalisch nichtlinearen Fall wird auf den Abschnitt "Offene Fragen / Ausblick" verwiesen.

## Literaturverzeichnis

### Eigene referierte Literatur

- [BGK04] A. Bucher, U.-J. Görke and R. Kreißig. A material model for finite elasto-plastic deformations considering a substructure. *Int. J. Plast.*, 20/04:619–642, 2004.
- [BMGK04a] A. Bucher, A. Meyer, U.-J. Görke and R. Kreißig. About a nodal based transfer algorithm and error estimators in nonlinear adaptive FEM. In: Proceedings of the IV European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering, ECCOMAS 2004, Jyväskylä, 2004.
- [BMGK04b] A. Bucher, A. Meyer, U.-J. Görke and R. Kreißig. Entwicklung von adaptiven Algorithmen für nichtlineare FEM. Preprint SFB393/04-03, TU Chemnitz, 2004.
- [GBK03] U.-J. Görke, A. Bucher and R. Kreißig. An efficient algorithm for the integration of the initial value problem in anisotropic finite elastoplasticity considering a substructure. In: *Dislocations. Plasticity on Metal Forming*, A. S. Khan (Ed.), Proceedings of Plasticity 03, Neat Press, 346–348, 2003.
- [Ku00a] G. Kunert. An a posteriori residual error estimator for the finite element method on anisotropic tetrahedral meshes. *Numer. Math.*, 86(3):471–490, 2000.
- [Ku01a] G. Kunert. A local problem error estimator for anisotropic tetrahedral finite element meshes. *SIAM J. Numer. Anal.*, 39:668–689, 2001.
- [Ku01c] G. Kunert. A posteriori  $l_2$  error estimation on anisotropic tetrahedral finite element meshes. *IMA J. Numer. Anal.*, 21:503–523, 2001.
- [Mey90] A. Meyer. A parallel preconditioned conjugate gradient method using domain decomposition and inexact solvers on each subdomain. *Computing*, 45/90:217–234, 1990.
- [MeUn04] A. Meyer and R. Unger. Projection methods for contact problems in elasticity. Preprint SFB393/04-04, TU Chemnitz, 2004.
- [MRS04] A. Meyer, F. Rabold and M. Scherzer. Efficient Finite Element Simulation of Crack Propagation. Preprint SFB393/04-01, TU Chemnitz, 2004.
- [Sch97] M. Scherzer. Stress fields at interface-corners and cracks for non-linear deformations. In: *Damage and Failure of Interfaces*, Proc. of the First International Conference – DFI-1, Vienna, Austria, H.-P. Rossmanith (Ed.), Balkema, 67–74, 1997.

### Eigene referierte Literatur (zur Veröffentlichung angenommen)

- [Sch04] M. Scherzer and M. Kuna. Combined analytical and numerical solution of 2D interface corner configurations between dissimilar piezoelectric materials. *International Journal of Fracture*, 2004 (accepted for publication).

### Eigene nicht referierte Literatur

- [BMGK03] A. Bucher, A. Meyer, U.-J. Görke and R. Kreißig. A contribution to hierarchical adaptive strategies in nonlinear FEM, *Computational Mechanics*, 2003 (submitted).

- [GBKM00a] U.-J. Görke, A. Bucher, R. Kreißig and D. Michael. Implicit integration of deformation laws for large elasto-plastic deformations. In: *Proceedings of the IV. IASS-IACM Colloquium*, Chania-Kreta, 2000.
- [MeRaS04] A. Meyer, F. Rabold and M. Scherzer. Efficient Finite Element Simulation of Crack Propagation. *Int. J. Num. Meth. Engng.*, 2004 (submitted).
- [Ku97] G. Kunert. Error estimation for anisotropic tetrahedral and triangular finite element meshes. Preprint SFB393/97-16, TU Chemnitz, 1997.
- [RMSK04] F. Rabold, A. Meyer, M. Scherzer and M. Kuna. Finite-Elemente-Simulation von Risswachstum mittels effizienter adaptive-iterativer Solver. In: *36. Tagung des DVM-Arbeitskreises Bruchvorgänge, Themenschwerpunkt: Schädigungsmechanismen und Bruch, DVM-Bericht 236*, Deutscher Verband für Materialforschung und -Prüfung e.V., 171–181, 2004.
- [SM96] M. Scherzer and A. Meyer. Zur Berechnung von Spannungs- und Deformationsfeldern an Interface-Ecken im nichtlinearen Deformationsbereich auf Parallelrechnern. Preprint SFB393/96-03, TU Chemnitz, 1996.

## Dissertationen

- [Buch01b] A. Bucher. *Deformationsgesetze für große elastisch-plastische Verzerrungen unter Berücksichtigung einer Substruktur*. Dissertation, TU Chemnitz, Institut für Mechanik, Bericht 4/01 2001.
- [Kada04] I. Yu. Kadashevich. *Modellierung der zyklischen Verfestigung unter Verwendung eines Mehrflächenmodells der Plastizität mit kinematischen Bindungen einschließlich der Parameterbestimmung*. Dissertation, TU Chemnitz, Institut für Mechanik, Bericht 1/04 2004.

## Habilitationen

- [Sch99] M. Scherzer. *Physikalisch und geometrisch nichtlineare Problemstellungen der Festkörper- und Bruchmechanik an Interface-Konfigurationen*. Habilitations-schrift, Technische Universität Bergakademie Freiberg, 1999.

## Andere Arbeiten

- [ES63] F. Erdogan and G.C. Sih. On the crack extension in plates under plane loading and transverse shear. *Journal of Basic Engineering*, 85/63:519–527, 1963.
- [TWB03] H. Theilig, M. Wünsche and R. Bergmann. Numerische und experimentelle Untersuchungen zur Entwicklung gekrümmter Ermüdungsrisse bei proportionaler zyklischer Belastung. In: *35. Tagung des DVM-Arbeitskreises Bruchvorgänge, Themenschwerpunkt: Schädigungsmechanismen und Bruch*, DVM-Bericht 235, 239–248, 2003.
- [Yser90] H. Yserentant. Two Preconditioners Based on the Multilevel Splitting of Finite Element Spaces. *Numer. Math.*, 58/90:163–184, 1990.

## 2.5 Offene Fragen / Ausblick

Entsprechend der Zielsetzung im Berichtszeitraum für das Teilprojekt D1 des SFB 393 der TU Chemnitz wurde die bisher entwickelte FEM-Software für geometrisch und physikalisch nichtlineare Aufgaben um adaptive Strategien zur Netzanpassung und effiziente Methoden zur Kontaktmodellierung erweitert. Das in diesem Zusammenhang entstandene FEM-Programm SPC-PM2AdN1 zeichnet sich damit gegenüber der Vorgängerversion SPC-PMHP durch eine deutlich verbesserte Praxisrelevanz aus. Basierend auf thermodynamisch konsistenten Ansätzen der Elastoplastizität großer Verzerrungen mit anisotropem Verfestigungsverhalten und unter Einbeziehung von Schädigungsmodellen können vielfältige Aufgaben der Struktur- und Rissbruchmechanik numerisch simuliert werden.

Neuartige, knotenbasierte Algorithmen für die Übertragung der Zustandsgrößen auf neu generierte Elemente im Rahmen einer hierarchisch strukturierten Netzverfeinerung wurden entwickelt, in die inkrementell-iterativen Lösungsverfahren integriert und erfolgreich getestet. Der größere numerische Aufwand durch die zusätzliche Lösung des Anfangswertproblems in den Elementknoten ist deshalb gerechtfertigt, weil damit die Zustandsgrößen in den Elementknoten (als Basisvariablen für die Übertragungsstrategien) mit der gleichen Genauigkeit vorliegen wie in den Integrationsstützstellen. Es ist geplant, durch vergleichende Untersuchungen mit anderen Übertragungsmethoden (basierend auf Extrapolationsalgorithmen und/oder Glättung der Knotenvariablen) bis zum Ende der Förderungsperiode den Nachweis zu erbringen, dass diese, theoretisch konsistenter, Verfahrensweise auch zu numerisch genaueren Ergebnissen und einem verbesserten Konvergenzverhalten führt.

Der ursprünglich vorgesehene Fehlerschätzer zur Minimierung der Unstetigkeit der Spannungslösung an gemeinsamen Elementkanten wurde für die verwendeten Elemente mit quadratischen Ansätzen um den Anteil des Elementresiduums ergänzt. Lösungsabhängige Fehlerindikatoren, die eine verbesserte Erfassung der Grenzen plastischer Gebiete und des Wachsens von Rissen und Schädigungszonen ermöglichen, wurden implementiert und untersucht. Offen, und auch in der Literatur nicht beleuchtet, ist dabei die für die Effizienz der Netzanpassung bei nichtlinearen Modellen wesentliche Frage der Wahl geeigneter Abbruchschranken für die Fehlerschätzer und -indikatoren. Hier sind bisher nur heuristische Vorgehensweisen möglich, die zudem stark problemabhängig sind.

Nichtlineare Aufgabenstellungen sind nicht selten durch eine Ortsabhängigkeit kritischer Regionen (die eine Netzverfeinerung erfordern) im Verlauf der Belastungsgeschichte gekennzeichnet. Typische Beispiele sind die Bewegung der Kontaktzone beim Rollkontakt oder die Ausbreitung von Rissen. Im Sinne einer effektiven Diskretisierung ist es somit notwendig, an geeigneten Stellen das Netz zu vergrößern. Unter Nutzung der hierarchischen Datenstrukturen erfolgt die Netzvergrößerung in SPC-PM2AdN1 durch Zusammenfügen vorher geteilter Elemente. Die Bildung des arithmetischen Mittels und die Methode der kleinsten Fehlerquadrate wurden für die Übertragung der Zustandsgrößen auf Knoten im Vaterelement, die aus mehreren Knoten früherer Sohnelemente gebildet werden, untersucht. Ein Vergleich der numerischen Genauigkeit und des Einflusses auf das Konvergenzverhalten dieser beiden Verfahren ist Gegenstand weiterer Untersuchungen. Im Rahmen der Aufgabenstellungen im Berichtszeitraum wurde weiterhin das Auslöschen von Elementen bei Erreichung eines bestimmten Schädigungsgrades und das Auftrennen von Elementen beim Risswachstum realisiert.

Für die Kontaktmodellierung im nichtlinearen Fall wurde zunächst das 2D-Problem bei einem starren Hindernis betrachtet. Dabei wurden die im TP A12 für geometrisch und physikalisch lineare Probleme der Elastizität entwickelten effizienten Verfahren auf der Grundlage geeigneter Projektoren für penetrierte Knoten erfolgreich in das Konzept der inkrementell-iterativen Vorgehensweise bei großen Verzerrungen integriert. Die ursprünglich vorgesehene Begrenzung des Hindernisses mittels Geraden und Kurven zweiter Ordnung wurde um deren Approximation durch kubische Splines erweitert. Ausschlaggebend dafür waren praktische Erwägungen, die auch dazu führten, auf die geplante, sukzessive Erweiterung der Kontaktmodellierung zur Berücksichtigung der Reibung zu verzichten. Stattdessen wurden der verbesserten Beschreibung der Geometrie der Hindernisse und der oben erwähnten zusätzlichen Untersuchungen bezüglich der Fehlerschätzer und der Übertragungsalgorithmen insbesondere bei Netzvergrößerung der Vorrang gegeben. Durch Verzögerungen der Arbeiten zur Lösung des Kontaktproblems durch FE-Diskretisierungen vom Nitsche-Typ im TP A12 (siehe dort) wurde auch die vorgesehene Anpassung dieser Untersuchungen auf nichtlineare Probleme zurückgestellt. Beginnend mit der Übertragung und Modifikation der Fehlerschätzer an Kontaktkanten aus den Untersuchungen zur linearen Elastizität im TP A12 wird gegenwärtig die Kopplung der Kontaktmodellierung mit der adaptiven Vorgehensweise für den nichtlinearen Fall vorbereitet.

Mit SPC-PM2AdNI liegt ein FEM-Programm zur numerischen Simulation von ebenen geometrisch und physikalisch nichtlinearen Problemstellungen vor, das sich auf der Basis hierarchischer Datenstrukturen durch schnelle Lösungsverfahren, effiziente adaptive Strategien zur Netzverfeinerung und -vergrößerung und eine flexible Materialschnittstelle auszeichnet, die mit verallgemeinerten, modernen numerischen Verfahren zur iterativen Lösung des Anfangswertproblems verknüpft ist. Damit lassen sich bereits jetzt unterschiedliche praktische Aufgaben aus der Struktur- und Rissbruchmechanik lösen. Es liegt nahe, diese effektiven und anpassungsfähigen Programmstrukturen zu nutzen, um in einer weiteren Förderungsperiode den Anwendungsbereich des Programmes zu vergrößern. Dafür bieten sich in Zusammenarbeit und basierend auf Vorarbeiten anderer Teilprojekte eine Erweiterung der Materialbibliothek beispielsweise um gekoppelte Aufgabenstellungen und eine Berücksichtigung räumlicher Probleme an. In diesem Zusammenhang rückt auch die Frage der Parallelisierung des Programmes wieder verstärkt in den Vordergrund.