

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. Basierend 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 im-

plementiert 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

Solvern und adaptiven Techniken in A3 und des in SPC-PMHP realisierten Materialmodells für anisotropes elastisch-plastisches Werkstoffverhalten wurde das nichtlineare, adaptive FEM-Programm SPC-PM2AdNl 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 vergrößern. Auf der Grundlage hierarchischer Datenstrukturen wurden effiziente Vergrößerungsstrategien einschließlich der erforderlichen Übertragungsalgorithmen entwickelt und implementiert. Das Auslösen 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 Anfangswertprobleme 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 Einschnitt-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], [KKG98], [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

Zur numerischen Simulation von Risswachstum hat sich neben anderen Verfahren (Boundary-Element-Method, Meshless Galerkin-Method) die Finite-Elemente-Methode (FEM) als geeignetes Werkzeug etabliert. Die Modellierung von Rissausbreitung mittels FEM erfordert die Bearbeitung des algorithmischen und implementierungstechnischen Problems der Bildung neuer belastungsfreier Oberflächen. Der Stand der Forschung wird überwiegend durch ingenieurmäßige, pragmatische Algorithmen charakterisiert [TW03, FR2003], die eine Verschiebung der Risspitze und eine angepasste Neuvernetzung in ihrer Umgebung realisieren und damit lediglich die Aufgabe auf eine informationstechnisch-topologische FEM-Frage zurückführen. Die Extended-Finite-Elemente-Methode (X-FEM)[BB99] realisiert für ein vorgegebenes Netz, das auch relativ grob sein kann, unter Verwendung von singulären Ansatzfunktionen eine relativ gute Anpassung des Netzes an fortschreitende Risse. Dabei werden nicht die Verschiebungen der Rissflanken, sondern die entsprechenden Verschiebungssprünge durch die Finite-Elemente-Formfunktionen des umliegenden Netzes approximiert.

Die Modellierung von Risswachstum stellt jedoch nach wie vor ein anspruchsvolles und schwieriges Problem dar. Zur Verbesserung der Lösungsgenauigkeit ist faktisch immer eine Abschätzung des lokalen Fehlers, insbesondere in Risspitzenumgebungen, erfor-



derlich. Um dies zu tun, müssen adaptive Lösungs- und Vernetzungsstrategien verwandt werden, die in Verbindung mit iterativen Lösern optimale Algorithmen bezüglich Genauigkeit und Aufwand erzeugen. In diesem Zusammenhang ergibt sich für Risswachstumsimulationen mittels moderner Löser mit Multi-Level-Struktur, die die Informationen aller iterativ erzeugten Netze ausbeuten, das Problem, dass bei der Elementteilung und Kantenverdopplung die Hierarchie des Kantenbaums nicht verloren gehen darf, damit die Leistungsfähigkeit des iterativen PGCM-Lösers erhalten bleibt [MRS04]. Durch Anwendung einer speziellen Projektionstechnik wurde im Rahmen der Projektbearbeitung im Bearbeitungszeitraum 2002 bis 2004 ein neuer Löser mit Multi-Level-Struktur entwickelt, der bei Risswachstum effektiv einsetzbar ist. Dieser Löser ist in der Auslaufphase des SFB 393 entscheidend verbessert worden. Dabei wurden, in Analogie zur X-FEM, FE-Ansatzfunktionen für die Verschiebungssprünge über die Rissflanken eingesetzt. Im Vergleich mit dem Vorkonditionierer des schon erwähnten Lösers konnte ein weitaus effizienterer Vorkonditionierer erarbeitet werden.

### 2.3.2 Simulation der Rissausbreitung mittels adaptiv-iterativer Algorithmen

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 und Rissausbreitung 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.

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 Gleichungssolvern angewendet werden. Das entwickelte Programmschema ist in Abbildung 2.1 zu sehen.

Folgende Teilaufgaben wurden dazu im Bearbeitungszeitraum 2002 bis 2004 zur Entwicklung der Basissoftware erfüllt:

- Weiterentwicklung der vorhandenen adaptiven Vernetzungs- und Lösungsalgorithmen, die eine effektive Simulation von Rissausbreitung ermöglichen

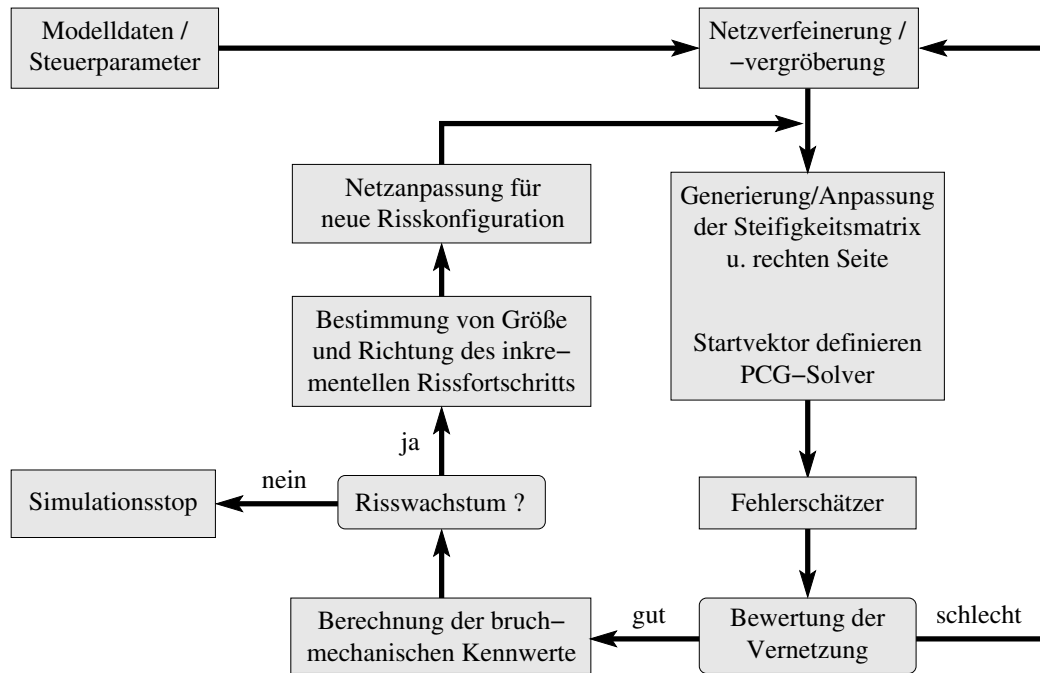


Abbildung 2.1: Programmschema

- Erarbeitung von geeigneten FEM-Techniken zur Bestimmung der bruchmechanischen Beanspruchungsparameter
- Festlegung/Findung geeigneter Kriterien zur Rissausbreitung und deren numerische Umsetzung für einfachste linear-elastische Aufgaben
- Erarbeitung einer bruchmechanisch gesteuerten Vernetzungsstrategie
- Einbau und Erprobung der erarbeiteten Techniken in adaptiv-hierarchische Löser

In der Auslaufphase 2004/2005 wurden

1. der iterative Löser für lineare Aufgaben entscheidend verbessert und
2. erste Schritte zur Einbeziehung des nichtlinearen Materialverhaltens (einschließlich Schädigungsmechanik) in die Risswachstumsformulierungen unternommen.

### 2.3.3 Vergleich unterschiedlicher Algorithmen zur Übertragung von Zustandsgrößen bei adaptiver Netzverfeinerung

Bei geometrisch und physikalisch nichtlinearen Problemen wird die äußere Belastung inkrementell in einzelnen Lastschritten aufgebracht. Wegen der Abhängigkeit der Lösung von der Belastungsgeschichte ist es bei einer Netzverfeinerung bzw. -vergrößerung im Rahmen der nichtlinearen FEM erforderlich, die Feldgrößen (Verzerrungen, Spannungen, innere Variablen) vom alten auf das neue Netz zu übertragen. Die Netzanpassung

und damit im Zusammenhang die Übertragung der Feldvariablen sind bei einer hierarchischen adaptiven Strategie örtlich begrenzt. Im Gegensatz dazu erfordert eine globale Neuvernetzung den Datentransfer für das gesamte Gitter.

Jedes einzelne Lastinkrement kann im Sinne einer adaptiven Strategie als separates Teilproblem angesehen werden, das folgende Schritte beinhaltet:

- Lösung des Anfangs-Randwert-Problems
- Fehlerschätzung
- Netzanpassung
- Übertragung der Feldgrößen auf Knoten und Gaußpunkte des neuen Netzes

Nachfolgend werden unterschiedliche Übertragungsalgorithmen miteinander verglichen: Ein elementorientiertes Extrapolationsverfahren, eine patchorientierte Strategie und das im Rahmen dieses Teilprojektes entwickelte Verfahren, welches auf der zusätzlichen Lösung des Anfangswertproblems in den Elementknoten basiert.

### Elementorientierte Extrapolation

Für den Vergleich unterschiedlicher Transferalgorithmen wurde entsprechend den Grundlagen der in [OQ91] vorgestellten elementorientierten Übertragungsmethode ein adäquater Extrapolationsalgorithmus ins Programm SPC-PM2AdNI implementiert. Dieser basiert auf der Definition von Interpolationsfunktionen  $M_i(\xi, \eta)$ , die der Bedingung

$$y(\xi, \eta) = \sum_{i=1}^n M_i(\xi, \eta) \bar{y}_i \quad (2.1)$$

genügen. Hierbei charakterisiert  $y(\xi, \eta)$  beliebige Feldvariablen bzw. deren Tensorkomponenten in Abhängigkeit von ihren Werten  $\bar{y}_i$  in den  $n$  Gaußpunkten des Elements.

Im betrachteten Fall wird für 8-Knoten-Elemente bei vollständiger Integration der folgende Ansatz für die konkreten Interpolationsfunktionen verwendet:

$$M_i(\xi, \eta) = c_{i1} + c_{i2}\xi + c_{i3}\eta + c_{i4}\xi\eta + c_{i5}\xi^2 + c_{i6}\eta^2 + c_{i7}\xi^2\eta + c_{i8}\xi\eta^2 + c_{i9}\xi^2\eta^2 \quad (2.2)$$

Ebenso wie die gewöhnlichen Formfunktionen mit den Elementknoten verbunden sind, werden auch die speziellen Interpolationsfunktionen  $M_i$  zu den Gaußpunkten mit den lokalen Koordinaten  $(\xi_j, \eta_j)$  in Beziehung gesetzt:

$$M_i(\xi_j, \eta_j) = 1 \quad \text{für} \quad i = j \quad (2.3)$$

$$M_i(\xi_j, \eta_j) = 0 \quad \text{für} \quad i \neq j. \quad (2.4)$$

Werden die Interpolationsfunktionen  $M_i$  in (2.3) und (2.4) ersetzt durch ihre Polynomdarstellung (2.2) in den Gaußpunkten mit den Koordinaten  $(\xi_j, \eta_j)$ , entsteht ein lineares

Gleichungssystem für die Bestimmung der unbekanntenen Koeffizienten  $c_{ij}$ . Es werden 81 Koeffizienten für die neun unterschiedlichen Interpolationsfunktionen  $M_i$  bezüglich der Gaußpunkte erhalten. Diese Interpolationsfunktionen werden für alle Feldvariablen bzw. deren Komponenten im Fall mehrstufiger Tensoren als identisch angenommen.

Unter Verwendung der Funktionen  $M_i$  wird die Extrapolation der Gaußpunktwerte eines Elementes auf seine Elementknoten durchgeführt. Gehört ein Knoten zu mehreren Elementen, werden an diesem unterschiedliche Werte für ein und dieselbe Feldgröße erhalten, je nachdem in welchem Element die Berechnung am Knoten erfolgte. Im Gegensatz zu der sonst in der Literatur üblichen Vorgehensweise werden diese unterschiedlichen Knotenwerte nicht gemittelt. Die unterschiedlichen Werte in den Seitenmittenknoten werden zur Berechnung des Kantensprungfehlers (siehe (2.15)) für die adaptive Steuerung herangezogen. Es wird davon ausgegangen, dass die mit Hilfe der Extrapolationsmethode ermittelten Knotenwerte der Feldgrößen von geringerer Genauigkeit sind als die mittels einer zusätzlichen Lösung des Anfangswertproblems berechneten.

Einige aktuelle Ergebnisse von Untersuchungen elementorientierter Extrapolation im Fall von nichtlinearen Problemen sind in [CRSW99, ERBM98, FC95] veröffentlicht.

### Patchorientiertes Verfahren

Um die Genauigkeit der Übertragungsmethode zu verbessern, müssen zusätzliche Informationen in die elementorientierte Extrapolationsmethode eingearbeitet werden. Eine logische Erweiterung und gleichzeitig eine Verbindung zwischen lokalen und globalen Algorithmen ist die Betrachtung einer Gruppe benachbarter Elemente (Patch) zur realistischeren Berechnung von Feldgrößen. Als Basis dient dabei die sogenannte superkonvergente Patch-recovery (SPR) Methode von Zienkiewicz und Zhu [ZZ92a, ZZ92c, ZZW93]. In diesem Rahmen werden polynomiale Funktionen eingeführt, welche die Feldgrößen innerhalb eines Teilgebietes des Gitters beschreiben. Diese Funktionen werden mit der Methode der kleinsten Quadrate an diskrete Werte in ausgewählten Punkten optimal angepasst.

Im Folgenden sollen kurz die grundlegenden Beziehungen der SPR-Methode für lineare Elastizität dargestellt werden (vergleiche [ZZ92b]). Die mittels der FEM berechneten Cauchy-Spannungen  $\boldsymbol{\sigma}_h$  lauten

$$\boldsymbol{\sigma}_h = \mathbf{D} \mathbf{B} \mathbf{u}_h \quad (2.5)$$

mit

$$\mathbf{u}_h = \mathbf{G} \bar{\mathbf{u}} \quad (2.6)$$

wobei  $\mathbf{D}$  die Elastizitätsmatrix,  $\mathbf{u}_h$  die FE Approximation der Verschiebungen und  $\bar{\mathbf{u}}$  die Knotenwerte der Verschiebungen sind. Die Matrix  $\mathbf{G}$  besteht aus dem Vektor  $\mathbf{N}^T = (N^1, N^2, \dots, N^n)$  mit den gewöhnlichen Formfunktionen und lautet im zweidimensionalen Fall:

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} \mathbf{N}^T & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{N}^T \end{pmatrix} \quad (2.7)$$

Weiterhin repräsentiert die Matrix  $\mathbf{B}$  den bekannten Differentialoperator, der die Verzerrungen mit den Verschiebungen  $\mathbf{u}_h$  verbindet. Das Ziel der SPR-Methode besteht in der Bestimmung von Knotenwerten  $\bar{\boldsymbol{\sigma}}^*$ , so dass die geglättete, kontinuierliche Feldgröße  $\boldsymbol{\sigma}^*$ , die über die Formfunktionen und diese Knotenparameter  $\bar{\boldsymbol{\sigma}}^*$  mit

$$\boldsymbol{\sigma}^* = \tilde{\mathbf{G}} \bar{\boldsymbol{\sigma}}^* \quad (2.8)$$

definiert ist, genauer sein soll als die FE-Approximation  $\boldsymbol{\sigma}_h$  von  $\boldsymbol{\sigma}$ . Die Matrix  $\tilde{\mathbf{G}}$  besteht aus der entsprechenden Anzahl von Vektoren  $\mathbf{N}$  analog zu (2.7). Die Berechnung der Spannungen  $\bar{\boldsymbol{\sigma}}^*$  erfolgt innerhalb eines Teilgebietes, bestehend aus benachbarten Elementen (Patch) mit einem gemeinsamen Scheitelknoten (siehe Abbildung 2.2). Es wird angenommen, dass die Knotenwerte der  $j$ -ten Spannungskomponente jeweils einer polynomialen Darstellung

$$\sigma_{p_j}^* = \mathbf{P}^T \mathbf{a}_j \quad (2.9)$$

des aktuellen Spannungsfeldes genügen. Hierbei definiert  $\mathbf{P}$  den Vektor der entsprechenden Polynomterme  $\mathbf{P}^T = [1, x, y, x^2, xy, y^2, x^2y, xy^2, x^2y^2, \dots]$ , die maximal die gleiche Ordnung  $p$  wie die Formfunktionen besitzen sollen. Mit  $\mathbf{a}_j$  wird der Vektor der zur betrachteten Spannungskomponente gehörenden Polynomkoeffizienten  $\mathbf{a}_j^T = [a_1, a_2, \dots, a_p]$  bezeichnet. Die polynomiale Näherung gilt für jeden Patch und wird für die Berechnung einer jeden Spannungskomponente genutzt.

Der Koeffizientenvektor  $\mathbf{a}_j$  wird mittels der Methode der kleinsten Quadrate bezüglich einer bestimmten Anzahl  $n$  von Bezugspunkten innerhalb des betrachteten Patches bestimmt.

$$\begin{aligned} F(\mathbf{a}_j) &= \sum_{i=1}^n (\sigma_{hj}(x_i, y_i) - \sigma_{p_j}^*(x_i, y_i))^2 \\ &= \sum_{i=1}^n (\sigma_{hj}(x_i, y_i) - \mathbf{P}^T(x_i, y_i) \mathbf{a}_j)^2 \rightarrow \text{Min} \end{aligned} \quad (2.10)$$

Hierbei sind  $(x_i, y_i)$  die globalen Koordinaten des  $i$ -ten Knotens des Patches. Ausgehend von den notwendigen Bedingungen für die Existenz eines Minimums von (2.10) folgt das lineare algebraische Gleichungssystem

$$\mathbf{A} \mathbf{a}_j = \mathbf{b} \quad (2.11)$$

für den unbekanntem Koeffizientenvektor  $\mathbf{a}_j$  mit

$$\mathbf{A} = \sum_{i=1}^n \mathbf{P}(x_i, y_i) \mathbf{P}^T(x_i, y_i) \quad \text{und} \quad \mathbf{b} = \sum_{i=1}^n \mathbf{P}(x_i, y_i) \sigma_{hj}(x_i, y_i) \quad (2.12)$$

Wiberg und Ziukas definierten den Begriff der Superkonvergenz in einem weiter gefassten Sinn: *One can recover the finite element solution and/or its derivatives by means of various post-processing techniques* [WZ98]. Entsprechend dieser Idee wurde für den Vergleich unterschiedlicher Transferalgorithmen eine patchorientierte Übertragungsmethode entwickelt, die auf der grundlegenden Konzeption des SPR aufsetzt und sie dahingehend weiterführt, dass nicht nur Spannungen, sondern alle vorhandenen Feldvariablen

$\mathbf{y}$  in dieser Art und Weise auf die Elementknoten übertragen werden. Dabei enthält der Vektor  $\mathbf{y}$  sowohl die Spannungen als auch die Verzerrungen, innere Variablen und den plastischen Multiplikator.

Das Ergebnis des Übertragungsalgorithmus kann durch viele Faktoren beeinflusst werden, so z.B. Form und Grad der verwendeten Polynome, Auswahl der Bezugspunkte usw. Vor allen Dingen muss gewährleistet sein, dass eine eindeutige Lösung im Rahmen der Methode der kleinsten Quadrate existiert. Das bedeutet, dass die Anzahl der Bezugspunkte nicht kleiner sein darf als der Grad des Polynoms. Aus diesem Grund werden in [GZH04] Gaußpunkte der vollständigen Integration empfohlen. In diesem Zusammenhang wurde der in das FE-Programm SPC-PM2AdNl implementierte Transferalgorithmus auf vollständig integrierte 8-Knoten-Elemente der Serendipity-Klasse angepasst. Dementsprechend wurden Patches der folgenden Form betrachtet:

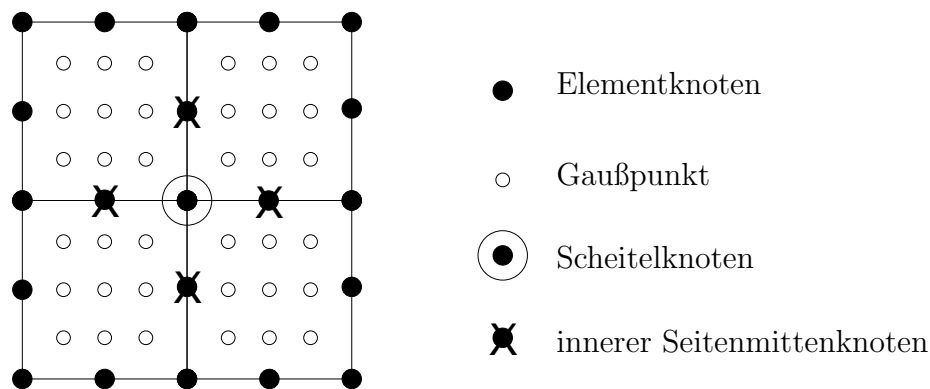


Abbildung 2.2: Patch für vollständig integrierte 8-Knoten-Elemente der Serendipity-Klasse in der inneren Netzregion. Anwendung eines eindeutigen Berechnungsschemas für den Scheitelknoten des Patches, Mittelwertbildung an den inneren Seitenmittenknoten, die auch zu den benachbarten (überlappenden) Patches gehören.

Ebenso wie bei der SPR-Methode wird angenommen, dass die Knotenwerte  $\bar{\mathbf{y}}^*$  einer beliebigen Feldvariable mit einem Polynom approximiert werden können, das die gleiche Ordnung wie die Formfunktionen besitzt. Dieses Polynom ist für das betrachtete Teilgebiet definiert. Es gilt analog

$$y_{pj}^* = \mathbf{P}^T \mathbf{a}_j. \quad (2.13)$$

Für jede einzelne Variable bzw. Komponente wird in analoger Weise ein individueller Koeffizientenvektor mittels der Methode der kleinsten Quadrate berechnet:

$$\begin{aligned} F(\mathbf{a}_j) &= \sum_{i=1}^n (y_{hj}(x_i, y_i) - y_{pj}^*(x_i, y_i))^2 \\ &= \sum_{i=1}^n (y_{hj}(x_i, y_i) - \mathbf{P}^T(x_i, y_i) \mathbf{a}_j)^2 \rightarrow \text{Min} \end{aligned} \quad (2.14)$$

Der Koeffizientenvektor  $\mathbf{a}_j$  wird wiederum durch Lösung eines linearen Gleichungssystems äquivalent zu (2.11) ermittelt. Damit können die Knotenwerte beliebiger Feldgrößen durch Einfügen der entsprechenden Knotenkoordinaten in Gleichung (2.13) ermittelt werden. Es ist offensichtlich, dass für innerhalb des Teilgebietes liegende Seitenmittenknoten die Berechnung der Feldgrößen mehrfach (im vorliegenden Fall zweimal) erfolgt. In diesen Knoten wird der Mittelwert aus den einzelnen Berechnungen gebildet.

Schließlich soll erwähnt werden, dass die patchorientierte Übertragungsmethode zu geglätteten Verläufen der Feldvariablen führt (einheitliche, elementunabhängige Werte in den Knoten). Damit ist das Berechnen von Kantensprüngen als Anteil des residualen Fehlerschätzers (vgl. Gleichung (2.15)) mit dieser Methode nicht möglich (siehe [BGK05]). Folglich wird bei der Fehlerschätzung im patchorientierten Transfer dieser Anteil vernachlässigt.

### Zusätzliche Lösung des Anfangswertproblems in den Elementknoten

In [OQ91, PHDO96] werden einige Anforderungen an zweckmäßige Transferalgorithmen formuliert:

1. Die Übertragung der Zustandsvariablen soll mit dem Verschiebungsfeld des neuen Netzes kompatibel sein.
2. Die Übertragung soll konsistent zum konstitutiven Algorithmus durchgeführt werden.
3. Der Transfer soll in die Gleichgewichtssiterationen eingebunden sein.
4. Sich entwickelnde Randbedingungen sollen vom Übertragungsalgorithmus nicht beeinflusst werden.
5. Der numerische Approximationsfehler soll minimiert werden.

Lokale und globale Übertragungsalgorithmen, die auf den Werten der Feldvariablen in den Gaußpunkten basieren, sind durch den gewählten Polynomgrad der Approximationsfunktion beschränkt. Selbst wenn diese Beziehungen konsistent zu der benutzten FE-Approximation sind, bleiben die in den vorangegangenen Abschnitten präsentierten Übertragungsmethoden Interpolationen mit den bekannten numerischen Einschränkungen.

Um insbesondere den ersten beiden der genannten Forderungen besser zu entsprechen, wird die zusätzliche Lösung des Anfangswertproblems in den Elementknoten als eine alternative Vorgehensweise für die Übertragung der Feldgrößen vorgeschlagen. Im Gegensatz zu den meisten aus der Literatur bekannten FE Anwendungen wird in dem hier entwickelten Programm SPC-PM2AdNI das Anfangswertproblem nicht nur in den Gaußpunkten, sondern auch in den Elementknoten gelöst. Damit sind alle Feldgrößen sowohl in den Gaußpunkten als auch in den Knoten vorhanden. Das bedeutet außerdem, dass die Feldgrößen in den Knoten mit der gleichen Genauigkeit berechnet werden wie in den Gaußpunkten – unabhängig von der Ordnung der FE Approximation (siehe auch [BGK05]).

Bei finiter Elastoplastizität existiert keine explizite Spannungs-Dehnungsbeziehung. Vielmehr liegt das Materialgesetz in Form eines Algebro-Differenzialgleichungssystems (DAE) vor. Für seine numerische Lösung muss es nach der Zeit diskretisiert werden. Nach Anwenden eines Einzschrittdiskretisierungsschemas (z.B. Euler, Crank-Nicolson) zur Lösung von Differenzialgleichungen wird ein nichtlineares algebraisches Gleichungssystem erhalten, welches mit dem Newton-Verfahren gelöst wird. Für weitere Details wird auf [Buch01b, BGK04] verwiesen.

Nach der Übertragung der Feldvariablen auf das neue Netz sind in der Regel die Gleichgewichtsbedingungen verletzt. Das gilt auch für die hier vorgestellte Übertragungsmethode, da der Transfer von den Knoten hin zu den Gaußpunkten des neuen Netzes allein über die Formfunktionen erfolgt. Darüber hinaus muss die Erfüllung der Fließbedingung für plastische Belastungszustände an allen Integrationspunkten durch geeignete und konsistente numerische Algorithmen sichergestellt werden. Bei element- bzw. patchbezogenen Übertragungsmethoden erfolgt der Transfer der Feldgrößen unabhängig voneinander. Im Gegensatz zur Methode der zusätzlichen Lösung des Anfangswertproblems in den Knoten ist hier die physikalische Konsistenz der neu berechneten Knotenwerte, z.B. die Erfüllung der Fließbedingung, nicht gewährleistet. Deswegen ist es erforderlich, Nachiterationen anzufügen, damit das Gleichgewicht wieder hergestellt werden kann.

Da bei FE-Approximationen, abgesehen von einigen speziellen Formulierungen, nur das Verschiebungsfeld kontinuierlich über die Elementgrenzen ist, führt die hier vorgestellte Übertragungsmethode zu unterschiedlichen Werten ein und derselben Feldvariable an einem Knoten, der zu unterschiedlichen Elementen gehört. Der in [BGK05] vorgestellte adaptive Algorithmus basiert aber genau auf diesen ungeglätteten Daten. Die unterschiedlichen Werte stellen eine konsistente Grundlage für anschließende Iterationen zur Lösung des Anfangs-Randwertproblems dar. Außerdem werden die unterschiedlichen Werte an den Seitenmittenknoten für die Berechnung des Kantensprungs bei der Fehlerschätzung verwendet (2.15).



## Fehlerschätzung bei nichtlinearen Problemen

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

$$\eta_T^2 \approx \frac{h_T^2}{\lambda_D} \int_{\Omega_T} |\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}_h) + \mathbf{f}_h|^2 d\Omega_T + \sum_{E \in \partial\Omega_T} \frac{h_T}{\lambda_D} \int_E |[\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}_h) \mathbf{n}_E]|^2 ds_E \quad (2.15)$$

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 bestimmend sind [KV00]. Diese Aussage gilt bei finiter Elastoplastizität nur noch für die Verwendung von linearen Elementen. Bei Elementansätzen höherer Ordnung und großen elastisch-plastischen Verzerrungen ergibt sich 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  $\eta_{KT}$  bezüglich der Erfüllung der Fließbedingung implementiert.

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

Die Geschichte der Schädigungsmechanik beginnt mit den Arbeiten von Kachanov [Kacha58] und Rabotnov [Rabo59] in den 50-iger Jahren. Die darauf folgende Zeit war vor allen Dingen von der Entwicklung dieser Modelle auf der Ebene der Materialgleichungen gekennzeichnet, ohne die dazu notwendigen Randwertaufgaben, die die zu bewertenden konkreten inhomogenen Spannungszustände erzeugen können, zu lösen. So entstanden eine ganze Reihe von Modellen, die das konstitutive Verhalten bis hin zum duktilen Bruch erfassen. Zur Beschreibung der dabei auftretenden komplizierten Phänomene (Bildung, Wachstums und Vereinigung mikroskopischer Hohlräume) war es notwendig, auf unterschiedlichen Niveauebenen zu arbeiten. Das sind nach Thomason [Thoma90] und Needleman [Needl00]:

1. das mikroskopische metallphysikalische Niveau der Theorie der Versetzungen,
2. das mesoskopische Niveau, auf dem der konkrete Schädigungsmechanismus in der Mikrostruktur bis zum Bruchversagen modelliert wird,

### 3. das makroskopische Niveau der Kontinuumstheorie.

Erst in den 70-iger und 80-iger Jahren konnten infolge der rasanten Entwicklung der Computertechnik auch die dazugehörigen Randwertaufgaben des Makroniveaus gelöst werden. So resultierten aus der Forschung der vergangenen Jahre verschiedene schädigungsmechanische Modelle für die Beschreibung des duktilen Versagens metallischer Werkstoffe, die numerisch durchgerechnet wurden. Dies geschah auch mit dem Ziel, um in inverser Aufgabenstellung auf die zu verwendenden Materialparameter zu schließen. Das vorangige Anwendungsgebiet der applikativen Schädigungsmechanik war auf die Verbesserung der klassischen zähbruchmechanischen Konzepte zur stabilen Rissausbreitung gerichtet, womit auch erste Erfahrungen zur Bestimmung von Schädigungsparametern gesammelt wurden. Allerdings wies z.B. der Vergleich unterschiedlicher FEM-Codes und Strategien zur Parameteridentifikation auf eine noch nicht zufriedenstellende Situation [BeBo99] hin.

Am bekanntesten sind die Modelle von Gurson-Tvergaard-Needleman [Gurs77] und Rousselier [Rouss01], die die Entstehung, das Wachstum und die Koaleszenz von Mikroporen bis zur makroskopischen Anrissbildung als Folge der plastischen Verformung und Spannungsmehrachsigkeit beschreiben. Eine Verwendung der iterativ-adaptiven Lösungstechnik für schädigungsmechanische Problemstellungen ist hierbei bisher nur in wenigen Publikationen (siehe z. B. [Gel98]) zu finden. In der verfügbaren Literatur handelt es sich dabei um das übliche Remeshing nach großen Netzverzerrungen ( z.B. bei Massivumformung). Deshalb ist es sehr notwendig, die modernen iterativ-adaptiven Löser für diese wichtigen Problemstellungen weiter zu entwickeln.

Da die beiden oben genannten Schädigungsmodelle im vorigen Antragszeitraum in SPC-PMHP implementiert wurden und die Struktur der Materialgleichungen mit derjenigen der Elasto-Plasto-Mechanik analog ist, konnten die dafür im Teilprojekt entwickelten adaptiven Techniken 2.3.3 - 2.3.5 sinngemäß übernommen und effektiv angewandt werden. Mit dieser Implementierung ist es nun 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. 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]. Vom Standpunkt der Kontinuumsmechanik und Numerik ist es somit notwendig, 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 numerisch stabil zu gestalten. Dafür bieten sich die in 2.3.1 erarbeiteten Algorithmen zur Elementteilung und Kantenverdopplung an. Mit der Realisierung dieser Aufgaben wurde in der Auslaufphase 2004/2005 begonnen.

**Literaturverzeichnis zu 2.3**

- [AO00] M. Ainsworth, J. Oden. A Posteriori Error Estimation in Finite Element Analysis. J. Wiley & Sons, New York, 2000.
- [Ak05] J.E. Akin Finite Element Analysis with Error Estimation. Pre-publication draft, <http://www.owl.net.rice.edu/~mech517/>, 2005.
- [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.
- [BSUGC94] I. Babuška, T. Strouboulis, C.S. Upadhyay, S. Gangaraj, K. Copps. Validation of a posteriori error estimators by numerical approach. *Int. J. Num. Meth. Engng.* 15:1073-1123, 1994.
- [BS01] I. Babuška, T. Strouboulis. The Finite Element Method and its Reliability. The Clarendon Press, Oxford University Press, 2001
- [BB99] T. Belytschko and T. Black. Modelling of damage in metal forming processes. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 45:601–620, 1999.
- [BB94a] T. Belytschko, T.D. Blacker. Enhanced derivative recovery through least square residual penalty. *Appl. Num. Math.* 14:55-68, 1994.
- [BeBo99] G. Bernauer and W. Brocks. Numerical round robin on micro-mechanical models: Conclusions of part A. *Technical report, ESIS TC8 Meeting Trondheim, 1999.*
- [BB94b] T.D. Blacker, T. Belytschko. Superconvergent patch recovery with equilibrium and conjoint interpolant enhancements. *Int. J. Num. Meth. Engng.* 37:517-536, 1994.
- [BZ97b] B. Boroomand, O.C. Zienkiewicz. An improved REP recovery and the effectivity robustness test. *Int. J. Num. Meth. Engng.* 40:3247-3277, 1997.
- [BZ99] B. Boroomand, O.C. Zienkiewicz. Recovery procedures in error estimation and adaptivity, part II: adaptivity in nonlinear problems of elasto-plasticity behaviour. *Comput. Method. Appl. Mech. Engrg.* 176:127-146, 1999.
- [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.
- [BGK04] A. Bucher, U.-J. Görke and R. Kreißig. A material model for finite elasto-plastic deformations considering a substructure. *Int. J. Plast.* 20:619-642, 2004.
- [BGK05] A. Bucher, A. Meyer, U.-J. Görke, R. Kreißig. A contribution to error estimation and mapping algorithms for a hierarchical adaptive FE-strategy in finite elastoplasticity. *Comput Mech* 36:182-195, 2005.
- [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.
- [CF99] C. Carstensen, S. Funken. Averaging technique for FE-a posteriori error control in elasticity. Part I: Conforming FEM. Technical Report 99-14, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel, Berichtsreihe des Mathematischen Seminars Kiel, 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.
- [CA03] C. Carstensen, J. Albery. Averaging techniques for reliable a posteriori FE-error control in elastoplasticity with hardening. *Comput. Method. Appl. Mech. Engrg.* 192:1435-1450, 2003.
- [Car04] C. Carstensen. Some remarks on the history and future of averaging techniques in a posteriori finite element error analysis. *ZAMM - Z. Angew. Math. Mech.* 84:3-21, 2004.
- [Chris99] P.W. Christensen and A. Klarbring. *Newton's method for frictional contact problems*, ECCM, 1999.
- [CRSW99] H. Cramer, M. Rudolph, G. Steinl, W. Wunderlich. A hierarchical adaptive finite element strategy for elastic-plastic problems. *Comput. Struct.* 73:61-72, 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.
- [ERBM98] R.A. Einfeld, D. Roehl, T.N. Bittencourt, L.F. Martha. Mapping of Local Variables Due to Remeshing in Non-linear Plasticity Fracture Problems. In: *Computational Mechanics. New Trends and Applications*, Idelsohn, S., Oñate, Dvorkin, E. (eds), (CIMNE, Barcelona), 1998.
- [FC95] L. Fourment, J.L. Chenot. Error estimators for viscoplastic materials. Application to forming processes. *Int. J. Num. Meth. Engng.* 38:469-490, 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.
- [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.
- [Gel98] J.C. Gelin Modelling of damage in metal forming processes. *Journal of Materials Processing Technology*, 80/81:24–32, 1998.
- [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.

- [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.
- [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.
- [GZH04] H. Gu, Z. Zong, K:C: Hung. A modified superconvergent patch recovery method and its application to large deformation problems. *Finite. Elem. Anal. Des.* 40:665–687, 2004.
- [Gurs77] A.L. Gurson. Continuum theorie of ductile rupture by void nucleation and growth: Part I-Yield criteria and flow rule for porous ductile media *Journal of Materials and Technology, Processing Technology*, 80/81:24–32, 1998.
- [Gwin83] J. Gwinner. A penalty approximation for a unilateral contact problem in nonlinear elasticity. *Math. Meth. Appl. Sci.*, 11/83:447–458, 1983.
- [Hasl83] J. Haslinger. Approximation of the Signorini problem with friction obeying the Coulomb law. *Math. Meth. Appl. Sci.*, 5/83:422–437, 1983.
- [HC74] E. Hinton, J.S. Campbell. Local and global smoothing of discontinuous finite element functions using least squares. *Int. J. Num. Meth. Engng.*, 8:461–480, 1974
- [Hues94] A. Huesmann and G. Kuhn. Behandlung elastoplastischer Kontaktprobleme mit der Randelementmethode. *ZAMM*, 74/94:T254–T256, 1994.
- [JK03] J. Jackewicz and M. Kuna. Non-local regularisation for FE simulation of damage in ductile materials. *Computational Material Science*, 28/03:684–695, 2003.
- [Kacha58] L.M. Kachanov. About Fracture Time under Creep Conditions (in Russisch). *Isvestija AN SSSR, OTN*, 1958, 8, pp. 26–31.
- [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 mehaniki i fiziki deformirujemogo tverdogo tela*, K. F. Černycha (Ed.), Universität St. Petersburg, 2000.
- [Kara89] G. Karami. *Boundary Element Methods for Two Dimensional Contact Problems*. Springer, New York/Berlin/Heidelberg, 1989.
- [Kiku88] N. Kikuchi and J.T. Oden. *Contact Problems in Elasticity: A Study of Variational Inequalities and Finite Element Methods*. SIAM, Philadelphia, 1988.
- [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.

- [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.
- [KKG98] S. Kretzschmar, U.-J. Görke and R. Kreißig. Identifikation von Materialparametern durch Auswertung inhomogener Verschiebungsfelder. *ZAMM*, 78/98:S559–S560, 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.
- [KN87] M. Křížek, P. Neittaanmäki. On Superconvergence Techniques. *Acta Appl. Math.* 9:175-198, 1987.
- [LPL97] T. Lee, H.C. Park, S.W. Lee. A superconvergent stress recovery technique with equilibrium constraint. *Int. J. Num. Meth. Engng.* 40:1139-1160, 1997.
- [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.
- [MRS04] A. Meyer, F. Rabold and M. Scherzer. Efficient Finite Element Simulation of Crack Propagation. Preprint SFB393/04–01, TU Chemnitz, 2004.
- [MM98] D. Michael and M. Meisel. Some remarks to large deformation elasto-plasticity (continuum formulation). TU Chemnitz-Zwickau, Preprint SFB393/98–28, 1998.
- [MS01] D. Michael and M. Springmann. Zur numerischen Simulation des Versagens duktiler metallischer Werkstoffe. Preprint SFB393/09–01, 2001.
- [Mich01] D. Michael. Kontinuumstheoretische Grundlagen und algorithmische Behandlung von ausgewählten Problemen der assoziierten Fließtheorie. TU Chemnitz, Preprint SFB393/01–06, 2001.
- [Neca80] J. Necăs, J. Jarušek and J. Haslinger. *On the solution of the variational inequality to the Signorini problem with small friction*. Bolletino U.M.I., 17, 1980.
- [Need100] A. Needleman. Computational mechanics at the mesoscale. *Acta Materialia*, 48(1):105–124, 2000.
- [OB71] J.T. Oden, H.J. Brauchli. On the calculation of consistent stress distributions in finite element approximations. *Int. J. Num. Meth. Engng.*, 3:317-325, 1971.
- [OQ91] M. Ortiz, J.J. Quigley. Adaptive mesh refinement in strain localization problems. *Comput. Method Appl. Mech. Engrg.* 90:781-804, 1991.
- [PHDO96] D. Perić, D. Hochard, M. Dutko, D.R.J. Owen. Transfer operators for evolving meshes in small strain elasto-plasticity. *Comput Method Appl Mech Engrg* 137:331-344, 1996.

- [Rabo59] I.N. Rabotnov. Mechanism of Longtime Fracture (in Russisch). *Questions of Strength of Materials and Structures (in Russisch)*, Isdatelstvo AN SSSR, Moskva, 1959A.
- [Reu03] F. Reusch. *Entwicklung und Anwendung eines nicht-lokalen Materialmodells zur Simulation duktiler Schädigung in metallischen Werkstoffen*. Dissertation, Universität Dortmund, 2003.
- [Rouss01] G. Rousselier. Dissipation in porous metal plasticity and ductile fracture. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 49(8):1727–1746, 2001.
- [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.
- [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.
- [Thoma90] P. Thomason. *Ductile Fracture of Metals*. Pergamon, Oxford, 1990.
- [UR75] V. Ulbricht, H. Röhle. Berechnung von Rotationsschalen bei nichtlinearem Deformationsverhalten, PhD thesis, TU Dresden, 1975.
- [Ver95] R. Verfürth. A review of a posteriori error estimation and adaptive mesh-refinement techniques. J. Wiley & Sons, Chichester, 1995.
- [Wah95] L. Wahlbin. Superconvergence in Galerkin Finite Element Methods. Lecture Notes in Mathematics. Springer-Verlag, Berlin, 1995.
- [WA93] N.-E. Wiberg, F. Abdulwahab. Patch recovery based on superconvergent derivatives and equilibrium. *Int. J. Num. Meth. Engng.*, 36:2703-2724, 1993.
- [WAZ94] N.-E. Wiberg, F. Abdulwahab, S. Ziukas. Enhanced superconvergent patch recovery incorporating equilibrium and boundary conditions. *Int. J. Num. Meth. Engng.*, 37:3417-3440, 1993.
- [WL94] N.-E. Wiberg, X.D. Li. Superconvergent patch recovery based on finite element solution and a posteriori  $l_2$  norm error estimate. *Comm. Appl. Num. Meth.* 10:312-320, 1994.
- [WZ98] N.-E. Wiberg, S. Ziukas. Zienkiewicz-Zhu Error Estimator – A Future Vision. In: Computational Mechanics. New Trends and Applications, Idelsohn, S., Oñate, Dvorkin, E. (eds), (CIMNE, Barcelona), 1998.
- [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.
- [ZZ87] O.C. Zienkiewicz, J.Z. Zhu. A simple error estimator and adaptive procedure for practical engineering analysis. *Int. J. Num. Meth. Engng.*, 24:337-357, 1987.
- [ZZ92a] O.C. Zienkiewicz, J.Z. Zhu. The superconvergent patch recovery and a posteriori error estimates. Part 1: The recovery technique. *Int. J. Num. Meth. Engng.* 33:1331-1364, 1992.
- [ZZ92b] O.C. Zienkiewicz, J.Z. Zhu. The superconvergent patch recovery and a posteriori error estimates. Part 2: Error estimates and adaptivity. *Int. J. Num. Meth. Engng.* 33:1365-1382, 1992.
- [ZZ92c] O.C. Zienkiewicz, J.Z. Zhu. The superconvergent patch recovery and adaptive finite element refinement. *Comput. Method. Appl. Mech. Engng.* 101:207-224, 1992.
- [ZZW93] O.C. Zienkiewicz, J.Z. Zhu, J. Wu. Superconvergent patch recovery techniques – some further tests. *Comm. App. Num. Meth.* 9:251-258, 1993.

## 2.4 Ergebnisse

### 2.4.1 Verbesserung des iterativen Löses für Rissausbreitungssimulationen

Im vergangenen Bearbeitungszeitraum wurde ein iterativer Löser entwickelt, der die hierarchische Datenstruktur bei Rissfortschritt nicht zerstört. Nach der bruchmechanisch bestimmten Information über ein notwendiges Risswachstum mit vorgegebenem Inkrement und vorgegebener Richtung wird das vorhandene Netz mit einem minimalen Aufwand geändert, so dass iterativ-hierarchische Lösungstechnik nur geringfügig “behindert” wird. Eine “klassische” Dopplung von Kanten und Knoten entlang der neuen Rissufer wird nicht vorgenommen, damit ein effizienter Vorkonditionierer die Kantenbaum-Informationen verwerten kann. Um dies zu realisieren, wurde mit Hilfe von Projektionstechniken ein einfacher Preconditioner erstellt, der auf einer Mittelung bezüglich zwei verschiedener Kantensysteme des Netzes basiert [MRS04, MRS05]. Der einzige Nachteil dieses Vorkonditionierers besteht in der fehlenden Spektraläquivalenz, womit noch relativ hohe Iterationszahlen erzeugt wurden. Deshalb wurde ein neuer effektiverer Vorkonditionierer entwickelt. Die entscheidenden Charakteristika des dabei entstandenen Löses werden im folgenden Abschnitt erläutert.

Die wesentliche Verbesserung resultiert aus folgender Beobachtung. Mit Einführung von  $d$  “Doppelknoten” entlang des gewachsenen Risses benutzt man also folgende  $(n + d + d)$  Finite-Elemente-Ansatzfunktionen

$$\Phi = (\varphi_1, \dots, \varphi_n, \varphi_{n+1}^-, \dots, \varphi_{n+d}^-, \varphi_{n+1}^+, \dots, \varphi_{n+d}^+),$$

die die aktuelle Steifigkeitsmatrix erzeugen, für die der effiziente Löser gesucht ist. Hierbei sind die ersten  $n$  Funktionen klassische FEM-Hütchenfunktionen. Die restlichen  $d$  “halbe” Hütchen mit Träger auf einer Seite des Risses und nochmal  $d$  solche Funktionen



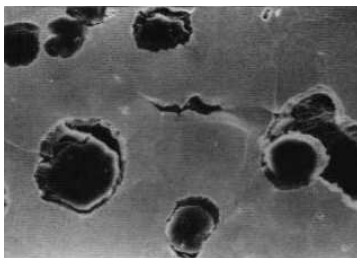


Abbildung 2.3: Einschlüsse in GGG40

mit Träger auf der anderen Seite. Eine einfache Basistransformation (nämlich Addition / Subtraktion dieser halben Hütchenfunktionen zu üblichen und zu Spungfunktionen über den Riss hinweg) führt zu:

$$\tilde{\Phi} = (\varphi_1, \dots, \varphi_n, \varphi_{n+1}, \dots, \varphi_{n+d}, \tilde{\varphi}_{n+1}, \dots, \tilde{\varphi}_{n+d}).$$

Die hierzu gehörige neue Steifigkeitsmatrix  $\tilde{K}$  hat eine Blockstruktur, die gut zur DD-Vorkonditionierung genutzt werden kann:

$$\tilde{K} = \begin{pmatrix} A & B \\ B^T & T \end{pmatrix}$$

Der Block  $A$  (aus den ersten  $n + d$  Ansatzfunktionen entstanden) ist die Steifigkeitsmatrix zum gewöhnlichen Deformationsproblem ohne jeden Riss, für die die existierenden Kanteninformationen den effizienten hierarchischen Vorkonditionierer bereitstellen. Der Restblock  $T$  ist bei 1-dimensionaler Anordnung der Rissknoten gerade eine 5-diagonale Matrix, also effizient mit direkten Lösern zu behandeln. Die Zusammenhänge sind im einzelnen im Preprint [Mey05] geschildert, der in veränderter Form auch Eingang in einen Springer-Sammelband zu Ergebnissen des SFB393 finden wird.

## 2.4.2 Anwendung adaptiver Algorithmen zur Simulation der Rissausbreitung

Duktilen Materialversagen vor Risspitzen in Metallen ist oft verbunden mit Voidwachstums- und Voidvereinigungsprozessen, die schließlich zu einem makroskopischen Rissfortschritt führen können. Innerhalb der oben erwähnten Schädigungsmodelle werden diese Effekte auf dem Kontinuumsniveau mittels erweiterter Theorien der Plastizität beschrieben. Dabei können natürlich wirkliche geometrische Voids nicht modelliert werden, sondern sie finden im Mittel Berücksichtigung anhand kontinuierlicher Materialgleichungen. Der Einfluss von Voids und anderer Inhomogenitäten auf die Verhältnisse an Risspitzen ist deshalb anhand dieser Theorien auch nur als gemittelter Einfluss interpretierbar. Die wirkliche gegenseitige Beeinflussung von Risspitzen und Voids, die auf dem Meso-Niveau von Metallen (siehe Bild 2.3 für GGG40) mit Risspitzen wechselwirken, ist nur durch eine genaue geometrische Modellierung möglich. Eine Variante, dieses Verhalten zu charakterisieren, soll im folgenden Abschnitt anhand einfacher linear-elastischer Annahmen dargestellt werden. Die Berechnungen wurden im Rahmen einer Studienarbeit [Schwa05] durchgeführt.

### Modellprobe zur Abschätzung des Einflusses von Einschlüssen/Voids (Hohlräume) auf das Risswachstum

Zur Simulation des Risswachstums wurde ein Grundmodell erstellt, welches durch verschiedene Parameter beschrieben wird. Allen verwendeten Modellen gleich sind die Außenabmessungen, die horizontal zentral gelegene Störung konstanten Durchmessers sowie die äußere Belastung. Sie wird durch eine Verschiebung  $u$  der Außenkanten, wie in Abbildung 2.4 dargestellt, aufgebracht, wobei deren Größe keinen Einfluss auf den Verlauf der Rissfront hat. Des Weiteren sind die Materialdaten des ferritischen Matrixgefüges ( $E = 2,1 \cdot 10^5 \frac{N}{mm^2}$  und  $\nu = 0,3$ ) für jede Berechnung dieselben. Zur Anwendung kamen die üblichen quadratischen Dreieckselemente. Um die Auswirkungen auf den Rissfortschritt zu untersuchen, wurde der Materialeinschluss einerseits im Abstand zum Ligament, andererseits in seiner Art der Modellierung variiert. Zum Einsatz kamen dabei zwei Varianten:

- a) Der Einschluss wurde als Hohlraum modelliert, also als spannungsfreie Oberfläche und
- b) in Form eines anderen Materials (z.B. Graphitteilchen), welches fest mit der Matrix verbunden ist.

Während der Hohlraum im ersten Fall einen Einschluss wiedergibt, der keine Verbindung zum umliegenden Material hat, konnte durch Wahl eines extrem hohen Elastizitätsmoduls für den Einschluss im zweiten Fall eine fast starre Oberfläche simuliert werden.

Der Abstand  $b$  des Einschlusses zum Ligament wurde in Schritten von  $0,5 LE^4$  von anfangs  $5 LE$  solange verringert, bis der Riss den Einschluss berührte.

Zum Vergleich wurden einige Modelle zusätzlich mit einer Rissverlängerung von  $\Delta a = 2 LE$  gerechnet. Standardmäßig vorgesehen war ein Wert von  $\Delta a = 0,5 LE$ . Dieser ergab sich aus mehreren Versuchen mit unterschiedlichen Rissverlängerungslängen und stellt ein gutes Verhältnis zwischen Rechenzeit und Genauigkeit dar. Untersuchungen bei kleineren Rissfortschritten warfen dagegen bei gleichem Rissverlauf große Schwierigkeiten bei der Stabilität der Berechnungen auf<sup>5</sup>. Größere Schrittweiten hatten zur Folge, dass der Rissverlauf, insbesondere in der Nähe des Einschlusses, eine sehr „kantige“ Form mit verhältnismäßig starken Winkeländerungen annahm. Die Simulation ist hier zu träge, um die starken Spannungs- und Dehnungsgradienten korrekt zu erfassen. Im Folgenden sollen die berechneten Rissverläufe der verschiedenen Modelle miteinander verglichen werden. Die Ergebnisse geben Aufschluss über den Einfluss der Einschlüsse auf den Risspfad.

#### Ergebnisse der Berechnungen mit Hohlraum

Zuerst werden die Risstrajektorien der Modelle mit Hohlraum angeführt. Die resultierenden Kurven repräsentieren den Verlauf der Rissfront während des Wachstums. Die

<sup>4</sup>LE=1mm

<sup>5</sup> Bei  $\Delta a = 0,25 LE$  brach die Simulation nach einigen Schritten ab. Die sich ergebenden Risspitzenkoordinaten stimmten mit denen der Standardrechnung unter Berücksichtigung numerischer Ungenauigkeiten überein.

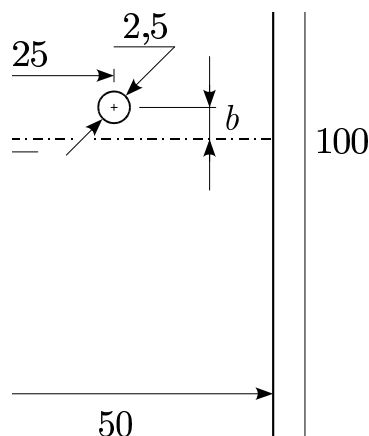


Abbildung 2.4: Grundmodell

Störungen sind maßstabsgetreu in den Diagrammen eingezeichnet. Ein Pfeil markiert die vertikale Lage des Einschlusses.

Wie in den Abbildungen 2.5 zu sehen ist, bewirkt ein Hohlraum in der Nähe der Risspitze, dass diese in Richtung der Störung wandert. Je kleiner der Abstand des Einschlusses zum Ligament des Ausgangsrisses (durch eine horizontale Linie gekennzeichnet) wird, desto stärker ist die Ablenkung des Risses. Interessant ist, dass sich der Riss hinter dem Lochmittelpunkt, d.h. ab einem Winkel von  $\varphi \approx 120^\circ$  nach unten krümmt. Wächst der Riss weiter, verliert die Störung an Einfluss auf dessen Richtung, wodurch ein zum Ligament paralleler Verlauf zustande kommt. Liegt der Hohlraum zu nahe am Riss, dringt er in diesen ein. Der kritische Abstand beträgt bei den vorliegenden Berechnungen  $4,0 \text{ LE} < b < 4,5 \text{ LE}$ . Wegen der maßstäblichen Darstellung der Rissverläufe sind kleinere Details nur schwer zu erkennen. Es lässt sich jedoch anhand der Rissspitzenkoordinaten nachweisen, dass anfangs eine Auslenkung der Rissfront in die vom Hohlraum abgewandte Richtung erfolgt. Für kleinere Abstände  $b$  verstärkt sich diese Erscheinung, so dass sie im Diagramm zu  $b = 2,5 \text{ LE}$  doch recht gut zu erkennen ist. Es wurden zusätzliche Berechnungen mit verschiedenen Randbedingungen durchgeführt. Dabei kam das Grundmodell ( $b = 4,5 \text{ LE}$ ) mit den folgenden Modifikationen zum Einsatz:

- unverändertes Referenzmodell
- nach rechts verbreitertes Modell
- festgehaltene rechte Kante
- festgehaltene rechte und linke Kante.

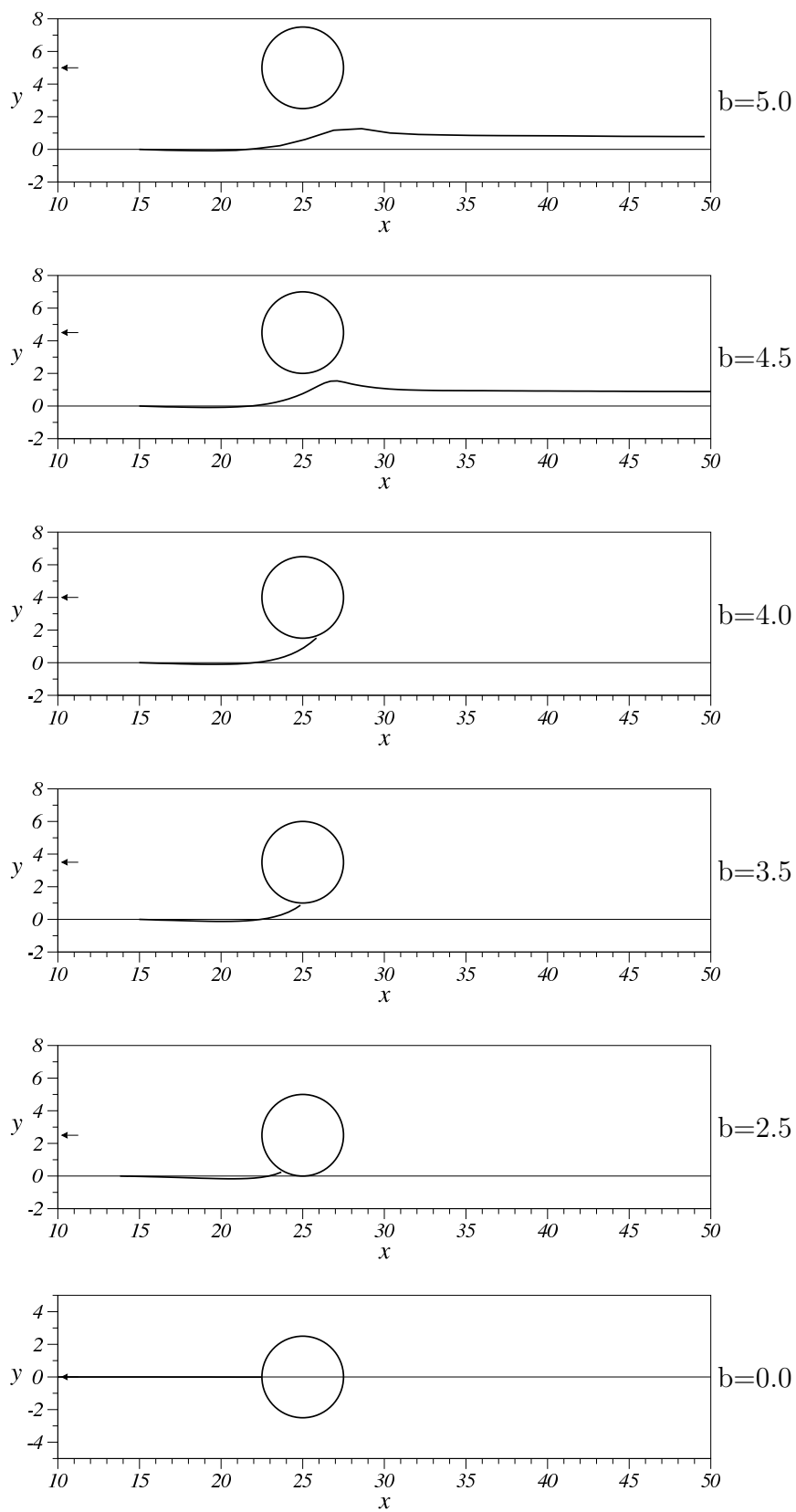


Abbildung 2.5: Risstrajektorien der Modelle mit Hohlraum

Die berechneten Rissverläufe unterscheiden sich bisweilen sehr stark. Die Abbildung 2.6 zeigt den Vergleich verschiedener Ristrasjektorien, die auf die verschiedenen Randbedingungen zurückzuführen sind.

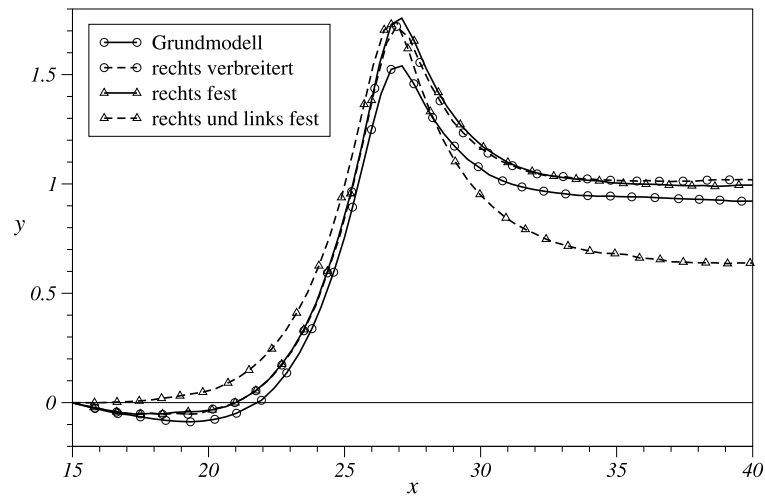


Abbildung 2.6: Vergleich der Ristrasjektorien bei unterschiedlichen Randbedingungen

Es fällt besonders auf, dass kaum ein Unterschied zwischen dem Modell mit fester rechter Kante und der nach rechts verbreiterten (Gesamtbreite des Modells auf 100 LE verdoppelt) Variante besteht. Weitere Untersuchungen sind notwendig, um die Zusammenhänge zwischen Risswachstum und Hohlraumeinfluss aufzuklären.

### Ergebnisse der Berechnungen mit Materialeinschluss

Die durchgeführten Berechnungen bestätigen den intuitiv erwarteten Fakt, dass Risse von starren Einschlüssen eher abgestoßen werden als dass sie, wie z.B. beim Hohlraum, versuchen, die Oberfläche des Einschlusses zu durchdringen.

In den Simulationen wurde der Elastizitätsmodul des Einschlussmaterials auf den extrem hohen Wert von  $E = 1 \cdot 10^{10} \frac{N}{mm^2}$  gesetzt.  $\nu$  blieb unverändert bei 0,3. Mit einer festen Bindung zwischen den beiden Körpern war gewährleistet, dass sich der Einschluss wie ein starres Loch verhält. Die folgenden Diagramme (Abbildungen ??, 2.7) zeigen, wie stark sich der Riss um die Störung krümmt. Ein Eindringen des Risses in den Einschluss konnte nur für  $b < 1,5LE$  vorausgesagt werden. Die genaue Bestimmung des kritischen  $b$ -Wertes ist aus verständlichen Gründen mit der bisher entwickelten Software noch nicht realisierbar.

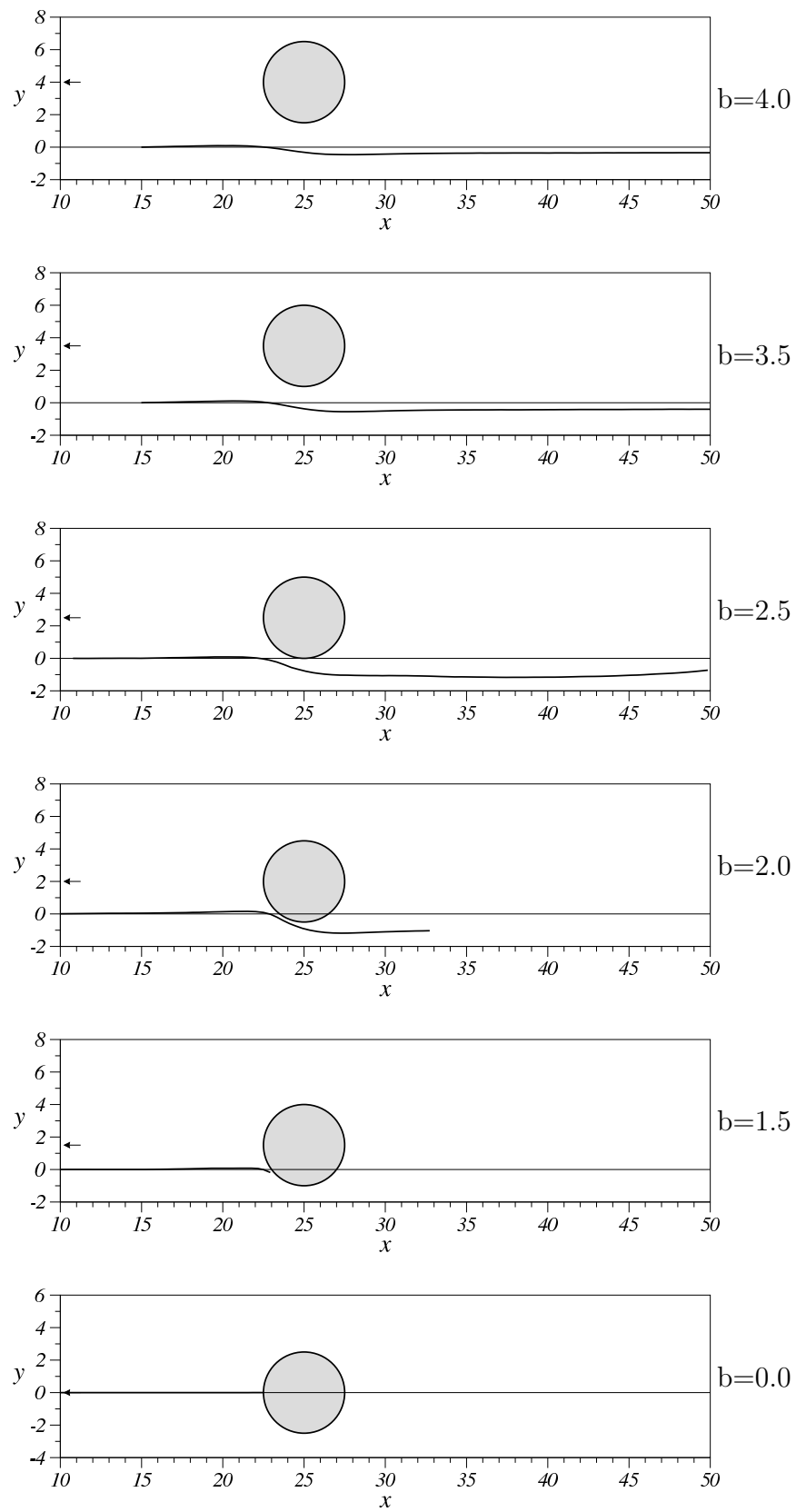


Abbildung 2.7: Risstrajektorien der Modelle mit hartem Materialeinschluss

### 2.4.3 Vergleich unterschiedlicher Algorithmen zur Übertragung von Zustandsgrößen bei adaptiver Netzverfeinerung

In diesem Abschnitt werden am Beispiel einer Scheibe mit Loch einige numerische Ergebnisse aus dem Vergleich der unterschiedlichen Übertragungsstrategien vorgestellt. Hierbei wird ein ebener Verzerrungszustand angenommen. Ausgehend von zwei unterschiedlichen Grobnetzen werden Berechnungen mit vollständig integrierten 8-Knoten-Elementen der Serendipity-Klasse durchgeführt. Die verwendeten Netze wie auch die aufgetragenen Randbedingungen sind in Bild 2.8 dargestellt.

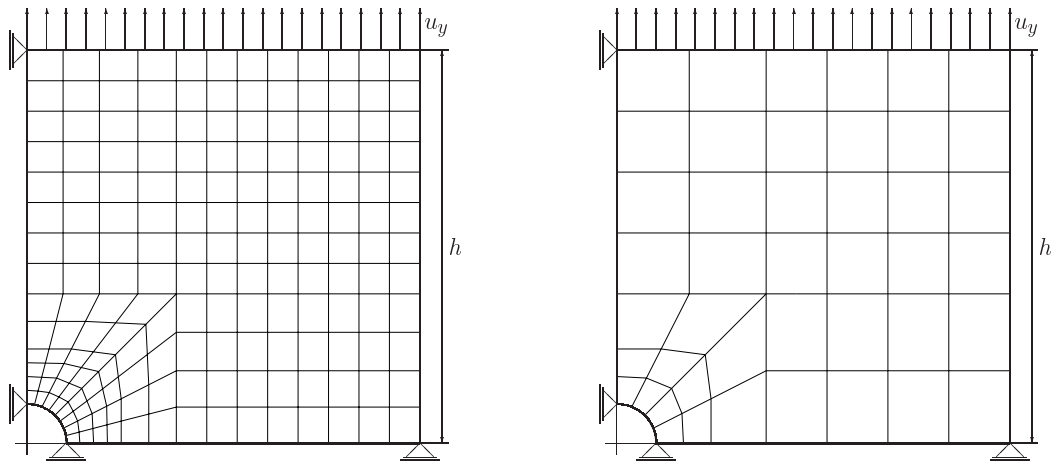


Abbildung 2.8: Scheibe mit Loch (ein Viertel der Scheibe). Randbedingungen. Grobnetze mit 44 und 176 Elementen. Kantenlänge  $h = 100$  mm, Radius der Bohrung 10 mm.

Bei Untersuchungen mit dem Fehlerschätzer  $\eta_T$  (vgl. (2.15)) wurde als äußere Belastung eine gleichmäßige Verschiebung des oberen Randes der Scheibe um  $0,5h$  aufgebracht, welche auf 1000 Lastschritte aufgeteilt wurde. Das entspricht Inkrementen von jeweils 0.05 Prozent je Lastschritt. Für Studien mit dem Fehlerindikator  $\eta_{KT}$  wurde die Scheibe nur um 20 Prozent ihrer Länge gedehnt, was jeweils einzelnen Lastschritten von 0.02 Prozent entspricht. Hier sei noch darauf hingewiesen, dass die automatische Lastschrittwertensteuerung zu kleineren Schrittweiten führen kann.

Das elastische Materialverhalten wird durch einen hyperelastischen Neo-Hooke-Ansatz beschrieben, welcher Kompressibilität berücksichtigt [Buch01b]. Hierbei lautet der Ansatz für den elastischen Anteil  $\psi_e$  der freien Helmholtz-Energiedichte  $\psi$ :

$$\psi_e = c_{10}(I - \ln III - 3) + D_2 (\ln III)^2 \quad (2.16)$$

Die Größen  $I$  und  $III$  bezeichnen die Invarianten des elastischen Verzerrungstensors. Unter Verwendung des Elastizitätsmoduls  $E = 2.1 \cdot 10^5$  MPa und der Querkontraktionszahl  $\nu = 0.3$  werden die Materialparameter  $c_{10}$  und  $D_2$  durch

$$c_{10} \approx \frac{E}{4(1 + \nu)}, \quad D_2 \approx \frac{c_{10}}{2} \frac{\nu}{1 - 2\nu} \quad (2.17)$$

angenähert.

Die Fließbedingung

$$F = (\dot{\mathbf{T}} - \dot{\boldsymbol{\alpha}}) \mathbf{C} \cdot (\dot{\mathbf{T}} - \dot{\boldsymbol{\alpha}}) \mathbf{C} - \frac{2}{3} T_F^2 = 0 \quad (2.18)$$

mit

$$\dot{\mathbf{T}} = \mathbf{T} - \frac{1}{3} (\mathbf{T} \cdot \mathbf{C}) \mathbf{C}^{-1}, \quad \dot{\boldsymbol{\alpha}} \text{ analog.} \quad (2.19)$$

entspricht bei kleinen Verzerrungen und  $\dot{\boldsymbol{\alpha}} = \mathbf{0}$  dem von-Mises Ansatz. Für den Rückspannungstensor  $\boldsymbol{\alpha}$  wurde eine Evolutionsgleichung vom Prager-Typ angesetzt

$$\dot{\boldsymbol{\alpha}} = c_1 \lambda \mathbf{C} (\dot{\mathbf{T}} - \dot{\boldsymbol{\alpha}}) \mathbf{C} \quad (2.20)$$

während die Entwicklungsgleichung der Fließspannung auf einem Ansatz von Ulbricht und Röhle [UR75] basiert:

$$T_F = T_{F0} + a [(E_v^p + \beta)^n + \beta^n] \quad (2.21)$$

In den vorangegangenen Beziehungen bezeichnen  $\mathbf{C}$  den rechten Cauchy-Green Tensor,  $\mathbf{T}$  den zweiten Piola-Kirchhoffschen Spannungstensor und  $E_v^p$  die plastische Bogenlänge.

Die in den Gleichungen (2.20) und (2.21) enthaltenen Materialparameter werden mit  $T_{F0} = 200$  MPa (Anfangsfließspannung),  $a = 1000$  MPa,  $n = 0.3$ ,  $\beta = 10^{-8}$  und  $c_1 = 500$  MPa angenommen. Mehr Details zum verwendeten Materialgesetz können in [Buch01b, BGK04, BGK05] nachgelesen werden.

Die folgenden Berechnungen wurden mit den im Abschnitt 2.3.3 vorgestellten Übertragungsalgorithmen durchgeführt. Dabei wurden die Untersuchungen bezüglich der erforderlichen Elementanzahl als auch der notwendigen Iterationen ausgewertet, welche als Indikatoren für den numerischen Aufwand sowie das Konvergenzverhalten der entsprechenden adaptiven Näherungslösung angesehen werden können.

Im ersten Lastschritt wird ein Vergleichsfehler bestimmt und nachfolgend das Netz so angepasst, dass der aktuelle Fehler höchstens 0.1 Prozent des Ausgangsfehlers beträgt. Für die Berechnungen mit den unterschiedlichen Übertragungsalgorithmen wurde aus Vergleichsgründen jeweils derselbe Referenzfehler verwendet.

Wie bereits erwähnt, besteht der Fehlerschätzer aus zwei Anteilen – der erste stellt das Elementresiduum dar, der zweite den Kantensprung. Das Elementresiduum wird bei allen betrachteten Übertragungsstrategien in der gleichen Art und Weise berechnet. Für den Kantensprung werden allerdings infolge der leicht unterschiedlichen Art der Berechnung der Variablen an den Seitenmittenknoten voneinander abweichende Werte erhalten. Beim patchorientierten Variablentransfer entfällt der Kantensprunganteil sogar vollständig, da hier geglättete Knotenwerte vorliegen.

In Abbildung 2.9 wird die Entwicklung der Elementanzahl in Abhängigkeit vom Übertragungsalgorithmus dargestellt. Es kann beobachtet werden, dass die Methode der zusätzlichen Lösung des Anfangswertproblems in den Elementknoten die kleinste Elementanzahl



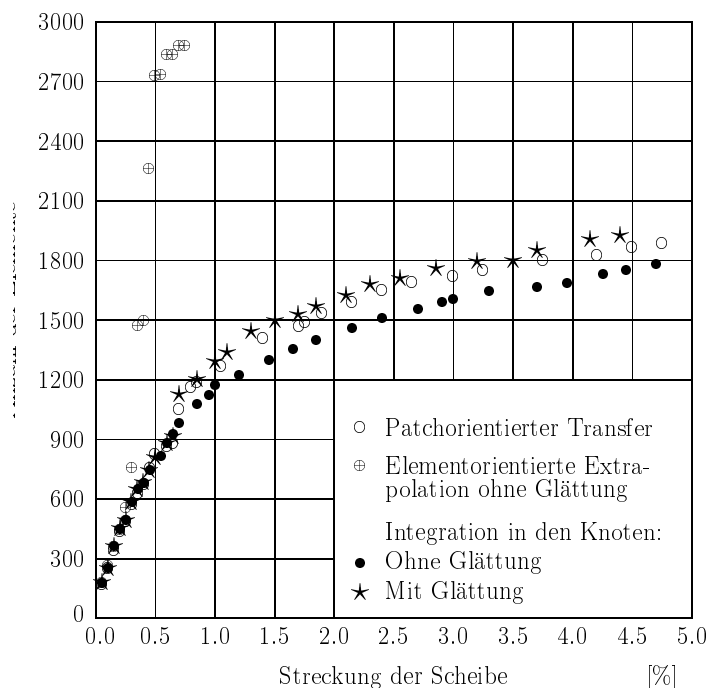


Abbildung 2.9: Scheibe mit Loch. Entwicklung der Elementanzahl in Abhängigkeit vom gewählten Übertragungsalgorithmus bei Verwendung des Fehlerschätzers  $\eta_T$ . Grobgitter mit 44 Elementen. Der elementorientierte Übertragungsalgorithmus wurde bei 1.2 % Dehnung abgebrochen.

erzeugt. Das bedeutet, dass mit dieser Vorgehensweise, verglichen mit anderen Strategien, geringere Fehlerwerte schon bei kleinerer Elementanzahl vorliegen.

Die patchorientierte Methode führt auf größere Elementzahlen, die jedoch noch kleiner sind, als wenn geglättete Knotenwerte im Zusammenhang mit der zusätzlichen Lösung des Anfangswertproblems verwendet werden. Hieraus kann geschlossen werden, dass ein anschließendes Glätten der Knotenwerte, die durch die zusätzliche Lösung des Anfangswertproblems in den Elementknoten erzeugt wurden, die numerische Effizienz beeinträchtigt.

Es kann angemerkt werden, dass die elementorientierte Übertragungsmethode nicht für das diskutierte Beispiel geeignet erscheint, da hier größere Konvergenzprobleme auftreten. Bei einer Dehnung von 1.2 % wurde die Berechnung abgebrochen, weil eine erhebliche Zunahme der Elementanzahl vorlag und damit der numerische Aufwand beträchtlich anstieg. Offensichtlich sind die mit der Extrapolationsmethode eingebrachten Fehler so bedeutend, dass die Übertragung solch fehlerbehafteter Größen das Konvergenzverhalten in sehr ungünstiger Weise beeinflusst.

Die reale Lastschrittanzahl in Abhängigkeit vom verwendeten Übertragungsalgorithmus ist in der Abbildung 2.10 dargestellt. Sie unterscheidet sich von der vom Nutzer vorgegebenen durch die automatische Lastschrittkontrolle des FE-Programms SPC-PM2AdN1. In diesem Zusammenhang können ähnliche Schlussfolgerungen für das Konvergenzverhalten wie für die numerische Effizienz gezogen werden: Die zusätzliche Lösung des Anfangswertproblems in den Knoten ohne anschließende Glättung der Knotenwerte führt

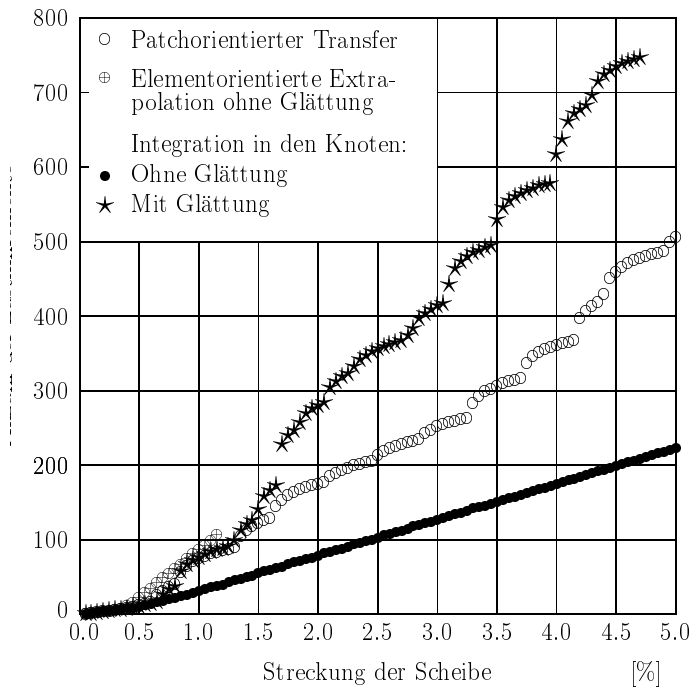


Abbildung 2.10: Scheibe mit Loch. Entwicklung der realen Lastschrittanzahl infolge automatischer Lastschrittweitensteuerung bezüglich des verwendeten Übertragungsalgorithmus bei Verwendung des Fehlerschätzers  $\eta_T$ . Vordefinierte Lastschrittanzahl: 100. Die Element-orientierte Übertragungsmethode der Extrapolation wurde bei 1.2 % Dehnung abgebrochen.

auf die kleinste Lastschrittanzahl. Alle anderen Methoden erfordern mehr Inkremente und weisen damit ein schlechteres Konvergenzverhalten auf.

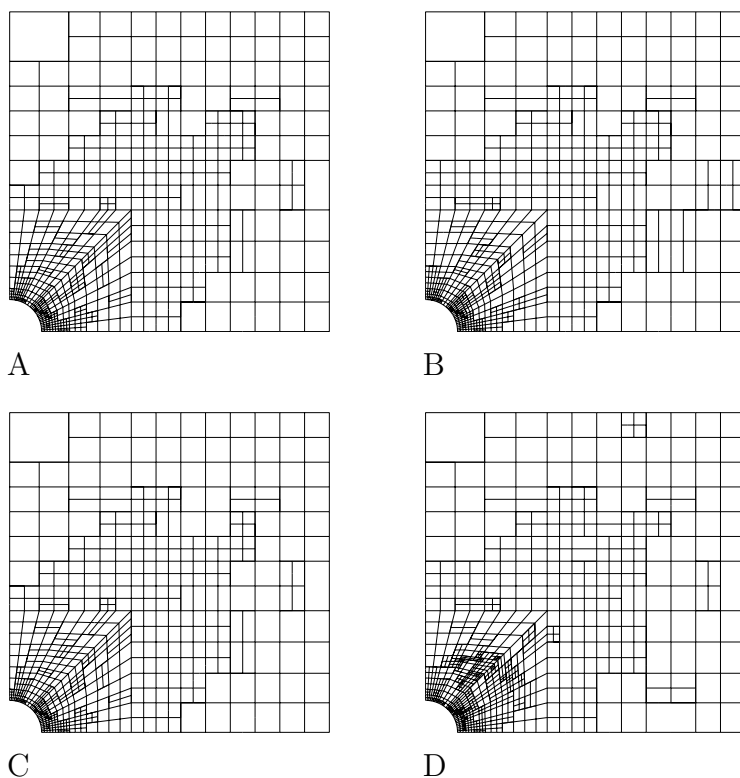


Abbildung 2.11: Scheibe mit Loch. Entwicklung des Netzes bei Nutzung unterschiedlicher Übertragungsstrategien:

- A) Zusätzliche Lösung des Anfangswertproblems in den Knoten.
- B) Wie A mit anschließender Glättung.
- C) Patchorientierter Übertragungsalgorithmus.
- D) Elementorientierte Extrapolation.

Werden für einen ausgewählten Lastschritt die angepassten Netze verglichen, welche unter Verwendung unterschiedlicher Übertragungsstrategien entstanden, kann festgestellt werden, dass diese eine ähnliche Topologie aufweisen. Eine Ausnahme bildet hierbei nur die Vernetzung, die bei Verwendung des elementorientierten Extrapolationsverfahrens erhalten wurde. Hier treten auch ausgeprägte Verfeinerungen in vom Loch weiter entfernten Zonen der Scheibe auf, welche mit anderen Übertragungstrategien nicht beobachtet werden konnten.

Alle Netze weisen im Allgemeinen hohe Verfeinerungsdichten in Nähe des Loches auf, genau an den Orten, wo sich auch große Spannungsgradienten befinden. Da sich der Fehlerschätzer bezüglich der Erfüllung des Gleichgewichts besonders sensibel gegenüber großen Spannungsgradienten erweist, wurden Netzverfeinerungen in diesen Zonen erwartet.

Ein weiterer numerischer Test wurde mit dem Fehlerindikator  $\eta_{KT}$  bezüglich der Erfüllung der Fließbedingung durchgeführt. Die Ergebnisse bestätigen die Einflüsse der unterschiedlichen Übertragungsalgorithmen auf das numerische Konvergenzverhalten und die Effektivität adaptiver FE-Algorithmien, die bereits diskutiert wurden. Wie aus Abbildung 2.12 ersichtlich, erweist sich auch in diesem Fall die Methode der zusätzlichen

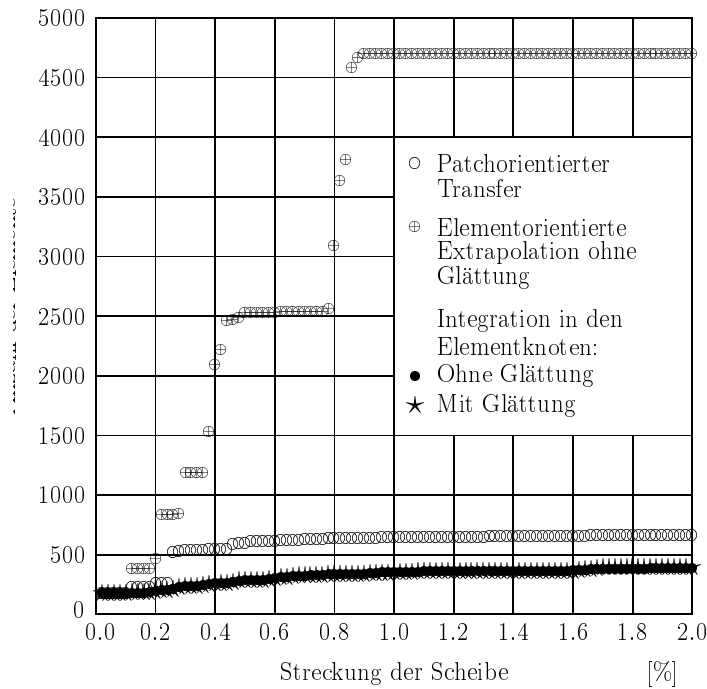


Abbildung 2.12: Scheibe mit Loch. Entwicklung der Elementanzahl in Abhängigkeit vom verwendeten Übertragungsalgorithmus bei Verwendung des Fehlerschätzers  $\eta_{KT}$ . Grobnetz mit 176 Elementen

Lösung des Anfangswertproblems in den Knoten als effektivster Algorithmus, führt er doch auf die kleinste Anzahl von Elementverfeinerungen. Auch hier erscheint die elementorientierte Extrapolationsmethode aufgrund einer großen Anzahl von Verfeinerungen für eine effektive Bearbeitung als weniger geeignet.

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

Die meisten Metalle versagen bei Raumtemperatur duktil. Der Bruchprozess wird begleitet von extensiven plastischen Deformationen gekoppelt mit Energiedissipation. Dieses duktile Verhalten findet man in vielen Ingenieur Anwendungen.

Mikroskopisch bedeutet duktiler Versagen Entstehen, Wachstum und Vereinigung von Voids. Das dabei auftretende Risswachstum erfolgt durch ein kontinuierliches Einfließen der Voids in einen makroskopischen Hauptriss.

Makroskopisch hat man drei wesentliche Faktoren zu berücksichtigen: Plastische Deformationen, hydrostatische Spannungen und Lokalisierungsprozesse, die als direktes Vorstadium des Risswachstums gelten.

Die Voidwachstums- und Vereinigungsprozesse finden in der sogenannten Prozesszone vor der Risspitze statt. Sie müssen auf der Ebene des Kontinuums anhand erweiterter Materialannahmen, die den Damage-Prozess mit einschließen, modelliert und in die numerische Lösung der Randwertaufgabe mit einbezogen werden. Die stabile Lösung der Randwertaufgaben erfordert einerseits die Kenntnis der makroskopischen Materialpara-

meter, die in der Prozesszone für das Versagen bis zum Bruch verantwortlich sind. Andererseits muss die Formulierung der Randwertaufgabe so gestaltet sein, dass alle zu berechnenden Werte stetig abhängig sind von den Ausgangsparametern (“well-posedness”), damit die Modellierung bis zum Versagen stabil erfolgen kann. Letztlich müssen die einzusetzenden Materialparameter vorher in inversen Formulierungen ermittelt werden, ansonsten ist überhaupt keine Beschreibung des Bruchprozesses möglich. Voraussetzung für die Lösung der inversen Aufgaben ist die Bedingung der “well-posedness” für die dabei in der Optimierungsprozedur mehrfach zu lösenden Randwertaufgaben. Die inverse Materialparameterbestimmung im Hinblick auf diese strengen Erfordernisse für das Verhalten in der Bruchprozesszone wurde erstmals im Rahmen des DFG-Projektes [KuSche02] und der damit entstandenen Promotion [Spring05] realisiert. Innerhalb des vorliegenden Projektes lag und liegt der Schwerpunkt auf der Modellierung des Rissfortschrittes in Zusammenhang mit den adaptiv-iterativen Lösern. Die in [Spring05] gesammelten Erfahrungen in Zusammenhang mit den Gurson-Rousselier-Modellen und mit der Bestimmung der Lokalisierungsbedingungen wurden hierbei entsprechend angewandt. Die notwendigen Materialparameter mussten jedoch als gegeben vorausgesetzt werden oder wurden [Spring05] entnommen.

Zusammenfassend sei somit gesagt, dass die Modellierung von duktilem Bruchversagen die Realisierung und Lösung von drei entscheidenden Fragestellungen erfordert:

1. Die Effiziente Beschreibung des Materialverhaltens einschließlich der Material-Degradation. Die Eigenschaften auf der Mikroebene müssen durch Homogenisierung Berücksichtigung finden und dabei gleichzeitig stabile Materialmodelle, die zu gut gestellten Formulierungen (“well-posedness”) führen, erzeugt werden.
2. Die Modellierung des Überganges vom Kontinuum zum Diskontinuum mit neuen freien Oberflächen (Trennprozess).
3. Die Simulation von Rissen und Risswachstumsprozessen, die Verschiebungs-Diskontinuitäten im kontinuierlichen Medium darstellen.

Die eben formulierten Aufgaben wurden im Rahmen des Projektes wie folgt realisiert. Den Ausgangspunkt bildeten die adaptiv-iterativen Lösungsalgorithmen, die in der letzten Beantragungsphase für elastisch-plastisches Materialverhalten entwickelt wurden (inklusive Übertragung der Zustandsvariablen bei adaptiver Netzveränderung und Fehlerschätzer). Die dabei entstandene Software (Basis: Workada) konnte dann auf die schädigungsmechanischen Fragestellungen erweitert werden. Somit ist die Beschreibung des Materialverhaltens in der Prozesszone möglich. Die beiden anderen Punkte konnten in der Auslaufphase des SFB nur in der einfachsten Form als erste Erfahrungssammlung realisiert werden. Das bedeutet die Vorgabe eines Längenmaßes  $\Delta a$ , das im Versagensfall den Riss um  $\Delta a$  erweitert.

Bleibt noch die Definition des Versagensfalles in enger Verbindung mit der Festlegung der Risswachstumsrichtung. In diesem Zusammenhang scheint es angebracht, das Lokalisierungskriterium, das als verschwindende Determinante des akustischen Tensors [Spring05] definiert ist, zu verwenden. Da ohnehin nur bis zur Erfüllung dieses Kriteriums stabil gerechnet werden kann, ist diese Tatsache sehr einleuchtend. Eine immer bessere Modellierung bis zum Versagen hängt dann von den konkreten Modellen ab, die in erweiterter

Form auch nichtlokale Theorien mit einbeziehen müssen. Entscheidend dabei ist die Anbindung des Versagensfalles an die notwendigen Experimente.

Geht man jedoch beim Risswachstum von einer scharfen Risspitze aus, dann ergibt sich wegen des singulären asymptotischen Verhaltens (auch bei nichtlinearem Material) das Problem der immerwährenden Erzeugung des Versagensfalles (Rissfortschritt) mit immer besserer adaptiver Netzverfeinerung an der Risspitze, ohne einen Schwellwert größer 0 zu erreichen. Anders ausgedrückt heißt das, dass für eine beliebig kleine äußere Last Risswachstum an einer scharfen Risspitze erzeugbar ist, wenn die klassischen Schädigungsmodelle verwandt werden. Die Lösung dieses Problems ist eine eigenständige Aufgabe für zukünftige Untersuchungen. Dabei muss das asymptotische Verhalten in Verbindung mit den möglichen Lokalisierungsmoden in der Risspitze betrachtet werden.

Um diese Angelegenheit einfach zu umgehen, wurde der Riss mit einem vorgegebenen kleinen Radius modelliert. Auf diese Weise sollte die adaptive Netzabhängigkeit des Kriteriums behoben werden. Jedoch war die praktische Realisierung wegen unüberbrückbarer Schwierigkeiten beim Rissfortschritt eines abgerundeten Risses mit den vorhandenen adaptiv-iterativen Lösern zur Zeit noch nicht durchführbar.

Deshalb wird derzeit die Rissimulation anhand von zwei vergleichenden Betrachtungsweisen realisiert:

- Verwendung eines nichtlokalen Schädigungsmodells (Gurson, Rousselier) mit Ausmittlung der Schädigungsvariablen  $\beta$  ([Spring05]) über die Gausspunkte und nachfolgender Extrapolation auf die Knotenpunkte. Dabei wird Risswachstum definiert durch:
  - Risswachstum entsteht, wenn der Porenvolumenanteil  $f = f(\beta)$  einen vorgegebenen kritischen Wert  $f_c$  erreicht.
  - Der Rissfortschritt geht von der Risspitze aus in Richtung des maximalen Porenvolumenanteils
  - Das Rissinkrement  $\Delta a$  wird durch eine nach unten vorgegebene Elementverfeinerungsgrenze an der Risspitze definiert.
- Verwendung der Determinante des akustischen Tensors als Kriterium des Rissfortschrittes:
  - Bestimmung der Determinante  $q(x, y)$  des akustischen Tensors in einer entsprechenden Anzahl von Gausspunkten um die Risspitze. Das Materialverhalten wird dabei anhand der Schädigungsvariable  $\beta$  ebenfalls ausgemittelt.
  - Erzeugung einer interpolierten Funktion von diesen Determinanten über das Risspitzengebiet, um die Risswachstumsrichtung zu definieren
  - Beim Verschwinden der Determinante in einem Punkt der Rissumgebung erfolgt Rissfortschritt in Richtung des Minimums der ermittelten Funktion.
  - Das Rissinkrement  $\Delta a$  wird durch eine nach unten vorgegebene Elementverfeinerungsgrenze an der Risspitze definiert.

## Literaturverzeichnis

- [KuSche02] M. Kuna and M. Scherzer. Identifikation elastoplastischer und schädigungsmechanischer Materialparameter anhand gemessener Verformungsfelder. *DFG-Vorhaben KU 929/7-1, 929/7-2*, Institut für Mechanik und Fluidodynamik, TU Bergakademie Freiberg, 2002–2004.
- [Mey05] A. Meyer. A New Efficient Preconditioner for Crack Growth Problems. Prepr. SFB393 05-06, TU Chemnitz.
- [MRS05] A. Meyer, F. Rabold and M. Scherzer. Efficient finite element simulation of crack propagation using adaptive iterative solvers. *Communications in Numerical Methods in Engineering* 2006,22,93-108.
- [Spring05] M. Springmann. *Identifikation von Materialparametern schädigungsmechanischer Gesetze unter Einbeziehung der Dehnungslokalisierung*. Dissertation, TU Bergakademie Freiberg, Institut für Mechanik und Fluidodynamik, 2005.
- [Schwa05] M. Schwarz. Simulation der Rissausbreitung in der Nähe von Materialeinschlüssen. *Studienarbeit am IMFD*, TU Bergakademie Freiberg, 2005.

## 2.5 Offene Fragen / Ausblick

Die bisher entwickelte FEM-Software für geometrisch und physikalisch nichtlineare Aufgaben wurde im Berichtszeitraum für das Teilprojekt D1 des SFB 393 der TU Chemnitz um adaptive Strategien zur Netzanpassung erweitert. Das in diesem Zusammenhang entstandene FEM-Programm SPC-PM2AdNl 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.

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 dadurch gerechtfertigt, dass die Zustandsgrößen in den Elementknoten (als Basisvariablen für die Übertragungsstrategien) mit der gleichen Genauigkeit vorliegen wie in den Integrationsstützstellen. Vergleichende Untersuchungen mit einer elementorientierten Extrapolation und einem patchorientierten Verfahren erbrachten den Nachweis, dass die in diesem Teilprojekt favorisierte Übertragungsweise zu numerisch genaueren Ergebnissen und einem verbesserten Konvergenzverhalten führt.

Im Rahmen der Aufgabenstellungen im Berichtszeitraum wurde weiterhin das Auslösen von Elementen bei Erreichung eines bestimmten Schädigungsgrades und das Auftrennen von Elementen beim Risswachstum realisiert.

Mit SPC-PM2AdNl liegt ein FEM-Programm zur numerischen Simulation von ebenen geometrisch und physikalisch nichtlinearen Problemstellungen vor, das sich auf der Ba-

sis 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 unterschiedliche praktische Aufgaben aus der Struktur- und Rissbruchmechanik lösen. Eine Weiterentwicklung dieser effektiven und anpassungsfähigen Programmstrukturen ist durch die Genehmigung des DFG-Paketantrages "Numerische Simulation gekoppelter Aufgaben der Mechanik" gewährleistet. Hierbei stellen die Erweiterung der Materialbibliothek um gekoppelte Aufgabenstellungen der Piezo- wie auch der Biomechanik, die Berücksichtigung räumlicher Probleme als auch die Identifikation von Materialparametern unter Nutzung von speziellen Regularisierungstechniken die Kernpunkte des Forschungsvorhabens dar.