

Modellierung des schädigungsbehafteten inelastischen Materialverhaltens von Faser-Kunststoff-Verbunden

Der Fakultät Maschinenwesen
der Technischen Universität Dresden
zur

Erlangung des akademischen Grades
Doktoringenieur (Dr.-Ing.)
vorgelegte Dissertation

Dipl.-Ing. Sebastian Müller
geboren am 11. Oktober 1984 in Meißen

Tag der Einreichung: 11. November 2014

Tag der Verteidigung: 23. Januar 2015

1. Gutachter: Prof. Dr.-Ing. habil. Volker Ulbricht
2. Gutachter: Prof. Dr.-Ing. habil. Maik Gude

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Festkörpermechanik der Technischen Universität Dresden. Gefördert wurde sie im Rahmen des Sonderforschungsbereiches 639 durch die Deutsche Forschungsgemeinschaft, bei der ich mich hiermit recht herzlich bedanke.

Besonderer Dank gilt meinem Doktorvater Prof. Dr.-Ing. habil. Volker Ulbricht, der mich von Beginn an unterstützt und gefördert hat. Ebenso danke ich Herrn Prof. Dr.-Ing. habil. Maik Gude für das Interesse an meiner Arbeit und für die Erstellung des zweiten Gutachtens.

Ich danke allen Kollegen des Instituts für Festkörpermechanik für das aussergewöhnlich positive Arbeitsumfeld sowie deren hilfreiche Diskussionsbeiträge und Anregungen. Ganz besonders möchte ich Herrn Dr.-Ing. Markus Kästner danken, der mich beginnend mit den Studienarbeiten im Rahmen meines Diplomstudiums fachlich gefördert und unterstützt hat und mir seither auch mit nichtfachlichen Anregungen stets zur Seite stand. Ein spezieller Dank gilt auch meinem Kollegen und Zimmerpartner Dipl.-Inf. Swen Blobel für die Aufnahme in sein Arbeitszimmer und den damit verbundenen regen freundschaftlichen Austausch.

Schlussendlich danke ich meiner Familie, allen voran meiner Frau und meinen lieben Eltern, für deren Ansporn, Geduld und Unterstützung während der gesamten Promotionszeit.

Dresden, den 24. Februar 2015

Sebastian Müller

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis	v
Tabellenverzeichnis	xi
Abkürzungsverzeichnis	xiii
Mathematische Operatoren und Notationen	xv
Symbolverzeichnis	xvii
1 Einführung	1
1.1 Motivation und Zielstellung	1
1.2 Phänomenologie des Materialverhaltens von glasfaserverstärkten Polypropylen	3
1.2.1 Phänomenologie des Matrixwerkstoffs Polypropylen	4
1.2.2 Mikro- und mesoskopische Schädigungsphänomene	6
1.3 Mehrskalige Modellierung von Faser-Kunststoff-Verbunden	6
1.3.1 Identifikation repräsentativer Volumenelemente	7
1.3.2 Ermittlung effektiver Spannungs-Verzerrungsbeziehungen	8
2 Kontinuumsmechanik	13
2.1 Kinematik	13
2.2 Kinetik und Bilanzgleichungen	15
2.3 Materialgleichungen	16
2.4 Randwertproblem	17
3 Diskretisierung, Linearisierung und Algebraisierung des Randwertproblems	19
3.1 Einführung in die erweiterte Finite-Elemente-Methode	19
3.1.1 Lokalisierung von Unstetigkeiten	21
3.1.2 Approximation von Unstetigkeiten	23
3.2 Diskretisierung	25
3.3 Linearisierung	31
3.4 Parallelisierte nichtlineare FE-Rechnung	35
4 Höherwertige erweiterte Finite-Elemente-Methode	41
4.1 Höherwertige Level-Set-Funktion	43
4.1.1 Globale Level-Set-Funktion	43

4.1.2	Lokale Level-Set-Funktion	45
4.2	Konsistente numerische Integration	50
4.2.1	Zweidimensionale Integration	51
4.2.2	Dreidimensionale Integration	61
4.2.3	Grenzflächenintegration	64
5	Konstitutive Beziehungen	67
5.1	Modellierung der Glasfaser	67
5.2	Modellierung polymerer Matrixwerkstoffe	68
5.2.1	Nichtlineare fraktionale Viskoelastizität	68
5.2.2	Validierung des Materialmodells für Polypropylen	72
5.2.3	Mehrachsiges Verallgemeinerung	73
5.2.4	Einbindung in eine iterative FE-Rechnung	75
5.3	Grenzflächenschädigung	79
5.3.1	Kinematik kohäsiver Grenzflächenschädigung	79
5.3.2	Schädigungsinitialisierung	80
5.3.3	Degradation	81
5.4	Matrixschädigung	84
5.4.1	Isotroper Kontinuumsschädigungsansatz	85
5.4.2	Nichtlokale Formulierung	90
6	Simulation unidirektional verstärkter GF-PP-Verbunde	97
6.1	Parametrisierung des Verbundmodells	97
6.2	Analyse des Mikrostruktureinflusses auf das Schädigungsverhalten	102
6.3	Analyse des Schädigungsverhaltens unter mehrachsiger Zug- / Druckmischbelastung	103
7	Zusammenfassung und Ausblick	107
Anhang		121
	Fraktionale Differential- und Integralrechnung	122
A	Fraktionale Differential- und Integraloperatoren	122
B	Iterative Lösung nichtlinearer fraktionaler Differentialgleichungen	123

Abbildungsverzeichnis

1.1	Einteilung der hierarchischen Materialstruktur eines FKV in die Mikro-, Meso- und Makroebene anhand einer idealisierten Verbundgeometrie.	2
1.2	Mikroskopische Schädigung eines faserverstärkten Kunststoffes.	3
1.3	Effektive Spannungs-Dehnungskurven für einen unidirektional verstärkten GF-PP-Verbund in Abhängigkeit von der Faserorientierung α und der Belastungsgeschwindigkeit.	4
1.4	In monotonen Zugversuchen ermittelte effektive Spannungs-Dehnungskurven für den Matrixwerkstoff Polypropylen bei unterschiedlichen Belastungsgeschwindigkeiten: (a) bis zum Versagen der Probe und (b) für den Dehnungsbereich $\varepsilon \leq 0,05$	5
1.5	Semilogarithmischer Spannungs-Zeitverlauf eines Relaxationsversuchs für den Matrixwerkstoff Polypropylen bei einem Dehnungsniveau von $\varepsilon = 0,045$ und einer Haltezeit von $t_h = 48h$	6
1.6	Evolution der Schädigung in GF-PP-Verbunden über die einzelnen Längenskalen: (a) mikroskopische Schädigung der Grenzfläche zwischen Faser und Matrix sowie der Matrix selbst, (b) Ausbreitung der Lokalisierungszone auf Mesoebene und (c) Totalversagen des Verbundbauteils (Hufenbach u. a. (2011)).	7
1.7	Identifikation eines RVE am Beispiel einer unidirektionalen hexagonalen Anordnung der Verstärkungsfasern.	8
1.8	Periodische Randbedingungen: (a) Periodizität der Verschiebungen an gegenüberliegenden Rändern und (b) Definition der Masterknoten M_i zur effizienten Vorgabe effektiver Lasten oder Deformationen.	10
1.9	Ableitung geeigneter RVE-Modelle zur Abbildung einer makroskopischen einachsigen Zugbelastung: (a) Probenausschnitt mit einachsigen Spannungszustand und (b) mögliche RVE-Modelle der mikroskopischen Materialstruktur für Faserorientierung von $\alpha = 90^\circ$ und $\alpha = 45^\circ$	11
2.1	(a) Definition des Körpers \mathcal{K} und dessen innere Struktur. (b) Kinematik des Grenzflächenrisses.	14
3.1	FE-Netz mit gewöhnlichen Elementen und X-Elementen und deren Einteilung nach der Art der Unstetigkeit.	20
3.2	Heterogener Körper mit entsprechenden Level-Set-Funktionen $\varphi_j = 0$	21
3.3	Modellierung eines schwach diskontinuierlichen Feldes durch die Überlagerung einer kontinuierlichen Formfunktion und der Anreicherungsfunktion (3.6).	24

3.4	Modellierung eines stark diskontinuierlichen Feldes durch die Überlagerung einer kontinuierlichen Formfunktion und der Anreicherungsfunktion (3.7).	24
3.5	Aufteilung des Berechnungsnetz in n^e gewöhnliche Elemente und n^{xe} X-Elemente mit angereicherten Verschiebungsfeld.	27
3.6	Korrespondenz zwischen (a) natürlichen und (b) physikalischen Elementkoordinaten eines isoparametrischen 20 Knoten (Serendipity) Hexaederelements.	27
3.7	Vergleich des schematischen Aufbaus einer CPU und einer GPU, aus Speicher (DRAM), Zwischenspeicher (Cache), Kontrolleinheit (Control) und arithmetisch-logischen Einheiten (ALU) (vgl. NVIDIA (2013)).	36
3.8	Rechenzeiten zum Lösen des Gleichungssystems (3.43) in Abhängigkeit vom Freiheitsgrad für: (a) zwei- und (b) dreidimensionale FE-Modelle. Verglichen werden die auf der CPU ausgeführten direkten Lösungsverfahren BACKSLASH und CHOLMOD2 mit dem auf der GPU berechneten iterativen Verfahren der konjugierten Gradienten (CG).	37
3.9	Prinzipieller Ablauf der Bestimmung des Gleichgewichts in einer nichtlinearen FE-Rechnung und die Aufteilung der Berechnungsschritte auf die CPU und die GPU zur optimalen Ausnutzung derer individueller Eigenschaften.	39
3.10	Rechenzeiten für das Erstellen der Gesamtsteifigkeitsmatrix und des inneren Knotenkraftvektors in Abhängigkeit von der Elementanzahl für: (a) zwei- und (b) dreidimensionale FE-Modelle. Verglichen wird eine rein CPU basierte Berechnung mit einem hybriden Lösungsverfahren entsprechend Abb. 3.9.	40
4.1	Einschlussproblem.	42
4.2	Globale LS-Beschreibung einer kugelförmigen Unstetigkeit Γ_d auf Basis linearer: (a) 2D Rechteck- und (b) 3D Hexaederelemente.	44
4.3	Globale LS-Beschreibung einer kugelförmigen Unstetigkeit Γ_d auf Basis quadratischer: (a) 2D Rechteck- und (b) 3D Hexaederelemente.	45
4.4	Konvergenzuntersuchung für die Approximation gekrümmter Unstetigkeiten auf Basis einer globalen Level-Set-Wert Berechnung: (a) die normalisierte L_2 Norm und (b) die normalisierte Energienorm für bilineare (Q4) und biquadratische (Q8) Rechteckelemente sowie trilineare (H8) und triquadratische (H20) Hexaederelemente.	45
4.5	Berechnung der lokalen LS-Funktion φ^j für ein trilineares Hexaederelement entsprechend der zuvor beschriebenen Teilschritte.	47
4.6	Lineare elementweise Rekonstruktion der Unstetigkeit Γ_d , basierend auf den Schnittpunkten mit den Elementkanten: (a) abweichende Knotenwerte in angrenzenden Elementen und die resultierende zweidimensionale und (b) dreidimensionale LS-Approximation.	48
4.7	Identifikation zusätzlicher diskreter Punkte auf der Geometriefläche Γ_d für dreidimensionale Problemstellungen.	49

4.8	Höherwertige elementweise Rekonstruktion der Unstetigkeit Γ_d basierend auf den Schnittpunkten mit den Elementkanten und zusätzlichen Stützstellen innerhalb der Elemente: (a) zweidimensionale und (b) dreidimensionale LS-Approximation.	50
4.9	Konvergenzuntersuchung für die Approximation gekrümmter Unstetigkeiten auf Basis einer lokalen, elementweisen Level-Set-Berechnung: (a) die normalisierte L_2 Norm und (b) die normalisierte Energienorm für bilineare (Q4) und biquadratische (Q8) Rechteckelemente sowie trilineare (H8) und triquadratische (H20) Hexaederelemente.	51
4.10	Integration eines biquadratischen, von der Level-Set-Funktion φ_j geschnittenen Elements durch die Aufteilung der polygonalen Teilgebiete in höherwertige Integrationsbereiche. Die Verwendung standardisierter Geometrien erlaubt die Anwendung von Standardquadraturregeln.	53
4.11	Integration eines biquadratischen, von der Level-Set-Funktion φ_j geschnittenen Elements durch Reduktion der Gebietsintegration auf eine Randintegration über die Kanten der polygonalen Teilgebiete. Die Integration entsprechend (4.21) verlangt nach einer p -fachen Integration anhand der durch den Koeffizienten λ_p verschobenen Quadraturpunkte.	56
4.12	Überführung eines kontinuierlich verlaufenden Verzerrungsfeldes in eine gebietsweise konstante Verzerrung durch die gewichtete Mittelung anhand von (4.23).	58
4.13	Anwendung des <i>strain-smoothing</i> -Verfahrens auf ein X-Element: (a) Aufteilung der durch die LS-Funktion generierten Elementteilbereiche in eine endliche Anzahl von Mittelungsbereichen, (b) Exemplarische Verteilung der gemittelten Verzerrung $\bar{\epsilon}_{ij}$ im Elementgebiet.	59
4.14	Konvergenzuntersuchung für die Integration angereicherter, bilinearer Rechteckelemente (Q4): (a) die normalisierte L_2 Norm und (b) die normalisierte Energienorm.	60
4.15	Konvergenzuntersuchung für die Integration angereicherter, biquadratischer Rechteckelemente (Q8): (a) die normalisierte L_2 Norm und (b) die normalisierte Energienorm.	61
4.16	Aufteilung angereicherter Hexaederelemente in tetraederförmige Integrationsbereiche auf Basis einer dreidimensionalen DELAUNAY-Zerlegung. Inkonsistenz zwischen eben berandeten Tetraedern und dem gekrümmten Verlauf der Unstetigkeit.	62
4.17	Konsistente Aufteilung angereicherter Hexaederelemente in gekrümmt berandete, tetraederförmige Integrationsbereiche durch die Modifikation der aus einer dreidimensionalen DELAUNAY-Zerlegung gewonnenen Tetraeder.	63
4.18	Konvergenzuntersuchung für die Integration angereicherter, trilinearer (H8) und triquadratischer (H20) Hexaederelemente mittels eben (T4) und gekrümmt (T10) berandeten Tetraederbereichen: (a) die normalisierte L_2 Norm und (b) die normalisierte Energienorm.	63

4.19	Bestimmung einer Quadraturregel zur Grenzflächenintegration: (a) doppelt gekrümmter Grenzflächenverlauf, (b) konsistente Aufteilung der Grenzfläche mittels modifizierter DELAUNAY-Triangulation und (c) Ableitung der Grenzflächen-Quadraturpunkte.	65
5.1	Fraktionales Element als zusätzliches rheologisches Grundelement.	69
5.2	Fraktionales viskoelastisches Materialmodell: (a) Rheologisches Modell, (b) Normierte Relaxationsfunktion des fraktionalen MAXWELL-Elements	70
5.3	Modellverhalten (Linien) im Vergleich mit experimentellen Ergebnissen (Symbole) für Polypropylen: (a) Spannungs-Dehnungskurven für monotone Zugversuche bei drei unterschiedlichen Dehnraten bis zu einem Dehnungsniveau von $\varepsilon \leq 0,05$, (b) Spannung-Zeitkurve für einen Relaxationsversuch bei $\bar{\varepsilon} = 0,045$ und einer Haltezeit von $t_h = 48$ h	72
5.4	(a) Aufteilung der Separation $[[\mathbf{u}]]_l^c$ und des Spannungsvektors \mathbf{t}_l^c in ihren Normal- und Tangentialanteil. (b) Einfluss des Grenzflächenfestigkeitsparameters λ auf das Initialisierungskriterium (5.61).	80
5.5	Evolution der Normal- und Tangentialspannung in Abhängigkeit der Normal- und Tangentialseparation für: (a) ein anfangs-nachgiebiges und (b) ein anfangs-steifes Kohäsivzonenmodell mit linearer Degradation.	83
5.6	Evaluierung unterschiedlicher Kohäsivzonenmodelle anhand eines Einschlussproblems: (a) Modellaufbau und (b) Vergleich effektiver Spannungs-Verzerrungskurven.	84
5.7	Geschädigter Körper und entsprechendes Volumenelement mit Defekten.	85
5.8	Einachsige Zugbelastung mit linearelastischem Materialverhalten und exponentieller Degradation der Steifigkeit infolge verzerrungsgesteuerter Schädigung: (a) Spannungs-Dehnungsverlauf und Einfluss der charakteristischen Parameter, (b) Evolution der Schädigungsvariablen D in Abhängigkeit der Geschichtsvariablen κ	87
5.9	Evaluierung des Kontinuumsschädigungsmodells anhand einer Lochscheibe (Viertelmodell): (a) Testanordnung, (b) Kraft-Verschiebungsverläufe und (c) Schädigungsverteilung bei Maximalbelastung in Abhängigkeit der mittleren Elementkantenlänge h	90
5.10	Nichtlokale Integralformulierung für den zweidimensionalen Fall: (a) Interaktionsradius r_{CDM} eines einzelnen Empfängerpunkts und die berücksichtigten Quellpunkte, (b) Wichtungsfunktion (5.98) mit einem Interaktionsradius von $r = 1$ mm, (c) Einflussbereich für den Fall eines RVE Modells mit periodischen Randbedingungen (vgl. Abschnitt 1.3.2).	92
5.11	Evaluierung der nichtlokalen Kontinuumsschädigungsformulierung anhand einer Lochscheibe (vgl. Abb. 5.9 (a)): Kraft-Verschiebungsverläufe für bilineare (a) und biquadratische Rechteckelemente mit unterschiedlicher Elementkantenlänge h und (c) Schädigungsverteilung bei Maximalbelastung.	93
5.12	Profil und die Anzahl der von Null verschiedenen Einträge N_{nz} der Gesamtsteifigkeitsmatrix für: (a) den ersten rein elastischen Lastschritt sowie bei halber (b) und (c) vollständiger Belastung.	95

5.13	Entwicklung des relativen Residuumfehlers innerhalb der einzelnen Lastinkremente unter Verwendung: (a) der lokalen Sekantensteifigkeit und (b) der vollständigen nichtlokalen Tangentensteifigkeit. Die rein elastischen Lastinkremente sind blau gekennzeichnet.	95
6.1	XFEM-Modell des mikroskopischen RVE eines unidirektional verstärkten Verbundes für die Analyse einer Faserorientierung von: (a) $\alpha = 90^\circ$ und (b) $\alpha = 45^\circ$ relativ zur Belastungsrichtung (vgl. Abb. 1.9).	98
6.2	Linear elastische Simulation des effektiven Materialverhaltens eines UD-GF-PP-Verbundes und einer Faserorientierung von $\alpha = 90^\circ$: (a) Vergleich der effektiven Spannungs-Dehnungskurve (Linie) mit experimentellen Ergebnissen (Symbole) und (b) lokale Verzerrungsverteilung $\varepsilon_{11}(\mathbf{x})$ bei $\bar{\varepsilon} = 0,01$	98
6.3	Nichtlineare Simulation des effektiven Materialverhalten eines UD-GF-PP-Verbundes und einer Faserorientierung von $\alpha = 90^\circ$ unter Berücksichtigung des viskoelastischen Verhaltens der Matrix: (a) Vergleich der effektiven Spannungs-Dehnungskurven (Linien) mit experimentellen Ergebnissen (Symbole) und (b) lokale Verzerrungsverteilung $\varepsilon_{11}(\mathbf{x})$ bei $\bar{\varepsilon} = 0,01$ und $\dot{\bar{\varepsilon}} = 0,9\%/min$	99
6.4	Nichtlineare Simulation des effektiven Materialverhalten eines UD-GF-PP-Verbundes und einer Faserorientierung von $\alpha = 90^\circ$ unter Berücksichtigung des viskoelastischen Verhaltens der Matrix und der kohäsiven Grenzflächenschädigung: (a) Vergleich der effektiven Spannungs-Dehnungskurven (Linien) mit experimentellen Ergebnissen (Symbole) und (b) lokale Verzerrungsverteilung $\varepsilon_{11}(\mathbf{x})$ bei $\bar{\varepsilon} = 0,01$ und $\dot{\bar{\varepsilon}} = 0,9\%/min$	100
6.5	Nichtlineare Simulation des effektiven Materialverhalten eines UD-GF-PP-Verbundes und einer Faserorientierung von $\alpha = 90^\circ$ unter Berücksichtigung des viskoelastischen Verhaltens der Matrix, der kohäsiven Grenzflächenschädigung und der Kontinuumsschädigung der Matrix: (a) Vergleich der effektiven Spannungs-Dehnungskurven (Linien) mit experimentellen Ergebnissen (Symbole) und (b) Schädigungsverteilung $D(\mathbf{x})$ bei $\bar{\varepsilon} = 0,01$ und bei $\dot{\bar{\varepsilon}} = 0,9\%/min$	101
6.6	Nichtlineare Simulation des effektiven Materialverhalten eines UD-GF-PP-Verbundes und einer Faserorientierung von $\alpha = 45^\circ$ unter Berücksichtigung des viskoelastischen Verhaltens der Matrix, der kohäsiven Grenzflächenschädigung und der Kontinuumsschädigung der Matrix: (a) Vergleich der effektiven Spannungs-Dehnungskurve (Linien) mit experimentellen Ergebnissen (Symbole) und (b) Schädigungsverteilung $D(\mathbf{x})$ bei $\bar{\varepsilon} = 0,015$ und $\dot{\bar{\varepsilon}} = 9\%/min$	102
6.7	Analyse des Einflusses des Faservolumengehalts auf die mikroskopische Schädigung von GF-PP-Verbunden: (a) Variation der RVE Geometrie und (b) effektive Spannungs-Dehnungskurven für unterschiedliche Faservolumengehalte.	103
6.8	Lokale Schädigungsverteilung in Abhängigkeit des Faservolumengehalts.	104
6.9	Analyse des Schädigungsverhaltens unter mehrachsiger Zug- / Druckmischbelastung: (a) effektive Verzerrungszustände $\bar{\varepsilon}_{11} - \bar{\varepsilon}_{22}$ für eine verschiebungsgesteuerte FE-Simulation und die identifizierten Versagenspunkte in der effektiven (b) Verzerrung- bzw. (c) Spannungsebene.	105

Tabellenverzeichnis

3.1	Rechenzeiten zum Lösen des Gleichungssystems (3.43) für unterschiedliche direkte und iterative Gleichungssystemlöser.	38
3.2	Rechenzeiten für das Erstellen der Gesamtsteifigkeitsmatrix und des inneren Knotenkraftvektors in Abhängigkeit von der Modelldimension und der Elementanzahl.	40
4.1	Konvergenzraten für die LEBESQUE- $\ e\ _{L_2}$ und die Energienorm $\ e\ _{en}$ eines Einschlussproblems unter Verwendung bilinearer (Q4) und biquadratischer (Q8) Rechteckelemente, trilinearer (H8) und triquadratischer (H20) Hexaederelemente und einer globalen Berechnung der Level-Set-Werte.	46
4.2	Konvergenzraten für die LEBESQUE- $\ e\ _{L_2}$ und die Energienorm $\ e\ _{en}$ eines Einschlussproblems unter Verwendung bilinearer (Q4) und biquadratischer (Q8) Rechteckelemente, trilinearer (H8) und triquadratischer (H20) Hexaederelemente und einer lokalen Berechnung der Level-Set-Werte.	50
4.3	Konvergenzraten für Integration mittels höherwertiger Integrationsbereiche (IB), LASSERRE-Verfahren (L) und <i>strain-smoothing</i> (SM) unter Verwendung bilinearer (Q4) und biquadratischer (Q8) Rechteckelemente.	61
5.1	Materialparameter des nichtlinear viskoelastischen Modells für Polypropylen. . .	72
5.2	Zuordnung zwischen einachsigen und mehrachsigen Materialparametern unter der Annahme einer konstanten Querkontraktionszahl.	74

Abkürzungsverzeichnis

ALU	algorithmisch-logische Einheit	35
CG	konjugierte Gradienten	37
CPU	Hauptprozessor	19
CUDA	Programmierschnittstelle für den Grafikprozessor (<i>Compute Unified Device Architecture</i>)	35
FKV	Faser-Kunststoff-Verbund	1
GF	Glasfaser	4
GPU	Grafikprozessor	3
LS	Level-Set	20
PP	Polypropylen	4
RVE	repräsentatives Volumenelement	7
UD	unidirektional	10
XFEM	erweiterte Finite-Elemente-Methode	2

Mathematische Operatoren und Notationen

a	Skalar
\mathbf{a}	Vektor mit Koordinatenbezug oder Tensor 1. Stufe
\mathbf{A}	Tensor höherer Stufe
$\underline{\mathbf{A}}$	Vektor
$\underline{\underline{\mathbf{A}}}$	Matrix
\cup	Assemblierungsoperator
$ \dots $	Betrag
\exp	Exponentialfunktion
∇	Gradientenoperator
∇^s	symmetrischer Gradientenoperator
$\langle \dots \rangle$	MACAULAY-Klammern
\max	Maximumoperator
\min	Minimumoperator
$\frac{\partial(\dots)}{\partial x}, (\dots)_{,x}$	Partielle Ableitung
$[[\dots]]$	Sprungoperator
$\ \dots\ $	Tensornorm
$(\dots)^T$	Transposition
$\dots \otimes \dots$	dyadisches Produkt
$\dots \cdot \dots$	einfache Verjüngung
$\dots : \dots$	doppelte Verjüngung
$\dot{(\dots)}$	Zeitliche Ableitung
\vee	Disjunktion
\wedge	Konjunktion

Symbolverzeichnis

$a_{i,k+1}$	Implizite Quadraturkoeffizienten eines fraktionales Integrals	71
$\hat{\mathbf{a}}$	Verschiebungsfeld zur Beschreibung einer schwachen Unstetigkeit	15
A^i	Fläche der RVE-Seite die dem i -ten Masterknoten zugeordnet ist	9
α	Ableitungsordnung eines fraktionales Elements	69
\mathcal{B}^e	Gebiet eines Elements	26
$b_{i,k+1}$	Explizite Quadraturkoeffizienten eines fraktionales Integrals	71
$\hat{\mathbf{b}}$	Verschiebungsfeld zur Beschreibung einer starken Unstetigkeit	15
$\partial\mathcal{B}^c$	Geschädigte Grenzfläche	14
$\partial\mathcal{B}^m$	Ungeschädigte Grenzfläche	14
$\underline{\mathbf{B}}$	Differentialoperatormatrix	29
$\partial\mathcal{B}^t$	Teil des Randes auf dem natürliche Randbedingungen vorgegeben sind	17
$\partial\mathcal{B}^u$	Teil des Randes auf dem wesentliche Randbedingungen vorgegeben sind	17
\mathcal{B}^{RVE}	Gebiet eines RVE	8
$\partial\mathcal{B}^{\text{RVE}}$	Rand eines RVE Gebiets	9
β	Nichtlinearitätsparameter der Gleichgewichtslage	68
c_0	Grundsteifigkeit der Gleichgewichtslage	68
c_1	Steifigkeit eines fraktionales Elements	69
$\underline{\mathbf{C}}$	Matrixnotation der Materialtangente steifigkeit	33
\mathbf{C}	C_{ijkl} Materialtangente steifigkeitstensor	68
D	Schädigungsvariable des Kontinuumsschädigungsmodells	85
D^α	Fraktionales Ableitungsoperator mit der Ableitungsordnung α	69
$\mathbf{1}$	δ_{ij} Zweistufiger Einheitstensor, Kronecker-Delta	67
E_α	MITTAG-LEFFLER-Funktion	69
E	Elastizitätsmodul	67

Φ^c	Freie Energie der Kohäsivzone	81
ε	Skalare einachsige Dehnung	5
ε_0	Kritische äquivalente Verzerrung	87
ε_f	Charakteristische äquivalente Verzerrung des Schädigungsevolution	87
ε_v	Äquivalente Verzerrung	87
$\dot{\varepsilon}$	Skalare einachsige Dehnrate	5
$\boldsymbol{\varepsilon}$	ε_{ij} Verzerrungstensor	8
\mathbf{e}	e_{ij} Verzerrungsdeviator	73
$\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}$	VOIGTSche-Vektornotation des Verzerrungstensors	29
$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$	$\bar{\varepsilon}_{ij}$ Effektiver Verzerrungstensor	8
$\ \mathbf{e}\ _{\text{en}}$	Fehler entsprechend der Energienorm	43
$\ \mathbf{e}\ _{L_2}$	Fehler entsprechend der LEBESQUE-Norm	42
e	EULERSche Zahl	82
F^c	Skalarwertige Anreicherungsfunktion zur kinematischen Beschreibung einer starken Unstetigkeit	15
F^m	Skalarwertige Anreicherungsfunktion zur kinematischen Beschreibung einer schwachen Unstetigkeit	15
$\underline{\mathbf{f}}_{\text{ext}}$	Vektor der äußeren Knotenlasten	31
$\underline{\mathbf{f}}_{\text{int}}$	Vektor der inneren Knotenlasten	31
\mathbf{F}^{M_i}	Kraftvektor des i -ten Masterknoten	9
\mathbf{f}	Massenkraftdichte	15
G	Schubmodul	67
γ	Verhältnis von Zug- und Druckfestigkeit im Rahmen der Kontinuumschädigungsformulierung	88
Γ	Gammafunktion	71
I^α	Fraktionaler Integraloperator mit der Ordnung α	71
J	Determinante der JACOBI-Matrix	29
$\underline{\mathbf{J}}$	JACOBI-Matrix	29
\mathcal{K}	Materieller Körper	13
K^{eff}	Effektive Grenzflächensteifigkeit	81

K	Kompressionsmodul	67
$\underline{\underline{\mathbf{K}}}$	Tangentensteifigkeitsmatrix	32
κ	Geschichtsvariable des Kontinuumsschädigungsmodells	87
$\underline{\underline{\mathbf{L}}}_{\varepsilon}$	Operatormatrix der diskretisierten Verzerrungs-Verschiebungsbeziehung	29
λ	Wichtungparameter für die Grenzflächenfestigkeit	80
\mathcal{M}^e	Anzahl gewöhnlicher Elemente	26
\mathcal{M}^{xe}	Anzahl von X-Elementen mit angereichertem Verschiebungsansatz	26
\mathbf{M}_i	Masterknoten des i -ten Paares gegenüberliegender Seiten eines RVE	9
m	Masse	15
\mathbf{n}^c	Normalenvektor einer geschädigten Grenzfläche	17
n_c	Anzahl geschädigter Grenzflächen	14
\mathbf{n}^m	Normalenvektor einer ungeschädigten Grenzfläche	17
n_m	Anzahl ungeschädigter Grenzflächen	14
N_i	Elementformfunktion des i -ten Elementknotens	22
n^K	Anzahl der Knoten eines Elements	23
\mathbf{n}	Normalenvektor	15
ν	Querkontraktionszahl	67
φ	Konfiguration eines materiellen Körpers	13
φ	Level-Set (LS) Funktion	21
ψ	Wichtungsfunktion	81
$\underline{\underline{\mathbf{R}}}$	Residuumvektor	31
ρ	Dichte	15
s_0	Normalisierungsparameter der nichtlinearen Viskositätsfunktion	70
σ^{eq}	Einachsige Gleichgewichtsspannung	68
σ_n^{\max}	Maximal ertragbare Grenzflächenspannung	82
σ^{ov}	Einachsige Überspannung	68
$\boldsymbol{\sigma}$	σ_{ij} (CAUCHYscher) Spannungstensor	8
$\boldsymbol{\sigma}^{eq}$	σ_{ij}^{eq} Gleichgewichtsspannungstensor	73

$\hat{\sigma}$	$\hat{\sigma}_{ij}$	Nichtlokaler Spannungstensor	81
\mathbf{s}	s_{ij}	Spannungsdeviator	73
σ^{ov}	σ_{ij}^{ov}	Überspannungstensor	73
$\underline{\sigma}$		VOIGTSche-Vektornotation des Spannungstensors	29
$\bar{\sigma}$		Effektiver Spannungstensor	8
\mathbf{t}^c		Spannungsvektor an einer starken Unstetigkeit entsprechend der Kohäsivzonentheorie	17
t^{eff}		Effektive Grenzflächenspannung	81
t_n		Normalspannung	81
$\bar{\mathbf{t}}$		Spannungsvektor entsprechend einer natürlichen Randbedingung	17
t_h		Haltezeit des Relaxationsversuchs	5
\mathbf{t}_t		Tangentialspannung	81
\mathbf{t}		Spannungsvektor	15
τ		Charakteristische Relaxationszeit eines fraktionalen Elements	69
$[[\mathbf{u}]]^c$		Verschiebungssprung an einer geschädigten Grenzfläche	14
$\hat{\mathbf{u}}$		Kontinuierlich verlaufendes Verschiebungsfeld	15
\mathbf{u}^{M_i}		Verschiebungsvektor des i -ten Masterknoten	9
$[[u]]_n$		Normalenseparation	79
\mathbf{u}^P		Vektor der periodischen Randverschiebungen	9
$\bar{\mathbf{u}}$		Verschiebungsvektor entsprechend einer wesentlichen Randbedingung	17
$\underline{\mathbf{u}}$		Vektor aller Verschiebungsfreiwerte eines Modells	31
$[[u]]^{\text{eff}}$		Effektive Separation	81
$[[u]]^{\text{max}}$		Charakteristische Separation des Kohäsivzonenmodells	82
$[[\mathbf{u}]]_t$		Tangentialseparation	79
$\Delta \underline{\mathbf{u}}$		Verschiebungsinkrement	34
$\delta \underline{\mathbf{u}}$		Verschiebungszuwachs innerhalb eines Iterationsschritts	32
$\delta \mathbf{u}$		Virtuelles Verschiebungsfeld	18
V^{RVE}		Volumen eines RVE	8
\mathbf{x}		Räumlicher Ortsvektor	13
\mathbf{X}		Materieller Ortsvektor	13
ξ		Natürliche Elementkoordinaten	26

1 Einführung

Die numerische Simulation ist ein etabliertes Werkzeug in vielen ingenieurtechnischen Anwendungen. Insbesondere bei der Konstruktion und Auslegung von Bauteilen aus einem Faser-Kunststoff-Verbund (FKV) ist eine zuverlässige Vorhersage der Steifigkeits- und Festigkeitseigenschaften entscheidend. Die bei der Bauteilsimulation verwendeten konstitutiven Beziehungen für die effektiven Eigenschaften des Verbundes sind häufig angepasst an die Phänomenologie einer bestimmten Verbundstruktur und an spezifische Verbundbestandteile. Die Bestimmung der entsprechenden Parameter erfordert häufig eine Vielzahl experimenteller Untersuchungen, wobei manche Parameter, zum Beispiel für die Eigenschaften in Dickenrichtung, nur schwer oder gar nicht bestimmbar sind. Vor diesem Hintergrund wurden in den letzten Jahren numerische Verfahren entwickelt, die den experimentellen Aufwand auf eine geringe Anzahl von Grundversuchen an den Verbundbestandteilen reduzieren sollen.

Sogenannte Mehrskalen-Ansätze nutzen den hierarchischen Aufbau von FKV zur Identifikation von charakteristischen Längenskalen der Materialstruktur. Für typische FKV, wie glasfaserverstärktes Polypropylen (GF-PP), können drei Betrachtungsebenen unterschieden werden. Die Mikroebene besteht dabei ausschließlich aus einzelnen Filamenten der Verstärkungsfaser und reinem Matrixmaterial. Die Mesoebene repräsentiert die nächst größere Längenskala und besteht aus konsolidierten Faserbündeln (Rovings), die aufgrund ihres hohen Faservolumengehalts als homogen betrachtet werden, und den mit Matrixmaterial gefüllten Zwischenräumen. Auf Makro- oder auch Bauteilebene wird der FKV letztendlich nur als homogenes Kontinuum mit effektiven Materialeigenschaften betrachtet. Die Einteilung ist in Abb. 1.1 anhand einer idealisierten Verbundstruktur dargestellt.

1.1 Motivation und Zielstellung

Die mechanischen Eigenschaften von FKV sind bestimmt durch das Materialverhalten der einzelnen Verbundbestandteile sowie durch deren geometrische Anordnung. Ausgehend von der Mikroebene kann das effektive Materialverhalten des Verbundes durch eine schrittweise Modellierung der einzelnen Längenskalen ermittelt werden. Für die Modellierung der Mikroebene sind hierfür neben einem geeigneten geometrischen Modell der mikroskopischen Werkstoffstruktur, die Materialeigenschaften der Verbundbestandteile sowie numerische Modelle zur Erfassung wesentlicher Schädigungsmechanismen erforderlich.

Vor diesem Hintergrund ist das Ziel der vorliegenden Arbeit die Entwicklung einer Modellierungsstrategie, die es ermöglicht, die wesentlichen inelastischen Phänomene des Materialverhaltens auf der mikroskopischen Längenskala abzubilden. Das Verfahren soll die zuvor genannten Einflussfaktoren - Geometrie, Verbundbestandteile und Schädigungsphänomene - kombiniert

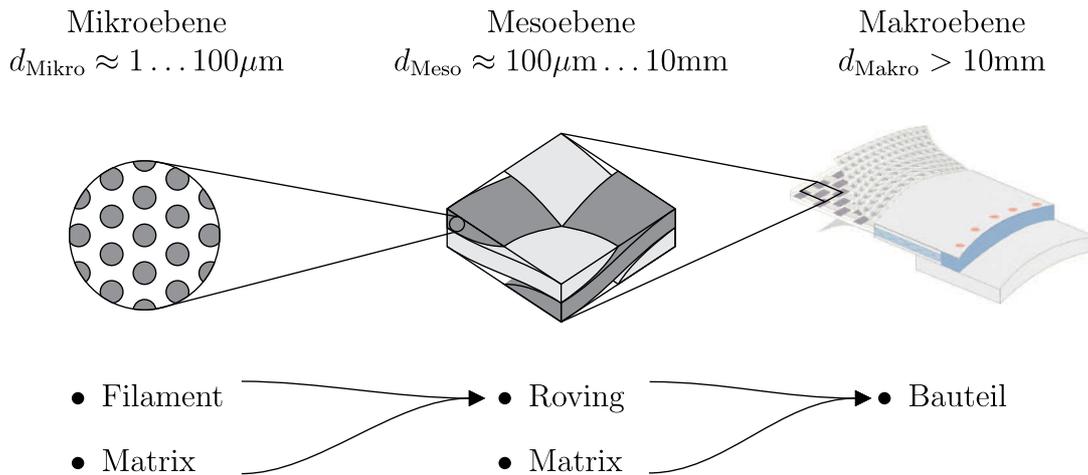


Abbildung 1.1: Einteilung der hierarchischen Materialstruktur eines FKV in die Mikro-, Meso- und Makroebene anhand einer idealisierten Verbundgeometrie.

in einer Simulation erfassen. Für die Diskretisierung der lokalen Werkstoffstruktur wird eine höherwertige Variante der erweiterten Finiten-Elemente-Methode (XFEM) entwickelt. Speziell die Abbildung gekrümmter Materialgrenzen innerhalb der Verbundstruktur soll durch die Verwendung von Ansatzfunktionen höherer Ordnung verbessert werden.

In Kästner (2009) konnte gezeigt werden, dass die inelastischen Materialeigenschaften von glasfaserverstärkten Polypropylen bei Belastungen quer zur Verstärkungsfaser signifikant durch das nichtlineare, dehnratenabhängige Materialverhalten der polymeren Matrix bestimmt werden. Ausgehend von diesen Beobachtungen soll im Rahmen der vorliegenden Arbeit ein effizientes Materialmodell zur Beschreibung von Polypropylen auf Basis von fraktionalen Evolutionsgleichungen entwickelt werden. Die Anwendung der fraktionalen Differentialrechnung erlaubt dabei eine signifikante Reduktion der notwendigen Materialparameter zur Beschreibung eines ausgeprägten viskoelastischen Materialverhaltens.

Für jede der zuvor genannten Längenskalen können charakteristische Schädigungsmechanismen identifiziert werden. Wie in Abb. 1.2 zu erkennen, kommt es bereits vor dem Versagen des FKV-Bauteils auf mikroskopischer Ebene des Verbundes zu einer Schädigung der Grenzfläche zwischen den Materialphasen sowie des umliegenden Matrixmaterials. Während die Lage der Grenzflächenschädigung durch die lokale Werkstoffstruktur a priori definiert ist, können Lokalisierungszonen im Bereich der polymeren Matrix an beliebigen Punkten auftreten. Für die effiziente Modellierung beider Phänomene werden zwei unterschiedliche Ansätze kombiniert. Die Beschreibung der Grenzflächenschädigung erfolgt auf Basis einer angepassten XFEM-Formulierung. Die kinematische Realisierung eines Verschiebungssprunges an der Materialgrenze in Kombination mit einem Kohäsivzonenmodell erlaubt hierbei die Modellierung einer sukzessiven Degradation der Grenzfläche. Das Versagen der Matrix wird demgegenüber durch ein nichtlokales, verzerrungsgesteuertes Kontinuumsschädigungsmodell abgebildet.

Die vorliegende Arbeit gliedert sich dabei wie folgt. Nachdem in Abschnitt 1.2 die Phänomenologie von glasfaserverstärkten Polypropylen diskutiert wird, sind in Abschnitt 1.3 die Grundlagen

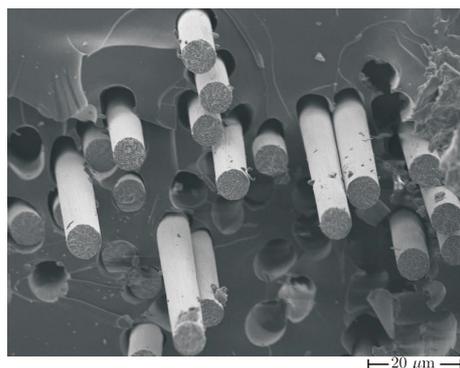


Abbildung 1.2: Mikroskopische Schädigung eines faserverstärkten Kunststoffes.

zur Berechnung effektiver Spannungs-Verzerrungsbeziehungen auf Basis einer mehrskaligen Modellierungsstrategie angegeben. In Kapitel 2 werden die Grundprinzipien einer kontinuumsmechanischen Beschreibung heterogener Körper zusammengefasst. Sie bilden die Basis für die Diskretisierung, Linearisierung und Algebraisierung des mechanischen Feldproblems auf Basis der XFEM in Kapitel 3. Dies beinhaltet die Vorstellung einer programmiertechnischen Umsetzung der Modellierung unter Ausnutzung moderner Grafikprozessoren (GPU). Die höherwertige Beschreibung schwacher und starker Unstetigkeiten im Verschiebungsfeld, die durch Materialgrenzen und deren Versagen hervorgerufen werden, auf Basis der XFEM ist Gegenstand von Kapitel 4. Dies umfasst neben verbesserten Verfahren zur Beschreibung gekrümmter Grenzflächenverläufe auch Methoden zur konsistenten Integration von Elementen mit angereichertem Verschiebungsansatz. Die konstitutiven Beziehungen zur Beschreibung der Verbundbestandteile, Glasfaser und Polypropylen, sowie für die Abbildung der Grenzflächen- und Matrixschädigung sind in Kapitel 5 zusammengefasst. Die gesamte Modellierungsstrategie wird in Kapitel 6 zur Berechnung effektiver Spannungs-Verzerrungsbeziehungen auf Mikroebene angewendet. Dies beinhaltet einen systematischen Aufbau und Parametrisierung des Gesamtmodells, die Analyse von Mikrostruktureinflüssen und die Simulation des Schädigungsverhaltens bei mehrachsiger Belastung. Eine Zusammenfassung und kritische Diskussion der Erkenntnisse in Kombination mit einem Ausblick über mögliche weiterführende Arbeiten ist in Kapitel 7 gegeben.

1.2 Phänomenologie des Materialverhaltens von glasfaserverstärkten Polypropylen

Die Entwicklung einer Modellierungsstrategie zur Beschreibung des schädigungsbehafteten inelastischen Materialverhaltens von FKV in der vorliegenden Arbeit orientiert sich an den von Kästner (2009) durchgeführten experimentellen Untersuchungen an Glasfaser-Polypropylenverbunden (GF-PP-Verbunden) sowie dessen konstitutiven Bestandteilen. Die wesentlichen Erkenntnisse der Untersuchungen sind im Folgenden zusammengefasst.

Für die Untersuchung des makroskopischen Materialverhaltens von GF-PP-Verbunden wurden am Institut für Textil- und Bekleidungstechnik (ITB) der TU Dresden Zugprobekörper ei-

nes Verbundes mit unidirektionaler Verstärkungsstruktur angefertigt. Zur Analyse der Richtungsabhängigkeit des effektiven Materialverhaltens wurden unterschiedliche Faserorientierungen α relativ zur Probenlängsachse untersucht. Im Rahmen von monotonen Zugversuchen bei unterschiedlichen Belastungsgeschwindigkeiten konnten für die Orientierungen $\alpha = 0^\circ$, 45° , 90° die in Abb. 1.3 dargestellten effektiven Spannungs-Dehnungskurven ermittelt werden. Es ist zu er-

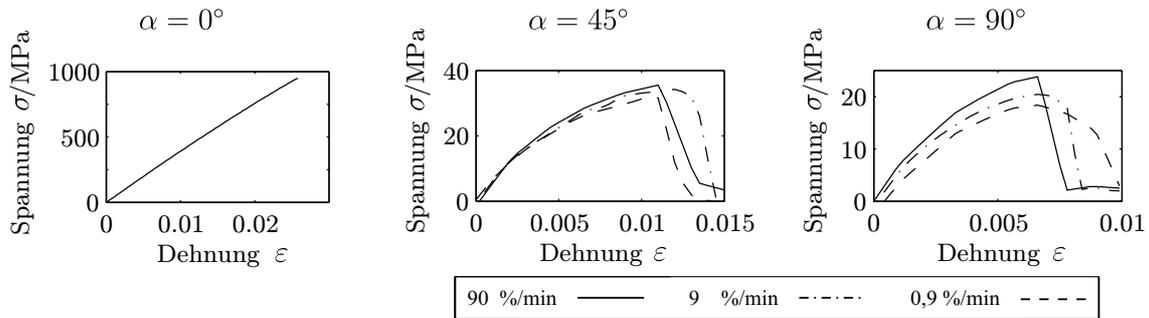


Abbildung 1.3: Effektive Spannungs-Dehnungskurven für einen unidirektional verstärkten GF-PP-Verbund in Abhängigkeit von der Faserorientierung α und der Belastungsgeschwindigkeit.

kennen, dass das effektive Verhalten des Verbundes bei einer Belastung in Faserlängsrichtung ($\alpha = 0^\circ$) durch die linearelastischen Eigenschaften der Glasfaser (GF) dominiert wird. Eine Variation der Belastungsgeschwindigkeit hat keinen Einfluss auf die Spannungsantwort. Beim Erreichen der Zugfestigkeit der Verstärkungsfaser kommt es zu einem abrupten Versagen der Zugprobe. Demgegenüber zeigt das effektive Materialverhalten bei einer Faserorientierung von $\alpha = 45^\circ$ und $\alpha = 90^\circ$ relativ zur Belastungsrichtung eine deutliche Nichtlinearität sowie eine signifikante Geschwindigkeitsabhängigkeit. Das Verhalten des Verbundes wird dabei wesentlich durch die nichtlinearen Materialeigenschaften der Polypropylen Matrix sowie durch unterschiedliche Schädigungsphänomene bestimmt. Die Evolution der Schädigung von der Mikroebene bis zum kompletten Versagen der Probe führt nach dem Erreichen eines Spannungsmaximums zu einem sukzessiven Abfall der Steifigkeit.

Die gewonnen Ergebnisse, speziell für die Faserorientierungen $\alpha = 45^\circ$ und $\alpha = 90^\circ$, sollen in Kapitel 6 für die Verifikation der im Rahmen der vorliegenden Arbeit entwickelten Modellierungsstrategie verwendet werden.

1.2.1 Phänomenologie des Matrixwerkstoffs Polypropylen

Wie in Abb. 1.3 gezeigt, wird das effektive Materialverhalten von GF-PP-Verbunden bei einer Belastung quer zur Verstärkungsfaser wesentlich von den nichtlinearen Eigenschaften der Matrix bestimmt. Vor diesem Hintergrund erfolgte in Kästner (2009) die experimentelle Charakterisierung von Polypropylen (PP) anhand von einachsigen Zugversuchen. Neben monotonen Zugversuchen bei unterschiedlichen Belastungsgeschwindigkeiten wurden hierfür Relaxationsversuche und zyklische Be- und Entlastungsversuche mit und ohne Haltezeiten durchgeführt. Eine Auswahl dieser Versuche bilden die Basis für die Formulierung eines nichtlinear viskoelastischen

Materialmodells in Abschnitt 5.2 und sind daher im Folgenden dargestellt.

Für die Identifikation der Geschwindigkeitsabhängigkeit des Materialverhaltens von Polypropylen wurden monotone Zugversuche bei unterschiedlichen Belastungsgeschwindigkeiten durchgeführt. Die in Abb. 1.4 (a) dargestellten Spannungs-Dehnungskurven zeigen, dass sich in Abhängigkeit der Dehnrates $\dot{\varepsilon}$ eine unterschiedliche Spannungsantwort einstellt. Die Belastungsgeschwindigkeit hat weiterhin einen Einfluss auf das nachkritische Verhalten der Polypropylen-Proben. Während bei hohen Dehnraten ein abruptes Sprödversagen zu beobachten ist, führen geringe Dehnraten zur Ausbildung einer Lokalisierungszone in Form einer Einschnürung. Mit Hinblick auf die Anwendung von Polypropylen als Matrixwerkstoff in einem FKV ist der Dehnungsbereich $\varepsilon \leq 0,05$ von besonderem Interesse. Die Ausschnittsvergrößerung der Spannungs-Dehnungskurven für diesen Bereich in Abb. 1.4 (b) zeigt eine nichtproportionale Zunahme der Spannung in Abhängigkeit der Belastungsgeschwindigkeit sowie eine ausgeprägte Nichtlinearität für diesen Dehnungsbereich.

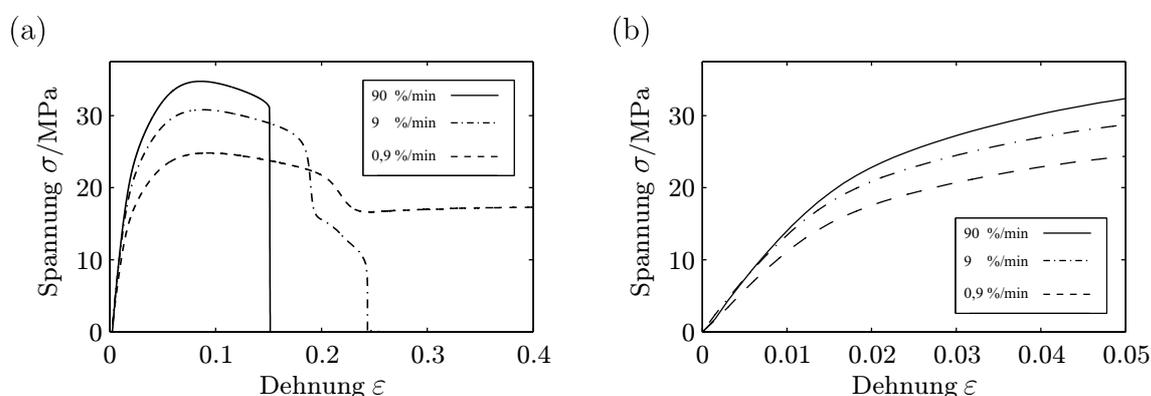


Abbildung 1.4: In monotonen Zugversuchen ermittelte effektive Spannungs-Dehnungskurven für den Matrixwerkstoff Polypropylen bei unterschiedlichen Belastungsgeschwindigkeiten: (a) bis zum Versagen der Probe und (b) für den Dehnungsbereich $\varepsilon \leq 0,05$.

Eine Quantifizierung der im Rahmen der Zugversuche nachgewiesenen Geschwindigkeitsabhängigkeit des Materialverhaltens kann anhand von Relaxationsversuchen durchgeführt werden. Hierbei wurden Polypropylen Zugproben mit einer Belastungsgeschwindigkeit von $\dot{\varepsilon} = 450\%/min$ monoton bis zu einem Dehnungsniveau von $\varepsilon = 0,045$ belastet. Ein konstant halten der Dehnung erlaubt daraufhin die Trennung des geschwindigkeitsabhängigen und geschwindigkeitsunabhängigen Anteils der Spannungsantwort. Die ermittelte Spannungs-Zeitkurve ist in Abb. 1.5 semilogarithmisch dargestellt. Nach einer Haltezeit von $t_h = 48h$ wird von einer abgeschlossenen Relaxation des geschwindigkeitsabhängigen Anteils der Spannung, der Überspannung, ausgegangen. Die verbleibende geschwindigkeitsunabhängige Spannung wird auch als Gleichgewichtsspannung bezeichnet.

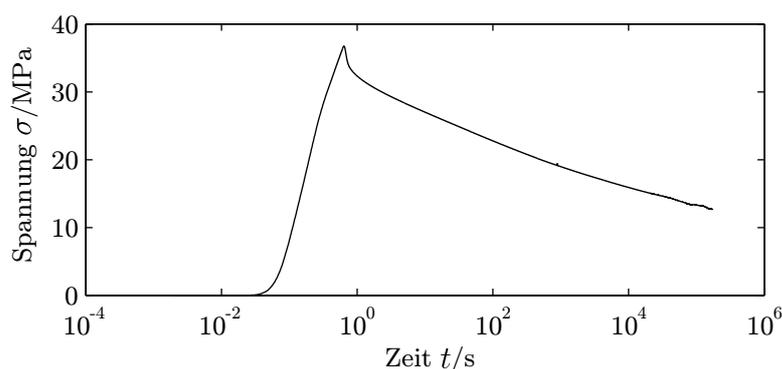


Abbildung 1.5: Semilogarithmischer Spannungs-Zeitverlauf eines Relaxationsversuchs für den Matrixwerkstoff Polypropylen bei einem Dehnungsniveau von $\varepsilon = 0,045$ und einer Haltezeit von $t_h = 48\text{h}$.

1.2.2 Mikro- und mesoskopische Schädigungsphänomene

Neben den nichtlinearen, geschwindigkeitsabhängigen Eigenschaften des Matrixmaterials haben Schädigungsphänomene auf den unterschiedlichen Längenskalen einen erheblichen Einfluss auf das effektive Materialverhalten von FKV. Vor diesem Hintergrund wurden am Institut für Leichtbau und Kunststofftechnik (ILK) der TU Dresden mikromechanische Analysen anhand von Schlibbildern durchgeführt. Für glasfaserverstärkte Polypropylenverbunde konnten hierbei charakteristische Schädigungsmechanismen identifiziert werden. Wie in Abb. 1.6 (a) zu erkennen, kommt es auf Mikroebene zu einem Versagen der Grenzfläche zwischen den Filamenten und dem umliegenden Matrixmaterial. Ausgehend von den Grenzflächenrissen führt eine weitere Schädigung der Matrix bei zunehmender Belastung zur Ausbildung einer Lokalisierungszone. Diese kann sich auf mesoskopischer Ebene über die Grenzen des Rovings hinweg ausbreiten (vgl. Abb. 1.6 (b)) und zusammen mit dem Versagen der Verstärkungsfasern auf makroskopischer Ebene zu einem Totalversagen des Verbundbauteils führen (vgl. Abb. 1.6 (c)).

Die experimentellen Beobachtungen des Verbundverhaltens auf Mikro- und Mesoebene motivieren die Entwicklung eines effizienten Verfahrens zur Beschreibung der Grenzflächen- und Matrixschädigung durch die Kombination eines diskontinuierlichen (XFEM) und kontinuierlichen (Kontinuumsschädigungsmodell) Schädigungsansatzes.

1.3 Mehrskalige Modellierung von Faser-Kunststoff-Verbunden

Die mehrskalige Modellierung von Faser-Kunststoff-Verbunden in der vorliegenden Arbeit basiert auf den Ansätzen von Kästner (2009). Sie wurden bereits erfolgreich für die linear-elastische Homogenisierung und für die Berechnung des effektiven viskoelastischen Materialverhaltens angewendet. Im Verlauf der Arbeit soll die Modellierungsstrategie daher auch für die Berechnung effektiver, schädigungsbehafteter Spannungs-Verzerrungsbeziehungen verwendet werden.

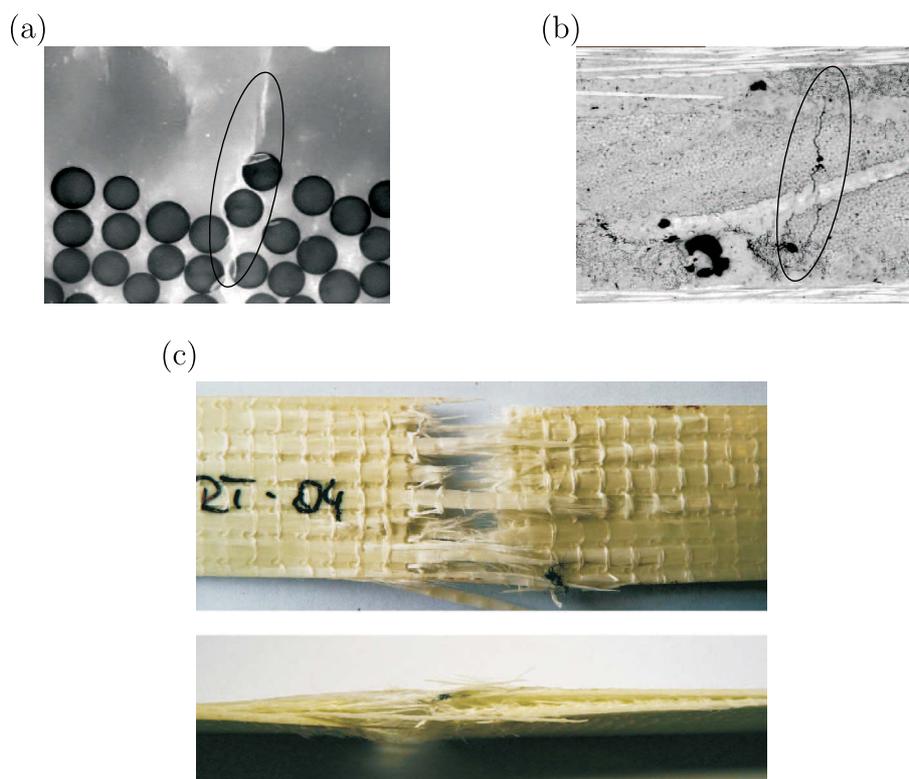


Abbildung 1.6: Evolution der Schädigung in GF-PP-Verbunden über die einzelnen Längsskalen: (a) mikroskopische Schädigung der Grenzfläche zwischen Faser und Matrix sowie der Matrix selbst, (b) Ausbreitung der Lokalisierungszone auf Mesoebene und (c) Totalversagen des Verbundbauteils (Hufenbach u. a. (2011)).

1.3.1 Identifikation repräsentativer Volumenelemente

Die Berechnung effektiver Spannungs-Verzerrungsbeziehungen auf der mikroskopischen Strukturebene von FKV soll auf Basis von repräsentativen Volumenelementen (RVE) erfolgen. In Verbindung mit der Finiten-Elemente-Methode erlaubt dieser Ansatz die Berücksichtigung beliebiger geometrischer Strukturen sowie Verbundbestandteile. Entsprechend seines Namens sollte ein RVE die wesentliche Aufteilung des Verbundes in seine konstitutiven Bestandteile sowie deren Anordnung wiedergeben. Für eine regellose Verteilung der Verbundbestandteile kann hierfür ein Ausschnitt aus der lokalen Materialstruktur erstellt werden, der eine statistische Verteilung aufweist. Kann demgegenüber in der lokalen Anordnung der Verbundbestandteile eine periodisch wiederkehrendes Muster erkannt werden, ist es möglich, die lokale Struktur durch ein idealisiertes Geometriemodell anzunähern. Beispielhaft ist dies in Abb. 1.7 für eine unidirektionale hexagonale Anordnung der Verstärkungsfasern auf Mikroebene dargestellt. Unter der Voraussetzung der periodischen Fortsetzbarkeit des RVE können für die Mikrostruktur zwei unterschiedliche repräsentative Ausschnitte identifiziert werden.

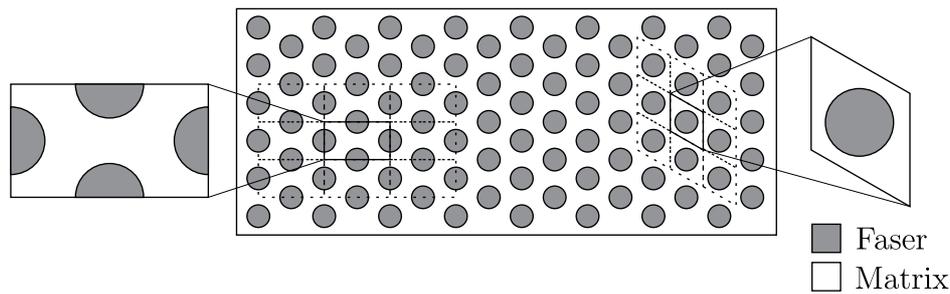


Abbildung 1.7: Identifikation eines RVE am Beispiel einer unidirektionalen hexagonalen Anordnung der Verstärkungsfasern.

1.3.2 Ermittlung effektiver Spannungs-Verzerrungsbeziehungen

Für die Berechnung effektiver Spannungs-Verzerrungsbeziehungen auf Basis von RVE-Modellen der lokalen Materialstruktur bedarf es eines physikalisch sinnvollen Zusammenhangs zwischen den integralen, effektiven Spannungen $\bar{\sigma}$ und Verzerrungen $\bar{\varepsilon}$ und den Spannungs- $\sigma(\mathbf{x})$ und Verzerrungsfeldern $\varepsilon(\mathbf{x})$ innerhalb des RVE-Modells. Ein möglicher Zusammenhang ergibt sich aus der Mittelwertbildung über das Gebiet des RVE \mathcal{B}^{RVE} . Mit V^{RVE} dem Volumen des RVE gilt für das volumetrische Mittel des Verzerrungstensors

$$\{\varepsilon(\mathbf{x})\} = \frac{1}{V^{\text{RVE}}} \int_{\mathcal{B}^{\text{RVE}}} \varepsilon(\mathbf{x}) dV, \quad (1.1)$$

des Spannungstensors

$$\{\sigma(\mathbf{x})\} = \frac{1}{V^{\text{RVE}}} \int_{\mathcal{B}^{\text{RVE}}} \sigma(\mathbf{x}) dV, \quad (1.2)$$

sowie der inneren Arbeit

$$\{\sigma(\mathbf{x}) : \varepsilon(\mathbf{x})\} = \frac{1}{V^{\text{RVE}}} \int_{\mathcal{B}^{\text{RVE}}} \sigma(\mathbf{x}) : \varepsilon(\mathbf{x}) dV. \quad (1.3)$$

Die Mittelwertgrößen erlauben die Formulierung eines Äquivalenzkriteriums nach Hill (1963, 1972)

$$\bar{\sigma} : \delta\bar{\varepsilon} = \{\sigma(\mathbf{x}) : \delta\varepsilon(\mathbf{x})\}. \quad (1.4)$$

Dieses besagt, dass die virtuelle Arbeit der effektiven inneren Lasten $\bar{\sigma} : \delta\bar{\varepsilon}$ äquivalent des volumetrischen Mittelwerts $\{\sigma(\mathbf{x}) : \delta\varepsilon(\mathbf{x})\}$ nach (1.3) ist. Unter Vorgabe der effektiven Spannung oder Verzerrung kann damit anhand von

$$\bar{\sigma} = \{\sigma(\mathbf{x})\}, \quad (1.5)$$

$$\bar{\varepsilon} = \{\varepsilon(\mathbf{x})\} \quad (1.6)$$

eine effektive Spannungs-Verzerrungsbeziehung berechnet werden. Die hierfür notwendigen Randbedingungen für das numerische Modell können durch eine Modifikation der Mittelungsformeln

(1.1) und (1.2) bestimmt werden. Sie können unter Ausnutzung der Definition des infinitesimalen Verzerrungstensors (2.4) sowie der Spannungstensor-Spannungsvektorbeziehung $\mathbf{t} = \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}$ in die entsprechenden Randintegrale

$$\{\varepsilon_{ij}(\mathbf{x})\} = \frac{1}{2V^{\text{RVE}}} \int_{\partial\mathcal{B}^{\text{RVE}}} (u_i n_j + u_j n_i) dA \quad (1.7)$$

und

$$\{\sigma_{ij}(\mathbf{x})\} = \frac{1}{2V^{\text{RVE}}} \int_{\partial\mathcal{B}^{\text{RVE}}} t_j x_i dA \quad (1.8)$$

überführt werden (Kästner (2009)). Hierbei ist \mathbf{u} der Verschiebungsvektor, \mathbf{n} der nach außen gerichtete Einheitsnormalenvektor und \mathbf{t} der Spannungsvektor auf dem Rand des RVE. Zur Sicherung von (1.7) und (1.8) können neben konstanten Spannungsvektorrandbedingungen und linearen Verschiebungsrandbedingungen auch periodische Randbedingungen vorgegeben werden. Letztere eignen sich besonders für die Modellierung sich periodisch fortsetzender RVE. Das Verschiebungsfeld auf dem Rand des Modells $\mathbf{x} \in \partial\mathcal{B}^{\text{RVE}}$

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{u}^{\text{P}}(\mathbf{x}) \quad (1.9)$$

setzt sich zusammen aus einem Term mit der vorgegebenen effektiven Verzerrung $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$ und dem periodischen Verschiebungsanteil $\mathbf{u}^{\text{P}}(\mathbf{x})$. Für ihn gilt entsprechend Abb. 1.8 (a)

$$\mathbf{u}^{\text{P}}(\mathbf{x}^{i+}) = \mathbf{u}^{\text{P}}(\mathbf{x}^{i-}), \quad \text{mit } \mathbf{x}^{i+} \in \partial\mathcal{B}^{\text{RVE},i+} \text{ und } \mathbf{x}^{i-} \in \partial\mathcal{B}^{\text{RVE},i-}. \quad (1.10)$$

Die Periodizität der Verschiebungen führt dabei zu einem antiperiodischen Verlauf der Spannungsvektoren auf gegenüberliegenden Rändern. Die Umsetzung der periodischen Randbedingungen im Rahmen der Finiten-Elemente-Methode (vgl. Kapitel 3) erfolgt durch die Definition sogenannter Masterknoten. Entsprechend der Darstellung in Abb. 1.8 (b) wird für jedes Paar gegenüberliegender Seiten ein Masterknoten M_i definiert. Für dessen Verschiebung \mathbf{u}^{M_i} gilt

$$\mathbf{u}^{M_i} = \mathbf{u}(\mathbf{x}^{i+}) - \mathbf{u}(\mathbf{x}^{i-}). \quad (1.11)$$

Die Zwangsbedingung erlaubt, durch die Vorgabe der Verschiebung an dem Masterknoten, die Generierung einer Relativverschiebung an gegenüberliegenden Seiten des RVE. Unter Ausnutzung des Prinzips der virtuellen Arbeit kann gezeigt werden, dass der effektive Spannungstensor $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$ direkt aus den Reaktionskräften der Masterknoten F^{M_i} berechnet werden kann. Für die einzelnen Komponenten des Spannungstensors gilt

$$\bar{\sigma}_{ij} = \frac{F_j^{M_i}}{A^i}, \quad (1.12)$$

mit A^i der Fläche der RVE-Seite, die dem Masterknoten M_i zugeordnet ist.

Das zuvor definierte Verfahren kann zur Bestimmung der Auswirkungen eines effektiven makroskopischen Beanspruchungszustandes auf die Mikro- und Mesoebene verwendet werden. Die

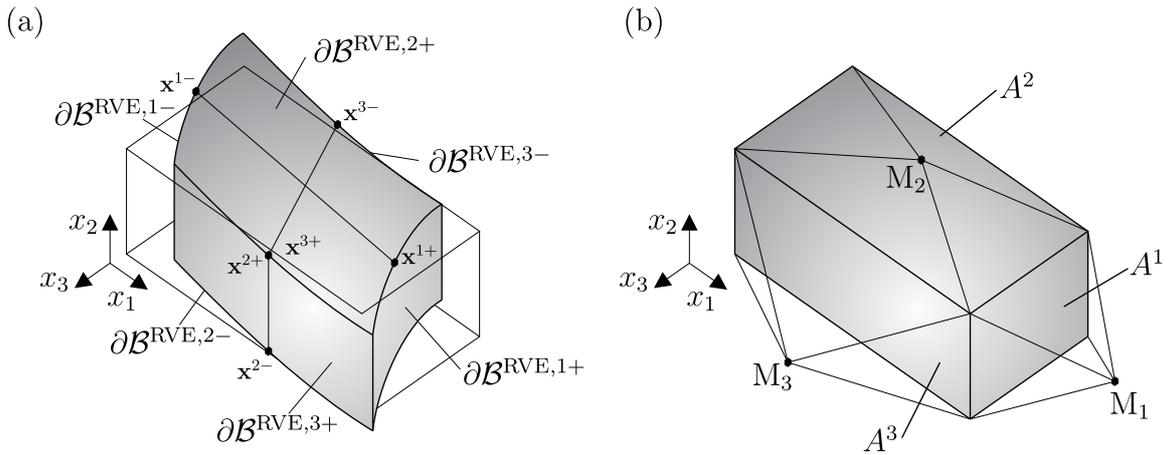


Abbildung 1.8: Periodische Randbedingungen: (a) Periodizität der Verschiebungen an gegenüberliegenden Rändern und (b) Definition der Masterknoten M_i zur effizienten Vorgabe effektiver Lasten oder Deformationen.

Vorgabe effektiver Spannungen $\bar{\sigma}$ oder Verzerrungen $\bar{\varepsilon}$ erlaubt darüber hinaus die Berechnung effektiver Spannungs-Verzerrungsbeziehungen. Die ermittelte effektive Materialantwort ergibt sich nach (1.1) und (1.2) aus den gemittelten lokalen Spannungs- und Verzerrungsfeldern.

Das Verfahren soll in Kapitel 6 zum Vergleich des effektiven Materialverhaltens mit den experimentellen Ergebnissen einachsiger Zugversuche an unidirektional (UD) verstärkten Verbundproben (vgl. Abschnitt 1.2) verwendet werden. Die Periodizität eines UD-Verbundes erlaubt dabei den Vergleich des experimentell beobachteten makroskopischen Materialverhaltens mit der effektiven Materialantwort eines mikroskopischen RVE-Modells der lokalen Materialstruktur. Der effektive Beanspruchungszustand ergibt sich aus den Randbedingungen des einachsigen Zugversuchs. Für den Verzerrungszustand gilt mit der effektiven Längsdehnung $\bar{\varepsilon}$ in x_1 -Richtung

$$\bar{\varepsilon}_{11} = \bar{\varepsilon}, \bar{\varepsilon}_{22} \neq 0, \bar{\varepsilon}_{33} \neq 0, \bar{\varepsilon}_{ij} = 0 \text{ für } i \neq j. \quad (1.13)$$

In hinreichendem Abstand zur Einspannung der Zugprobe (vgl. Abb. 1.9 (a)) ergibt sich aufgrund der freien Probenränder der einachsige Spannungszustand

$$\bar{\sigma}_{11} = \bar{\sigma}, \bar{\sigma}_{ij} = 0 \text{ sonst.} \quad (1.14)$$

In Abhängigkeit der Orientierung der Verstärkungsfasern α relativ zur Belastungsrichtung, lassen sich aus der mikroskopischen Materialstruktur des UD-Verbundes geeignete RVE-Modelle ableiten. Beispielhaft ist dies in Abb. 1.9 (b) für die Faserorientierungen $\alpha = 90^\circ$ und $\alpha = 45^\circ$ dargestellt.

Unter Vorgabe der effektiven Längsdehnung $\bar{\varepsilon}$ gelten für die Verschiebungen des Masterknotens M_1

$$u_1^{M_1} = \bar{\varepsilon} D_1, \quad (1.15)$$

mit D_1 der Länge des RVE in x_1 -Richtung. Zur Behinderung der Starrkörperbewegungen werden zusätzlich ausgewählte Verschiebungskomponenten an Knoten im Gebiet des RVE zu Null

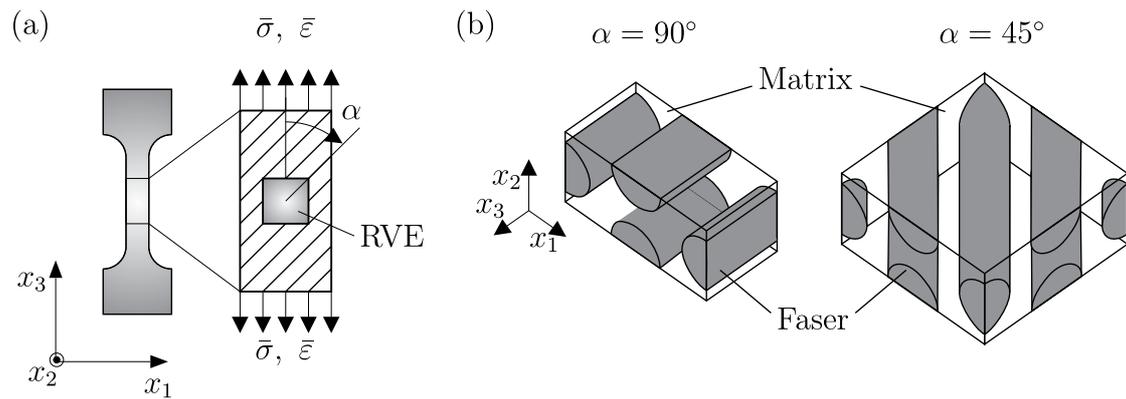


Abbildung 1.9: Ableitung geeigneter RVE-Modelle zur Abbildung einer makroskopischen einachsigen Zugbelastung: (a) Probenausschnitt mit einachsigen Spannungszustand und (b) mögliche RVE-Modelle der mikroskopischen Materialstruktur für Faserorientierung von $\alpha = 90^\circ$ und $\alpha = 45^\circ$.

gesetzt. Die effektive Spannung $\bar{\sigma}$ folgt mit (1.12) aus der Reaktionskraft am Masterknoten M_1

$$\bar{\sigma} = \bar{\sigma}_{11} = \frac{F_1^{M_1}}{A^1}. \quad (1.16)$$

2 Kontinuumsmechanik

Die Formulierung eines mechanischen Feldproblems auf Basis der Kontinuumsmechanik erfordert drei wesentliche Gleichungssätze: die kinematischen Beziehungen, die Bilanzgleichungen und die Materialgleichungen. Während die beiden Erstgenannten umfassend in den Abschnitten 2.1 und 2.2 dargestellt werden, bietet Abschnitt 2.3 lediglich einen allgemeinen Einblick in die Materialtheorie. Die konkrete Formulierung der Materialgleichungen ist Gegenstand des eigenständigen Kapitels 5.

2.1 Kinematik

Die Definition kinematischer Beziehungen dient der Beschreibung der Bewegung eines Körpers und der möglichen, daraus resultierenden Verzerrungen. Die definierten Größen und deren zeitliche Ableitung werden in den folgenden Abschnitten für die Formulierung der Bilanzgleichungen und der konstitutiven Beziehungen verwendet. Die Ausführungen orientieren sich an der Darstellung von Wriggers (2001) und sind detaillierter in Truesdell und Noll (2004) und Haupt (2002) zu finden.

Allgemeine kinematische Zusammenhänge

Ausgangspunkt für die Beschreibung der Bewegung und der Deformation eines homogenen Körpers \mathcal{K} , als Teilgebiet des Euklidischen Raumes $\mathcal{K} \subset \mathbb{R}^3$, ist die Definition einer beliebigen Konfiguration $\varphi: \mathcal{K} \rightarrow \mathbb{R}^3$

$$\mathbf{x} = \varphi(\mathbf{X}, t), \quad (2.1)$$

welche die Momentankonfiguration eines Punktes zum Zeitpunkt t beschreibt. Sie bezieht sich auf die Referenzkonfiguration \mathbf{X} , die beliebig gewählt werden kann. In der praktischen Anwendung wird hierfür meist die Ausgangskonfiguration zum Zeitpunkt t_0 , die zu Beginn eines Deformationsprozesses vorliegt, verwendet. Die Differenz der Ortsvektoren von Momentan- und Ausgangskonfiguration definiert den Verschiebungsvektor

$$\mathbf{u}(\mathbf{X}, t) = \varphi(\mathbf{X}, t) - \mathbf{X}. \quad (2.2)$$

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wird eine geometrisch lineare Theorie verfolgt. D.h. bezogen auf eine charakteristische Länge des betrachteten Körpers $l_{\mathcal{K}}$ sind die auftretenden Deformationen und Rotationen klein. Für den Verschiebungsgradienten $\mathbf{H} = \nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{u}$ bedeutet dies

$$\delta_{\mathbf{H}} = \|\mathbf{H}\| = \sqrt{\mathbf{H} : \mathbf{H}} \ll 1. \quad (2.3)$$

Anhand von (2.2) ist weiterhin zu erkennen, dass die Momentankonfiguration und die Ausgangskonfiguration sehr dicht beieinander liegen. Bei der Definition von Feldgrößen und Feldgleichungen kann daher auf eine Unterscheidung hinsichtlich des Bezugs auf die Momentankonfiguration bzw. auf die Ausgangskonfiguration verzichtet werden. Im Folgenden beziehen sich alle Feldgleichungen auf den Ortsvektor \mathbf{x} und die Zeit t . Bei der Definition eines Verzerrungsmaß können ferner Terme höherer Ordnung vernachlässigt werden. Dies führt zur Definition des technischen (linearen) Verzerrungstensors

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2} (\mathbf{H} + \mathbf{H}^T) = \nabla^s \mathbf{u} \quad (2.4)$$

mit dem symmetrischen Anteil des Gradienten ∇^s .

Erweiterte kinematische Zusammenhänge heterogener Körper

Die kinematische Beschreibung des Körpers \mathcal{K} durch die Definitionen (2.2) und (2.4) muss für die Modellierung heterogener Körper erweitert werden (Hettich (2007)). Hierfür wird angenommen, dass sich der Körper \mathcal{K} mit dem Gebiet \mathcal{B} und dem Volumen V in eine beliebige Anzahl von Teilkörpern aufteilt, die den beiden Festkörperphasen \mathcal{K}_a und \mathcal{K}_b zugeordnet werden können (vgl. Abb. 2.1 (a)). Die Gesamtheit aller Grenzflächen $\partial\mathcal{B}$ zwischen den beiden Festkörperphasen setzt sich aus Teilen ungeschädigter Grenzflächen $\partial\mathcal{B}_i^m$ und Teilen, an denen diskrete Risse auftreten $\partial\mathcal{B}_j^c$ zusammen. Für die Grenzfläche $\partial\mathcal{B}^m = \bigcup_{i=1}^{n_m} \partial\mathcal{B}_i^m$ wird gefordert, dass die Verschiebung kon-

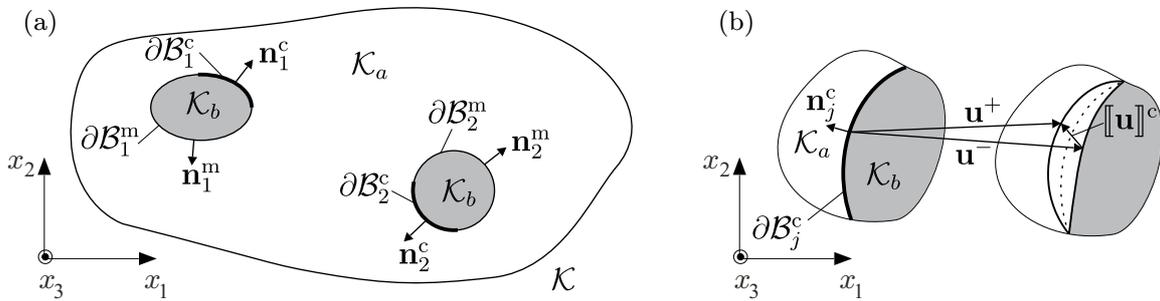


Abbildung 2.1: (a) Definition des Körpers \mathcal{K} und dessen innere Struktur. (b) Kinematik des Grenzflächenrisses.

tinuierlich, der Gradient der Verschiebung jedoch diskontinuierlich ist. Dies soll im Folgenden auch als schwache Unstetigkeit bezeichnet werden. Im Gegensatz dazu führen die an der Grenzfläche $\partial\mathcal{B}^c = \bigcup_{j=1}^{n_c} \partial\mathcal{B}_j^c$ auftretenden Risse zu einer Diskontinuität im Verschiebungsfeld und damit zu einer starken Unstetigkeit. Die zu definierende Abbildungsfunktion für das Verschiebungsfeld muss in der Lage sein, den durch den Riss induzierten Verschiebungssprung

$$[[\mathbf{u}]]^c = \mathbf{u}^+ - \mathbf{u}^- \quad \text{auf} \quad \partial\mathcal{B}^c \quad (2.5)$$

abzubilden (vgl. Abb. 2.1 (b)). Die Gesamtheit der kinematischen Anforderungen an das Verschiebungsfeld führt zu einem erweiterten Verschiebungsvektor

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \hat{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t) + \sum_{i=1}^{n_m} F_i^m(\mathbf{x}) \hat{\mathbf{a}}_i(\mathbf{x}, t) + \sum_{j=1}^{n_c} F_j^c(\mathbf{x}) \hat{\mathbf{b}}_j(\mathbf{x}, t). \quad (2.6)$$

Er setzt sich aus dem gewöhnlichen, kontinuierlichen Anteil $\hat{\mathbf{u}}$, den mit den ungeschädigten Grenzflächen assoziierten Anteilen $\hat{\mathbf{a}}_i$ und den mit den Grenzflächenrissen einher gehenden Anteilen $\hat{\mathbf{b}}_j$ zusammen. Da alle Teilvektoren kontinuierliche Funktionen darstellen, müssen die zuvor formulierten Kontinuitätsanforderungen durch eine entsprechende Wahl der skalarwertigen Funktionen F_i^m und F_j^c realisiert werden. Die konkreten Funktionen sind in Kapitel 3 im Rahmen der Einführung in die erweiterte Finiten-Elemente-Methode angegeben.

Wie im vorhergehenden Abschnitt erwähnt, beschränkt sich die vorliegende Arbeit auf eine geometrisch lineare Theorie. Als Verzerrungsmaß dient daher der technische Verzerrungstensor (2.4). Mit der Definition des erweiterten Verschiebungsfeldes (2.6) entspricht dieser

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \nabla^s \hat{\mathbf{u}} + \sum_{i=1}^{n_m} [(\nabla F_i^m \otimes \hat{\mathbf{a}}_i)^s + F_i^m \nabla^s \hat{\mathbf{a}}_i] + \sum_{j=1}^{n_c} [(\nabla F_j^c \otimes \hat{\mathbf{b}}_j)^s + F_j^c \nabla^s \hat{\mathbf{b}}_j]. \quad (2.7)$$

Der Index s bezeichnet dabei den symmetrischen Anteil des entsprechenden Terms.

2.2 Kinetik und Bilanzgleichungen

Neben den bereits formulierten kinematischen Zusammenhängen bedarf die kontinuumsmechanische Beschreibung des Zustands des Körpers \mathcal{K} weiterer physikalischer Zustandsgrößen. Sie bilden die Basis für integrale Bilanzgleichungen, die unter der Voraussetzung, dass es sich um hinreichend glatte Feldgrößen handelt, in lokale Formen für differentielle Teilgebiete überführt werden können. Für die Beschreibung des mechanischen Feldproblems sind die Massebilanz, die Impulsbilanz, die Drehimpulsbilanz sowie der 1. und 2. Hauptsatz der Thermodynamik erforderlich. Sie sind ausführlich unter anderem in Haupt (2002) angegeben. Im folgenden sollen lediglich die im Rahmen der vorliegenden Arbeit erforderlichen Gleichungen angegeben werden.

Die Masse

$$m = \int_{\mathcal{B}} \rho \, dV \quad (2.8)$$

als Volumenintegral der Dichte ρ ist eine grundlegende Eigenschaft des Körpers \mathcal{K} . Da im vorliegenden Fall keinerlei Masseströme bzw. Massequellen und -senken berücksichtigt werden, gilt für die zeitliche Ableitung $\dot{m} = 0$. Lokal gilt im Fall einer geometrisch linearen Theorie $\rho = \text{konst.}$

Die Impulsbilanz folgt aus der Bilanzierung der zeitlichen Änderung des Impulses infolge an dem Körper angreifender äußerer Oberflächen- \mathbf{t} und Massenkräfte \mathbf{f} . Die lokale Form folgt aus der Anwendung des GAUSSSchen Integralsatzes und der Einführung des Spannungstensors $\boldsymbol{\sigma}$, des Normalenvektors \mathbf{n} , der Definition des Spannungsvektors $\mathbf{t} = \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}$ und weiterer Annahmen

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{f} = \rho \ddot{\mathbf{u}} \quad \forall \mathbf{x} \in \mathcal{B}. \quad (2.9)$$

Im statischen Fall entfällt der Trägheitsterm und (2.9) geht in die Gleichgewichtsbedingung

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{f} = \mathbf{0} \quad \forall \mathbf{x} \in \mathcal{B} \quad (2.10)$$

über.

Die Drehimpulsbilanz bilanziert analog zur Impulsbilanz die zeitliche Änderung des Drehimpulses in Abhängigkeit aller an dem Körper von außen angreifender Momente. Aus der lokalen Form folgt unter Ausnutzung der Impulsbilanz die Symmetrie des Spannungstensors $\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}^T$.

Die verbleibenden Bilanzen, der 1. und 2. Hauptsatz der Thermodynamik, dienen der Kopplung unterschiedlicher Feldprobleme sowie der Sicherung der thermodynamischen Zulässigkeit.

2.3 Materialgleichungen

Die vollständige kontinuumsmechanische Beschreibung eines Randwertproblems verlangt neben den bereits eingeführten kinematischen Beziehungen und den Bilanzen einen weiteren Satz von Gleichungen, der die individuellen Materialeigenschaften des betrachteten Körpers definiert. Die Notwendigkeit zusätzlicher Beziehungen erschließt sich ebenfalls aus der mathematischen Betrachtung der zuvor definierten Bilanzgleichungen. Hierbei übersteigt die Anzahl der eingeführten abhängigen Variablen die der Bilanzgleichungen.

Für ein rein mechanisches Feldproblem liefert die Definition einer Spannungs-Verzerrungsbeziehung sechs zusätzliche Gleichungen. Sie lässt sich in ihrer allgemeinsten Form als ein Funktional

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t) = \mathfrak{F}_{\tau \leq t} [\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}, \tau)] \quad (2.11)$$

angeben. Sie genügt der Definition eines einfachen Materials bei dem der aktuelle Spannungszustand eines Punktes lediglich von der Deformationsgeschichte in seiner differentiellen Umgebung abhängig ist. Entsprechende Materialgleichungen sind dadurch auf beliebigen Längenskalen einsetzbar.

Für die Definition eines Materialmodells bei dem es aufgrund von verzerrungsgesteuerten Schädigungsprozessen zu einer starken Lokalisierung der Deformation kommt, führt dieses Prinzip der lokalen Wirkung jedoch zu einem unphysikalischen Materialverhalten (Bažant (1976); Kuhl (2000)). Abhilfe schafft die Definition einer charakteristischen Längenskala innerhalb der konstitutiven Gleichungen, welche der Limitierung der Lokalisierungszone dient (Bažant und Jirásek (2002)). Entsprechende Spannungs-Verzerrungsbeziehungen lassen sich allgemein durch eine Erweiterung von (2.11)

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t) = \mathfrak{F}_{\tau \leq t, \mathbf{y} \in \Omega_{\text{NL}}} [\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{y}, \tau)] \quad (2.12)$$

angeben. Die Spannungszustand eines Punktes ist hierbei zusätzlich abhängig von der Deformationsgeschichte in einer zu definierenden nichtlokalen Umgebung Ω_{NL} .

Ein Spezialfall von (2.11) bilden Kohäsivzonenmodelle. Hierbei erfolgt die Definition eines an einer Grenzfläche übertragbaren Spannungsvektors als ein Funktional

$$\mathbf{t}^c(\mathbf{x}, t) = \mathfrak{F}_{\tau \leq t} [[\mathbf{u}]^c(\mathbf{x}, \tau), \mathbf{q}(\mathbf{x}, \tau)] \quad (2.13)$$

in Abhängigkeit des zeitlichen Verlaufs des Verschiebungssprungs $[[\mathbf{u}]]^c$ und einem Satz innerer Variablen \mathbf{q} (vgl. Abb. 2.1 (b)).

Die Allgemeinheit der Materialgleichungen (2.11) – (2.13) erlaubt die Abbildung nichtlinearer Zusammenhänge zwischen den Spannungen und den Deformationen. Dieses Verhalten wird im Verlauf der Arbeit allgemein als materielle oder physikalische Nichtlinearität bezeichnet.

2.4 Randwertproblem

Für die Berechnung eines mechanischen Randwertproblems auf Basis der Kontinuumsmechanik ist das Lösen eines gekoppelten Differentialgleichungssystems – bestehend aus den kinematischen Beziehungen, den Bilanzgleichungen und den Materialgleichungen – erforderlich. Da es sich bei einem Teil der Gleichungen um partielle Differentialgleichungen handelt, ist zusätzlich ein kompletter Satz von Rand- und Übergangsbedingungen zu formulieren.

Der äußere Rand des Körpers $\partial\mathcal{B}$ teilt sich auf in einen Teil, auf dem die Verschiebung

$$\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} \quad \forall \mathbf{x} \in \partial\mathcal{B}^u \quad (2.14)$$

als wesentliche Randbedingung und in einen Teil, auf dem der Spannungsvektor

$$\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \bar{\mathbf{t}} \quad \forall \mathbf{x} \in \partial\mathcal{B}^t \quad (2.15)$$

als natürliche Randbedingung vorgegeben wird.

An den Grenzflächen zwischen den Materialphasen werden Übergangsbedingungen in der Form von Forderungen an die Kontinuität des Spannungsvektors gestellt. Für die Gesamtheit aller ungeschädigten Ränder $\partial\mathcal{B}^m$ gilt

$$\mathbf{n}^m \cdot [[\boldsymbol{\sigma}]] = \mathbf{0} \quad \text{und} \quad [[\mathbf{u}]] = 0 \quad \forall \mathbf{x} \in \partial\mathcal{B}^m \quad (2.16)$$

mit dem Sprungoperator $[[A]] = A^b - A^a$. Für die Gesamtheit der inneren Grenzflächen, an denen Risse auftreten $\partial\mathcal{B}^c$ gilt entsprechend der Kohäsivzonentheorie

$$\mathbf{n}^c \cdot \boldsymbol{\sigma}^a = \mathbf{n}^c \cdot \boldsymbol{\sigma}^b = \mathbf{t}^c \quad \forall \mathbf{x} \in \partial\mathcal{B}^c. \quad (2.17)$$

Dabei wird die übertragbare Spannung \mathbf{t}^c durch ein materialspezifisches Kohäsivzonenmodell (*cohesive zone model* oder *traction separation law* (TSL)) bestimmt (vgl. Abschnitt 5.3). Da eine analytische Lösung des Gleichungssystems nur für wenige Spezialfälle möglich ist, soll das Problem nun in die schwache Form überführt werden, die eine Lösung mittels der Finiten-Elemente-Methode ermöglicht. Ausgangspunkt bildet die lokale Form der Impulsbilanz für den statischen Fall (2.10), die skalar mit einer vektoriellen Funktion $\delta\mathbf{u}$ multipliziert und über das Volumen des Körpers integriert wird

$$\int_{\mathcal{B}} (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}) \cdot \delta\mathbf{u} \, dV + \int_{\mathcal{B}} (\rho \mathbf{f}) \cdot \delta\mathbf{u} \, dV = 0. \quad (2.18)$$

Die Funktion $\delta \mathbf{u}$, häufig auch virtuelle Verschiebung oder Wichtungsfunktion genannt, darf dabei die wesentlichen Randbedingungen nicht verletzen ($\delta \mathbf{u} = \mathbf{0} \quad \forall \mathbf{x} \in \partial \mathcal{B}^u$) und muss den Stetigkeitsanforderungen der Verzerrungs-Verschiebungsbeziehung (2.4) genügen.

Durch partielle Integration des ersten Terms in (2.18), Anwendung des GAUSSschen Integral-satzes und Einarbeitung der natürlichen Randbedingung (2.15) ergibt sich die schwache Form der Randwertaufgabe (Wriggers (2001))

$$\int_{\mathcal{B}} \boldsymbol{\sigma} : \nabla^s \delta \mathbf{u} \, dV - \int_{\mathcal{B}} (\rho \mathbf{f}) \cdot \delta \mathbf{u} \, dV - \int_{\partial \mathcal{B}^t} \bar{\mathbf{t}} \cdot \delta \mathbf{u} \, dA = 0. \quad (2.19)$$

3 Diskretisierung, Linearisierung und Algebraisierung des Randwertproblems

Die Lösung des in Abschnitt 2.4 formulierten Randwertproblems (RWP) (2.19) soll im Rahmen der vorliegenden Arbeit auf Basis der erweiterten Finite-Elemente-Methode (XFEM) erfolgen. Die XFEM erlaubt die effiziente Modellierung der in Abschnitt 2.1 dargestellten kinematischen Felder innerhalb heterogener Körper. Im Gegensatz zur gewöhnlichen FEM, bei der die Vernetzung an den Verlauf der Diskontinuitäten angepasst werden muss, erlaubt die XFEM die Abbildung von starken (Risse) und schwachen (Materialgrenzen) Unstetigkeiten im Verschiebungsfeld unabhängig von der zugrunde liegenden Vernetzung. Die wesentlichen Zusammenhänge der Methode sind in Abschnitt 3.1 dargestellt. Die Entwicklung einer verbesserten XFEM auf Basis höherwertiger Elementformulierungen ist demgegenüber Gegenstand von Kapitel 4. In den Abschnitten 3.2 und 3.3 erfolgt die Diskretisierung und Linearisierung des Randwertproblems, bevor in Abschnitt 3.4 eine effiziente programmiertechnische Umsetzung vorgestellt wird. Sie kombiniert die Vorteile leistungsstarker Hauptprozessoren (CPU) mit denen moderner Grafikprozessoren (GPU).

3.1 Einführung in die erweiterte Finite-Elemente-Methode

Die erweiterte Finite-Elemente-Methode (XFEM, *eXtended Finite Element Method*) basiert auf dem *Partition of Unity* (PU) Konzept von Babuška u. a. (1994) und ist eng verwandt mit dessen Anwendung im Rahmen der PU-Methode (Babuška und Melenk (1997), PUM) bzw. PUFEM (Melenk und Babuška (1996)). Den Methoden gemein ist die globale bzw. lokale Verbesserung einer beliebigen Näherungslösung durch die gezielte Anreicherung des Ansatzraums basierend auf der Kenntnis der Eigenschaften der Lösung. Die XFEM selbst wurde zunächst von Belytschko und Black (1999) für die Modellierung von Rissen auf Basis der linearelastischen Bruchmechanik (LEBM) eingeführt. Sie erlaubt die Modellierung lokaler Unstetigkeiten im Verschiebungsfeld unabhängig von dem zugrundeliegenden FE-Netz. Der Verschiebungsansatz wurde dafür lokal mit der asymptotischen Lösung des Rissspitzennahfeldes angereichert. Eine Erweiterung der Methode durch Moës u. a. (1999) erlaubt die Abbildung längerer Risspfade. Die Anreicherung in hinreichender Entfernung zur Rissspitze erfolgt dabei auf Basis der Sprungfunktion. Die schnelle Akzeptanz der Methode führte in den folgenden Jahren zu einer Erweiterung des Anwendungsgebietes auf verschiedenste Problemstellungen, wie die Modellierung von Materialgrenzen

(Belytschko u. a. (2001); Sukumar u. a. (2001); Moës u. a. (2003); Käßner u. a. (2011)), von Verfestigungen (Chessa u. a. (2002)) oder von Problemen der Fluid-Struktur Kopplung (Zilian und Legay (2008)). Eine Vielzahl von Veröffentlichungen befassen sich seither mit den numerischen Eigenschaften sowie der Verbesserung der Methode. Neben den im folgenden Abschnitt angegebenen Arbeiten wurde eine umfassende Zusammenstellung zur Entwicklung der XFEM von Belytschko u. a. (2009) und von Fries und Belytschko (2010) veröffentlicht.

Die Modellierung von Unstetigkeiten innerhalb finiter Elemente erfolgt in der vorliegenden Arbeit durch die Definition spezieller X-Elemente, die die gewöhnlichen Elemente in Bereichen der Diskontinuität ersetzen. Wie in Abbildung Abb. 3.1 dargestellt, richtet sich die Wahl der Anreicherung nach der Art der Unstetigkeit.

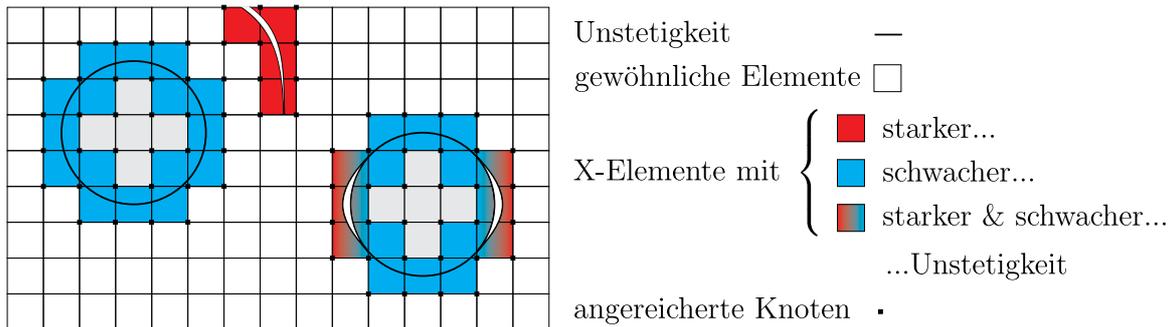


Abbildung 3.1: FE-Netz mit gewöhnlichen Elementen und X-Elementen und deren Einteilung nach der Art der Unstetigkeit.

Die den X-Elementen zugeordneten Knoten weisen im Allgemeinen eine größere Anzahl von Freiwerten auf als die gewöhnlicher Elemente. Während dies keinerlei Auswirkung auf die strukturellen Eigenschaften der Gesamtsteifigkeitsmatrix hat, führt es in Abhängigkeit von der Anreicherungsfunktion zu einer lokalen Verletzung der Kontinuität zwischen angereicherten und nicht angereicherten Elementen (Verlust der *partition of unity*). Der damit einhergehende Genauigkeitsverlust sowie das suboptimale Konvergenzverhalten kann durch die Berücksichtigung von Übergangselementen kompensiert werden (Chessa u. a. (2003); Fries (2008)). Alternativ kann die Kontinuität auch durch die gezielte Wahl der Anreicherungsfunktion sichergestellt werden. Die von Zi und Belytschko (2003) vorgestellte Anreicherungsfunktion für starke Unstetigkeiten gewährleistet das Verschwinden der Anreicherung auf Elementkanten, die nicht von der Diskontinuität geschnitten werden. Das Verschiebungsfeld angrenzender gewöhnlicher Elemente ist damit unbeeinflusst von den zusätzlichen Freiheitsgraden der angereicherten Elemente. Dieselben positiven Kontinuitätseigenschaften weist die von Moës u. a. (2003) veröffentlichte Anreicherungsfunktion für schwache Unstetigkeiten auf. Beide Anreicherungsfunktionen sind in Abschnitt 3.1.2 angegeben und werden im Rahmen der vorliegenden Arbeit verwendet.

Der von der Vernetzung unabhängige Verlauf der Diskontinuitäten macht es erforderlich, für deren Lokalisierung alternative Verfahren anzuwenden. Beginnend mit den Arbeiten von Belytschko u. a. (2001), Sukumar u. a. (2001) und Stolarska u. a. (2001) wird hierfür häufig die Level-Set (LS)-Methode von Osher und Sethian (1988) angewendet. Bei diesem, ursprünglich

für die Modellierung und Verfolgung von Grenzflächen angewendeten Verfahren, wird der Verlauf der Diskontinuität durch eine implizite Funktion dargestellt. Die Grundlagen der LS-Methode im Zusammenhang mit der XFEM sind in Abschnitt 3.1.1 zusammengefasst. Die konkrete numerische Umsetzung, speziell für die Beschreibung gekrümmter Unstetigkeiten, sowie die Ableitung der LS-Funktion aus Geometriedaten ist Gegenstand von Abschnitt 4.1.

Die Approximation diskontinuierlicher Verschiebungs- und Verzerrungsfelder innerhalb der angereicherten Elemente verhindert eine direkte Anwendung von Standardquadraturregeln auf das gesamte Elementgebiet. Für die entsprechenden Elemente müssen daher angepasste Integrationsmethoden entwickelt werden. Eine Auswahl von Verfahren und deren Vergleich hinsichtlich der numerischen Eigenschaften ist in Abschnitt 4.2 gegeben.

3.1.1 Lokalisierung von Unstetigkeiten

Die Lokalisierung von Unstetigkeiten im Rahmen der XFEM soll in der vorliegenden Arbeit durch die von Osher und Sethian (1988) eingeführte Level-Set-Methode erfolgen. Basis des Verfahrens ist die implizite Beschreibung einer Fläche $\partial\mathcal{B}(t) \subset \mathbb{R}^3$ durch die Funktion $\varphi : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$

$$\partial\mathcal{B}(t) = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 \mid \varphi(\mathbf{x}, t) = 0\}. \quad (3.1)$$

Eine Funktion, die diesen Anforderungen genügt, ist der vorzeichenbehaftete Abstand (*signed distance function*)

$$\varphi(\mathbf{x}, t) = \pm \min_{\mathbf{x}_{\partial\mathcal{B}} \in \partial\mathcal{B}(t)} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\partial\mathcal{B}}\|, \quad (3.2)$$

die im Folgenden als Level-Set (LS)-Funktion bezeichnet wird. Das Vorzeichen der Funktion bestimmt dabei die Lage des Punktes \mathbf{x} relativ zu der Oberfläche $\partial\mathcal{B}$. Für geschlossene Oberflächen entspricht dies einer Position innerhalb oder außerhalb des zugeordneten Gebiets \mathcal{B} . Für heterogene Körper mit mehreren Materialphasen (vgl. Abb. 3.2) wird für jede Grenzfläche $\partial\mathcal{B}_j$ eine eigenständige LS-Funktion φ_j definiert.

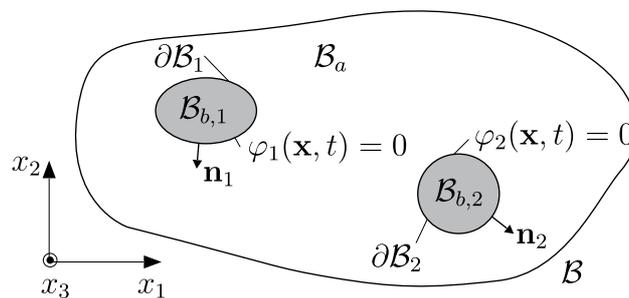


Abbildung 3.2: Heterogener Körper mit entsprechenden Level-Set-Funktionen $\varphi_j = 0$.

Für jeden Punkt \mathbf{x} gilt entsprechend

$$\varphi_j(\mathbf{x}) \begin{cases} < 0 & \text{für } \mathbf{x} \in \mathcal{B}_{b,j}, \\ = 0 & \text{für } \mathbf{x} \in \partial\mathcal{B}_j, \\ > 0 & \text{für } \mathbf{x} \in \mathcal{B} \setminus \mathcal{B}_{b,j}. \end{cases} \quad (3.3)$$

Aus der impliziten Beschreibung der Fläche lassen sich direkt grundlegende geometrische Eigenschaften ableiten. So gilt für die nach außen orientierte Flächennormale \mathbf{n}

$$\mathbf{n} = \frac{\nabla\varphi}{|\nabla\varphi|}. \quad (3.4)$$

Für die Anwendung der LS-Funktion im Rahmen der XFEM erfolgt häufig der Übergang zu einer diskreten Form. Hierbei wird der vorzeichenbehaftete Abstand eines beliebigen Punktes $\boldsymbol{\xi}$ anhand von

$$\varphi_j(\boldsymbol{\xi}) = \sum_i N_i(\boldsymbol{\xi}) \hat{\varphi}_{i,j} \quad (3.5)$$

aus den Knotenwerten $\hat{\varphi}_{i,j}$ und den von den natürlichen Elementkoordinaten $\boldsymbol{\xi}$ abhängigen Elementformfunktionen N_i berechnet.

Anhand von (3.5) ist zu erkennen, dass die Approximationsgüte der Unstetigkeit wesentlich durch die Ordnung der zugrundeliegenden Elementformfunktionen bestimmt ist. Die Verwendung von linearen Elementen liefert daher für gekrümmte Diskontinuitäten nur suboptimale Ergebnisse und verlangt nach einer feinen Diskretisierung. Die höherwertigen Elementformfunktionen sind demgegenüber in der Lage komplexe gekrümmte Verläufe bzw. Materialstrukturen besser abzubilden. Dréau u. a. (2010) und Moumnassi u. a. (2011) haben gezeigt, dass eine akkurate Beschreibung der Geometrie für eine optimale Konvergenz der Lösung substantiell ist.

In der Literatur finden sich verschiedene Ansätze zur Beschreibung gekrümmter Unstetigkeiten im Rahmen der XFEM. In Dréau u. a. (2010) erfolgt eine stückweise lineare Approximation von gekrümmten Materialgrenzen auf einem geometrischen Subnetz, das durch sukzessive lokale Unterteilung des Ursprungsnetzes im Bereich der Unstetigkeit erstellt wird. Eine höherwertige Elementformulierung für das Netz des Feldproblems stellt dabei sicher, dass die gewonnenen Grenzflächeninformationen abgebildet werden können. Das erstellte Subnetz ermöglicht weiterhin die Verwendung von Standardquadraturregeln für die Integration der angereicherten Elemente. Während gute Ergebnisse für die Beschreibung von Fehlstellen erzielt wurden, lieferte die Beschreibung von Materialgrenzen eine Verletzung der Kontinuitätseigenschaften. Für den zweidimensionalen Fall konnte dieser Umstand durch eine Korrektur der Anreicherungsfunktion beseitigt werden. Eine Verallgemeinerung des Vorgehens auf dreidimensionale Problemstellungen verbleibt jedoch ungelöst. Eine Modifikation der zuvor genannten Methode wurde von Legrain u. a. (2012) vorgestellt. Unter Verwendung der gleichen Subnetz Strategie wird die schwache Unstetigkeit der Materialgrenze jedoch durch eine HEAVISIDE-Anreicherung abgebildet. Die Kontinuitätsanforderungen an der Materialgrenze werden dabei auf Basis der NITSCHKE-Methode in die schwache Form des Randwertproblems eingebracht.

Ein alternativer Ansatz wurde von Cheng und Fries (2010) vorgestellt. Hierbei erfolgt die Approximation gekrümmter Materialgrenzen durch die Verwendung höherwertiger Formfunktionen

für die Feldvariablen und die LS-Funktion. Die Aufteilung des Elementgebiets in krummlinig berandete Integrationsbereiche sichert die Konsistenz zwischen Quadratur und dem Unstetigkeitsverlauf.

Zusammenfassend kann aus den zuvor genannten Arbeiten abgeleitet werden, dass die alleinige Verbesserung der Geometrieapproximation keine optimalen Ergebnisse liefert. Eine höherwertige XFEM Formulierung sollte daher eine konsistente Genauigkeit für Geometrie und Feldvariable aufweisen. Vor diesem Hintergrund wird in den folgenden Abschnitten eine XFEM Modellierung vorgestellt, die auf der Verwendung quadratischer Elementformulierungen basiert. Die Verwendung gleicher Formfunktionen für die Approximation der Feldvariablen und der Geometrie ermöglicht mit (3.5) die Beschreibung gekrümmter Unstetigkeiten. Für die konkrete Berechnung der LS-Knotenwerte sind in Abschnitt 4.1 zwei unterschiedlichen Ansätze sowie deren Vor- und Nachteile angegeben.

3.1.2 Approximation von Unstetigkeiten

Die numerische Lösung des in Abschnitt 2.4 formulierten Randwertproblems auf Basis der XFEM erfordert die Beschreibung diskontinuierlicher Verschiebungsfelder. Hierfür wird das kontinuierliche Standardverschiebungsfeld mit diskontinuierlichen Feldern überlagert (vgl. (2.6)). Die kinematischen Eigenschaften der Diskontinuität werden dabei durch eine sogenannte Anreicherungsfunktion bestimmt. Die Berücksichtigung schwacher (Materialgrenzen) und starker (Risse) Unstetigkeiten im Verschiebungsfeld erfordert hierbei die Definition zweier unterschiedlicher Anreicherungsfunktionen.

Schwache Unstetigkeiten

Der an Materialgrenzen auftretende Steifigkeitssprung infolge unterschiedlicher Materialeigenschaften in Kombination mit der Forderung nach Kontinuität des Spannungsvektors führt zu einer schwachen Unstetigkeit im Verschiebungsfeld. Zur Beschreibung der entsprechenden Kinematik wurde von Moës u. a. (2003) eine Anreicherungsfunktion angegeben, die den Einflussbereich der Anreicherung auf einzelne, von der Unstetigkeit geschnittene, Elemente beschränkt. Die Struktur der Funktion erlaubt dabei lediglich eine elementbezogene Notation

$$F^m = \sum_{i=1}^{n^K} N_i |\hat{\varphi}_i| - \left| \sum_{i=1}^{n^K} N_i \hat{\varphi}_i \right| \quad (3.6)$$

mit den Elementformfunktionen N_i , der n^K Elementknoten und den vorzeichenbehafteten Abständen $\hat{\varphi}_i$ der Knoten zur Unstetigkeit (vgl. Abschnitt 3.1.1). Die kinematischen Eigenschaften der Anreicherungsfunktion sind in Abb. 3.3 dargestellt. Die Überlagerung mit einer kontinuierlichen Formfunktion ermöglicht die Modellierung eines schwach diskontinuierlichen Feldes.

Starke Unstetigkeiten

Die Modellierung eines durch das Versagen der Materialstruktur hervorgerufenen Sprungs im Verschiebungsfeld verlangt nach einer weiteren Anreicherungsfunktion. Hierfür soll in der vor-

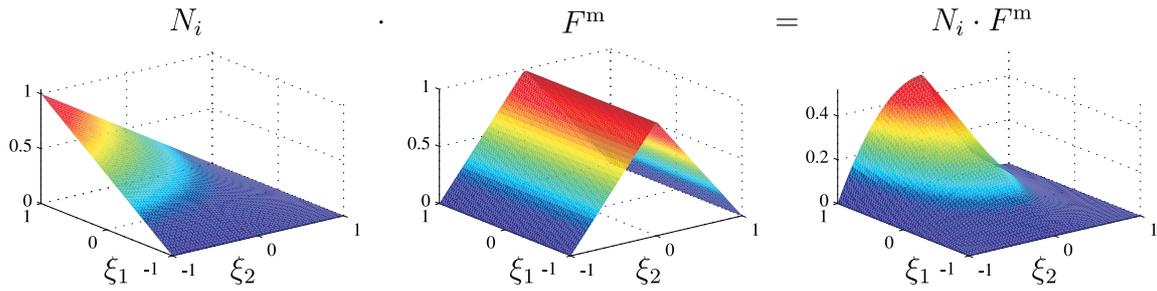


Abbildung 3.3: Modellierung eines schwach diskontinuierlichen Feldes durch die Überlagerung einer kontinuierlichen Formfunktion und der Anreicherungsfunktion (3.6).

liegenden Arbeit der Ansatz von Zi und Belytschko (2003) verwendet werden. Wie bereits bei der Anreicherungsfunktion für schwache Unstetigkeiten, kann die Funktion nur in einer elementbezogenen Notation angegeben werden. Abweichend zu (3.6) wird für jeden Elementknoten eine individuelle Funktion definiert. Für den j -ten Knoten eines angereicherten Elements gilt

$$F_j^c = \frac{1}{2} \left(\text{sign} \left(\sum_{i=1}^{n^K} N_i \hat{\varphi}_i \right) - \text{sign} (\hat{\varphi}_j) \right) \quad (3.7)$$

mit N_i und $\hat{\varphi}_i$ den Formfunktionen und den vorzeichenbehafteten Abständen der n^K Elementknoten. Die Produktbildung aller n^K Form- und Anreicherungsfunktionen sichert das Verschwinden des stark diskontinuierlichen Feldes auf den Elementkanten, die nicht von der Unstetigkeit geschnitten werden. Die Kinematik der Anreicherung ist exemplarisch in Abb. 3.4 für einen Knoten dargestellt. Der unstetige Verlauf der Anreicherungsfunktion erzeugt dabei eine starke Diskontinuität im Verlauf der Formfunktion.

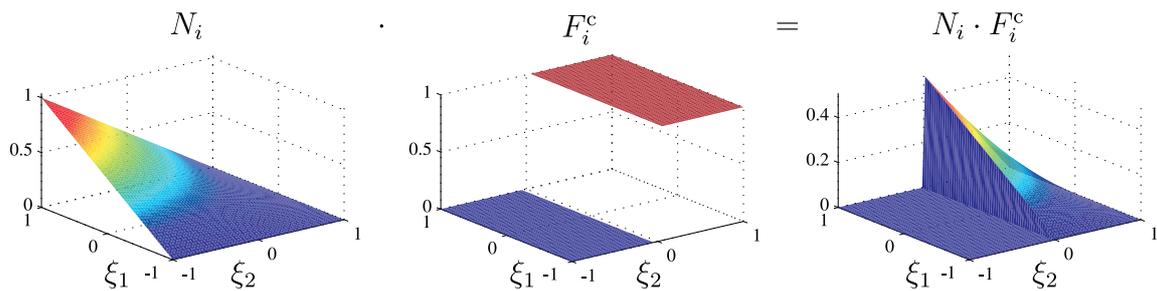


Abbildung 3.4: Modellierung eines stark diskontinuierlichen Feldes durch die Überlagerung einer kontinuierlichen Formfunktion und der Anreicherungsfunktion (3.7).

3.2 Diskretisierung

Für die in der schwachen Form des RWP (2.19) enthaltene virtuelle Verschiebung $\delta \mathbf{u}$ gelten entsprechend der GALERKIN-Methode die gleichen kinematischen Zusammenhänge und Anforderungen wie für das Standardverschiebungsfeld (2.6). Entsprechend lässt sich $\delta \mathbf{u}$ ausdrücken durch

$$\delta \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \delta \hat{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t) + \sum_{i=1}^{n_m} F_i^m(\mathbf{x}) \delta \hat{\mathbf{a}}_i(\mathbf{x}, t) + \sum_{j=1}^{n_c} F_j^c(\mathbf{x}) \delta \hat{\mathbf{b}}_j(\mathbf{x}, t), \quad (3.8)$$

als Überlagerung des kontinuierlichen Feldes $\delta \hat{\mathbf{u}}$ und der diskontinuierlichen Felder $F_i^m \delta \hat{\mathbf{a}}_i$ und $F_j^c \delta \hat{\mathbf{b}}_j$, deren Kinematik durch die Anreicherungsfunktionen F_i^m und F_j^c bestimmt wird. Das Einsetzen von (3.8) in die schwache Form (2.19), unter Vernachlässigung etwaiger Massenkkräfte, liefert zunächst

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{B}} \boldsymbol{\sigma} : \nabla^s \delta \hat{\mathbf{u}} \, dV + \sum_{i=1}^{n_m} \int_{\mathcal{B}} \boldsymbol{\sigma} : F_i^m \nabla^s \delta \hat{\mathbf{a}}_i + \boldsymbol{\sigma} : (\nabla F_i^m \otimes \delta \hat{\mathbf{a}}_i)^s \, dV &+ \\ + \sum_{j=1}^{n_c} \int_{\mathcal{B}} \boldsymbol{\sigma} : F_j^c \nabla^s \delta \hat{\mathbf{b}}_j + \boldsymbol{\sigma} : (\nabla F_j^c \otimes \delta \hat{\mathbf{b}}_j)^s \, dV &= \quad (3.9) \\ \int_{\partial \mathcal{B}^t} \bar{\mathbf{t}} \cdot \delta \hat{\mathbf{u}} \, dA + \sum_{i=1}^{n_m} \int_{\partial \mathcal{B}^t} \bar{\mathbf{t}} \cdot \delta \hat{\mathbf{a}}_i \, dA + \sum_{j=1}^{n_c} \int_{\partial \mathcal{B}^t} \bar{\mathbf{t}} \cdot \delta \hat{\mathbf{b}}_j \, dA. \end{aligned}$$

Wie in Abschnitt 3.1.2 dargestellt, basiert die Anreicherungsfunktion für starke Unstetigkeiten F_j^c auf der Signumfunktion. Für den Gradienten gilt entsprechend $\nabla F_j^c = \delta_j^c \mathbf{n}_j^c$, mit \mathbf{n}_j^c dem Normalenvektor der starken Unstetigkeit. Das Volumenintegral über den Summanden mit ∇F_j^c in (3.9) kann entsprechend der Eigenschaften der DIRAC-Funktion δ in das Oberflächenintegral

$$\int_{\mathcal{B}} \boldsymbol{\sigma} : (\nabla F_j^c \otimes \delta \hat{\mathbf{b}}_j)^s \, dV = \int_{\partial \mathcal{B}_j^c} \boldsymbol{\sigma} : (\mathbf{n}_j^c \otimes \delta \hat{\mathbf{b}}_j)^s \, dA = \int_{\partial \mathcal{B}_j^c} \mathbf{t}_j^c \cdot \delta \hat{\mathbf{b}}_j \, dA \quad (3.10)$$

überführt werden, wobei \mathbf{t}_j^c den über die Unstetigkeit $\partial \mathcal{B}_j^c$ übertragenen Spannungsvektor darstellt.

Die Zusammensetzung der virtuellen Verschiebung erfolgt aus den unabhängigen Teilvektoren

$\delta\hat{\mathbf{u}}$, $\delta\hat{\mathbf{a}}_i$ und $\delta\hat{\mathbf{b}}_j$. Entsprechend kann (3.9) als einen Satz von $1 + n_m + n_c$ Integralgleichungen

$$\begin{aligned}
 \int_{\mathcal{B}} \boldsymbol{\sigma} : \nabla^s \delta\hat{\mathbf{u}} \, dV &= \int_{\partial\mathcal{B}^t} \bar{\mathbf{t}} \cdot \delta\hat{\mathbf{u}} \, dA \\
 \int_{\mathcal{B}} \boldsymbol{\sigma} : [F_1^m \nabla^s \delta\hat{\mathbf{a}}_1 + (\nabla F_1^m \otimes \delta\hat{\mathbf{a}}_1)^s] \, dV &= \int_{\partial\mathcal{B}^t} \bar{\mathbf{t}} \cdot \delta\hat{\mathbf{a}}_1 \, dA \\
 &\vdots \\
 \int_{\mathcal{B}} \boldsymbol{\sigma} : [F_{n_m}^m \nabla^s \delta\hat{\mathbf{a}}_{n_m} + (\nabla F_{n_m}^m \otimes \delta\hat{\mathbf{a}}_{n_m})^s] \, dV &= \int_{\partial\mathcal{B}^t} \bar{\mathbf{t}} \cdot \delta\hat{\mathbf{a}}_{n_m} \, dA \\
 \int_{\mathcal{B}} \boldsymbol{\sigma} : F_1^c \nabla^s \delta\hat{\mathbf{b}}_1 \, dV + \int_{\partial\mathcal{B}_1^c} \mathbf{t}_1^c \cdot \delta\hat{\mathbf{b}}_1 \, dA &= \int_{\partial\mathcal{B}^t} \bar{\mathbf{t}} \cdot \delta\hat{\mathbf{b}}_1 \, dA \\
 &\vdots \\
 \int_{\mathcal{B}} \boldsymbol{\sigma} : F_{n_c}^c \nabla^s \delta\hat{\mathbf{b}}_{n_c} \, dV + \int_{\partial\mathcal{B}_{n_c}^c} \mathbf{t}_{n_c}^c \cdot \delta\hat{\mathbf{b}}_{n_c} \, dA &= \int_{\partial\mathcal{B}^t} \bar{\mathbf{t}} \cdot \delta\hat{\mathbf{b}}_{n_c} \, dA
 \end{aligned} \tag{3.11}$$

ausgedrückt werden. Das gesamte Gleichungssystem ist über den Spannungstensor $\boldsymbol{\sigma}$ gekoppelt.

Entsprechend der Grundzüge der FEM wird für die Lösung des Gleichungssystems (3.11) das Gebiet \mathcal{B} in eine endliche Anzahl finiter Elemente mit dem assoziierten Teilgebiet \mathcal{B}_i^c aufgeteilt. Es gilt

$$\mathcal{B} = \bigcup_{i \in (\mathcal{M}^e \vee \mathcal{M}^{xe})} \mathcal{B}_i^c \tag{3.12}$$

mit dem Assemblierungsoperator \bigcup sowie \mathcal{M}^e und \mathcal{M}^{xe} , den Mengen gewöhnlicher Elemente und X-Elemente. Die Einteilung der Gesamtheit der Elemente in die beiden Elementtypen erfolgt entsprechend der Abb. 3.5. Die X-Elemente können dabei durch eine oder mehrere Unstetigkeiten geschnitten werden.

Unabhängig vom Elementtyp erfolgt die Abbildung der Geometrie innerhalb eines Elements durch

$$\mathbf{x}(\boldsymbol{\xi}) = \sum_{i=1}^{n^K} N_i(\boldsymbol{\xi}) \hat{\mathbf{x}}_i, \tag{3.13}$$

mit den zu den n^K Knoten gehörenden Formfunktionen $N_i(\boldsymbol{\xi})$ und den physikalischen Knotenkoordinaten $\hat{\mathbf{x}}_i$. Die Formfunktionen sind dabei abhängig von den natürlichen Koordinaten $\boldsymbol{\xi}$. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit werden ausschließlich zweidimensionale Rechteck- und dreidimensionale Hexaederelemente verwendet, deren natürliche Koordinaten im Bereich $-1 \leq \xi_i \leq 1$ verlaufen. Die Korrespondenz zwischen physikalischen und natürlichen Koordinaten ist in Abb. 3.6 exemplarisch für ein 20 Knoten (Serendipity) Hexaederelement dargestellt.

Entsprechend des isoparametrischen Konzepts basiert die Beschreibung des Verschiebungsfeldes auf denselben Formfunktionen wie die Geometrieapproximation. Während sich der kontinuierliche Anteil des Verschiebungsfeldes $\hat{\mathbf{u}}$ über das gesamte Gebiet erstreckt und damit durch alle

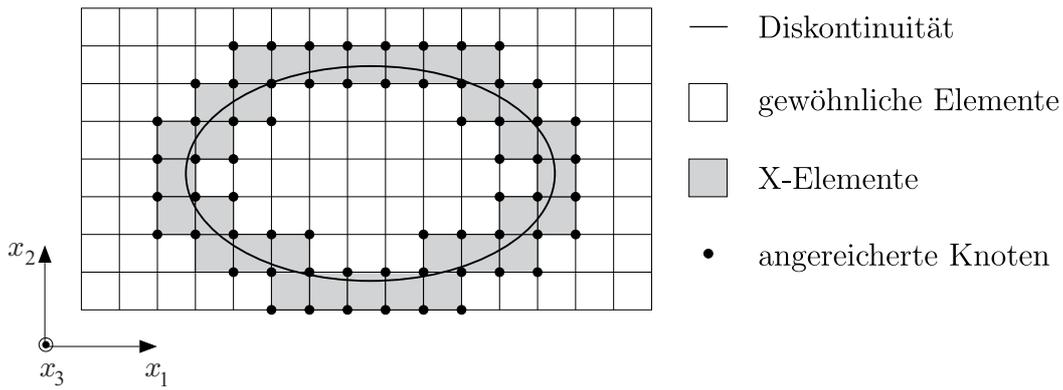


Abbildung 3.5: Aufteilung des Berechnungsnetz in n^e gewöhnliche Elemente und n^{xe} X-Elemente mit angereichertem Verschiebungsfeld.

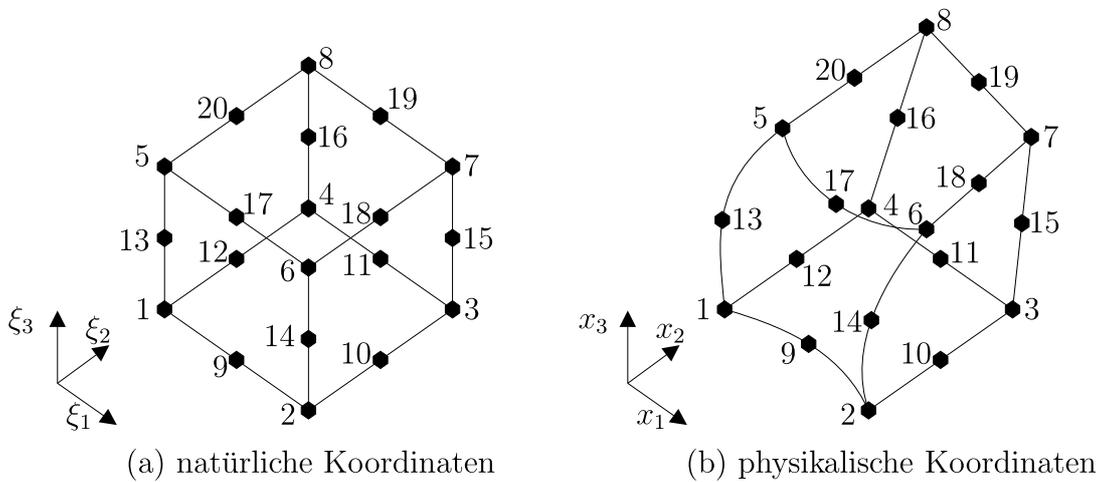


Abbildung 3.6: Korrespondenz zwischen (a) natürlichen und (b) physikalischen Elementkoordinaten eines isoparametrischen 20 Knoten (Serendipity) Hexaederelements.

Elementtypen abgebildet werden muss, sollen die diskontinuierlichen Anteile $\hat{\mathbf{a}}_i$ und $\hat{\mathbf{b}}_i$ nur in unmittelbarer Umgebung der Unstetigkeiten und damit innerhalb der X-Elemente berücksichtigt werden. Das kontinuierlich verlaufende Verschiebungsfeld gewöhnlicher Elemente

$$\mathbf{u}^e(\boldsymbol{\xi}) = \sum_{i=1}^{n^K} N_i(\boldsymbol{\xi}) \hat{\mathbf{u}}_i \quad (3.14)$$

ergibt sich aus der Interpolation der Knotenverschiebungsvektoren $\hat{\mathbf{u}}_i$ durch die zu den n^K Knoten gehörenden Formfunktionen N_i . Für das diskontinuierlich verlaufende Verschiebungsfeld eines X-Elements gilt hingegen

$$\mathbf{u}^{xe}(\boldsymbol{\xi}) = \sum_{i=1}^{n^K} \left(N_i(\boldsymbol{\xi}) \hat{\mathbf{u}}_i + \sum_{k=1}^{n^{m,xe}} F_{k,i}^m(\boldsymbol{\xi}) N_i(\boldsymbol{\xi}) \hat{\mathbf{a}}_{k,i} + \sum_{l=1}^{n^{c,xe}} F_{l,i}^c(\boldsymbol{\xi}) N_i(\boldsymbol{\xi}) \hat{\mathbf{b}}_{l,i} \right), \quad (3.15)$$

mit $n^{m,xe}$ und $n^{c,xe}$ der Anzahl schwacher und starker Unstetigkeiten im Elementgebiet und den assoziierten, zusätzlichen Knotenverschiebungsvektoren $\hat{\mathbf{a}}_{l,i}$ und $\hat{\mathbf{b}}_{k,i}$.

Für die numerische Umsetzung werden die Verschiebungsfelder in die Matrix-Vektorschreibweise

$$\underline{\mathbf{u}} = \underline{\mathbf{N}} \hat{\underline{\mathbf{d}}} \quad (3.16)$$

überführt. Die Besetzung der Elementformfunktionsmatrix $\underline{\mathbf{N}}$ und des Elementverschiebungsvektors $\hat{\underline{\mathbf{d}}}$ richtet sich nach dem jeweiligen Elementtyp. Für gewöhnliche Elemente gilt

$$\hat{\underline{\mathbf{d}}} = \underline{\hat{\mathbf{d}}}_{\mathbf{u}} = \left[\hat{\mathbf{u}}_1^T \quad \dots \quad \hat{\mathbf{u}}_i^T \quad \dots \quad \hat{\mathbf{u}}_{n^k}^T \right]^T \quad (3.17)$$

mit

$$\underline{\mathbf{N}}_{\mathbf{u}} = \begin{bmatrix} N_1 & 0 & 0 & \dots & N_{n^k} & 0 & 0 \\ 0 & N_1 & 0 & \dots & 0 & N_{n^k} & 0 \\ 0 & 0 & N_1 & \dots & 0 & 0 & N_{n^k} \end{bmatrix} \quad (3.18)$$

Der Elementverschiebungsvektor eines X-Elements enthält neben den Verschiebungsfreiwerten des kontinuierlich verlaufenden Verschiebungsfeldes die Freiwerte der im Element verlaufenden, diskontinuierlichen Felder. Während in der numerischen Umsetzung die Freiwerte knotenweise zusammengefasst sind, werden diese im Folgenden zur besseren Übersicht feldweise gruppiert. Es gilt

$$\hat{\underline{\mathbf{d}}} = \left[\underline{\hat{\mathbf{d}}}_{\mathbf{u}}^T \quad \underline{\hat{\mathbf{d}}}_{\mathbf{a}_1}^T \quad \dots \quad \underline{\hat{\mathbf{d}}}_{\mathbf{a}_{n^{m,xe}}}^T \quad \underline{\hat{\mathbf{d}}}_{\mathbf{b}_1}^T \quad \dots \quad \underline{\hat{\mathbf{d}}}_{\mathbf{b}_{n^{c,xe}}}^T \right]^T \quad (3.19)$$

mit den Feldvektoren

$$\underline{\hat{\mathbf{d}}}_{\mathbf{u}} = \left[\hat{\mathbf{u}}_1^T \quad \dots \quad \hat{\mathbf{u}}_i^T \quad \dots \quad \hat{\mathbf{u}}_{n^k}^T \right]^T, \quad (3.20)$$

$$\underline{\hat{\mathbf{d}}}_{\mathbf{a}_k} = \left[\hat{\mathbf{a}}_{k,1}^T \quad \dots \quad \hat{\mathbf{a}}_{k,i}^T \quad \dots \quad \hat{\mathbf{a}}_{k,n^k}^T \right]^T, \quad (3.21)$$

$$\underline{\hat{\mathbf{d}}}_{\mathbf{b}_l} = \left[\hat{\mathbf{b}}_{l,1}^T \quad \dots \quad \hat{\mathbf{b}}_{l,i}^T \quad \dots \quad \hat{\mathbf{b}}_{l,n^k}^T \right]^T. \quad (3.22)$$

Die Matrix der Formfunktionen

$$\underline{\mathbf{N}} = \left[\underline{\mathbf{N}}_{\mathbf{u}} \quad \underline{\mathbf{N}}_{\mathbf{a}_1} \quad \dots \quad \underline{\mathbf{N}}_{\mathbf{a}_{n^{m,xe}}} \quad \underline{\mathbf{N}}_{\mathbf{b}_1} \quad \dots \quad \underline{\mathbf{N}}_{\mathbf{b}_{n^{c,xe}}} \right] \quad (3.23)$$

setzt sich zusammen aus der Teilmatrix (3.18) und den zusätzlichen Matrizen

$$\underline{\mathbf{N}}_{\mathbf{a}_k} = \begin{bmatrix} F_{k,1}^c N_1 & 0 & 0 & \dots & F_{k,n^k}^c N_{n^k} & 0 & 0 \\ 0 & F_{k,1}^c N_1 & 0 & \dots & 0 & F_{k,n^k}^c N_{n^k} & 0 \\ 0 & 0 & F_{k,1}^c N_1 & \dots & 0 & 0 & F_{k,n^k}^c N_{n^k} \end{bmatrix}, \quad (3.24)$$

$$\underline{\mathbf{N}}_{\mathbf{b}_l} = \begin{bmatrix} F_{l,1}^m N_1 & 0 & 0 & \dots & F_{l,n^k}^m N_{n^k} & 0 & 0 \\ 0 & F_{l,1}^m N_1 & 0 & \dots & 0 & F_{l,n^k}^m N_{n^k} & 0 \\ 0 & 0 & F_{l,1}^m N_1 & \dots & 0 & 0 & F_{l,n^k}^m N_{n^k} \end{bmatrix}. \quad (3.25)$$

Die diskrete Form der Verzerrungs-Verschiebungsbeziehung lässt sich unter Ausnutzung der VOIGTSchen-Notation ausdrücken als

$$\underline{\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}} = \underline{\underline{\mathbf{B}}} \hat{\underline{\underline{\mathbf{d}}}}, \quad (3.26)$$

mit

$$\underline{\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}} = \left[\varepsilon_{11} \quad \varepsilon_{22} \quad \varepsilon_{33} \quad \gamma_{23} = 2\varepsilon_{23} \quad \gamma_{13} = 2\varepsilon_{13} \quad \gamma_{12} = 2\varepsilon_{12} \right]^T. \quad (3.27)$$

Entsprechend gilt für die vektorielle Form des Spannungstensors

$$\underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}} = \left[\sigma_{11} \quad \sigma_{22} \quad \sigma_{33} \quad \sigma_{23} \quad \sigma_{13} \quad \sigma_{12} \right]^T. \quad (3.28)$$

Die Struktur der Differentialoperatormatrix $\underline{\underline{\mathbf{B}}}$ lässt sich für die einzelnen Elementtypen aus der Verzerrungs-Verschiebungsbeziehung (2.4) und der Besetzung des Elementverschiebungsvektors $\hat{\underline{\underline{\mathbf{d}}}}$ ableiten. Die Zuordnung zwischen den Koordinaten des Verzerrungstensors und den partiellen Ableitungen des Verschiebungsfeldes erfolgt durch die Definition einer Operatormatrix $\underline{\underline{\mathbf{L}}}_\varepsilon$

$$\underline{\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}} = \underline{\underline{\mathbf{L}}}_\varepsilon \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}}. \quad (3.29)$$

Der Vektor der Verschiebungsgradienten $\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}}$ enthält dabei alle partiellen Ableitungen der Verschiebungskomponenten u_i nach den physikalischen Koordinaten x_j

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}} = \left[\frac{\partial u_1}{\partial x_1} \quad \frac{\partial u_1}{\partial x_2} \quad \frac{\partial u_1}{\partial x_3} \quad \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \quad \frac{\partial u_2}{\partial x_2} \quad \frac{\partial u_2}{\partial x_3} \quad \frac{\partial u_3}{\partial x_1} \quad \frac{\partial u_3}{\partial x_2} \quad \frac{\partial u_3}{\partial x_3} \right]^T. \quad (3.30)$$

Da die Verschiebungsfelder zuvor als Funktionen der natürlichen Elementkoordinaten definiert wurden, müssen die partiellen Ableitungen mit (3.13) mit Hilfe der Kettenregel umgeformt werden. Es gilt

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial \xi_1} \\ \frac{\partial}{\partial \xi_2} \\ \frac{\partial}{\partial \xi_3} \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial \xi_1} & \frac{\partial x_2}{\partial \xi_1} & \frac{\partial x_3}{\partial \xi_1} \\ \frac{\partial x_1}{\partial \xi_2} & \frac{\partial x_2}{\partial \xi_2} & \frac{\partial x_3}{\partial \xi_2} \\ \frac{\partial x_1}{\partial \xi_3} & \frac{\partial x_2}{\partial \xi_3} & \frac{\partial x_3}{\partial \xi_3} \end{bmatrix}}_{\underline{\underline{\mathbf{J}}}} \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x_1} \\ \frac{\partial}{\partial x_2} \\ \frac{\partial}{\partial x_3} \end{bmatrix}, \quad (3.31)$$

mit der JACOBI-Matrix $\underline{\underline{\mathbf{J}}}$. Die Determinante der JACOBI-Matrix $J = \det \underline{\underline{\mathbf{J}}}$ beschreibt das Verhältnis zwischen einem differentiellen Volumenelement in den physikalischen und den natürlichen Koordinaten. Sie ermöglicht die Transformation der Volumenintegration über das physikalische Elementgebiet in eine Integration über die natürlichen Koordinaten

$$\int_{\mathcal{B}^e} f(\boldsymbol{\xi}) dx_1 dx_2 dx_3 = \int_{\mathcal{B}_\xi^e} f(\boldsymbol{\xi}) J(\boldsymbol{\xi}) d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3. \quad (3.32)$$

Mit (3.31) kann der Vektor der Verschiebungsgradienten mittels der partiellen Ableitungen nach den natürlichen Koordinaten wie folgt ausgedrückt werden

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}} = \begin{bmatrix} \underline{\underline{\mathbf{J}}}^{-1} & \underline{\underline{\mathbf{0}}} & \underline{\underline{\mathbf{0}}} \\ \underline{\underline{\mathbf{0}}} & \underline{\underline{\mathbf{J}}}^{-1} & \underline{\underline{\mathbf{0}}} \\ \underline{\underline{\mathbf{0}}} & \underline{\underline{\mathbf{0}}} & \underline{\underline{\mathbf{J}}}^{-1} \end{bmatrix} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \boldsymbol{\xi}}. \quad (3.33)$$

Es verbleibt die Berechnung der partiellen Ableitungen der Verschiebungskomponenten nach den natürlichen Koordinaten aus der diskreten Beschreibung des Verschiebungsfeldes (3.16). Für gewöhnliche Elemente gilt für die Differentialoperatormatrix

$$\underline{\underline{\mathbf{B}}} = \underline{\underline{\mathbf{L}}}_\varepsilon \begin{bmatrix} \underline{\underline{\mathbf{J}}}^{-1} & \underline{\underline{\mathbf{0}}} & \underline{\underline{\mathbf{0}}} \\ \underline{\underline{\mathbf{0}}} & \underline{\underline{\mathbf{J}}}^{-1} & \underline{\underline{\mathbf{0}}} \\ \underline{\underline{\mathbf{0}}} & \underline{\underline{\mathbf{0}}} & \underline{\underline{\mathbf{J}}}^{-1} \end{bmatrix} \underline{\underline{\mathbf{B}}}_u \quad (3.34)$$

mit

$$\underline{\underline{\mathbf{B}}}_u = \begin{bmatrix} N_{1,\xi_1} & 0 & 0 & \dots & N_{n^k,\xi_1} & 0 & 0 \\ N_{1,\xi_2} & 0 & 0 & \dots & N_{n^k,\xi_2} & 0 & 0 \\ N_{1,\xi_3} & 0 & 0 & \dots & N_{n^k,\xi_3} & 0 & 0 \\ 0 & N_{1,\xi_1} & 0 & \dots & 0 & N_{n^k,\xi_1} & 0 \\ 0 & N_{1,\xi_2} & 0 & \dots & 0 & N_{n^k,\xi_2} & 0 \\ 0 & N_{1,\xi_3} & 0 & \dots & 0 & N_{n^k,\xi_3} & 0 \\ 0 & 0 & N_{1,\xi_1} & \dots & 0 & 0 & N_{n^k,\xi_1} \\ 0 & 0 & N_{1,\xi_2} & \dots & 0 & 0 & N_{n^k,\xi_2} \\ 0 & 0 & N_{1,\xi_3} & \dots & 0 & 0 & N_{n^k,\xi_3} \end{bmatrix}. \quad (3.35)$$

Die Besetzung der Matrix $\underline{\underline{\mathbf{B}}}$ für X-Elemente richtet sich, wie bei der Matrix der Formfunktionen $\underline{\underline{\mathbf{N}}}$, nach der Anzahl starker und schwacher Diskontinuitäten im Elementgebiet und den damit verbundenen Knotenfreiwerten. Mit

$$\underline{\underline{\mathbf{B}}} = \underline{\underline{\mathbf{L}}}_\varepsilon \begin{bmatrix} \underline{\underline{\mathbf{J}}}^{-1} & \underline{\underline{\mathbf{0}}} & \underline{\underline{\mathbf{0}}} \\ \underline{\underline{\mathbf{0}}} & \underline{\underline{\mathbf{J}}}^{-1} & \underline{\underline{\mathbf{0}}} \\ \underline{\underline{\mathbf{0}}} & \underline{\underline{\mathbf{0}}} & \underline{\underline{\mathbf{J}}}^{-1} \end{bmatrix} \left[\underline{\underline{\mathbf{B}}}_u \quad \underline{\underline{\mathbf{B}}}_{a_1} \quad \dots \quad \underline{\underline{\mathbf{B}}}_{a_{n^m,xe}} \quad \underline{\underline{\mathbf{B}}}_{b_1} \quad \dots \quad \underline{\underline{\mathbf{B}}}_{b_{n^c,xe}} \right] \quad (3.36)$$

setzt sich diese zusammen aus der Teilmatrix (3.35) und den zusätzlichen Matrizen

$$\underline{\underline{\mathbf{B}}}_{a_k} = \begin{bmatrix} (F_{k,1}^c N_1)_{,\xi_1} & 0 & 0 & \dots & (F_{k,n^k}^c N_{n^k})_{,\xi_1} & 0 & 0 \\ (F_{k,1}^c N_1)_{,\xi_2} & 0 & 0 & \dots & (F_{k,n^k}^c N_{n^k})_{,\xi_2} & 0 & 0 \\ (F_{k,1}^c N_1)_{,\xi_3} & 0 & 0 & \dots & (F_{k,n^k}^c N_{n^k})_{,\xi_3} & 0 & 0 \\ 0 & (F_{k,1}^c N_1)_{,\xi_1} & 0 & \dots & 0 & (F_{k,n^k}^c N_{n^k})_{,\xi_1} & 0 \\ 0 & (F_{k,1}^c N_1)_{,\xi_2} & 0 & \dots & 0 & (F_{k,n^k}^c N_{n^k})_{,\xi_2} & 0 \\ 0 & (F_{k,1}^c N_1)_{,\xi_3} & 0 & \dots & 0 & (F_{k,n^k}^c N_{n^k})_{,\xi_3} & 0 \\ 0 & 0 & (F_{k,1}^c N_1)_{,\xi_1} & \dots & 0 & 0 & (F_{k,n^k}^c N_{n^k})_{,\xi_1} \\ 0 & 0 & (F_{k,1}^c N_1)_{,\xi_2} & \dots & 0 & 0 & (F_{k,n^k}^c N_{n^k})_{,\xi_2} \\ 0 & 0 & (F_{k,1}^c N_1)_{,\xi_3} & \dots & 0 & 0 & (F_{k,n^k}^c N_{n^k})_{,\xi_3} \end{bmatrix}, \quad (3.37)$$

$$\underline{\underline{\mathbf{B}}}_{b_l} = \begin{bmatrix} (F_{l,1}^m N_1)_{,\xi_1} & 0 & 0 & \dots & (F_{l,n^k}^m N_{n^k})_{,\xi_1} & 0 & 0 \\ (F_{l,1}^m N_1)_{,\xi_2} & 0 & 0 & \dots & (F_{l,n^k}^m N_{n^k})_{,\xi_2} & 0 & 0 \\ (F_{l,1}^m N_1)_{,\xi_3} & 0 & 0 & \dots & (F_{l,n^k}^m N_{n^k})_{,\xi_3} & 0 & 0 \\ 0 & (F_{l,1}^m N_1)_{,\xi_1} & 0 & \dots & 0 & (F_{l,n^k}^m N_{n^k})_{,\xi_1} & 0 \\ 0 & (F_{l,1}^m N_1)_{,\xi_2} & 0 & \dots & 0 & (F_{l,n^k}^m N_{n^k})_{,\xi_2} & 0 \\ 0 & (F_{l,1}^m N_1)_{,\xi_3} & 0 & \dots & 0 & (F_{l,n^k}^m N_{n^k})_{,\xi_3} & 0 \\ 0 & 0 & (F_{l,1}^m N_1)_{,\xi_1} & \dots & 0 & 0 & (F_{l,n^k}^m N_{n^k})_{,\xi_1} \\ 0 & 0 & (F_{l,1}^m N_1)_{,\xi_2} & \dots & 0 & 0 & (F_{l,n^k}^m N_{n^k})_{,\xi_2} \\ 0 & 0 & (F_{l,1}^m N_1)_{,\xi_3} & \dots & 0 & 0 & (F_{l,n^k}^m N_{n^k})_{,\xi_3} \end{bmatrix}. \quad (3.38)$$

Durch die Aufteilung des Gebiets \mathcal{B} in eine endliche Anzahl finiter Elemente entsprechend (3.12) und die Anwendung der Vektornotation für die virtuelle Verschiebung und den Spannungstensor, kann das Gleichungssystem (3.11) algebraisiert werden. Für eine beliebige Wahl der Wichtungsfunktionen folgt das Gleichungssystem

$$\begin{aligned} \bigcup_{i \in (\mathcal{M}^e \vee \mathcal{M}^{xe})} \int_{\mathcal{B}_i^e} \underline{\underline{\mathbf{B}}}_u^T \underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}} dV &= \int_{\partial \mathcal{B}_i^t} \underline{\underline{\mathbf{N}}}_u^T \underline{\underline{\mathbf{t}}} dA, \\ \bigcup_{i \in \mathcal{M}^{xe}} \sum_{k=1}^{n^{m,e}} \int_{\mathcal{B}_i^e} \underline{\underline{\mathbf{B}}}_{\mathbf{a}_k}^T \underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}} dV &= \sum_{k=1}^{n^{m,e}} \int_{\partial \mathcal{B}_i^t} \underline{\underline{\mathbf{N}}}_{\mathbf{a}_k}^T \underline{\underline{\mathbf{t}}} dA, \\ \bigcup_{i \in \mathcal{M}^{xe}} \sum_{l=1}^{n^{c,e}} \int_{\mathcal{B}_i^e} \underline{\underline{\mathbf{B}}}_{\mathbf{b}_l}^T \underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}} dV + \int_{\partial \mathcal{B}_i^c} \underline{\underline{\mathbf{N}}}_c^T \underline{\underline{\mathbf{t}}}_l dA &= \sum_{l=1}^{n^{c,e}} \int_{\partial \mathcal{B}_i^t} \underline{\underline{\mathbf{N}}}_{\mathbf{b}_l}^T \underline{\underline{\mathbf{t}}} dA. \end{aligned} \quad (3.39)$$

Die Formfunktionsmatrix $\underline{\underline{\mathbf{N}}}_c$ für den Spannungsvektor an der starken Unstetigkeit entspricht dabei der Matrix $\underline{\underline{\mathbf{N}}}_u$.

3.3 Linearisierung

Das in (3.39) angegebene Gleichungssystem zur Bestimmung des Gleichgewichts lässt sich kompakt ausdrücken durch

$$\underline{\underline{\mathbf{f}}}_{\text{int}} - \underline{\underline{\mathbf{f}}}_{\text{ext}} = \underline{\underline{\mathbf{0}}}. \quad (3.40)$$

Der Vektor der inneren Knotenkräfte $\underline{\underline{\mathbf{f}}}_{\text{int}}$ ergibt sich dabei aus der Gesamtheit der Terme auf der linken Seite des Gleichungssystems (3.39). Entsprechend setzt sich der Vektor der äußeren Knotenkräfte $\underline{\underline{\mathbf{f}}}_{\text{ext}}$ aus den Termen der rechten Seite, plus etwaiger Einzelkräfte, die direkt an den Knoten angreifen, zusammen. Im Allgemeinen können beide Vektoren abhängig vom aktuellen Deformationszustand sein ($\underline{\underline{\mathbf{f}}}_{\text{int}} = \underline{\underline{\mathbf{f}}}_{\text{int}}(\underline{\underline{\mathbf{u}}})$ und $\underline{\underline{\mathbf{f}}}_{\text{ext}} = \underline{\underline{\mathbf{f}}}_{\text{ext}}(\underline{\underline{\mathbf{u}}})$). Da sich die vorliegende Arbeit auf geometrisch lineare Problemstellungen beschränkt und deformationsabhängige äußere Lasten ausgeschlossen werden, stellt lediglich der Vektor der inneren Knotenlasten eine Funktion des Verschiebungszustands dar. Die Kopplung zwischen dem Deformationszustand und den resultierenden Reaktionskräften liefern die in Kapitel 5 angegebenen konstitutiven Beziehungen. Diese sind an die Phänomenologie des Materialverhaltens von Faser-Kunststoff-Verbunden angepasst und weisen eine ausgeprägte Nichtlinearität auf. Vor diesem Hintergrund erfolgt die Bestimmung des Gleichgewichts (3.40) auf Basis eines inkrementellen, iterativen Lösungsverfahrens.

Basis der inkrementellen Berechnung des Gleichgewichts ist die Aufteilung des Zeitfensters der Simulation $t \in [0; t_{\max}]$ in eine endliche Anzahl diskreter Zeitschritte $\underline{\underline{\mathbf{t}}} = [0 \dots t_k \dots t_{\max}]^T$. Im Folgenden sei t_k eine bekannte Konfiguration, für die das Gleichgewicht entsprechend (3.40) erfüllt ist. Ausgehend von dieser Lösung soll das Gleichgewicht zum Zeitpunkt t_{k+1} iterativ auf Basis eines NEWTON-RAPHSON-Verfahrens bestimmt werden. Hierfür erfolgt zunächst die Definition eines Residuumvektors

$$\underline{\underline{\mathbf{R}}}(^{t_{k+1}}\underline{\underline{\mathbf{u}}}) = \underline{\underline{\mathbf{f}}}_{\text{int}}(^{t_{k+1}}\underline{\underline{\mathbf{u}}}) - ^{t_{k+1}}\underline{\underline{\mathbf{f}}}_{\text{ext}} = \underline{\underline{\mathbf{0}}}. \quad (3.41)$$

Wie bereits zuvor erwähnt, folgt aus den konstitutiven Beziehungen ein nichtlinearer Zusammenhang zwischen der Verschiebungslösung und den inneren Knotenkräften. Für die iterative Berechnung des Verschiebungsvektors ${}^{t_{k+1}}\underline{\mathbf{u}}$ wird daher (3.41) zunächst anhand einer TAYLOR-Reihenentwicklung linearisiert. Unter Vernachlässigung von Termen höherer Ordnung ergibt die Entwicklung im Punkt ${}^{t_{k+1}}\underline{\mathbf{u}}^{i-1}$

$$\tilde{\mathbf{R}}({}^{t_{k+1}}\underline{\mathbf{u}}^i) = \mathbf{R}({}^{t_{k+1}}\underline{\mathbf{u}}^{i-1}) + \underbrace{\frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \underline{\mathbf{u}}}}_{{}^{t_{k+1}}\underline{\mathbf{K}}^i} \Big|_{{}^{t_{k+1}}\underline{\mathbf{u}}^{i-1}} {}^{t_{k+1}}\delta \underline{\mathbf{u}}^i = \underline{\mathbf{0}}. \quad (3.42)$$

Der Verschiebungsvektor ${}^{t_{k+1}}\underline{\mathbf{u}}^{i-1}$ ist dabei die Lösung des vorangegangenen $i - 1$ -ten Iterationsschrittes. Auf ihm basierend erfolgt die Berechnung der Tangentensteifigkeitsmatrix ${}^{t_{k+1}}\underline{\mathbf{K}}^i$ des aktuellen und des Residuumvektors $\mathbf{R}({}^{t_{k+1}}\underline{\mathbf{u}}^{i-1})$ des vorherigen Iterationsschrittes. Für den Fall, dass die Iteration i die erste für den aktuellen Zeitpunkt t_{k+1} ist, entspricht der Vektor der bekannten Gleichgewichtslösung ${}^{t_k}\underline{\mathbf{u}}$. Durch Umstellung der Gleichung (3.42) kann anhand von

$${}^{t_{k+1}}\underline{\mathbf{K}}^i {}^{t_{k+1}}\delta \underline{\mathbf{u}}^i = \underline{\mathbf{f}}_{\text{int}}({}^{t_{k+1}}\underline{\mathbf{u}}^{i-1}) - {}^{t_{k+1}}\underline{\mathbf{f}}_{\text{ext}} \quad (3.43)$$

der Verschiebungszuwachs ${}^{t_{k+1}}\delta \underline{\mathbf{u}}^i$ berechnet werden. Der hierfür notwendige innere Knotenkraftvektor berechnet sich ausgehend von der bekannten Verschiebungslösung ${}^{t_{k+1}}\underline{\mathbf{u}}^{i-1}$ aus den Beiträgen der einzelnen Elemente

$$\underline{\mathbf{f}}_{\text{int}} = \bigcup_{i \in (\mathcal{M}^e \vee \mathcal{M}^{\text{xe}})} \underline{\mathbf{f}}_{\text{int},i}^e. \quad (3.44)$$

Für gewöhnliche Elemente enthält der Elementkraftvektor lediglich Terme korrespondierend zu den Freiwerten des kontinuierlichen Verschiebungsfeldes

$$\underline{\mathbf{f}}_{\text{int},i}^e = \int_{\mathcal{B}_i^e} \underline{\mathbf{B}}_{\underline{\mathbf{u}}}^T \underline{\boldsymbol{\sigma}} dV. \quad (3.45)$$

Der Elementkraftvektor angereicherter X-Elemente

$$\underline{\mathbf{f}}_{\text{int},i}^e = \left[\underline{\mathbf{f}}_{\underline{\mathbf{u}}}^T \quad \underline{\mathbf{f}}_{\mathbf{a}_1}^T \quad \dots \quad \underline{\mathbf{f}}_{\mathbf{a}_{n_m, \text{xe}}}^T \quad \underline{\mathbf{f}}_{\mathbf{b}_1}^T \quad \dots \quad \underline{\mathbf{f}}_{\mathbf{b}_{n_c, \text{xe}}}^T \right]^T \quad (3.46)$$

enthält zusätzlich Terme entsprechend den Freiwerten der schwach und stark diskontinuierlichen Verschiebungsfelder. Für die Teilvektoren gilt

$$\underline{\mathbf{f}}_{\underline{\mathbf{u}}} = \int_{\mathcal{B}_i^e} \underline{\mathbf{B}}_{\underline{\mathbf{u}}}^T \underline{\boldsymbol{\sigma}} dV, \quad (3.47)$$

$$\underline{\mathbf{f}}_{\mathbf{a}_k} = \int_{\mathcal{B}_i^e} \underline{\mathbf{B}}_{\mathbf{a}_l}^T \underline{\boldsymbol{\sigma}} dV, \quad (3.48)$$

$$\underline{\mathbf{f}}_{\mathbf{b}_l} = \int_{\mathcal{B}_i^e} \underline{\mathbf{B}}_{\mathbf{b}_l}^T \underline{\boldsymbol{\sigma}} dV + \int_{\partial \mathcal{B}_i^e} \underline{\mathbf{N}}_{\mathbf{c}}^T \underline{\mathbf{t}}_l^c dA. \quad (3.49)$$

Der für die Auswertung der Integrale erforderliche Spannungstensor $\underline{\sigma}$ sowie der Spannungsvektor \underline{t}_j^c müssen anhand der konstitutiven Beziehungen aus dem bekannten aktuellen Deformationszustand berechnet werden (vgl. Kapitel 5).

Die Tangentensteifigkeitsmatrix ergibt sich aus der partiellen Ableitung des Residuumvektors nach dem Verschiebungsvektor. Da in der vorliegenden Modellierung ausschließlich materielle Nichtlinearitäten berücksichtigt werden, gilt

$${}^{t_{k+1}}\underline{\underline{\mathbf{K}}}^i = \left. \frac{\partial \underline{\mathbf{R}}}{\partial \underline{\mathbf{u}}} \right|_{{}^{t_{k+1}}\underline{\mathbf{u}}^{i-1}} = \left. \frac{\partial \underline{\mathbf{f}}_{\text{int}}}{\partial \underline{\mathbf{u}}} \right|_{{}^{t_{k+1}}\underline{\mathbf{u}}^{i-1}}. \quad (3.50)$$

Die Tangentensteifigkeitsmatrix setzt sich hierbei zusammen aus den Beiträgen aller Elemente

$$\underline{\underline{\mathbf{K}}} = \bigcup_{i \in (\mathcal{M}^e \vee \mathcal{M}^{\text{xe}})} \underline{\underline{\mathbf{K}}}_i^e. \quad (3.51)$$

Für gewöhnliche Elemente gilt entsprechend (3.39)

$$\underline{\underline{\mathbf{K}}}_i^e = \int_{\mathcal{B}_i^e} \underline{\underline{\mathbf{B}}}_{\mathbf{u}}^T \frac{\partial \underline{\sigma}}{\partial \underline{\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}}} \frac{\partial \underline{\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}}}{\partial \underline{\underline{\mathbf{d}}}} dV = \int_{\mathcal{B}_i^e} \underline{\underline{\mathbf{B}}}_{\mathbf{u}}^T \underbrace{\frac{\partial \underline{\sigma}}{\partial \underline{\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}}}}_{\underline{\underline{\mathbf{C}}}} \underline{\underline{\mathbf{B}}}_{\mathbf{u}} dV \quad (3.52)$$

mit der Materialtangentensteifigkeit $\underline{\underline{\mathbf{C}}}$ in der aktuellen Konfiguration. Sie ist aus den konstitutiven Beziehungen des jeweiligen Elements abzuleiten. Beispielhaft ist dies in Kapitel 5 für ausgewählte Materialmodelle dargestellt.

Die Zusammensetzung der Tangentensteifigkeitsmatrix für X-Elemente richtet sich nach der Besetzung des Elementverschiebungsvektors $\underline{\underline{\mathbf{d}}}$ (3.19). Entsprechend der Sortierung der einzelnen Freiwerte gilt

$$\underline{\underline{\mathbf{K}}}_i^e = \begin{bmatrix} \underline{\underline{\mathbf{K}}}_{\mathbf{uu}} & \underline{\underline{\mathbf{K}}}_{\mathbf{ua}_1} & \cdots & \underline{\underline{\mathbf{K}}}_{\mathbf{ua}_{n,m,\text{xe}}} & \underline{\underline{\mathbf{K}}}_{\mathbf{ub}_1} & \cdots & \underline{\underline{\mathbf{K}}}_{\mathbf{ub}_{n,c,\text{xe}}} \\ \underline{\underline{\mathbf{K}}}_{\mathbf{a}_1\mathbf{u}} & \underline{\underline{\mathbf{K}}}_{\mathbf{a}_1\mathbf{a}_1} & \cdots & \underline{\underline{\mathbf{K}}}_{\mathbf{a}_1\mathbf{a}_{n,m,\text{xe}}} & \underline{\underline{\mathbf{K}}}_{\mathbf{a}_1\mathbf{b}_1} & \cdots & \underline{\underline{\mathbf{K}}}_{\mathbf{a}_1\mathbf{b}_{n,c,\text{xe}}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \underline{\underline{\mathbf{K}}}_{\mathbf{a}_{n,m,\text{xe}}\mathbf{u}} & \underline{\underline{\mathbf{K}}}_{\mathbf{a}_{n,m,\text{xe}}\mathbf{a}_1} & \cdots & \underline{\underline{\mathbf{K}}}_{\mathbf{a}_{n,m,\text{xe}}\mathbf{a}_{n,m,\text{xe}}} & \underline{\underline{\mathbf{K}}}_{\mathbf{a}_{n,m,\text{xe}}\mathbf{b}_1} & \cdots & \underline{\underline{\mathbf{K}}}_{\mathbf{a}_{n,m,\text{xe}}\mathbf{b}_{n,c,\text{xe}}} \\ \underline{\underline{\mathbf{K}}}_{\mathbf{b}_1\mathbf{u}} & \underline{\underline{\mathbf{K}}}_{\mathbf{b}_1\mathbf{a}_1} & \cdots & \underline{\underline{\mathbf{K}}}_{\mathbf{b}_1\mathbf{a}_{n,m,\text{xe}}} & \underline{\underline{\mathbf{K}}}_{\mathbf{b}_1\mathbf{b}_1} & \cdots & \underline{\underline{\mathbf{K}}}_{\mathbf{b}_1\mathbf{b}_{n,c,\text{xe}}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \underline{\underline{\mathbf{K}}}_{\mathbf{b}_{n,c,\text{xe}}\mathbf{u}} & \underline{\underline{\mathbf{K}}}_{\mathbf{b}_{n,c,\text{xe}}\mathbf{a}_1} & \cdots & \underline{\underline{\mathbf{K}}}_{\mathbf{b}_{n,c,\text{xe}}\mathbf{a}_{n,m,\text{xe}}} & \underline{\underline{\mathbf{K}}}_{\mathbf{b}_{n,c,\text{xe}}\mathbf{b}_1} & \cdots & \underline{\underline{\mathbf{K}}}_{\mathbf{b}_{n,c,\text{xe}}\mathbf{b}_{n,c,\text{xe}}} \end{bmatrix}. \quad (3.53)$$

Die Teilmatrizen ergeben sich aus den partiellen Ableitungen der Komponenten des inneren Kno-

tenkraftvektors (vgl. (3.39)) zu

$$\underline{\underline{\mathbf{K}}}_{\mathbf{u}\mathbf{u}} = \int_{\mathcal{B}_i^c} \underline{\underline{\mathbf{B}}}_{\mathbf{u}}^T \underline{\underline{\mathbf{C}}} \underline{\underline{\mathbf{B}}}_{\mathbf{u}} dV, \quad (3.54)$$

$$\underline{\underline{\mathbf{K}}}_{\mathbf{u}\mathbf{a}_k} = \int_{\mathcal{B}_i^c} \underline{\underline{\mathbf{B}}}_{\mathbf{u}}^T \underline{\underline{\mathbf{C}}} \underline{\underline{\mathbf{B}}}_{\mathbf{a}_k} dV, \quad (3.55)$$

$$\underline{\underline{\mathbf{K}}}_{\mathbf{u}\mathbf{b}_l} = \int_{\mathcal{B}_i^c} \underline{\underline{\mathbf{B}}}_{\mathbf{u}}^T \underline{\underline{\mathbf{C}}} \underline{\underline{\mathbf{B}}}_{\mathbf{b}_l} dV, \quad (3.56)$$

$$\underline{\underline{\mathbf{K}}}_{\mathbf{a}_m\mathbf{u}} = \int_{\mathcal{B}_i^c} \underline{\underline{\mathbf{B}}}_{\mathbf{a}_m}^T \underline{\underline{\mathbf{C}}} \underline{\underline{\mathbf{B}}}_{\mathbf{u}} dV, \quad (3.57)$$

$$\underline{\underline{\mathbf{K}}}_{\mathbf{a}_m\mathbf{a}_k} = \int_{\mathcal{B}_i^c} \underline{\underline{\mathbf{B}}}_{\mathbf{a}_m}^T \underline{\underline{\mathbf{C}}} \underline{\underline{\mathbf{B}}}_{\mathbf{a}_k} dV, \quad (3.58)$$

$$\underline{\underline{\mathbf{K}}}_{\mathbf{a}_m\mathbf{b}_l} = \int_{\mathcal{B}_i^c} \underline{\underline{\mathbf{B}}}_{\mathbf{a}_m}^T \underline{\underline{\mathbf{C}}} \underline{\underline{\mathbf{B}}}_{\mathbf{b}_l} dV, \quad (3.59)$$

$$\underline{\underline{\mathbf{K}}}_{\mathbf{b}_n\mathbf{u}} = \int_{\mathcal{B}_i^c} \underline{\underline{\mathbf{B}}}_{\mathbf{b}_n}^T \underline{\underline{\mathbf{C}}} \underline{\underline{\mathbf{B}}}_{\mathbf{u}} dV, \quad (3.60)$$

$$\underline{\underline{\mathbf{K}}}_{\mathbf{b}_n\mathbf{a}_k} = \int_{\mathcal{B}_i^c} \underline{\underline{\mathbf{B}}}_{\mathbf{b}_n}^T \underline{\underline{\mathbf{C}}} \underline{\underline{\mathbf{B}}}_{\mathbf{a}_k} dV, \quad (3.61)$$

$$\underline{\underline{\mathbf{K}}}_{\mathbf{b}_n\mathbf{b}_l} = \begin{cases} \int_{\mathcal{B}_i^c} \underline{\underline{\mathbf{B}}}_{\mathbf{b}_n}^T \underline{\underline{\mathbf{C}}} \underline{\underline{\mathbf{B}}}_{\mathbf{b}_l} dV & \text{wenn } n \neq l, \\ \int_{\mathcal{B}_i^c} \underline{\underline{\mathbf{B}}}_{\mathbf{b}_n}^T \underline{\underline{\mathbf{C}}} \underline{\underline{\mathbf{B}}}_{\mathbf{b}_l} dV + \int_{\partial\mathcal{B}_i^c} \underline{\underline{\mathbf{N}}}_{\mathbf{c}}^T \underline{\underline{\mathbf{T}}}_{\mathbf{c}} \underline{\underline{\mathbf{N}}}_{\mathbf{c}} dA & \text{wenn } n = l. \end{cases} \quad (3.62)$$

Die Materialtangenteigenschaften $\underline{\underline{\mathbf{T}}}_{\mathbf{c}}$ ergibt sich aus der partiellen Ableitung des übertragenen Spannungsvektors an der Diskontinuität nach dem Verschiebungssprung. Exemplarisch ist dies in Abschnitt 5.3 für ausgewählte Kohäsivzonenmodell angegeben.

Das aktuelle Verschiebungssinkrement

$${}^{t_{k+1}}\Delta\mathbf{u} = \sum_{n=1}^i {}^{t_{k+1}}\delta\mathbf{u}^n \quad (3.63)$$

setzt sich zusammen aus der Lösung von (3.43) und der Summe der Verschiebungszuwächse aller vorangegangenen Iterationen des aktuellen Zeitinkrements. Für die Verschiebungslösung gilt entsprechend

$${}^{t_{k+1}}\mathbf{u} = {}^{t_k}\mathbf{u} + {}^{t_{k+1}}\Delta\mathbf{u}. \quad (3.64)$$

Die aktualisierte Lösung erlaubt eine Neuberechnung des inneren Knotenkraftvektors und der Tangenteigenschaftenmatrix. Die erneute Auswertung von (3.43) führt zu einer sukzessiven Annäherung an die Verschiebungslösung. Ein Abbruch des Iterationsverfahrens erfolgt durch die Definition eines oder mehrerer Kriterien, z.B.:

- Unterschreiten eines kritischen absoluten oder relativen Wertes des Residuumvektors,
- Unterschreiten eines kritischen absoluten oder relativen Verschiebungszuwachses und / oder
- Erreichen einer maximalen Iterationsanzahl.

3.4 Parallelisierte nichtlineare FE-Rechnung

Die Entwicklung numerischer Verfahren zur Simulation des nichtlinearen Materialverhaltens von Faser-Kunststoffverbunden erfordert in der Regel die Implementierung neuartiger Diskretisierungsverfahren und angepasster Materialmodelle. Für die Umsetzung sind dabei zwei grundlegende Ansätze denkbar. Zum Einen bieten übliche kommerzielle FE-Pakete die Möglichkeit, einzelne neue Funktionalitäten anhand spezieller Schnittstellen zu implementieren. Alternativ ermöglicht die Entwicklung einer eigenständigen FE-Umgebung größtmögliche Flexibilität bei der Umsetzung der Modellierungsstrategie. Vor diesem Hintergrund wurde in der vorliegenden Arbeit der letztgenannte Ansatz verfolgt. Basierend auf der mathematischen Entwicklungsumgebung MATLAB wurde ein implizites FE-Paket entwickelt, das es erlaubt, die Kinematik von FKV-Werkstoffen effizient auf Basis der XFEM zu modellieren. Anhand spezieller Schnittstellen können beliebige Materialmodelle für das mechanische Verhalten der einzelnen Verbundbestandteile implementiert werden. Ausgewählte Schädigungsphänomene können durch die Kombination der XFEM mit einem Kohäsivzonenmodell sowie durch ein nichtlokales Kontinuumschädigungsmodell erfasst werden. Die Vielzahl der nichtlinearen Prozesse führt dabei zu einem erheblichen numerischen Aufwand, speziell bei der Berechnung dreidimensionaler Modelle. Zur Reduktion der Berechnungszeiten wurden daher Teile des inkrementellen, iterativen Lösungsalgorithmus von der CPU (Hauptprozessor, *Central Processing Unit*) auf die GPU (Grafikprozessor, *Graphics Processing Unit*) verlagert.

Seit der Einführung der CUDA-Schnittstelle (*Compute Unified Device Architecture*) durch NVIDIA im Jahr 2007, können NVIDIA Grafikkarten entgegen ihrer eigentlichen Bestimmung nicht nur zur Grafikkardarstellung, sondern auch als allgemeiner Coprozessor verwendet werden. Unter der Voraussetzung einer kompatiblen Grafikkarte ermöglicht die Schnittstelle den Zugriff auf den Grafikspeicher und die Verarbeitung der Daten auf dem Grafikprozessor. Die wesentlichen Unterschiede zwischen der CPU und der GPU liegen dabei in der Architektur der Recheneinheiten begründet. Auch wenn der Aufbau der beiden Prozessoren stark variiert, so können doch gewisse Parallelen in der Zusammensetzung gefunden werden. Wie in Abb. 3.7 dargestellt verfügen CPUs über eine geringe Anzahl von arithmetisch-logischen Einheiten (ALU), die jedoch mit einer sehr hohen Taktgeschwindigkeit angesprochen werden. Ein Großteil der Architektur eines CPU entfallen auf die Kontrolleinheit, die den Datenstrom organisiert und auf die ALUs verteilt und den Zwischenspeicher (Cache), in dem die zu verarbeitenden Daten vorgehalten werden. Der Aufbau erlaubt eine effiziente und schnelle Abarbeitung unterschiedlichster Rechenoperationen. Ein Grafikprozessor besteht im Vergleich zur CPU aus einer sehr großen Anzahl, langsam getakteter ALUs und einer vergleichsweise kleinen Kontroll- und Zwischenspeichereinheit. Die

Architektur ist dafür ausgelegt eine große Anzahl gleicher, einfacher Operationen parallel abzuwickeln. Die Parallelisierungsvariante wird dabei häufig auch als SIMD (*Single Instruction Multiple Data*) bezeichnet. Die schnelle, parallele Abarbeitung einer großen Menge von Daten auf der GPU verlangt nach einer schnellen Anbindung an den Speicher. Grafikkarten sind daher mit einem eigenständigen physikalischen Speicher (DRAM) ausgestattet, der eine wesentlich höhere Bandbreite ermöglicht als der Hauptspeicher (DRAM) des CPUs. Als Konsequenz daraus müssen alle Daten vor der Berechnung in den Speicher der GPU kopiert werden. Da die Anbindung des Grafikspeichers zum Hauptspeicher relativ langsam ist, sollten diese Operationen auf ein Minimum reduziert werden.

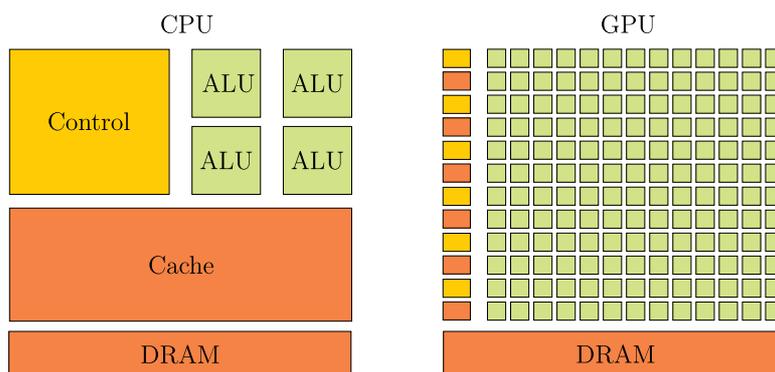


Abbildung 3.7: Vergleich des schematischen Aufbaus einer CPU und einer GPU, aus Speicher (DRAM), Zwischenspeicher (Cache), Kontrolleinheit (Control) und arithmetischen Einheiten (ALU) (vgl. NVIDIA (2013)).

Die Beschleunigung einer FE-Simulation durch die Einbindung der GPU in einen Teil der Berechnung kann auf vielfältige Weise erfolgen. Einen Überblick über verschiedene Ansätze wurde von Georgescu u. a. (2013) zusammengetragen. Der am häufigsten praktizierte Ansatz besteht in der Portierung des kompletten oder eines Teils des Gleichungssystemlösers auf die GPU. Der hierfür notwendige Programmieraufwand reduziert sich in der Regel auf die Einbindung einer entsprechenden Programmbibliothek. Eine umfassende und frei verfügbare Zusammenstellung von Sparse- und Linear-Algebra-Routinen bietet das Paket CUSP (2014).

Bei der Wahl des Gleichungssystemlösers sind zunächst direkte und iterative Verfahren zu unterscheiden. Die Vorteile eines direkten Gleichungssystemlösers liegen dabei in dessen Robustheit gegenüber schlecht konditionierten oder mit Nulleinträgen auf der Hauptdiagonalen versehenen Systemmatrizen. Beide Probleme können in einer anwendungsorientierten, nichtlinearen FE-Rechnung, speziell im Zusammenhang mit der Modellierung von Schädigungsphänomenen, auftreten. Demgegenüber zeigen iterative Gleichungssystemlöser eine wesentlich bessere Parallelisierbarkeit, womit sie besonders für die Architektur einer GPU geeignet sind.

Zur Evaluierung der Anwendbarkeit eines iterativen oder direkten Gleichungssystemlösers sowie für die Bewertung der Auswirkung auf die Rechenzeit eines Modells, sollen im Folgenden verschiedene Löser anhand von einfachen zwei- und dreidimensionalen FE-Modellen hinsichtlich ihrer numerischen Effizienz untersucht werden. Ein quadratisches bzw. quaderförmiges Berech-

nungsgebiet wird dafür homogen mit quadratischen 8-Knoten Rechteck- bzw. 20-Knoten Hexaederelementen vernetzt und mit Verschiebungsrandbedingungen belastet. Für die Lösung des Gleichungssystems (3.43) werden zwei direkte und ein iterativer Gleichungssysteml ser verglichen. Bei den direkten Verfahren kommt neben dem in MATLAB implementierten BACKSLASH-Operator, der auf einer Cholesky-Zerlegung basierte CHOLMOD2-Operator aus dem SUITESPARSE-Programmpaket von Davis (2013) zum Einsatz. Beide Verfahren nutzen ausschlielich die CPU. Als iteratives L sungsverfahren wird eine in dem Programmpaket CUSP enthaltene Routine der konjugierten Gradienten (CG, *Conjugate Gradients*) angewendet. Er wird zusammen mit einem JACOBI-Vorkonditionierer ausschlielich auf der GPU ausgef hrt. Alle Berechnungen werden auf einem Rechenknoten, ausgestattet mit einer AMD FX-8350 CPU (8 ALUs mit einer Taktrate von 4 GHz) und einem NVIDIA GTX680 GPU (1536 ALUs mit einer Taktrate von 1 GHz), durchgef hrt. Die Berechnungszeiten zum L sen des Gleichungssystems (3.43) eines zwei- und dreidimensionalen Modells sind in Abb. 3.8 in Abhangigkeit vom Freiheitsgrad dargestellt und in Tab. 3.1 zusammengefasst.

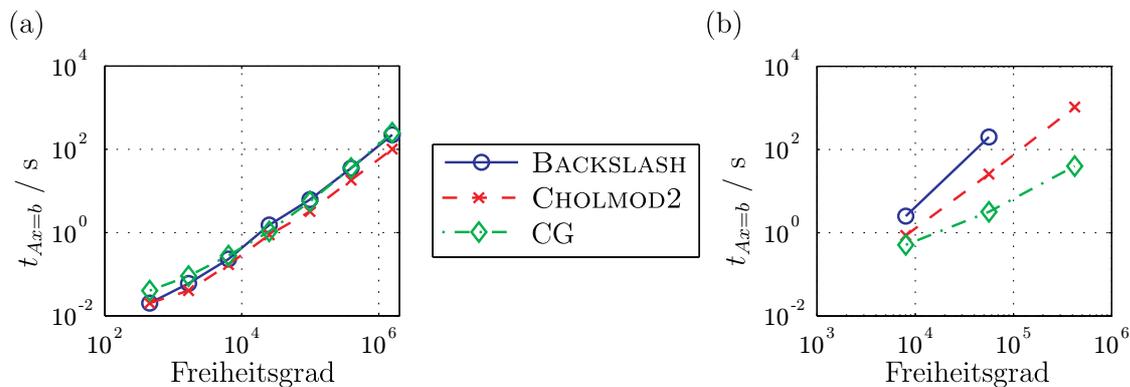


Abbildung 3.8: Rechenzeiten zum L sen des Gleichungssystems (3.43) in Abhangigkeit vom Freiheitsgrad f r: (a) zwei- und (b) dreidimensionale FE-Modelle. Verglichen werden die auf der CPU ausgef hrteten direkten L sungsverfahren BACKSLASH und CHOLMOD2 mit dem auf der GPU berechneten iterativen Verfahren der konjugierten Gradienten (CG).

Der Vergleich der direkten und iterativen Verfahren f r zwei- und dreidimensionale Modelle zeigt, dass die Rechenzeiten signifikant von der Besetzung und der Bandbreite der Systemmatrix abhangen. Wahrend die direkten Verfahren f r alle zweidimensionalen Diskretisierungen mit schwach besetzten Systemmatrizen k rzere Rechenzeiten als das iterative Verfahren liefern, fallt deren Effizienz f r dreidimensionale Modelle mit starker besetzten Systemmatrizen wesentlich ab. Unter den beiden direkten Verfahren ben tigt der CHOLMOD2 Gleichungssysteml ser durchweg geringere Rechenzeiten als der MATLAB eigene BACKSLASH-Operator. An dieser Stelle sei nochmals darauf verwiesen, dass iterative Verfahren bei schlecht konditionierten Systemmatrizen schlecht oder gar nicht konvergieren. Vor diesem Hintergrund erfolgt die Auswahl des Gleichungssysteml sers in Abhangigkeit vom zu berechnenden Problem. F r zweidimensionale

Tabelle 3.1: Rechenzeiten zum Lösen des Gleichungssystems (3.43) für unterschiedliche direkte und iterative Gleichungssystemlöser.

Modelldimension	Freiheitsgrad	Einträge $\neq 0$	Rechenzeiten / s		
			BACKSLASH	CHOLMOD2	CG
2D	454	12533	0,02	0,02	0,04
	1670	49117	0,06	0,04	0,09
	6406	194481	0,23	0,17	0,28
	25094	773993	1,52	0,88	1,06
	99334	3088090	6,17	3,21	5,58
	395270	12336531	35,00	18,17	35,43
	1567966	49314597	222,53	101,06	249,74
3D	8028	1085201	2,48	0,86	0,51
	56364	8658673	198,59	25,61	3,15
	421452	69141368	- ¹	1039,59	39,46

¹ Die Lösung konnte aufgrund von Hauptspeichermangel nicht ermittelt werden.

Modelle kommt dabei ausschließlich der CPU basierte CHOLMOD2 Löser zum Einsatz. Dreidimensionale Modelle werden zunächst mit einem iterativen, GPU basierten CG Verfahren gelöst. Führt dieses nach einer zu definierenden Anzahl von Iterationen nicht zu einer zufriedenstellenden Lösung, erfolgt ein automatischer Wechsel zu dem CHOLMOD2 Gleichungssystemlöser.

Eine weitere Möglichkeit zur Beschleunigung der inkrementellen FE-Simulation bietet die Portierung der Berechnung der Elementsteifigkeitsmatrizen sowie der inneren Elementknotenkraftvektoren auf die GPU. Speziell bei nichtlinearen FE-Simulationen entfällt ein Großteil der Rechenzeit auf diese Operationen. Da die Berechnung der einzelnen Elementbeiträge in der Regel unabhängig von anderen Elementen ist, sind diese Berechnungsschritte gut geeignet für eine Parallelisierung. Ein entsprechendes Verfahren wurde von Płaszewski u. a. (2010) für 2D und von Macioł u. a. (2010) für 3D Modelle untersucht. Speziell für dreidimensionale Elemente konnte ein signifikanter Geschwindigkeitszuwachs erzielt werden. Da in der vorliegenden Arbeit stark nicht-lineare Prozesse simuliert werden und das inkrementelle, iterative Lösungsverfahren eine häufige Berechnung der Tangentensteifigkeit und der inneren Knotenkräfte erfordert, wurde basierend auf dem letztgenannten Ansatz eine hybride Lösungsstrategie entwickelt. Die Berechnungsschritte innerhalb einer Iteration werden dabei in Abhängigkeit von ihrer Parallelisierbarkeit auf die CPU und die GPU verteilt. Der prinzipielle Ablauf ist in Abb. 3.9 veranschaulicht. Innerhalb einer Iteration wird zunächst die Verschiebungslösung zusammen mit allen notwendigen inneren Variablen der einzelnen Elemente in den Grafikspeicher portiert. Dies ermöglicht die parallele Berechnung der Elementsteifigkeitsmatrizen auf der GPU. Nach der Rückportierung in den Hauptspeicher kann die globale Steifigkeitsmatrix assembliert und der Verschiebungszuwachs

auf der CPU mittels eines geeigneten Gleichungssysteml6sers berechnet werden. Die Auswahl des Verfahrens erfolgt dabei nach den im vorhergehenden Absatz angegebenen Kriterien. Die anschließende parallele Aktualisierung der Elementknotenkraftvektoren erfolgt erneut auf der GPU, wohingegen die abschließende Berechnung des Residuumvektors und das Prüfen der Abbruchbedingung auf der CPU ausgeführt wird. Das Verfahren nutzt dabei effizient die Vorteile beider Rechenkerne. Unabhängige und häufig wiederkehrende Operationen werden parallelisiert auf der GPU ausgeführt. Rechenintensive und schlecht bzw. gar nicht parallelisierbare Rechenschritte verbleiben demgegenüber auf der CPU.

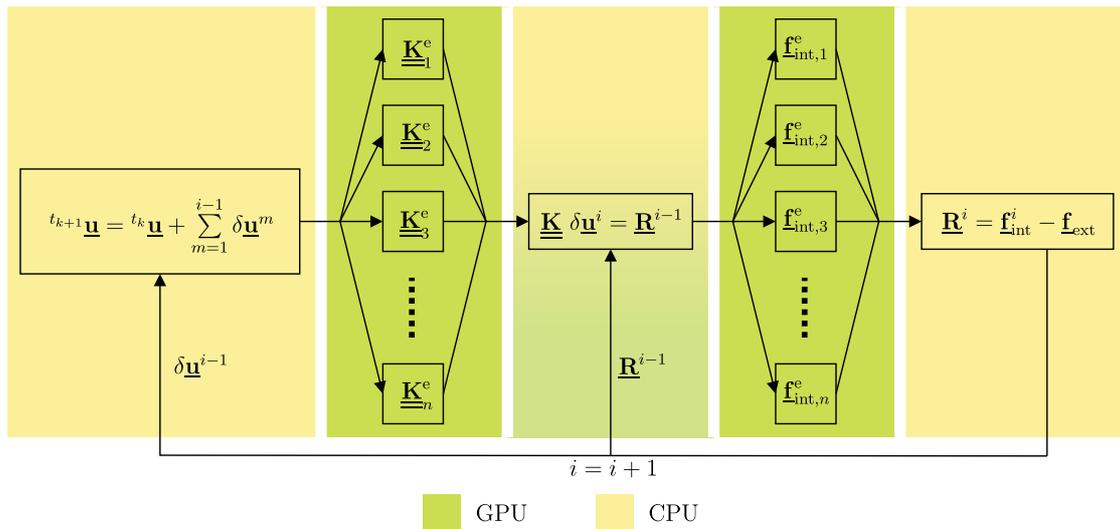


Abbildung 3.9: Prinzipieller Ablauf der Bestimmung des Gleichgewichts in einer nichtlinearen FE-Rechnung und die Aufteilung der Berechnungsschritte auf die CPU und die GPU zur optimalen Ausnutzung derer individueller Eigenschaften.

Zur Darstellung der Effizienz dieses hybriden Lösungsverfahrens sind in Abb. 3.10 die Berechnungszeiten für das Erstellen der Gesamtsteifigkeitsmatrix und des inneren Knotenkraftvektors im Vergleich mit einer rein CPU basierten Berechnung dargestellt. Hierfür wurden erneut die bereits zuvor beschriebenen, homogen vernetzten, zwei- und dreidimensionalen Modelle mit unterschiedlichen Diskretisierungen berechnet. Die konkreten Rechenzeiten sind in Tab. 3.2 in Abhängigkeit von der Elementanzahl zusammengefasst.

Man kann erkennen, dass das parallelisierte, hybride CPU-GPU Verfahren für zwei- und dreidimensionale Modelle durchweg effizienter arbeitet als eine rein serielle Berechnung auf der CPU. In Abhängigkeit von der Modelldimension und der Elementanzahl konnte eine Reduktion der Berechnungszeiten vom Faktor $\times 3 \dots \times 860$ für die Gesamtsteifigkeitsmatrix und $\times 3 \dots \times 30$ für den inneren Knotenkraftvektor erzielt werden.

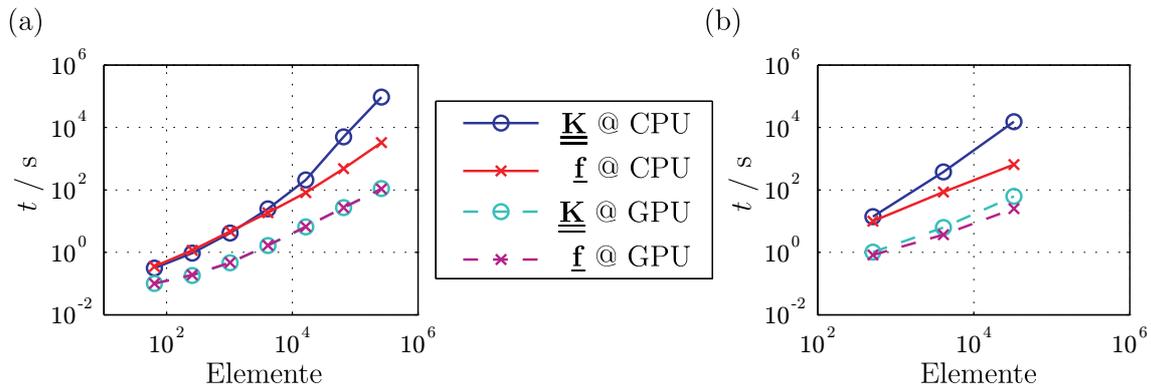


Abbildung 3.10: Rechenzeiten für das Erstellen der Gesamtsteifigkeitsmatrix und des inneren Knotenkraftvektors in Abhängigkeit von der Elementanzahl für: (a) zwei- und (b) dreidimensionale FE-Modelle. Verglichen wird eine rein CPU basierte Berechnung mit einem hybriden Lösungsverfahren entsprechend Abb. 3.9.

Tabelle 3.2: Rechenzeiten für das Erstellen der Gesamtsteifigkeitsmatrix und des inneren Knotenkraftvektors in Abhängigkeit von der Modelldimension und der Elementanzahl.

Modelldimension	Elemente	Rechenzeiten / s			
		CPU		CPU-GPU	
		$\underline{\underline{K}}$	$\underline{f}_{\text{int}}$	$\underline{\underline{K}}$	$\underline{f}_{\text{int}}$
2D	64	0,31	0,35	0,10	0,10
	256	0,94	1,16	0,18	0,19
	1024	4,13	4,65	0,46	0,47
	4096	24,74	18,64	1,64	1,67
	16384	209,39	80,98	6,52	6,61
	65536	4961,87	476,10	27,23	27,23
	262144	94296,41	3247,66	109,70	107,64
3D	512	13,87	9,90	1,02	0,82
	4096	378,11	85,27	6,27	3,67
	32768	15240,58	644,60	62,27	25,05

4 Höherwertige erweiterte Finite-Elemente-Methode

Für die verbesserte Approximation gekrümmter Unstetigkeiten, soll im folgenden Kapitel eine höherwertige XFEM entwickelt werden. Die Verwendung höherwertiger Elementformulierungen erlaubt dabei die Beschreibung gekrümmter Unstetigkeiten innerhalb des Elementgebiets. Für die Bestimmung der erforderlichen Level-Set-Funktion werden in Abschnitt 4.1 zwei unterschiedliche Verfahren diskutiert und hinsichtlich ihrer Anwendbarkeit und Genauigkeit verglichen.

Die gekrümmt verlaufenden Unstetigkeiten verhindern die Anwendung von Standardquadraturregeln für das gesamte Elementgebiet. Für die Integration der X-Elemente müssen daher alternative Verfahren angewendet werden. In Abschnitt 4.2 werden zunächst unterschiedliche Ansätze im Rahmen einer zweidimensionalen Modellierung verglichen. Basierend auf den gewonnenen Erkenntnissen erfolgt daraufhin die Formulierung eines dreidimensionalen Integrationsverfahrens für höherwertige X-Elemente.

Evaluierungsproblem

Die entwickelten Methoden zur Lokalisierung von Unstetigkeiten, als auch zur Integration von Elementen mit angereicherter Verschiebungsansatz, werden in den folgenden Abschnitten anhand eines Einschlussproblems evaluiert. Ein zylindrischer, isotroper, linear-elastischer Einschluss mit den Materialparametern E_1 , ν_1 und dem Radius a ist dabei eingebettet in einen größeren Zylinder mit dem Radius b und isotropem, linear-elastischem Materialverhalten (E_2 , ν_2). Am Außenradius des äußeren Zylinders ist die Verschiebung entsprechend Abb. 4.1 vorgegeben. Die analytische Lösung für das linear-elastische, mechanische Feldproblem kann für die rotationssymmetrische Anordnung aus dem radialen Kräftegleichgewicht, dem HOOKEschen Gesetz und den kinematischen Beziehungen der Kreisscheibe gewonnen werden (vgl. Balke (2010)). Unter der Voraussetzung, dass die Verschiebungen und der Spannungsvektor am Materialübergang stetig sind, gilt für die Verschiebung (Sukumar u. a. (2001))

$$u_r = \begin{cases} \left[\left(1 - \frac{b^2}{a^2}\right) \alpha + \frac{b^2}{a^2} \right] r & \text{für } 0 \leq r \leq a \\ \left(r - \frac{b^2}{r} \right) \alpha + \frac{b^2}{r} & \text{für } a \leq r \leq b \end{cases}, \quad (4.1)$$

$$u_\theta = 0$$

mit

$$\alpha = \frac{(\lambda_1 + \mu_1 + \mu_2)b^2}{(\lambda_2 + \mu_2)a^2 + (\lambda_1 + \mu_1)(b^2 - a^2) + \mu_2b^2} \quad (4.2)$$

und den Lamé-Konstanten $\lambda = \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)}$ und $\mu = \frac{E}{2(1+\nu)}$. Die ebenen Dehnungen in Radial- und Umfangsrichtung ergeben sich aus $\varepsilon_r = u_{r,r}$ und $\varepsilon_\theta = u_r/r$ zu

$$\varepsilon_r = \begin{cases} \left(1 - \frac{b^2}{a^2}\right) \alpha + \frac{b^2}{a^2} & \text{für } 0 \leq r \leq a, \\ \left(1 + \frac{b^2}{r^2}\right) \alpha - \frac{b^2}{r^2} & \text{für } a \leq r \leq b, \end{cases}, \quad (4.3)$$

$$\varepsilon_\theta = \begin{cases} \left(1 - \frac{b^2}{a^2}\right) \alpha + \frac{b^2}{a^2} & \text{für } 0 \leq r \leq a, \\ \left(1 - \frac{b^2}{r^2}\right) \alpha + \frac{b^2}{r^2} & \text{für } a \leq r \leq b, \end{cases}. \quad (4.4)$$

Für die entsprechenden Spannungen gilt in Abhängigkeit der Materialparameter

$$\sigma_r = 2\mu\varepsilon_r + \lambda(\varepsilon_r + \varepsilon_\theta), \quad (4.5)$$

$$\sigma_\theta = 2\mu\varepsilon_\theta + \lambda(\varepsilon_r + \varepsilon_\theta). \quad (4.6)$$

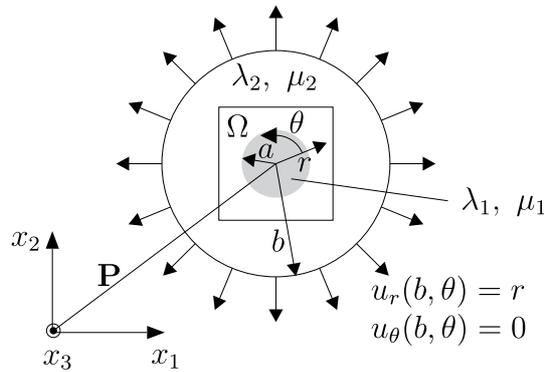


Abbildung 4.1: Einschlussproblem.

Zur Bewertung der Genauigkeit der entwickelten numerischen Verfahren werden im Folgenden stets zwei Fehlernormen berechnet, die LEBESQUE (L_2)- und die Energienorm (en). Entsprechend Fish und Belytschko (2007) berechnet sich die L_2 -Norm aus der normierten Abweichung des Verschiebungsfeldes \mathbf{u} von einer Referenzlösung \mathbf{u}^{Ref}

$$\|\mathbf{e}\|_{L_2} = \frac{\|\mathbf{u} - \mathbf{u}^{\text{Ref}}\|_{L_2}}{\|\mathbf{u}^{\text{Ref}}\|_{L_2}} = \frac{\left(\int_{\Omega} (\mathbf{u} - \mathbf{u}^{\text{Ref}})^T (\mathbf{u} - \mathbf{u}^{\text{Ref}}) d\mathbf{x} \right)^{\frac{1}{2}}}{\left(\int_{\Omega} (\mathbf{u}^{\text{Ref}})^T \mathbf{u}^{\text{Ref}} d\mathbf{x} \right)^{\frac{1}{2}}}. \quad (4.7)$$

Sie ermöglicht damit eine Aussage über die Güte der Approximation der primären Feldvariablen. In Abhängigkeit von der Anwendung kann neben der Genauigkeit der Verschiebungslösung

auch der Fehler bei den abgeleiteten Feldgrößen (Spannung, Verzerrung) von Interesse sein. Eine entsprechende Aussage kann auf Basis der Energienorm

$$\|e\|_{\text{en}} = \frac{\|\mathbf{u} - \mathbf{u}^{\text{Ref}}\|_{\text{en}}}{\|\mathbf{u}^{\text{Ref}}\|_{\text{en}}} = \frac{\left(\frac{1}{2} \int_{\Omega} (\underline{\boldsymbol{\sigma}} - \underline{\boldsymbol{\sigma}}^{\text{Ref}})^T (\underline{\boldsymbol{\varepsilon}} - \underline{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\text{Ref}}) d\mathbf{x} \right)^{\frac{1}{2}}}{\left(\frac{1}{2} \int_{\Omega} (\underline{\boldsymbol{\sigma}}^{\text{Ref}})^T \underline{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\text{Ref}} d\mathbf{x} \right)^{\frac{1}{2}}} \quad (4.8)$$

getroffen werden. Sie vergleicht die im Berechnungsgebiet gespeicherte potentielle Energie mit der der Referenzlösung. Die Berechnung der relativen Fehlernormen für ausgewählte Diskretisierungsstufen ermöglicht des Weiteren eine Aussage über die Konvergenz der einzelnen Verfahren bei Netzverfeinerung.

Die Berechnung der Fehlernormen sowie der Konvergenzraten erfolgt im Rahmen der vorliegenden Arbeit für ein quadratisches Berechnungsgebiet Ω entsprechend der Anordnung in Abb. 4.1. Mit einer Kantenlänge von 10 mm wird der innere Zylinder mit dem Radius $a = 3,9894$ mm und den Materialkennwerten $E_1 = 1000$ MPa, $\nu_1 = 0,2$ komplett eingeschlossen. Der Radius des äußeren Zylinders mit den Materialkennwerten $E_2 = 100$ MPa, $\nu_2 = 0,4$ beträgt $b = 10$ mm. Auf dem gesamten Rand des Berechnungsgebietes werden wesentliche Randbedingungen entsprechend der analytischen Lösung (4.1) vorgegeben. Die Diskretisierung des Berechnungsgebietes erfolgt durch eine homogene Vernetzung mit einer Teilung von 8, 16, 32, 64 und 128 in x_1 und x_2 Richtung. Für die Evaluierung dreidimensionaler Modelle werden zusätzlich 2 Elemente in x_3 Richtung berücksichtigt.

4.1 Höherwertige Level-Set-Funktion

In den folgenden Abschnitten 4.1.1 und 4.1.2 werden zwei unterschiedliche Ansätze zur Berechnung der Level-Set-Funktion (3.5) diskutiert.

4.1.1 Globale Level-Set-Funktion

Wie in Abschnitt 3.1 dargestellt, erfolgt die praktische Anwendung der LS-Funktion für die XFEM üblicherweise auf Basis der diskreten Form (3.5). Die Knotenwerte $\hat{\varphi}_{i,j}$ entsprechen dabei dem vorzeichenbehafteten Abstand des i -ten Knotens zu der j -ten Unstetigkeit. Existieren mehrere LS-Funktionen innerhalb eines Modells (vgl. Abb. 3.2), so kann ein Knoten mehrere LS-Werte aufweisen. Ein Wechsel des Vorzeichens in den knotenbasierten LS-Werten eines Elements weist dabei auf den Verlauf einer Unstetigkeit innerhalb des Elementgebiets hin. Während ein Element theoretisch durch beliebig viele Unstetigkeiten geschnitten werden kann, soll die Anzahl der Diskontinuitäten pro Element in der vorliegenden Modellierung auf zwei begrenzt werden.

Erfolgt die Zuordnung der LS-Knotenwerte elementübergreifend, so entspricht dies einer globalen Lokalisierung der Unstetigkeiten (vgl. Abb. 4.2). Die Interpolation der Knotenwerte durch die Elementformfunktionen führt zu einer impliziten Beschreibung der Diskontinuität. Die Güte der Approximation wird im Folgenden anhand von akademischen Beispielen sowohl qualitativ

als auch quantitativ untersucht. Für die qualitative Analyse soll eine analytisch gegebene kugelförmige Unstetigkeit durch eine auf den Elementformfunktionen basierenden LS-Funktion abgebildet werden. Die Knotenwerte der LS-Funktion werden elementübergreifend für den i -ten Knoten aus

$$\hat{\varphi}_i = \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_s\| - R \quad (4.9)$$

berechnet. Der Mittelpunkt der Kugel mit dem Radius R ist durch den Punkt \mathbf{x}_s gegeben. Die Verwendung bilinearer und trilinearier Formfunktionen für eine zweidimensionale respektive dreidimensionale Approximation der originalen Unstetigkeit Γ_d führt zu erheblichen Abweichungen von der ursprünglichen Unstetigkeit (vgl. Abb. 4.2). Unabhängig von der Dimension ist die LS-Funktion nicht in der Lage, die Krümmung innerhalb der einzelnen Elemente abzubilden. Der

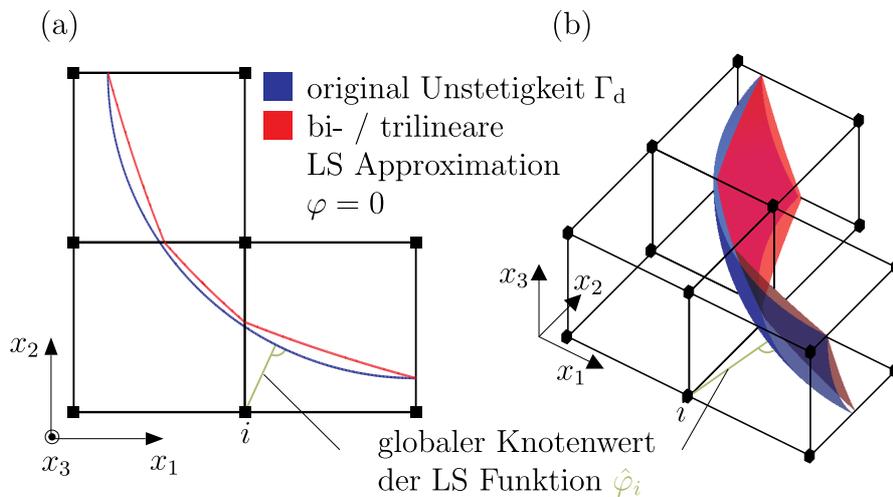


Abbildung 4.2: Globale LS-Beschreibung einer kugelförmigen Unstetigkeit Γ_d auf Basis linearer: (a) 2D Rechteck- und (b) 3D Hexaederelemente.

auftretende Geometriefehler kann durch die Verwendung einer feineren Vernetzung bzw. von Elementen höherer Ordnung reduziert werden. Bereits die Verwendung quadratischer Elementformulierungen führt bei gleichbleibender Elementgröße zu einer signifikanten Verbesserung der Approximation. Die in Abb. 4.3 dargestellte bi- bzw. triquadratische LS-Funktion zeigt nur minimale Abweichungen von dem Verlauf der originalen Unstetigkeit.

Die Quantifizierung des Genauigkeitszuwachses erfolgt anhand einer Konvergenzuntersuchung zu dem in Abb. 4.1 dargestellten Einschlussproblem. Die Beschreibung der Materialgrenze zwischen inneren und äußeren Zylinder erfolgt dabei auf Basis der XFEM mit einem schwach angereicherten Verschiebungsfeld. Für die Integration der X-Elemente mit gekrümmten Unstetigkeitsverläufen im Elementgebiet wird eine konsistente Integration auf Basis von höherwertigen Integrationsbereichen verwendet (vgl. Abschnitt 4.2). Die berechneten Fehlernormen (4.7) und (4.8) sind in Abb. 4.4 über der charakteristischen Elementkantenlänge h aufgetragen. Der Übergang von linearen zu quadratischen Formfunktionen liefert für eine zwei- und dreidimensionale Modellierung einen signifikanten Zuwachs an Genauigkeit, sowohl für die Verschiebungslösung als

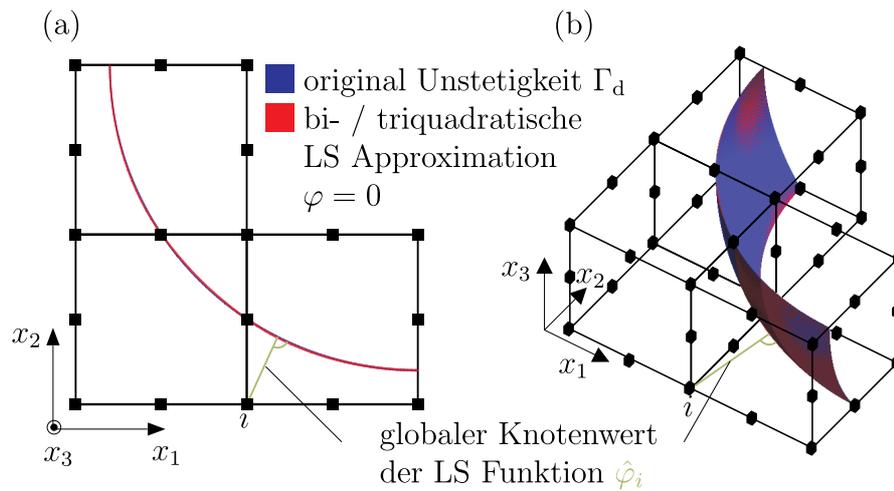


Abbildung 4.3: Globale LS-Beschreibung einer kugelförmigen Unstetigkeit Γ_d auf Basis quadratischer: (a) 2D Rechteck- und (b) 3D Hexaederelemente.

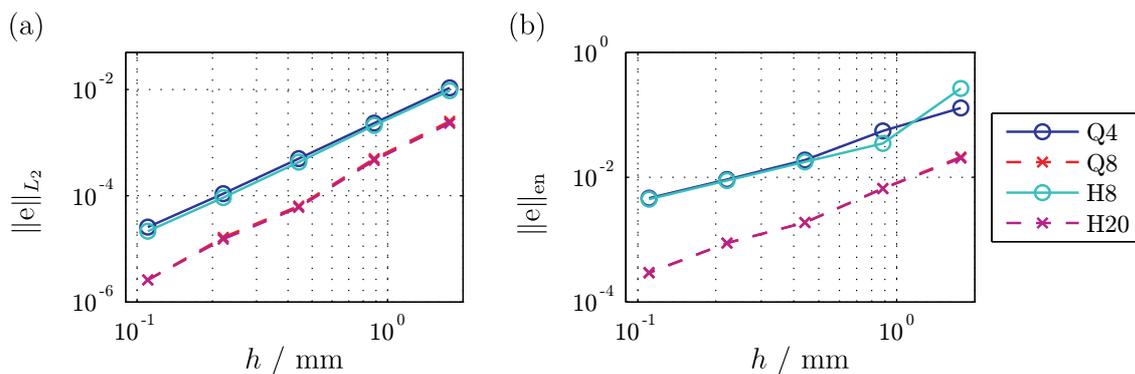


Abbildung 4.4: Konvergenzuntersuchung für die Approximation gekrümmter Unstetigkeiten auf Basis einer globalen Level-Set-Wert Berechnung: (a) die normalisierte L_2 Norm und (b) die normalisierte Energienorm für bilineare (Q4) und biquadratische (Q8) Rechteckelemente sowie trilineare (H8) und triquadratische (H20) Hexaederelemente.

auch für die abgeleiteten Feldgrößen. Die ermittelten Konvergenzraten sind in Tab. 4.1 zusammengefasst. Wie zu erwarten, liefern die quadratischen Elementformulierungen eine verbesserte Konvergenz, im Vergleich zu den linearen Ansätzen.

4.1.2 Lokale Level-Set-Funktion

Im vorhergehenden Abschnitt erfolgte die Berechnung der Knotenwerte für die LS-Funktion direkt aus der impliziten, analytischen Beschreibung einer Unstetigkeit. Da eine solche Funktion

Tabelle 4.1: Konvergenzraten für die LEBESQUE- $\|e\|_{L_2}$ und die Energienorm $\|e\|_{\text{en}}$ eines Einschlussproblems unter Verwendung bilinearer (Q4) und biquadratischer (Q8) Rechteckelemente, trilinearer (H8) und triquadratischer (H20) Hexaederelemente und einer globalen Berechnung der Level-Set-Werte.

Elementtyp	Q4	Q8	H8	H20
$\ e\ _{L_2}$	2,18	2,48	2,20	2,45
$\ e\ _{\text{en}}$	1,22	1,53	1,37	1,51

nur für einzelne geometrische Spezialfälle verfügbar ist, müssen für die Abbildung komplexerer Geometrien alternative Verfahren für die Bestimmung der LS-Knotenwerte entwickelt werden. Eine entsprechende Methode für die Überführung von CAD Geometrien in eine LS-Beschreibung wurde jüngst von Moumnassi u. a. (2011) veröffentlicht. Hierbei stand speziell die Abbildung scharfkantiger Konturen im Vordergrund. Gekrümmte Strukturen werden in Anlehnung an die Arbeiten von Dréau u. a. (2010) durch ein lokal adaptiv verfeinertes Subnetz erfasst. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wird ein alternativer Ansatz verfolgt. Er basiert auf der von Kästner (2009) motivierten lokalen LS-Beschreibung. Die Rekonstruktion der Unstetigkeit erfolgt dabei elementweise anhand diskreter Punkte. Ein ähnliches Verfahren wird von Pereira u. a. (2009) für die Beschreibung von Rissen angewendet. Die Erweiterung der Methode auf LS-Funktionen höherer Ordnung erlaubt eine signifikante Verbesserung der Beschreibung gekrümmter Unstetigkeiten.

Das von Kästner u. a. (2011) dargestellte Verfahren, basierend auf linearen Elementformulierungen, nutzt die Schnittpunkte der Elementkanten $\hat{\mathbf{x}}^s$ mit der Geometrie fläche Γ_d für die lokale Rekonstruktion der Unstetigkeit. Je nach Art der Problemstellung, zwei- oder dreidimensional, wird der Verlauf durch eine lineare- bzw. bilineare Parameterfunktion

$$\mathbf{x}^s(\psi) = \sum_k N_k(\psi) \hat{\mathbf{x}}_k^s \quad (4.10)$$

innerhalb eines einzelnen Elements angenähert. Der i -te Knotenwert der LS-Funktion im j -ten Element kann damit durch

$$\hat{\varphi}_i^j = \min_{\psi} \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}^s(\psi)\| \quad (4.11)$$

berechnet werden. Der gesamte Ablauf der lokalen Berechnung der LS-Funktion ist dabei in Abb. 4.5 für ein einzelnes trilineares Hexaederelement dargestellt und kann in die folgenden drei wesentlichen Schritte zusammengefasst werden:

1. Identifikation der Schnittpunkte der Elementkanten mit der Unstetigkeit Γ_d ;
2. Elementweise Approximation des Unstetigkeitsverlaufs durch eine Gerade (2D) oder Parameterfläche (3D);
3. Berechnung des *lokalen* vorzeichenbehafteten Abstands $\hat{\varphi}_i^j$ für jeden Knoten i des Elements j relativ zu den zuvor definierten Geraden bzw. Parameterflächen. Setzt sich im dreidimen-

sionalen Fall die Parameterfläche aus mehreren Teilflächen (Drei- und Vierecke) zusammen, so wird entsprechend der Forderung (3.2) stets der minimale Abstand ausgewählt. Der Verlauf der Unstetigkeit ist damit implizit durch die LS-Funktion (3.5) gegeben.

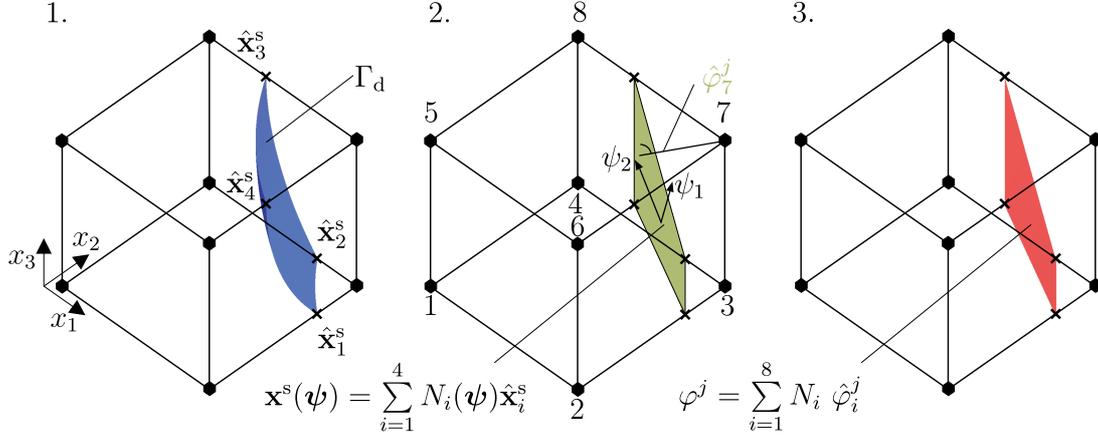


Abbildung 4.5: Berechnung der lokalen LS-Funktion φ^j für ein trilineares Hexaederelement entsprechend der zuvor beschriebenen Teilschritte.

Während die Schnittpunkte mit den Elementkanten mit dem Originalverlauf übereinstimmen, gehen die Informationen über die Krümmung innerhalb der Elemente durch die lineare Rekonstruktion mit (4.10) verloren. Die lokale Rekonstruktion der Unstetigkeit führt zu abweichenden Knotenwerten der LS-Funktion in angrenzenden Elementen (vgl. Abb. 4.6). Bei der Anwendung der LS-Funktion innerhalb der XFEM führt dies zu einer Verletzung der Kontinuitätsanforderungen an die primären Feldvariablen an den Elementkanten angrenzender X-Elemente (vgl. Abschnitt 3.1.2).

Zur Reduzierung der zuvor erwähnten Diskontinuität sowie für eine verbesserte Approximation gekrümmter Unstetigkeiten wurde das Konzept der lokalen LS-Berechnung auf die Verwendung höherwertiger Elementformulierungen erweitert. Eine Ausnutzung der Eigenschaften höherwertiger Formfunktionen erfordert dabei ein angepasstes Berechnungsverfahren für die lokalen LS-Knotenwerte. Entsprechend dem in Abb. 4.7 dargestellten Vorgehen werden neben den Schnittpunkten mit den Elementkanten zusätzliche Punkte auf der Geometrie fläche Γ_d identifiziert. Hierfür wird zunächst für jede mögliche Paarung zweier Kantenschnittpunkte $\hat{\mathbf{x}}_k^s$ und $\hat{\mathbf{x}}_l^s$ mit $k \neq l$ der Mittelpunkt

$$\hat{\mathbf{x}}_{kl}^m = \frac{1}{2} (\hat{\mathbf{x}}_k^s + \hat{\mathbf{x}}_l^s) \quad (4.12)$$

bestimmt. Ausgehend von diesem Startpunkt erfolgt die Identifikation eines weiteren diskreten Punktes auf der Geometrie fläche Γ_d . Hierfür ist neben dem Startpunkt der Richtungsvektor \mathbf{r}_{kl}^m erforderlich. Für zweidimensionale Problemstellungen kann dieser aus dem Richtungsvektor zwischen den beteiligten Kantenschnittpunkten

$$\mathbf{r}_{kl}^m \perp \mathbf{t}_{kl}^m \quad \text{mit} \quad \mathbf{t}_{kl}^m = \hat{\mathbf{x}}_k^s - \hat{\mathbf{x}}_l^s \quad (4.13)$$

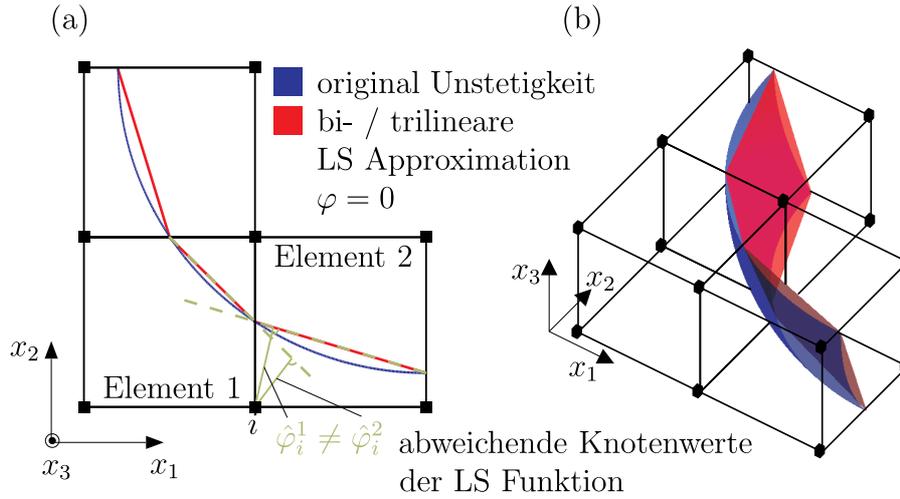


Abbildung 4.6: Lineare elementweise Rekonstruktion der Unstetigkeit Γ_d , basierend auf den Schnittpunkten mit den Elementkanten: (a) abweichende Knotenwerte in angrenzenden Elementen und die resultierende zweidimensionale und (b) dreidimensionale LS-Approximation.

abgeleitet werden. Für dreidimensionale Problemstellungen ist die Identifikation des Richtungsvektors $\underline{\mathbf{r}}_{kl}^m$ ungleich schwieriger, da ausgehend von dem Startpunkt $\hat{\mathbf{x}}_{kl}^m$ eine Vielzahl von Suchrichtungen möglich sind. Als zuverlässig wurde ein Verfahren zur Bestimmung des Richtungsvektors $\underline{\mathbf{r}}_{kl}^m$ auf Basis der Tangentenvektoren der beteiligten Elementkanten $\underline{\mathbf{t}}_k$ und $\underline{\mathbf{t}}_l$ identifiziert (vgl. Abb. 4.7). Es gilt

$$\underline{\mathbf{r}}_{kl}^m = \underline{\mathbf{t}}_k + T_{kl}\underline{\mathbf{t}}_l, \quad (4.14)$$

wobei die Art der Kombination durch die Koeffizientenmatrix

$$\underline{\underline{\mathbf{T}}} = \begin{bmatrix} & -1 & 0 & -1 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & & -1 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & & -1 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & -1 & & -1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -1 & & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 1 & 0 & 0 & 0 & & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 & 0 & 0 & & 0 & 0 & -1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 1 & 0 & 0 & 0 & & 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 1 & 0 & 0 & & -1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & -1 & 0 & -1 & & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 1 & 0 & -1 & & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & -1 & -1 & 0 & -1 & \end{bmatrix} \quad (4.15)$$

bestimmt wird. Das Verfahren ist in Abb. 4.7 für eine dreidimensionale Problemstellung skizziert. Mit den zusätzlichen diskreten Stützstellen \hat{x}_i^s kann entsprechend des bereits zuvor verwendeten

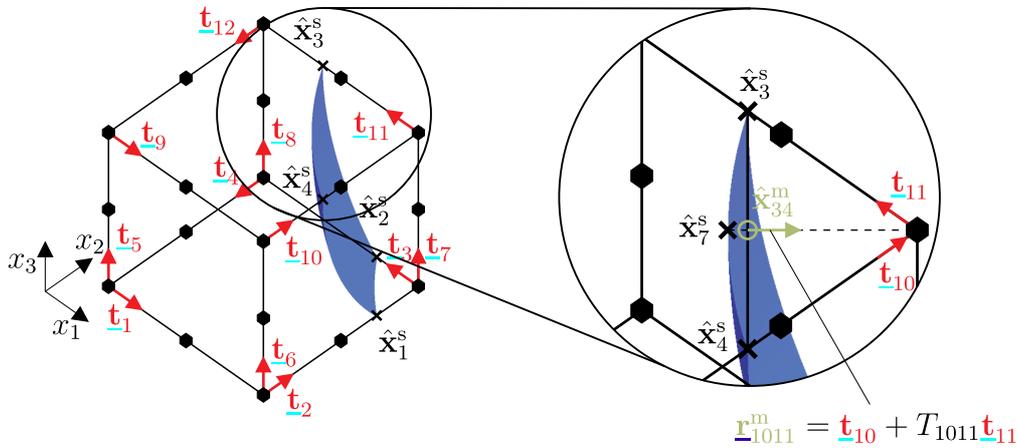


Abbildung 4.7: Identifikation zusätzlicher diskreter Punkte auf der Geometriefläche Γ_d für dreidimensionale Problemstellungen.

Ansatzes (4.10) eine lokale quadratische (2D) bzw. biquadratische (3D) Parameterfunktionen definiert werden. Diese ermöglicht mit (4.11) die Berechnung der lokalen LS-Knotenwerte.

Der resultierende elementübergreifende Verlauf der LS-Funktion für die lokale Rekonstruktion einer kugelförmigen Unstetigkeit ist in Abb. 4.8 für den zwei- und dreidimensionalen Fall skizziert. Unabhängig von der Dimension der Problemstellung, liefert das Verfahren eine sehr gute Übereinstimmung zwischen LS-Funktion und der original Unstetigkeit Γ_d . Neben den Schnittpunkten mit den Elementkanten wird auch die Krümmung des Unstetigkeitsverlaufs innerhalb der Elemente erfasst. Die berechneten lokalen LS-Werte angrenzender Elemente zeigen nur minimale Abweichungen. Entsprechend kann durch die Verwendung von höherwertigen Elementen, in Verbindung mit einem angepassten LS-Berechnungsverfahren, die zuvor erwähnte Diskontinuität linearer Elemente signifikant reduziert werden.

Zur Evaluierung des Verfahrens wurde erneut eine Konvergenzuntersuchung zu dem in Abb. 4.1 dargestellten Einschlussproblem durchgeführt. Wie bei der Analyse der globalen Level-Set-Funktion in Abschnitt 4.1.1, wird bei der Approximation gekrümmter Unstetigkeiten auf Basis quadratischer Elemente eine konsistente Integration entsprechend der Ausführungen in Abschnitt 4.2 durchgeführt. Die berechneten Fehlernormen (4.7) und (4.8) für unterschiedliche Diskretisierungsstufen sind in Abb. 4.9 dargestellt. Der Vergleich des Fehlerniveaus mit den Ergebnissen der globalen Level-Set-Berechnung in Abb. 4.4 zeigt nur minimale Abweichungen. Das entwickelte Verfahren zur lokalen, elementweisen Rekonstruktion der Unstetigkeit auf Basis diskreter Stützstellen ist zuverlässig in der Lage, gekrümmte Verläufe auch innerhalb des Elementgebiets zu erfassen. Die in Tab. 4.2 zusammengefassten Konvergenzraten sind speziell für die quadratischen Elementformulierungen auf dem Niveau der entsprechenden globalen LS-Approximation. Die Abweichungen bei der Verwendung linearer Ansätze ist auf unterschiedliche Kontinuitätseigenschaften der LS-Funktion zurückzuführen. Der methodenbedingte stetige Ver-

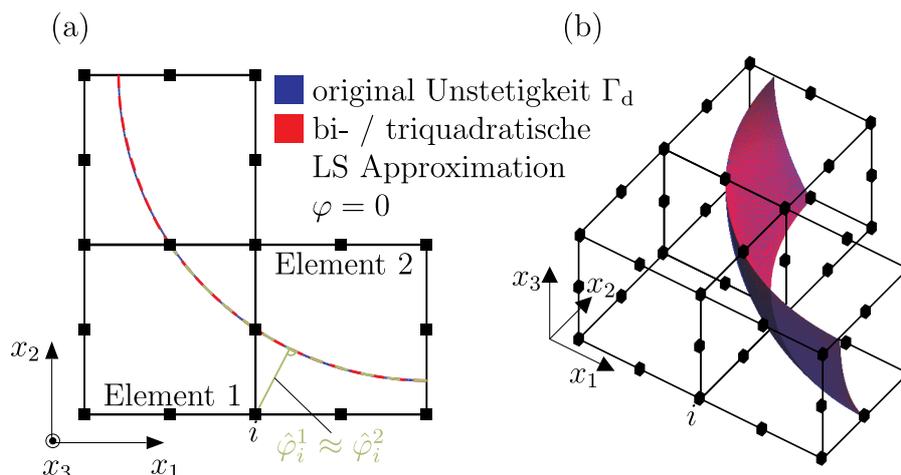


Abbildung 4.8: Höherwertige elementweise Rekonstruktion der Unstetigkeit Γ_d basierend auf den Schnittpunkten mit den Elementkanten und zusätzlichen Stützstellen innerhalb der Elemente: (a) zweidimensionale und (b) dreidimensionale LS-Approximation.

lauf der global berechneten LS-Funktion kann, wie schon zuvor erwähnt, bei einer elementweisen Berechnung der Level-Set-Werte und unter Verwendung linearer Formfunktionen nicht sichergestellt werden.

Tabelle 4.2: Konvergenzraten für die LEBESQUE- $\|e\|_{L_2}$ und die Energienorm $\|e\|_{\text{en}}$ eines Einschlussproblems unter Verwendung bilinearer (Q4) und biquadratischer (Q8) Rechteckelemente, trilinearer (H8) und triquadratischer (H20) Hexaederelemente und einer lokalen Berechnung der Level-Set-Werte.

Elementtyp	Q4	Q8	H8	H20
$\ e\ _{L_2}$	1,99	2,48	2,01	2,45
$\ e\ _{\text{en}}$	1,15	1,53	0,99	1,51

4.2 Konsistente numerische Integration

Die Lösung eines Randwertproblems auf Basis der diskretisierten Variante der schwachen Form (3.39) erfordert die Integration der primären und sekundären Feldvariablen über die einzelnen Elementgebiete. Entsprechend der in den vorangegangenen Abschnitten erläuterten Grundlagen der FEM führt dies zu einer Integration der polynomialen Elementformfunktionen bzw. deren Ableitungen. Standardquadraturregeln, wie die GAUSS-Integration, liefern lediglich exakte Ergebnisse für polynomiale Funktionen. Bereits die Berücksichtigung verzerrter Elemente führt

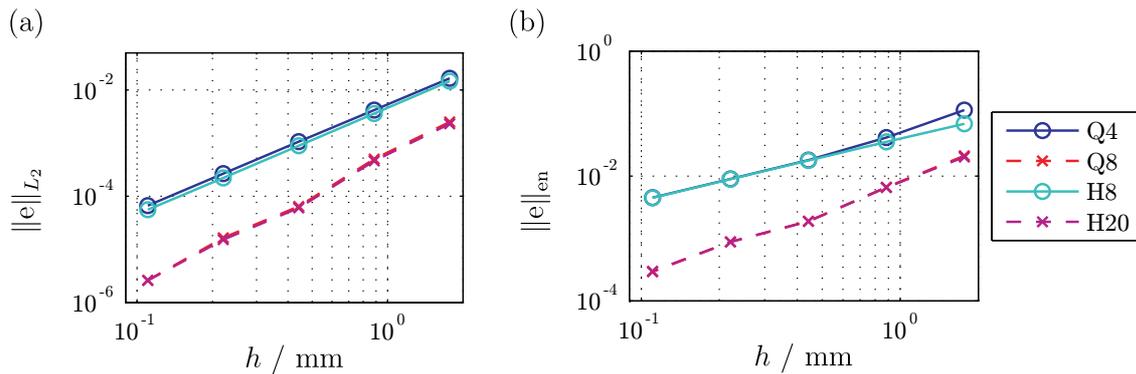


Abbildung 4.9: Konvergenzuntersuchung für die Approximation gekrümmter Unstetigkeiten auf Basis einer lokalen, elementweisen Level-Set-Berechnung: (a) die normalisierte L_2 Norm und (b) die normalisierte Energienorm für bilineare (Q4) und biquadratische (Q8) Rechteckelemente sowie trilineare (H8) und triquadratische (H20) Hexaederelemente.

aufgrund der Geometrietransformation zu einem Abfall der Genauigkeit. Wesentlich schwerwiegender ist jedoch der Genauigkeitsverlust bei der Integration diskontinuierlicher Funktionen, wie sie in den zuvor beschriebenen X-Elementen auftreten. Die Modellierung starker und schwacher Unstetigkeiten im Elementgebiet verhindert eine direkte Integration des gesamten Elements. Vor diesem Hintergrund werden in der Literatur eine Vielzahl von Ansätzen zur Integration angereicherter Elemente diskutiert. Einzelne Varianten sollen in den folgenden Abschnitten diskutiert, erweitert und anhand von numerischen Beispielen evaluiert werden.

4.2.1 Zweidimensionale Integration

Die am häufigsten angewandte Methode zur Integration von X-Elementen basiert auf einer Unterteilung des Elementgebiets $\int_{\mathcal{B}^e} \dots dV = \sum_{o=1}^{n_{int}} \int_{\mathcal{B}_o^{int}} \dots dV$ in eine endliche Anzahl von Teilbereichen, in denen die zu integrierenden Funktionen einen kontinuierlichen Verlauf aufweisen (Moës u. a. (1999)). Die Aufteilung in standardisierte Bereiche wie Drei- und Vierecke erlaubt dabei die Anwendung von Standardquadraturregeln. Da dieses Vorgehen speziell für dreidimensionale Problemstellungen sehr aufwändig ist, werden in der Literatur alternative Verfahren diskutiert.

In dem von Ventura (2006) vorgestellten Verfahren werden die diskontinuierlich verlaufenden Funktionen durch äquivalente polynomiale Funktionen angenähert. Deren kontinuierlicher Verlauf ermöglicht die Verwendung von Standardquadraturregeln über das gesamte Elementgebiet. Ein neuerer Ansatz von Natarajan u. a. (2009, 2010) basiert auf der SCHWARZ-CHRISTOFFEL-Transformation polygonaler Bereiche, die durch die Unterteilung des Elementes durch die Unstetigkeit entstehen. Die Transformation auf kreisrunde Gebiete erlaubt die Anwendung von Mittelpunkt- oder GAUSS-CHEBYSHEV-Quadraturregeln. Komplet geschnittene Elemente verlangen dabei nach zwei getrennten Transformationen, während teilweise geschnittene Elemente,

wie z.B. Rissspitzenelemente, mit nur einer Transformation erfasst werden können. Ein wesentlicher Nachteil der Methode, die auf einer Transformation in die komplexe Ebene basiert, besteht in der Tatsache, dass sie auf den zweidimensionalen Fall beschränkt ist.

Für die Integration von $1/r^\alpha$ Singularitäten, wie sie charakteristisch für das Rissspitzennahfeld der auf der linearelastischen Bruchmechanik basierten XFEM sind, wurden von Mousavi und Sukumar (2010a) und Park u. a. (2009) spezielle Transformationstechniken entwickelt, die eine direkte und akkurate Integration ermöglichen. Beide Ansätze sind für zwei- und dreidimensionale Problemstellungen geeignet. Zur Beseitigung der Singularitäten können alternativ spezielle Quadraturregeln auf Basis von Momentenverfahren bestimmt werden, die ein direktes Integrieren der angereicherten Elemente ermöglichen (Mousavi u. a. (2010); Mousavi und Sukumar (2010b)). Da die abgeleiteten Quadraturregeln stets nur für bestimmte Fälle der Elementaufteilung und -anreicherung gültig sind, ist das Verfahren besonders für eine dreidimensionale Anwendung als sehr aufwändig einzustufen. Vielversprechender ist dem gegenüber eine von Mousavi und Sukumar (2011) vorgestellte Methode zur Integration beliebiger Polytope, wie sie bei der Teilung eines Elements durch eine Unstetigkeit entstehen. Das Verfahren basiert auf dem von Lasserre (1998) vorgestellten Ansatz zur Reduktion der Integrationsordnung, welcher in Abschnitt 4.2.1 näher vorgestellt und erweitert wird. Eine weitere, in der Literatur häufig diskutierte Methode zur Reduktion des Integrationsaufwands ergibt sich aus der Kombination der XFEM mit dem sogenannten *strain-smoothing*-Verfahren. Der in Abschnitt 4.2.1 untersuchte Ansatz hat seinen Ursprung in netzfreien Berechnungsverfahren und wurde von Liu u. a. (2007) auf die FEM erweitert. Für eine auf linearen Ansatzfunktionen basierende XFEM konnte durch Bordas u. a. (2011) gezeigt werden, dass das Verfahren bei einem reduzierten numerischen Aufwand ähnliche Genauigkeiten liefert wie herkömmliche Integrationsverfahren. Die Konvergenz für Elemente höherer Ordnung wurde von Bordas u. a. (2011) zunächst nur im Zusammenhang mit unangereicherten Elementen untersucht. Die beobachteten suboptimalen Konvergenzraten sind in Übereinstimmung mit den Untersuchungen von Kästner u. a. (2013) zur Kombination der Methode mit der XFEM für ein magnetostatisches Feldproblem.

Die drei Verfahren - höherwertige Integrationsbereiche, LASSERRE-Integration und *strain-smoothing* - werden im Folgenden näher erläutert und hinsichtlich ihrer Genauigkeit und Konvergenz verglichen.

Höherwertige Integrationsbereiche

Die in Abschnitt 4.1 beschriebene höherwertige XFEM, bei der gekrümmte Unstetigkeitsverläufe innerhalb des Elementgebiets erfasst werden können, verlangt nach einer konsistenten Aufteilung des Elementgebiets in Integrationsbereiche. Ausgehend von den Arbeiten von Kästner (2009) und Cheng und Fries (2010) wurde daher ein Verfahren entwickelt, bei dem angereicherte Elemente in krummlinig berandete Standardgeometrien aufgeteilt werden. Beispielhaft ist dies in Abb. 4.10 dargestellt. Basierend auf den Eckknoten eines X-Elements und den Schnittpunkten der Level-Set-Funktion mit den Elementkanten erfolgt zunächst die Identifikation von Drei- und Vierecksbereichen, die ausschließlich in den durch die LS-Funktion generierten Teilbereichen des Elements liegen. Durch die Bestimmung zusätzlicher diskreter Punkte der Level-Set-Funktion im Elementgebiet kann daraufhin der Kantenmittelpunkt der höherwertigen Integrationsbereiche so

modifiziert werden, dass er konsistent zu dem gekrümmten Verlauf der Unstetigkeit ist. Hierfür wird das gleiche Lokalisierungsverfahren eingesetzt welches bereits in Abschnitt 4.1.2 zur Bestimmung der Stützstellen für die Berechnung der LS-Funktion verwendet wurde. Konkret werden in der vorliegenden Arbeit Bereiche mit quadratischer Geometrieinterpolation genutzt.

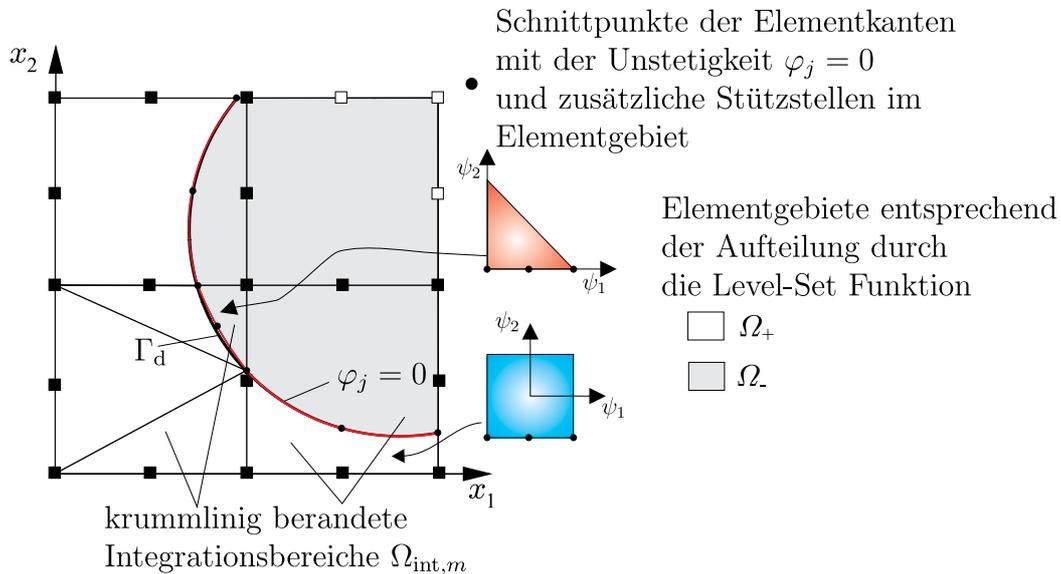


Abbildung 4.10: Integration eines biquadratischen, von der Level-Set-Funktion φ_j geschnittenen Elements durch die Aufteilung der polygonalen Teilgebiete in höherwertige Integrationsbereiche. Die Verwendung standardisierter Geometrien erlaubt die Anwendung von Standardquadraturregeln.

Für das Gebietsintegral eines Elements mit n^{int} Integrationsbereichen gilt damit

$$\int_{V^e} J^e d\mathbf{x} = \sum_{j=1}^{n^{\text{int}}} \int_{V_j^{\text{int}}} J^e J^{\text{int}} d\boldsymbol{\psi}, \quad (4.16)$$

mit der JACOBI-Determinante J^e aus der Geometrietransformation zwischen physikalischen Koordinaten und natürlichen Elementkoordinaten und der JACOBI-Determinante J^{int} resultierend aus der Transformation zwischen natürlichen Elementkoordinaten und den natürlichen Koordinaten des jeweiligen Integrationsbereichs.

LASSERRE-Integration

Das Integrationsverfahren von Lasserre (1998, 1999) erlaubt die Integration kontinuierlicher, positiv homogener Funktionen f über beliebige N -dimensionale Gebiete. Ist f im gesamten Integrationsgebiet kontinuierlich differenzierbar, so kann der Integrationsaufwand auf eine $(N - 1)$ -dimensionale Integration über den Rand Γ reduziert werden. Das Verfahren wurde bereits erfolgreich von Mousavi und Sukumar (2011) und von Kästner u. a. (2013) auf Problemstellungen im

Zusammenhang mit der XFEM angewendet. In beiden Arbeiten wurde der Ansatz von Lasserre (1998) zur Integration über konvexe Polytope verwendet. In der vorliegenden Arbeit soll dieser Ansatz entsprechend dem Lemma 2.2 von Lasserre (1999) auf beliebige, gerad- und krummlinig berandete Gebiete verallgemeinert werden.

Während der mathematische Hintergrund detailliert in Lasserre (1998, 1999) dargestellt ist, sollen im Folgenden nur die wesentlichen, an die Problemstellung angepassten Zusammenhänge der Methode beschrieben werden. Hierzu ist $f : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$ eine positiv homogene Funktion mit der Ordnung q . Für sie soll gelten $f(\lambda \mathbf{x}) = \lambda^q f(\mathbf{x})$ für alle $\lambda \in \mathbb{R}$, $\lambda > 0$, $x \in \mathbb{R}^N$ und $\Omega \subset \mathbb{R}^N$ einem Gebiet mit dem $(N - 1)$ -dimensionalen Rand $\Gamma \subset \mathbb{R}^{(N-1)}$. Entsprechend der GREENSchen Formel gilt für die Bereichsintegration

$$\int_{\Omega} f(\mathbf{x}) d^N \mathbf{x} = \frac{1}{N + q} \int_{\Gamma} \langle \mathbf{x}, \mathbf{n} \rangle f(\mathbf{x}) d^{N-1} \mathbf{x}, \quad (4.17)$$

mit $\langle \mathbf{x}, \mathbf{n} \rangle$ - dem Skalarprodukt des Ortsvektors \mathbf{x} und dem nach außen gerichteten Einheitsnormalenvektor \mathbf{n} auf dem Rand Γ .

Basierend auf einer speziellen Form von (4.17) wurde von Mousavi und Sukumar (2011) eine Quadraturregel für die Integration einer homogenen Funktionen über ein konvexes Polytop hergeleitet. Die n^{QP} Quadraturpunkte liegen dabei ausschließlich auf dem Rand Γ von Ω .

Nach dem gleichen Verfahren kann dies mit Hilfe von (4.17) für beliebige Gebiete Ω vollzogen werden. Für eine Quadraturregel zur Integration von f über den Rand Γ soll gelten

$$\int_{\Gamma} f(\mathbf{x}) d^{N-1} \mathbf{x} \approx Q = \sum_{j=1}^{n^{\text{QP}}} \omega_j f(\mathbf{x}_j), \quad (4.18)$$

mit den Quadraturpunktkoordinaten \mathbf{x}_j und -gewichten ω_j . Die Kombination von (4.17) und (4.18) führt zu einer gewichteten Quadraturregel

$$(N + q) \int_{\Omega} f(\mathbf{x}) d^N \mathbf{x} \approx \tilde{Q} = \sum_{j=1}^{n^{\text{QP}}} \tilde{\omega}_j f(\tilde{\mathbf{x}}_j), \quad (4.19)$$

mit $\tilde{\mathbf{x}}_j = \mathbf{x}_j$ und $\tilde{\omega}_j = \langle \mathbf{x}_j, \mathbf{n}_j \rangle \omega_j$ für die Approximation des Gebietsintegrals. Da (4.19) lediglich für eine einzelne homogene Funktionen geeignet ist, verlangt die Integration einer Linearkombination aus homogenen Funktionen $g(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^p g_k(\mathbf{x})$ die individuelle Integration jeder einzelnen Funktion g_k . Für die Anwendung der Methode im Zusammenhang mit der erweiterten Finiten-Elemente-Methode bedeutet dies, dass alle zu integrierenden Funktionen g_k bekannt sein müssen. Da dies im Allgemeinen nicht der Fall ist, wurde von Mousavi und Sukumar (2011) eine Erweiterung zur LASSERRE-Integration vorgestellt. Sie erlaubt es, beliebige Linearkombinationen von homogenen Funktionen zu integrieren, ohne jede einzelne explizit zu kennen.

Für die Integration der Linearkombinationen $g(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^p g_k(\mathbf{x})$ soll \tilde{Q} eine Quadraturregel entsprechend (4.19) sein. Für die p q_k -homogenen Funktionen $g_k(\mathbf{x})$ gilt $g_k(\lambda \mathbf{x}) = \lambda^{q_k} g_k(\mathbf{x})$ für alle $\lambda \in \mathbb{R}$, $\lambda > 0$. Weiterhin soll gewährleistet sein, dass $g(\mathbf{x})$ stetig ist und auch außerhalb von

Ω berechnet werden kann. Das Gebietsintegral von $g(\lambda\mathbf{x})$ kann auf Basis einer Quadraturregel entsprechend (4.19) berechnet werden. Unter Ausnutzung der Homogenität von g_k gilt

$$\tilde{Q}(g(\lambda\mathbf{x})) = \sum_{k=1}^p \lambda^{q_k} (N + q_k) \int_{\Omega} g_k(\mathbf{x}) d^N \mathbf{x}. \quad (4.20)$$

Da die Funktionen g_k nicht explizit bekannt sind, können deren Integrale $\int_{\Omega} g_k(\mathbf{x}) d^N \mathbf{x}$ als p Unbekannte I_k betrachtet werden. Durch die Wahl von p voneinander verschiedener Koeffizienten $\lambda > 0$ kann mit (4.20) ein lineares Gleichungssystem

$$\begin{pmatrix} \lambda_1^{q_1} (N + q_1) & \lambda_1^{q_2} (N + q_2) & \dots & \lambda_1^{q_p} (N + q_p) \\ \lambda_2^{q_1} (N + q_1) & \lambda_2^{q_2} (N + q_2) & \dots & \lambda_2^{q_p} (N + q_p) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \lambda_p^{q_1} (N + q_1) & \lambda_p^{q_2} (N + q_2) & \dots & \lambda_p^{q_p} (N + q_p) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_1 \\ I_2 \\ \vdots \\ I_p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{Q}(g(\lambda_1\mathbf{x})) \\ \tilde{Q}(g(\lambda_2\mathbf{x})) \\ \vdots \\ \tilde{Q}(g(\lambda_p\mathbf{x})) \end{pmatrix} \quad (4.21)$$

für die Berechnung der unbekanntenen Integrale aufgestellt werden. Die Anwendung der zuvor beschriebenen Quadraturregel (4.19) erlaubt die Berechnung der rechten Seite von (4.21) auf Basis einer Randintegration über Γ . Das Gesamtintegral ergibt sich dann durch Auflösung des Gleichungssystems (4.21) nach den Einzelintegralen I_k und deren Summation $\int_{\Omega} g(\mathbf{x}) d^N \mathbf{x} = \sum_{k=1}^p I_k$. Das Verfahren erlaubt die Integration beliebiger Funktionen, die sich aus der Linearkombination homogener Funktionen ergeben, ohne diese explizit zu kennen. Die Quadraturpunkte befinden sich dabei ausschließlich auf dem Rand des Integrationsgebiets. Für die Berechnung der Integrale in der schwachen Form des Randwertproblems (3.39) stellt jede Matrixkomponente der einzelnen Integranden eine individuelle Funktion $g(\mathbf{x})$ dar.

Die Anwendung der Methode auf X-Elemente soll im Folgenden anhand eines zweidimensionalen Beispiels verdeutlicht werden. Wie in Abb. 4.11 dargestellt, werden einzelne Elemente durch die Unstetigkeit in jeweils zwei polygonale Bereiche aufgeteilt. Definiert werden diese Bereiche durch die Elementknoten, den Schnittpunkten der Level-Set-Funktion mit den Elementkanten und durch zusätzliche diskrete Punkte der LS-Funktion im Elementgebiet. Letztere sind dabei nur bei der Approximation gekrümmter Unstetigkeitsverläufe auf Basis von höherwertigen Elementformulierungen erforderlich.

Entsprechend dem zuvor beschriebenen Verfahren kann die Gebietsintegration über die einzelnen Polygone mittels (4.19) und (4.21) in eine Randintegration überführt werden. Für die Integration entlang der Polygonkanten wird eine Geometrietransformation mittels eindimensionaler LAGRANGEScher Formfunktion in Kombination mit einer Standard-GAUSS-Quadratur angewendet.

Ein wesentlicher Nachteil der Methode ist die Vielzahl einzelner Integrationen, die notwendig sind, um die rechte Seite von (4.21) zu berechnen. In Abhängigkeit vom Integranden müssen hierfür die Anzahl p sowie die Ordnungen q_k der homogenen Funktionen abgeschätzt werden. Dies soll anhand der Integration der Steifigkeitsmatrix eines biquadratischen Rechteckelements verdeutlicht werden. Der Integrand ergibt sich aus der mehrmaligen Produktbildung der quadra-

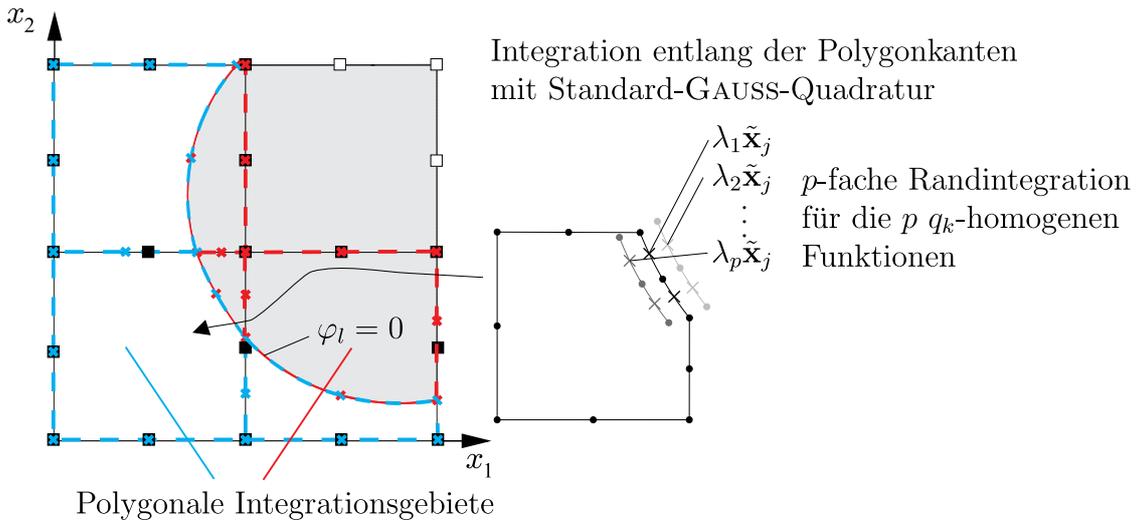


Abbildung 4.11: Integration eines biquadratischen, von der Level-Set-Funktion φ_j geschnittenen Elements durch Reduktion der Gebietsintegration auf eine Randintegration über die Kanten der polygonalen Teilgebiete. Die Integration entsprechend (4.21) verlangt nach einer p -fachen Integration anhand der durch den Koeffizienten λ_p verschobenen Quadraturpunkte.

tischen Formfunktionen mit sich selbst sowie mit seinen Ableitungen

$$\underline{\underline{\mathbf{K}}}^e = \int_{\Omega^e} \underbrace{\underline{\underline{\mathbf{B}}}^T}_{q_k=0\dots5} \underline{\underline{\mathbf{C}}} \underbrace{\underline{\underline{\mathbf{B}}}}_{q_k=0\dots5} dx. \quad (4.22)$$

Dies führt zu einem möglichen Spektrum $q_k = 0\dots 10$ -homogener Funktionen im Integranden. Entsprechend müssen für die Integration der Steifigkeitsmatrix $p = 11$ unabhängige Randintegrale (vgl. (4.21)) mit p unterschiedlichen Koeffizienten λ gelöst werden. Berechnet man die rechte Seite von (4.21) unter Verwendung von (4.19), führen diese Koeffizienten zu einer Verschiebung der Quadraturpunkte (vgl. Abb. 4.11). Aus diesem Umstand leitet sich ein zweiter wesentlicher Nachteil der Methode ab. Mögliche interne Variablen, die für die Auswertung des Integranden erforderlich sind, müssen p -fach für jeden Quadraturpunkt abgespeichert werden.

Zusammenfassend erlaubt die Methode eine Reduktion der Integrationsordnung von einem Gebietsintegral auf ein Randintegral. Dieser Vorteil geht aber in erheblichen Maß auf Kosten des numerischen Aufwands sowie des erforderlichen Speicherbedarfs. Die numerischen Eigenschaften des Verfahrens werden am Ende dieses Abschnitts mit den zusätzlich beschriebenen Integrationsmethoden verglichen.

Strain Smoothing

Das *strain-smoothing*-Verfahren bzw. dessen Anwendung in der FEM (SFEM, Liu u. a. (2007)) und der XFEM (SmXFEM, Bordas u. a. (2010)) hat seinen Ursprung im *Stabilized Conforming Nodal Integration* Verfahren für netzfreie Berechnungsmethoden (Chen u. a. (2001)). Das Verzerrungsfeld innerhalb eines zu definierenden Gebiets wird dabei durch eine konstante nichtlokal gemittelte Verzerrung ersetzt. Die sich daraus ableitenden speziellen Eigenschaften des Verfahrens wurden von Bordas u. a. (2011) wie folgt zusammengefasst:

- Unter Verwendung des GAUSSschen Integralsatzes kann die Gebietsintegration in eine Randintegration überführt werden.
- Es werden keinerlei partielle Ableitungen der Formfunktionen benötigt.
- Das Verfahren ist unempfindlich gegenüber Netzverzerrungen, da keine isoparametrische Geometrietransformation notwendig ist.

Die im Folgenden angegebenen grundlegenden Zusammenhänge des Verfahrens orientieren sich an den Arbeiten von Bordas u. a. (2010, 2011). Entsprechend dem Namen des Verfahrens ist der Kernpunkt die Überführung des kontinuierlich verlaufenden Verzerrungsfeldes ε in eine nichtlokal gemittelte Verzerrung $\bar{\varepsilon}$. Im Zusammenhang mit der (X)FEM erfolgt dies innerhalb einer endlichen Anzahl von Teilbereichen Ω_i^{sm} , den sogenannten *smoothing cells* eines Elementes (vgl. Abb. 4.12). Für die gemittelte Verzerrung eines Punktes \mathbf{x}_c innerhalb eines solchen Bereichs gilt

$$\bar{\varepsilon}(\mathbf{x}_c) = \int_{\Omega_i^{\text{sm}}} \varepsilon(\mathbf{x}) \Phi(\mathbf{x} - \mathbf{x}_c) d\mathbf{x}. \quad (4.23)$$

Die Wichtungsfunktion $\Phi(\mathbf{x})$ muss dabei den Anforderungen

$$\Phi > 0 \quad \text{und} \quad \int_{\Omega_i^{\text{sm}}} \Phi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = 1 \quad (4.24)$$

genügen. Entsprechend dem Vorgehen in den zuvor genannten Quellen wird in der vorliegenden Arbeit die Funktion

$$\Phi(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1/V_i & \forall \mathbf{x} \in \Omega_i^{\text{sm}} \\ 0 & \forall \mathbf{x} \notin \Omega_i^{\text{sm}} \end{cases} \quad (4.25)$$

verwendet. V_i entspricht dabei dem Volumen des Bereichs Ω_i^{sm} . Die Überführung eines kontinuierlich verlaufenden Verzerrungsfeldes in ein gebietsweise konstantes Verzerrungsfeldes ist in Abb. 4.12 exemplarisch dargestellt. Das Elementgebiet wurde dafür in 4 Mittelungsbereiche eingeteilt. Die für die Berechnung der gemittelten Verzerrung notwendige Gebietsintegration kann unter Ausnutzung des GAUSSschen Integralsatzes in eine Randintegration überführt werden.

Für die Verzerrungen innerhalb eines angereicherten, isoparametrischen Elements gilt entsprechend der diskretisierten Verschiebungs-Verzerrungsbeziehung (3.26)

$$\varepsilon = \underline{\underline{\mathbf{B}}}^u \hat{\mathbf{u}} + \sum_{l=1}^{n_m} \underline{\underline{\mathbf{B}}}^m_l \hat{\mathbf{a}}_l + \sum_{k=1}^{n_c} \underline{\underline{\mathbf{B}}}^c_k \hat{\mathbf{b}}_k = \underline{\underline{\mathbf{B}}} \hat{\mathbf{d}}. \quad (4.26)$$

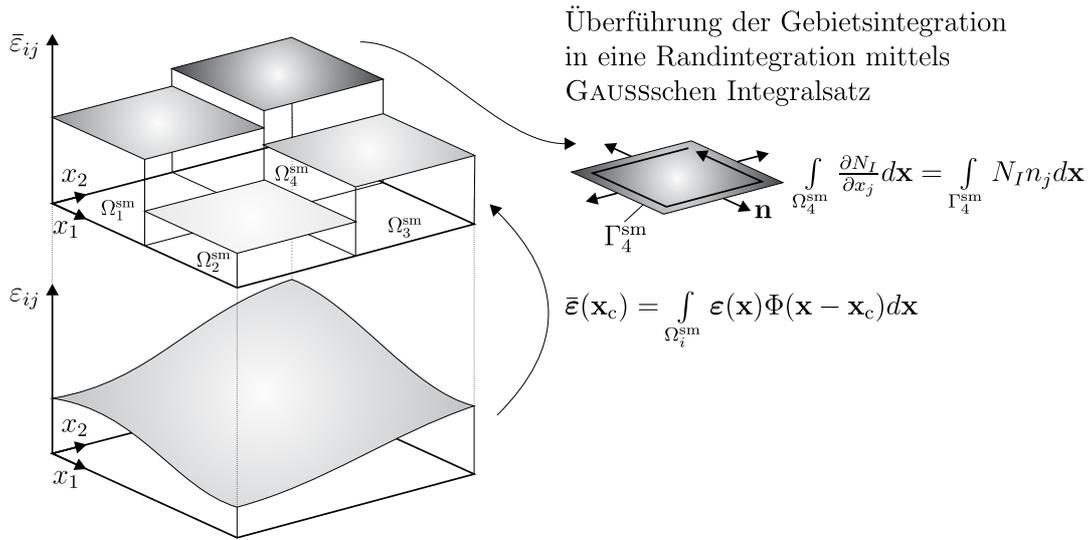


Abbildung 4.12: Überführung eines kontinuierlich verlaufenden Verzerrungsfeldes in eine gebietsweise konstante Verzerrung durch die gewichtete Mittelung anhand von (4.23).

Die Differentialoperatormatrizen $\underline{\underline{\mathbf{B}}}$, $\underline{\underline{\mathbf{B}}}_l^{\text{m}}$ und $\underline{\underline{\mathbf{B}}}_k^{\text{c}}$ enthalten dabei die partiellen Ableitungen der Formfunktionen $\underline{\mathbf{N}}_{,x}$ und deren Produkt mit den Anreicherungsfunktionen $(\underline{\mathbf{N}}F^{\text{m}})_{,x}$, $(\underline{\mathbf{N}}F^{\text{c}})_{,x}$. Die Anwendung von (4.23) auf die Verzerrungs-Verschiebungsbeziehung führt zu einer gemittelten Verzerrung innerhalb des Teilbereichs Ω_i^{sm}

$$\bar{\varepsilon}_i = \underbrace{\frac{1}{V_i} \int_{\Omega_i^{\text{sm}}} \underline{\underline{\mathbf{B}}}^u d\mathbf{x}}_{\underline{\underline{\mathbf{B}}}_i^u} \hat{\mathbf{u}} + \sum_{l=1}^{n_m} \underbrace{\frac{1}{V_i} \int_{\Omega_i^{\text{sm}}} \underline{\underline{\mathbf{B}}}_l^{\text{m}} d\mathbf{x}}_{\underline{\underline{\mathbf{B}}}_{i,l}^{\text{m}}} \hat{\mathbf{a}}_l + \sum_{k=1}^{n_c} \underbrace{\frac{1}{V_i} \int_{\Omega_i^{\text{sm}}} \underline{\underline{\mathbf{B}}}_k^{\text{c}} d\mathbf{x}}_{\underline{\underline{\mathbf{B}}}_{i,k}^{\text{c}}} \hat{\mathbf{b}}_k = \underline{\underline{\mathbf{B}}}_i \hat{\mathbf{d}}, \quad (4.27)$$

sowie zu den bereichsweise konstanten, gemittelten Differentialoperatormatrizen $\underline{\underline{\mathbf{B}}}$, $\underline{\underline{\mathbf{B}}}_l^{\text{m}}$ und $\underline{\underline{\mathbf{B}}}_k^{\text{c}}$. Unter Ausnutzung des GAUSSschen Integralsatzes lassen sich die in (4.27) enthaltenen Gebietsintegrationen in Randintegrationen überführen. Für die in den Differentialoperatormatrizen auftretenden partiellen Ableitungen gilt

$$\int_{\Omega_i^{\text{sm}}} \frac{\partial N_i}{\partial x_j} d\mathbf{x} = \int_{\Gamma_i^{\text{sm}}} N_i n_j d\mathbf{x}, \quad (4.28)$$

$$\int_{\Omega_i^{\text{sm}}} \frac{\partial (N_i F^{\text{m}})}{\partial x_j} d\mathbf{x} = \int_{\Gamma_i^{\text{sm}}} (N_i F^{\text{m}}) n_j d\mathbf{x}, \quad (4.29)$$

$$\int_{\Omega_i^{\text{sm}}} \frac{\partial (N_i F_i^{\text{c}})}{\partial x_j} d\mathbf{x} = \int_{\Gamma_i^{\text{sm}}} (N_i F_i^{\text{c}}) n_j d\mathbf{x}, \quad (4.30)$$

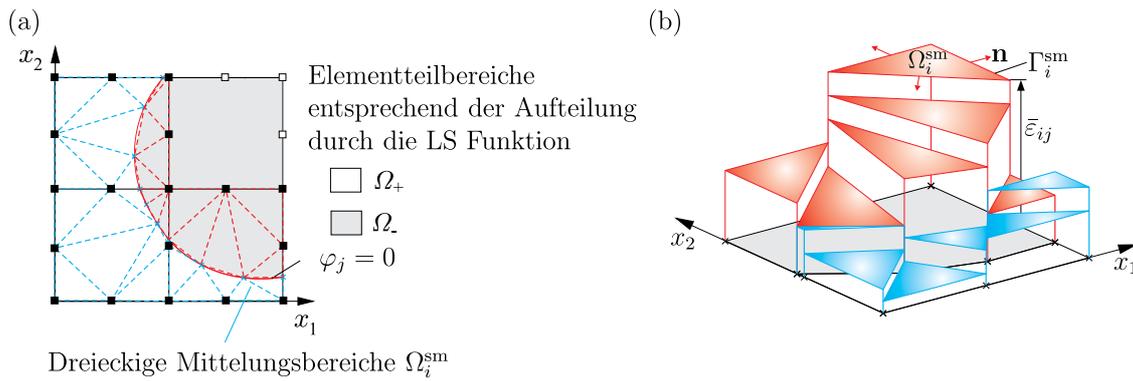


Abbildung 4.13: Anwendung des *strain-smoothing*-Verfahrens auf ein X-Element: (a) Aufteilung der durch die LS-Funktion generierten Elementteilbereiche in eine endliche Anzahl von Mittelungsbereichen, (b) Exemplarische Verteilung der gemittelten Verzerrung $\bar{\epsilon}_{ij}$ im Elementgebiet.

mit \mathbf{n} , dem nach außen gerichteten Einheitsnormalenvektor auf dem Rand Γ_i^{sm} des jeweiligen Mittelungsbereichs. Die Integration entlang der Bereichskontur Γ_i^{sm} erfolgt dabei unter Verwendung einer Standard-GAUSS-Quadratur. Die Anzahl der Quadraturpunkte richtet sich nach dem Polynomgrad der Elementformfunktionen.

Die per *strain-smoothing* integrierte Steifigkeitsmatrix $\underline{\underline{\mathbf{K}}}^e$ eines X-Elements ergibt sich demnach ohne explizite Integration aus der Summation der Beiträge aus den n^{sm} Mittelungsbereichen

$$\underline{\underline{\mathbf{K}}}^e = \int_{\Omega^e} \underline{\underline{\mathbf{B}}}^T \underline{\underline{\mathbf{C}}} \underline{\underline{\mathbf{B}}} dx = \sum_{i=1}^{n^{sm}} \int_{\Omega_i^{sm}} \underline{\underline{\mathbf{B}}}_i^T \underline{\underline{\mathbf{C}}}_i \underline{\underline{\mathbf{B}}}_i dx = \sum_{i=1}^{n^{sm}} \underline{\underline{\mathbf{B}}}_i^T \underline{\underline{\mathbf{C}}}_i \underline{\underline{\mathbf{B}}}_i V_i, \quad (4.31)$$

mit $\underline{\underline{\mathbf{C}}}_i$, $\underline{\underline{\mathbf{B}}}_i$ und V_i der Materialsteifigkeitsmatrix, der gemittelten Verzerrungs-Verschiebungsmatrix und dem Volumen des i -ten Mittelungsbereichs.

Für die Anwendung des Verfahrens auf X-Elemente müssen unter Berücksichtigung der Aufteilung des Elementgebiets durch die Unstetigkeiten eine endliche Anzahl von Mittelungsbereichen definiert werden. Die durch die Aufteilung des Elementgebiets generierten Teilbereiche könnten dabei als Mittelungsbereiche genutzt werden. Da dieses Vorgehen, wie die Verwendung einer reduzierten Integration in der Standard FEM, Nullenergiemoden hervorrufen kann, erfolgt bei der Anwendung des Verfahrens eine weitere Unterteilung des Elements mit Hilfe einer DELAUNAY-Zerlegung. Speziell Elemente höherer Ordnung verlangen nach einer feineren Aufteilung der Teilbereiche. Die Aufteilung eines einfach geschnittenen X-Elements ist in Abb. 4.13 dargestellt. Dem zu Beginn des Abschnitts formulierten Anspruch, den Aufwand zur Einteilung des Elementgebiets in Integrationsbereich zu verringern, wird das Verfahren damit nicht gerecht.

Vergleich und Konvergenzanalyse

Der Einfluss des Integrationsverfahrens auf die Genauigkeit eines XFEM Modells soll anhand des in Abb. 4.1 dargestellten Einschlussproblems untersucht werden. Hierfür werden sechs un-

terschiedliche Modellierungen ausgewertet. Diese ergeben sich aus der Anwendung der drei Integrationsverfahren:

- (i) Aufteilung in höherwertige Integrationsbereiche (IB),
- (ii) LASSERRE-Integration (L) sowie
- (iii) *strain-smoothing*-Verfahren (SM)

auf zweidimensionale Modelle mit bilinearen (Q4) und biquadratischen (Q8) Elementformulierungen. Es ist dabei anzumerken, dass die zuvor dargestellten Verfahren lediglich für angereicherte Elemente verwendet werden. Die übrigen gewöhnlichen Elemente werden entsprechend ihrer Elementordnung mit einer Standard-GAUSS-Quadratur integriert.

Die erzielten Fehlernormen bilinearer Rechteckelemente in Abhängigkeit vom Integrationsverfahren sind in Abb. 4.14 über der mittleren Elementkantenlänge aufgetragen. Anhand der LEBES-

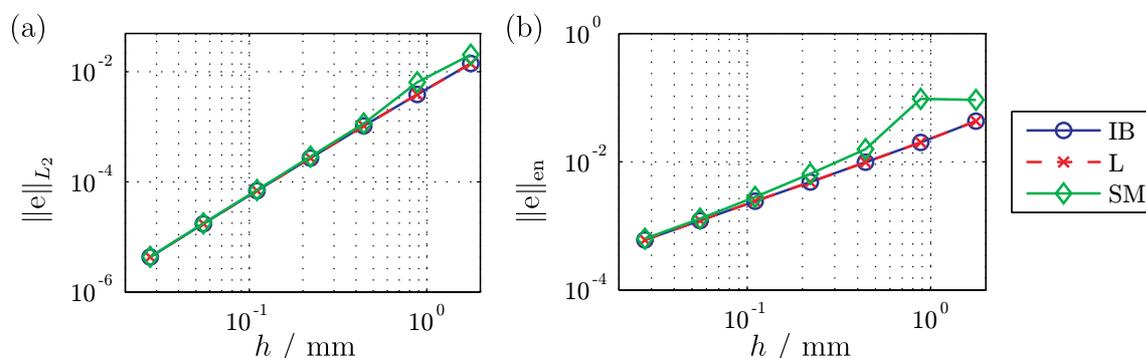


Abbildung 4.14: Konvergenzuntersuchung für die Integration angereicherter, bilinearer Rechteckelemente (Q4): (a) die normalisierte L_2 Norm und (b) die normalisierte Energienorm.

QUE-Norm ist zu erkennen, dass alle drei Verfahren eine annähernd gleiche Genauigkeit bei der Approximation des Verschiebungsfeldes liefern. Bei den abgeleiteten Feldgrößen fällt die Genauigkeit des *strain-smoothing*-Verfahrens (SM) für grobe Vernetzungen gegenüber der Verwendung von Integrationsbereichen (IB) und der LASSERRE-Integration (L) ab. Dieser Umstand ist auf den hohen Volumenanteil angereicherter Elemente bei groben Vernetzungen zurückzuführen. Die bereichsweise Mittelung des Verzerrungszustands in diesen Elementen führt verfahrensbedingt zu einer schlechteren Approximation des Verzerrungsfeldes. Die erzielten Konvergenzraten sind in Tab. 4.3 zusammengefasst. Mit Ausnahme der Konvergenzrate für die Energienorm des *strain-smoothing*-Verfahrens zeigen alle drei Methoden für bilineare Elemente ein ähnliches Konvergenzverhalten. Die höhere Konvergenzrate des SM-Verfahrens bei der Energienorm ist auf den starken Abfall des Fehlers im Bereich der drei größten Vernetzungen zurückzuführen.

Die Konvergenzkurven der Integrationsverfahren unter Verwendung biquadratischer Rechteckelemente (Q8) sind in Abb. 4.15 dargestellt. Erneut liefern die höherwertigen Integrationsbereiche und die LASSERRE-Integration ein äquivalentes Fehlerniveau. Während alle Verfahren eine

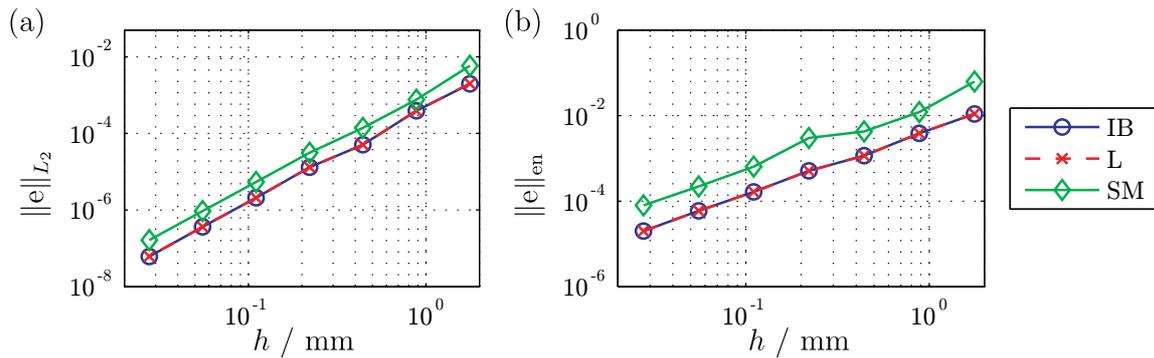


Abbildung 4.15: Konvergenzuntersuchung für die Integration angereicherter, biquadratischer Rechteckelemente (Q8): (a) die normalisierte L_2 Norm und (b) die normalisierte Energienorm.

ähnliche Konvergenz aufweisen (vgl. Tab. 4.3), kommt es zu einem erheblichen Abfall der Genauigkeit für das *strain-smoothing*-Verfahren. Dies betrifft neben der Approximation der abgeleiteten Feldgrößen (Energienorm) auch die Verschiebungslösung (L_2 -Norm). Der Vorteil einer verbesserten Approximation der mechanischen Felder durch die höhere Ordnung der Formfunktionen, geht durch die bereichsweise Mittelung der Verzerrungen innerhalb der angereicherten Elemente teilweise verloren.

Tabelle 4.3: Konvergenzraten für Integration mittels höherwertiger Integrationsbereiche (IB), LASSERRE-Verfahren (L) und *strain-smoothing* (SM) unter Verwendung bilinearer (Q4) und biquadratischer (Q8) Rechteckelemente.

Integrationsverfahren	IB		L		SM	
	Q4	Q8	Q4	Q8	Q4	Q8
$\ e\ _{L_2}$	1,95	2,49	1,95	2,49	2,06	2,48
$\ e\ _{en}$	1,02	1,51	1,02	1,51	1,30	1,54

4.2.2 Dreidimensionale Integration

In Abschnitt 4.2.1 wurden drei Verfahren zur Integration angereicherter Elemente vorgestellt und anhand einer zweidimensionalen Problemstellung untersucht. Während die Verwendung höherwertiger, an den Verlauf der Unstetigkeiten angepasster Integrationsbereiche und die LASSERRE-Integration ein optimales Konvergenzverhalten zeigen, kommt es zu einem erheblichen Abfall der Genauigkeit bei der Anwendung des *strain-smoothing*-Verfahrens auf höherwertige Elementformulierungen. Das Verfahren nach LASSERRE ist das Einzige, das ohne eine zusätzliche Unterteilung der durch die Level-Set-Funktion generierten Elementteilmereiche auskommt. Dieser Vorteil geht in erheblichem Maß auf Kosten des numerischen Aufwands. Speziell die Speicherung

interner Variablen, wie sie z.B. für die Evaluierung von inelastischen Materialmodellen benötigt wird, führt zu einem signifikanten Speichermehrbedarf im Vergleich zur Integration mittels angepasster Integrationsbereiche. Vor diesem Hintergrund wurde für die dreidimensionale Umsetzung der höherwertigen XFEM die Integration mittels konsistenter Integrationsbereiche ausgewählt.

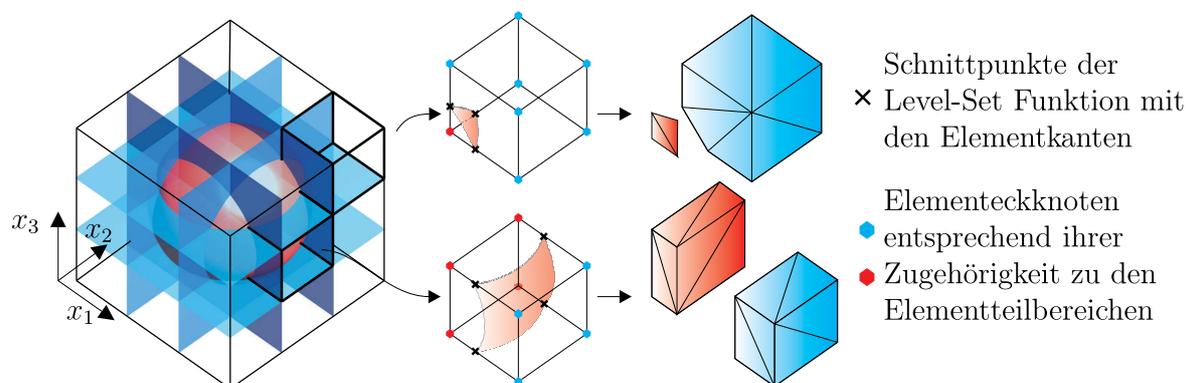


Abbildung 4.16: Aufteilung angereicherter Hexaederelemente in tetraederförmige Integrationsbereiche auf Basis einer dreidimensionalen DELAUNAY-Zerlegung. Inkonsistenz zwischen eben berandeten Tetraedern und dem gekrümmten Verlauf der Unstetigkeit.

Entsprechend dem zweidimensionalen Vorgehen werden für die Definition der Integrationsbereiche in einem ersten Schritt die Schnittpunkte der Elementkanten mit den Level-Set-Funktionen bestimmt (vgl. Abschnitt 4.2.1). Zusammen mit den Eckknoten in den einzelnen Elementteilbereichen bilden diese mehrere - mindestens jedoch zwei - Punktmengen für die anschließende Zerlegung des Elements in tetraederförmige Integrationsbereiche auf Basis einer dreidimensionalen DELAUNAY-Zerlegung. Dies ist exemplarisch in Abb. 4.16 für ein Modell mit kugelförmigen Einschluss dargestellt. Die ebenen Dreiecksflächen der erzeugten Tetraeder sind dabei nicht konsistent mit dem doppelt gekrümmten Verlauf der Unstetigkeit im Elementgebiet. Diese Abweichung kann durch den Übergang zu Tetraedern mit quadratischer Geometrieinterpolation und der Identifikation zusätzlicher Punkte der Level-Set-Funktion minimiert werden. Entsprechend dem in Abb. 4.17 skizzierten Vorgehen werden dabei die Mittelknoten der Tetraederkanten, welche die Unstetigkeit enthalten, so modifiziert, dass deren Verlauf mit der Level-Set-Funktion übereinstimmt. Für die Identifikation der zusätzlichen Punkte im Elementgebiet wird das gleiche Verfahren verwendet, wie für die lokale Level-Set-Berechnung (vgl. Abschnitt 4.1.2). Die Einfluss einer konsistenten Integration auf die Genauigkeit einer höherwertigen XFEM kann anhand der in Abb. 4.18 dargestellten Konvergenzuntersuchung verdeutlicht werden. Hierbei wurde das Einschlussproblem, welches zu Beginn des Kapitels vorgestellt wurde, dreidimensional modelliert. Neben der Auswirkung des Übergangs von linearen (H8) zu quadratischen (H20) Hexaederelementen wurde auch der Einfluss der konsistenten Aufteilung des Elementgebiets in gekrümmt berandete Integrationsbereiche untersucht. Die Ergebnisse für die Verwendung von eben bzw. gekrümmt berandeten Tetraedern sind mit dem Zusatz T4 bzw. T10 gekennzeichnet.

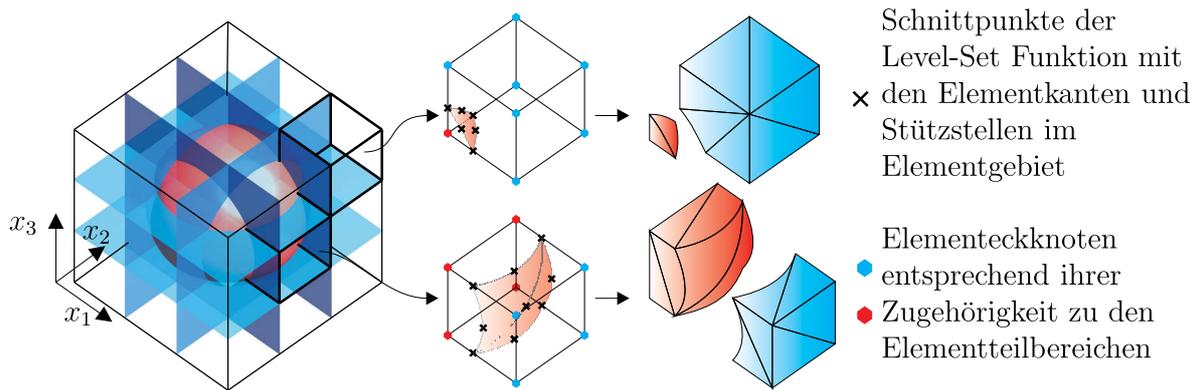


Abbildung 4.17: Konsistente Aufteilung angereicherter Hexaederelemente in gekrümmt berandete, tetraederförmige Integrationsbereiche durch die Modifikation der aus einer dreidimensionalen DELAUNAY-Zerlegung gewonnenen Tetraeder.

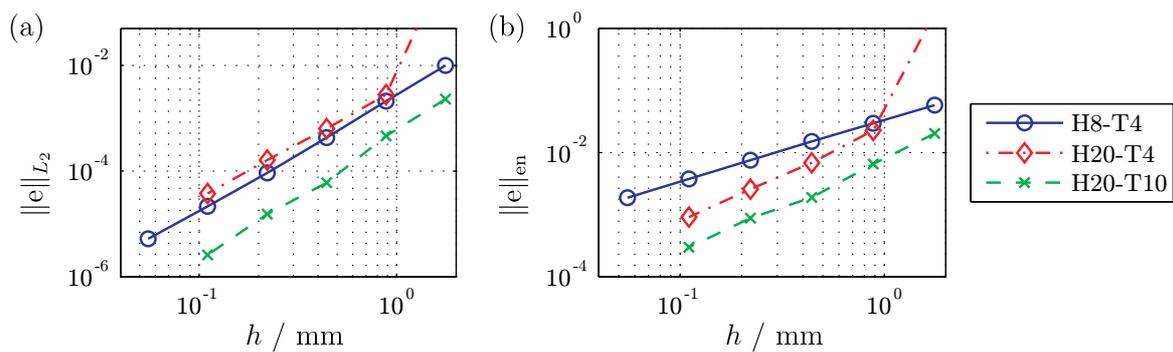


Abbildung 4.18: Konvergenzuntersuchung für die Integration angereicherter, trilinearer (H8) und triquadratischer (H20) Hexaederelemente mittels eben (T4) und gekrümmt (T10) berandeten Tetraederbereichen: (a) die normalisierte L_2 Norm und (b) die normalisierte Energienorm.

Es ist zu erkennen, dass die Beschreibung gekrümmter Unstetigkeiten im Elementgebiet auf Basis triquadratischer Hexaederelemente (H20) eine konsistente Integration mittels gekrümmt berandeter Tetraederbereiche (T10) erfordert. Die Inkonsistenz zwischen der gekrümmten Beschreibung der Unstetigkeit und den eben berandeten Tetraederbereichen (T4) führt zu einem erheblichen Abfall bei der erreichbaren Genauigkeit. Das erzielte Konvergenzverhalten der dreidimensionalen Umsetzung des Integrationsverfahrens ist in Übereinstimmung mit den zweidimensionalen Ergebnissen in Abschnitt 4.2.1.

4.2.3 Grenzflächenintegration

Das Versagen einer Grenzfläche zwischen zwei Materialien wird im Rahmen der vorliegenden Arbeit auf Basis eines Kohäsivzonenmodells abgebildet. Es steuert die übertragbare Spannung zwischen zwei Materialphasen in Abhängigkeit vom Verschiebungssprung an der Grenzfläche. Wie in Kapitel 3 dargestellt, folgen aus der Berücksichtigung einer starken Unstetigkeit im Verschiebungsfeld auf Basis der XFEM zusätzliche Randintegrale in der schwachen Form des Randwertproblems (3.39). Für die Integration des Spannungsvektors über den Verlauf der Unstetigkeit im Elementgebiet muss aus der impliziten Level-Set-Beschreibung der Unstetigkeit eine Quadraturregel abgeleitet werden.

In Anlehnung an die in Abschnitt 4.1.2 beschriebene lokale Berechnung der Level-Set-Funktion erfolgt dies auf Basis der Bestimmung diskreter Stützpunkte der Level-Set-Funktion $\hat{\mathbf{x}}^\Gamma$. Für die Erfassung gekrümmter Unstetigkeitsverläufe innerhalb höherwertiger Elemente müssen neben den Schnittpunkten mit den Elementkanten zusätzliche Punkte im Elementgebiet identifiziert werden. Ausgehend von dem Mittelpunkt zwischen zwei Randschnittpunkten erfolgt dies durch das in Abb. 4.7 dargestellte Verfahren. Die Gesamtmenge der Punkte innerhalb eines Elements, die zu ein und derselben Unstetigkeit gehören, erlaubt die explizite Beschreibung des Verlaufs durch eine geeignete Geometrieinterpolation

$$\mathbf{x}^\Gamma = \sum_i N_i^\Gamma \hat{\mathbf{x}}_i^\Gamma. \quad (4.32)$$

Im zweidimensionalen Fall können hierfür eindimensionale, quadratische LAGRANGESche Formfunktionen verwendet werden. Für eine dreidimensionale Modellierung ist aufgrund der Vielfältigkeit des Unstetigkeitsverlaufs eine weitere Unterteilung der Diskontinuität erforderlich. Wie in Abb. 4.19 dargestellt, werden zunächst mit Hilfe einer DELAUNAY-Zerlegung n^Δ Dreiecksflächen aus den Schnittpunkten mit den Elementkanten bestimmt. Durch die Modifikation der Kantenmittelknoten entsprechend der zuvor bestimmten zusätzlichen Punkte im Elementgebiet, wird die Konsistenz zwischen dem Verlauf der Unstetigkeit und den Dreiecksflächen gewährleistet. Die Quadraturregel für das gesamte Randintegral ergibt sich aus der Summation der Quadraturpunkte aus den n^Δ Dreiecksflächen

$$\int_{\partial V^c} f(\mathbf{x}) dA = \sum_{i=1}^{n^\Delta} \int_{\partial V_i^\Delta} f(\mathbf{x}) dA = \sum_{i=1}^{n^\Delta} \sum_{j=1}^{n^{\text{QP}}} f(\mathbf{x}(\boldsymbol{\psi}_j)) w_j J_i^\Delta(\boldsymbol{\psi}_j). \quad (4.33)$$

Wobei $\boldsymbol{\psi}_j$, w_j die Quadraturpunkte und -gewichte einer Standardquadraturregel und J_i^Δ die JACOBI-Determinante für das Dreiecksgebiet sind.

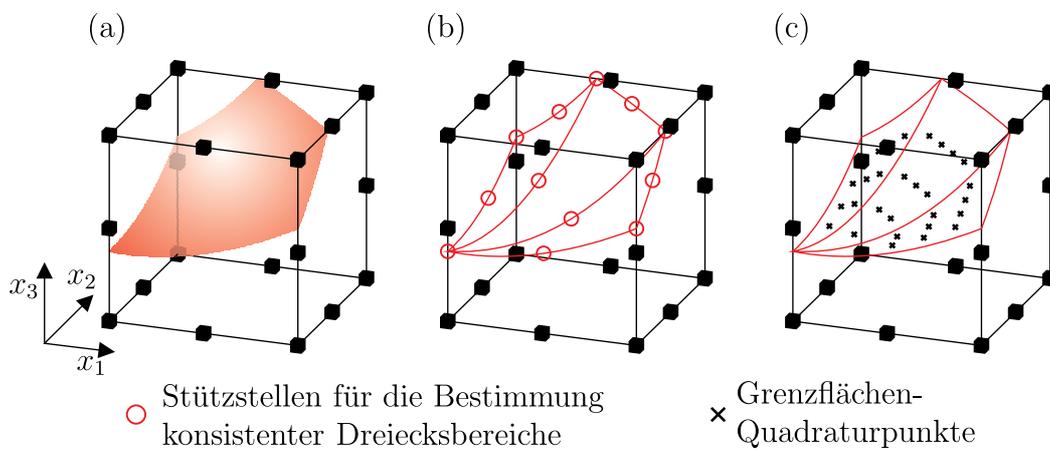


Abbildung 4.19: Bestimmung einer Quadraturregel zur Grenzflächenintegration: (a) doppelt gekrümmter Grenzflächenverlauf, (b) konsistente Aufteilung der Grenzfläche mittels modifizierter DELAUNAY-Triangulation und (c) Ableitung der Grenzflächen-Quadraturpunkte.

5 Konstitutive Beziehungen

Für die Modellierung des effektiven mechanischen Verhaltens von Faser-Kunststoff-Verbunden (FKV) ist es neben der Beschreibung der Kinematik und der Werkstoffstruktur entscheidend, entsprechende konstitutive Beziehungen zu formulieren. Im Rahmen der vorliegenden Modellierungsstrategie umfasst dies die Beschreibung des Materialverhaltens der einzelnen Verbundbestandteile sowie die Abbildung charakteristischer Schädigungsphänomene.

Das mechanische Verhalten der Glasfaser kann dabei durch das in Abschnitt 5.1 angegebene isotrope, linear elastische Materialmodell abgebildet werden. Für die Modellierung des komplexen, inelastischen Verhaltens des Matrixwerkstoffes Polypropylen erfolgte die Formulierung eines nichtlinearen fraktional-viskoelastischen Materialmodells. Die entsprechenden ein- und mehrachsigen Beziehungen sowie die linearisierten Evolutionsgleichungen sind in Abschnitt 5.2 zusammengefasst.

Wie in Abschnitt 3.1.2 dargestellt, erlaubt die XFEM die Abbildung starker Unstetigkeiten. In Kombination mit dem in Abschnitt 5.3 angegebenen Kohäsivzonenmodell ist sie in der Lage, diskretes Grenzflächenversagen zwischen unterschiedlichen Materialbereichen abzubilden. Entsprechend der experimentellen Beobachtungen zum Schädigungsverhalten von FKV tritt neben der Grenzflächenschädigung auch Versagen innerhalb der einzelnen Materialphasen auf. Besonders eine Schädigung der polymeren Matrix führt in der Regel zu einer signifikanten Reduktion der Steifigkeit des Verbundes. Im Unterschied zum Versagen der Grenzschicht, wo der Risspfad a priori durch die innere Struktur des Werkstoffs gegeben ist, sind die Lokalisierungszonen der Matrix wesentlich von der Art der Belastung abhängig. Für die effiziente Modellierung der Matrixschädigung wird daher in Abschnitt 5.4 ein Kontinuumsschädigungsmodell formuliert.

5.1 Modellierung der Glasfaser

Die Modellierung der Glasfaser erfolgt im Rahmen der vorliegenden Arbeit auf Basis eines isotropen, linear elastischen Materialmodells. Die elastischen Materialkennwerte, E-Modul $E_{GF} = 73$ GPa und Querkontraktionszahl $\nu_{GF} = 0,22$ orientieren sich an den Ausführungen von Schürmann (2005).

Unter Ausnutzung der isotropen Eigenschaften reduziert sich das allgemeine HOOKESche Gesetz auf

$$\sigma_{ij} = 2G \left(\varepsilon_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \varepsilon_{qq} \right) + K \delta_{ij} \varepsilon_{qq}, \quad (5.1)$$

mit dem Schubmodul $G = E/(2(1 + \nu))$ und dem Kompressionsmodul $K = E/(3(1 - 2\nu))$. Neben der Definition der Spannungs-Verzerrungsbeziehung, wird für die Modellierung der linear elastischen Glasfaser in einer inkrementellen, iterativen FE-Rechnung die Materialtangente-

steifigkeit benötigt (vgl. Abschnitt 3.3). Sie ergibt sich aus der partiellen Ableitung des Spannungstensors nach dem Verzerrungstensor. Mit (5.1) gilt für die Materialtangente der Glasfaser

$$C_{ijkl} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial \varepsilon_{kl}} = 2G \left(\frac{1}{2} [\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{jk} \delta_{il}] - \frac{1}{3} \delta_{ij} \delta_{kl} \right) + K \delta_{ij} \delta_{kl}. \quad (5.2)$$

5.2 Modellierung polymerer Matrixwerkstoffe

Das Materialverhalten des Matrixwerkstoffes Polypropylen wurde von Kästner (2009) anhand von einachsigen Zug- und Relaxationsversuchen sowie Be- und Entlastungsversuchen mit und ohne Zwischenrelaxation als viskoplastisch klassifiziert. Basierend auf den experimentellen Untersuchungen wurde ein nichtlineares, viskoplastisches Materialmodell formuliert (Kästner u. a. (2012)). Die 19 Parameter des Gesamtmodells sind dabei zum Teil aufwendig iterativ aus experimentellen Ergebnissen abzuleiten.

Die Modellierung im Rahmen der vorliegenden Arbeit verfolgt einen alternativen Ansatz. Er basiert auf der Verwendung der fraktionalen Viskoelastizität, deren Evolutionsgleichungen Ableitungsoperatoren mit gebrochen rationaler Ordnung enthalten (Gorenflo (1997); Koeller (1984); Mainardi und Gorenflo (2007); Smit und de Vries (1970)). Sie erlauben die Beschreibung komplexer Kriech- und Relaxationsprozesse über mehrere Dekaden mittels weniger Materialparameter (Müller u. a. (2011); Müller u. a. (2013)).

Ein an die Phänomenologie des Thermoplasts Polypropylen angepasstes Modell ist in Abschnitt 5.2.1 dargestellt. Der Vergleich des Modells mit einachsigen experimentellen Untersuchungen in Abschnitt 5.2.2 zeigt eine gute Übereinstimmung für unterschiedliche Belastungssituationen. Entsprechend der Erfordernisse für eine Implementierung des Modells in eine inkrementelle, iterative FE-Rechnung (vgl.: Kapitel 3) werden die konstitutiven Beziehungen in Abschnitt 5.2.3 für den mehrachsigen Belastungszustand verallgemeinert und in Abschnitt 5.2.4 linearisiert. Entsprechend der Verwendung des Werkstoffs als Matrixmaterial in FKV beschränkt sich der Anwendungsbereich des Modells auf den Bereich infinitesimaler Verzerrungen $\varepsilon \leq 0,05$.

5.2.1 Nichtlineare fraktionale Viskoelastizität

Die Modellierung des nichtlinearen viskoelastischen Materialverhaltens von Polypropylen basiert auf einer additiven Zerlegung der Spannung

$$\sigma = \sigma^{\text{eq}} + \sigma^{\text{ov}} \quad (5.3)$$

in eine dehnratenunabhängige Gleichgewichtsspannung σ^{eq} und eine dehnratenabhängige Über-
spannung σ^{ov} . Erstere beschreibt dabei die Gleichgewichtslage und wird durch ein nichtlineares Federelement approximiert

$$\sigma^{\text{eq}} = \frac{c_0}{1 + \beta|\varepsilon|} \varepsilon. \quad (5.4)$$

Die Grundsteifigkeit c_0 wird dabei mit steigendem Dehnungsniveau in Abhängigkeit des Parameters β herabgesetzt.

Die Abbildung der dehnratenabhängigen Überspannung erfolgt durch ein Modell der fraktionalen Viskoelastizität. In diesem Zusammenhang erfolgt die Definition des fraktionalen Elements als zusätzliches rheologisches Grundelement (vgl. Abb. 5.1). Dessen Spannung

$$\sigma = c_1 \tau^\alpha D^\alpha \varepsilon, \quad (5.5)$$

ist direkt proportional zur fraktionalen Ableitung der Dehnung. Das fraktionale Element ist definiert anhand von drei Parametern der Steifigkeit c , der charakteristischen Relaxationszeit τ und der fraktionalen Ableitungsordnung $\alpha = \{\mathbb{R} | 0 \leq \alpha \leq 1\}$.

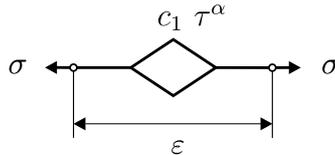


Abbildung 5.1: Fraktionales Element als zusätzliches rheologisches Grundelement.

Der fraktionale Ableitungsoperator D^α entspricht der Definition von RIEMANN-LIOUVILLE (Oldham und Spanier (1974)) und ist im Anhang A näher beschrieben. Mit der Beziehung $\tau = \frac{\eta}{c_1}$ kann gezeigt werden, dass die rheologischen Grundelemente Feder und Dämpfer als Grenzfälle im fraktionalen Element enthalten sind

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} c_1 \tau^\alpha D^\alpha \varepsilon^{ov} = c_1 \left(\frac{\eta}{c_1} \right)^0 D^0 \varepsilon^{ov} = c_1 \varepsilon^{ov} \quad \text{Feder,} \quad (5.6)$$

$$\lim_{\alpha \rightarrow 1} c_1 \tau^\alpha D^\alpha \varepsilon^{ov} = c_1 \left(\frac{\eta}{c_1} \right)^1 D^1 \varepsilon^{ov} = \eta \dot{\varepsilon}^{ov} \quad \text{Dämpfer.} \quad (5.7)$$

Die Reihenschaltung von linear elastischer Feder und fraktionalen Element liefert das fraktionale MAXWELL-Element, das für die Modellierung der dehnratenabhängigen Überspannung verwendet werden kann (vgl.: Abb. 5.2 (a), Koeller (1984)). Die in Abb. 5.2 (b) abgebildete Relaxationsfunktion erlaubt eine anschauliche Interpretation der Parameter. Aufgrund der Kinematik $\varepsilon = \varepsilon^e + \varepsilon^{ov}$ und der konstanten Spannung innerhalb des fraktionalen MAXWELL-Elements ist die dehnratenabhängige Überspannung implizit durch die fraktionale Differentialgleichung

$$D^\alpha \sigma^{ov} + \frac{1}{\tau^\alpha} \sigma^{ov} = c_1 D^\alpha \varepsilon \quad (5.8)$$

gegeben. Die LAPLACE-Transformation erlaubt für den Fall konstanter Materialparameter eine Überführung der Evolutionsgleichung in eine explizite Form (Müller u. a. (2013))

$$\sigma^{ov}(t) = c_1 \int_0^t E_\alpha \left(- \left(\frac{t-\xi}{\tau} \right)^\alpha \right) \frac{d\varepsilon(\xi)}{d\xi} d\xi. \quad (5.9)$$

Hierbei stellt $E_\alpha(x)$ die MITTAG-LEFFLER-Funktion dar (Diethelm u. a. (2005); Friedrich (1991); Mainardi und Gorenflo (2000); Mittag-Leffler (1903)).

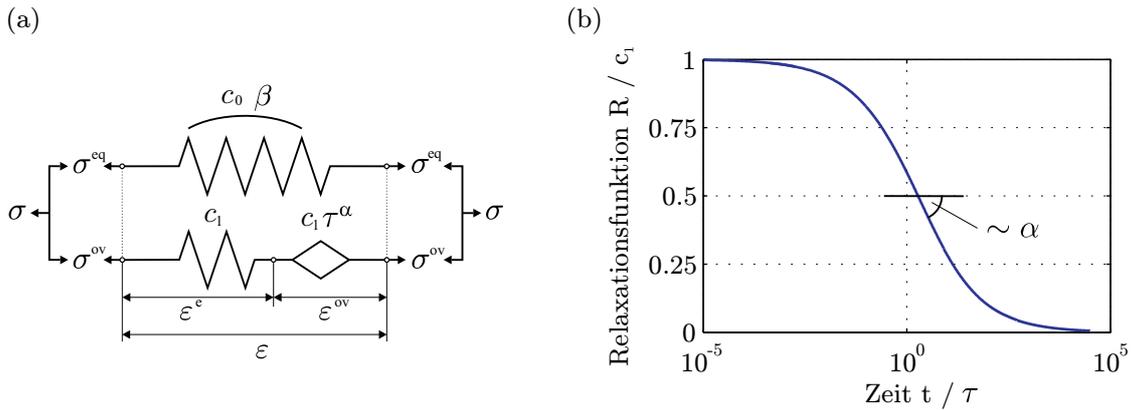


Abbildung 5.2: Fraktionales viskoelastisches Materialmodell: (a) Rheologisches Modell, (b) Normierte Relaxationsfunktion des fraktionales MAXWELL-Elements

Die in (5.8) gegebene Evolutionsgleichung repräsentiert ein linear viskoelastisches Überspannungsmodell (mit einer linearen Differentialgleichungsstruktur und konstanten Materialparametern). Dieses ist in der Lage das Relaxationsverhalten typischer Matrixwerkstoffe, wie das Epoxidharz RTM6 oder dem Thermoplast Polypropylen, anhand von drei Parametern abzubilden (Müller u. a. (2013)).

Zusätzlich zu dem ausgeprägten Relaxationsverhalten zeigt der Werkstoff Polypropylen jedoch ein ausgesprochen nichtlinear viskoelastisches Verhalten während der Belastung. Dessen Modellierung erfordert eine Erweiterung des bereits beschriebenen Materialmodells. Ein effektiver Ansatz hierzu wurde in Kästner u. a. (2012) vorgestellt. Er basiert auf der Definition einer spannungsabhängigen Viskositätsfunktion die es ermöglicht die Viskosität eines Standard MAXWELL-Elements zu variieren. Konkret sinkt die Viskosität mit steigender Überspannung. Der Ansatz wurde für die Verwendung mit fraktionales MAXWELL-Elementen modifiziert, so dass die charakteristische Relaxationszeit in Abhängigkeit der erreichten Überspannung degradiert wird

$$\tilde{\tau} = \tau \exp\left(-\frac{|\sigma^{ov}|}{s_0}\right). \quad (5.10)$$

τ entspricht dabei der Bezugs-Relaxationszeit und s_0 einem Normalisierungsparameter. Durch Ersetzen der konstanten Relaxationszeit in (5.8) mit der Viskositätsfunktion (5.10) entsteht eine neue Evolutionsgleichung für die Überspannung

$$D^\alpha \sigma^{ov} + \frac{1}{(\tilde{\tau}(\sigma^{ov}))^\alpha} \sigma^{ov} = c_1 D^\alpha \epsilon, \quad (5.11)$$

die nun eine nichtlineare fraktionales Differentialgleichung darstellt. Die nichtlineare Struktur verhindert dabei die Überführung in eine explizite Form durch die LAPLACE-Transformation. Für die Lösung von (5.11) wird daher ein iterativer Lösungsalgorithmus, basierend auf einem Prädiktor-Korrektur-Verfahren, angewendet (vgl.: Anhang B).

Die fraktionale Differentialgleichung wird dafür zunächst in die äquivalente fraktionale Integralgleichung

$$\sigma^{\text{ov}} + I^\alpha \left(\frac{1}{\tilde{\tau}^\alpha} \sigma^{\text{ov}} \right) = c_1 \varepsilon \quad (5.12)$$

überführt, mit dem fraktionalen Integraloperator I^α (vgl.: Anhang A). Das aus der Definition des fraktionalen Integraloperators resultierende Integral wird basierend auf einem ADAMS-MOULTON-Verfahren (implizites Mehrschrittverfahren) diskretisiert

$$\sigma^{\text{ov},k+1} + \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \left[\sum_{i=0}^{k+1} \frac{a_{i,k+1} \sigma^{\text{ov},i}}{(\tilde{\tau}(\sigma^{\text{ov},i}))^\alpha} \right] = c_1 \varepsilon^{k+1}, \quad (5.13)$$

mit der Gammafunktion Γ , den Quadraturkoeffizienten $a_{i,k+1}$ und $(\)^i$ mit $i = 0 \dots k + 1$ den konstitutiven Variablen zu diskreten Zeitpunkten ($\varepsilon(t_0) = \varepsilon^0$). Dies erlaubt die Isolierung der linearen Terme von $\sigma^{\text{ov},k+1}$

$$\sigma^{\text{ov},k+1} = \frac{c_1 \varepsilon^{k+1} - \sum_{i=0}^n \frac{a_{i,k+1} \sigma^{\text{ov},i}}{\Gamma(\alpha)(\tilde{\tau}(\sigma^{\text{ov},i}))^\alpha}}{1 + \frac{a_{k+1,k+1}}{\Gamma(\alpha)(\tilde{\tau}(\sigma^{\text{ov},k+1}))^\alpha}}. \quad (5.14)$$

Gleichung (5.14) stellt jedoch keine explizite Lösung von (5.11) dar, da die aktuelle Überspannung implizit in der charakteristischen Relaxationszeit $\tilde{\tau} = \tilde{\tau}(\sigma^{\text{ov},k+1})$ enthalten ist. Die Lösung erfordert daher einen Prädiktorschritt, bei dem die Überspannung angenähert wird. Hierfür wird die fraktionale Integralgleichung (5.12) erneut diskretisiert, diesmal jedoch unter Verwendung eines ADAMS-BASHFORTH-Verfahrens (explizites Mehrschrittverfahren)

$$\sigma^{\text{ov},k+1} + \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \left[\sum_{i=0}^n \frac{b_{i,k+1} \sigma^{\text{ov},i}}{(\tilde{\tau}(\sigma^{\text{ov},i}))^\alpha} \right] = c_1 \varepsilon^{k+1}. \quad (5.15)$$

Da hierbei die Diskretisierung des Integrals ohne der gesuchten Überspannung $\sigma^{\text{ov},k+1}$ auskommt, kann ein expliziter Ausdruck für den Prädiktorwert

$${}_p\sigma^{\text{ov},k+1} = c_1 \varepsilon^{k+1} - \sum_{i=0}^n \frac{b_{i,k+1} \sigma^{\text{ov},i}}{\Gamma(\alpha)(\tilde{\tau}(\sigma^{\text{ov},i}))^\alpha} \quad (5.16)$$

angegeben werden. Eine Korrektur des ermittelten Näherungswerts ${}_p\sigma^{\text{ov},k+1}$ erfolgt durch das Einsetzen in (5.10), respektive (5.14). Erneutes Einsetzen der gewonnenen Lösung in die zuvor genannten Evolutionsgleichungen führt dabei zu einer iterativen Verbesserung des Ergebnisses. Der Gesamt Ablauf zur Überspannungsberechnung lässt sich damit wie folgt zusammenfassen:

1. Prädiktorschritt: Berechnung der Überspannung $\sigma_0^{\text{ov},k+1} = {}_p\sigma^{\text{ov},k+1}$ aus (5.16)
2. Korrekturschritte $k = 1 \dots N$:
 - a) Berechnung der Relaxationszeit $\tilde{\tau} = \tilde{\tau}(\sigma_{k-1}^{\text{ov},k+1})$ aus (5.10)
 - b) Berechnung der Überspannung $\sigma_k^{\text{ov},k+1}$ aus (5.16)
 - c) Prüfen der Konvergenz $|\sigma_k^{\text{ov},k+1} - \sigma_{k-1}^{\text{ov},k+1}| < \text{Tol.}$

5.2.2 Validierung des Materialmodells für Polypropylen

Das in Abschnitt 5.2.1 dargestellte Materialmodell nichtlinearer, fraktionaler Viskoelastizität ist in der Lage, das inelastische Verhalten des Matrixwerkstoffs Polypropylen abzubilden. Es basiert dabei lediglich auf sechs Parametern - zwei für die Modellierung der Gleichgewichtslage und vier für die viskose Überspannung.

Die Bestimmung der Parameter erfolgte im vorliegenden Fall ausschließlich auf Basis der experimentellen Ergebnisse des Relaxationsversuches. Eine Fehlerquadratoptimierung erlaubte dabei die Anpassung der Modellantwort an die experimentellen Ergebnisse. Der Vergleich der Relaxationsfunktion des linear viskoelastischen Modells (vgl.: (5.9) und Abb. 5.2 (b)) mit der Spannungs-Zeitkurve des Relaxationsversuchs liefert dabei die Startwerte für die Optimierung. Die ermittelten Parameter auf Basis der von Kästner (2009) veröffentlichten experimentellen Ergebnisse sind in Tab. 5.1 zusammengefasst.

Tabelle 5.1: Materialparameter des nichtlinear viskoelastischen Modells für Polypropylen.

c_0	β	c_1	τ	α	s_0
605 MPa	31,5	966 MPa	1185,5 s	0,47	3,1 MPa

Das Modellverhalten für monotone, einachsige Zugversuche sowie für einen Relaxationsversuch ist in Abb. 5.3 mit den experimentellen Ergebnissen verglichen.

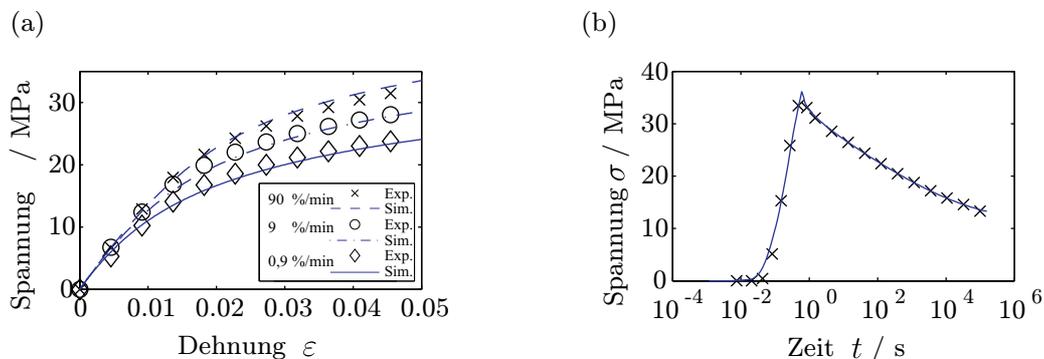


Abbildung 5.3: Modellverhalten (Linien) im Vergleich mit experimentellen Ergebnissen (Symbole) für Polypropylen: (a) Spannungs-Dehnungskurven für monotone Zugversuche bei drei unterschiedlichen Dehnraten bis zu einem Dehnungsniveau von $\varepsilon \leq 0,05$, (b) Spannung-Zeitkurve für einen Relaxationsversuch bei $\bar{\varepsilon} = 0,045$ und einer Haltezeit von $t_h = 48$ h

Das Modell ist dabei in der Lage, sowohl das nichtlineare, dehnratenabhängige Verhalten während der Belastung, als auch das Relaxationsverhalten bei konstanter Dehnung abzubilden.

5.2.3 Mehrachsige Verallgemeinerung

Die Nutzung des in Abschnitt 5.2.1 dargestellten Materialmodells innerhalb einer mehrdimensionalen FE-Rechnung erfordert die mehrachsige Verallgemeinerung der konstitutiven Beziehungen. Entsprechend der experimentellen Untersuchungen von Kästner (2009) erfolgt dies auf Basis der Annahme eines isotropen Materialverhaltens. Die Zerlegung der konstitutiven Variablen in ihren deviatorischen und volumetrischen Anteil erlaubt die Definition unterschiedlicher Zug- und Torsionseigenschaften, wobei zunächst für beide Anteile ein inelastisches Verhalten angenommen wird.

Ausgangspunkt für die mehrachsige Verallgemeinerung ist die Aufspaltung der symmetrischen, tensoriellen, konstitutiven Variablen in den deviatorischen und volumetrischen Anteil. Der infinitesimale Verzerrungstensor ε

$$\varepsilon_{ij} = e_{ij} + \frac{1}{3}\varepsilon_{mm}\delta_{ij} \quad (5.17)$$

teilt sich auf in den Verzerrungsdeviator e_{ij} und die volumetrische Verzerrung $\frac{1}{3}\varepsilon_{mm}\delta_{ij}$. Die gleiche Aufteilung wird auf den Spannungstensor σ und dessen Bestandteile σ^{eq} und σ^{ov} angewendet

$$\sigma_{ij}^{()} = s_{ij}^{()} + \frac{1}{3}\sigma_{mm}^{()} \delta_{ij}. \quad (5.18)$$

Eine Möglichkeit der mehrachsigen Verallgemeinerung der durch (5.4) gegebenen nichtlinear elastischen Gleichgewichtslage ist in Kästner (2009) angegeben. Für den deviatorischen, respektive volumetrischen Anteil der Gleichgewichtsspannung gilt

$$s_{ij}^{\text{eq}} = \frac{2G^{\text{eq}}}{1 + \beta_G \|e_{kl}\|} e_{ij}, \quad (5.19)$$

$$\sigma_{mm}^{\text{eq}} = \frac{3K^{\text{eq}}}{1 + \beta_K |\varepsilon_{nn}|} \varepsilon_{mm}, \quad (5.20)$$

wobei G^{eq} und K^{eq} Schub- und Kompressionsmodul und $\|e_{kl}\| = \sqrt{e_{kl}e_{kl}}$ und $|\varepsilon_{nn}| = \sqrt{\varepsilon_{mm}\varepsilon_{nn}}$ die Normen des korrespondierenden Anteils des Verzerrungstensors darstellen.

Für den deviatorischen und volumetrischen Anteil der Überspannung werden zwei Evolutionsgleichungen

$$D^\alpha s_{ij}^{\text{ov}} + \frac{1}{\tilde{\tau}_G^\alpha} s_{ij}^{\text{ov}} = 2G^{\text{ov}} D^\alpha e_{ij}, \quad (5.21)$$

$$D^\alpha \sigma_{mm}^{\text{ov}} + \frac{1}{\tilde{\tau}_K^\alpha} \sigma_{mm}^{\text{ov}} = 3K^{\text{ov}} D^\alpha \varepsilon_{mm}, \quad (5.22)$$

definiert, mit den entsprechenden Moduln G^{ov} und K^{ov} und den charakteristischen Relaxationszeiten $\tilde{\tau}_G$ und $\tilde{\tau}_K$. Während Letztere im Fall linearer Viskoelastizität Konstanten darstellen, sind es im vorliegenden nichtlinear viskoelastischen Modell prozessabhängige Variablen $\tilde{\tau}_{(\cdot)} = \tilde{\tau}_{(\cdot)}(\sigma_{kl}^{\text{ov}})$.

Die mehrachsige Verallgemeinerung der Viskositätsfunktion (5.10) erfolgt unter Verwendung der Norm des Überspannungstensors $\|\sigma_{kl}^{ov}\| = \sqrt{\sigma_{kl}^{ov}\sigma_{kl}^{ov}}$

$$\tilde{\tau}_{(\cdot)}(\sigma_{kl}^{ov}) = \tau_{(\cdot)} \exp\left(-\frac{\|\sigma_{kl}^{ov}\|}{s_0}\right), \text{ mit } (\cdot) = G, K. \quad (5.23)$$

Die Verwendung des vollständigen Überspannungstensors führt zu einem System gekoppelter nichtlinearer, fraktionaler Differentialgleichungen ((5.21) und (5.22)).

Die zuvor getroffene Aufspaltung der konstitutiven Variablen in ihren deviatorischen und volumetrischen Anteil erlaubt die Definition unterschiedlicher Materialeigenschaften für Zug- und Schubbelastung. Deren Ermittlung kann anhand von geeigneten Zug- und Torsionsversuchen erfolgen. Da im vorliegenden Fall lediglich experimentelle Ergebnisse aus einachsigen Zugversuchen vorliegen, werden die Parameter der mehrachsigen konstitutiven Beziehungen aus den einachsigen Materialparametern unter Annahme einer konstanten Querkontraktionszahl abgeleitet. Eine optische Auswertung von Zug- und Relaxationsversuchen mittels Grauwertkorrelation (ARAMIS) bestätigt die Zulässigkeit des Ansatzes für das Thermoplast Polypropylen. Die Querkontraktionszahl wurde daraufhin auf $\nu = 0,4$ festgesetzt. Eine Korrespondenz zwischen den Parametern des einachsigen und des mehrachsigen Modells ist in Tab. 5.2 zusammengefasst.

Tabelle 5.2: Zuordnung zwischen einachsigen und mehrachsigen Materialparametern unter der Annahme einer konstanten Querkontraktionszahl.

Modellanteil	Einachsiger Parameter	Mehrachsiger Parameter	Beschreibung
Nichtlinear elastische Gleichgewichtsrelation	c_0	$G^{eq} = \frac{c_0}{2(1+\nu)}$	Steifigkeit
		$K^{eq} = \frac{c_0}{3(1-2\nu)}$	
	β	$\beta_G = \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{\beta}{1+\nu}, \beta_K = \frac{\beta}{1-2\nu}$	Abminderungsfaktor
Nichtlinear viskoelastisches Überspannungsmodell	c_1	$G^{ov} = \frac{c_1}{2(1+\nu)},$ $K^{ov} = \frac{c_1}{3(1-2\nu)}$	Relaxationsstärke
	τ	$\tau_G = \tau_K = \tau$	Relaxationszeit
	α	α	Fraktionale Ableitungsordnung
Viskositätsfunktion	s_0	s_0	Nichtlineare Überspannungsabhängigkeit

5.2.4 Einbindung in eine iterative FE-Rechnung

Die Einbindung des nichtlinearen viskoelastischen Materialmodells in eine FE-Rechnung erfolgt auf Basis des in Kapitel 3 dargestellten iterativen Lösungsverfahrens. Wie in Abschnitt 3.3 angeben, ist es hierfür notwendig aus den verallgemeinerten konstitutiven Beziehungen einen Spannungsalgorithmus in Verbindung mit einer konsistenten Materialtangente ableiten. Die zeitlich nichtlokalen Eigenschaften der fraktionalen Differential- und Integraloperatoren in den Evolutionsgleichungen des Überspannungsmodells machen es hierbei erforderlich, dass zu jedem Zeitpunkt der Spannungsberechnung die konstitutiven Variablen und die Spannungs-Verzerrungszustände vorhergehender Zeitschritte abrufbar sind.

Im Folgenden markiert der obere Index t_i , mit $i = 1 \dots k + 1$, diskrete Werte der konstitutiven Variablen, korrespondierend zu den Zeitinkrementen der inkrementellen FE-Rechnung. Der Index $i = k + 1$ markiert dabei den aktuellen Zeitschritt mit dem aus dem iterativen Lösungsalgorithmus bekannten Verzerrungszustand ${}^{t_{k+1}}\varepsilon_{ij}$. Alle weiteren Größen mit $i = 0 \dots k$ werden als bekannt angesehen. Entsprechend der im vorhergehenden Abschnitt eingeführten Aufteilung der konstitutiven Variablen erfolgt die Abspaltung des deviatorischen Anteils des aktuellen Verzerrungstensors

$${}^{t_{k+1}}e_{ij} = {}^{t_{k+1}}\varepsilon_{ij} - \frac{1}{3} {}^{t_{k+1}}\varepsilon_{mm}, \quad (5.24)$$

mit ${}^{t_{k+1}}\varepsilon_{mm}$ dem volumetrischen Anteil.

Der zu ermittelnde Spannungszustand ${}^{t_{k+1}}\sigma = {}^{t_{k+1}}\sigma^{\text{eq}} + {}^{t_{k+1}}\sigma^{\text{ov}}$ setzt sich aus der Gleichgewichtsspannung σ^{eq} und der Überspannung σ^{ov} zusammen. Für beide Spannungen wird der deviatorische und volumetrische Anteil separat berechnet. Für die Gleichgewichtsspannung gilt

$${}^{t_{k+1}}\sigma_{ij}^{\text{eq}} = {}^{t_{k+1}}s_{ij}^{\text{eq}} + \frac{1}{3} {}^{t_{k+1}}\sigma_{mm}^{\text{eq}} \delta_{ij}, \quad (5.25)$$

mit

$${}^{t_{k+1}}s_{ij}^{\text{eq}} = \frac{2G^{\text{eq}}}{1 + \beta_G \sqrt{{}^{t_{k+1}}e_{kl} {}^{t_{k+1}}e_{kl}}} {}^{t_{k+1}}e_{ij}, \quad (5.26)$$

$${}^{t_{k+1}}\sigma_{mm}^{\text{eq}} = \frac{3K^{\text{eq}}}{1 + \beta_K \sqrt{{}^{t_{k+1}}\varepsilon_{oo} {}^{t_{k+1}}\varepsilon_{pp}}} {}^{t_{k+1}}\varepsilon_{mm}. \quad (5.27)$$

In der gleichen Weise gilt für die Überspannung

$${}^{t_{k+1}}\sigma_{ij}^{\text{ov}} = {}^{t_{k+1}}s_{ij}^{\text{ov}} + \frac{1}{3} {}^{t_{k+1}}\sigma_{mm}^{\text{ov}} \delta_{ij}, \quad (5.28)$$

wobei der deviatorische und volumetrische Anteil implizit durch die Evolutionsgleichungen

$$D^\alpha {}^{t_{k+1}}s_{ij}^{\text{ov}} + \frac{1}{{}^{t_{k+1}}\tilde{\gamma}_G^\alpha} {}^{t_{k+1}}s_{ij}^{\text{ov}} = 2G^{\text{ov}} D^\alpha {}^{t_{k+1}}e_{ij}, \quad (5.29)$$

$$D^\alpha {}^{t_{k+1}}\sigma_{mm}^{\text{ov}} + \frac{1}{{}^{t_{k+1}}\tilde{\gamma}_K^\alpha} {}^{t_{k+1}}\sigma_{mm}^{\text{ov}} = 3K^{\text{ov}} D^\alpha {}^{t_{k+1}}\varepsilon_{mm} \quad (5.30)$$

gegeben ist. Für die überspannungsabhängige charakteristische Relaxationszeit gilt

$${}^{t_{k+1}}\tilde{\tau}_{(\cdot)} = \tau_{(\cdot)} \exp \left(-\frac{\sqrt{{}^{t_{k+1}}\sigma_{kl}^{ov} {}^{t_{k+1}}\sigma_{kl}^{ov}}}{s_0} \right), \text{ mit } (\cdot) = G, K, \quad (5.31)$$

wodurch die Gleichungen (5.28) bis (5.31) ein nichtlineares, fraktionales Differentialgleichungssystem darstellen. Die Lösung erfolgt unter Verwendung desselben iterativen Lösungsalgorithmus wie bei den einachsigen Evolutionsgleichungen in Abschnitt 5.2.1. Die Differentialgleichungen (5.29) und (5.30) werden hierfür zunächst in die äquivalenten fraktionalen Integralgleichungen überführt

$${}^{t_{k+1}}s_{ij}^{ov} + I^\alpha \left(\frac{1}{{}^{t_{k+1}}\tilde{\tau}_G^\alpha} {}^{t_{k+1}}s_{ij}^{ov} \right) = 2G^{ov} {}^{t_{k+1}}e_{ij}, \quad (5.32)$$

$${}^{t_{k+1}}\sigma_{mm}^{ov} + I^\alpha \left(\frac{1}{{}^{t_{k+1}}\tilde{\tau}_K^\alpha} {}^{t_{k+1}}\sigma_{mm}^{ov} \right) = 3K^{ov} {}^{t_{k+1}}\varepsilon_{mm}. \quad (5.33)$$

Die Verwendung eines ADAMS-MOULTON-Verfahrens (implizites Mehrschrittverfahren) erlaubt die Diskretisierung der fraktionalen Integrale (vgl.: Anhang B)

$$I^\alpha \left(\frac{1}{{}^{t_{k+1}}\tilde{\tau}_G^\alpha} {}^{t_{k+1}}s_{ij}^{ov} \right) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \left[\sum_{i=0}^k \frac{a_{i,k+1} {}^{t_i} s_{ij}^{ov}}{{}^{t_i}\tilde{\tau}_G^\alpha} + \frac{a_{k+1,k+1} {}^{t_{k+1}} s_{ij}^{ov}}{{}^{t_{k+1}}\tilde{\tau}_G^\alpha} \right], \quad (5.34)$$

$$I^\alpha \left(\frac{1}{{}^{t_{k+1}}\tilde{\tau}_K^\alpha} {}^{t_{k+1}}\sigma_{mm}^{ov} \right) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \left[\sum_{i=0}^k \frac{a_{i,k+1} {}^{t_i} \sigma_{mm}^{ov}}{{}^{t_i}\tilde{\tau}_K^\alpha} + \frac{a_{k+1,k+1} {}^{t_{k+1}} \sigma_{mm}^{ov}}{{}^{t_{k+1}}\tilde{\tau}_K^\alpha} \right]. \quad (5.35)$$

Durch Isolierung der gesuchten Anteile der Überspannung lassen sich die Evolutionsgleichungen in die Form

$${}^{t_{k+1}}s_{ij}^{ov} = \frac{2G^{ov} {}^{t_{k+1}}e_{ij} - \sum_{i=0}^k \frac{a_{i,k+1} {}^{t_i} s_{ij}^{ov}}{\Gamma(\alpha) {}^{t_i}\tilde{\tau}_G^\alpha}}{1 + \frac{a_{k+1,k+1}}{\Gamma(\alpha) {}^{t_{k+1}}\tilde{\tau}_G^\alpha}}, \quad (5.36)$$

$${}^{t_{k+1}}\sigma_{mm}^{ov} = \frac{3K^{ov} {}^{t_{k+1}}\varepsilon_{mm} - \sum_{i=0}^k \frac{a_{i,k+1} {}^{t_i} \sigma_{mm}^{ov}}{\Gamma(\alpha) {}^{t_i}\tilde{\tau}_K^\alpha}}{1 + \frac{a_{k+1,k+1}}{\Gamma(\alpha) {}^{t_{k+1}}\tilde{\tau}_K^\alpha}} \quad (5.37)$$

überführen. Da der gesuchte Überspannungstensor implizit durch die charakteristischen Relaxationszeiten ${}^{t_{k+1}}\tilde{\tau}_G$ und ${}^{t_{k+1}}\tilde{\tau}_K$ enthalten ist, muss für die iterative Lösung der Gleichungen ein erster Näherungswert für die Überspannung ermittelt werden. Hierfür wird ein Prädiktorverfahren eingesetzt, welches die fraktionalen Integralgleichungen (5.32) und (5.33) basierend auf einem ADAMS-BASHFORTH-Verfahren diskretisiert. Für die fraktionalen Integraloperatoren gilt damit

$$I^\alpha \left(\frac{1}{{}^{t_{k+1}}\tilde{\tau}_G^\alpha} {}^{t_{k+1}}s_{ij}^{ov} \right) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \sum_{i=0}^k \frac{b_{i,k+1} {}^{t_i} s_{ij}^{ov}}{{}^{t_i}\tilde{\tau}_G^\alpha}, \quad (5.38)$$

$$I^\alpha \left(\frac{1}{{}^{t_{k+1}}\tilde{\tau}_K^\alpha} {}^{t_{k+1}}\sigma_{mm}^{ov} \right) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \sum_{i=0}^k \frac{b_{i,k+1} {}^{t_i} \sigma_{mm}^{ov}}{{}^{t_i}\tilde{\tau}_K^\alpha}, \quad (5.39)$$

wobei $b_{i,k+1}$ den Quadraturkoeffizienten (vgl.: Anhang B). Die Diskretisierung erlaubt eine Isolation der gesuchten Überspannungsanteile und damit eine Überführung der Evolutionsgleichungen in einen expliziten Ausdruck. Für den benötigten Prädiktor des Überspannungstensors gilt damit

$${}_{\text{p}}^{t_{k+1}}\sigma_{ij}^{\text{ov}} = {}_{\text{p}}^{t_{k+1}}s_{ij}^{\text{ov}} + \frac{1}{3} {}_{\text{p}}^{t_{k+1}}\sigma_{mm}^{\text{ov}}\delta_{ij}, \quad (5.40)$$

mit

$${}_{\text{p}}^{t_{k+1}}s_{ij}^{\text{ov}} = 2G^{\text{ov}} {}_{\text{p}}^{t_{k+1}}e_{ij} - \sum_{i=0}^k \frac{b_{i,k+1} {}_{\text{p}}^{t_i}s_{ij}^{\text{ov}}}{\Gamma(\alpha) {}_{\text{p}}^{t_i}\tilde{\tau}_G^\alpha}, \quad (5.41)$$

$${}_{\text{p}}^{t_{k+1}}\sigma_{mm}^{\text{ov}} = 3K^{\text{ov}} {}_{\text{p}}^{t_{k+1}}\varepsilon_{mm} - \sum_{i=0}^k \frac{b_{i,k+1} {}_{\text{p}}^{t_i}\sigma_{mm}^{\text{ov}}}{\Gamma(\alpha) {}_{\text{p}}^{t_i}\tilde{\tau}_K^\alpha}. \quad (5.42)$$

Die Anwendung des in Abschnitt 5.2.1 dargestellten Iterationsschemas führt zu einer sukzessiven Verbesserung der Lösung.

Wie zu Beginn des Abschnitts erwähnt, verlangt der iterative Lösungsalgorithmus der FE-Rechnung neben dem Spannungsalgorithmus eine konsistente Materialtangente. Diese ist als die partielle Ableitung des aktuellen Gesamtspannungstensors nach dem aktuellen Verzerrungstensor

$${}_{\text{p}}^{t_{k+1}}C_{ijkl} = \frac{\partial {}_{\text{p}}^{t_{k+1}}\sigma_{ij}}{\partial {}_{\text{p}}^{t_{k+1}}\varepsilon_{kl}} = \frac{\partial {}_{\text{p}}^{t_{k+1}}\sigma_{ij}^{\text{eq}}}{\partial {}_{\text{p}}^{t_{k+1}}\varepsilon_{kl}} + \frac{\partial {}_{\text{p}}^{t_{k+1}}\sigma_{ij}^{\text{ov}}}{\partial {}_{\text{p}}^{t_{k+1}}\varepsilon_{kl}} = {}_{\text{p}}^{t_{k+1}}C_{ijkl}^{\text{eq}} + {}_{\text{p}}^{t_{k+1}}C_{ijkl}^{\text{ov}} \quad (5.43)$$

definiert. Der erste Summand ist dabei der Tangentenmodul der Gleichgewichtsrelation

$${}_{\text{p}}^{t_{k+1}}C_{ijkl}^{\text{eq}} = \frac{\partial {}_{\text{p}}^{t_{k+1}}s_{ij}^{\text{eq}}}{\partial {}_{\text{p}}^{t_{k+1}}\varepsilon_{kl}} + \frac{1}{3}\delta_{ij} \frac{\partial {}_{\text{p}}^{t_{k+1}}\sigma_{mm}^{\text{eq}}}{\partial {}_{\text{p}}^{t_{k+1}}\varepsilon_{kl}}, \quad (5.44)$$

dessen Bestandteile aus den partiellen Ableitungen des zuvor ermittelten Spannungsalgorithmus (5.26) und (5.27) abgeleitet werden können

$$\frac{\partial {}_{\text{p}}^{t_{k+1}}s_{ij}^{\text{eq}}}{\partial {}_{\text{p}}^{t_{k+1}}\varepsilon_{kl}} = \frac{2G^{\text{eq}}}{1 + \beta_G \sqrt{{}_{\text{p}}^{t_{k+1}}e_{pq} {}_{\text{p}}^{t_{k+1}}e_{pq}}} \left[\psi_{ijkl} - \frac{\beta_G {}_{\text{p}}^{t_{k+1}}e_{ij} {}_{\text{p}}^{t_{k+1}}e_{kl}}{(1 + \beta_G \sqrt{{}_{\text{p}}^{t_{k+1}}e_{pq} {}_{\text{p}}^{t_{k+1}}e_{pq}}) \sqrt{{}_{\text{p}}^{t_{k+1}}e_{pq} {}_{\text{p}}^{t_{k+1}}e_{pq}}} \right], \quad (5.45)$$

$$\delta_{ij} \frac{\partial {}_{\text{p}}^{t_{k+1}}\sigma_{mm}^{\text{eq}}}{\partial {}_{\text{p}}^{t_{k+1}}\varepsilon_{kl}} = \frac{3K^{\text{eq}}}{(1 + \beta_K \sqrt{{}_{\text{p}}^{t_{k+1}}\varepsilon_{oo} {}_{\text{p}}^{t_{k+1}}\varepsilon_{pp}})^2} \theta_{ijkl}. \quad (5.46)$$

Die Tensoren ψ und θ sind hierbei wie folgt definiert

$$\psi_{ijkl} = \frac{\partial {}_{\text{p}}^{t_{k+1}}e_{ij}}{\partial {}_{\text{p}}^{t_{k+1}}\varepsilon_{kl}} = \frac{1}{2} [\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{jk}\delta_{il}] - \frac{1}{3}\delta_{ij}\delta_{kl}, \quad (5.47)$$

$$\theta_{ijkl} = \delta_{ij} \frac{\partial {}_{\text{p}}^{t_{k+1}}\varepsilon_{mm}}{\partial {}_{\text{p}}^{t_{k+1}}\varepsilon_{kl}} = \delta_{ij}\delta_{kl}. \quad (5.48)$$

Für den Tangentenmodul des Überspannungsmodells gilt äquivalent

$${}^{t_{k+1}}C_{ijkl}^{\text{ov}} = \frac{\partial^{t_{k+1}}s_{ij}^{\text{ov}}}{\partial^{t_{k+1}}\varepsilon_{kl}} + \frac{1}{3}\delta_{ij}\frac{\partial^{t_{k+1}}\sigma_{mm}^{\text{ov}}}{\partial^{t_{k+1}}\varepsilon_{kl}}. \quad (5.49)$$

Die nichtlineare Struktur der Evolutionsgleichungen der Überspannung (5.34) und (5.35) führt zu einem linearen Gleichungssystem

$${}^{t_{k+1}}C_{ijkl}^{\text{ov}} = A\psi_{ijkl} + \frac{1}{3}B\theta_{ijkl} - \left[\phi_{ij} + \frac{1}{3}\delta_{ij}\vartheta_{mm} \right] {}^{t_{k+1}}\sigma_{op}^{\text{ov}} {}^{t_{k+1}}C_{opkl}^{\text{ov}} \quad (5.50)$$

für den Tangentenmodul C^{ov} . Für die auftretenden Tensoren und Faktoren gelten neben den Definitionen (5.47) und (5.48)

$$A = \frac{2G^{\text{ov}}}{1 + \frac{a_{k+1,k+1}}{\Gamma(\alpha) {}^{t_{k+1}}\tilde{\tau}_G^\alpha}}, \quad (5.51)$$

$$B = \frac{3K^{\text{ov}}}{1 + \frac{a_{k+1,k+1}}{\Gamma(\alpha) {}^{t_{k+1}}\tilde{\tau}_K^\alpha}}, \quad (5.52)$$

$$\phi_{ij} = \frac{{}^{t_{k+1}}s_{ij}^{\text{ov}}}{1 + \frac{a_{k+1,k+1}}{\Gamma(\alpha) {}^{t_{k+1}}\tilde{\tau}_G^\alpha}} \frac{\alpha a_{k+1,k+1}}{\Gamma(\alpha) {}^{t_{k+1}}\tilde{\tau}_G^\alpha s_0 \sqrt{{}^{t_{k+1}}\sigma_{kl}^{\text{ov}} {}^{t_{k+1}}\sigma_{kl}^{\text{ov}}}}, \quad (5.53)$$

$$\vartheta_{mm} = \frac{{}^{t_{k+1}}\sigma_{mm}^{\text{ov}}}{1 + \frac{a_{k+1,k+1}}{\Gamma(\alpha) {}^{t_{k+1}}\tilde{\tau}_K^\alpha}} \frac{\alpha a_{k+1,k+1}}{\Gamma(\alpha) {}^{t_{k+1}}\tilde{\tau}_K^\alpha s_0 \sqrt{{}^{t_{k+1}}\sigma_{kl}^{\text{ov}} {}^{t_{k+1}}\sigma_{kl}^{\text{ov}}}}. \quad (5.54)$$

In Anbetracht eines komplexen FE-Modells kann die Berechnung des konsistenten Tangentenmoduls des Überspannungsmodells sehr rechenintensiv sein. Eine für übliche inkrementelle Rechnungen ausreichende Näherung stellt der Tangentenmodul des äquivalenten linear viskoelastischen Modells

$${}^{t_{k+1}}C_{ijkl}^{\text{ov}} = A\psi_{ijkl} + \frac{1}{3}B\theta_{ijkl} \quad (5.55)$$

dar.

5.3 Grenzflächenschädigung

Die Modellierung der Grenzflächenschädigung basiert in der vorliegenden Arbeit auf einem Kohäsivzonenansatz. Die Versagenstheorie wurde erstmals von Dugdale (1960) und Barenblatt (1962) vorgestellt. Sie unterscheidet sich dabei grundlegend von dem durch Griffith (1921) eingeführten Modell eines spröden Versagens. Im Rahmen der Kohäsivzonentheorie kommt es zu einer kontinuierlichen Degradation der Grenzflächensteifigkeit. Der Abbau erfolgt innerhalb einer erweiterten Prozesszone und wird durch die Separation der beiden Rissufer gesteuert (vgl. Abb. 2.1 (b)). Die Kopplung zwischen dem Verschiebungssprung und dem übertragbaren Spannungsvektor ist durch ein Kohäsivzonenmodell definiert. Hierbei werden grundsätzlich anfangs-steife und anfangs-nachgiebige Modelle unterschieden. Die Auswahl eines geeigneten Modells richtet sich dabei nach dem jeweiligen Anwendungsfall. Das effektive mechanische Verhalten heterogener Körper wird bei anfangs-nachgiebigen Modellen bereits vor Eintreten einer Grenzflächenschädigung durch das Kohäsivzonenmodell signifikant beeinflusst. Bei der Verwendung einer anfangs-steifen Formulierung wird das vorkritische Verhalten demgegenüber ausschließlich durch die Materialmodelle der einzelnen Materialphasen bestimmt. Eine Gegenüberstellung ausgewählter Modelle erfolgt in Abschnitt 5.3.3. Zuvor werden in Abschnitt 5.3.1 die kinematischen Grundgrößen der Grenzflächenschädigung und in Abschnitt 5.3.2 ein Initialisierungskriterium definiert.

5.3.1 Kinematik kohäsiver Grenzflächenschädigung

Für die Modellierung eines Verschiebungssprunges an der Grenzfläche zwischen zwei Materialien wurde in Abschnitt 2.1 ein erweitertes Verschiebungsfeld definiert, das in Abschnitt 3.2 mit Hilfe der XFEM diskretisiert wurde. Innerhalb des diskretisierten Verschiebungsansatzes eines X-Elements wird der Verschiebungssprung an der Grenzfläche $\partial\mathcal{B}^c$ durch die zusätzlichen Knotenfreiwerte $\hat{\mathbf{b}}_i$ definiert. Zusammen mit den Elementformfunktionen N_i der n^K Knoten eines X-Elements gilt für den Verschiebungssprung

$$[[\mathbf{u}]]^c = \sum_{i=1}^{n^K} N_i \hat{\mathbf{b}}_i. \quad (5.56)$$

Ausgehend von dem Normalenvektor der Grenzfläche \mathbf{n} lässt sich der Verschiebungssprung entsprechend Abb. 5.4 (a) in einen skalarwertigen Normalenanteil $[[u]]_n$ und den vektoriellen Tangentialanteil $[[\mathbf{u}]]_t$ zerlegen

$$[[\mathbf{u}]]^c = [[u]]_n \mathbf{n} + [[\mathbf{u}]]_t. \quad (5.57)$$

Für die einzelnen Bestandteile gilt

$$[[u]]_n = [[\mathbf{u}]]^c \cdot \mathbf{n}, \quad (5.58)$$

$$[[\mathbf{u}]]_t = [[\mathbf{u}]]^c \cdot [\mathbf{1} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}], \quad (5.59)$$

mit $\mathbf{1}$ dem zweistufigen Einheitstensor. Auf eine weitere Zerlegung des Tangentialanteils kann unter der Voraussetzung eines isotropen Verhaltens innerhalb der Tangentialebene verzichtet werden (vgl. Hettich (2007)).

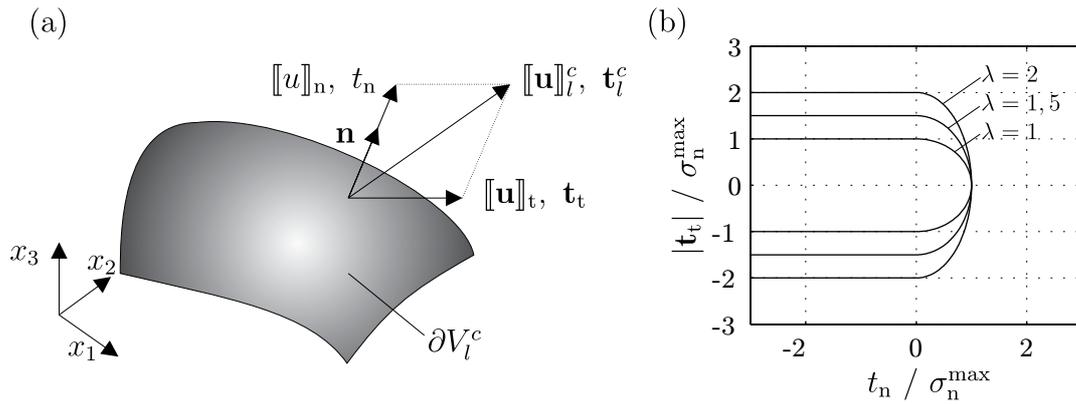


Abbildung 5.4: (a) Aufteilung der Separation $[[\mathbf{u}]]_l^c$ und des Spannungsvektors \mathbf{t}_l^c in ihren Normal- und Tangentialanteil. (b) Einfluss des Grenzflächenfestigkeitsparameters λ auf das Initialisierungskriterium (5.61).

Für die Steuerung der Degradation unter einer Zug-Schub-Mischbelastung erfolgt entsprechend dem Vorgehen von Camacho und Ortiz (1996) die zusätzliche Definition einer effektiven Separation

$$[[u]]^{\text{eff}} = \sqrt{\langle [[u]]_n \rangle^2 + \lambda^2 |[[\mathbf{u}]]_t|^2} \quad (5.60)$$

mit $\langle x \rangle = \frac{1}{2}(x + |x|)$ den MACAULAY-Klammern und λ einem Wichtungparameter zwischen Normal- und Tangentialseparation. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit entspricht $\lambda = \frac{\sigma_t^{\max}}{\sigma_n^{\max}}$ dem Koeffizienten der Grenzflächenfestigkeit in Tangential- und Normalenrichtung (vgl. Ortiz und Pandolfi (1999)).

5.3.2 Schädigungsinitialisierung

Für die Anwendung anfangs-steifer Kohäsivzonenmodelle für die Modellierung der Grenzflächenschädigung ist die Formulierung eines Initialisierungskriteriums notwendig. Bei Erreichen dieses Kriteriums werden die zusätzlichen Knotenfreiwerte zur Abbildung des Verschiebungssprunges aktiviert und die übertragbare Spannung an der Grenzfläche durch das Kohäsivzonenmodell gesteuert. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit erfolgt die Initialisierung des Versagens auf Basis eines effektiven Spannungskriteriums nach Brewer und Lagace (1988)

$$\sqrt{\langle t_n \rangle^2 + \lambda^{-2} |t_t|^2} = \sigma_n^{\max}. \quad (5.61)$$

Die kritische Spannung σ_n^{\max} entspricht dabei der Grenzflächenfestigkeit in Normalenrichtung. Der Einfluss des Parameters λ auf das Initialisierungskriterium ist in Abb. 5.4 (b) dargestellt. Die MACAULAY-Klammern sichern die Insensitivität der Schädigung gegenüber einer Druckbelastung der Grenzfläche. Die Normal- und Tangentialspannung an der Grenzfläche ergeben sich analog zu den Separationskomponenten aus der Normal- und Tangentialprojektion des Span-

nungsvektors

$$t_n = \mathbf{t} \cdot \mathbf{n}, \quad (5.62)$$

$$\mathbf{t}_t = \mathbf{t} \cdot [\mathbf{1} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}]. \quad (5.63)$$

Die Berechnung des Spannungsvektors auf der Unstetigkeit erfolgt dabei mittels des Normalenvektors \mathbf{n} aus dem Spannungstensor $\boldsymbol{\sigma}$. Da dieser im Allgemeinen lediglich in den Quadraturpunkten bekannt ist, erfolgt entsprechend dem Vorgehen von Wells und Sluys (2001) die Berechnung eines nichtlokalen mittleren Spannungstensors auf der Unstetigkeit anhand von

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{x}) = \frac{\int_{\Omega^{cz}} \psi(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}) \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi}}{\int_{\Omega^{cz}} \psi(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi}}. \quad (5.64)$$

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wird für das Mittelungsgebiet Ω^{cz} ein kugelförmiger Bereich um den Grenzflächenpunkt \mathbf{x} definiert. Sein Radius entspricht der charakteristischen Länge der Wichtungsfunktion $\psi(\mathbf{x})$ (5.100) und korreliert im Rahmen der vorliegenden Modellierung mit der mittleren Elementkantenlänge des zugrundeliegenden FE-Netzes. Die nichtlokale Spannung wird dabei lediglich für die Initialisierung des Versagens verwendet und führt nicht zu einer nichtlokalen Schädigungsformulierung. Die numerische Umsetzung der nichtlokalen Spannung erfolgt auf Basis der Quadraturpunkte $\boldsymbol{\xi}_i$ in Ω^{cz} und deren assoziiertes Volumen V_i

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{x}) = \sum_i \tilde{\psi}_i \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\xi}_i) \quad \text{mit} \quad \tilde{\psi}_i = \frac{\psi(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}_i) V_i}{\sum_j \psi(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}_j) V_j}. \quad (5.65)$$

5.3.3 Degradation

Ausgehend von den thermodynamischen Prinzipien der Materialmodellformulierung in Lubliner (1972, 1973) ist es möglich den Spannungsvektor eines Kohäsivzonenmodell aus der freien Energie Φ^c entsprechend

$$\mathbf{t}^c = \frac{\partial \Phi^c}{\partial \llbracket \mathbf{u} \rrbracket^c} \quad (5.66)$$

abzuleiten. Mit den von Ortiz und Pandolfi (1999) formulierten Annahmen soll die freie Energie

$$\Phi^c = \Phi^c(\llbracket u \rrbracket^{\text{eff}}, \mathbf{q}) \quad (5.67)$$

lediglich eine Funktion von der effektiven Separation $\llbracket u \rrbracket^{\text{eff}}$ (5.60) und einem Satz innerer Variablen \mathbf{q} sein. Unter dieser Voraussetzung gilt für den Spannungsvektor

$$\mathbf{t}^c = \underbrace{\frac{t^{\text{eff}}}{\llbracket u \rrbracket^{\text{eff}}}}_{K^{\text{eff}}} (\llbracket u \rrbracket_n \mathbf{n} + \lambda^2 \llbracket \mathbf{u} \rrbracket_t) \quad \text{für} \quad \llbracket u \rrbracket_n \geq 0 \quad (5.68)$$

mit K^{eff} der effektiven Grenzflächensteifigkeit und

$$t^{\text{eff}} = \frac{\partial \Phi^c}{\partial \llbracket u \rrbracket^{\text{eff}}}(\llbracket u \rrbracket^{\text{eff}}, \mathbf{q}) \quad (5.69)$$

einer effektiven, skalarwertigen Grenzflächenspannung.

Die im Folgenden vorgestellten Kohäsivzonenmodelle sind ausschließlich von der effektiven Separation $\llbracket u \rrbracket^{\text{eff}}$ abhängig. Zur Sicherung der Irreversibilität der Grenzflächenschädigung erfolgt die Definition der Belastungsfunktion

$$f(\llbracket u \rrbracket^{\text{eff}}, \omega) = \llbracket u \rrbracket^{\text{eff}} - \omega, \quad (5.70)$$

mit der Geschichtsvariablen ω . Für sie gilt

$$\omega = \max_{\tau \leq t} (\llbracket u \rrbracket^{\text{eff}}(\tau)). \quad (5.71)$$

Die Funktion f dient der Identifikation von Be- und Entlastungszuständen. Die Irreversibilität der Schädigung wird dabei durch Be- und Entlastungsbedingungen der Kuhn-Tucker-Form

$$f \leq 0, \quad \dot{\omega} \geq 0, \quad \dot{\omega} f = 0 \quad (5.72)$$

sichergestellt. Die Entlastung der Grenzfläche $f < 0$ erfolgt elastisch unter Verwendung der Sekantensteifigkeit im Punkt der maximal erreichten effektiven Separation ω . Für die effektiven Grenzflächenspannung gilt dann

$$t^{\text{eff, unl}} = \frac{t^{\text{eff}}(\omega)}{\omega} \llbracket u \rrbracket^{\text{eff}}, \quad (5.73)$$

wobei sich $t^{\text{eff}}(\omega)$ aus dem gewählten Kohäsivzonenmodell ableitet.

Ein häufig verwendeter Ansatz ist das von Ortiz und Pandolfi (1999) angegebene anfangsnachgiebige Modell mit der exponentiellen Spannungs-Separationsbeziehung

$$t^{\text{eff}} = e \sigma_n^{\text{max}} \frac{\omega}{\llbracket u \rrbracket^{\text{max}}} \exp\left(-\frac{\omega}{\llbracket u \rrbracket^{\text{max}}}\right). \quad (5.74)$$

Hierbei ist e die EULERSche Zahl und $\llbracket u \rrbracket^{\text{max}}$ die effektive Separation bei Erreichen des Spannungsmaximums. Das Modell ist dabei aufgrund seiner geschlossenen Beschreibung auf Basis einer einzigen Funktion besonders einfach zu implementieren. Die entsprechende Evolution der Normal- und Tangentialspannung in Abhängigkeit der Separationskomponenten ist in Abb. 5.5 (a) dargestellt. Als zweites Modell soll ein anfangs-steifer Ansatz mit linearer Degradation untersucht werden. Die Evolution der effektiven Spannung

$$t^{\text{eff}} = \begin{cases} \sigma_n^{\text{max}} \frac{\llbracket u \rrbracket^{\text{max}} - \omega}{\llbracket u \rrbracket^{\text{max}}} & \text{wenn } \omega < \llbracket u \rrbracket^{\text{max}} \\ 0 & \text{wenn } \omega \geq \llbracket u \rrbracket^{\text{max}} \end{cases} \quad (5.75)$$

beginnt bei der maximal ertragbaren Grenzflächennormalspannung σ_n^{max} . Die charakteristische Separation $\llbracket u \rrbracket^{\text{max}}$ definiert dabei den Punkt bei dem die effektive Grenzflächenspannung verschwindet. Die Initialisierung des Schädigungsprozesses erfolgt dabei bei Erreichen des in Abschnitt 5.3.2 formulierten Kriteriums. Die Evolution der Normal- und Tangentialspannung in Abhängigkeit der Normal- und Tangentialseparation ist in Abb. 5.5 (b) dargestellt.

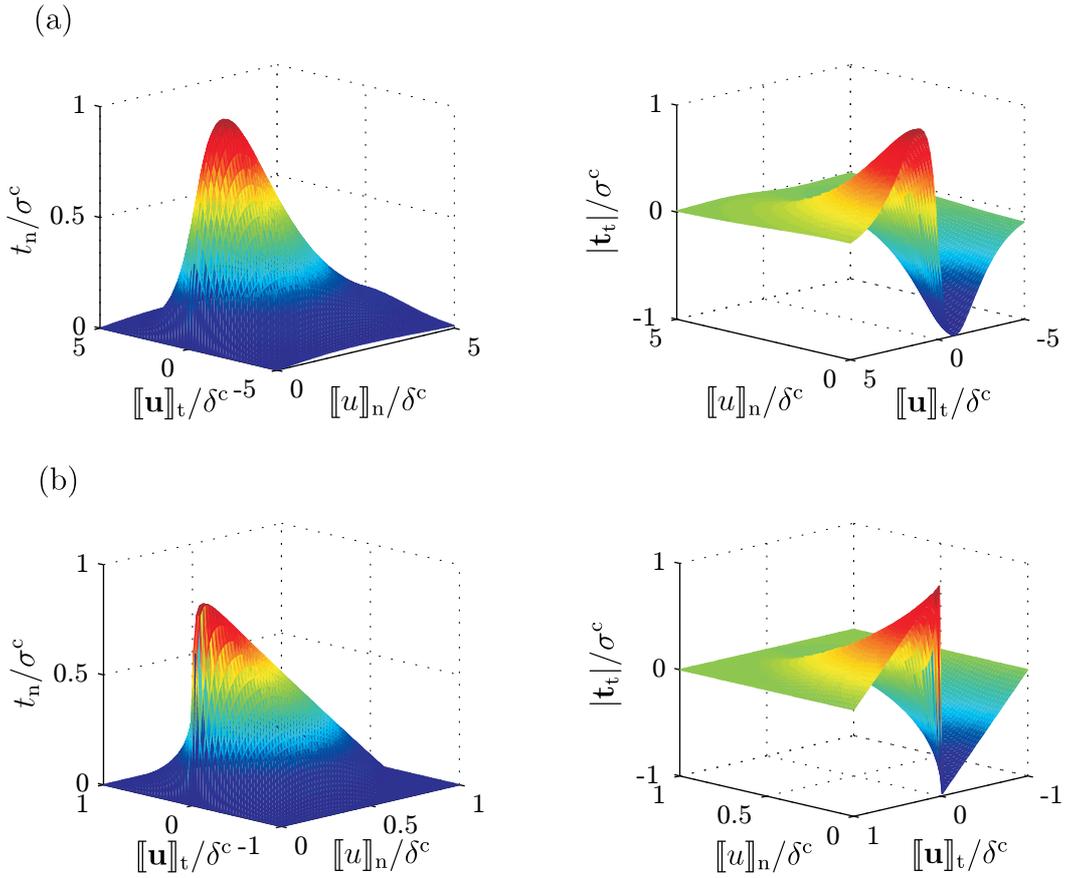


Abbildung 5.5: Evolution der Normal- und Tangentialspannung in Abhängigkeit der Normal- und Tangentialseparation für: (a) ein anfangs-nachgiebiges und (b) ein anfangs-steifes Kohäsivzonenmodell mit linearer Degradation.

Neben der Definition des an einer Grenzfläche übertragbaren Spannungsvektors \mathbf{t}^c , ist für die Implementierung des Modells in einen inkrementelles, iteratives FE-Lösungsverfahren die Ableitung einer Tangentensteifigkeitsmatrix $\underline{\underline{\mathbf{T}}}^c$ erforderlich (vgl. (3.62) in Abschnitt 3.3). Für sie gilt mit (5.68)

$$\underline{\underline{\mathbf{T}}}^c = \frac{\partial \mathbf{t}^c}{\partial [[\mathbf{u}]]^c} = \frac{\partial K^{\text{eff}}}{\partial [[\mathbf{u}]]^c} \otimes ([[u]]_n \mathbf{n} + \lambda^2 [[\mathbf{u}]]_t) + K^{\text{eff}} (\mathbf{n} \otimes \mathbf{n} + \lambda^2 (\mathbf{1} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n})). \quad (5.76)$$

Das Verhalten beider Ansätze und deren Einfluss auf das effektive Verhalten eines heterogenen Körpers soll im Folgenden anhand eines Einschlussproblems demonstriert werden. Das hierfür untersuchte Modell ist in Abb. 5.6 (a) dargestellt. Es besteht aus einem würfelförmigen Grundkörper mit einer Kantenlänge von 1 mm und einem zylindrischen Einschluss mit einem Radius von 0,25 mm. Das FE-Modell besteht aus $25 \times 25 \times 4 = 2500$ 20-Knoten-Hexaederelementen. Für die Beschreibung des mechanischen Verhaltens des umliegenden Materials wird das in Abschnitt 5.2 angegebene nichtlineare, fraktionale Viskoelastizitätsmodell in Kombination mit den

für Polypropylen identifizierten Parametern angewendet. Der zylindrische Einschluss wird hingegen isotrop linearelastisch modelliert. Die Materialkennwerte $E = 73 \text{ GPa}$, $\nu = 0,22$ orientieren sich an den Materialeigenschaften von Glasfasern. Für die Grenzflächenfestigkeit gilt $\sigma_n^{\max} = 20 \text{ MPa}$ und für deren Verhältnis zur Festigkeit in Tangentialrichtung $\lambda = 2$. Die Größe der charakteristischen Separation richtet sich nach dem verwendeten Kohäsivzonenmodell. Für den anfangs-nachgiebigen Ansatz in (5.74) gilt $[[u]]^{\max} = 0,005 \text{ mm}$, wohingegen für das anfangs-steife Modell in (5.75) $[[u]]^{\max} = 0,01 \text{ mm}$ gilt. Das Gesamtmodell wird monoton, verschiebungsgesteuert mit der effektiven Dehnung $\bar{\varepsilon}$ in x_1 Richtung belastet. Hierfür werden die in Abschnitt 1.3.2 erläuterten periodischen Randbedingungen angewendet. Für die Evaluierung der Modelantwort sind in Abb. 5.6 (b) die effektiven Spannungs-Verzerrungskurven unter Anwendung der beiden Kohäsivzonenmodelle der eines ungeschädigten Körpers gegenübergestellt. Es ist zu er-

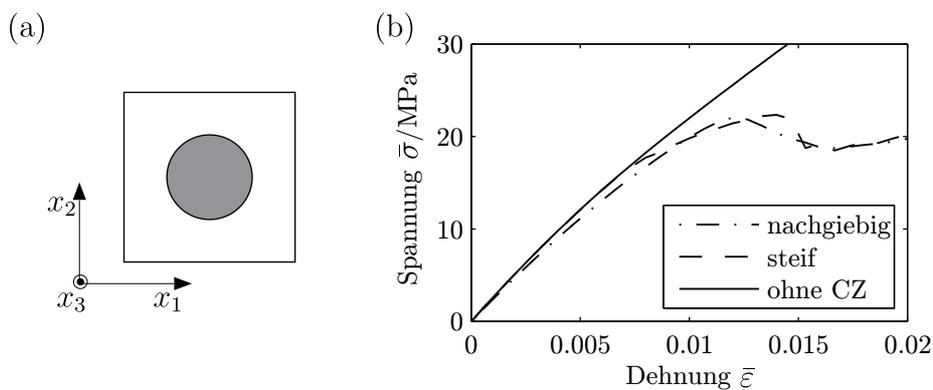


Abbildung 5.6: Evaluierung unterschiedlicher Kohäsivzonenmodelle anhand eines Einschlussproblems: (a) Modellaufbau und (b) Vergleich effektiver Spannungs-Verzerrungskurven.

kennen, dass das anfangs-nachgiebige Modell bereits ab Beginn der Belastung einen Einfluss auf die Steifigkeit des Gesamtmodells hat. Das anfangs-steife Modell wird erst bei Erreichen der kritischen Grenzflächenspannung aktiviert. Die anschließende Degradation führt zu einer Abnahme der Steifigkeit des Gesamtmodells.

5.4 Matrixschädigung

Die Beschreibung der Matrixschädigung soll im Rahmen der vorliegenden Arbeit auf Basis eines Kontinuumsschädigungsmodells erfolgen, da die Lage der Lokalisierungszone im Gegensatz zum Grenzflächenriss wesentlich von der Verbundstruktur und dem Belastungszustand abhängen.

Die Abbildung von Schädigungsphänomenen auf Basis von Kontinuumsschädigungsmodellen basiert auf dem Ansatz effektiver Spannungen. Eingeführt von Kachanov (1958) für die Modellierung von Kriechversagen, wurde der Ansatz seither auf eine Vielzahl von Problemstellungen angewendet, u. a. Materialermüdung (Lemaitre (1971)), Kriechen (Rabotnov (1963)), plastische

Schädigung (Lemaitre (1985)) und Schädigung spröder und quasipröder Materialien (Krajcinovic und Fonseka (1981); Fonseka und Krajcinovic (1981)).

Grundlage des Konzepts effektiver Spannungen ist die Annahme, dass die Degradation der Materialsteifigkeit die Folge von sich bildenden, wachsenden und sich vereinigenden Mikrorissen und Poren ist (Simo (1987)). Die Abbildung im Rahmen der Kontinuumsmechanik lässt sich anhand eines Volumenelements eines geschädigten Körpers darstellen. Das Volumenelement ist dabei groß genug um eine Vielzahl von Defekten zu enthalten, jedoch klein genug um im Rahmen der Modellierung als Materialpunkt berücksichtigt zu werden (vgl.: Abb. 5.7). Für die Oberfläche

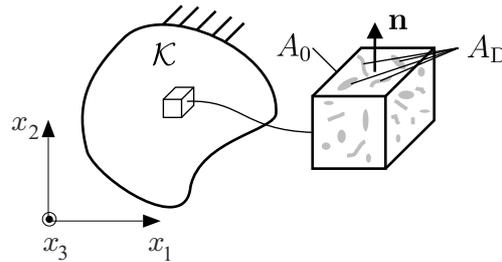


Abbildung 5.7: Geschädigter Körper und entsprechendes Volumenelement mit Defekten.

mit dem Normalenvektor \mathbf{n} gilt damit, dass die ursprüngliche Fläche A_0 durch die Fläche der Defekte A_D verringert wird, wodurch die effektive Oberfläche \tilde{A} entsteht. Für die Raumrichtung entsprechend \mathbf{n} lässt sich damit die Schädigungsvariable

$$D_{\mathbf{n}} = \frac{A_0 - \tilde{A}}{A_0} \quad (5.77)$$

angeben (Lemaitre (1984)), wobei $D_{\mathbf{n}} = 0$ den ungeschädigten Ausgangszustand und $D_{\mathbf{n}} = D_{\max} \leq 1$ den kritischen Versagenszustand darstellt. Für den Fall, dass die Verteilung der Defekte eine Abhängigkeit von dem Normalenvektor \mathbf{n} aufweist, führt dieser Ansatz zu einer tensoriellen Größe (Chow und Wang (1987)). Im Vergleich dazu genügt bei einer gleichmäßigen Verteilung der Defekte die Definition einer skalarwertigen Schädigungsvariable D , was zu dem im folgenden Abschnitt angegebenen isotropen Schädigungsansatz führt.

Die Verringerung der Oberfläche in Folge einer Schädigung hat direkte Auswirkung auf die Spannungskonzentration in dem entsprechenden Querschnitt. Für den effektiven Spannungsvektor $\tilde{\mathbf{t}}$ bezogen auf die effektive Querschnittsfläche \tilde{A} gilt

$$\tilde{\mathbf{t}} = \mathbf{t} \frac{A_0}{\tilde{A}} = \frac{\mathbf{t}}{1 - D}, \quad (5.78)$$

mit dem Nennspannungsvektor \mathbf{t} .

5.4.1 Isotroper Kontinuumsschädigungsansatz

Grundlage eines isotropen Kontinuumsschädigungsmodells bildet die Annahme einer gleichmäßigen Verteilung der Defekte und einer Unabhängigkeit der Schädigungsvariable D von der Ori-

entierung der betrachteten Oberfläche. Entsprechend folgt aus (5.78) für den effektiven Spannungstensor $\tilde{\sigma}$ bezogen auf den Nennspannungstensor σ

$$\tilde{\sigma} = \frac{\sigma}{1-D} \quad \text{bzw.} \quad \sigma = (1-D)\tilde{\sigma}. \quad (5.79)$$

Anschaulich bedeutet dies, dass die effektiven im Material auftretenden Spannungen größer sind als die nach außen übertragenen Spannungen. Entsprechend der von Lemaitre (1984) eingeführten Hypothese der Verzerrungsäquivalenz gilt weiterhin, dass die Verzerrungen des geschädigten Materials aus den gleichen konstitutiven Beziehungen berechnet werden wie die des ungeschädigten Materials mit Ausnahme, dass die Nennspannungen durch die effektiven Spannungen ersetzt werden. Im Falle linearelastischen Materialverhaltens führt dies zu

$$\varepsilon = \mathbf{C}^{-1} : \sigma \rightarrow \mathbf{C}^{-1} : \tilde{\sigma} = \mathbf{C}^{-1} : \left(\frac{\sigma}{1-D} \right) \quad (5.80)$$

bzw.

$$\sigma = (1-D)\mathbf{C} : \varepsilon. \quad (5.81)$$

Als interne Variable hat die Schädigungsvariable D direkten Einfluss auf die spezifische freie Energie $f = f(\varepsilon, D)$. Entsprechend der üblichen Definitionen im Rahmen der Kontinuumschädigungsmechanik ist sie gegeben durch

$$f(\varepsilon, D) = (1-D)f_0(\varepsilon), \quad (5.82)$$

wobei $f_0(\varepsilon)$ die spezifische freie Energie des ungeschädigten Materials darstellt. Für die thermodynamisch konjugierten Größen des Verzerrungstensors ε und der Schädigungsvariable D gilt

$$\sigma = \rho \frac{\partial f}{\partial \varepsilon}, \quad (5.83)$$

$$Y = \rho \frac{\partial f}{\partial D}. \quad (5.84)$$

$$(5.85)$$

Y wird dabei in Analogie zur Bruchmechanik als Energiefreisetzungsrates infolge Schädigung $G = -Y$ bezeichnet. Die Auswertung der CLAUSIUS-DUHEM-Ungleichung führt zu der notwendigen Bedingung

$$\dot{D} \geq 0 \quad (5.86)$$

für die thermodynamische Zulässigkeit des Ansatzes (Lemaitre (1984)).

Da die Verteilung der Defekte im Allgemeinen unbekannt ist, muss die Schädigungsvariable D durch entsprechende konstitutive Beziehungen bestimmt werden. Hierfür wird zunächst eine Belastungsfunktion eingeführt, die das Gebiet schädigungsfreier Deformation von dem Gebiet mit Schädigung abgrenzt. Entsprechend dem Vorgehen in Abschnitt 5.3 für die Grenzflächenschädigung erfolgt die Definition einer skalaren Belastungsfunktion

$$g(\varepsilon, \kappa) = \varepsilon_v(\varepsilon) - \kappa, \quad (5.87)$$

mit der äquivalenten Verzerrung ε_v und der Geschichtsvariablen κ . Für sie gilt

$$\kappa(t) = \max \left(\varepsilon_0, \max_{\tau \leq t} \varepsilon_v(\tau) \right). \quad (5.88)$$

Der Grenzwert für das erstmalige Einsetzen der Schädigung ist dabei ε_0 . Ein Wachstum der Schädigung liegt bei $g = 0$ vor. Die Irreversibilität der Schädigung wird durch eine zusätzliche Be- und Entlastungsbedingung in der Kuhn-Tucker-Form

$$g \leq 0, \quad \dot{\kappa} \geq 0, \quad \dot{\kappa}g = 0 \quad (5.89)$$

sichergestellt.

Zur vollständigen Definition des Schädigungsmodells verbleibt die Verbindung der schädigungsantreibenden Geschichtsvariablen κ mit der Schädigungsvariablen D . Hierfür erfolgt die Definition eines Entfestigungsgesetzes. Da beide Größen monoton wachsend sind, ist es zulässig hierfür einen expliziten Ansatz zu wählen (Brekemans u. a. (1992)). Im Folgenden wird hierfür ein exponentieller Ansatz von Jirásek und Patzák (2002) verwendet

$$D = D_{\max} \left[1 - \frac{\varepsilon_0}{\kappa} \exp \left(-\frac{\kappa - \varepsilon_0}{\varepsilon_f - \varepsilon_0} \right) \right]. \quad (5.90)$$

Das Anwachsen der Schädigungsvariablen ist dabei durch den Maximalwert D_{\max} limitiert. Der Einfluss der charakteristischen Verzerrungen ε_0 und ε_f auf den Spannungs-Dehnungsverlauf im Falle einer monotonen, einachsigen Zugbelastung und linearelastischen Materialverhaltens ist in Abb. 5.8 (a) dargestellt ($\varepsilon_v = \varepsilon$). Die kritische Verzerrung $\varepsilon_0 = \sigma_f/E$ entspricht dabei dem Quotient aus Zugfestigkeit σ_f und E-Modul E .

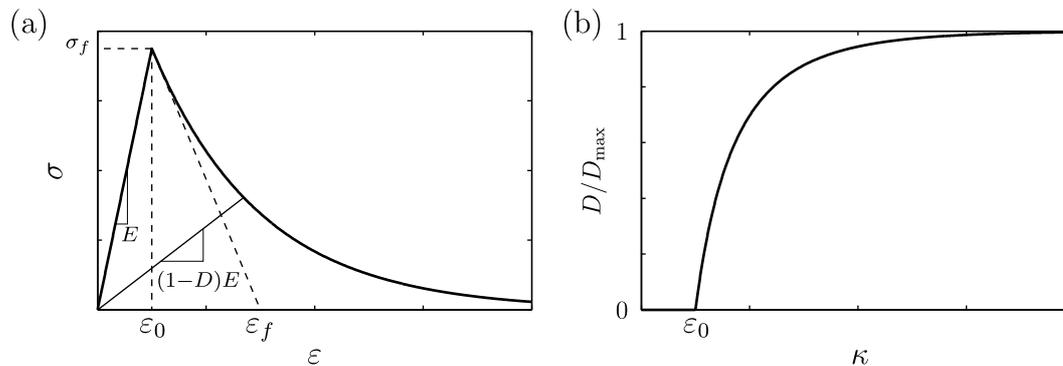


Abbildung 5.8: Einachsige Zugbelastung mit linearelastischem Materialverhalten und exponentieller Degradation der Steifigkeit infolge verzerrungsgesteuerter Schädigung: (a) Spannungs-Dehnungsverlauf und Einfluss der charakteristischen Parameter, (b) Evolution der Schädigungsvariablen D in Abhängigkeit der Geschichtsvariablen κ .

Für die Definition eines äquivalenten Verzerrungsmaßes ε_v existieren in der Literatur eine Vielzahl von Ansätzen. Grundsätzlich unterscheidet man hierbei assoziierte Modelle, bei denen das Verzerrungsmaß eine Funktion der Energiefreisetzungsrate Y ist (u. a. Bažant und Pijaudier-Cabot (1988); Simo (1987)) und nicht-assoziierte Modelle, in denen die äquivalente Verzerrung eine reine Funktion des Verzerrungstensors darstellt (u. a. Mazars (1981)). Während erstgenannte Modelle einen symmetrischen schädigungsfreien Bereich im Verzerrungsraum generieren, erlauben letztgenannte Modelle eine an den Deformationsmode (Zug, Druck oder Scherung) angepasste Schädigungsformulierung (u. a. Brekelmans u. a. (1992); de Vree u. a. (1995); Mazars (1986)).

Eine grundlegende Form der äquivalenten Verzerrung lässt sich in der von Jirásek und Patzák (2002) verwendeten Notation angeben

$$\varepsilon_v = \sqrt{\underline{\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}} : \underline{\underline{\mathbf{M}}} : \underline{\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}}}. \quad (5.91)$$

Der Metriktenor \mathbf{M} dient hierbei der Transformation des Verzerrungstensors in eine skalare Vergleichsgröße. Unter Verwendung der VOIGT-Notation (3.27) kann (5.91) umgeschrieben werden zu

$$\varepsilon_v = \sqrt{\underline{\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}}^T \underline{\underline{\mathbf{M}}} \underline{\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}}}. \quad (5.92)$$

Eine alternative äquivalente Verzerrung wurde von de Vree u. a. (1995) vorgestellt

$$\varepsilon_v = k_1 I_1 + \sqrt{k_1^2 I_1^2 + k_2 J_2} \quad \text{mit} \quad k_1 = \frac{\gamma - 1}{2\gamma(1 - 2\nu)} \quad \text{und} \quad k_2 = \frac{3}{\gamma(1 + \nu)^2}. \quad (5.93)$$

Sie basiert auf der ersten I_1 und zweiten J_2 Invariante des Verzerrungstensors. Mit γ dem Verhältnis von Zug- und Druckfestigkeit erlaubt der Ansatz die Abbildung unterschiedlicher Schädigungseigenschaften bei Zug- und Druckbeanspruchung, wie es charakteristisch für spröde und quasipröde Materialien ist. Im Verlauf der Arbeit wird der Ansatz für die Modellierung der Schädigung von Polypropylen eingesetzt.

Wie bereits zu Beginn des Abschnitts dargestellt, entsprechen in der Theorie der Kontinuumschädigungsmechanik die nominalen Spannungen $\boldsymbol{\sigma}$ nicht den effektiven Spannungen $\tilde{\boldsymbol{\sigma}}$, welche durch die konstitutiven Beziehungen des ungeschädigten Materials gegeben sind (vgl. Abschnitt 5.2). Daher ist es erforderlich, die in Abschnitt 5.2.4 ermittelte konsistente Tangentensteifigkeit an die veränderte Spannungs-Verzerrungsbeziehung anzupassen. Mit (5.79) gilt

$$\mathbf{C} = \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} = (1 - D) \frac{\partial \tilde{\boldsymbol{\sigma}}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} - \tilde{\boldsymbol{\sigma}} \frac{\partial D}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}, \quad (5.94)$$

wobei der erste Summand die Sekantensteifigkeit darstellt (vgl. Abb. 5.8 (a)). Der zweite Term kann mit dem Entfestigungsgesetz (5.90), der Geschichtsvariable (5.88) und der Definition der äquivalenten Verzerrung ausgedrückt werden durch

$$\frac{\partial D}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} = \frac{\partial D}{\partial \kappa} \frac{\partial \kappa}{\partial \varepsilon_v} \frac{\partial \varepsilon_v}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}. \quad (5.95)$$

Die partielle Ableitung der Geschichtsvariable κ ergibt sich mit (5.88) zu

$$\frac{\partial \kappa}{\partial \varepsilon_v} = \begin{cases} 0 & \text{für } \varepsilon_v < \kappa, \\ 1 & \text{für } \varepsilon_v = \kappa. \end{cases} \quad (5.96)$$

Sie ist damit ein Indikator für Be- und Entlastung.

Die Evaluierung des Kontinuumsschädigungsmodells erfolgt im Folgenden anhand eines numerischen Beispiels. Das in Abb. 5.9 (a) dargestellte Viertelmodell einer Lochscheibe unter einachsiger Zugbeanspruchung erlaubt die Untersuchung eines inhomogenen Verzerrungszustands. Das Materialverhalten wird dabei als isotrop linearelastisch angenommen. Die Materialparameter $E = 1500$ MPa, $\nu = 0,4$ orientieren sich an der Anfangstangentensteifigkeit von Polypropylen (vgl. Abschnitt 5.2). Die Probe wird monoton, verschiebungsgesteuert bis zu einer Maximalverschiebung von $\bar{u} = 0,1$ mm belastet. Für die charakteristischen Verzerrungen des Entfestigungsgesetzes (5.90) gelten $\varepsilon_0 = 0,02$ und $\varepsilon_f = 0,2$. Die äquivalente Verzerrung berechnet sich mit $\underline{\underline{M}} = \underline{\underline{1}}$ der Einheitsmatrix aus (5.92). Die effektiven Kraft-Wegverläufe unterschiedlicher Diskretisierungen sind in Abb. 5.9 (b) gegenübergestellt. Es ist zu erkennen, dass der Diskretisierungsgrad einen erheblichen Einfluss auf den Kraft-Verschiebungsverlauf hat. Speziell für feine Vernetzungen kommt es zu einem instabilen Anwachsen der Schädigung und damit zu einem sprunghaften Versagen der Struktur. Der Vergleich der Schädigungsverteilung in Abb. 5.9 (c) zeigt, dass sich bei allen Diskretisierungen ein Schädigungsband ausbildet, dessen Breite mit der Elementkantenlänge korreliert. Es ist keine Konvergenz der Lösung erkennbar.

Der entscheidende Mangel der zuvor vorgestellten Schädigungsformulierung ist der zugrundeliegende Kontinuumsansatz eines einfachen nicht-polaren Materials (Bažant und Jirásek (2002); Noll (1972)), wonach die Spannungen an einem beliebigen Punkt nur von der aktuellen Deformation und der Temperatur sowie deren vorherigem zeitlichen Verläufen an demselben Punkt abhängen. Dieser Ansatz setzt voraus, dass das konstitutive Verhalten eines Materials auf einer beliebig kleinen Längenskala betrachtet werden kann und die Interaktion der Materialpunkte vollständig über die Bilanzgleichungen definiert ist (vgl. Abschnitt 2.2 und 2.3). Für ein verzerungsbasiertes Kontinuumsschädigungsmodell führt dies zu einer Lokalisierung der Schädigung. Für den Grenzfall einer unendlich feinen Vernetzung verschwindet die Schädigungszone und damit die dissipierte Energie, was letztendlich zu einem unphysikalischen Verhalten der FE-Lösung führt (Bažant (1976)). Eine detaillierte mathematische Diskussion des Lokalisierungsproblems und des damit verbundenen Verlusts der Stabilität bzw. Eindeutigkeit der Lösung wurde von Kuhl (2000) veröffentlicht. Es konnte gezeigt werden, dass die Lokalisierung der Schädigung zu einer Änderung des zugrunde liegenden Feldgleichungstyps von elliptisch zu hyperbolisch führt. Entsprechend sind die eingangs formulierten Anfangs- und Randbedingungen unzureichend und das Problem wird schlecht gestellt (Sluys (1992)).

Entsprechend der allgemeinen Materialmodellformulierung in Abschnitt 2.3 kann dieser Mangel durch die Definition einer charakteristischen Längenskala innerhalb der konstitutiven Gleichungen beseitigt werden. Sie dient der Limitierung der Lokalisierungszone (Bažant und Jirásek (2002)). Im Zusammenhang mit der Schädigungsmodellierung entspricht diese Abmessung zum Beispiel der Größe der Prozesszone. Eine solche nichtlokale Formulierung beinhaltet in der Regel Integrale bzw. Gradienten der inneren Variablen. Einen umfassenden Überblick über die Hintergründe nichtlokaler Materialmodellierung wurde von Bažant und Jirásek (2002) veröffentlicht. Im folgenden Abschnitt wird ein integralbasierter Ansatz dargestellt, der es erlaubt, die Netzabhängigkeit der Kontinuumsschädigungsformulierung zu eliminieren und eine Konvergenz des Randwertproblems zu einer physikalisch sinnvollen Lösung ermöglicht.

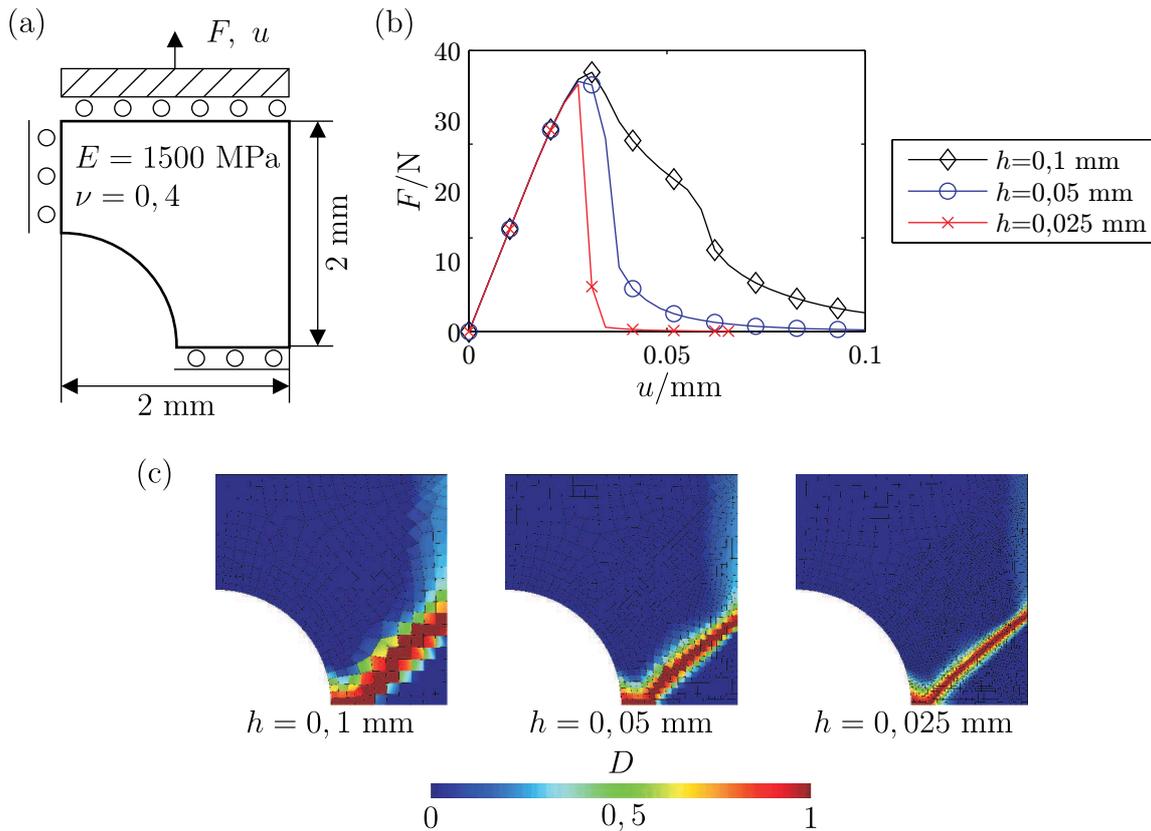


Abbildung 5.9: Evaluierung des Kontinuumsschädigungsmodells anhand einer Lochscheibe (Viertelmodell): (a) Testanordnung, (b) Kraft-Verschiebungsverläufe und (c) Schädigungsverteilung bei Maximalbelastung in Abhängigkeit der mittleren Elementkantenlänge h .

5.4.2 Nichtlokale Formulierung

Wie im vorangegangenen Abschnitt dargestellt, führen lokal formulierte verzerrungsgesteuerte Kontinuumsschädigungsformulierungen zu einer erheblichen Netzabhängigkeit der Lösung. Eine Konvergenz zu einem physikalisch sinnvollen Ergebnis ist nicht gewährleistet. Abhilfe schafft die Definition einer charakteristischen Länge innerhalb der konstitutiven Gleichungen. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit soll dies auf Basis einer integralbasierten nichtlokalen Formulierung erfolgen (Pijaudier-Cabot und Bažant (1987)). Hierbei werden lokale innere Variablen durch deren entsprechende räumlich gemittelte und gewichtete nichtlokale Pendanten ersetzt. Für die nichtlokale Größe \bar{y} gilt entsprechend

$$\bar{y}(\mathbf{x}) = \frac{\int_{\Omega} \psi(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}) y(\boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi}}{\int_{\Omega} \psi(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi}}, \quad (5.97)$$

wobei $\psi(\mathbf{x})$ die Wichtungsfunktion darstellt. Die einfachste Definition für solch eine Wichtungsfunktion stellt die Sprungfunktion dar. Entsprechend wäre $\psi = 1$ innerhalb eines zu definierenden Mittelungsgebiets und $\psi = 0$ außerhalb. Eine wesentlich bessere Wahl, speziell im Hinblick auf die Konvergenz der Lösung bei Netzverfeinerung, stellen kontinuierlich verlaufende Funktionen dar. Bažant und Pijaudier-Cabot (1988) verwendeten hierfür eine Exponentialfunktion entsprechend der Form einer GAUSSschen Normalverteilung

$$\psi(\mathbf{x}) = \exp\left(-\left(\frac{k \|\mathbf{x}\|}{r}\right)^2\right). \quad (5.98)$$

Mit r der charakteristischen Abklinglänge und

$$k = \begin{cases} \pi^{1/2} & \text{für 1D,} \\ 2 & \text{für 2D,} \\ (6\sqrt{\pi})^{1/3} & \text{für 3D} \end{cases} \quad (5.99)$$

ergibt sich für das Integral von $\psi(\mathbf{x})$ über ein unendliches Gebiet die Länge r bzw. die Fläche eines Kreises oder das Volumen einer Kugel mit dem Durchmesser r . Die Form der Wichtungsfunktion ist in Abb. 5.10 (b) beispielhaft für den zweidimensionalen Fall dargestellt. Da (5.98) theoretisch zu einem unendlich großen Einflussgebiet führt, wobei Punkte außerhalb des Radius $r/2$ in guter Näherung vernachlässigt werden können, wird in der Literatur häufig auch die glockenförmige Wichtungsfunktion

$$\psi(\mathbf{x}) = \begin{cases} \left(1 - \left(\frac{\|\mathbf{x}\|}{r}\right)^2\right)^2 & \text{wenn } \|\mathbf{x}\| \leq r \\ 0 & \text{wenn } \|\mathbf{x}\| > r \end{cases} \quad (5.100)$$

verwendet. Da zwischen den Wichtungsfunktionen keine signifikanten Unterschiede hinsichtlich der numerischen Eigenschaften und der erzielten Ergebnisse festgestellt werden konnten, wird im Folgenden ausschließlich (5.98) angewendet.

Während in der grundlegenden Arbeit zur nichtlokalen Schädigungsmodellierung (Bažant u. a. (1984)) alle inneren Variablen als nichtlokal behandelt wurden, konnte in späteren Veröffentlichungen gezeigt werden, dass es ausreichend ist, nur eine der schädigungsbezogenen Variablen als nichtlokal zu betrachten (Bažant und Pijaudier-Cabot (1988)). Neben der äquivalenten Verzerrung ε_v und der Geschichtsvariablen κ ist auch die Schädigungsvariable D hierfür geeignet, wobei die Ergebnisse je nach Wahl der nichtlokalen Variable abweichen können (Jirásek (1998)).

Für die folgenden Modellierungen wird der nichtlokale Operator (5.97) auf die äquivalente Verzerrung angewendet

$$\bar{\varepsilon}_v(\mathbf{x}) = \frac{\int_{\Omega_{\text{CDM}}} \psi(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}) \varepsilon_v(\boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi}}{\int_{\Omega_{\text{CDM}}} \psi(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi}}, \quad (5.101)$$

wobei Ω_{CDM} das Mittelungsgebiet für den Punkt \mathbf{x} darstellt. Entsprechend gilt für die Geschichtsvariable

$$\kappa(t) = \max\left(\varepsilon_0, \max_{\tau \leq t} \bar{\varepsilon}_v(\tau)\right). \quad (5.102)$$

Im Rahmen der numerischen Umsetzung erfolgt die Auswertung von (5.101) unter Verwendung der Standard-Quadraturpunkte und deren assoziierten Volumens $V = w J$ als Produkt des Quadraturgewichts w und der Jacobideterminante J . Wie in Abb. 5.10 (a) dargestellt, berechnet sich die nichtlokale äquivalente Verzerrung des Empfängerpunkts \mathbf{x} aus den lokalen äquivalenten Verzerrungen in den Quellpunkten ξ_i

$$\bar{\varepsilon}_v(\mathbf{x}) = \sum_i \tilde{\psi}_i \varepsilon_v(\xi_i) \quad \text{mit} \quad \tilde{\psi}_i = \frac{\psi(\mathbf{x} - \xi_i) V_i}{\sum_j \psi(\mathbf{x} - \xi_j) V_j}, \quad (5.103)$$

die innerhalb eines zu definierenden Interaktionsradius r_{CDM} liegen. Der gleiche Radius fungiert als charakteristische Abklinglänge r innerhalb der Wichtungsfunktion (5.98) bzw. (5.100). Spezielle Aufmerksamkeit bei der Auswahl der Interaktionspunkte ist bei der Analyse repräsentativer Volumenelemente (RVE) und bei der Verwendung periodischer Randbedingungen erforderlich (vgl. Abschnitt 1.3.2). Wie in Abb. 5.10 dargestellt ist, (c) sollte die Auswahl entsprechend der Periodizitätsforderung randübergreifend erfolgen.

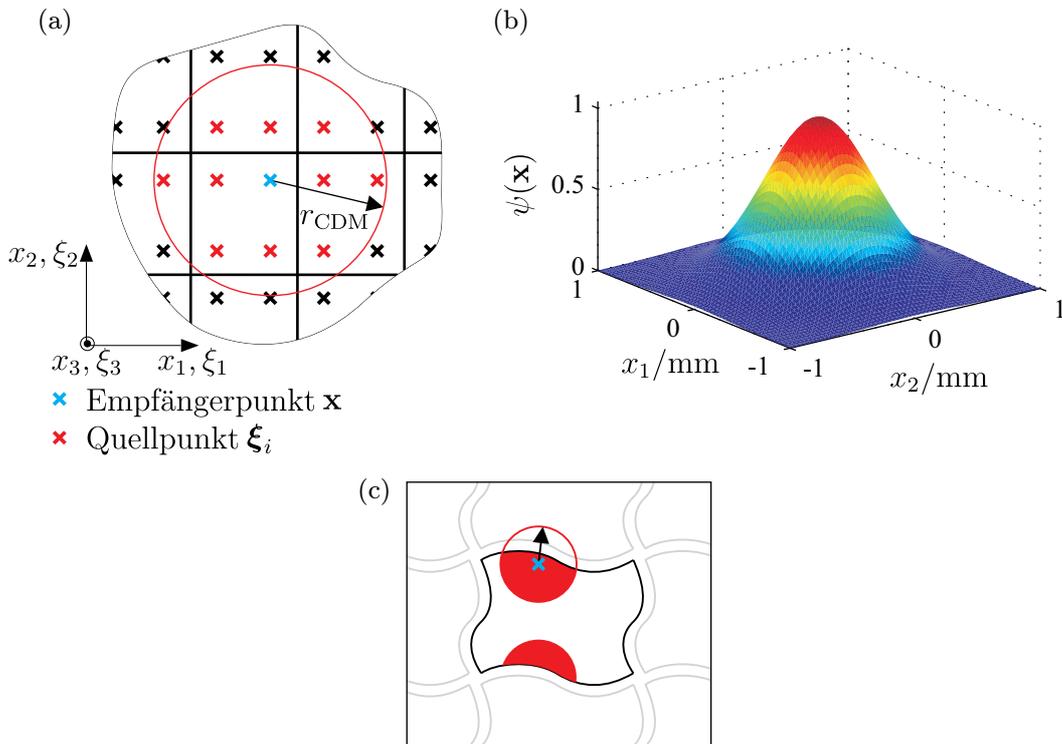


Abbildung 5.10: Nichtlokale Integralformulierung für den zweidimensionalen Fall: (a) Interaktionsradius r_{CDM} eines einzelnen Empfängerpunkts und die berücksichtigten Quellpunkte, (b) Wichtungsfunktion (5.98) mit einem Interaktionsradius von $r = 1$ mm, (c) Einflussbereich für den Fall eines RVE Modells mit periodischen Randbedingungen (vgl. Abschnitt 1.3.2).

Für die Validierung der Netzunabhängigkeit der nichtlokalen Formulierung wurde das in Abb. 5.9 (a) dargestellte Problem erneut für verschiedene Diskretisierungsstufen (mittlere Elementkantenlänge $h = \{0,1; 0,05; 0,025\}$ mm) sowie Elementordnungen (bilineare und biquadratische Rechteckelemente) ausgewertet. Der Interaktionsradius betrug bei allen Rechnungen $r_{\text{CDM}} = 0,1$ mm. Die entsprechenden effektiven Kraft-Verschiebungsverläufe sind in Abb. 5.11 (a) und (b) dargestellt. Es ist zu erkennen, dass für bilineare Elemente ab einer Elementkantenlänge von $h \leq r_{\text{CDM}}/2$ von einer konvergierten Lösung ausgegangen werden kann. Für biquadratische Elemente ist dies bereits für Diskretisierungen $h \leq r_{\text{CDM}}$ der Fall. Die Größe und Form der

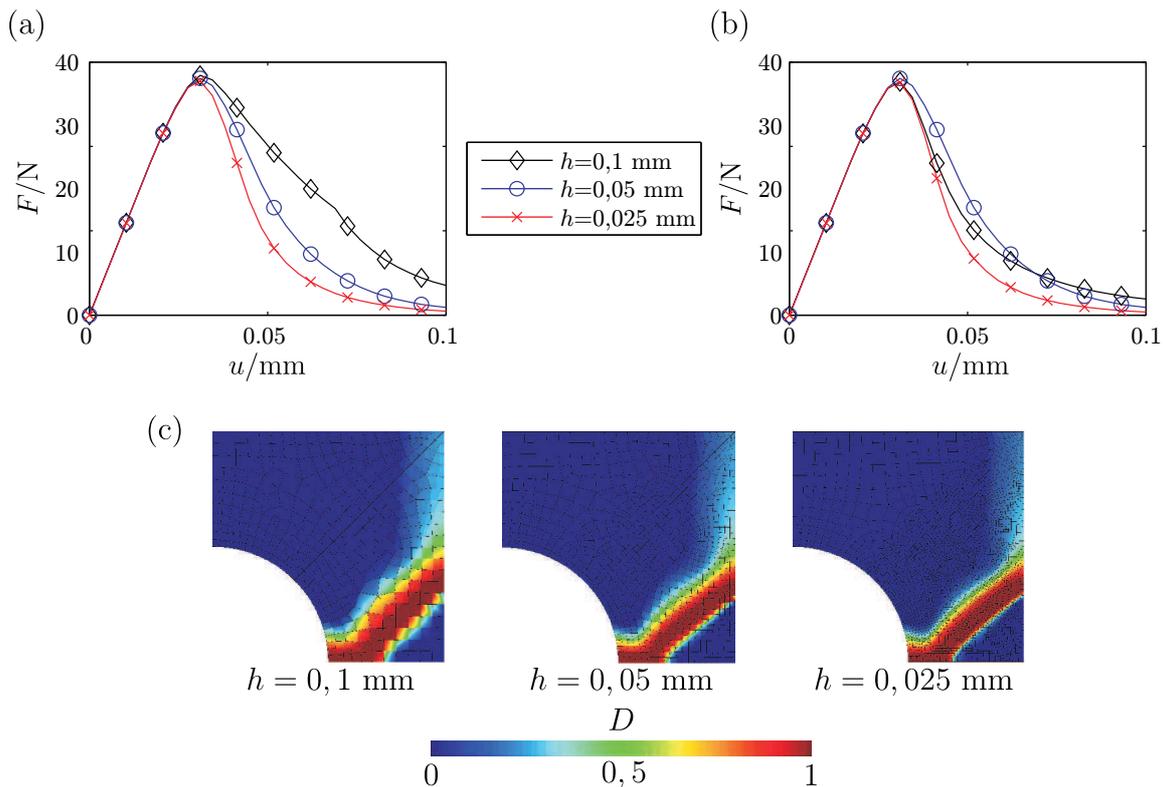


Abbildung 5.11: Evaluierung der nichtlokalen Kontinuumschädigungsformulierung anhand einer Lochscheibe (vgl. Abb. 5.9 (a)): Kraft-Verschiebungsverläufe für bilineare (a) und biquadratische Rechteckelemente mit unterschiedlicher Elementkantenlänge h und (c) Schädigungsverteilung bei Maximalbelastung.

Schädigungszone ist weitestgehend unabhängig von der Netzfeinheit (vgl. Abb. 5.11 (c)).

Wie im vorhergehenden Abschnitt beschrieben, erfordert die Modifikation der Spannungs-Verzerrungsbeziehung eine Anpassung der Materialtangente. Eine konsistente Berücksichtigung der nichtlokalen Eigenschaften der Schädigungsformulierung wurde von Jirásek und Patzák (2002) und Huerta u. a. (2003) hergeleitet.

Ausgehend von der konsistenten Materialtangente (5.94) der lokalen Formulierung erfolgt die Berücksichtigung der nichtlokalen äquivalenten Verzerrung durch eine Anpassung der

partiellen Ableitung $\partial \varepsilon_v / \partial \varepsilon$. Entsprechend (5.103) gilt

$$\frac{\partial \bar{\varepsilon}_v}{\partial \varepsilon} = \sum_i \tilde{\psi}_i \frac{\partial \varepsilon_v}{\partial \varepsilon}. \quad (5.104)$$

Womit sich die nichtlokale Materialtangenteigenschaften wie folgt ergibt

$$\mathbf{C} = \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial \varepsilon} = \underbrace{(1 - D) \frac{\partial \tilde{\boldsymbol{\sigma}}}{\partial \varepsilon}}_{\mathbf{C}_{\text{sek}}} - \tilde{\boldsymbol{\sigma}} \underbrace{\frac{\partial D}{\partial \kappa} \frac{\partial \kappa}{\partial \bar{\varepsilon}_v} \sum_i \tilde{\psi}_i \frac{\partial \varepsilon_v}{\partial \varepsilon}}_{\mathbf{C}_{\text{nichtlokal}}}. \quad (5.105)$$

Hierbei sind \mathbf{C}_{sek} die Sekantensteifigkeit und $\mathbf{C}_{\text{nichtlokal}}$ der nichtlokale Anteil des Steifigkeitstensors. Während \mathbf{C}_{sek} im Allgemeinen symmetrisch ist, ist die Symmetrie des nichtlokalen Anteils $\mathbf{C}_{\text{nichtlokal}}$ abhängig von der gewählten Form der äquivalenten Verzerrung. Symmetrie ist dabei nur zu erreichen wenn $\partial \varepsilon_v / \partial \varepsilon$ einem skalaren Vielfachen von $\tilde{\boldsymbol{\sigma}}$ entspricht. Für die äquivalente Verzerrung (5.91) trifft dies nicht zu.

Wie in dem vorhergehenden Beispiel gezeigt, ist für eine konvergierende Lösung ein Interaktionsradius notwendig, der mehrere Elemente einschließt. Entsprechend ist die Materialtangenteigenschaften eines Quadraturpunktes nicht nur von den Verzerrungen innerhalb des eigenen Elements, sondern auch von denen der umliegenden Elemente abhängig. Für die Gesamtsteifigkeitsmatrix der FE-Rechnung bedeutet dies neben dem Verlust der Symmetrie auch, dass sich das Profil der Matrix und die Anzahl der von Null verschiedenen Einträge im Laufe der Berechnung ändern. Dies ist in Abb. 5.12 anschaulich dargestellt. Hierbei handelt es sich um das Profil der Steifigkeitsmatrix aus einer nichtlokalen Berechnung des in Abb. 5.9 (a) dargestellten Problems, mit einer mittleren Elementkantenlänge von $h = 0,05$ mm und einem Interaktionsradius von $r_{\text{CDM}} = 0,1$ mm. Mit fortschreitender Belastung kommt es zu einer Schädigung der Struktur und einem Wachstum der entsprechenden inneren Variablen. Entsprechend der Definition der Tangenteigenschaften (5.105) ergeben sich zusätzliche Einträge und die Bandbreite der Matrix nimmt zu.

Neben diesen für die numerische Umsetzung negativen Eigenschaften ermöglicht die Verwendung der kompletten Tangenteigenschaften das Erreichen von Konvergenzraten höherer Ordnung. In Abb. 5.13 ist der Verlauf des relativen Residuumfehlers der vorher besprochenen Beispielrechnung für die einzelnen Lastschritte dargestellt. Während unter Verwendung der lokalen Sekantensteifigkeit lediglich lineare Konvergenz zu beobachten ist, führt die Berücksichtigung des nichtlokalen Anteils zu einer quadratischen Abnahme des Fehlers. Der zusätzliche numerische Aufwand zur Berechnung des nichtlokalen Anteils führt jedoch dazu, dass die Gesamtrechnenzeit auf ein Vielfaches der Rechnung basierend auf der Sekantensteifigkeit anwächst. Da bei üblichen nichtlinearen Rechnungen bei einem relativen Residuumfehler von 0,1 % die Iteration abgebrochen wird, ist es ratsam für große Modelle mit vielen Lastschritten auf die Berechnung des nichtlokalen Anteils zu verzichten. Weiterhin wurde im Rahmen der Untersuchung festgestellt, dass in Abhängigkeit der äquivalenten Verzerrung die Verwendung der Tangenteigenschaften zu einem instabilen Verhalten des Iterationsverfahrens führen kann. Demgegenüber führte die Verwendung der Sekantensteifigkeit auch für komplexe Definitionen der äquivalenten Verzerrung zu einer stabilen Konvergenz des Lösungsalgorithmus.

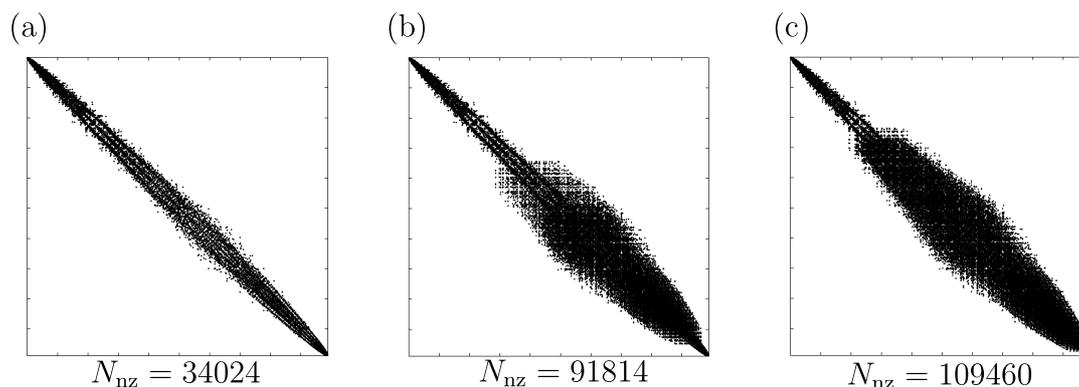


Abbildung 5.12: Profil und die Anzahl der von Null verschiedenen Einträge N_{nz} der Gesamtsteifigkeitsmatrix für: (a) den ersten rein elastischen Lastschritt sowie bei halber (b) und (c) vollständiger Belastung.

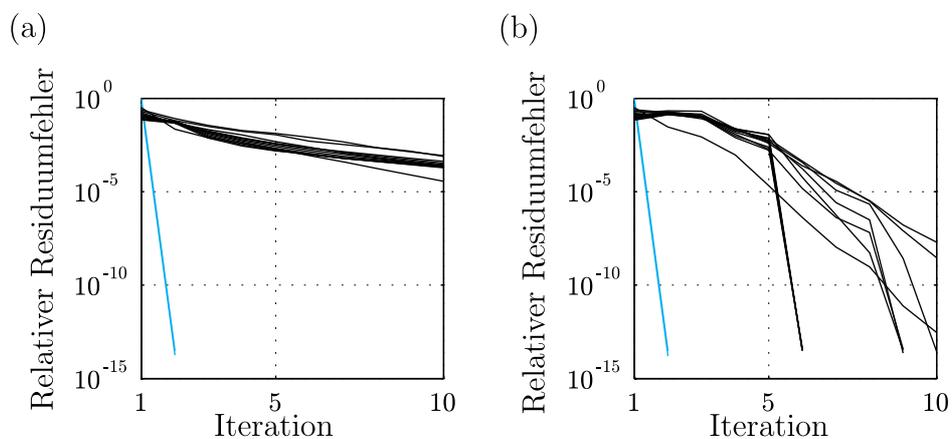


Abbildung 5.13: Entwicklung des relativen Residuumfehlers innerhalb der einzelnen Lastinkremente unter Verwendung: (a) der lokalen Sekantensteifigkeit und (b) der vollständigen nichtlokalen Tangentensteifigkeit. Die rein elastischen Lastinkremente sind blau gekennzeichnet.

6 Simulation unidirektional verstärkter GF-PP-Verbunde

Die in den vorhergehenden Kapiteln entwickelten Verfahren zur Beschreibung der lokalen Materialstruktur sowie des inelastischen, schädigungsbehafteten Materialverhaltens von FKV sollen im Folgenden für die Simulation des Materialverhaltens eines GF-PP- Verbundes zusammengeführt werden. Die Ausnutzung der in Abschnitt 1.3 formulierten Äquivalenzkriterien erlaubt die Berechnung von effektiven Spannungs-Dehnungskurven anhand von repräsentativen Ausschnitten der lokalen Materialstruktur.

In Abschnitt 6.1 erfolgt zunächst eine Parametrisierung und Evaluierung der Modellierungsstrategie anhand der in Abschnitt 1.2 dargestellten experimentellen Untersuchungen an unidirektional verstärkten GF-PP-Zugproben. Basierend auf den Ergebnissen wird in Abschnitt 6.2 der Einfluss des Faservolumengehalts auf die effektiven inelastischen Eigenschaften untersucht. Abschließend erfolgt in Abschnitt 6.3 die Analyse des Schädigungsverhaltens unter mehrachsiger Belastung. Etwaige geometrische Größen sind bezogen auf einen Durchmesser der Glasfaser von $d_{GF} = 10 \mu\text{m}$.

6.1 Parametrisierung des Verbundmodells und Berechnung des effektiven mikroskopischen Verhaltens

Die idealisierte mikroskopische Materialstruktur eines GF-PP-Verbundes besteht entsprechend Abb. 1.7 aus parallel zueinander verlaufenden Einzelfasern. Eine hexagonale Faseranordnung sichert die transversale Isotropie des Verbundes. Aus dem Volumenverhältnis von Glasfasern und Polypropylen zum Gesamtvolumen des Verbundes ergibt sich ein Faservolumengehalt von $v_F = 0,5$. Die Generierung eines numerischen Modells auf Basis der XFEM erfolgt entsprechend Abb. 6.1 aus den in Abb. 1.9 dargestellten RVE der mikroskopischen Materialstruktur.

Wie in Abschnitt 1.2 anhand von experimentellen Untersuchungen an GF-PP-Zugproben dargestellt, zeigt der Verbund ein ausgeprägtes nichtlineares und geschwindigkeitsabhängiges Materialverhalten bei einer Belastungsrichtung die nicht mit der Orientierung der Verstärkungsfasern übereinstimmt. Für die numerische Analyse dieses Verhaltens stehen daher die Faserorientierungen $\alpha = 45^\circ$ und $\alpha = 90^\circ$ relativ zur Belastungsrichtung im Vordergrund (vgl. Abb. 1.9). Die makroskopische Dehnung $\bar{\epsilon}(t)$ wird dabei mittels periodischer Randbedingungen monoton auf das numerische Modell übertragen. Die Belastungsgeschwindigkeiten entsprechen mit $\dot{\bar{\epsilon}} = \{0,9; 9; 90\}\%/min$ denen der experimentellen Untersuchungen.

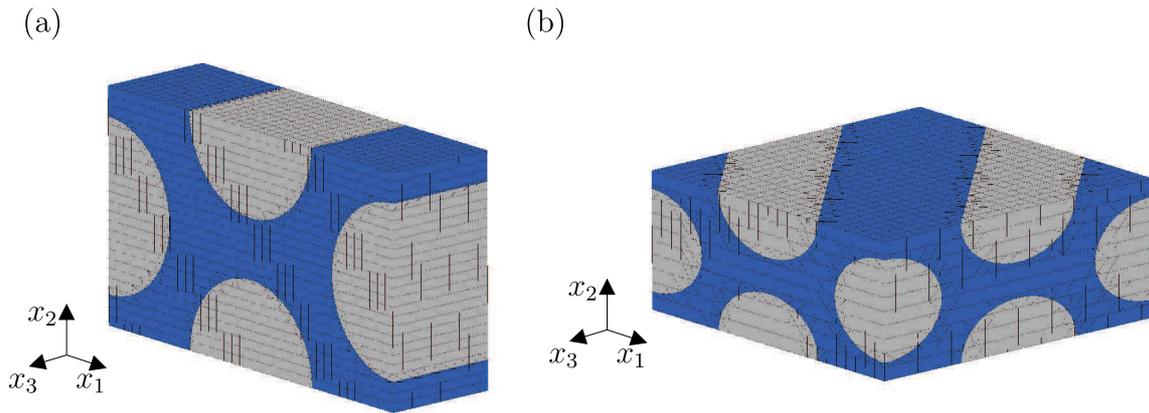


Abbildung 6.1: XFEM-Modell des mikroskopischen RVE eines unidirektional verstärkten Verbundes für die Analyse einer Faserorientierung von: (a) $\alpha = 90^\circ$ und (b) $\alpha = 45^\circ$ relativ zur Belastungsrichtung (vgl. Abb. 1.9).

Der systematische Aufbau sowie die Parametrisierung der Gesamtmodellierungsstrategie erfolgt zunächst anhand einer Faserorientierung von $\alpha = 90^\circ$ und dem in Abb. 6.1 (a) dargestellten numerischen Modell. Eine isotrop linear elastische Modellierung der Glasfasern ($E_{GF} = 73 \text{ GPa}$, $\nu_{GF} = 0,22$) und der Polypropylen-Matrix ($E_{PP} =$, $\nu_{PP} = 0,4$) führt unabhängig von der Belastungsgeschwindigkeit zu dem in Abb. 6.2 (a) abgebildeten effektiven Spannungs-Dehnungsverlauf. Der Vergleich mit den experimentell bestimmten Spannungs-Dehnungskurven für unterschiedliche Dehnraten zeigt, dass lediglich die Tangentensteifigkeit zu Beginn der Belastung durch das Modell korrekt abgebildet wird. Die inelastischen Phänomene, die im Experiment zu dem ausgeprägt nichtlinearen Verlauf führen, können demgegenüber nicht erfasst werden.

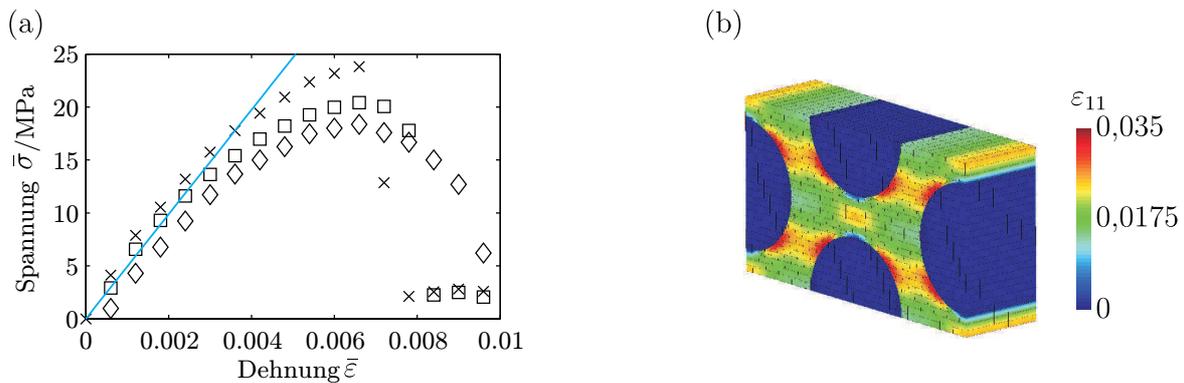


Abbildung 6.2: Linear elastische Simulation des effektiven Materialverhaltens eines UD-GF-PP-Verbundes und einer Faserorientierung von $\alpha = 90^\circ$: (a) Vergleich der effektiven Spannungs-Dehnungskurve (Linie) mit experimentellen Ergebnissen (Symbole) und (b) lokale Verzerrungsverteilung $\varepsilon_{11}(\mathbf{x})$ bei $\bar{\varepsilon} = 0,01$.

Eine wesentliche Verbesserung der Modellierung kann durch die viskoelastische Beschreibung

der Polypropylen-Matrix auf Basis des in Abschnitt 5.2 formulierten fraktionalen Materialmodells erzielt werden. Der Vergleich der errechneten effektiven Spannungs-Dehnungskurven für unterschiedliche Belastungsgeschwindigkeiten mit den experimentellen Ergebnissen in Abb. 6.3 (a) zeigt eine gute Approximation der Geschwindigkeitsabhängigkeit sowie des nichtlinearen Verlaufs der Spannung bis zum Erreichen des experimentellen Spannungsmaximalwerts. Der sich anschließende Abfall der experimentell ermittelten Kurven ist auf unterschiedliche Schädigungsphänomene zurückzuführen. Entsprechend der in Abschnitt 1.2.2 vorgestellten mikro-mechanischen Analysen an geschädigten Verbundbauteilen kommt es auf Mikroebene zu einem Versagen der Grenzfläche zwischen den Verbundbestandteilen sowie zu einer Ausbildung von Lokalisierungszonen im Bereich der Matrix. Beide Schädigungsmechanismen können durch eine Erweiterung der Modellierungsstrategie durch die im Rahmen der vorliegenden Arbeit entwickelten Verfahren erfasst werden.

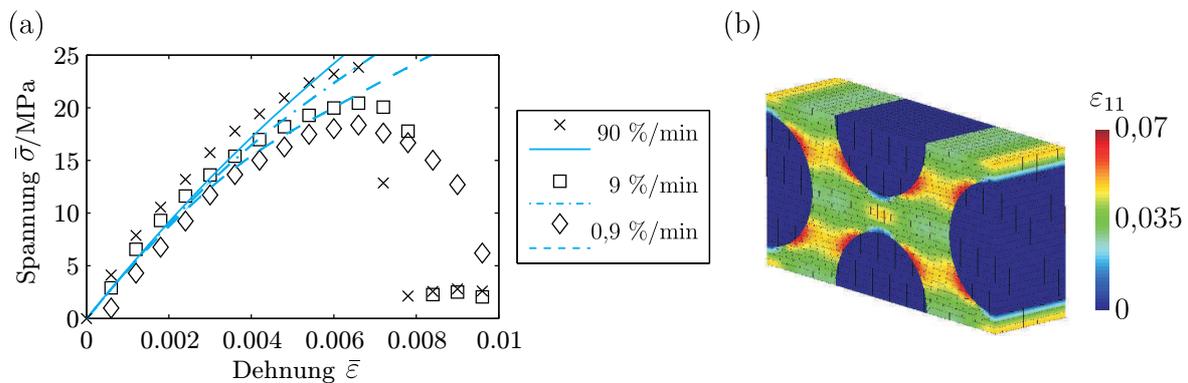


Abbildung 6.3: Nichtlineare Simulation des effektiven Materialverhalten eines UD-GF-PP-Verbundes und einer Faserorientierung von $\alpha = 90^\circ$ unter Berücksichtigung des viskoelastischen Verhaltens der Matrix: (a) Vergleich der effektiven Spannungs-Dehnungskurven (Linien) mit experimentellen Ergebnissen (Symbole) und (b) lokale Verzerrungsverteilung $\varepsilon_{11}(\mathbf{x})$ bei $\bar{\varepsilon} = 0,01$ und $\dot{\bar{\varepsilon}} = 0,9 \text{ \%}/\text{min}$.

Die in Abschnitt 3.1 formulierte Anreicherungsstrategie für schwache und starke Unstetigkeiten in Kombination mit der in Abschnitt 5.3 eingeführten Kohäsivzonentheorie erlaubt die effiziente Modellierung des Versagens der Grenzfläche zwischen Faser und Matrix. Da die effektiven Eigenschaften des Verbundes vor Eintreten der Schädigung ausschließlich durch das Materialverhalten der Bestandteile bestimmt wird, erfolgt die Beschreibung der Grenzflächenschädigung auf Basis des in Abschnitt 5.3 eingeführten anfangs-steifen Kohäsivzonenmodells mit einer linearen Degradation der übertragbaren Spannung. Für die Bestimmung der Parameter – maximal ertragbare Grenzflächennormalspannung σ_n^{\max} , charakteristische Separation $[[u]]^{\max}$ und Koeffizient der Grenzflächenfestigkeit in Tangential- und Normalenrichtung λ – wurde das lokale Spannungsfeld an der Grenzfläche sowie die Evolution der Schädigung analysiert. Die Spannung $\sigma_n^{\max} = 21 \text{ MPa}$ entspricht demnach der Normalspannung an der Grenzfläche in Bereichen wo die Flächennormale mit der Belastungsrichtung zusammenfällt. Der Wert gewährleistet eine Schädigungsinitialisierung auf dem Belastungsniveau, bei dem in der vorhergehenden Simulation die berechneten Spannungs-Dehnungskurven von den experimentellen Ergebnissen abwichen.

Die charakteristische Separation $[[u]]^{\max} = 0,27 \mu\text{m}$ und der Koeffizient $\lambda = 2$ führen zu einer guten Approximation des sich anschließenden Spannungsplateaus. Der Verlauf der berechneten effektiven Spannung ist in Abb. 6.4 (a) in Abhängigkeit von der Belastungsgeschwindigkeit mit den experimentell ermittelten Kurven gegenübergestellt. Es ist zu erkennen, dass die Grenzflächenschädigung zu einer Limitierung des Spannungsniveaus und zu einem sukzessiven Abfall der Steifigkeit führt. Das sich abzeichnende erneute Ansteigen der Spannungs-Dehnungskurve bei Erreichen der Maximalbelastung ist auf die intakte Matrix zurückzuführen. Nach dem Erliegen der Grenzflächenschädigung trägt sie fast ausschließlich die Last innerhalb des Verbundes. Eine Analyse des Verzerrungsfeldes zeigt, dass sich die Deformation in der Nähe der Grenzflächenrissspitze konzentriert.

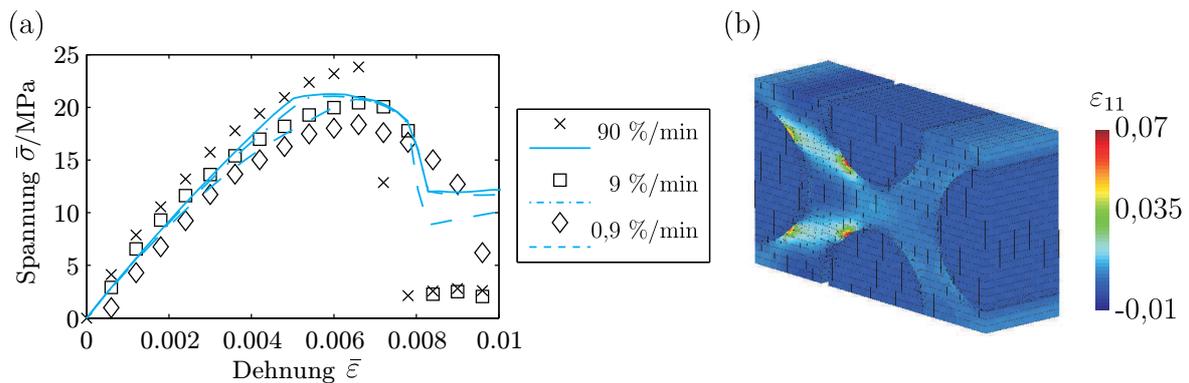


Abbildung 6.4: Nichtlineare Simulation des effektiven Materialverhalten eines UD-GF-PP-Verbundes und einer Faserorientierung von $\alpha = 90^\circ$ unter Berücksichtigung des viskoelastischen Verhaltens der Matrix und der kohäsiven Grenzflächenschädigung: (a) Vergleich der effektiven Spannungs-Dehnungskurven (Linien) mit experimentellen Ergebnissen (Symbole) und (b) lokale Verzerrungsverteilung $\varepsilon_{11}(\mathbf{x})$ bei $\bar{\varepsilon} = 0,01$ und $\dot{\bar{\varepsilon}} = 0,9 \text{ \%}/\text{min}$.

Unter der Annahme, dass das Ausbilden dieser Lokalisierungszone an den Rissspitzen der Ausgangspunkt für das Versagen der Matrix ist, wird das numerische Modell um den in Abschnitt 5.4 eingeführten verzerrungsgesteuerten, nichtlokalen Kontinuumsschädigungsansatz erweitert. Die äquivalente Verzerrung berechnet sich nach (5.93) mit $\gamma = 6$, dem Verhältnis aus Druck- und Zugfestigkeit, aus dem lokalen Verzerrungsfeld. Die schädigungsantreibende nichtlokale äquivalente Verzerrung ergibt sich anhand von (5.101) mit der empirisch gewählten charakteristischen Länge $r = 2,7 \mu\text{m}$. Die charakteristische Verzerrung für das Einsetzen der Schädigung und deren Evolution beträgt $\varepsilon_0 = 0,0475$ respektive $\varepsilon_f = 0,1$. Ein Maximalwert von $D_{\max} = 0,9$ für den Schädigungsparameter D sichert die numerische Konvergenz der Rechnung. Die berechneten Spannungs-Dehnungskurven in Abb. 6.5 (a) zeigen, dass die fortschreitende Schädigung im Bereich der Matrix zu einem totalen Versagen des Verbundes führt. Das Niveau der residualen Spannungen ist dabei abhängig von dem zuvor definierten zulässigen Maximalwert des Schädigungsparameters. Eine Anhebung des Wertes erfordert jedoch die Implementierung spezieller Stabilisierungsverfahren für die Deformation vollständig geschädigter Elemente. Eine

exemplarische Verteilung des Schädigungsparameters in Abb. 6.5 (b) dargestellt. Wie erwartet, kommt es zu einer Ausbildung von Lokalisierungszonen in der Nähe der Grenzflächenrissspitze.

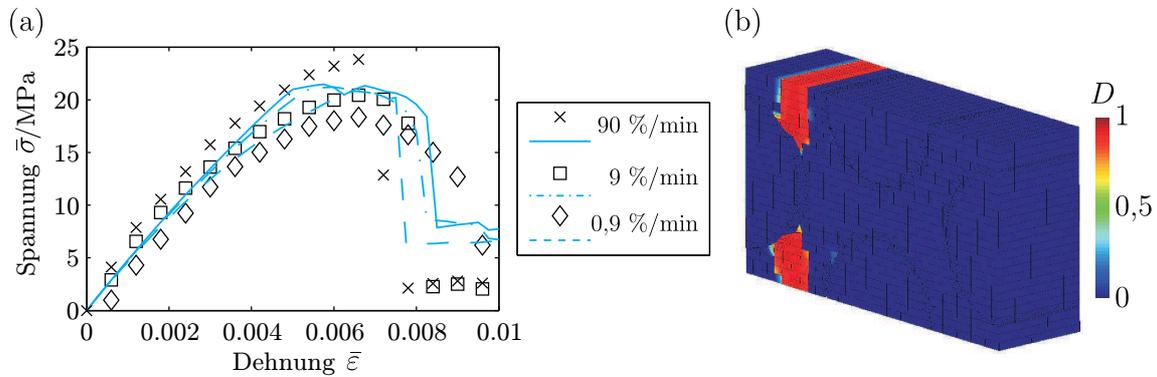


Abbildung 6.5: Nichtlineare Simulation des effektiven Materialverhalten eines UD-GF-PP-Verbundes und einer Faserorientierung von $\alpha = 90^\circ$ unter Berücksichtigung des viskoelastischen Verhaltens der Matrix, der kohäsiven Grenzflächenschädigung und der Kontinuumsschädigung der Matrix: (a) Vergleich der effektiven Spannungs-Dehnungskurven (Linien) mit experimentellen Ergebnissen (Symbole) und (b) Schädigungsverteilung $D(\mathbf{x})$ bei $\bar{\varepsilon} = 0,01$ und bei $\dot{\bar{\varepsilon}} = 0,9 \text{ %/min}$.

Basierend auf dem vollständig parametrisierten Modell zur Beschreibung des mikroskopischen Verhaltens unidirektional verstärkter GF-PP-Verbunde soll nun das effektive Verhalten des Modells für eine Faserorientierung von $\alpha = 45^\circ$ ermittelt werden. Das FE-Modell des idealisierten RVE der lokalen Materialstruktur ist in Abb. 6.1 (b) dargestellt. Die ermittelten Spannungs-Dehnungskurven sind in Abb. 6.6 (a) den experimentellen Ergebnissen gegenübergestellt. Abb. 6.6 (b) zeigt die lokale Schädigungsverteilung bei einer effektiven Dehnung von $\bar{\varepsilon} = 0,015$ und einer Belastungsgeschwindigkeit von $\dot{\bar{\varepsilon}} = 9 \text{ %/min}$. Der Vergleich der Simulationsergebnisse mit den experimentellen Daten zeigt eine gute qualitative Übereinstimmung. Die Dehnratenabhängigkeit des Materialverhaltens wird allerdings speziell im Bereich der schädigungsfreien Belastung durch das Modell überschätzt. Es ist anzunehmen, dass dieser Umstand in einem erheblichen Maß auf die periodischen Randbedingungen, speziell für die lastfreien Ränder, zurückzuführen ist. In weiterführenden Arbeiten sollte daher die Anwendbarkeit alternativer Randbedingungsformulierungen untersucht werden (vgl. Coenen u. a. (2012); Glüge (2013); Inglis u. a. (2008)). Das durch das Versagen der Faser-Matrixgrenzfläche bestimmte Spannungsmaximum der Simulation ist in guter Übereinstimmung mit dem im Experiment beobachteten Verhalten. Der sich anschließende Abfall der Spannung wird durch ein fortschreitendes Versagen der Grenzfläche sowie eine lokale Degradation des Matrixmaterials verursacht. Die verbleibende Restspannung bei Maximalbelastung ist erneut auf den zuvor gewählten Maximalwert des Schädigungsparameters ($D_{\max} = 0,9$) zurückzuführen.

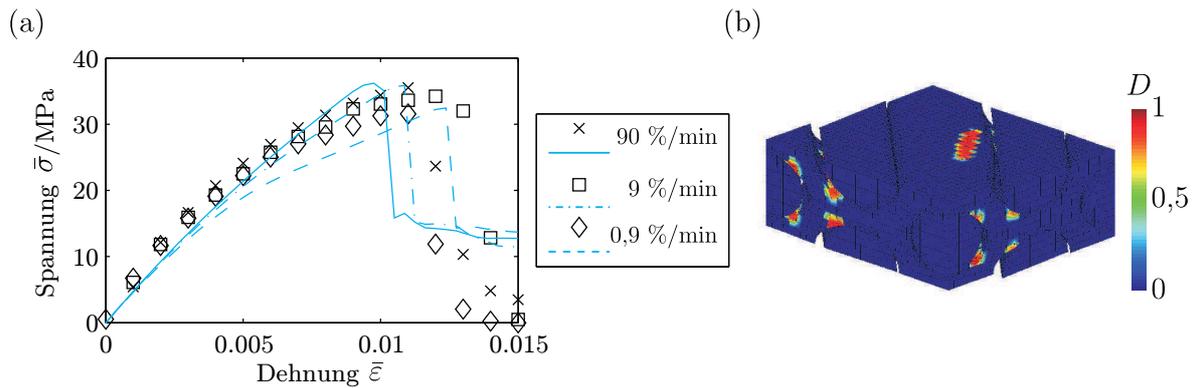


Abbildung 6.6: Nichtlineare Simulation des effektiven Materialverhalten eines UD-GF-PP-Verbundes und einer Faserorientierung von $\alpha = 45^\circ$ unter Berücksichtigung des viskoelastischen Verhaltens der Matrix, der kohäsiven Grenzflächenschädigung und der Kontinuumschädigung der Matrix: (a) Vergleich der effektiven Spannungs-Dehnungskurve (Linien) mit experimentellen Ergebnissen (Symbole) und (b) Schädigungsverteilung $D(\mathbf{x})$ bei $\bar{\varepsilon} = 0,015$ und $\dot{\bar{\varepsilon}} = 9 \%/min$.

6.2 Analyse des Mikrostruktureinflusses auf das Schädigungsverhalten

Die entwickelte Modellierungsstrategie erlaubt eine effiziente Beschreibung des mikroskopischen Materialverhaltens. Die automatisierte Modellgenerierung auf Basis der XFEM ermöglicht eine schnelle Veränderung der mikroskopischen Materialstruktur und damit die Analyse der Auswirkung auf das effektive Materialverhalten. Exemplarisch ist dies im Folgenden anhand einer Variation des Faservolumengehalts v_F demonstriert. Unter Beibehaltung der äußeren Abmessungen des RVE der mikroskopischen Materialstruktur (vgl. Abb. 6.1 (a)) erfolgt die Variation von v_F anhand des Faserradius.

Die Profile eines RVE mit einem Faservolumengehalt von $v_F = \{0,3; 0,4; 0,5; 0,6; 0,7\}$ und einer Faserorientierung von $\alpha = 90^\circ$ sind in Abb. 6.7 (a) dargestellt. Die Analyse einer effektiven einachsigen Zugbelastung bis zum Erreichen einer effektiven Dehnung von $\bar{\varepsilon} = 0,01$ bei einer Belastungsgeschwindigkeit von $\dot{\bar{\varepsilon}} = 9 \%/min$ führt zu den in Abb. 6.7 (b) dargestellten effektiven Spannungs-Dehnungskurven.

Die lokale Schädigungsverteilung in Abhängigkeit des Faservolumengehalts ist in Abb. 6.8 dargestellt. Wie zu erwarten, führt eine Anhebung des Faservolumengehalts zu einem Anstieg der Steifigkeit des Verbundes. Das spannungsinduzierte Versagen der Grenzfläche ist daher bei geringen Faservolumengehalten sehr gering ausgeprägt. Etwaige Lokalisierungszonen im Bereich der Risspitze, die zur Initialisierung einer Matrixschädigung führen, treten nur für hohe Faservolumengehalte auf. Zusammenfassend liefert das Modell ein realistisches Bild des mikroskopischen Versagensverhaltens, wobei eine experimentelle Verifikation für anschließende Arbeiten wünschenswert wäre.

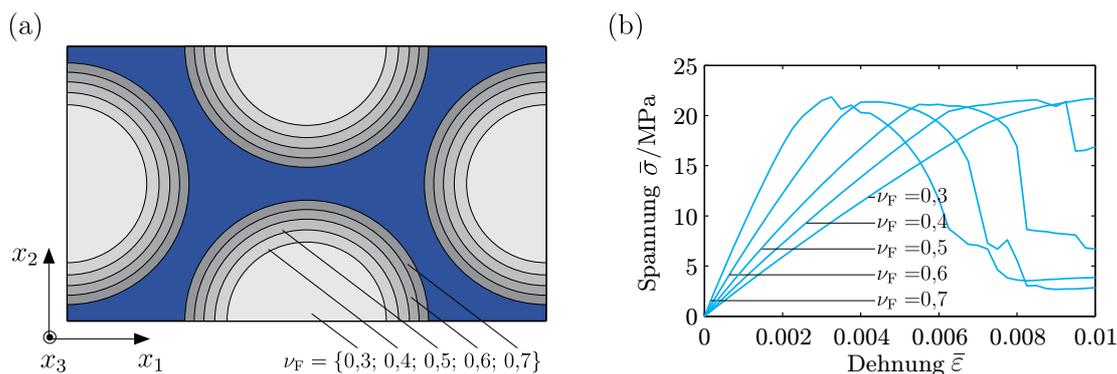


Abbildung 6.7: Analyse des Einflusses des Faservolumengehalts auf die mikroskopische Schädigung von GF-PP-Verbunden: (a) Variation der RVE Geometrie und (b) effektive Spannungs-Dehnungskurven für unterschiedliche Faservolumenanteile.

6.3 Analyse des Schädigungsverhaltens unter mehrachsiger Zug- / Druckmischbelastung

Das in Abb. 6.1 (a) dargestellte RVE eines UD-Verbundes erlaubt die Analyse des mikroskopischen Schädigungsverhaltens bei mehrachsiger Zug- / Druckmischbelastung in der $x_1 - x_2$ Ebene. Entsprechende Lastfälle können experimentell nur schwer oder gar nicht analysiert werden.

Exemplarisch soll im Folgenden der kritische effektive mehrachsige Spannungs- / Verzerrungszustand identifiziert werden, bei dem es zur Initialisierung einer lokalen Schädigung kommt. Konkret werden die in Abb. 6.9 (a) dargestellten 60 Lastkonfigurationen homogen, inkrementell und verschiebungsgesteuert mittels periodischer Randbedingungen auf das FE-Modell aufgebracht. Die Berechnung der Spannungsantwort erfolgte jeweils bis zum Erreichen eines Schädigungskriteriums (Grenzflächen- oder Matrixschädigung). Die ermittelten Punkte in der effektiven Verzerrungsebene $\bar{\epsilon}_{11} - \bar{\epsilon}_{22}$ und der effektiven Spannungsebene $\bar{\sigma}_{11} - \bar{\sigma}_{22}$ sind in Abb. 6.9 (b) - (c) aufgetragen. Für ausgewählte Drucklastfälle tritt dabei keine Schädigung im Bereich des RVE auf. Eine Erweiterung des untersuchten Verzerrungsgebiets hin zu kleineren effektiven Verzerrungen ist dabei aufgrund des geometrisch linearen Ansatzes des Modells nur bedingt zulässig. Unabhängig davon erlauben die Ergebnisse die Rekonstruktion einer Versagenskurve im effektiven Verzerrungs- und Spannungsraum. Im Hinblick auf eine anschließende Modellierung übergeordneter Strukturebenen können die Versagenspunkte zur Parametrisierung eines effektiven Versagensmodells verwendet werden.

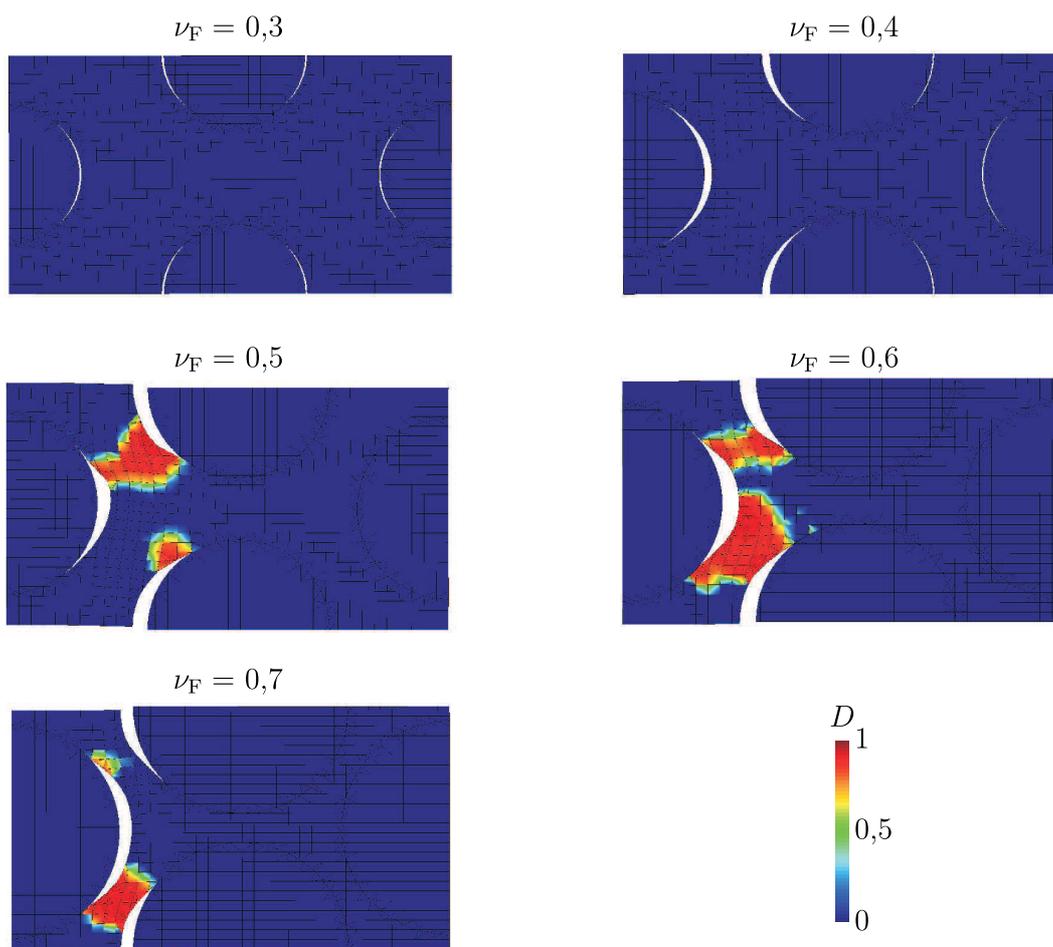


Abbildung 6.8: Lokale Schädigungsverteilung in Abhängigkeit des Faservolumengehalts.

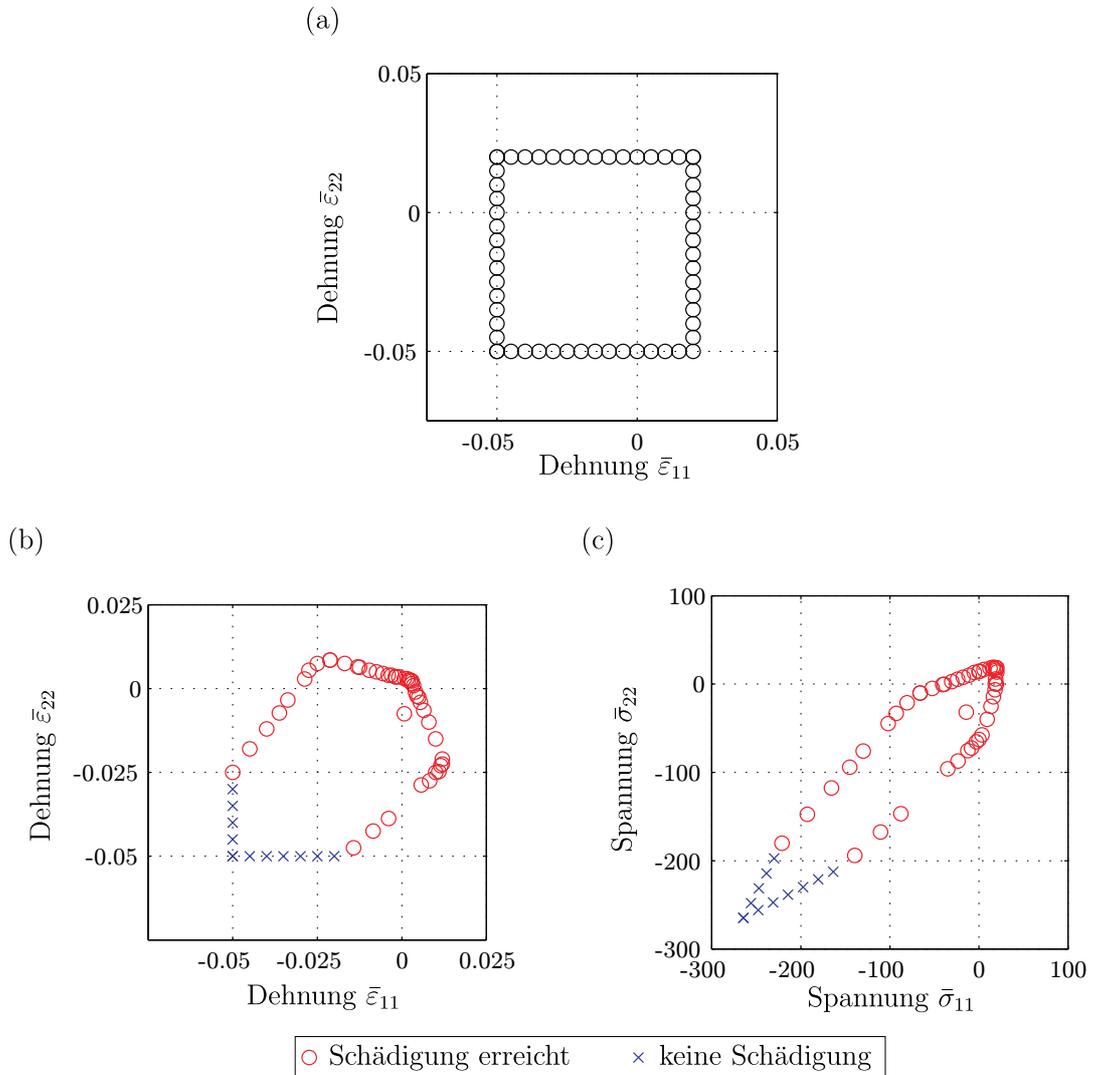


Abbildung 6.9: Analyse des Schädigungsverhaltens unter mehrachsiger Zug- / Druckmischbelastung: (a) effektive Verzerrungszustände $\bar{\varepsilon}_{11} - \bar{\varepsilon}_{22}$ für eine verschiebungsgesteuerte FE-Simulation und die identifizierten Versagenspunkte in der effektiven (b) Verzerrung- bzw. (c) Spannungsebene.

7 Zusammenfassung und Ausblick

Moderne FKV zeigen in Abhängigkeit ihrer Verbundbestandteile, ihrer Materialstruktur und der Art der Belastung ein ausgeprägt nichtlineares Verhalten. Ausschlaggebend hierfür sind im Wesentlichen die inelastischen Materialeigenschaften der polymeren Matrix sowie unterschiedliche Schädigungsphänomene. Ein zuverlässiges Werkzeug zur Bestimmung der effektiven Eigenschaften eines Verbundes bieten mehrskalige Modellierungsverfahren. Sie nutzen den hierarchischen Aufbau der lokalen Materialstruktur zur Identifikation charakteristischer Längenskalen. Ausgehend von der kleinsten, ingenieurtechnisch sinnvollen Betrachtungsebene – der Mikroskala – können die effektiven Verbundeigenschaften anhand von Homogenisierungsverfahren bestimmt werden. Neben einem Modell der lokalen Materialstruktur sind hierfür lediglich Materialmodelle für die Verbundbestandteile sowie Ansätze zur Beschreibung charakteristischer Schädigungsmechanismen erforderlich.

Im Fokus der vorliegenden Arbeit stand die Modellierung des inelastischen, schädigungsbehafteten Verhaltens von GF-PP-Verbunden. Für dessen Charakterisierung wurden zunächst experimentelle Untersuchungen an Polypropylen- und Verbundproben ausgewertet. Es konnte gezeigt werden, dass das inelastische Verhalten eines unidirektional verstärkten Verbundes bei einer Belastung senkrecht zur Faserrichtung wesentlich durch das nichtlinear viskoelastische Verhalten der Matrix dominiert wird. Die mikromechanische Analyse von Schlifffbildern eines geschädigten Verbundes hat gezeigt, dass dem Versagen des Bauteils eine sukzessive Schädigung der Grenzschicht zwischen Faser und Matrix sowie der Matrix selbst vorausgeht.

Basierend auf den Erkenntnissen der experimentellen Untersuchungen wurden im Rahmen der vorliegenden Arbeit Ansätze zur effizienten Beschreibung der lokalen Materialstruktur auf Basis der erweiterten Finiten-Elemente-Methode (XFEM), der viskoelastischen Modellierung der Polypropylenmatrix durch ein fraktionales Materialmodell und für die Abbildung lokaler Grenzflächen- und Matrixschädigung durch eine Kombination aus Kohäsivzonen- und Kontinuumschädigungsmodell erarbeitet.

Die Anwendung der XFEM ermöglicht eine effiziente Beschreibung schwacher und starker Unstetigkeiten im Verschiebungsfeld, deren Verlauf unabhängig von den Elementgrenzen des zugrundeliegenden FE-Netzes ist. Beide Unstetigkeitsarten werden im Rahmen der vorliegenden Arbeit kombiniert berücksichtigt. Materialgrenzen innerhalb der Materialstruktur stellen schwache Unstetigkeiten dar. Deren Versagen initialisiert zusätzlich eine starke Unstetigkeit, welche die schwache überlagert. Die Lokalisierung der Unstetigkeit innerhalb der Elemente erfolgt implizit durch die Formulierung einer Level-Set-Funktion (LS-Funktion). In ihrer diskretisierten Form weist sie jedem Knoten einen vorzeichenbehafteten Abstand zu einer Unstetigkeit zu. Die Interpolation des Funktionsverlaufs erfolgt daraufhin durch die Formfunktionen des zugrundeliegenden Elements. Die Qualität der LS-Funktion ist direkt abhängig von der Ordnung der Elementformulierung. Speziell für gekrümmte Unstetigkeitsverläufe konnte gezeigt werden, dass die

Verwendung von linearen Formfunktionen nur zu einer suboptimalen Approximation führt. Eine wesentliche Verbesserung der Approximationsgüte, sowohl qualitativ als auch quantitativ, konnte durch die Verwendung quadratischer Elementformulierungen erzielt werden. Für die Bestimmung der notwendigen Knotenwerte der LS-Funktion wurde ein lokales elementweises Triangulationsverfahren entwickelt. Es erlaubt die lokale Rekonstruktion des Unstetigkeitsverlaufs auf Basis der Bestimmung diskreter Stützstellen. Es ist damit speziell für die Überführung explizit gegebener Geometrien (CAD-Modelle) in ein XFEM-Modell geeignet.

Das Auftreten von Unstetigkeiten im Verschiebungsfeld im Bereich ausgewählter Elemente erfordert die Formulierung eines angepassten Integrationsverfahrens. Anhand einer zweidimensionalen Betrachtung wurden, speziell im Hinblick auf krummlinige Unstetigkeitsverläufe innerhalb quadratischer Elemente, unterschiedliche Integrationsverfahren erarbeitet und hinsichtlich ihrer numerischen Eigenschaften verglichen. Neben der Aufteilung der durch die LS-Funktion generierten Elementteilbereiche in standardisierte, höherwertige Integrationsbereiche wurde die LASSERRE-Integration sowie ein sogenanntes *strain-smoothing* Verfahren untersucht. Die beiden letztgenannten Verfahren zeigten suboptimale Eigenschaften hinsichtlich ihrer Genauigkeit bzw. ihrer Anwendbarkeit in einer materiell nichtlinearen FE-Rechnung. Vor diesem Hintergrund wurde die Verwendung höherwertiger Integrationsbereiche auf die Anwendung in einer dreidimensionalen FE-Rechnung erweitert.

Die Fülle notwendiger Elemente zur FE-Modellierung von Verbundwerkstoffen sowie die hohe Anzahl von Lastschritten innerhalb einer inkrementellen, iterativen FE-Rechnung führen zu einem erheblichen numerischen Aufwand. Zur Reduktion der Rechenzeit wurde innerhalb der vorliegenden Arbeit ein Verfahren entwickelt, das die einzelnen Rechenoperationen effizient auf den Hauptprozessor (CPU) und auf den Grafikprozessor (GPU) verteilt. Die Architektur moderner GPU in Kombination mit angepassten Programmpaketen erlaubt eine signifikante Reduktion der Rechenzeit bei parallel ablaufenden Berechnungen.

Eine effiziente Modellierung des nichtlinear viskoelastischen Materialverhaltens von Polypropylen kann durch die Verwendung konstitutiver Beziehungen mit gebrochenrationalen (fraktionalen) Ableitungsordnungen erzielt werden. Fraktionale Evolutionsgleichungen erlauben die Beschreibung komplexer Kriech- und Relaxationsprozesse über mehrere Dekaden anhand weniger Parameter. Zur verbesserten Approximation der ausgeprägten Nichtlinearität des Materialverhaltens von Polypropylen wurde das Überspannungsmodell eines fraktionalen MAXWELL-Elements um eine nichtlinear elastische Gleichgewichtslage und eine überspannungsabhängige Viskositätsfunktion erweitert. Der Vergleich mit den experimentellen Ergebnissen einachsiger Zugversuche zeigt eine gute Übereinstimmung zwischen Modellantwort und realem Materialverhalten. Für die Verwendung des Materialmodells innerhalb einer materiell nichtlinearen FE-Rechnung wurden die konstitutiven Beziehungen für den mehrachsigen Fall verallgemeinert und die relevanten Größen, eine konsistente Materialtangente und ein Spannungsalgorithmus abgeleitet.

Die Beschreibung ausgewählter mikroskopischer Schädigungsphänomene erfolgt im Rahmen der vorliegenden Arbeit durch eine Kombination von Kohäsivzonen- und Kontinuumsschädigungsmodell. Das Kohäsivzonenmodell steuert die übertragbare Spannung zwischen Faser und Matrix in Abhängigkeit von dem Verschiebungssprung an der Grenzfläche. Die Evaluierung unterschiedlicher Ansätze für die Degradation der übertragbaren Spannung im Bereich der Grenz-

fläche führte zur Auswahl eines anfangs-steifen Ansatzes mit linearer Evolutionsgleichung. Die Initialisierung der Grenzflächenschädigung erfolgt auf Basis eines effektiven Spannungskriteriums, welches es erlaubt, den Einfluss einer kombinierten Zug-Schub-Mischbelastung zu erfassen. Die im Experiment beobachtete Schädigung der Matrix wird in der vorliegenden Modellierung durch ein isotropes Kontinuumsschädigungsmodell abgebildet. Die Formulierung eines integralbasierten nichtlokalen Ansatzes verhindert dabei die Netzabhängigkeit der Lösung und sichert die Konvergenz des Verfahrens hin zu einem physikalisch sinnvollen Ergebnis. Als schädigungsantreibende Größe wurde eine äquivalente Verzerrung formuliert, welche die Berücksichtigung unterschiedlicher Schädigungseigenschaften bei Zug- und Druckbeanspruchung erlaubt.

Während das fraktionale Viskoelastizitätsmodell systematisch auf Basis der einachsigen experimentellen Untersuchungen an Polypropylenproben parametrisiert wurde, erfolgte die Bestimmung der schädigungsrelevanten Parameter anhand der Ergebnisse aus Zugversuchen an Verbundproben mit einer Faserorientierung von 90° relativ zur Belastungsrichtung. Das FE-Modell zur Analyse des inelastischen Materialverhaltens auf der Mikroebene wurde aus einem RVE der lokalen Materialstruktur abgeleitet. Durch die schrittweise Erweiterung des Modells zur Abbildung der einzelnen Schädigungsphänomene und dem Vergleich der Modellantwort mit den experimentellen Ergebnissen konnten die Parameter der Schädigungsmodelle bestimmt werden. Die berechneten effektiven Spannungs-Dehnungskurven für Modelle mit einer Faserorientierung von 90° und 45° zeigen eine gute qualitative und quantitative Übereinstimmung mit dem im Experiment beobachteten Verhalten.

Das vollständig parametrisierte Verbundmodell erlaubt die Analyse von Mikrostruktureinflüssen und die Berücksichtigung von mehrachsigen Belastungszuständen. Exemplarisch wurde dies im Rahmen der vorliegenden Arbeit anhand des Mikrostrukturmodells für eine Faserorientierung von 90° demonstriert. Es konnte gezeigt werden, dass eine Veränderung des Faservolumengehalts nicht nur einen Einfluss auf die Steifigkeit des Verbundes hat, sondern auch signifikant das lokale Schädigungsverhalten beeinflusst. Eine Verifikation der Ergebnisse anhand experimenteller Untersuchungen wäre jedoch für weiterführende Arbeiten wünschenswert. Es konnte weiterhin gezeigt werden, dass mittels des mikroskopischen Verbundmodells eine Versagenskurve im Spannungs- bzw. Verzerrungsraum rekonstruiert werden kann. Die Ergebnisse können in weiterführenden Untersuchungen auf höheren Strukturebenen zur Parametrisierung eines effektiven Versagensmodells angewendet werden.

Literaturverzeichnis

- [Babuška u. a. 1994] BABUŠKA, I. ; CALOZ, G. ; OSBORN, J.: Special Finite Element Methods for a Class of Second Order Elliptic Problems with Rough Coefficients. In: *SIAM Journal on Numerical Analysis* 31 (1994), Nr. 4, S. 945–981
- [Babuška und Melenk 1997] BABUŠKA, I. ; MELENK, J. M.: The Partition Of Unity Method. In: *Int. J. Numer. Meth. Engng.* 40 (1997), Nr. 4, S. 727–758. – ISSN 1097-0207
- [Balke 2010] BALKE, H.: *Einführung In Die Technische Mechanik Festigkeitslehre*. Springer, 2010
- [Barenblatt 1962] BARENBLATT, G.: The Mathematical Theory of Equilibrium Cracks in Brittle Fracture. Elsevier, 1962, S. 55–129
- [Bažant 1976] BAŽANT, Z. P.: Instability, Ductility, and Size Effect in Strain-Softening Concrete. In: *Journal of the Engineering Mechanics Division* 102(2) (1976), S. 331–344
- [Bažant und Jirásek 2002] BAŽANT, Z. P. ; JIRÁSEK, M.: Nonlocal Integral Formulations of Plasticity and Damage: Survey of Progress. In: *J. Eng. Mech.* 128 (2002), Oktober, Nr. 11, S. 1119–1149. – ISSN 0733-9399
- [Bažant und Pijaudier-Cabot 1988] BAŽANT, Z. P. ; PIJAUDIER-CABOT, G.: Nonlocal Continuum Damage, Localization Instability and Convergence. In: *Journal of Applied Mechanics* 55 (1988), Juni, Nr. 2, S. 287–293. – ISSN 0021-8936
- [Bazant u. a. 1984] BAZANT, Z. P. ; BELYTSCHKO, T. B. ; CHANG, T.-P.: Continuum model for strain softening. In: *Journal of Engineering Mechanics* 110 (12) (1984), S. 1666–1692
- [Belytschko und Black 1999] BELYTSCHKO, T. ; BLACK, T.: Elastic crack growth in finite elements with minimal remeshing. In: *Int. J. Numer. Meth. Engng.* 45 (1999), Nr. 5, S. 601–620
- [Belytschko u. a. 2009] BELYTSCHKO, T. ; GRACIE, R. ; VENTURA, G.: A review of extended/generalized finite element methods for material modeling. In: *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* 17 (2009), Nr. 4, S. 043001
- [Belytschko u. a. 2001] BELYTSCHKO, T. ; MOËS, N. ; USUI, S. ; PARIMI, C.: Arbitrary discontinuities in finite elements. In: *Int. J. Numer. Meth. Engng.* 50 (2001), S. 993–1013

- [Bordas u. a. 2010] BORDAS, S. P. ; RABCZUK, T. ; HUNG, N.-X. ; NGUYEN, V. P. ; NATARAJAN, S. ; BOG, T. ; QUAN, D. M. ; HIEP, N. V.: Strain smoothing in FEM and XFEM. In: *Computers & Structures* 88 (2010), Dezember, Nr. 23–24, S. 1419–1443. – ISSN 0045-7949
- [Bordas u. a. 2011] BORDAS, S. P. A. ; NATARAJAN, S. ; KERFRIDEN, P. ; AUGARDE, C. E. ; MAHAPATRA, D. R. ; RABCZUK, T. ; PONT, S. D.: On the performance of strain smoothing for quadratic and enriched finite element approximations (XFEM/GFEM/PUFEM). In: *Int. J. Numer. Meth. Engng.* 86 (2011), Nr. 4-5, S. 637–666. – ISSN 1097-0207
- [Brekelmans u. a. 1992] BREKELMANS, W. ; SCHREURS, P. ; VREE, J.: Continuum damage mechanics for softening of brittle materials. 93 (1992), Nr. 1-4, S. 133–143. – ISSN 0001-5970
- [Brewer und Lagace 1988] BREWER, J. C. ; LAGACE, P. A.: Quadratic Stress Criterion for Initiation of Delamination. In: *Journal of Composite Materials* 22 (1988), Nr. 12, S. 1141–1155
- [Camacho und Ortiz 1996] CAMACHO, G. ; ORTIZ, M.: Computational modelling of impact damage in brittle materials. In: *International Journal of Solids and Structures* 33 (1996), August, Nr. 20-22, S. 2899–2938. – ISSN 0020-7683
- [Chen u. a. 2001] CHEN, J.-S. ; WU, C.-T. ; YOON, S. ; YOU, Y.: A stabilized conforming nodal integration for Galerkin mesh-free methods. In: *Int. J. Numer. Meth. Engng.* 50 (2001), Nr. 2, S. 435–466. – ISSN 1097-0207
- [Cheng und Fries 2010] CHENG, K. W. ; FRIES, T.-P.: Higher-order XFEM for curved strong and weak discontinuities. In: *Int. J. Numer. Meth. Engng.* 82 (2010), Nr. 5, S. 564–590
- [Chessa u. a. 2002] CHESSA, J. ; SMOLINSKI, P. ; BELYTSCHKO, T.: The extended finite element method (XFEM) for solidification problems. In: *Int. J. Numer. Meth. Engng.* 53 (2002), Nr. 8, S. 1959–1977. – ISSN 1097-0207
- [Chessa u. a. 2003] CHESSA, J. ; WANG, H. ; BELYTSCHKO, T.: On the construction of blending elements for local partition of unity enriched finite elements. In: *Int. J. Numer. Meth. Engng.* 57 (2003), Nr. 7, S. 1015–1038. – ISSN 1097-0207
- [Chow und Wang 1987] CHOW, C. ; WANG, J.: An anisotropic theory of elasticity for continuum damage mechanics. In: *International Journal of Fracture* 33 (1987), S. 3–16
- [Coenen u. a. 2012] COENEN, E. ; KOUZNETSOVA, V. ; GEERS, M.: Novel boundary conditions for strain localization analyses in microstructural volume elements. In: *Int. J. Numer. Meth. Engng.* 90 (2012), Nr. 1, S. 1–21. – ISSN 1097-0207
- [CUSP 2014] CUSP: *sparse linear algebra library*. 2014. – URL <http://cusplibrary.github.io/>
- [Davis 2013] DAVIS, T.: *SuiteSparse 4.3.0*. 2013. – URL <https://www.cise.ufl.edu/research/sparse/SuiteSparse/>

-
- [Diethelm 2010] DIETHELM, K.: *The Analysis of Fractional Differential Equations*. Springer, 2010
- [Diethelm u. a. 2005] DIETHELM, K. ; FORD, N. ; FREED, A. ; LUCHKO, Y.: Algorithms for the fractional calculus: A selection of numerical methods. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 194 (2005), Februar, Nr. 6-8, S. 743–773. – ISSN 0045-7825
- [Diethelm und Ford 2002] DIETHELM, K. ; FORD, N. J.: Analysis of Fractional Differential Equations. In: *Journal of Mathematical Analysis and Applications* 265 (2002), Januar, Nr. 2, S. 229–248. – ISSN 0022-247X
- [Diethelm u. a. 2002] DIETHELM, K. ; FORD, N. J. ; FREED, A. D.: A Predictor-Corrector Approach for the Numerical Solution of Fractional Differential Equations. In: *Nonlinear Dynamics* 29 (2002), Juli, Nr. 1, S. 3–22
- [Diethelm und Freed 1998] DIETHELM, K. ; FREED, A. D.: *On the Solution of Nonlinear Fractional-Order Differential Equations Used in the Modeling of Viscoplasticity*. 1998
- [Diethelm und Freed 2002] DIETHELM, K. ; FREED, A. D.: *The FracPECE Subroutine for the Numerical Solution of Differential Equations of Fractional Order*. 2002
- [Dréau u. a. 2010] DRÉAU, K. ; CHEVAUGEON, N. ; MOËS, N.: Studied X-FEM enrichment to handle material interfaces with higher order finite element. In: *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 199 (2010), Juni, Nr. 29-32, S. 1922–1936
- [Dugdale 1960] DUGDALE, D. S.: Yielding of steel sheets containing slits. In: *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 8 (1960), Mai, Nr. 2, S. 100–104
- [Fish und Belytschko 2007] FISH, J. ; BELYTSCHKO, T.: *A First Course in Finite Elements*. Wiley, 2007
- [Fonseka und Krajcinovic 1981] FONSEKA, G. U. ; KRAJCINOVIC, D.: The Continuous Damage Theory of Brittle Materials, Part 2: Uniaxial and Plane Response Modes. In: *Journal of Applied Mechanics* 48 (1981), Dezember, Nr. 4, S. 816–824. – ISSN 0021-8936
- [Friedrich 1991] FRIEDRICH, C.: Relaxation and retardation functions of the Maxwell model with fractional derivatives. In: *Rheologica Acta* 30 (1991), März, Nr. 2, S. 151–158
- [Fries 2008] FRIES, T.-P.: A corrected XFEM approximation without problems in blending elements. In: *Int. J. Numer. Meth. Engrg.* 75 (2008), Nr. 5, S. 503–532
- [Fries und Belytschko 2010] FRIES, T.-P. ; BELYTSCHKO, T.: The extended/generalized finite element method: An overview of the method and its applications. In: *Int. J. Numer. Meth. Engrg.* 84 (2010), Nr. 3, S. 253–304
- [Georgescu u. a. 2013] GEORGESCU, S. ; CHOW, P. ; OKUDA, H.: GPU Acceleration for FEM-Based Structural Analysis. 20 (2013), Nr. 2, S. 111–121–. – ISSN 1134-3060

- [Glüge 2013] GLÜGE, R.: Generalized boundary conditions on representative volume elements and their use in determining the effective material properties. In: *Computational Materials Science* 79 (2013), November, Nr. 0, S. 408–416. – ISSN 0927-0256
- [Gorenflo 1997] GORENFLO, R.: *Fractals and Fractional Calculus in Continuum Mechanics*. Kap. Fractional calculus: some numerical methods, S. 277–290, Springer Verlag, Wien and New York, 1997
- [Gorenflo und Mainardi 1997] GORENFLO, R. ; MAINARDI, F.: *Fractional Calculus: Integral and Differential Equations of Fractional Order*. 1997
- [Gorenflo und Mainardi 2000] GORENFLO, R. ; MAINARDI, F.: *Essentials of Fractional Calculus*. 2000
- [Gorenflo und Mainardi 2008] GORENFLO, R. ; MAINARDI, F.: Fractional Calculus: Integral and Differential Equations of Fractional Order. In: *ArXiv e-prints: 0805.3823* (2008), Mai
- [Griffith 1921] GRIFFITH, A. A.: The Phenomena of Rupture and Flow in Solids. In: *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical or Physical Character* 221 (1921), Nr. 582-593, S. 163–198
- [Haupt 2002] HAUPT, P.: *Continuum Mechanics and Theory of Materials, 2nd Edition*. Springer Verlag Berlin Heidelberg, 2002
- [Hettich 2007] HETTICH, T. M.: *Diskontinuierliche Modellierung zur Versagensanalyse von Verbundmaterialien*, Universität Stuttgart, Dissertation, 2007
- [Hill 1963] HILL, R.: Elastic Properties of Reinforced Solids: Some Theoretical Principles. In: *J. Mech. Phys. Solids* 11 (1963), S. 357–372
- [Hill 1972] HILL, R.: On Constitutive Macro-Variables for Heterogeneous Solids at Finite Strain. In: *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences* 326 (1972), Nr. 1565, S. 131–147
- [Huerta u. a. 2003] HUERTA, A. ; RODRÍGUEZ-FERRAN, A. ; MORATA, I.: Efficient and Reliable Nonlocal Damage Models. In: KOLYMBAS, D. (Hrsg.): *Lecture Notes in Applied and Computational Mechanics* Bd. 13. Springer Berlin Heidelberg, 2003, S. 239–268. – ISSN 978-3-642-07357-1
- [Hufenbach u. a. 2011] HUFENBACH, W. ; GUDE, M. ; BÖHM, R. ; ZSCHEYGE, M.: The effect of temperature on mechanical properties and failure behaviour of hybrid yarn textile-reinforced thermoplastics. In: *Materials & Design* 32 (2011), September, Nr. 8-9, S. 4278–4288. – ISSN 0261-3069
- [Inglis u. a. 2008] INGLIS, H. M. ; GEUBELLE, P. H. ; MATOUŠ, K.: Boundary condition effects on multiscale analysis of damage localization. In: *Philosophical Magazine* 88 (2008), Juni, Nr. 16, S. 2373–2397. – ISSN 1478-6435

- [Jirásek 1998] JIRÁSEK, M.: Nonlocal models for damage and fracture: Comparison of approaches. In: *International Journal of Solids and Structures* 35 (1998), November, Nr. 31–32, S. 4133–4145. – ISSN 0020-7683
- [Jirásek und Patzák 2002] JIRÁSEK, M. ; PATZÁK, B.: Consistent tangent stiffness for nonlocal damage models. In: *Computers & Structures* 80 (2002), Juni, Nr. 14–15, S. 1279–1293. – ISSN 0045-7949
- [Kachanov 1958] KACHANOV, L. M.: Time of the rupture process under creep conditions. In: *Izv. Akad. Nauk. S.S.R. Otd. Tech. Nauk.* 8 (1958), S. 26–31
- [Kästner u. a. 2011] KÄSTNER, M. ; HAASEMANN, G. ; ULBRICHT, V.: Multiscale XFEM-modelling and simulation of the inelastic material behaviour of textile-reinforced polymers. In: *Int. J. Numer. Meth. Engng.* 86 (2011), Nr. 4-5, S. 477–498. – ISSN 1097-0207
- [Kästner u. a. 2012] KÄSTNER, M. ; OBST, M. ; BRUMMUND, J. ; THIELSCH, K. ; ULBRICHT, V.: Inelastic material behavior of polymers – Experimental characterization, formulation and implementation of a material model. In: *Mechanics of Materials* 52 (2012), September, Nr. 0, S. 40–57. – ISSN 0167-6636
- [Koeller 1984] KOELLER, R. C.: Applications of Fractional Calculus to the Theory of Viscoelasticity. In: *Journal of Applied Mechanics* 51 (1984), Nr. 2, S. 299–307
- [Krajcinovic und Fonseka 1981] KRAJCI NOVIC, D. ; FONSEKA, G. U.: The Continuous Damage Theory of Brittle Materials, Part 1: General Theory. In: *Journal of Applied Mechanics* 48 (1981), Dezember, Nr. 4, S. 809–815. – ISSN 0021-8936
- [Kuhl 2000] KUHL, E.: *Numerische Modelle für kohäsive Reibungsmaterialien*, Universität Stuttgart, Dissertation, 2000
- [Kästner 2009] KÄSTNER, M.: *Skalenübergreifende Modellierung und Simulation des mechanischen Verhaltens von textilverstärktem Polypropylen unter Nutzung der XFEM*, TU Dresden, Dissertation, 2009
- [Kästner u. a. 2013] KÄSTNER, M. ; MÜLLER, S. ; GOLDMANN, J. ; SPIELER, C. ; BRUMMUND, J. ; ULBRICHT, V.: Higher-order extended FEM for weak discontinuities - level set representation, quadrature and application to magneto-mechanical problems. In: *Int. J. Numer. Meth. Engng* 93 (2013), Nr. 13, S. 1403–1424. – ISSN 1097-0207
- [Lasserre 1998] LASSERRE, J. B.: Integration on a Convex Polytope. In: *Proceedings of the American Mathematical Society* 126 (1998), August, Nr. 8, S. 2433–2441. – ISSN 00029939
- [Lasserre 1999] LASSERRE, J. B.: Integration and Homogeneous Functions. In: *Proceedings of the American Mathematical Society* 127 (1999), März, Nr. 3, S. 813–818. – ISSN 00029939

- [Legrain u. a. 2012] LEGRAIN, G. ; CHEVAUGEON, N. ; DRÉAU, K.: High order X-FEM and levelsets for complex microstructures: Uncoupling geometry and approximation. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 241–244 (2012), Oktober, Nr. 0, S. 172–189. – ISSN 0045-7825
- [Lemaitre 1971] LEMAITRE, J.: Evaluation of dissipation and damage in metals, submitted to dynamic loading. In: *Proc. I.C.M. I.* Kyoto, Japan, 1971
- [Lemaitre 1984] LEMAITRE, J.: How to use damage mechanics. In: *Nuclear Engineering and Design* 80 (1984), Juli, Nr. 2, S. 233–245. – ISSN 0029-5493
- [Lemaitre 1985] LEMAITRE, J.: A Continuous Damage Mechanics Model for Ductile Fracture. In: *Journal of Engineering Materials and Technology* 107 (1985), Januar, Nr. 1, S. 83–89. – ISSN 0094-4289
- [Liu u. a. 2007] LIU, G. ; DAI, K. ; NGUYEN, T.: A Smoothed Finite Element Method for Mechanics Problems. 39 (2007), Nr. 6, S. 859–877–. – ISSN 0178-7675
- [Lubliner 1972] LUBLINER, J.: On the thermodynamic foundations of non-linear solid mechanics. In: *International Journal of Non-Linear Mechanics* 7 (1972), Nr. 3, S. 237–254. – ISSN 0020-7462
- [Lubliner 1973] LUBLINER, J.: On the structure of the rate equations of materials with internal variables. In: *Acta Mechanica* 17 (1973), Nr. 1-2, S. 109–119. – ISSN 0001-5970
- [Macioł u. a. 2010] MACIOŁ, P. ; PŁASZEWSKI, P. ; BANAŚ, K.: 3D finite element numerical integration on GPUs. In: *Procedia Computer Science* 1 (2010), Mai, Nr. 1, S. 1093–1100. – ISSN 1877-0509
- [Mainardi und Gorenflo 2000] MAINARDI, F. ; GORENFLO, R.: On Mittag-Leffler-type functions in fractional evolution processes. In: *Journal of Computational and Applied Mathematics* 118 (2000), Nr. 1-2, S. 283 – 299. – ISSN 0377-0427
- [Mainardi und Gorenflo 2007] MAINARDI, F. ; GORENFLO, R.: Time-fractional derivatives in relaxation processes: a tutorial survey. In: *Fractional Calculus and Applied Analysis* 10 No 3 (2007), S. 269–308
- [Mazars 1981] MAZARS, J.: Mechanical damage and fracture of concrete structure. In: *Proc. I.C.F.5.* Cannes, France, 1981, S. 1499–1506
- [Mazars 1986] MAZARS, J.: A description of micro- and macroscale damage of concrete structures. In: *Engineering Fracture Mechanics* 25 (1986), Nr. 5–6, S. 729–737. – ISSN 0013-7944
- [Melenk und Babuška 1996] MELENK, J. ; BABUŠKA, I.: The partition of unity finite element method: Basic theory and applications. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 139 (1996), Dezember, Nr. 1–4, S. 289–314. – ISSN 0045-7825

-
- [Miller und Ross 1993] MILLER, K. S. ; ROSS, B.: *An Introduction to the Fractional Calculus and Fractional Differential Equations*. John Wiley & Sons; 1 edition (May 19, 1993), 1993
- [Mittag-Leffler 1903] MITTAG-LEFFLER, M. G.: Sur la nouvelle fonction $E_\alpha(x)$. In: *C. R. Acad. Sci. Paris (Ser. II)* 137 (1903), S. 554–558
- [Moumnassi u. a. 2011] MOUMNASSI, M. ; BELOUETTAR, S. ; BÉCHET, E. ; S.P., B. ; QUOIRIN, D. ; POTIER-FERRY, M.: Finite element analysis on implicitly defined domains: An accurate representation based on arbitrary parametric surfaces. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 200 (2011), S. 774–796
- [Mousavi und Sukumar 2010a] MOUSAVI, S. ; SUKUMAR, N.: Generalized Duffy transformation for integrating vertex singularities. 45 (2010), Nr. 2-3, S. 127–140. – ISSN 0178-7675
- [Mousavi und Sukumar 2010b] MOUSAVI, S. ; SUKUMAR, N.: Generalized Gaussian quadrature rules for discontinuities and crack singularities in the extended finite element method. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 199 (2010), Dezember, Nr. 49–52, S. 3237–3249. – ISSN 0045-7825
- [Mousavi und Sukumar 2011] MOUSAVI, S. ; SUKUMAR, N.: Numerical integration of polynomials and discontinuous functions on irregular convex polygons and polyhedrons. 47 (2011), Nr. 5, S. 535–554. – ISSN 0178-7675
- [Mousavi u. a. 2010] MOUSAVI, S. E. ; XIAO, H. ; SUKUMAR, N.: Generalized Gaussian quadrature rules on arbitrary polygons. In: *Int. J. Numer. Meth. Engng.* 82 (2010), Nr. 1, S. 99–113. – ISSN 1097-0207
- [Moës u. a. 2003] MOËS, N. ; CLOIREC, M. ; CARTRAUD, P. ; REMACLE, J.-F.: A computational approach to handle complex microstructure geometries. In: *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.* 192 (2003), Nr. 28-30, S. 3163–3177. – Multiscale Computational Mechanics for Materials and Structures
- [Moës u. a. 1999] MOËS, N. ; DOLBOW, J. ; BELYTSCHKO, T.: A finite element method for crack growth without remeshing. In: *Int. J. Numer. Meth. Engng.* 46 (1999), Nr. 1, S. 131–150
- [Müller u. a. 2011] MÜLLER, S. ; KÄSTNER, M. ; BRUMMUND, J. ; ULBRICHT, V.: A nonlinear fractional viscoelastic material model for polymers. In: *Computational Materials Science* 50 (2011), August, Nr. 10, S. 2938–2949. – ISSN 0927-0256
- [Müller u. a. 2013] MÜLLER, S. ; KÄSTNER, M. ; BRUMMUND, J. ; ULBRICHT, V.: On the numerical handling of fractional viscoelastic material models in a FE analysis. In: *Computational Mechanics* 51 (2013), Nr. 6, S. 999–1012. – ISSN 0178-7675
- [Natarajan u. a. 2009] NATARAJAN, S. ; BORDAS, S. ; ROY MAHAPATRA, D.: Numerical integration over arbitrary polygonal domains based on Schwarz–Christoffel conformal mapping. In: *Int. J. Numer. Meth. Engng.* 80 (2009), Nr. 1, S. 103–134. – ISSN 1097-0207

- [Natarajan u. a. 2010] NATARAJAN, S. ; MAHAPATRA, D. R. ; BORDAS, S. P. A.: Integrating strong and weak discontinuities without integration subcells and example applications in an XFEM/GFEM framework. In: *Int. J. Numer. Meth. Engng.* 83 (2010), Nr. 3, S. 269–294
- [Noll 1972] NOLL, W.: A new mathematical theory of simple materials. In: *Archive for Rational Mechanics and Analysis* 48 (1972), Nr. 1, S. 1–50
- [NVIDIA 2013] NVIDIA: *CUDA C PROGRAMMING GUIDE*. 2013. – URL <http://docs.nvidia.com/cuda/>
- [Oldham und Spanier 1974] OLDHAM, K. B. ; SPANIER, J.: *The Fractional Calculus*. Academic Press, New York, 1974
- [Ortiz und Pandolfi 1999] ORTIZ, M. ; PANDOLFI, A.: Finite-deformation irreversible cohesive elements for three-dimensional crack-propagation analysis. In: *Int. J. Numer. Meth. Engng.* 44 (1999), Nr. 9, S. 1267–1282
- [Osher und Sethian 1988] OSHER, S. ; SETHIAN, J. A.: Fronts propagating with curvature-dependent speed: Algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations. In: *Journal of Computational Physics* 79 (1988), November, Nr. 1, S. 12–49
- [Park u. a. 2009] PARK, K. ; PEREIRA, J. P. ; DUARTE, C. A. ; PAULINO, G. H.: Integration of singular enrichment functions in the generalized/extended finite element method for three-dimensional problems. In: *Int. J. Numer. Meth. Engng.* 78 (2009), Nr. 10, S. 1220–1257. – ISSN 1097-0207
- [Pereira u. a. 2009] PEREIRA, J. P. ; DUARTE, C. A. ; GUOY, D. ; JIAO, X.: hp-Generalized FEM and crack surface representation for non-planar 3-D cracks. In: *Int. J. Numer. Meth. Engng.* 77 (2009), Nr. 5, S. 601–633. – ISSN 1097-0207
- [Pijaudier-Cabot und Bažant 1987] PIJAUDIER-CABOT, G. ; BAŽANT, Z. P.: Nonlocal Damage Theory. In: *Journal of Engineering Mechanics* 113 (1987), S. 1512–1533
- [Płaszewski u. a. 2010] PŁASZEWSKI, P. ; MACIOŁ, P. ; BANAŚ, K.: Finite Element Numerical Integration on GPUs. In: WYRZYKOWSKI, R. (Hrsg.) ; DONGARRA, J. (Hrsg.) ; KARCZEWSKI, K. (Hrsg.) ; WASNIEWSKI, J. (Hrsg.): *Lecture Notes in Computer Science* Bd. 6067. Springer Berlin Heidelberg, 2010, S. 411–420. – ISSN 978-3-642-14389-2
- [Podlubny 1999] PODLUBNY, I.: *Fractional Differential Equations*. Academic Press, San Diego, 1999
- [Rabotnov 1963] RABOTNOV, Y. N.: On the Equation of State of Creep. In: *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers* 178 (1963), Nr. 1, S. 2–117–2–122
- [Schürmann 2005] SCHÜRMAN, H.: *Konstruieren mit Faser-Kunststoff-Verbunden*. Springer Verlag Berlin-Heidelberg, 2005

-
- [Simo 1987] SIMO, J. C.: On a fully three-dimensional finite-strain viscoelastic damage model: Formulation and computational aspects. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 60 (1987), Februar, Nr. 2, S. 153–173. – ISSN 0045-7825
- [Sluys 1992] SLUYS, L.: *Wave Propagation, Localisation and Dispersion in Softening Solids*, TU Delft, Dissertation, 1992
- [Smit und de Vries 1970] SMIT, W. ; VRIES, H. de: Rheological models containing fractional derivatives. In: *Rheologica Acta* 9 (1970), November, Nr. 4, S. 525–534
- [Stolarska u. a. 2001] STOLARSKA, M. ; CHOPP, D. L. ; MOËS, N. ; BELYTSCHKO, T.: Modeling crack growth by level sets in the extended finite element method. In: *Int. J. Numer. Meth. Engng.* 51 (2001), Nr. 8, S. 943–960
- [Sukumar u. a. 2001] SUKUMAR, N. ; CHOPP, D. L. ; MOËS, N. ; BELYTSCHKO, T.: Modeling holes and inclusions by level sets in the extended finite-element method. In: *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.* 190 (2001), September, Nr. 46-47, S. 6183–6200
- [Truesdell und Noll 2004] TRUESDELL, C. ; NOLL, W. ; ANTMAN, S. S. (Hrsg.): *The non-linear field theories of mechanics*. Springer, 2004
- [Ventura 2006] VENTURA, G.: On the elimination of quadrature subcells for discontinuous functions in the eXtended Finite-Element Method. In: *Int. J. Numer. Meth. Engng.* 66 (2006), Nr. 5, S. 761–795
- [de Vree u. a. 1995] VREE, J. de ; BREKELMANS, W. ; GILS, M. van: Comparison of nonlocal approaches in continuum damage mechanics. In: *Computers & Structures* 55 (1995), Mai, Nr. 4, S. 581–588. – ISSN 0045-7949
- [Weilbeer 2005] WEILBEER, M.: *Efficient Numerical Methods for Fractional Differential Equations and their Analytical Background*, Technical University of Braunschweig, Dissertation, 2005
- [Wells und Sluys 2001] WELLS, G. N. ; SLUYS, L. J.: A new method for modelling cohesive cracks using finite elements. In: *Int. J. Numer. Meth. Engng.* 50 (2001), Nr. 12, S. 2667–2682
- [Wriggers 2001] WRIGGERS, P.: *Nichtlineare Finite-Element-Methoden*. Berlin ; Heidelberg [u.a.] : Springer, 2001
- [Zi und Belytschko 2003] ZI, G. ; BELYTSCHKO, T.: New crack-tip elements for XFEM and applications to cohesive cracks. In: *Int. J. Numer. Meth. Engng.* 57 (2003), Nr. 15, S. 2221–2240
- [Zilian und Legay 2008] ZILIAN, A. ; LEGAY, A.: The enriched space–time finite element method (EST) for simultaneous solution of fluid–structure interaction. In: *Int. J. Numer. Meth. Engng.* 75 (2008), Nr. 3, S. 305–334. – ISSN 1097-0207

Anhang

Fraktionale Differential- und Integralrechnung

Die fraktionale Differential- und Integralrechnung erlaubt die Berücksichtigung von gebrochenrationalen Ableitungs- und Integrationsordnungen α . Die historische Entwicklung und die fundamentalen Zusammenhänge wurden unter Anderen von Gorenflo und Mainardi (1997, 2000, 2008) sowie Oldham und Spanier (1974) zusammengefasst. Im Folgenden sind lediglich die wesentlichen und für die Anwendung im Rahmen der Materialmodellierung notwendigen Definitionen und Verfahren dargestellt.

A Fraktionale Differential- und Integraloperatoren

In der Literatur sind unterschiedliche Zugänge zur fraktionalen Differentialrechnung dokumentiert. Sie unterscheiden sich durch die Definition des fraktionalen Ableitungsoperators. Die am häufigsten verwendeten Definitionen wurden von RIEMANN-LIOUVILLE, CAPUTO und GRÜN-WALD-LETNIKOV eingeführt (vgl. Diethelm (2010); Oldham und Spanier (1974)). Die beiden erstgenannten Definitionen basieren auf Integralformulierungen und können daher als kontinuierliche Ansätze charakterisiert werden. Basierend auf einem generalisierten Differenzenquotienten, repräsentiert der letztgenannte Ansatz demgegenüber einen diskreten Zugang. In Anlehnung an das übliche Vorgehen im Rahmen der Materialmodellformulierung, wird in der vorliegenden Arbeit ausschließlich die Definition nach RIEMANN-LIOUVILLE verwendet.

Die RIEMANN-LIOUVILLE Definition der fraktionalen Ableitung basiert auf der CAUCHY-schen Formel zur Berechnung der n -ten Stammfunktion

$$I^n f(x) = \frac{1}{(n-1)!} \int_0^x (x-\xi)^{n-1} f(\xi) d\xi, \quad 0 < x < b, \quad n \in \mathbb{N}. \quad (\text{A.1})$$

Unter Verwendung der Gammafunktion

$$\Gamma(x) = \int_0^\infty \xi^{x-1} \exp(-\xi) d\xi, \quad x \in \mathbb{R}, \quad (\text{A.2})$$

kann (A.1) auf beliebige positive, reelle Ordnungen α erweitert werden

$$I^\alpha f(x) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_0^x (x-\xi)^{\alpha-1} f(\xi) d\xi, \quad x > 0, \quad \alpha \in \mathbb{R}^+ \setminus \{0\}. \quad (\text{A.3})$$

und definiert damit den fraktionalen Integraloperator I^α . Der fraktionale Differentialoperator D^α ergibt sich durch die m -fache Differentiation von (A.3) zu

$$D^\alpha f(x) = \begin{cases} \frac{d^m}{dx^m} \left[\frac{1}{\Gamma(m-\alpha)} \int_0^x (x-\xi)^{m-\alpha-1} f(\xi) d\xi \right], & m-1 < \alpha < m; \\ \frac{d^m}{dx^m} f(x), & \alpha = m \end{cases} \quad (\text{A.4})$$

mit $\alpha \in \mathbb{R}^+ \setminus 0$ und $m \in \mathbb{N}^+$. Weiterhin soll gelten, dass $D^0 = I^0 = \tilde{I}$, mit \tilde{I} dem Einheitsoperator. Es kann gezeigt werden, dass die Rechts- und Linksinverse des fraktionalem Integraloperators (A.3) unter Verwendung des fraktionalem Ableitungsoperators (A.4) und der fraktionalem Ordnung $m - 1 < \alpha < m$ den Einheitsoperator ergibt $D^\alpha I^\alpha = I^\alpha D^\alpha = \tilde{I}$.

Anhand von (A.3) und (A.4) wird deutlich, dass es sich bei dem fraktionalem Integral und der fraktionalem Ableitung um nicht-lokale Operatoren handelt. Dies bedeutet, dass die Ableitung respektive das Integral einer Funktion f an einem Punkt x von dem gesamten Verlauf der Funktion $f(\xi)$ im Bereich $\xi \in [0; x]$ abhängt. Entsprechend muss für die Auswertung von fraktionalem Operatoren der gesamte Verlauf der entsprechenden Funktionen gespeichert werden. Ein weiterer wesentlicher Unterschied zwischen einer fraktionalem Ableitung nach RIEMANN-LIOUVILLE und einer ganzzahligen Ableitung ist der Umstand, dass die fraktionalem Ableitung einer konstanten Größe ungleich null sein kann.

Die Lösung linearer fraktionalem Differential- und Integralgleichungen kann häufig durch die Anwendung der LAPLACE-Transformation erfolgen (vgl. Miller und Ross (1993)). Für die Transformation der fraktionalem Ableitung nach RIEMANN-LIOUVILLE in den LAPLACE Raum gilt

$$\mathcal{L}\{D^\alpha f(x); s\} = s^\alpha \tilde{f}(s) - \sum_{i=0}^{m-1} s^{m-1-i} D^i g(0^+), \quad \text{mit } g(t) = I^{m-\alpha} f(t) \quad (\text{A.5})$$

und $m - 1 \leq \alpha \leq m$, $m \in \mathbb{N}^+$, $s \in \mathbb{C}$.

B Iterative Lösung nichtlinearer fraktionalem Differentialgleichungen

Die im vorhergehenden Abschnitt angegebenen fraktionalem Operatoren treten häufig im Zusammenhang mit fraktionalem Differential- und Integralgleichungen auf. Während die meisten linearen Gleichungen durch die Anwendung der LAPLACE-Transformation gelöst werden können (vgl. Diethelm (2010); Gorenflo und Mainardi (1997); Podlubny (1999)), erfordern nichtlineare Zusammenhänge im Allgemeinen alternative Lösungsverfahren. Eine Auswahl numerischer Lösungsverfahren wurden von Diethelm u. a. (2005, 2002); Diethelm und Freed (1998, 2002) sowie Weilbeer (2005) angegeben.

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit erfolgt die Lösung nichtlinearer fraktionalem Differentialgleichungen auf Basis des von Diethelm u. a. (2002) vorgestellten numerischen Lösungsverfahrens. Dessen Darstellung erfolgt anhand der allgemeinen fraktionalem Differentialgleichung

$$D^\alpha f(x) = u(x, f(x)), \quad \alpha, x \in \mathbb{R}^+. \quad (\text{B.6})$$

Die fraktionalem Ableitung der zu ermittelnden Funktion $f(x)$ ist dabei gleich einer, potentiell nichtlinearen, Funktion $u(x, f(x))$. Die Allgemeinheit dieser Gleichung sowie des Lösungsverfahrens erlaubt eine Anwendung im Rahmen der Materialmodellformulierung in Abschnitt 5.2. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit werden im Folgenden homogene Anfangsbedingungen für alle Funktionen und Variablen angenommen.

Das numerische Lösungsverfahren basiert auf der Kombination eines generalisierten impliziten ADAMS-MOULTON- und einem expliziten ADAMS-BASHFORTH-Verfahren. Beide Techniken sind zu einem Prädiktor-Korrektor-Verfahren zusammengefasst.

Mit (A.4) als Definition für den fraktionalen Ableitungsoperator in (B.6) kann die Differentialgleichung als stark singuläre VOLTERRA Integralgleichung zweiter Art klassifiziert werden. Entsprechend den Ausführungen von Weilbeer (2005) würde eine direkte numerische Lösung spezielle Regularisierungsverfahren verlangen. Um dies zu vermeiden, kann (B.6) in eine gleichwertige fraktionale Integralgleichung überführt werden. Hierfür wird zunächst der fraktionale Integraloperator (A.3) auf beide Seiten der Differentialgleichung angewendet. Unter Verwendung der homogenen Anfangsbedingungen, kann (B.6) in

$$f(x) = I^\alpha u(x, f(x)) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_0^x (x - \xi)^{\alpha-1} u(\xi, f(\xi)) d\xi \quad (\text{B.7})$$

überführt werden. Erneut handelt es sich bei (B.7) um eine VOLTERRA Integralgleichung zweiter Art, jedoch mit einem schwach singulären Integranden. Ein Beweis das die Lösung von (B.7) auch für (B.6) zutrifft wurde von Diethelm und Ford (2002) veröffentlicht.

Für die numerische Lösung von (B.7) wird der Definitionsbereich $[0; x]$ zunächst in eine endliche Anzahl von Stützstellen x_j mit $j = 0, 1, \dots, n + 1$ unterteilt. Weiterhin wird angenommen, dass die Lösung der Funktion $f(x_j)$ an allen Punkten x_j , $j = 0, 1, \dots, n$ bekannt und die Lösung am Punkt x_{n+1} zu ermitteln ist. In einem ersten Schritt wird das Integral der rechten Seite in eine Summe von Teilintegralen zerlegt

$$\int_0^{x_{n+1}} (x_{n+1} - \xi)^{\alpha-1} u(\xi, f(\xi)) d\xi \approx \sum_{i=1}^{n+1} \int_{x_{i-1}}^{x_i} (x_{n+1} - \xi)^{\alpha-1} \tilde{u}_i(\xi, f(\xi)) d\xi. \quad (\text{B.8})$$

Jedes Teilintegral kann nun analytisch durch eine Approximation des Funktion $\tilde{u}_i(\xi, f(\xi))$ gelöst werden. Mit der Annahme eines stückweise linearen Verlaufs (Trapezregel), führt diese Methode zu einem impliziten ADAMS-MOULTON-Verfahren. Das Gesamtintegral in (B.7) kann damit durch eine Summe über gewichtete diskrete Funktionswerte ersetzt werden

$$\sum_{i=1}^{n+1} \int_{x_{i-1}}^{x_i} (x_{n+1} - \xi)^{\alpha-1} \tilde{u}_i(\xi, f(\xi)) d\xi = \sum_{i=0}^{n+1} a_{i,n+1} u_i(x_i, f(x_i)). \quad (\text{B.9})$$

Für die Wichtungskoeffizienten gilt

$$\begin{aligned}
 a_{0,n+1} &= \frac{(x_{n+1} - x_1)^{\alpha+1} + x_{n+1}^\alpha(\alpha x_1 + x_1 - x_{n+1})}{x_1 \alpha(\alpha + 1)}, \\
 a_{i,n+1} &= \frac{(x_{n+1} - x_{i-1})^{\alpha+1} + (x_{n+1} - x_i)^\alpha[\alpha(x_{i-1} - x_i) + x_{i-1} - x_{n+1}]}{(x_i - x_{i-1})\alpha(\alpha + 1)} \\
 &\quad + \frac{(x_{n+1} - x_{i+1})^{\alpha+1} - (x_{n+1} - x_i)^\alpha[\alpha(x_i - x_{i+1}) - x_{i+1} + x_{n+1}]}{(x_{i+1} - x_i)\alpha(\alpha + 1)}, \quad (\text{B.10}) \\
 &\quad \text{mit } 1 \leq i \leq n, \\
 a_{n+1,n+1} &= \frac{(x_{n+1} - x_n)^\alpha}{\alpha(\alpha + 1)}.
 \end{aligned}$$

Das Einsetzen der Quadraturregel in (B.7) führt zu einer diskretisierten Form der Integralgleichung

$$f(x_{n+1}) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \left(\sum_{i=0}^n a_{i,n+1} u(x_i, f(x_i)) + a_{n+1,n+1} u(x_{n+1}, f(x_{n+1})) \right). \quad (\text{B.11})$$

Zur Bestimmung der Lösung der Differentialgleichung verbleibt die Isolation des Funktionswertes $f(x_{n+1})$. Ist dies aufgrund der Struktur der Gleichung nicht möglich, kann die Lösung iterativ innerhalb eines Prädiktor-Korrektor-Verfahren ermittelt werden. Eine erste Abschätzung des Funktionswertes $f(x_{n+1})$ in der rechten Seite von (B.11) kann auf Basis eines expliziten ADAMS-BASHFORTH-Verfahrens ermittelt werden (vgl. Diethelm u. a. (2002)). Im Gegensatz zu dem zuvor beschriebenen impliziten Verfahren erfolgt hierbei die Approximation der Funktion $\tilde{u}_i(\xi, f(\xi)) = u(x_{i-1}, f(x_{i-1}))$ innerhalb eines Teilintegrals durch einen konstanten Verlauf. Die Summe über alle Teilintegrale in (B.8) kann damit durch die Quadraturregel

$$\sum_{i=1}^{n+1} \int_{x_{i-1}}^{x_i} (x_{n+1} - \xi)^{\alpha-1} \tilde{u}_i(\xi, f(\xi)) d\xi = \sum_{i=0}^n b_{i,n+1} u(x_i, f(x_i)) \quad (\text{B.12})$$

ersetzt werden. Für die Koeffizienten gilt

$$b_{i,n+1} = \frac{(x_{n+1} - x_i)^\alpha - (x_{n+1} - x_{i+1})^\alpha}{\alpha}. \quad (\text{B.13})$$

Das Einsetzen der Quadraturregel in (B.7) erlaubt die Lösung der fraktionalen Integralgleichung basierend ausschließlich auf den bereits bekannten Funktionswerten

$${}_p f(x_{n+1}) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \left(\sum_{i=0}^n b_{i,n+1} u(x_i, f(x_i)) \right). \quad (\text{B.14})$$

Ausgehend von dem Prädiktorwert ${}_p f$ kann die Lösung anhand von (B.11) korrigiert werden

$$f(x_{n+1}) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \left(\sum_{i=0}^n a_{i,n+1} u(x_i, f(x_i)) + a_{n+1,n+1} u(x_{n+1}, {}_p f(x_{n+1})) \right). \quad (\text{B.15})$$

Durch erneutes Einsetzen der gewonnen Lösung in (B.15) als neuen Prädiktorwert kann das Ergebnis sukzessiv bis zum Erreichen eines Abbruchkriteriums verbessert werden.