

Neue Bewertungskriterien für geschädigte Strukturen

Mario Timmel^a, Michael Kaliske^b, Stefan Kolling^c

^a Institut für Statik und Dynamik der Tragstrukturen, Universität Leipzig
Marschnerstraße 31, 04109 Leipzig
E-Mail: mtimmel@wifa.uni-leipzig.de

^b Institut für Statik und Dynamik der Tragstrukturen, Universität Leipzig
Marschnerstraße 31, 04109 Leipzig
E-Mail: kaliske@wifa.uni-leipzig.de

^c DaimlerChrysler AG, EP/SPB, HPC X411, 71059 Sindelfingen
E-Mail: stefan.kolling@daimlerchrysler.com

Zusammenfassung:

Im vorliegenden Bericht wird die Anwendung der Methode der materiellen Kräfte, alternativ Konfigurations- oder verallgemeinerte Kräfte genannt, für den Bereich der numerischen Simulation mittels der Finiten Elemente Methode vorgestellt. Auf der Basis materieller Kräfte erfolgen zunehmend Prognosen hinsichtlich der bruchmechanischen Eigenschaften von Strukturen, wobei sich vertiefende Betrachtungen bisher vorwiegend auf statische Anwendungen beschränkten. In diesem Zusammenhang erfolgt die Erweiterung für hochdynamische Beanspruchungen. Dabei werden zunächst die theoretischen Aspekte dargestellt, woraufhin sich anschauliche Beispiele anschließen. Dabei wird das Verhalten von gekerbten respektive vorgeschädigten Strukturen analysiert. Zudem erfolgt eine numerische Betrachtung von Systemen mit inhomogener Steifigkeit und solchen mit impulsartiger Belastung unter der Ausbildung von Stoßwellen. Eine weitere hier dargestellte Anwendung besteht in der Untersuchung von Schädigungsphänomenen der Mikroebene, um zusätzlich die Ursachen von Steifigkeitsreduktionen in geschädigten Bereichen abzubilden. Abschließend wird die Anwendung der materiellen Kräfte für eine Netzoptimierung diskutiert. Die Darstellungen erfolgen allgemein für hyperelastische Werkstoffe unter großen Verzerrungen.

Keywords: Explizite Finite Elemente Methode, Materielle Kräfte, Mikromechanik, Hyperelastizität

Abstract:

The topic of our concern in the present paper is the discussion of a new assessment criterion for damaged structures based on material forces, also known as configurational forces. In general, we assume hyperelastic materials at large strains. The application of the material forces is given in the context of numerical simulation based on the Finite Element Method using an explicit solver for time integration. By using material forces, predictions of the fracture mechanical behaviour of structures with initial cracks can be performed. Therefore, this tool finds an increasing acceptance in industrial application. Since studies published so far have been performed rather for quasi static loaded systems, we take our attention to structures with high strain rate loading with respect to the application in short-time dynamics, impact and crash simulation. At first, we discuss theoretical aspects of the formulation and, subsequently, we show illustrative examples like damaged structures with notches. Additionally, we present systems under shockwave induced loads. As a further application, we investigate the damage phenomena on the micro scale. Based on the material force method, reasons for reduction of stiffness in damaged zones are identified. Finally, we discuss the application of material forces in the context of mesh optimization.

Keywords: Explicit Finite Elemente Method, Materiel Forces, Micromechanics, Hyperelasticity

1 Einführung

Im Rahmen der Modellierung von hyperelastischen Materialien ist die Berücksichtigung von Schädigungseffekten die Voraussetzung für eine möglichst realitätsnahe Erfassung der komplexen Werkstoffeigenschaften. Eine wesentliche Bedeutung erlangt in diesem Kontext die Methode der materiellen Kräfte. Mithilfe dieser Formulierung erhält man die zusätzliche Information des Gradienten der Energie in Abhängigkeit vom materiellen Ort. Auf dieser Basis ist eine Voraussage einer eventuellen Strukturänderung möglich.

Auf der Makroebene eines Systems mit Initialrissen können somit unter anderem Sensitivitätsanalysen an Rissspitzen durchgeführt werden. Dadurch ist ausgehend von experimentellen Daten numerisch eine gezielte Prognose hinsichtlich des Rissfortschrittsverhaltens von Strukturen möglich. Als numerische Verfahren kommen hierbei im Wesentlichen die Randelementmethode und die FEM zum Einsatz. Die Güte ist bei letzterer hierbei verstärkt abhängig von der Vernetzung und dem Grad der Ansatzfunktionen. Hinzu kommt bei dynamischen Problemstellungen und der Verwendung expliziter Zeitintegrationen die Zeitschrittweite, die eine zusätzliche Restriktion der Elementgröße darstellt.

Werden Bauteile hochdynamischen Beanspruchungen ausgesetzt wie beispielsweise durch Detonationen oder Einwirkungen durch Hochgeschwindigkeitsprojektilen (siehe Du Bois [2]) können Stoßwellen initiiert werden, die lokale Bereiche der Strukturen signifikant schädigen. Auf der Grundlage der in diesem Beitrag vorgestellten Methode ist eine Identifikation derartiger Zonen möglich, womit, gestützt auf diese Aussagen, die Werkstoffbeziehungen infolge Schädigung modifiziert werden können.

Neben diesen speziellen Beispielen für Schädigung weisen viele Materialien häufig keine oberflächlich erkennbare Ursache für den Abbau von Steifigkeit auf. Die numerische Abbildung dieses Materialaufweichens erfolgt dabei weitestgehend mittels phänomenologischer Ansätze (siehe z.B. TIMMEL et al. [15]), bei denen durch explizite Schädigungsvariablen die Potentiale und somit auch die Spannungen reduziert werden. Die hohe Effizienz derartiger Ansätze korreliert jedoch bei komplexen Beanspruchungen mit geringer oder schlecht reproduzierbaren Aussagen der Numerik. Die Ursache besteht darin, dass der Steifigkeitsabbau auf Phänomen der mikroskopischen Ebene basiert. In diesem Zusammenhang seien Veränderungen von Mikroheterogenitäten bei Metallen (vgl. KOLLING [8] und MÜLLER [11]) sowie die Eliminierung von molekularen Netzwerkverbindungen bei Elastomeren (siehe MULLINS [10]) genannt. Mittels gewöhnlicher Werkstoffbeziehungen können die Einflüsse der Mikroebene nur verschmiert berücksichtigt werden. Die im vorliegenden Beitrag aufgezeigte Möglichkeit, solche mikromechanischen Einflüsse auch in den makroskopischen Konstitutivgleichungen zu berücksichtigen erfolgt über die Methode der materiellen Kräfte. Diese werden für eine Beschreibung der Entwicklung mikroskopischer Partikel verwendet, wobei geeignete Homogenisierungsverfahren benötigt werden, welche die beiden Ebenen miteinander verknüpfen.

Eine weitere Anwendung der materiellen Kräfte über die Beschreibung von Schädigungsphänomenen hinaus ergibt sich in der Beurteilung der Netzgüte in der FEM, da infolge der räumlichen Diskretisierung eines Continuums die Ergebnisse netzabhängig sind.

In diesem Beitrag werden zunächst einige theoretische Grundlagen sowie spezielle Aspekte im Rahmen der Implementierung der Methode in LS-DYNA (siehe auch KOLLING & ACKERMANN [17]) dargestellt, woraufhin sich eine ausführliche Diskussion anschließt, in der Anwendungsbeispiele untersucht werden, die verschiedene Schädigungsphänomene aufweisen.

2 Methode der materiellen Kräfte

Zunächst werden einige theoretische Aspekte dieser Methode auf der Basis der Ausarbeitungen von ESHELBY [4], [6] gezeigt. Der Grundgedanke besteht darin, die Potentiale einer Struktur unter einem bestimmten Beanspruchungszustand sowohl für die Ausgangskonfiguration als auch für geringfügige Variationen von dieser zu ermitteln. Die Unterschiede in den Potentialen werden dann auf die Veränderungen der Strukturform bezogen. Somit gelingt die Aussage, welche Modifikation in ihrer Form eine Struktur erstrebt, um ihre Gesamtenergie zu minimieren.

Für den Fall einer beliebigen dynamischen Beanspruchung wird der Zustand einer Struktur über die kinetische Potentialdichte beziehungsweise Lagrange-Dichte L als die Differenz aus der von der materiellen Position \mathbf{X} abhängigen kinetischen sowie der potentiellen Energiedichte W beschrieben. Im nächsten Schritt wird nun der Gradient der Lagrange-Dichte nach \mathbf{X} gebildet

$$\nabla_{\mathbf{x}} L = \nabla_{\mathbf{x}} \left(\frac{1}{2} \rho_0(\mathbf{X}) \mathbf{v}^2 - W(\mathbf{F}, \mathbf{X}) \right) = \frac{1}{2} \nabla_{\mathbf{x}} \rho_0 \mathbf{v}^2 + \rho_0 (\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{v})^T \mathbf{v} - \underline{\mathbf{P}} : \nabla_{\mathbf{x}} \underline{\mathbf{F}} - \left. \frac{\partial W}{\partial \mathbf{X}} \right|_{\text{expl.}} \quad (1)$$

In Gleichung (1) bezeichnen \mathbf{v} die Geschwindigkeit materieller Punkte, ρ_0 die ursprüngliche Materialdichte sowie $\underline{\mathbf{P}}$ den ersten Piola-Kirchhoff-Spannungstensor, welcher die Spannungen bezogen auf die Ausgangskonfiguration, auch Ingenieurspannungen, angibt. Der rechte Teil der Gleichung (1) wird im nächsten Schritt modifiziert, indem einzelne Anteile durch äquivalente Größen ersetzt werden. Der materielle Gradient der Geschwindigkeiten ist dabei identisch mit der Zeitableitung des Deformationsgradienten, $\nabla_x \mathbf{v} = \dot{\underline{\mathbf{F}}}$, und der Ausdruck $\underline{\mathbf{P}} : \nabla_x \underline{\mathbf{F}}$ ist gleich $\text{Div}(\underline{\mathbf{F}}^T \underline{\mathbf{P}}) - \underline{\mathbf{F}}^T \text{Div} \underline{\mathbf{P}}$. Der letzte Term entspricht dabei der linken Seite der lokalen räumlichen Impulsbilanz $\text{Div} \underline{\mathbf{P}} = \rho_0 \dot{\mathbf{v}} - \mathbf{f}$. Mit \mathbf{f} werden die Volumenkräfte bezeichnet. Unter zusätzlicher Verwendung der Äquivalenz $\nabla_x \underline{\mathbf{L}} = \text{Div}(\underline{\mathbf{L}})$ ergibt sich schließlich die lokale materielle Impulsbilanz

$$\text{Div} \left(\underbrace{-\underline{\mathbf{L}} - \underline{\mathbf{F}}^T \underline{\mathbf{P}}}_{\underline{\mathbf{M}}} \right) + \underbrace{\frac{1}{2} \nabla_x \rho_0 \mathbf{v}^2 - \underline{\mathbf{F}}^T \mathbf{f} - \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial \mathbf{X}}}_{\mathbf{g}} \Big|_{\text{expl.}} + \underbrace{\rho_0 \overline{(\underline{\mathbf{F}}^T \mathbf{v})}}_{\underline{\mathbf{p}}} = \mathbf{0} \Leftrightarrow \mathbf{g} = -\text{Div} \underline{\mathbf{M}} - \dot{\underline{\mathbf{p}}}, \quad (2)$$

mit $\underline{\mathbf{M}}$ als dynamischem Energie-Impulstensor und $\underline{\mathbf{p}}$ als Pseudo-Impulsvektor (siehe KOLLING, MUELLER [9] für eine ausführliche Herleitung). Mittels der materiellen Kraft \mathbf{g} gelingt nach Gleichung (2) eine Identifikation in der Struktur enthaltener Volumenkräfte sowie Inhomogenitäten in Form variierender Dichte oder Steifigkeit. Aufgrund der während einer FE-Simulation schon vorhandenen Größen, die sich im Energie-Impulstensor sowie dem Pseudo-Impulsvektor befinden, wird die materielle Kraft über die Bilanz auf der rechten Seite von Gleichung (2) bestimmt.

2.1 FE-Formulierung

Für eine Anwendung der Methode der materiellen Kräfte im Rahmen von FE-Simulationen (siehe BRAUN [1], MUELLER et al. [12] und STEINMANN [13], [14]) ist es notwendig, die schwache Form des Gleichgewichts der rechten Seite von Gleichung (2) zu ermitteln. Dazu wird die Bilanzgleichung mit einer vektoriellen Testfunktion $\boldsymbol{\eta}$ multipliziert und über das materielle Volumen B integriert

$$\int_B \left(\rho_0 \overline{(\underline{\mathbf{F}}^T \mathbf{v})} \cdot \boldsymbol{\eta} + \text{Div}(\underline{\mathbf{M}} \cdot \boldsymbol{\eta}) - \underline{\mathbf{M}} : \nabla_x \boldsymbol{\eta} + \mathbf{g} \cdot \boldsymbol{\eta} \right) dV = 0. \quad (3)$$

Durch Anwendung des GAUSSSchen-Integralsatzes und die Berücksichtigung verschwindender Testfunktionen auf den Rändern kann der zweite Term in (3) eliminiert werden. Nunmehr wird die Testfunktion $\boldsymbol{\eta}$ in jedem finiten Element Ω durch beliebige Knotenwerte und Formfunktionen N^l approximiert

$$\boldsymbol{\eta} = \sum_1 N^l \boldsymbol{\eta}^l, \quad \nabla_x \boldsymbol{\eta} = \sum_1 \nabla_x N^l \boldsymbol{\eta}^l, \quad (4)$$

woraus sich die Beziehung

$$\sum_1 \boldsymbol{\eta}^l \int_{\Omega} \left(\rho_0 \overline{(\underline{\mathbf{F}}^T \mathbf{v})} N^l - \underline{\mathbf{M}} \nabla_x N^l + \mathbf{g} N^l \right) d\Omega = 0 \quad (5)$$

ergibt. Der Index l gibt dabei den betrachteten Knoten eines Elements an. Unter der Annahme beliebiger Werte $\boldsymbol{\eta}^l$ kann Gleichung (5) nur dann gelöst werden, wenn sich der Klammerausdruck aufhebt, wobei der letzte Term der materiellen Kraft des Knotens l eines Elements entspricht ($\mathbf{G}^l = \mathbf{g} N^l$). Die resultierende materielle Kraft

$$\mathbf{G}^l = \bigcup_{e=1}^{n_e} \int_{\Omega} \left\{ -\rho_0 \overline{(\underline{\mathbf{F}}^T \mathbf{v})} N^l + \underline{\mathbf{M}} \nabla_x N^l \right\} d\Omega \quad (6)$$

eines Knotens ergibt sich schließlich durch Aufaddieren sämtlicher materieller Kräfte aller einzelnen Elemente n_e , welche an einem Knoten anbinden. Die Ermittlung der materiellen Kräfte erfolgt im Rahmen einer Simulation mit LS-DYNA in jedem Zeitschritt im Anschluss an die Spannungsermittlung. Die Implementierung erfolgt dabei für voll- und unterintegrierte 8-Knoten-Solid-Elemente. Die nach Gleichung (2) notwendigen physikalischen Größen ergeben sich entweder durch direkte Vorgabe in der Schnittstelle oder werden ausgehend von diesen ermittelt. Die Knotenbeschleunigungen, die vom Programm nicht übergeben werden, müssen explizit ermittelt werden. Infolge der kleinen Zeitinkremente zwischen zwei Zeitschritten können die Beschleunigungen vereinfacht über die Differenz der Geschwindigkeiten bezogen auf das Zeitinkrement ermittelt werden. Die Zeitableitung des Pseudo-Impulsvektors \mathbf{p} kann analog erfolgen.

Eine Anwendung dieses Verfahrens bedingt eine detaillierte Konvergenzbetrachtung mit verschiedenen Zeitschrittweiten, um vor allem bei hochdynamischen Beanspruchungen die Abhängigkeit der sehr sensitiven Ergebnisse von der zeitlichen Diskretisierung zu untersuchen.

3 Anwendungsbeispiele

3.1 Rissfortschritt

Im ersten Beispiel wird ein am rechten Rand gehaltenes System mit einer Querschnittsschwächung in Form eines initiierten Risses und den Abmessungen $l/h/d=100/20/1\text{mm}$ betrachtet. Die Diskretisierung erfolgt mittels 8-Knoten-Volumen-Elementen der Kantenlänge 1mm, wobei im Bereich des Risses deren Länge und Höhe halbiert wird. Der elastomere Werkstoff der Struktur wird mittels eines hyperelastischen NEO-HOOKE-Materialmodells abgebildet. Die Beanspruchung erfolgt über eine Verschiebung des linken Rands mit Dehnraten von $\dot{\epsilon}=100, 200$ und 500s^{-1} . Infolge der Schwächung wird die Struktur in Abhängigkeit vom Verzerrungszustand ein Maximum an Energie abbauen, sofern der Riss in der Systemmitte fortschreitet.

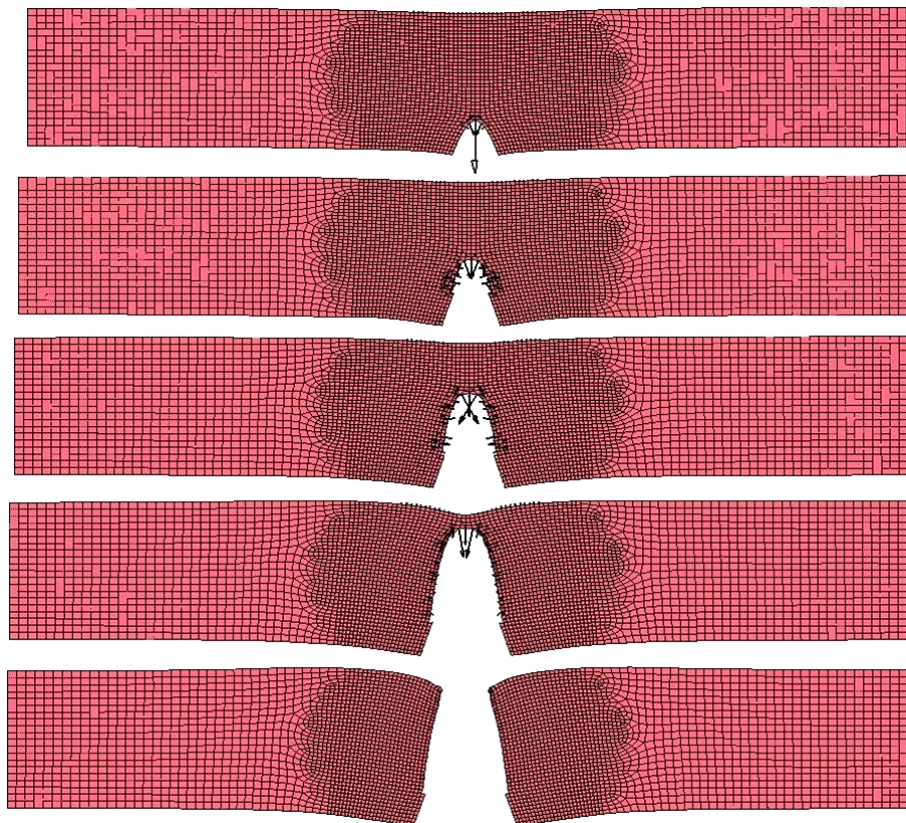


Bild 1: Zustände des Rissfortschritts der Zugprobe bei einer Dehnrates von 500s^{-1}

Ein Risswachstum wird dann auftreten, wenn die kritische Energiefreisetzungsrates erreicht ist, die in dem Zusammenhang der materiellen Kraft an der Rissspitze entspricht. Die kritische Energiefreisetzungsrates, bei welcher die infolge eines Rissfortschritts freigesetzte Energie auf die veränderte Risstiefe bezogen wird, kann nunmehr für einfache Proben in experimentellen Untersuchungen bestimmt werden. In der numerischen Simulation können anschließend für komplexere Bauteile bruch-

mechanische Untersuchungen erfolgen. Sofern eine FE-Simulation des Rissfortschritt-Prozesses auf der Basis eines Konfigurationskraft-Kriteriums durchgeführt werden soll, erfordert dies einerseits eine adaptive Prozedur, andererseits eine uneingeschränkte Zugänglichkeit zu einem FE-Code. Alternativ bietet sich in LS-DYNA die Option, ein Elementversagen zu definieren. Als maßgebendes Kriterium wurde die resultierende materielle Kraft eines Elements definiert. Somit kann eine sehr realistische Abbildung eines Rissfortschritts erzielt werden.

Im Rahmen des Beispiels erfolgt in der Nutzer-Schnittstelle eine Materialdefinition mit anschließender Ermittlung der materiellen Kräfte, die mit den vorgegebenen kritischen Größen verglichen werden. Sofern eine Überschreitung auftritt, wird das jeweilige Element gelöscht. Mittels dieser Prozedur ist eine realitätsnahe Abbildung des Strukturversagens möglich. Allerdings ist die Abbildung des Rissfortschritts durch Löschen ganzer Elemente zum einen sehr grob und zum anderen auch physikalisch nicht korrekt, da dem System damit auch Masse entzogen wird. Die Vorgehensweise entspricht aber dem in der Crashesimulation aktuellen Stand der Technik. In Bild 1 sind einzelne Zustände des Versagensprozesses sowie die materiellen Kräfte dargestellt. Während im ungeschädigten Zustand eine hohe verallgemeinerte Kraft an der Risspitze vorhanden ist, ergeben sich im zunehmend zerstörten Rissbereich anschließend stärker verteilte und betragsmäßig geringere materielle Kräfte, da die Risspitze durch das Löschen von Elementen etwas „abstumpft“. Neben den getroffenen qualitativen Aussagen wird auf der Basis des vorgestellten Kriteriums das Kraft-Verformungs-Verhalten der Struktur analysiert. Dabei wird die Reaktionskraft F über der Randverformung u aufgetragen (Bild 2). Gemäß der Materialdefinition ergibt sich zunächst ein nahezu linearer Anstieg von F . Durch das Eliminieren der Elemente mit einhergehender Strukturteilung federt der rechte Teil zurück, wodurch die Reaktionskraft negativ wird. Diese Erscheinung kann durch eine entsprechende Dämpfung an experimentelle Befunde angepasst werden. Der Verlauf des Abfalls kann durch eine Validierung der kritischen materiellen Kraft ebenfalls beeinflusst werden. Im Bereich der Kurzzeiddynamik kann über eine geringfügige Erhöhung des kritischen Betrags bei zunehmendem Elementausfall eine Verzögerung des Versagensprozesses eingestellt werden.

Ein weiterer interessanter Aspekt in Bild 2 ist der Einfluss der Dehnrates auf den Pfad-Verlauf. Insbesondere bei sehr hohen Dehnraten ergibt sich durch die Massenträgheit eine Verlagerung des Kraft-Verformungs-Pfads und somit eine Erhöhung der maximalen Kraft.

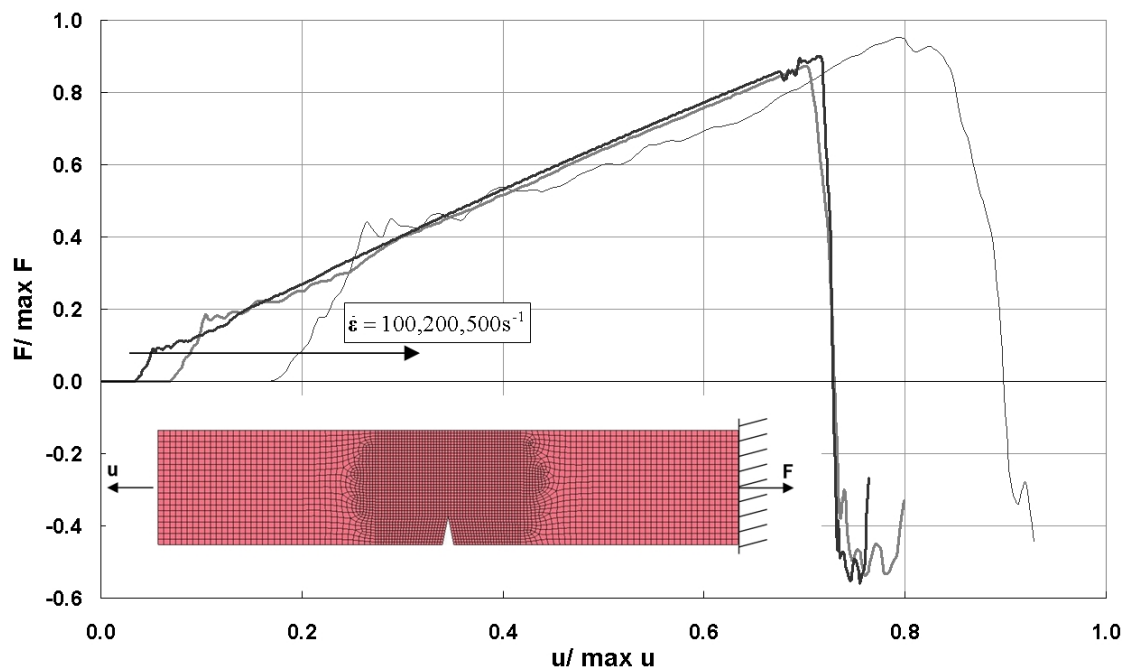


Bild 2: Kraft-Verformungs-Beziehung für eine Zugprobe mit initiiertem Riss

3.2 Stoßartige Einwirkungen

Wenn Strukturen durch kurzzeitige Impulse hoher Amplitude beansprucht werden, können sich Stoßwellen ausbilden. In diesem Fall ist der Widerstand der Struktur nicht ausreichend, wodurch infolge einer zunehmenden Kompression die Fortpflanzungsgeschwindigkeit von Störungen ansteigt. In der Folge verändert sich die Form des ursprünglich aufgebrachtene Belastungsimpulses unter einer signifikanten Singularität der Spannungen. Des Weiteren wird Energie dissipiert, wodurch ein anfänglicher

Belastungsimpuls stark abklingt. Da neben einer hochdynamischen Erregung nichtlineare Spannungs-Verzerrungs-Beziehungen grundlegende Voraussetzung für derartige Phänomene sind, können diese Effekte auch bei hyperelastischen Materialien auftreten. Materialien, die über Zustandsgleichungen beschrieben werden, können über eine geeignete Parameterwahl annähernd über die hyperelastischen Ansätze definiert werden, womit eine Analyse mittels materieller Kräfte möglich ist.

Für Untersuchungen von Impaktvorgängen kann eine Identifikation von Stoßwellen somit bei einer Systembeurteilung relevant sein. Mittels der Methode der materiellen Kräfte können solche Zustände sehr effizient identifiziert werden, da sich im Fall von Singularitäten in den physikalischen Größen unmittelbar deutlich von Null verschiedene verallgemeinerte Kräfte ergeben. Eine detaillierte Diskussion hinsichtlich materieller Kräfte in Systemen mit Entstehung von Stoßwellen kann TIMMEL et al. [16] entnommen werden. Grundlegende Darstellungen von Schockwellen-Phänomenen insbesondere im Zusammenhang mit FE-Analysen sind in DU BOIS [2] enthalten. Im Rahmen eines Beispiels wird ein Stab quadratischer Querschnittsfläche der Höhe 10 cm sowie der Länge 10 m betrachtet. Dieser Stab wird schlagartig auf der linken Seite durch einen Impuls beansprucht. Die Diskretisierung wird mit 1000 Volumenelementen vorgenommen. Eine Materialdefinition erfolgt durch die volumetrische Energiefunktion $W(\det \mathbf{F}) = 0.5K(0.5(\det \mathbf{F})^2 - 0.5 - \ln(\det \mathbf{F}))$, wobei mit K der Kompressionsmodul definiert wird. Sofern diese Größe in Relation zur Amplitude des Impulses zu gering ist, ergibt sich die Ausbildung von Stoßwellen. In Bild 3 links ist der anfängliche Belastungsimpuls als Spannungsantwort des äußersten linken Elements dargestellt, der sich qualitativ und quantitativ verändert. Der Spannungsanstieg der hinteren Elemente erfolgt nicht mehr linear, sondern abrupt, und der Belastungsimpuls von 30 GPa baut sich zunehmend ab. Diese Erscheinungen sind Indikatoren für durch Stoßwellenausbildung beanspruchte Strukturen. Mittels der sehr hohen materiellen Kräfte kann dieses Phänomen nach Bild 3 rechts identifiziert werden. Für den Fall eines höheren gewählten Kompressionsmoduls oder einer geringeren Belastungsamplitude ergeben sich verallgemeinerte Kräfte in der Umgebung von Null, da ohne Stoßwellenbildung die Bilanz der kinetischen sowie potentiellen Energie konstant ist (siehe z.B. KOLLING, MÜLLER [9]).

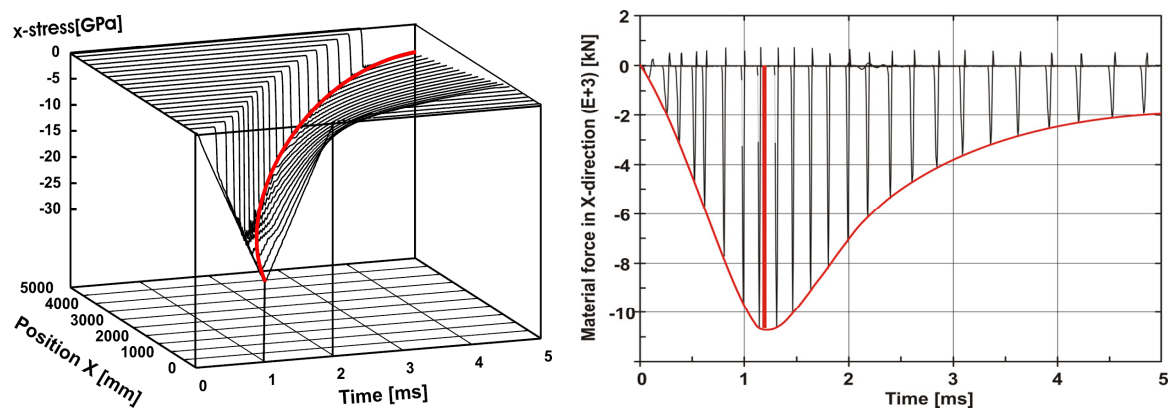


Bild 3: links: Spannungsverlauf, rechts: Verlauf der materiellen Kräfte

3.3 Mikromechanische Schädigungsanalyse

Für eine realistische, das heißt sämtliche zu Spannungserweichung führenden Effekte berücksichtigende numerische Simulation müssen die Phänomene der Mikroebene betrachtet werden (siehe u.a. GROSS, SEELIG [7]). Unter einer Vielzahl von Defekten auf der Mikrostruktur werden insbesondere Inhomogenitäten wie beispielsweise Partikel geringerer Steifigkeiten oder Poren untersucht. Auf der Grundlage experimentell ermittelter Zusammenhänge müssen diese Charakteristiken in das numerische Modell übertragen werden.

Dies betrifft einerseits die geometrische und physikalische Modellierung und andererseits die Entwicklung dieser Mikrostruktur während des Belastungsprozesses. Eine geeignete Formulierung auf der Mikroebene ermöglicht mittels einer Transformation der Eigenschaften anschließend eine genaue Beschreibung der Makroskala, die in der FE-Approximation abgebildet wird. In Bild 4 links ist das FE-Modell einer Struktur dargestellt. Während bei phänomenologischen Materialdefinitionen die Spannungen der Elemente ausgehend von den Verzerrungen über direkte tensorielle Verknüpfungen bestimmt werden, erfolgt hier eine explizite Betrachtung des mikroskopischen Problems mit einer anschließenden Transformation der Mikrosystemantworten in das makroskopische Modell. Das Mikrosystem, mit welchem eine Schädigungsakkumulation abgebildet werden soll, entspricht dabei dem

Modell nach Bild 4 rechts. In einem Matrixgebiet B^+ befindet sich ein Einschluss B^- mit dem Stofftensor \mathbb{C}^- , mit $\mathbb{C}^- \leq \mathbb{C}^+$ für ein Schädigungsmodell.

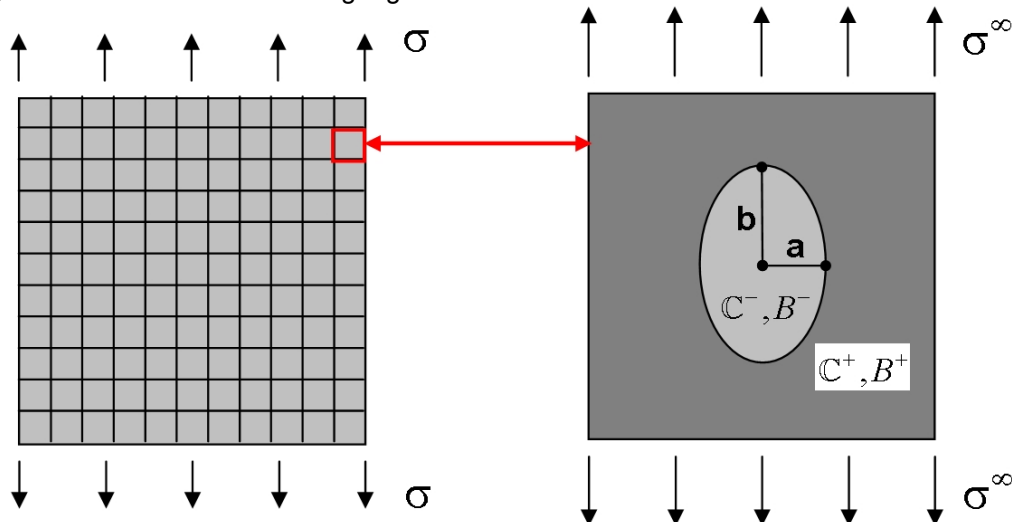


Bild 4: links: makroskopisches FE-Modell, rechts: Kontinuumsmodell der Mikroebene

Die Spannungen des Mikromodells bestimmen sich mittels einer Homogenisierung der Einschluss- sowie Matrixspannungen respektive Matrixverzerrungen über den gesamten Volumenbereich

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \mathbb{C}^* \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle \quad \text{mit} \quad \langle \cdot \rangle = \frac{1}{V} \int_B (\cdot) dV, \quad (7)$$

wobei sich die mittlere Verzerrung $\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle$ des Mikrosystems aus der gegebenen Verzerrung $\boldsymbol{\varepsilon}$ des Makrosystems ergibt. Die Verknüpfung nach Gleichung (7) erfolgt mittels des effektiven Steifigkeitstensors

$$\mathbb{C}^* = \left\{ (\mathbb{C}^+)^{-1} + \frac{V_{B^-}}{V} ((\mathbb{C}^-)^{-1} - (\mathbb{C}^+)^{-1}) \mathbb{C}^- \left[\mathbb{I} + \mathbb{S}(m) ((\mathbb{C}^+)^{-1} \mathbb{C}^- - \mathbb{I}) \right]^{-1} (\mathbb{C}^+)^{-1} \right\}^{-1}. \quad (8)$$

An dessen komplexer Struktur sind die Abhängigkeiten sowohl von den Steifigkeits-, als auch den Volumenverhältnissen von Einschluss und Matrix erkennbar. Eine weitere essentielle Größe ist zudem der ESHELBY-Tensor $\mathbb{S} = \mathbb{S}(m)$, mit $m = (a - b)/(a + b)$ sowie a und b als den beiden Halbachsen der Ellipse (siehe ESHELBY [5]). Dieser Tensor ist für die analytische Beschreibung von Mikromodellen, bei denen ein Partikel in Matrixmaterial eingebettet ist, notwendig. Dabei sind wesentliche Restriktionen einzuhalten: Das gesamte Mikromodell ist einerseits beschränkt auf kleine Verzerrungen sowie linearen Spannungs-Verzerrungs-Beziehungen. Das eingeschlossene Partikel muss die Form eines Rotationsellipsoiden des Radius b und der Länge a einschließlich des Sonderfalls einer Kugel ($a=b$) aufweisen. Die folgenden Betrachtungen beschränken sich daher auf kleine Verzerrungen. Eine Erweiterung für Materialien mit großen Verzerrungen kann mittels einer inkrementellen Betrachtung durchgeführt werden. Die Annahme einer ellipsoiden Einschlussform stellt für den Großteil der Anwendungsfälle eine geeignete Näherung dar, die einen analytischen Zugang ermöglicht. Eine Alternative besteht bei Aufgabe dieser Restriktion lediglich in 2-Skalen-FEM-Untersuchungen.

Die Modellierung des Mikrosystem-Verhaltens ausgehend von experimentellen Untersuchungen erfolgt nunmehr über eine Bestimmung des Gleichgewichtszustands. Das bedeutet, es muss diejenige ellipsoide Form des eingeschlossenen Partikels gefunden werden, welche die Gesamtenergie minimiert. Dieser Zustand, welcher im Laufe der Zeit im numerischen Modell analog der Realität erzielt werden muss, wird mittels einer vorzugebenden zeitlichen Verzögerung definiert.

Die Gesamtenergie des Mikrosystems (siehe z.B. MÜLLER [11] oder KOLLING [8]) ergibt sich zu

$$\Pi(F, \mathbf{u}, \lambda) - \lambda(V - V_0) = \int_{B^+} \underbrace{\Psi^+}_{0.5 \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbb{C}^+ \boldsymbol{\varepsilon}} dV + \int_{B^-} \underbrace{\Psi^-}_{0.5 \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbb{C}^- \boldsymbol{\varepsilon}} dV - \int_{\partial B} \hat{\mathbf{t}} \cdot \mathbf{u} dA + \int_F \gamma dA. \quad (9)$$

Mittels der ersten beiden Integrale der rechten Seite wird die innere Energie von Einschluss und Matrix bestimmt. Neben dem Potential der äußeren Kräfte $\hat{\mathbf{t}}$ sowie der Verformung \mathbf{u} wird auf der Basis

des letzten Terms die bei angrenzenden Materialien unterschiedlicher Steifigkeit auftretende Grenzschichtenergie über die Integration der Grenzflächenenergiedichte γ über den Rand des Einschlusses F definiert. Über den zusätzlichen Term $\lambda(V - V_0)$, mit λ als Lagrange-Parameter, wird in einem ersten Schritt die Konstanz des Einschlussvolumens erzwungen. Die Gleichgewichtsform der Grenzfläche F ergibt sich nach dem Prinzip vom Stationärwert des Gesamtpotentials nach Gleichung (9) zu

$$\delta\Pi(F, \mathbf{u}, \lambda) = 0 = - \int_F \left(\underbrace{\mathbf{n} \cdot \llbracket \mathbf{M} \rrbracket \mathbf{n}}_{\tau_n^{\text{el}}} + \underbrace{\gamma \kappa}_{\tau_n^{\text{int}}} - \lambda \right) \delta n \, dA. \quad (10)$$

Eine ausführliche Herleitung der Gleichung (10) ausgehend von Gleichung (9) kann MÜLLER [11] und KOLLING [8] entnommen werden.

Sofern eine Übereinstimmung zwischen den verallgemeinerten Spannungen einerseits sowie dem Lagrange-Parameter andererseits erzielt ist, $\tau_n = \tau_n^{\text{el}} + \tau_n^{\text{int}} = \lambda$, liegt Gleichgewicht vor. Aufgrund der Volumenkonstanz kann der Lagrange-Parameter vereinfacht über den Mittelwert der verallgemeinerten Spannungen

$$\lambda = \langle \tau_n \rangle = U_F^{-1} \int_F \tau_n \, dS \quad \text{mit} \quad U_F = \int_F dS \quad (11)$$

definiert werden. Während der Grenzflächenanteil der verallgemeinerten Spannung τ_n^{int} nach Gleichung (10) ausgehend von der Krümmung κ des Einschlusses direkt bestimmt werden kann, bedarf der elastische Anteil τ_n^{el} einer umfassenderen Betrachtung. Dieser ergibt sich zu

$$\tau_n^{\text{el}} = -\frac{1}{2} \llbracket \mathbf{C} \rrbracket \boldsymbol{\varepsilon}^- \cdot \boldsymbol{\Omega}^{-1}(\mathbf{n}) \llbracket \mathbf{C} \rrbracket \boldsymbol{\varepsilon}^- + \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon}^- : \llbracket \mathbf{C} \rrbracket \boldsymbol{\varepsilon}^-, \quad \text{mit} \quad \boldsymbol{\Omega}_{ik}(\mathbf{n}) = \mathbf{C}_{ijkl}^+ n_j n_l \quad \text{und} \quad \llbracket \mathbf{C} \rrbracket = \mathbf{C}^+ - \mathbf{C}^-, \quad (12)$$

wobei nach (12) die Verzerrungen $\boldsymbol{\varepsilon}^-$ am inneren des Einschlusses benötigt werden, welche für komplexe Einschlussgeometrien nur numerisch ermittelt werden können. Aufgrund der Restriktion auf ellipsoide Einschlüsse kann jedoch eine analytische Formulierung (siehe Schmidt [18]) vorgegeben werden

$$\boldsymbol{\varepsilon}^-(\mathbf{m}) = -\mathbb{S}(\mathbf{m}) : \left\{ \left[\mathbf{C}^+ - \llbracket \mathbf{C} \rrbracket : \mathbb{S}(\mathbf{m}) \right]^{-1} \mathbf{C}^- \left(\llbracket \mathbf{C}^{-1} \rrbracket \mathbf{C}^+ \boldsymbol{\varepsilon} \right) \right\}. \quad (13)$$

Nach Gleichung (13) ist die innere Verzerrung neben der Verzerrung aus äußerer Beanspruchung des Makrosystems $\boldsymbol{\varepsilon}$ wiederum von den gegebenen Steifigkeiten sowie vom ESHELBY-Tensor abhängig.

Im Rahmen der numerischen Simulation dieses Modells mittels der FEM erfolgt für eine definierte Konfiguration eines Mikromodells zunächst die Ermittlung der inneren Einschlussverzerrung nach (13) und anschließend die Bestimmung der verallgemeinerten Spannungen nach Gleichung (12) sowie (10). Die Startform des Einschlusses wird zunächst als Kugel mit $m=0$ gewählt. Durch Gleichung (10) kann die Gleichgewichtsform iterativ ermittelt werden, indem die Einschlussform über die Abweichung der verallgemeinerten Spannungen von ihrem Mittelwert berücksichtigt werden

$$\mathbf{m}^{k+1} = \mathbf{m}^k + f \left(\tau_n^k - \langle \tau_n^k \rangle \right). \quad (14)$$

Für stabile Einschlussformen ergibt sich aufgrund der Annäherung der verallgemeinerten Spannung an ihren Mittelwert eine Konvergenz in der Iteration. Durch die Evolutionsvariable f wird die Einstellung des Gleichgewichtszustands verzögert.

In einem ersten Beispiel wird die zuvor dargestellte Theorie veranschaulicht. Dazu wird eine Zelle beliebigen Volumens und Steifigkeit nach Bild 4 betrachtet, in welcher sich ein ellipsoider Einschluss befindet. Die Einschlusssteifigkeit ist kleiner als die Matrixsteifigkeit ($\mathbf{C}^+ / \mathbf{C}^- = 10$). Die Einheitszelle wird mit einer Spannung in y -Richtung beansprucht. Anhand Bild 5 ist der Einfluss der Einschlussform auf die Gesamtenergie des Mikromodells zu erkennen. Für stark gestreckte respektive gestauchte Ellipsenformen ist die Energie deutlich höher als das Minimum, wobei die Abweichungen der verallgemeinerten Spannungen ebenfalls sehr hoch sind. Diese gelten als Indikator für die Richtung, in

welcher sich die Form verändern muss, um die Energie zu minimieren. Im Gleichgewichtszustand ist die Abweichung im Mittel aufgehoben, eine Veränderung der Form würde die Energie wieder erhöhen. Des Weiteren kann mit Bild 5 die Abhängigkeit der Gesamtenergie und somit auch der Steifigkeit des Mikromodells vom Einschlussvolumen gedeutet werden. Dabei ist das Minimum nicht nur geringer, sondern die Kurvenformen beziehungsweise –krümmungen sind zudem verschieden. Die Modifikationen unter veränderten Volumenverhältnissen sind bei einer Berücksichtigung von Schädigungsphänomenen wie Porenwachstum relevant. In dem Fall ist der Lagrange-Term nach (9) zu modifizieren.

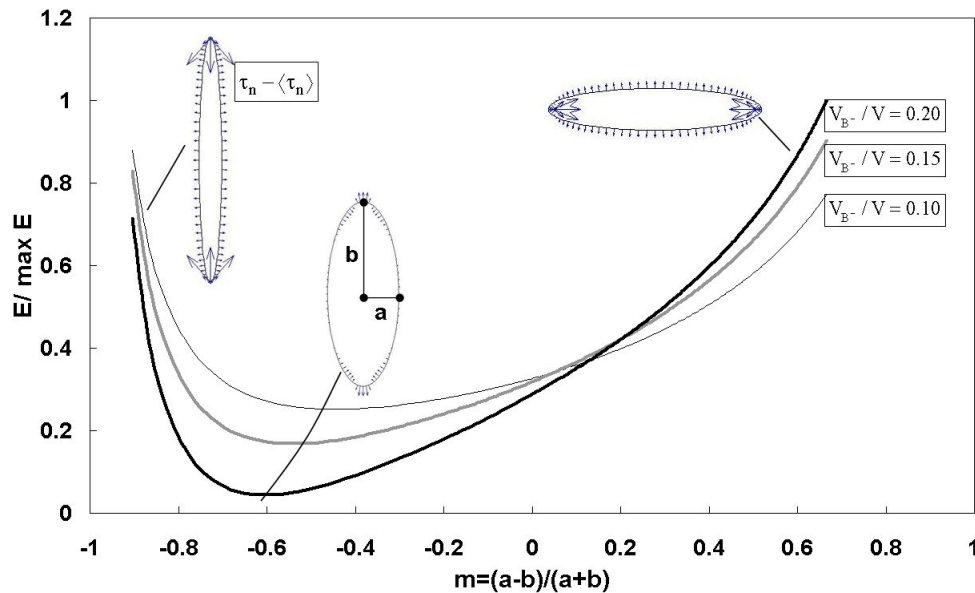


Bild 5: Einschlussenergie bei variierender Ellipsenform

Im nächsten Schritt erfolgt eine numerische Betrachtung einer Makrostruktur, wobei die Materialeigenschaften mittels des zuvor beschriebenen Mikromodells bestimmt werden. Dabei werden die Verzerrungen der Makroebene als Fernfeldbeanspruchung für das Mikromodell vorgegeben, dessen Systemantwort mittels einer Homogenisierung die konstitutive Beziehung der globalen Struktur ergibt. Betrachtet wird nach Bild 6 ein linksseitig eingespannter Kragarm, der eine Beanspruchung durch die Verformung an der Kragspitze erfährt, die bis zur normierten Zeit von $nt=0.05$ linear gesteigert, im Intervall bis $nt=0.20$ gehalten und bis $nt=0.25$ linear verringert wird. Während dieser Belastung erfolgt eine Steifigkeitsreduktion des metallischen Werkstoffs infolge von Veränderungen mikroheterogener Partikel. Deren Entwicklung wird mit Gleichung (14) definiert.

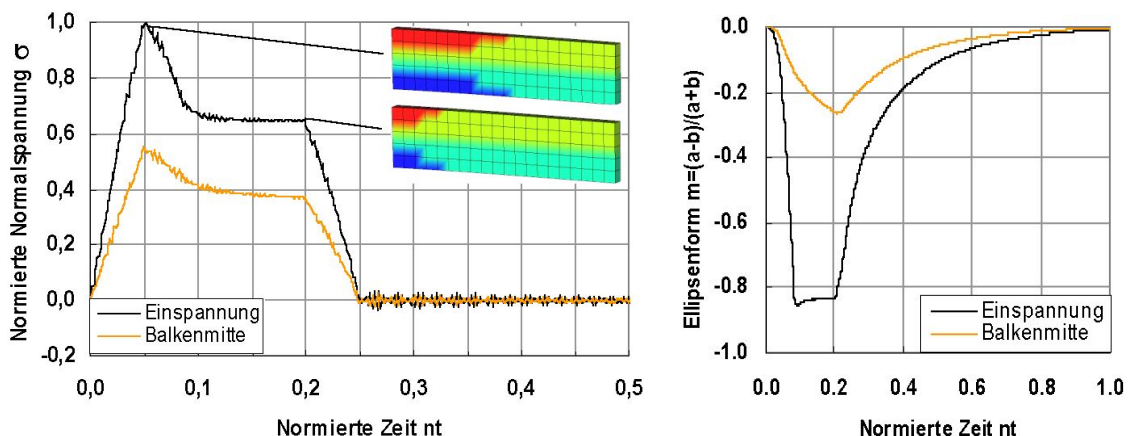


Bild 6: Kragssystem mit Mikroevolution, links: Spannungsverlauf, rechts: Einschlussform

Die in Richtung des Gleichgewichtszustands veränderte Partikelform resultiert in einer verringerten effektiven Steifigkeit nach Gleichung (8). In der Konsequenz reduziert sich während des Beanspruchungsprozesses die Spannung in der Struktur. Die verallgemeinerte Spannung, die auf den Mikro-partikel einwirkt, ist dabei nach den Gleichungen (11)-(13) abhängig von der äußeren Belastung, der

Verzerrung ε . Demzufolge verändern sich höher beanspruchte Bereiche wesentlich schneller mit einhergehender Spannungsaufweichung.

Deutlich ist dieser Aspekt anhand Bild 7 zu erkennen. Die Spannungsverläufe im Bereich des Belastungsplateaus weisen bei höherer Steifigkeitsdiskrepanz eine größere Neigung auf. Zudem ergeben sich bei einem größer modellierten höheren Partikelvolumen geringere Spannungen.

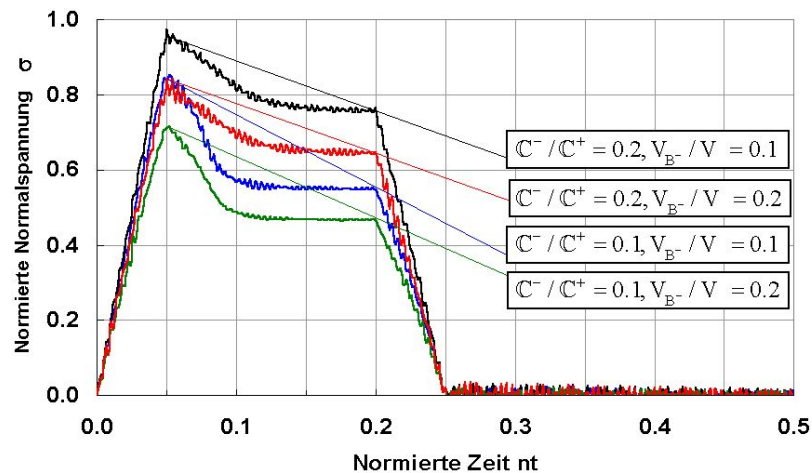


Bild 7: Verschiedene Gradienten der Spannungsaufweichung

3.4 Netzoptimierung

Über die Anwendung der Bruch- und Schädigungsmechanik hinaus können die verallgemeinerten Kräfte im Rahmen von Netzoptimierungen in der FEM eingesetzt werden (siehe MÜLLER [11]). Diese Option ergibt sich aus der Eigenschaft, wonach Inhomogenitäten einerseits über von Null verschiedene materielle Kräfte identifiziert werden können, andererseits eine Veränderung der Konfiguration gemäß diesen materiellen Kräften die totale Energie in Abhängigkeit von der Vorzeichenkonvention erhöht respektive verringert. Während innerhalb eines homogenen Kontinuums keine verallgemeinerten Kräfte auftreten, entsteht durch die Überführung eines komplexen Kontinuums in ein FE-Modell in der Regel ein Diskretisierungsfehler. Dieser ist abhängig von der Netzfeinheit, der Netzform sowie von der Beanspruchung. Der Diskretisierungsfehler in der FE-Abbildung stellt eine geringfügige und rein numerisch bedingte Inhomogenität dar. In der Folge treten geringfügige materielle Kräfte an den Elementknoten einer homogenen diskretisierten Struktur auf.

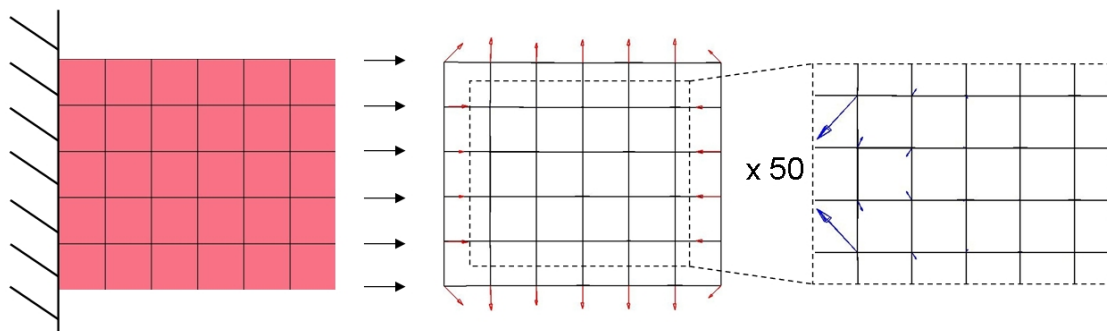


Bild 8: links: System und Belastung, rechts: System mit materiellen Kräfte

In Bild 8 links ist eine Struktur dargestellt, die über eine Randbelastung beansprucht wird, wobei in diesem Fall eine Auslenkung bis zu einer maximalen Dehnung von zwei Prozent durchgeführt wird. Die Betrachtung erfolgt an einem metallischen Werkstoff. Eine Untersuchung bei elastomeren Eigenschaften erfolgt analog. Die verallgemeinerten Kräfte auf dem Rand der Struktur nach Bild 8 rechts liefern zunächst die Aussage, dass die Gesamtenergie ansteigt, sofern die Konfiguration nach diesen materiellen Kräften modifiziert würde: Eine Kontraktion in der Länge resultiert bei konstanter Randverschiebung in höheren Verzerrungen. Eine zunehmende Systemhöhe erhöht durch das zunehmende Gesamtvolumen die Energie. Diese Aussagen auf der Basis materieller Kräfte können primär nicht verwendet werden, da von einer Unveränderlichkeit des Rands hinsichtlich Geometrie und Lagerung

ausgegangen wird. Lediglich in einem weiteren Anwendungsgebiet, der Formoptimierung von Strukturen, können diese Ergebnisse berücksichtigt werden.

Die in dem Zusammenhang entscheidenden materiellen Kräfte treten im Inneren der Struktur auf, wobei die Größenordnung wesentlich kleiner als auf dem Rand ist. Werden die inneren Knoten analog den vektoriellen Darstellungen verschoben, würde sich die Energie der Struktur erhöhen. Eine entgegen gerichtete Knotenverschiebung resultiert in einer Verringerung der Gesamtenergie, die in der FEM einer genaueren Lösung entspricht. Die Simulation erfolgt zunächst über eine Analyse des Ausgangssystems nach Bild 8 links. Über den gesamten Belastungsverlauf werden die maximalen materiellen Kräfte an den inneren Knoten ermittelt. Diese werden im nächsten Schritt für eine Koordinatenmodifikation benutzt. Die neuen Koordinaten ergeben sich aus denen des Iterationsschritts zuvor und den materiellen Kräften, die mit einem Faktor gewichtet werden. Dieser muss einerseits negativ sein, um die Energie zu minimieren, und andererseits sollte dieser relativ klein sein, um eine Konvergenz zu ermöglichen. In Bild 9 ist das qualitative Resultat einer solchen Prozedur dargestellt. Dabei ergeben sich genau die Verschiebungen der inneren Knoten, die nach dem rechten Teil von Bild 8 vorgegeben werden, um die Energie zu verringern. Hinsichtlich der quantitativen Veränderungen ergibt sich eine Verringerung der Gesamtenergie im Promille-Bereich. Diese korreliert dabei mit einer Umlagerung der Spannungen im Auflagerbereich.

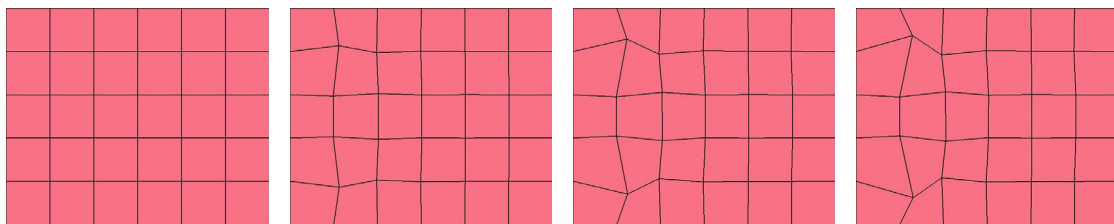


Bild 9: FE-Modell nach 1, 100, 200 und 300 Iterationen

Nach Bild 10 links verringert sich die Spannung in y-Richtung signifikant, während im mittleren Auflagerbereich eine geringfügige Erhöhung zu verzeichnen ist. Anhand Bild 11 kann der Einfluss der äußeren Belastung auf die Entwicklung des Netzes gedeutet werden. Dabei wurde im Modell nach Bild 11 links die Zugbelastung nahezu parabelförmig aufgebracht, wodurch sich vorrangig die Elemente auf der beanspruchten Seite verändern.

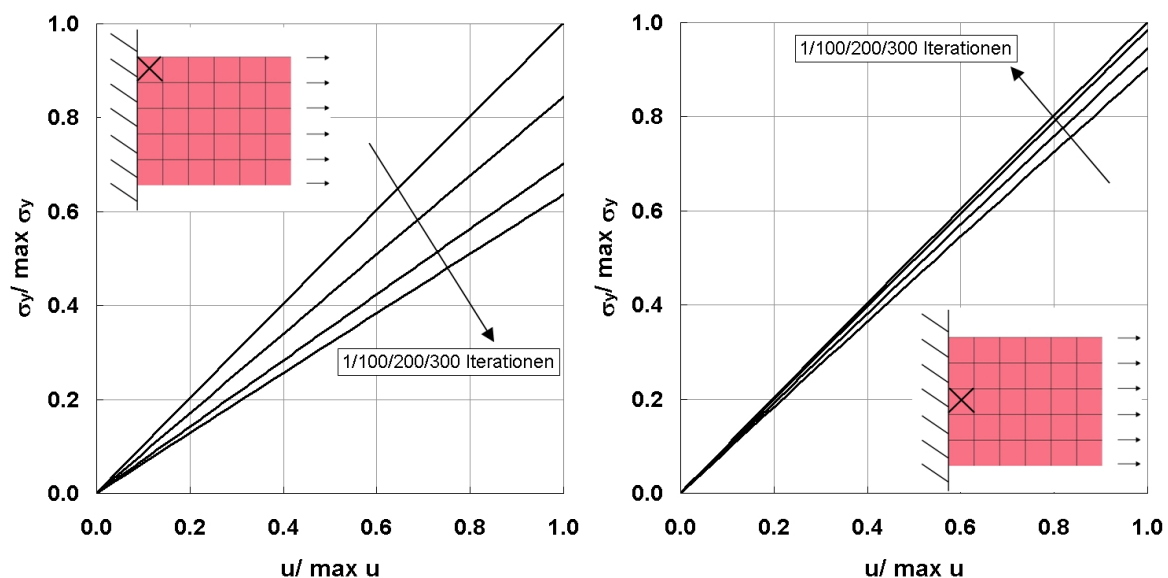


Bild 10: Veränderung der y-Spannungen im Auflagerbereich bei einer Netzoptimierung

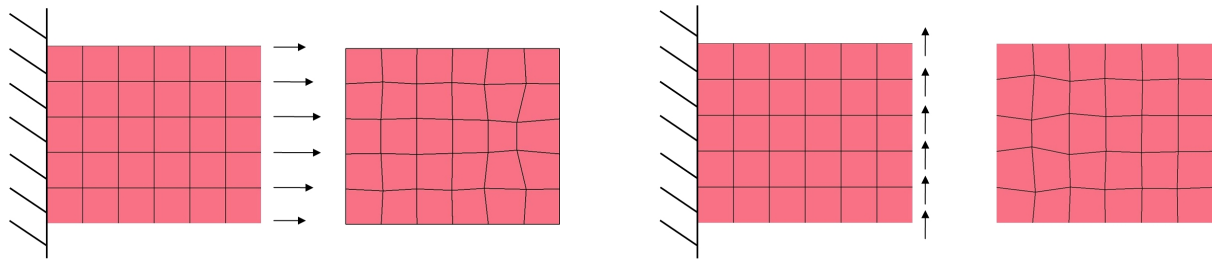


Bild 11: Abhängigkeit der Netzoptimierung von der Belastung

Eine interessante Anwendung dieser Prozedur kann darin liegen, Strukturen numerisch zu stabilisieren. Während in den zuvor dargestellten Beispielen die Elementknoten gemäß der negativen materiellen Kraft verschoben wurden, um die Energie zu verringern, so ist es denkbar, das Verfahren in negierter Form bei der Verwendung unterintegrierter Elemente einzusetzen. Bei einer Durchführung des zuvor dargestellten Gesamtenergie minimierenden Verfahrens bei Unterintegration liegt es nahe, dass durch Knotenverschiebungen gezielt Hourglass-Formen auftreten, da diese die Strukturenergie intensiv abbauen. Daher müssten in diesem Fall die Knoten in die positive Richtung der verallgemeinerten Kräfte verschoben werden. Dieses Vorgehen würde zwar zunächst in steiferen Elementen resultieren, im Gegenzug könnte aber auf ebenfalls Energie erhöhende Hourglass-Versteifungen verzichtet werden.

4 Zusammenfassung und Ausblick

In dem vorliegenden Beitrag wurden verschiedene Anwendungsgebiete der Methode der materiellen Kräfte vorgestellt. Dieses Kriterium, das den Gradienten des kinetischen Potentials, im statischen Fall der Verzerrungsenergie, ausgibt, eignet sich als Indikator für materielle und numerische Inhomogenitäten. Zudem können in experimentellen Untersuchungen identifizierte Strukturänderungen wie Porenwachstum, Phasengrenzenverschiebungen oder Formänderungen von Mikroheterogenitäten auf der Basis einer Evolutionsbedingung in die Numerik, insbesondere die FEM, übertragen werden. In diesem Zusammenhang wurden einige Anwendungsbeispiele diskutiert: Eine Simulation des Rissfortschritts, die Identifikation von Stoßwellen sowie eine Mikrostrukturentwicklung mit einhergehendem Steifigkeitsverlust der globalen Struktur. Zudem wurde die Einsetzbarkeit im Zuge einer Netzbewertung respektive Netzmodifikation vorgestellt und auf einen möglichen Einsatz als Hourglasskontrolle hingewiesen. In den nächsten Schritten werden die materiellen Kräfte für eine Beschreibung des Volumenzwachstums von mikroskopischen Einschlüssen verwendet. Des Weiteren wird die Schädigungsformulierung mittels eines Mikromodells über eine inkrementelle Prozedur für Werkstoffe mit großen Verzerrungen angewendet.

5 Literatur

- [1] BRAUN, M. (1997): Configurational forces induced by finite-element discretization, Proceedings of the Estonian Academy of Sciences, Physics, Mathematics 46, 24-31.
- [2] DU BOIS, P.A. (2004): Crashworthiness Engineering Course Notes, Livermore Software Technology Corporation.
- [3] LS-DYNA keyword user's manual, Livermore Software Technology Corporation.
- [4] ESHELBY, J.D. (1951): The Force on an elastic singularity, Philosophical Transactions of the Royal Society London 244, 87-112.
- [5] ESHELBY, J.D. (1957): The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion and related problems, Proceedings Royal Society A(241), 376-396.
- [6] ESHELBY, J.D. (1970): Energy relations and the energy-momentum tensor in continuum mechanics, In Kanninen M.F. (editor) Inelastic behavior of solids, Mc Graw Hill, New York, 77-115.
- [7] GROSS, D.; SEELIG, T. (2001): Bruchmechanik mit einer Einführung in die Mikromechanik, Springer, Berlin.
- [8] KOLLING, S. (2001): Zur numerischen Simulation von Morphologieänderungen in mikroheterogenen Materialien, Institut für Mechanik, TU Darmstadt.
- [9] KOLLING, S.; MÜLLER, R. (2005): On configurational forces in short-time-dynamics and their computation with an explicit solver. Computational Mechanics 35, 392-399.
- [10] MULLINS, L. (1969): Softening of Rubber by Deformation. Rubber Chemistry and Technology 42. 339-362.

-
- [11] MÜLLER, R. (2001): 3D-Simulation der Mikrostrukturentwicklung in Zwei-Phasen-Materialien, Institut für Mechanik, TU Darmstadt.
 - [12] Mueller, R.; Kolling, S.; Gross, D. (2002): On configurational forces in the context of the finite element method. *International Journal of Numerical Methods in Engineering* 53, 1557-1574.
 - [13] Steinmann, P. (2000): Application of material forces to hyperelastostatic fracture mechanics I: Continuum mechanical setting. *International Journal of Solids and Structures* 37, 7371-7391.
 - [14] Steinmann, P.; Ackermann, D.; Barth F.J. (2001): Application of material forces to hyperelastostatic fracture mechanics II: computational setting. *International Journal of Solids and Structures* 38, 5509-5526.
 - [15] TIMMEL, M.; KALISKE, M.; KOLLING, S. (2004): Modellierung gummiartiger Materialien bei dynamischer Beanspruchung. LS-DYNA Forum, Bamberg, C-I-1/11.
 - [16] TIMMEL, M.; KALISKE, M.; KOLLING, S.; MÜLLER, R. (2005): Application of Material Forces to Hyperelastodynamics, *Proceedings in Applied Mathematics and Mechanics*, submitted.
 - [17] Kolling, S.; Ackermann, D. (2003): Applications of material forces in finite element simulations. *Proceedings of the 4th European LS-DYNA Users Conference, D-II*, 1-14.
 - [18] Schmidt, I.; Gross, D. (1997): The equilibrium shape of an elastically inhomogeneous inclusion. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 45, 1521-1549.

