Dual-horizon peridynamics and nonlocal operator method

Zusammenfassung der Abhandlung

zur Erlangung des akademischen Grades Doktor-Ingenieur (Dr.-Ing.)

an der Fakultät Bauingenieurwesen

der

Bauhaus Universität Weimar

vorgelegt von

M.Sc. Huilong Ren

geboren am 07. Jan 1989 in Jiangxi, China

(interner Doktorand)

Mentor

Prof. Dr. - Ing. Timon Rabczuk

Weimar, October 2019

Problemstellung und Zielsetzung

1. Peridynamics (PD) ist eine Methode zur Lösung kontinuierlicher und diskontinuierlicher Probleme in der Kontinuumsmechanik. Sie diskretisiert das Gebiet mit sog. Partikeln, die sich innerhalb eines gewissen Einflussbereiches, dem sog. „Horizont“ (Horizon), gegenseitig beeinflussen. Leider erfordert PD eine konstante Horizontgröße für alle Partikel sowie eine strukturierte, homogene Partikeldiskretisierung, was die Anwendbarkeit auf komplexe Geometrien erschwert. Des Weiteren basiert PD auf einer Kollokationsmethode und expliziten Zeitintegration, was auf Instabilitäten führt. Eine effiziente numerische Berechnung erfordert oft eine „willkürliche“ Diskretisierung mit variabler Horizontgroesse. Darüber hinaus schränkt die explizite Zeitintegration aufgrund des maximale Zeitschrittes, die Anwendbarkeit, von PD ein. Infolgedessen ist PD nicht für statische bzw. quasistatische Probleme oder „Langzeit“-dynamische Probleme geeignet.
2. PD basiert auf der sog. Nichtlokalität, einem Konzept, was noch nicht vollständig erforscht ist. Durch diese Nichtlokalität unterscheidet sich PD grundsätzlich von meisten netzfreien Methoden und der Methode der finiten Elemente (FEM). Die FEM sowie viele netzfreie Methoden basieren auf einem Variationsprinzip und der Methode der gewichteten Residuen. Die Verwendung eines Variationsprinzips wäre auch für besagte nichtlokale Theorien wichtig, da diese das Anwendungsgebiet stark erweitert. Der Zusammenhang zwischen Nichtlokalität und Variationsprinzip bzw. Methode der gewichteten Residuen ist bis jetzt jedoch unklar.
3. Partikelbasierte Methoden wie PD und SPH werden durch explizite Integrationsmethoden in starker Form gelöst. Ein allgemeines Verfahren für implizite Gleichungslöser wurde bislang nicht vorgestellt, wäre aber für zahlreiche Anwendungen wünschenswert.
4. Die numerische Integration und die Berechnung der partiellen Ableitungen höherer Ordnung in Partikelmethoden sind entweder kompliziert und rechenintensiv oder ungenau. Eine Verbesserung bez. dieser Kriterien wäre wünschenswert, um derartige Methoden insbesondere im Vergleich zur FEM attraktiver zu gestalten.
5. Das Hauptziel dieser Arbeit ist die Entwicklung einer auf Nichtlokalität basierenden allgemeinen numerischen Methode zur Lösung partieller Differentialgleichungen. Hierfür werden folgende Unterziele definiert:
   a. Entwicklung und Implementierung einer PD Formulierung, die eine willkürliche Diskretisierung von Partikeln ermöglicht und gleichzeitig sämtliche Erhaltungsgleichungen der Kontinuumsmechanik erfüllt.
   b. Etablieren eines Zusammenhanges zwischen der nichtlokalen Theorie und dem Variationsprinzip, so dass aus letzterem bestimmte nichtlokale Theorien abgeleitet werden können.
   c. Entwicklung und Implementierung einer impliziten *und* expliziten partikelbasierten Methode für die Festkörpermechanik.
   d. Entwicklung und Implementierung einer allgemeine numerischen Methode, die für partielle Differentialgleichungen höherer Ordnung geeignet ist.
   e. Verifikation und Validierung der unter a-d vorgeschlagenen Methoden.

Stand von Wissenschaft und Technik

1. Problemstellungen mit sich ausbreitenden Diskontinuitäten wie sie beispielsweise bei der

Rissbildung entstehen stellen immer noch Herausforderungen für konventionelle Methoden wie FEM dar. Während Methoden wie XFEM die Ausbreitung von wenigen Rissen mit relativ einfachen Risspfaden (ohne Rissverzweigungen oder Rissinteraktionen) ermöglichen, gibt es vergleichsweise wenige Methoden für dynamische Rissausbreitungen mit komplexen Rissmustern. Die Peridynamics (PD) Methode ist eine der populärsten Verfahren für dynamische Rissprobleme. Sie ersetzt die Divergenz des Spannungstensors in der linearen Impulserhaltung durch eine „integrale“ Formulierung basierend auf sog. „Bond-Forces“, so dass der Risspfad letztendlich Teil der Lösung wird. Um die Parameter der PD „Stoffgesetze“ zu kalibrieren wird ein quasi-Kontinuumsansatz verwendet. Leider erfordert die Diskretisierung des PD-Modells eine konstante Horizontgröße für alle Partikel und basiert des weiteren auf einer expliziten Zeitintegration, so dass die Anwendbarkeit von PD sich momentan auf Probleme in der Kurzzeitdynamik beschränkt. Für quasistatische Probleme verwendet PD eine dynamische Relaxationsmethode, was zu unzuverlässigen und ungenauen Ergebnissen führt.

2. Nichtlokalitätstheorien in der Physik umfassen Theorien in der Quantenmechanik, nichtlokale Kontinuumstheorien einschließlich nichtlokaler Elastizitätstheorie, nichtlokale Schädigungsmodelle, nichtlokale Vektorrechnung sowie PD. In der Kontinuumsmechanik garantieren nichtlokale Theorien die Gutgestelltheit des Randwertproblems/Anfangsrandwertproblemes und somit die Eindeutigkeit und Existenz einer Lösung. Im Hinblick auf Problemstellungen mit Materialversagen verschmieren die meisten nichtlokalen Theorien den Riss über eine gewisse Breite. Im Gegensatz dazu ermöglicht PD die Modellierung von diskreten Rissen, was die Effizienz im Rahmen numerischer Diskretisierungsverfahren erheblich verbessert.
3. Ähnlich wie PD erfordert SPH eine homogene Partikeldiskretisierung und eine explizite Zeitintegration. SPH basiert auf der sog. starken Form und ist demnach eine Kollokationsmethode. Infolgedessen leidet SPH unter Instabilitäten. Um die numerische Stabilität von SPH aufrechtzuerhalten wurden zahlreiche Verbesserungsmöglichkeiten wie z.B. die Einführung zusätzlicher Spannungspunkte oder die Verwendung spezieller Einflussfunktionen vorgeschlagen.

Methodik

1. Im Rahmen dieser Arbeit wird das Variationsprinzip und die Methode der gewichteten Residuen zur Herleitung verschiedener neuer Methoden verwendet. Mit dem Variationsprinzip lassen sich viele physikalische Probleme formulieren, mit denen die Grundgleichungen und die damit verbundenen Randbedingungen leicht erfüllt werden können. Die nichtlokalen Gleichungen verschiedener physikalischer Modelle werden auf der Grundlage des Variationsprinzips hergeleitet.
2. Die entwickelten Methoden werden in einem selbst erstellten Code implementiert, der in C # Mathematica geschrieben wurde. Eine Reihe von numerischen Berechnungen wurden durchgeführt, um die vorgeschlagenen numerischen Methoden zu verifizieren.

Wesentliche Ergebnisse

1. Methodenentwicklung
   a. Es wurde eine DH-PD-Formulierung (Dual horizon peridynamics) entwickelt, die

unterschiedliche Horizontgrößen ermöglicht und trotzdem sämtliche Erhaltungsgleichungen erfüllt. Des weiteren erlaubt sie eine willkürliche/inhomogene Partikeldiskretisierung.

b. Es wird eine nichtlokalen Operatorenmethode (NOM) zur Lösung des elektro-magneto-mechanischen Wellenleiterproblems entwickelt. Die Methode basiert auf dem Variationsprinzip basiert und vermeidet Ansatzfunktionen, was die Implementierung drastisch vereinfacht. Gemeinsame Differentialoperatoren sowie die Variationsformen werden im Kontext von nichtlokalen Operatoren definiert.

c. Es wird eine allgemeine nichtlokale Operatormethode vorgeschlagen, die zur Lösung partieller Differentialgleichungen (PDEs) (rein) mechanischer Probleme geeignet ist. Die Variation des nichtlokalen Operators spielt hier eine äquivalente Rolle wie die Ableitungen der Formfunktionen bei netzfreien oder FE Methoden. Basierend auf dem Variationsprinzip kann somit die Tangentensteifigkeitsmatrix leicht implementiert werden. Die nichtlokale Operatormethode wird um Operator-Energiefunktionen erweitert, um die lineare Konsistenz der Methode zu erfüllen.

d. Es wird eine allgemeine Methode vorgestellt, um die lokale starke Form von Differentialgleichungen mit Hilfe eines Variationsprinzip und dem Prinzip des „dualen Horizontes“ in eine schwache Form umzuwandeln.

e. Erweiterung der NOM zur Lösung partieller Differentialgleichungen höherer Ordnung. Die NOM höherer Ordnung erhält alle partiellen Ableitungen mit angegebener maximaler Ordnung ohne die Verwendung von Formfunktionen.

f. Entwicklung eines Verfahrens zur Umwandlung der NOM in eine netzfreie Methode. Numerische Integration erfolgt auf einem Hintergrundnetz und Randbedingungen werden über ein modifiziertes Variationsprinzip auferlegt.

b. Entwicklung einer Dual-Support-Smoothed Particle Hydrodynamics (DS-SPH) Methode, die als Sonderfall der NOM angesehen werden kann und klassische Instabilitäten der SPH Methode behebt.

2. Ergebnisse und Anwendungen

a. Anwendung der vorgeschlagenen Methoden zur Modellierung komplexer Rissausbreitungs- und Rissverzweigungsprobleme in 2D und 3D.

b. Anwendung der NOM zur Lösung der Maxwell-Gleichungen, linearer Elastizitätsprobleme, Hyperelastizitätsprobleme, Modellierung von Materialversagen mit Hilfe von Phasenfeldern, Von-Karman-Plattengleichungen, Dehnungsgradientenelastizität, Poisson-Gleichung in 2D bis 5D, 1D-Schrödinger-Gleichung sowie 2D-elektrostatische Probleme.