

Zusammenfassung zur Promotionsschrift

An efficient adaptive PD formulation for complex microstructures

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades

Doktor-Ingenieur (Dr.-Ing.)

an der Fakultät Bauingenieurwesen

der Bauhaus-Universität Weimar

vorgelegt von

Ali Jenabidehkordi

(interner Doktorand)

Mentor

Prof. Dr.-Ing. Timon Rabczuk

A handwritten signature in black ink, appearing to read 'Timon Rabczuk', with a long horizontal stroke extending to the right.

Weimar, im März 2021

Problemstellung und Zielsetzung

1. Problemstellungen mit Materialversagen stellen aus zwei Gründen besondere Herausforderungen an numerische Verfahren. Einerseits ist das Randwertproblem oder Anfangsrandwertproblem bei Materialversagen schlecht gestellt, was Regularisierungsverfahren erfordert. Andererseits ändert Materialversagen die zugrundeliegenden Approximationsräume während einer Simulation. Oder anders ausgedrückt: Es werden Verfahren für sich ausbreitende Risse benötigt. Dass Finite-Elemente-Methoden (FEM) dafür wenig geeignet sind wurde bereits von Zienkiewicz vor Jahrzehnten festgestellt. Er schlug damals Partikelmethoden wie die Diskrete Elemente Methode (DEM) vor. Diese basiert allerdings nicht auf Ansätzen der Kontinuumsmechanik und ist ungeeignet, komplexes Materialverhalten der makroskopischen Skale abzubilden. Ein wesentliches Problem der DEM ist immer noch die zuverlässige und eindeutige Kalibrierung der Materialparameter.
2. Verfahren zur Modellierung von Materialversagen können in zwei Kategorien unterteilt werden: a) Diskrete Verfahren (discrete fracture) und b) verschmierte Verfahren (continuous approaches to fracture). Letztere Verfahren führen eine intrinsische Längenskale ein und verschmieren den diskreten Riss auf eine ‚endliche‘ Breite. Klassische Vertreter dieser Verfahren sind schwache oder starke nichtlokale Modelle, gradientenbasierte Modelle und Phasenfeldmodelle. Derartige Verfahren sind nicht in der Lage die Risskinematik, d.h. ein un stetiges Verschiebungsfeld, abzubilden. Demnach können sie auch nicht gewisse physikalische Phänomene um die Rissspitze/Rissfront erfassen. Darüber hinaus erfordert die Auflösung des Risses eine sehr feine Diskretisierung, was zu sehr hohen Rechenzeiten führt. Der Vorteil liegt in der einfacheren Implementierung, da verschmierte Rissverfahren keine Erfassung der Risstopologie und komplexe Risspfadverfolgungsalgorithmen benötigen. Diskrete Rissverfahren bilden den Riss in der Regel als kontinuierliche Rissoberfläche ab. Das populärste Verfahren ist wahrscheinlich die sog. ‚Extended Finite Element Method‘ (XFEM). Sie ist sehr effizient, genau und hervorragend geeignet für Problemstellungen mit einer überschaubaren Anzahl an Rissen. Für Probleme mit sehr vielen Rissen, wie sie oft unter dynamischer Beanspruchung vorkommen oder bei Verbundwerkstoffen, ist XFEM aufgrund des hohen Implementierungsaufwandes eher ungeeignet. Es gibt auch einige diskrete Rissverfahren, welche den Riss als Menge von Risssegmenten abbildet. Diese kombinieren die Vorteile diskreter und verschmierter Rissverfahren. Auf Kosten der Genauigkeit (‚üblicher‘ diskreter Rissverfahren) vereinfachen sie die Implementierung, da sie die Abbildung von Risstopologien drastisch vereinfachen. Klassische Vertreter dafür sind die ‚Cracking Particles Method‘ (CPM) und ‚Peridynamics‘ (PD). Letztere ist Gegenstand dieser Arbeit.
3. PD wurde von *Stewart Silling* im Jahr 2000 vorgestellt. PD ersetzt die Divergenz des Cauchy’schen Spannungstensors in der linearen Impulserhaltung durch eine integrale Form, die auf sog. ‚Bond‘-Kräfte basiert, welche das Materialverhalten approximiert. In diesem Sinn weist sie eine gewisse Ähnlichkeit zur DEM auf. Allerdings ist die Kalibrierung der Materialparameter deutlich einfacher und wird durch einen Quasi-Kontinuumsansatz realisiert, welche die PD-Energie (oder Energiedichte) mit der Formänderungsenergie (oder Formänderungsenergiedichte) des Kontinuums gleichsetzt. Dies ermöglicht einen ‚natürlichen‘ Übergang vom Kontinuum zum Diskontinuum. Letztendlich wird Materialversagen durch

- ‚Kappen‘ der Interaktionen einzelner Partikel realisiert. Diese können wiederum mit Hilfe eines Quasi-Kontinuumsansatzes mit makroskopischen Materialparametern wie der kritischen Energiefreisetzungsrate (critical energy release rate), Zugfestigkeit, Elastizitätsmodul und Querdehnzahl in Verbindung gebracht werden.
4. Der Großteil der Anwendungen der PD, insbesondere in der Anfangsphase, konzentriert sich auf rein mechanische Problemstellungen und Problemen mit linear elastischem Materialverhalten (bis zum Materialversagen). Die Erweiterung auf nichtlineares Materialverhalten und auf gekoppelte Probleme ist komplizierter im Vergleich zu Diskretisierungsverfahren wie der FEM, die auf Kontinuumsansätzen basiert. Ebenso nimmt die Recheneffizienz mit steigender Komplexität – stärker – ab (im Vergleich zu Verfahren wie FEM).
 5. Da das Materialverhalten der PD durch die Interaktionen von Kräften abgebildet wird, weist sie gewisse Ähnlichkeiten mit netzfreien Verfahren auf. Dementsprechend teilt sie auch gewisse Nachteile von netzfreien Verfahren. Beispielsweise sind netzfreie Verfahren aufgrund der fehlenden Netztopologie schlecht in der Lage, komplexe Ränder und dementsprechend auch komplexe Mikrostrukturen abzubilden.
 6. Diese Dissertation fokussiert sich auf effiziente PD Implementierungen, welche komplexe Mikrostrukturen, wie sie bei Verbundwerkstoffen vorkommen, abbilden können. Dies spielt eine wesentliche Rolle beim sog. ‚Computational Materials Design‘, d.h. bei der Computer-gestützten Entwicklung neuer Verbundwerkstoffe.

Stand der Wissenschaft

7. Obgleich PD in der Lage ist diskrete Risse abzubilden, gehört sie zu sog. nicht-lokalen Methoden, die bereits ihre Ursprünge deutlich vor der ersten PD Formulierung im Jahr 2000 haben. Es gibt unterschiedliche PD Modelle. Die ‚ursprüngliche‘ sog. ‚Bond-based‘ PD Formulierung (BB-PD) ist die einfachste Version, ist allerdings auf linear elastisch isotrope Festkörper mit einer Querdehnzahl von $1/4$ und $1/3$ beschränkt. Die ‚State based‘ PD Formulierung (SB-PD) wurde im Jahr 2009 von Silling als Erweiterung der BB-PD vorgestellt und erweitert die Anwendung der PD, indem sie die sog. ‚Bond‘-Kräfte mit kontinuumsmechanischen Spannungen wie dem ersten Piola-Kirchhoff Spannungstensor in Beziehung setzt. Dies ermöglicht unter zusätzlichem Aufwand die Verwendung von nahezu beliebigen Stoffgesetzen.
8. Der ‚nicht-lokale Charakter‘ der PD stellt zum Einen gewisse Anforderungen an die Implementierung und zum Anderen erhöht sie die Rechenzeit – im Vergleich zur FEM. Im Gegensatz zur FEM, welche eine h-adaptive Verfeinerung ermöglicht, erfordert PD strukturierte Diskretisierungen mit einheitlichem Interaktionsradius. Anderenfalls treten künstliche Wellenreflexionen auf. Die sog. ‚Dual-Horizon‘ PD (DH-PD) ermöglicht die Verwendung unstrukturierter Partikelanordnungen mit unterschiedlichem Interaktionsradius, was die Recheneffizienz drastisch verbessert. Gleichzeitig verhindert sie künstliche Wellenreflexionen.
9. Ein weiterer Ansatz zur Reduzierung des Rechenaufwandes besteht in der Nutzung von Ansätzen zur Softwarebeschleunigung. Wenngleich einige effiziente PD-Programme existieren, wird deren Implementierung in der Literatur kaum diskutiert. Aufgrund der ‚Partikelstruktur‘ wurde PD in den ‚Open-Source‘ Code LAMMPS implementiert. LAMMPS ist eigentlich ein Code für MD (Molekulardynamik) Simulationen, der mittlerweile in C++ zur Verfügung steht. Obwohl LAMMPS voll parallelisiert und effizient ist, ist die

Implementierung und Erweiterung der PD-Implementierung aufgrund der relativ komplexen Software-Struktur keine einfache Aufgabe. *Peridigm* ist ein C++-Programm, das speziell zur Simulation peridynamischer Mehrfeldprobleme entwickelt wurde. Es ist in der Lage, unterschiedliche Bereiche zu simulieren, die durch Kontaktmodelle verbunden sind. *Peridigm* unterstützt Pre- und Postprocessing-Tools wie z.B. *Paraview*. Ähnlich wie *LAMMPS* ist die Erweiterung von *Peridigm* schwierig.

10. Mittlerweile gibt es auch einige kommerzielle PD-Programme, die allerdings keinen Zugriff auf den Quelltext ermöglichen, so daß eine Weiterentwicklung für den Benutzer – zumindest momentan – ausgeschlossen ist.

Methodik

11. Diese Arbeit basiert auf der PD Methode. Es wird sowohl die BB-PD als auch die SB-PD verwendet.
12. Darüber hinaus wird eine neue Verfeinerungsstrategie vorgeschlagen, welche die Effizienz der PD verbessert. Diese neue Methode wird ‚Multi-Horizon‘ PD (MH-PD) genannt.
13. Es wird eine neue Softwarearchitektur für PD entwickelt und vorgestellt. Der daraus resultierende Code ist ‚open source‘ und geeignet PD Formulierungen in unterschiedliche ‚Richtungen‘ zu erweitern, insbesondere auf gekoppelte Mehrfeldprobleme und beliebige Stoffgesetze, welche allerdings nicht Gegenstand dieser Dissertation sind. Des weiteren ermöglicht die Softwarearchitektur die Diskretisierung komplexer Mikrostrukturen, was insbesondere bei Verbundwerkstoffen wichtig ist.
14. Es wird ein Programm „Relational-Based Software“ (*RBS*) als Beispiel einer C++-Implementierung zur Simulation peridynamischer Probleme auf Basis der beschriebenen Architektur entwickelt und auf *GitHub* zur Verfügung gestellt. *RBS* reduziert den Implementierungsaufwand neuer Methoden bzw. Modifikationen der PD durch Modultrennung. Dies vereinfacht die Implementierung isolierten Moduleile.

Ergebnisse

15. Es wird gezeigt, dass die neue MH-PD Formulierung bei unstrukturierten Partikelanordnungen mit unterschiedlichen Interaktionsradien keine ‚künstlichen‘ Kräfte in die Diskretisierung einführt und frei von künstlichen Wellenreflexionen ist. Ebenso werden Untersuchungen zur Recheneffizienz durchgeführt.
16. Des weiteren wird anhand ausgewählter Beispiele gezeigt, dass die vorgestellte MH-PD Formulierung unempfindlich gegenüber unterschiedlicher räumlicher Diskretisierungen ist.
17. Es wird ausführlich der Vorteil der neuen Softwarearchitektur im Vergleich zu bestehenden PD-Programmen diskutiert und aufgezeigt. Dies beinhaltet auch Problemstellungen mit komplexen Mikrostrukturen.
18. Die vorgestellte PD-Implementierung wird anhand von experimentellen Ergebnissen validiert. Die Möglichkeit, PD auch auf komplexe Mikrostrukturen anwenden zu können wird anhand einer Simulation eines speziellen Verbundwerkstoffen aufgezeigt, d.h. sog. Polymer-Matrix Verbundwerkstoffe. Es wird gezeigt, dass makroskopische Spannungs-Dehnungs-Kurven anhand von Simulationen der Mikroskale gut approximiert werden können.