Zusammenfassung der Promotionsschrift

Eine nichtlokale Operatormethode zur Modellierung quasistatischen/dynamischen Materialversagens

zur Erlangung des akademischen Grades

Doktor-Ingenieur (Dr.-Ing.)

an der Fakultät Bauingenieurwesen

der

Bauhaus-Universität Weimar

vorgelegt von

M.Sc.Yongzheng Zhang

Geboren in Shandong, China

(interner Doktorand)

Mentor

Prof. Dr.-Ing. Timon Rabczuk

Weimar, November 2021

Problemstellung und Zielsetzung

1. Zahlreiche physikalische Problemstellungen können mit Hilfe von partiellen Differentialgleichungen (PDEs) modelliert werden. Da die Lösung von PDEs für komplexe Geometrien und mit steigender Komplexität analytisch nicht möglich ist, wurden numerische Methoden wie beispielsweise die Methode der finiten Elemente (FEM) entwickelt. Alternative Verfahren sind beispielsweise netzfreie Methoden, Finite-Differenzen-Verfahren, Randelementmethoden oder ‚Isogeometric Analysis' (IGA). Die meisten numerischen Methoden basieren auf sogenannten Formfunktionen für die Feldinterpolation, wobei die Ableitungen der Formfunktion Differentialoperatoren darstellen. Für PDEs höherer Ordnung ergeben sich dementsprechend hohe Anforderungen an die Differenzierbarkeit der Formfunktionen. Desweiteren sind die Differentialoperatoren sogenannte ‚lokale' Operatoren, welche an einem Punkt spezifiziert werden. Derartige numerische Verfahren haben Schwierigkeiten bei der numerischen Lösung von Problemstellungen mit sich bewegenden Grenzen/Rändern oder Unstetigkeiten innerhalb des Gebiets. Ein klassisches Beispiel dafür sind Rissausbreitungsprobleme. Beispielsweise ist der lokale Differentialoperator für Probleme mit starken Unstetigkeiten nicht definiert.

2. Peridynamik (PD) ist eine elegante netzfreie numerische Methode zur Lösung von Rissausbreitungsproblemen. PD basiert auf sog. Nichtlokalität. Durch diese Nichtlokalität unterscheidet sich die PD grundlegend von den meisten ‚gewöhnlichen', d.h. lokalen, Methoden wie der FEM. Sowohl die FEM als auch viele netzfreie Methoden basieren auf einem Variationsprinzip und der Methode der gewichteten Residuen. Die Verwendung eines Variationsprinzips wäre auch für die oben erwähnten nichtlokalen Theorien – wie PD – vorteilhaft, da es den Anwendungsbereich erheblich erweitert. PD basiert außerdem auf einer expliziten Zeitintegration, was die Anwendbarkeit auf dynamische Probleme beschränkt.

3. Darüber hinaus ist die Berechnung von partiellen Ableitungen höherer Ordnung in netzfreien Methoden entweder kompliziert und rechenintensiv oder ungenau. Eine Verbesserung in Bezug auf diese Kriterien wäre wünschenswert, um solche Methoden attraktiver zu machen, insbesondere im Vergleich zur FEM.

4. Das Hauptziel dieser Arbeit ist die Implementierung einer impliziten partikelbasierten nichtlokalen Operatormethode (NOM), welche auf einem Variationsprinzip beruht und die Lösung von statischen und quasi-statischen Problemen ermöglicht, insbesondere für Problemstellungen mit Materialversagen. Zu diesem Zweck werden die folgenden Teilziele definiert:

   - Entwicklung und Implementierung der impliziten partikelbasierten NOM – erster und höherer Ordnung – zur Lösung von PDEs unterschiedlicher Ordnung in verschiedenen Dimensionen (2D und 3D).

- Implementierung einer expliziten partikelbasierten NOM für dynamische Problemstellungen.
- Erweiterung der NOM-Formulierung für Kirchhoff (dünne) Platten unter Ausnutzung der Stetigkeit höherer Ordnung der netzfreien Methode (NOM).
- Anwendung der NOM auf quasistatische und dynamische Bruchprobleme, um die Effizienz und Genauigkeit der Methode zu demonstrieren.

Stand der Wissenschaft und Technik

5. Zur Lösung von PDEs werden unterschiedliche numerische Verfahren verwendet. Bei der FEM wird der Berechnungsbereich durch Elemente diskretisiert und die Formfunktionen werden innerhalb eines Elementes definiert, um die Primärvariable innerhalb jedes Elements zu interpolieren. Die gängigsten Elementformulierungen basieren auf Lagrangepolynomen. Diese erlauben es nicht, Unstetigkeiten wie beispielsweise Risse innerhalb eines Elementes zu formulieren. Auch PDEs höherer Ordnung sind nicht einfach mit der FEM aufgrund ihrer C^0-Stetigkeit zu modellieren.
6. Die ‚Extended Finite Element' Methode (XFEM) erlaubt es, Unstetigkeiten – wie Risse – innerhalb eines Elementes abzubilden. Dafür wird der Approximationsraum der Primärvariablen mit Hilfe eines sog. Partition-von-Eins- Konzeptes und einer dementsprechenden Anreicherungsfunktion modifiziert. Allerdings erfordert die Abbildung von Rissen immer noch Techniken, um die Risstopologie zu erfassen. Ebenso werden Rissverfolgungsalgorithmen benötigt, was die Implementierung der XFEM insbesondere für Problemstellungen mit komplexen Rissgeometrien (Rissverzweigungen oder Rissinteraktionen) enorm erschwert.
7. Netzfreie Methoden vermeiden Elemente, was die Modellierung großer Verformung erleichtert. Unstetigkeiten in netzfreien Verfahren können prinzipiell mit den gleichen Konzepten realisiert werden wie in der FEM. Durch ihre Stetigkeit höherer Ordnung vereinfachen sie auch die Lösung PDEs höherer Ordnung. Der größte Nachteil von netzfreien Methoden liegt in der zumeist sehr hohen Rechenzeit.
8. Finite-Differenzen-Methoden (FDM) bilden eine Alternative zur FEM und zu netzfreien Methoden. Im Gegensatz zur FEM und den meisten netzfreien Verfahren basiert die FDM auf der starken Form, was die Aufbringung von natürlichen Randbedingungen erschwert. Im Vergleich zur FEM ist die FDM nicht so robust und stabil. Ausbreitende Risse, welches natürliche Randbedingungen an den Rissufern erfordert, können ebenso nicht effektiv mit der FDM modelliert werden.
9. Die sog. Isogeometric Analysis (IGA) basiert auf CAD-Formfunktionen, welche sich durch ihre Stetigkeit höherer Ordnung auszeichnen. Somit eignet sich die

IGA für PDEs höherer Ordnung. Für komplexe Geometrien, welche sich aus sog. ‚Patches' zusammensetzen, ist die IGA an den Übergängen auch lediglich C^0-stetig, was zusätzlichen Aufwand (und Zwangsbedingungen) erfordert. Ebenso eignet sich die IGA wenig zur Modellierung von sich ausbreitenden Rissen.

Methodik

10. In dieser Arbeit wird eine sog. Nichtlokale Operatorenmethode (NOM) vorgeschlagen, welche auf der Methode der gewichteten Residuen und Variationsprinzipien beruht. Die NOM ist stetig beliebiger Ordnung und ermöglicht eine einfache Abbildung von Materialversagen. Sie benötigt keinerlei Formfunktionen, lediglich die Definition einer potentiellen Energie (oder eines Randwertproblems) und mit Hilfe der Methoden der gewichteten Residuen oder einer Variationsformulierung folgt automatisch die konsistente Tangentensteifigkeitsmatrix, der innere sowie äußere Kraftvektor, was die Implementierung drastisch vereinfacht.
11. Die Berechnung der nichtlokalen Operationen erster und höherer Ordnung erfolgt über eine dementsprechende Taylorreihenentwicklung. Die NOM erhält die nichtlokalen Operationen durch eine gewichtete Summe der Taylor-Erweiterungsreihen innerhalb des Einflussbereiches eines Partikels/Knotens.
12. Die NOM wurde in Mathematica implementiert.
13. Zur Modellierung von Materialversagen innerhalb der NOM wurde ein Phasenfeldmodell (zweiter Ordnung) verwendet.

Wesentliche Ergebnisse

14. Theoretische Ergebnisse: Das Operator-Energie-Funktional kann Instabilitäten und Null-Energie-Moden verhindern.
15. Numerische Untersuchungen an ausgewählten Beispielen zeigen, dass die NOM vergleichbare Konvergenzraten der FEM erreicht.
16. Anhand unterschiedlicher sog. ‚Benchmark'-Probleme – mit vorhandenen experimentellen Daten – wurde die Genauigkeit der NOM gezeigt. Für das Kalthoff-Winkler-Experiment wurde bspw. gezeigt, dass die NOM Rissgeschwindigkeiten, Rissmuster und unterschiedliche Versagensmechanismen korrekt abbilden kann. Ebenso zeigte die NOM gute Übereinstimmung in Last-Verformungs-Kurven.

Unterschrift des Betreuers