

Zusammenfassung der Promotionsschrift

H-adaptive Verfahren basierend auf a-posteriori Fehlerschätzern für die Simulation von Mehrfeldproblemen

DISSERTATION

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

an der Fakultät Bauingenieurwesen
der Bauhaus-Universität Weimar

vorgelegt von

Jafar Amani Dashlekeh

Geboren am 21. März 1985 in Ardebil, Iran

Mentor: Prof. Dr.-Ing. Timon Rabczuk

Status des Doktoranden: Extern

Weimar, Januar 2023

PROBLEMSTELLUNG UND ZIELSETZUNG

1. Modellierung und Simulation ist ein wesentlicher Bestandteil zur Vorhersage der physikalischen Eigenschaften von Materialien und Strukturen. Der Rechenaufwand für multiphysikalische Problemstellungen kann allerdings erheblich sein.
2. Ein Maß, das die Effizienz und Genauigkeit des numerischen Modells quantifiziert, ist die sog. Konvergenzrate. Sie gibt an, wie schnell die numerische Lösung sich dem exakten Ergebnis annähert, wenn die Anzahl der Iterationen, Elemente, Freiheitsgrade etc. zunimmt. Zur Steigerung der Effizienz von numerischen Lösungsverfahren werden daher in der Regel h-adaptive Verfeinerungsstrategien verwendet, welche auf a-posteriori Fehlerschätzern basieren, welche Fehler in bestimmte Größen (QoIs) quantifizieren und diese anschließend durch die h-Verfeinerungsstrategie minimieren.
3. Netzfrie Methoden ermöglichen Simulationen von komplexen Geometrien. Sie eignen sich insbesondere zur Lösung nichtlinearer Gleichungen, stochastischer Prozesse und aufgrund ihrer Stetigkeit höherer Ordnung auch für partielle Differentialgleichungen höherer Ordnung. Im Gegensatz zu ‚klassischen‘ FE-Methoden sind netzfrie Verfahren allerdings rechenintensiver.
4. Die Simulation einiger Mehrfeldprobleme erfordert die Erfüllung einer inf-sup oder Ladyzenskaja-Babuška-Brezzi (LBB)-Stabilitätsbedingung, welche die Kompatibilität und Stetigkeit konjugierter Primär- und Sekundärvariablen sicherstellen muss. Gemischte mechanische FE-Formulierungen sowie klassische u-p Diskretisierungen erfordern die Erfüllung der inf-sup Bedingungen. Letztere (u-p) Formulierungen haben Anwendungen in der Geotechnik oder Geomechanik, z.B. zur Modellierung poröser Medien.
5. Die Modellierung und Simulation von Schädigungsprozessen in der Kurzzeitdynamik zählt auch zu den anspruchsvollsten adiabaten thermo-mechanischen Mehrfeldproblemen. Aufgrund der großen Wärmeentwicklung kann sich teilweise der Aggregatzustand der Festkörper lokal verändern, welcher wesentlich den Schädigungsprozess bestimmt.
6. Ziel dieser Dissertation ist die Entwicklung und Implementierung fehlerabschätzerbasierter Verfeinerungsstrategien für netzfrie Methoden und Mehrfeldprobleme.
7. Des Weiteren effiziente LBB (inf-sup)-stabile gemischte Diskretisierungen für Mehrfeldprobleme zu entwickeln und implementieren, insbesondere für Anwendungen in der Geomechanik, i.e. für poröse Medien und für anspruchsvolle Problemstellungen in der Kurzzeitdynamik, bspw. Festkörper unter Impaktbeanspruchungen. Hierfür soll das Johnson-Cook Modell im Rahmen der sog. Peridynamics (PD)-Methode verwendet werden.

STAND DER WISSENSCHAFT UND TECHNIK

8. Modellierung und Simulation ist ein wesentlicher Baustein zur Entwicklung neuer Materialien und Strukturen. Klassische Verfahren sind finite Element-Methoden oder netzfreie Verfahren. Zur Steigerung ihrer Effektivität werden oft h-adaptive Verfeinerungsstrategien entwickelt, welche durch sog. A-posteriori Fehlerschätzer bestimmt werden. Während es zahlreiche Modelle, Methoden und Fehlerschätzer für lineare Probleme und Einfeldprobleme gibt, fehlt es an entsprechenden Verfahren für nichtlineare Mehrfeldprobleme.
9. Bei gewissen Mehrfeldproblemen, i.e. Problemen mit Zwangsbedingungen, muss die zugrundeliegende gemischte Diskretisierung eine Stabilitätsbedingung erfüllen. Im Gegensatz dazu unterliegt die netzfreie Mixed Discrete Least Squares Meshless (MDLSM) keinen LBB-Bedingungen, da sie auf der Minimierung der kleinsten Quadrate-Funktion basiert. Dies ermöglicht die gleiche Approximationsordnung für Verschiebungen und Spannungen.

METHODIK

10. Es wurde eine sog. Mixed Discrete Least Squares Meshless (MDLSM)-Methode zur Analyse von Elastizitätsproblemen entwickelt. Zur Erhöhung der Effizienz wurde eine mehrstufige h-adaptive Verfeinerungsstrategie entwickelt, welche auf einem a-posteriori Fehlerabschätzer basiert.
11. Anschließend wurde ein sog. Dual-Weighted-Residual (DWR)-Fehlerabschätzer implementiert, welcher Grundlage einer sog. zielorientierten Fehlerabschätzung ist, so dass Fehler in beliebigen gewünschten Variablen minimiert werden können. Neben einer entsprechenden Verfeinerungsstrategie wurde auch eine Vergrößerungsstrategie entwickelt.
12. Für Mehrfeldprobleme wurden gekoppelte dynamische Biot-Gleichungen zur Modellierung elastischer poröser Medien verwendet. Die Fehlerschätzer und Verfeinerungsstrategien wurden dementsprechend erweitert und mit ‚klassischen‘ Fehlerschätzern wie dem Zienkiewicz-Zhu-Fehlerschätzer, dem superkonvergenten Patch-Recovery (SPR), dem gewichteten superkonvergenten Patch-Recovery (WSPR) und der L2-Projektion verglichen.
13. Letztendlich wurde eine dreidimensionale Peridynamics (NOSB-PD)-Formulierung für thermo-mechanisches, sprödes und duktilen Materialversagen entwickelt und auf Problemstellungen in der Kurzeitdynamik angewendet, insbesondere Impaktprobleme. Dafür musste das Johnson-Cook (JC)-Stoffgesetz in einer NOSB-PD entwickelt werden. Die vorgeschlagene Methode wurde anhand des Taylortests und Kalthoff-Winkler-Experimentes validiert.
14. Die Implementierung erfolgte in einem selbst entwickelten in Fortran und C++ geschriebenen objektorientierten parallelisierten-Code. Das Testen der Methodik erfolgte zuvor in einer MATLAB-Umgebung.

ERGEBNISSE

15. Die Genauigkeit der implementierten Verfahren wurde für analytische Beispiele und durch Vergleich mit Experimenten getestet. Im ersten Fall wurden Fehlernormen und Konvergenzraten der adaptiven Verfahren bestimmt und mit optimalen Konvergenzraten verglichen. Im Vergleich zu globalen Verfeinerungsstrategien erhöhten sich die Konvergenzraten um einen Faktor von ca. 1,8. Durch Verwendung von Anreicherungsverfahren konnte die Konvergenzrate nahezu verdoppelt werden.
16. Im Vergleich zu herkömmlichen a-posteriori Fehlerschätzern konnten zielorientierte Fehlerschätzer die Konvergenzrate je nach Problem um den Faktor 1,4 bis 2,0 erhöhen. Beispielsweise wurde bei dem ‚Scheibe mit Loch‘ Problem die Normalspannung in x-Richtung in gewissen Bereichen als Zielgröße betrachtet.
17. Die NOSB-PD-Formulierung wurde anhand zweier klassischer Validierungsbeispiele getestet: 1) dem Taylortest und 2) dem Kalthoff-Winkler-Experiment. Im ersten Beispiel wurden zu verschiedenen Zeitpunkten Verschiebungen, Temperaturen, von-Mises-Spannungen und äquivalente plastischer Dehnungen mit den entsprechenden Größen der Experimente verglichen. Im zweiten Benchmark-Beispiel wurden Rissmuster und Rissgeschwindigkeiten betrachtet und gezeigt, dass diese mit unterschiedlichen Experimenten gut übereinstimmen.