

Schädigungsmodellierung auf der Basis eines Zweiskalen-Ansatzes

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 X271, 71059 Sindelfingen
E-Mail: stefan.kolling@daimlerchrysler.com

Zusammenfassung:

Im vorliegenden Beitrag erfolgt die Diskussion eines mikromechanischen Materialansatzes zur numerischen Simulation der Steifigkeitsreduktion von Werkstoffen. Die Ursache dieser Materialdegradation besteht in der Evolution von Poren und Rissen auf der Mikroebene der Strukturen. Mittels der gewöhnlichen makroskopischen Ansätze, die in kurzer Form reflektiert werden, können die Schädigungseffekte lediglich phänomenologisch abgebildet werden. Eine detaillierte Betrachtung der Mikroskale ermöglicht dagegen eine gezielte Übertragung der Schädigungsentwicklung in das numerische Modell.

Im ersten Schritt wird zunächst ein repräsentativer Volumenbereich der Mikroebene definiert, wobei dieser einen ellipsoiden Einschluss sehr geringer Steifigkeit aufweist. Mittels der Theorie der Konfigurationskräfte wird anschließend analog dem Wachstum von Mikroporen die geometrische Veränderung derartiger Einschlüsse beschrieben. Die auf der Basis numerischer Homogenisierung gemittelten Spannungen der Mikroskale werden abschließend auf die Makroskale transferiert und stellen somit die Systemantwort zu den gegebenen makroskopischen Deformationen dar. Im Rahmen dieses Beitrags werden neben den theoretischen Grundlagen und den Anwendungsbeispielen insbesondere Aspekte zur Modellierungstechnik unter der Verwendung des expliziten FE Programms LS-DYNA diskutiert.

Keywords: Konfigurationskräfte, Mikromechanik, Schädigung, 2-Skalen-FEM

Abstract:

In the present paper, a micromechanical approach to simulate softening behaviour of materials will be shown. This material degradation is caused by the evolution of microcracks and microvoids. Based on the well known macroscopic approaches, which will be described in a short way, damage phenomena can only be modelled phenomenologically. Considering explicitly the microscale, the evolution of microvoids can be mapped and the approximation quality can be improved by a better understanding of damage effects in the material.

In a first step, a representative volume is defined, where an ellipsoidal soft inclusion is embedded in a stiffer surrounding material. With the aid of configurational forces, the geometrical modification of these inclusions can be described. In the following, the averaged strain will be determined according to homogenization methods and transferred to the macroscale and approximates the material response to the given macroscopic strains. In the framework of this article, theoretical basics and application examples will be shown. In particular, we will describe the modelling technique using the explicit FE-Code LS-DYNA.

Keywords: Configurational Forces, Micromechanics, Damage, 2-scale FEM

1 Einführung

Im Rahmen der numerischen Simulation hyperelastischer Werkstoffe insbesondere unter zyklischen Beanspruchungen ist eine Berücksichtigung signifikanter Schädigungseffekte notwendig. Hierbei stellen die sogenannten Softening-Effekte die Ursache für den Abbau von Steifigkeit dar. Während der Beanspruchung verändert sich dabei die Struktur auf der Mikroebene. Anhand von Bild 1 links kann die Evolution von Mikroporen bei einem Elastomer beobachtet werden.

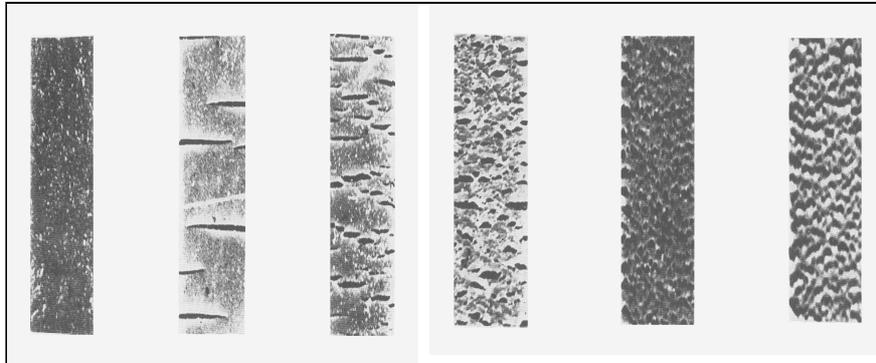


Bild 1: Evolution von Mikroporen in Elastomeren

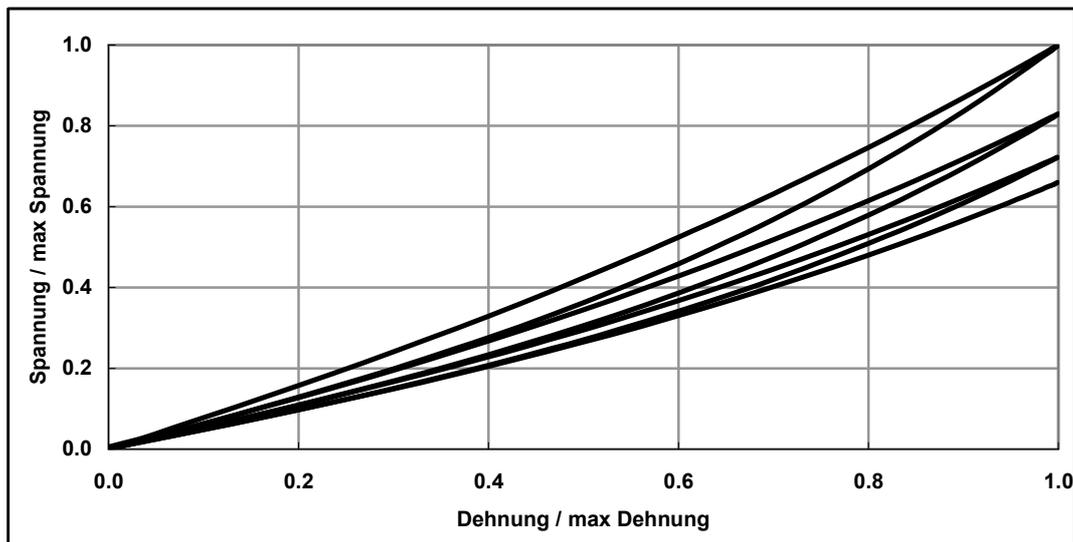


Bild 2: Spannungsabbau mit zunehmender Zyklenzahl bei uniaxialem Zugversuch

Hinsichtlich der qualitativen Erscheinungen ergibt sich am Beispiel des Benchmarktests von Bild 2 eine zunehmende Reduktion der Spannungen. Dieser Effekt ist bei einer zyklischen Beanspruchung besonders stark ausgeprägt. Die numerische Abbildung hyperelastischer Materialien mit derartigen Schädigungscharakteristiken erfolgt weitestgehend über phänomenologische Modelle (siehe u.a. Lemaitre, Desmorat [9]). Die freie Energie ψ wird dabei neben einer Verzerrungsgröße in einer zusätzlichen Abhängigkeit von einer Geschichtsvariablen d definiert.

$$\psi = \psi(\underline{\mathbf{C}}, d) = (1-d) \psi_0(\underline{\mathbf{C}}), \text{ mit } \underline{\mathbf{C}} = \underline{\mathbf{F}}^T \underline{\mathbf{F}} \text{ und } 0 \leq d \leq 1 \quad (1)$$

Für den Fall kleiner Verzerrungen wird der in Gleichung (1) verwendete rechte Cauchy-Green-Tensor $\underline{\mathbf{C}}$ durch den linearen Verzerrungstensor $\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}$ ersetzt. Die zusätzliche mechanische Größe d ermöglicht unter der Verwendung des ungeschädigten hyperelastischen Potentials ψ_0 eine zu identischen Verzerrungen veränderliche Spannung abzubilden. Der jeweilige Steifigkeitsverlust, der von dem zu modellierenden Werkstoff sowie der Beanspruchung abhängt, muss nunmehr über einen funktionalen Zusammenhang aus den realen Versuchen in die numerische Simulation übertragen werden. Auf der Grundlage der Dissipationsungleichung

$$D = \underline{\mathbf{S}} : \frac{\dot{\underline{\mathbf{C}}}}{2} - d \frac{\partial \psi_0(\underline{\mathbf{C}})}{\partial \underline{\mathbf{C}}} : \dot{\underline{\mathbf{C}}} - \psi_0(\underline{\mathbf{C}}) \dot{d} = \left(\frac{\underline{\mathbf{S}}}{2} - d \frac{\partial \psi_0(\underline{\mathbf{C}})}{\partial \underline{\mathbf{C}}} \right) \dot{\underline{\mathbf{C}}} - \psi_0(\underline{\mathbf{C}}) \dot{d} \leq 0 \quad (2)$$

sowie der Auswertung nach Coleman, Noll [1] verbleibt die reduzierte Ungleichung

$$D = -\psi_0(\underline{\mathbf{C}}) \dot{d} \leq 0, \quad (3)$$

die durch eine geeignete Wahl einer Evolutionsgleichung für die interne Variable d erfüllt werden muss. Aufgrund der nichtnegativen Energie $\psi_0(\underline{\mathbf{C}})$ wird die Schädigungsgröße in Abhängigkeit von dem Potential gebracht, womit eine Evolutionsbeziehung der Form

$$d = f(\psi_0(\underline{\mathbf{C}})) = d^\infty \left[1 - \exp(-\max \psi_0 / \eta) \right] \quad (4)$$

definiert werden kann (siehe z.B. TIMMEL et al. [13]). Die Variablen d^∞ und η werden im Rahmen des Schädigungsmodells nach Gleichung (4) ausgehend von den zur Verfügung stehenden Spannungs-Verzerrungs-Daten als maximale Schädigung respektive Schädigungsintensität ermittelt.

Derartige Schädigungsmodelle sind in der Praxis vorwiegend aufgrund ihrer Effektivität sehr weit verbreitet. Das in LS-DYNA implementierte Materialmodell 183 (siehe Kolling et al. [7]) ermöglicht hierbei eine Simulation auf der Basis tabulierter Spannungs-Verzerrungs-Daten für gummiartige Materialien, wodurch der Aufwand der Parameteridentifikation entfällt.

Mit zunehmender Komplexität der abzubildenden Struktur sinkt jedoch die Approximationsgüte, da analog zu den meisten hyperelastischen Materialansätzen ausschließlich die gemessenen Daten in die Numerik übertragen werden. Die Prozesse beziehungsweise strukturellen Veränderungen in den tieferen Skalen bleiben dagegen unberücksichtigt. In der aktuellen Forschung werden in diesem Zusammenhang Materialmodelle entwickelt, bei denen eine Mikrostrukturänderung berücksichtigt werden kann. In den Arbeiten von Kolling [6] und Müller [11] erfolgte eine Modellierung von Morphologieänderungen bei metallischen Legierungen. Die während der Belastung beobachtete geometrische Veränderung von Einschlüssen konnte somit in das FE-Modell übertragen werden.

Aufbauend auf diesen Arbeiten wurde in Timmel et al. [14] und Timmel et al. [15] ein Materialmodell vorgestellt, mit dessen Hilfe eine Mikroporenentwicklung mit einhergehendem Spannungsabbau simuliert werden konnte. Während in den beiden letztgenannten Beiträgen ausschließlich die Mikroebene analysiert wurde, erfolgt im Rahmen dieses Artikels eine Vorstellung gekoppelter Modelle, bei denen die Spannungen und Verzerrungen zwischen der gewöhnlichen Makroebene sowie der Mikroebene transferiert werden. Hierbei werden die dafür notwendigen Grundlagen zur Homogenisierung in kurzer Form vorgestellt. Während für den Fall kleiner Verzerrungen eine analytische Lösung und somit ein komplexes Zweiskalen-Materialmodell definiert werden kann, wird bei großen Verzerrungen eine explizite FE-Analyse der Mikroebene notwendig. Neben den theoretischen Grundlagen und Aspekten zur Implementierung in LS-DYNA werden Anwendungsbeispiele sowohl für kleine als auch große Verzerrungen vorgestellt.

2 Zweiskalen-Ansatz

Anhand von Bild 3 links wird das Prinzip des Zweiskalen-Modells veranschaulicht. Neben einer beliebig beanspruchten Makrostruktur wird ein mikroskopischer Ausschnitt definiert, der ein Gebiet B^+ des Potentials ψ^+ und einen weichen Einschluss B^- geringerer Steifigkeit aufweist $\psi^- \ll \psi^+$.

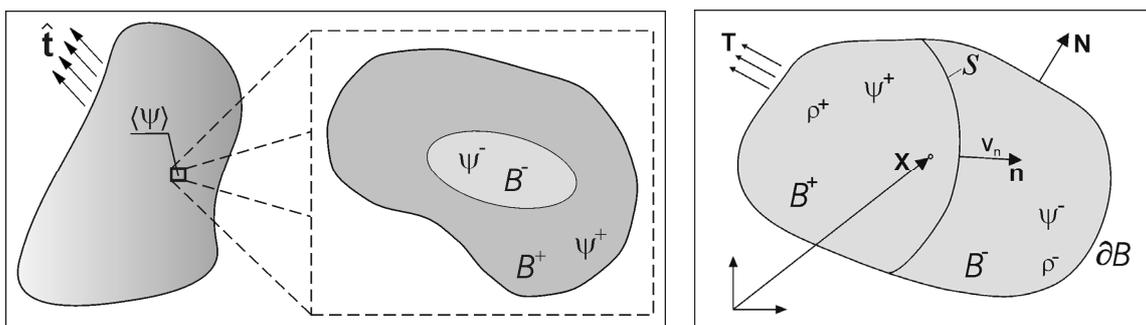


Bild 3: links: Mikro-Makroskalen-Interaktion, rechts: Mikromechanisches Zweiphasenmodell

Dieser weiche Einschluss repräsentiert einen materiellen Defekt in Form eines geschädigten Gebietes, im Folgenden auch als Mikropore bezeichnet. Auf der Makroebene werden solche mikroskopischen Inhomogenitäten lediglich in homogenisierter Form berücksichtigt. Die in der Makrostruktur gespeicherte Verzerrungsenergie stellt somit einen Mittelwert $\langle \psi \rangle = f(B^+, B^-, \psi^+, \psi^-)$ der mikroskopischen Potentiale dar. Die während der Belastung analog Bild 1 auftretenden Mikroporenvergrößerungen werden über eine Ausdehnung des weichen Einschlussgebietes B^- sowie einer Kontraktion des steiferen Gebietes B^+ modelliert. In der Konsequenz verringert sich die mittlere Verzerrungsenergie dichte $\langle \psi \rangle$, womit ein Steifigkeitsabbau analog zu den phänomenologischen Schädigungsmodellen (z.B. Gleichungen (1)-(4)) abgebildet werden kann. Der weiche Einschluss wird hierbei geometrisch durch einen Ellipsoiden approximiert. Einerseits weisen Mikroporen sehr häufig ellipsoide Formen auf, andererseits können somit im Folgenden noch dargestellte Effizienzsteigerungen bei der Materialformulierung erzielt werden. Die Hauptaufgabe besteht zunächst darin, das Wachstum der ellipsoiden Einschlüsse zu beschreiben.

2.1 Mikromechanische Formulierung

Für die Beschreibung des Einschlusswachstums ist zunächst eine Diskussion der thermomechanischen Bilanzgleichungen in einem Zweiphasensystem nach Bild 3 rechts notwendig. Die abgebildete Mikrostruktur wird durch eine beliebige Kraft $\underline{\mathbf{T}} = \underline{\mathbf{P}}\underline{\mathbf{N}}$ belastet. Mit $\underline{\mathbf{P}}$ werden die 1.Piola-Kirchhoff-Spannungen, mit $\underline{\mathbf{N}}$ der Normaleneinheitsvektor auf dem äußeren Rand ∂B , und mit $\underline{\mathbf{n}}$ der Normalenvektor auf der scharfen Phasengrenze S definiert. Infolge der Phasengrenze, welche die unterschiedlich steifen Phasen identischer Dichte $\rho = \rho^+ = \rho^-$ abgrenzt, sind hierbei zusätzliche Formulierungen unter der Verwendung des Sprungoperators $[[\bullet]] = (\bullet)^+ - (\bullet)^-$, der Annahme konstanter Temperatur sowie der Abwesenheit von Volumenkräften ($\underline{\mathbf{f}} = \underline{\mathbf{0}}$, $\Theta = \text{const.}$) notwendig. Basierend auf der Energiebilanz $\rho[[e + 0.5|\dot{\underline{\mathbf{x}}}|^2]]v_n + [[(\underline{\mathbf{P}}\underline{\mathbf{n}}) \cdot \dot{\underline{\mathbf{x}}}] = 0$ mit der Partikelgeschwindigkeit $\dot{\underline{\mathbf{x}}}$, der freien Energie $\Psi = \rho(e - \eta\Theta)$ mit der inneren Energie e und der Entropiedichte η , sowie der Entropiebilanz $\rho\Theta[[\eta]]v_n - \omega_S\Theta = 0$ ergibt sich die Dissipationsungleichung für ein Zweiphasensystem

$$[[\Psi + 0.5\rho|\dot{\underline{\mathbf{x}}}|^2]]v_n + [[(\underline{\mathbf{P}}\underline{\mathbf{n}}) \cdot \dot{\underline{\mathbf{x}}}] = \omega_S\Theta \geq 0. \quad (5)$$

Nach Gleichung (5) wird eine Entropie ω_S auf der Grenzfläche für den Fall produziert, dass sich die Phasengrenze mit der Geschwindigkeit v_n in die Normalenrichtung $\underline{\mathbf{n}}$ bewegt.

Mittels der lokalen Impulsbilanz $[[\underline{\mathbf{P}}\underline{\mathbf{n}} + \rho\dot{\underline{\mathbf{x}}}]v_n = 0$ kann der zweite Term in Gleichung (5) zu dem Ausdruck $[[(\underline{\mathbf{P}}\underline{\mathbf{n}}) \cdot \dot{\underline{\mathbf{x}}}] = -\rho v_n [[|\dot{\underline{\mathbf{x}}}|^2]] - v_n \underline{\mathbf{n}} \cdot [[\underline{\mathbf{F}}^T \underline{\mathbf{P}}]]\underline{\mathbf{n}} - v_n^2 \rho [[\underline{\mathbf{F}}^T \dot{\underline{\mathbf{x}}}] \cdot \underline{\mathbf{n}}$ umgeformt werden (siehe Müller [11]), womit die modifizierte Dissipationsungleichung

$$\underbrace{(\underline{\mathbf{n}} \cdot [[\underline{\mathbf{M}}]\underline{\mathbf{n}} - v_n \rho \underline{\mathbf{n}} \cdot [[\underline{\mathbf{F}}^T \dot{\underline{\mathbf{x}}}]])}_{\tau_n} v_n = \underbrace{\omega_S \Theta}_{d_s} \geq 0, \quad \text{mit } \underline{\mathbf{M}} = (\Psi - 0.5\rho|\dot{\underline{\mathbf{x}}}|^2)\underline{\mathbf{1}} - \underline{\mathbf{F}}^T \underline{\mathbf{P}} \quad (6)$$

aufgestellt werden kann. Die lokale Dissipation d_s infolge einer Phasengrenzenbewegung wird nach Gleichung (6) thermodynamisch durch die Konfigurationskraft τ_n getrieben. Unter Beachtung des dynamischen Energie-Impuls-Tensors $\underline{\mathbf{M}}$ (siehe Kolling, Mueller [8]) wirken sich insbesondere Unterschiede in den freien Energien sowie den Spannungs- und Verzerrungsfeldern der beiden Phasen in einer zunehmenden Dissipation aus. Diese Differenzen sind aufgrund der Annahme eines sehr weichen Einschlussgebietes gegeben.

Die globale Form der Dissipationsungleichung (6) ergibt sich durch die Integration über den gesamten Einschlussrand

$$D = \int_S \tau_n v_n \, dA \geq 0. \quad (7)$$

3 Evolutionsgleichungen

Auf der Basis der Dissipationsungleichung in globaler Form (7) ist es nunmehr möglich, geometrische Veränderungen aus den realen Versuchen in die Numerik zu übertragen. Infolge der werkstoff- sowie belastungsabhängigen Strukturmodifikation sind dabei entsprechende Evolutionsgleichungen aufzustellen, um über die Evolutionsparameter das numerische Modell anzupassen. Die Restriktion auf ellipsoide Einschlüsse ermöglicht dabei die Einführung von Geometrieparametern. Im Rahmen der in diesem Beitrag vorgestellten Betrachtungen wird der Einschluss mittels einer Form-, Volumen- sowie Rotationsvariablen beschrieben $\mathcal{X} = \mathcal{X}(m, V, \varphi)$. In der Konsequenz können auf der Basis der Dissipationsungleichung (7) die einzelnen treibenden Kräfte auf diese geometrischen Größen bestimmt werden. Hierfür wird zunächst die Geschwindigkeit, mit welcher sich die Phasengrenze in Normalenrichtung bewegt, durch den Ausdruck

$$v_n = \dot{\mathcal{X}}(m, V, \varphi) \cdot \mathbf{n} = \frac{\partial \mathcal{X}(m, V, \varphi)}{\partial m} \cdot \mathbf{n} \dot{m} + \frac{\partial \mathcal{X}(m, V, \varphi)}{\partial V} \cdot \mathbf{n} \dot{V} + \frac{\partial \mathcal{X}(m, V, \varphi)}{\partial \varphi} \cdot \mathbf{n} \dot{\varphi} \quad (8)$$

substituiert. Einsetzen der Beziehung (8) in Gleichung (7) ergibt die modifizierte Ungleichung

$$D = \int_S \left(\tau_n \frac{\partial \mathcal{X}(m, V, \varphi)}{\partial m} \cdot \mathbf{n} \dot{m} + \tau_n \frac{\partial \mathcal{X}(m, V, \varphi)}{\partial V} \cdot \mathbf{n} \dot{V} + \tau_n \frac{\partial \mathcal{X}(m, V, \varphi)}{\partial \varphi} \cdot \mathbf{n} \dot{\varphi} \right) dA \quad (9)$$

$$= \tau_m \dot{m} + \tau_V \dot{V} + \tau_\varphi \dot{\varphi} \geq 0$$

für ein Zweiphasensystem mit einem ellipsoiden Einschluss. Die zweite Beziehung nach Gleichung (9) stellt eine wesentliche Bedingung für die Definition von Evolutionsgleichungen dar. Für die Entwicklung geeigneter Beziehungen muss zunächst ein allgemeingültiges Schädigungsverhalten postuliert werden. Hinsichtlich der Volumenmodifikation wird ein Porenheilungseffekt mit einhergehender Einschlussvolumenreduktion ausgeschlossen $\dot{V} \geq 0$. In Analogie zur phänomenologischen Schädigungsmodellierung (Gleichungen (1)-(4)), bei welcher die Erhöhung der Schädigungsvariablen d weitestgehend durch einen zunehmenden Mikroschädigungsbereich motiviert wird (Lemaitre [9]), wird für die Evolutionsbeziehung des Einschlussvolumens die Beziehung

$$V = V(\alpha) = V_0 + (V_\infty - V_0) (1 - \exp(-\alpha/\eta)), \quad \text{mit } \alpha = \alpha(t) = \max_{s \in [0, t]} \tau_V(s) \quad (10)$$

aufgestellt. Auf der Grundlage geeigneter Versuche wird nach Gleichung (10) neben dem Initialvolumen V_0 ein maximal zu erreichendes Schädigungsvolumen V_∞ vorgegeben. Über den Parameter η wird die Geschwindigkeit der Volumenänderung definiert. Anhand von Gleichung (10) ist zu erkennen, dass eine Volumenänderung nur in dem Fall möglich, dass eine neue maximale treibende Kraft τ_V auf das Volumen auftritt. Da die Ermittlung dieser treibenden Kraft jedoch nach Gleichung (9) vom Integrationsbereich S abhängt, würde bei einer konstanten äußeren Belastung ein Selbstwachstum der modellierten Mikropore einsetzen. Um dieses Phänomen auszuschließen, wird eine Regularisierung durchgeführt, wobei die treibende Volumenkraft jeweils auf die aktuelle Einschlussoberfläche bezogen wird. Eine weitere Modifikation der Beziehung (10) wird notwendig, um den unrealistischen Fall von Einschlusswachstum unter hydrostatischer Druckbeanspruchung auszuschließen. Hierfür wird die Spur der Verzerrungen der Mikrostruktur unter der Verwendung der Foeppel-Klammer $\langle \text{tr} \underline{\mathbf{E}} \rangle = 0.5(\text{tr} \underline{\mathbf{E}}) + 0.5 |(\text{tr} \underline{\mathbf{E}})|$ als zusätzliches Kriterium eingeführt. Die erweiterte Evolutionsbeziehung für die Evolutionsvariable α ergibt sich somit zu

$$\alpha(t) = \max_{s \in [0, t]} \left[\tau_V(s) \frac{\langle \text{tr} \underline{\mathbf{E}}(s) \rangle}{\text{tr} \underline{\mathbf{E}}(s)} \frac{A(0)}{A(s)} \right], \quad \text{mit } A(s) = \int_{S(s)} dA. \quad (11)$$

Durch die Konstitution der Gleichungen (10) und (11) und der sich daraus ergebenden Bedingung $\tau_V \dot{V} \geq 0$ kann die Ungleichung (9)₂ verkürzt werden $\tau_m \dot{m} + \tau_\varphi \dot{\varphi} \geq 0$. Für die Evolution der Einschlussform sowie der Einschlussdrehung wird die Annahme getroffen, dass sich diese zu jeder Zeit und somit unabhängig von neu auftretenden Maximalwerten der treibenden Kräfte auf die Ellipsoidform τ_m und Ellipsoidrotation τ_φ verändern können (siehe Müller [11]). Die Einhaltung der reduzierten

Dissipationsungleichung kann sehr effizient über eine Abhängigkeit des jeweiligen geometrischen Parameters von dem Vorzeichen der entsprechenden treibenden Kraft garantiert werden,

$$\dot{m} = \dot{m}(\tau_m) \rightarrow \begin{cases} \dot{m} \geq 0 & \text{für } \tau_m \geq 0 \\ \dot{m} \leq 0 & \text{für } \tau_m \leq 0 \end{cases}, \dot{\phi} = \dot{\phi}(\tau_\phi) \rightarrow \begin{cases} \dot{\phi} \geq 0 & \text{für } \tau_\phi \geq 0 \\ \dot{\phi} \leq 0 & \text{für } \tau_\phi \leq 0 \end{cases}, \quad (12)$$

womit die Evolutionsbeziehungen

$$\dot{\phi} = \dot{\phi}(\tau_\phi) = \alpha_\phi \tau_\phi \frac{V_0}{V}, \quad \dot{m} = \dot{m}(\tau_m) = \alpha_m \tau_m \frac{V_0}{V} \quad (13)$$

aufgestellt werden können. Analog zur Volumenmodifikation ist auch für die Veränderung der Form sowie Rotation eine Regularisierung notwendig. Beispielsweise wirkt sich eine konstante treibende Kraft τ_n auf einem Einschluss geringeren Volumens schwächer auf die Form- und Rotationsmodifikation aus, weshalb die treibenden Größen auf das aktuelle Volumen bezogen werden.

Die Evolutionsbeziehungen nach Gleichung (13) stellen sehr einfache Gesetzmäßigkeiten für eine Strukturänderung dar. Über weitere Modifikationen der dargestellten Ausdrücke können komplexe experimentelle Erscheinungen numerisch abgebildet werden. In der sich anschließenden Diskussion der Anwendungsbeispiele werden erweiterte Formen von (13) hinsichtlich ihrer Auswirkung vorgestellt.

4 Kleine Verzerrungen

Für den Fall kleiner Verzerrungen kann nach Schmidt [16] eine spezielle Lösung für die treibende Kraft auf einem Einschluss gegeben werden

$$\tau_n = -\frac{1}{2} \llbracket \mathbb{C} \rrbracket \boldsymbol{\varepsilon}^- \cdot \boldsymbol{\Omega}^{-1}(\mathbf{n}) \llbracket \mathbb{C} \rrbracket \boldsymbol{\varepsilon}^- + \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon}^- : \llbracket \mathbb{C} \rrbracket \boldsymbol{\varepsilon}^-, \quad \text{mit } \Omega_{ik}(\mathbf{n}) = \mathbb{C}_{ijkl}^+ n_j n_l. \quad (14)$$

Nach Gleichung (14) werden neben den Materialtensoren \mathbb{C}^+ und \mathbb{C}^- die Einschlussverzerrungen $\boldsymbol{\varepsilon}^-$ benötigt, um die treibenden Kräfte zu bestimmen. Während die Ermittlung dieser inneren Verzerrungen für den allgemeinen Fall eine eigene numerische Simulation erfordert, kann auf der Basis des Prinzips der äquivalenten Eigendehnungen (siehe Eshelby [4] und Gross, Seelig [5]) eine analytische Lösung dieses Problems aufgestellt werden.

Eshelby's vierstufiger Tensor $\mathbb{S} = \mathbb{S}(m, \varphi)$, mit $m = (a - b)/(a + b)$, a und b definieren die Halbachsen eines Rotationsellipsoids, ermöglicht die analytische Ermittlung der Gesamtverzerrungen ellipsoider Einschlüsse unter einer Eigendehnungsbeanspruchung. Durch eine rechnerische Umordnung der Steifigkeiten erhält das gesamte Mikrostrukturgebiet B die Steifigkeit des steiferen Bereichs \mathbb{C}^+ , und die Verzerrungsdiskrepanz in den Einschlüssen wird anschließend explizit korrigiert, wobei hierfür die Beziehung

$$\boldsymbol{\varepsilon}^-(m, \varphi) = -\mathbb{S}(m, \varphi) : \left\{ \left[\mathbb{C}^+ - \llbracket \mathbb{C} \rrbracket : \mathbb{S}(m, \varphi) \right]^{-1} \mathbb{C}^- \left(\llbracket \mathbb{C}^{-1} \rrbracket \mathbb{C}^+ \boldsymbol{\varepsilon} \right) \right\} \quad (15)$$

verwendet wird. Somit können die treibenden Kräfte nach Gleichung (6) analytisch ermittelt werden. Eine explizite numerische Betrachtung der Mikroebene ist nicht mehr notwendig. Für kleine Verzerrungen kann in der Konsequenz ein Zweiskalen-Materialmodell aufgestellt werden, bei welchem die Mikrostrukturevolution ausschließlich auf einer analytischen Lösung beruht. Die Komponenten des Eshelby-Tensors \mathbb{S} können Mura [10] entnommen werden.

5 Homogenisierung

Ein bedeutender Aspekt bei Mehrskalen-Simulationen ist die Interaktion der Feldgrößen der verschiedenen Strukturebenen. Die inhomogenen Spannungen sowie Verzerrungen der Mikroebene werden auf der oberen Makroskala homogenisiert

$$\underline{\mathbf{F}}_{\text{mac}} = \langle \underline{\mathbf{F}}_{\text{mic}} \rangle = \langle \underline{\mathbf{F}} \rangle = \frac{1}{V} \int_B \underline{\mathbf{F}}(\mathbf{X}) dV, \quad \underline{\mathbf{P}}_{\text{mac}}^T = \langle \underline{\mathbf{P}}_{\text{mic}}^T \rangle = \langle \underline{\mathbf{P}}^T \rangle = \frac{1}{V} \int_B \underline{\mathbf{P}}^T(\mathbf{X}) dV. \quad (16)$$

Auf der Basis der rechten Seite von Gleichung (16) werden die Spannungen der Mikroskala gemittelt und anschließend als Systemantwort zur Makroebene transferiert. Die bei Mikrostrukturanalysen notwendige Berücksichtigung periodischer Randbedingungen resultiert in konstanten Verschiebungsgradienten auf den Rändern, $\underline{H} = \underline{F} - \underline{1} = \text{const}$.

Unter der Voraussetzung, dass der gemittelte Deformationsgradient nach Gleichung (16) linke Seite identisch zu jenem auf dem Rand der Mikroebene ist (siehe Timmel et al. [15]), $\underline{F}_{\text{mac}} = \langle \underline{F}_{\text{mic}} \rangle = \langle \underline{F} \rangle = \underline{F}$, kann die Randverformung des Mikrosystems auf der Basis des gegebenen Deformationsgradienten der Makroebene ermittelt werden $\underline{u}|_{\partial B} = \underline{H} \cdot \underline{X}$.

Bei kleinen Verzerrungen werden die Feldgrößen analog zu Gleichung (16) gemittelt. Hierbei wird der Deformationsgradient durch die linearen Dehnungen ersetzt, $\underline{\varepsilon}_{\text{mac}} = \langle \underline{\varepsilon}_{\text{mic}} \rangle = \underline{\varepsilon}$, und die 1. Piola-Kirchhoff-Spannungen sind aufgrund der geringen Deformationen identisch mit den wahren Spannungen $\underline{\sigma}_{\text{mac}} = \langle \underline{\sigma}_{\text{mic}} \rangle = \underline{\sigma}$. Die gemittelten Spannungen respektive Dehnungen werden dabei über den effektiven Steifigkeitstensor \mathbb{C}^* verknüpft

$$\langle \underline{\sigma} \rangle = \mathbb{C}^* \langle \underline{\varepsilon} \rangle. \quad (17)$$

Die effektive Steifigkeit impliziert einerseits die Anteile unterschiedlich steifer Phasen und andererseits die Form des Ellipsoiden. Eine analytische Lösung kann hierfür nach Mura [10] gegeben werden

$$\mathbb{C}^* = \left\{ (\mathbb{C}^+)^{-1} + \frac{V_{B^-}}{V_B} ((\mathbb{C}^-)^{-1} - (\mathbb{C}^+)^{-1}) \mathbb{C}^- \left[\mathbb{I} + \mathbb{S}(\mathbf{m}) ((\mathbb{C}^+)^{-1} \mathbb{C}^- - \mathbb{I}) \right]^{-1} (\mathbb{C}^+)^{-1} \right\}^{-1}. \quad (18)$$

6 Anwendungsbeispiele

Die zuvor diskutierten theoretischen Grundlagen werden im Folgenden anhand von zwei Anwendungsbeispielen vertieft. Hierzu erfolgt die Vorstellung eines Modellproblems unter kleinen Verzerrungen sowie einer Struktur, die großen Verzerrungen unterliegt. Infolge der komplexen Materialformulierungen werden zudem einige Aspekte zur Implementierung beziehungsweise numerischen Lösung dargelegt.

6.1 Zweiskalen-Simulation bei kleinen Verzerrungen

Die Einschränkung auf kleine Verzerrungen bei hyperelastischen Materialien ermöglicht die Aufstellung eines analytischen Zweiskalen-Materialmodells. Somit können mikrostrukturelle Veränderungen ohne separate numerische Untersuchung einer weiteren Materialebene abgebildet werden.

6.1.1 Implementierung

- Schleife über alle Gausspunkte (=Anzahl der Elemente bei Unterintegration)
 - Aufruf LS-DYNA-USERMAT-ROUTINE dyn21.f in Zeitpunkt t^n
 - Vorgabe der aktuellen Deformation $\langle \underline{\varepsilon}^n \rangle = \underline{\varepsilon}^n$
 - Vorgabe der Geschichts-Variablen $\mathbf{m}^n, \varphi^n, \mathbf{V}_{B^-}^n$
 - Aufruf SPANNUNGSROUTINE
Effektive Steifigkeit und Spannungen nach den Gleichungen (17) und (18)
 - ← Rückgabe der Spannungen: $\underline{\sigma}^n = \langle \underline{\sigma}^n \rangle$
 - Aufruf MIKROSTRUKTUR-EVOLUTIONS-ROUTINE
 - Einschlussverzerrungen nach Gleichung (15)
 - Treibende Kräfte nach den Gleichungen (14) und (9)
 - Geometriemodifikation nach den Gleichungen (10) und (13)
 - ← Rückgabe der modifizierten Geschichtsvariablen $\mathbf{m}^{n+1}, \varphi^{n+1}, \mathbf{V}_{B^-}^{n+1}$

Tabelle 1: Struktogramm des Zweiskalen-Materialmodells für kleine Verzerrungen

Mittels des in Tabelle 1 dargestellten Struktogramms erfolgt zunächst die Darstellung der Besonderheiten von Mehrskalen-Analysen. Die Programmierung eigener Materialansätze mit LS-DYNA bedingt generell die Rückgabe von Spannungen zu vorgegebenen Elementverformungen \mathbf{x} , aus denen sich die dazugehörigen Dehnungen ermitteln lassen,

$$\underline{\boldsymbol{\varepsilon}} = 0.5(\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u} + (\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u})^T) \text{ mit } \nabla_{\mathbf{x}}(\cdot) = \partial(\cdot) / \partial \mathbf{X} \text{ und } \mathbf{u} = \mathbf{x} - \mathbf{X}. \quad (19)$$

Die in Kapitel 5 beschriebene Interaktion zwischen den Verzerrungen der Makro- und Mikroebene ermöglicht nun die Vorgabe dieser Makroverzerrungen $\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}^n$ als Randbelastung der Mikroebene $\langle \underline{\boldsymbol{\varepsilon}}^n \rangle$. Mithilfe der vordefinierten Steifigkeiten der Mikroebene \mathbb{C}^- , \mathbb{C}^+ und des Mikrostrukturvolumens V_B sowie der abgespeicherten Formparameter des Einschlusses m, φ, V_B^- des vorangegangenen Zeitschritts erfolgt anschließend die Ermittlung der effektiven Steifigkeit \mathbb{C}^* nach Gleichung (18). Die Verknüpfung dieser Steifigkeit mit den Verzerrungen ergibt nach Gleichung (17) den Mittelwert der Spannungen der Mikrostruktur, die analog Abschnitt 5 den Spannungen der Makroebene entsprechen und deren Kalkulation respektive Rückgabe das Hauptziel der LS-DYNA-Nutzer-Schnittstelle bildet. Die eigentliche Besonderheit dieses Materialmodells erfolgt im nächsten Schritt: Die Vorgabe der Randverformungen der Mikrostruktur sowie der aktuellen Einschlussgeometrie ermöglicht die analytische Bestimmung der Verzerrungen $\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}^-$ im Einschlussinneren. Daraufhin können zunächst die treibenden Kräfte τ_n in Normalenrichtung berechnet werden. Infolge der Parametrisierung des Einschlusses werden anschließend die einzelnen treibenden Größen auf die Modifikation dieser Parameter bestimmt. Das bedeutet, es werden die Argumente der Evolutionsgleichungen ermittelt, um die Gesamtenergie der Mikrostruktur zu reduzieren und somit die Steifigkeit der Makroebene herabzusetzen. Über die Evolutionsbedingungen (siehe z.B. Gleichungen (10)-(13)) können die geometrischen Modifikationen gesteuert werden. In Erweiterung zu dem phänomenologischen Schädigungsmodell in Abschnitt 1 kann dadurch eine Mikroporenveränderung gezielt aus dem Versuch in das numerische Modell übertragen werden.

6.1.2 Modellproblem

Im Rahmen des ersten Anwendungsbeispiels wird ein links eingespannter Kragarm betrachtet, der am rechten Ende linear über die Zeit deformationsgesteuert belastet wird.

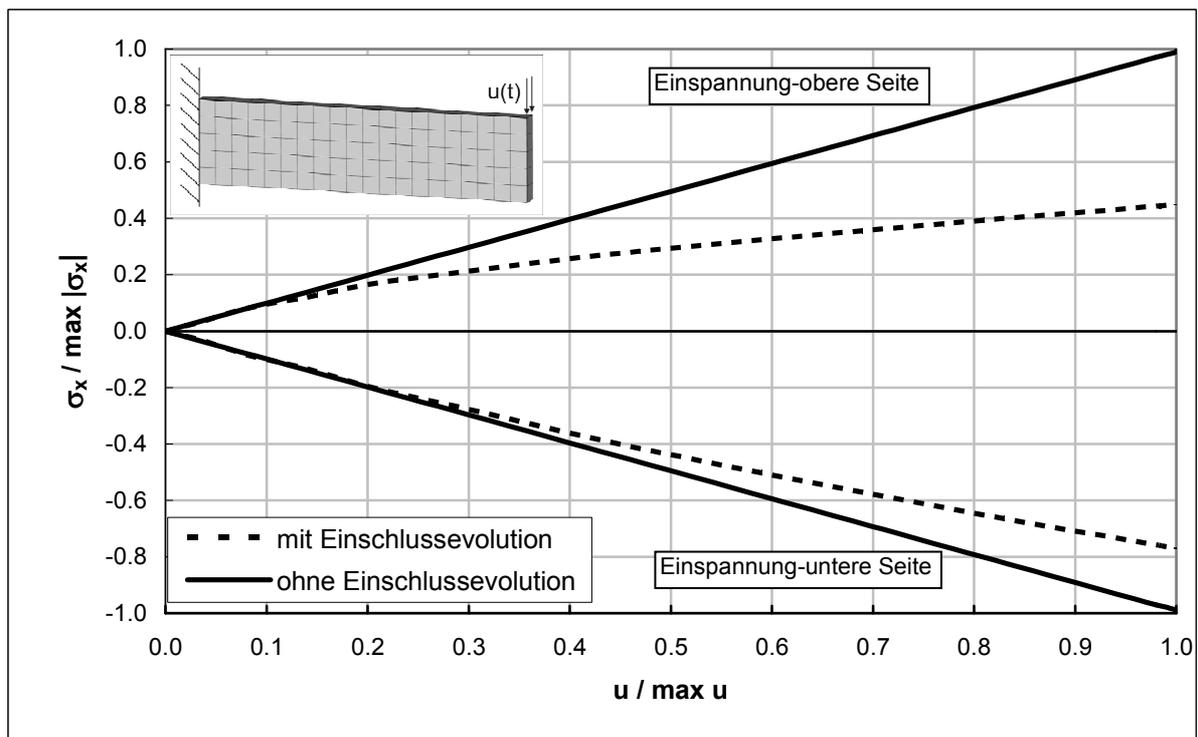


Bild 4: Spannungsabnahme infolge Mikroporenevolution bei einem Kragarm

Die Modellierung erfolgt durch 100 8-Knoten-Kontinuums-Elemente. Das Steifigkeitsverhältnis zwischen Einschluss und dessen Umgebung wird mit $C^+ = 200 C^-$ vorgegeben. Das ursprüngliche Verhältnis zwischen Einschluss- zu Mikrostrukturvolumen beträgt $V_B = 70 V_{B^-}$. Als Initialform der Mikropore wurde eine kugelförmige Geometrie mit $m = (a - b)/(a + b) = 0$ gewählt. Die Volumenevolution erfolgt dabei mittels der Evolutionsbeziehungen nach den Gleichungen (10) und (11). Hinsichtlich der Formevolution wird das im rechten Teil der Gleichung (13) dargestellte Evolutionsgesetz mit dem Term $(1 - |m|)^5$ multipliziert. Dadurch kann der Evolutionsparameter α_m erhöht werden, um während des Belastungsbeginns eine intensivere Formänderung zu ermöglichen, die mit zunehmender Beanspruchung und ellipsoider Einschlussgeometrie ($|m| \rightarrow 1$) abnimmt. Derartige Modifikationen können beliebig erweitert werden.

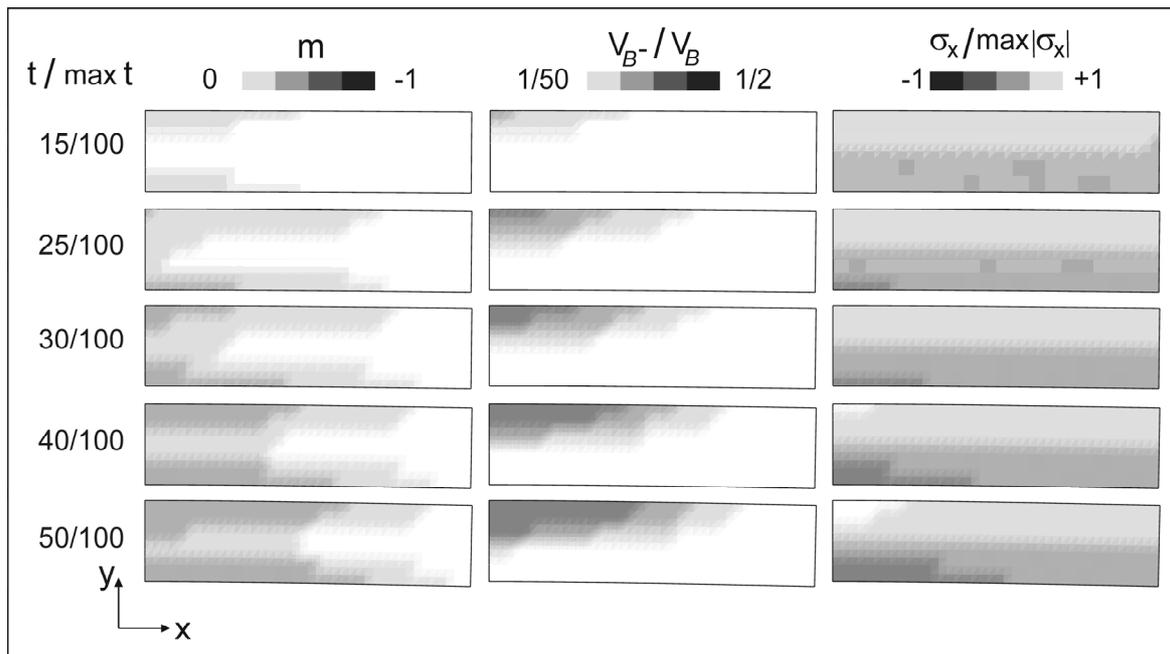


Bild 5: Plots der Entwicklung in Porenform, Porenvolumen sowie Spannungen in x-Richtung

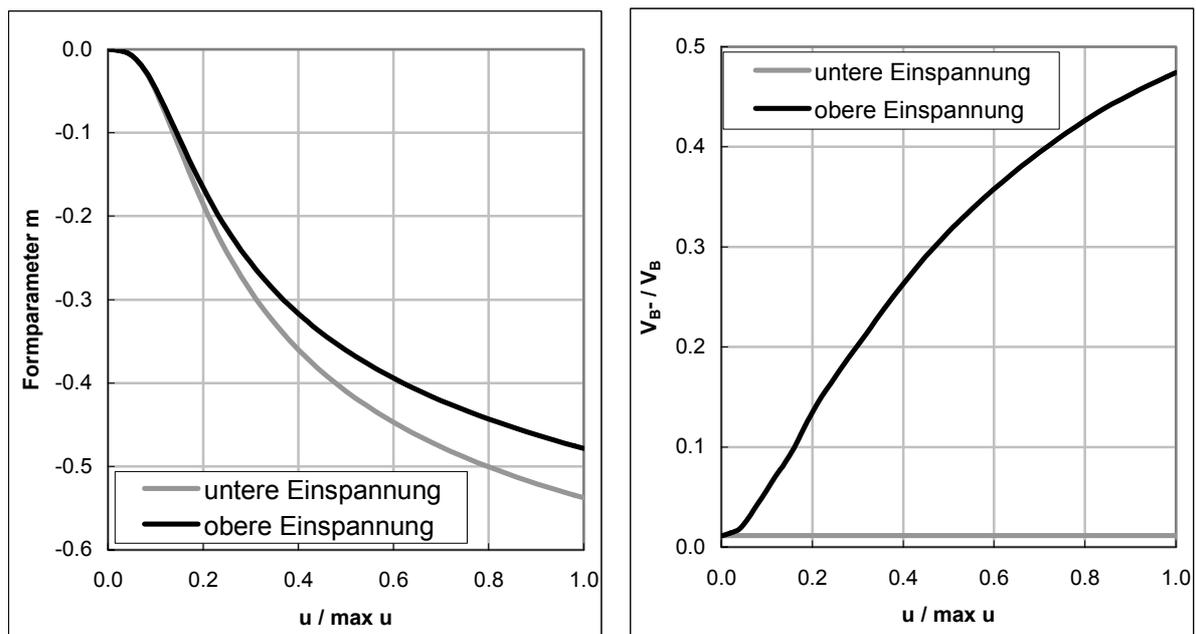


Bild 6: links: Evolution der Einschlussform, rechts: Evolution des Einschlussvolumens

Anhand von Bild 4 kann die Spannungsreduktion infolge einer Veränderung der modellierten Mikropore verdeutlicht werden. Dabei ergibt sich im Vergleich zu der Simulation mit konstanten mikroskopischen Randbedingungen eine unterlineare Spannungs-Verformungs-Beziehung. Die um die Foeppel-Klammer erweiterte Evolutionsbeziehung (11) resultiert in einer Abweichung der Spannungen der Ober- und Unterseite der Einspannung, da analog zu häufigen Schädigungsphänomenen in der Realität nur der Bereich positiver Spannungen beziehungsweise Verzerrungen einer Zunahme von Mikroporenvolumen unterliegt. Dieser Effekt ist im mittleren Bereich des Bilds 5 sowie im rechten Teil des Bilds 6 veranschaulicht. Die Form der ursprünglich kugelförmigen Mikroeingänge verändert sich nach Bild 5 links insbesondere im auflagnahen Bereich zu dem eines aufgestellten Ellipsoids. Das bedeutet, die in Richtung der y-Achse weisende Ellipsoidhöhe b ist größer als die in die x-Achse weisende Ellipsoidbreite a . Dieser Effekt basiert in einer energetisch ungünstigeren Konstellation, da ein aufgestelltes weiches Ellipsoid den horizontalen Spannungsfluss maximal stört.

Die vorgestellte Methodik kann für Werkstoffe mit elastoplastischem Materialverhalten der Einschlüsse sowie elastischem Verhalten des umgebenden Matrixmaterials angewendet werden. Für elastoplastisches Matrixmaterial existieren Näherungsverfahren, deren Approximationsqualität jedoch sehr gering ausfallen kann (siehe Gross, Seelig [5]).

6.2 Numerische Zweiskalen-Simulation

Die in Abschnitt 6.1 dargelegte analytische Vorgehensweise bei einer Zweiskalen-Untersuchung stellt einen Sonderfall dar. Die dafür benötigten Randbedingungen unterliegen für eine verallgemeinerte Betrachtung starken Restriktionen. Neben linear elastischem Materialverhalten unter kleinen Verzerrungen und isotropem Werkstoff wird hinsichtlich des Einschlusses die geometrische Form eines Rotationsellipsoids gefordert (siehe Kapitel 4). Für davon abweichende Randbedingungen kann die Betrachtung weiterer Materialebenen nur über separate FE-Analysen vorgenommen werden.

Die Besonderheit der im Folgenden vorgestellten Methodik besteht in einer ineinander verschachtelten Finite-Elemente-Berechnung mit LS-DYNA, bei der die Materialantwort der zu analysierenden Struktur durch eine Betrachtung eines definierten Mikrosystems erzielt wird. Die vorgegebene Mikrostruktur, die einen mikroskopischen Ausschnitt der oberen Materialebene repräsentiert, erfährt analog zu den zuvor beschriebenen Aspekten eine zunehmende geometrischen Modifikation, um das auch in der Realität mit geometrischen Veränderungen einhergehende Schädigungsverhalten abzubilden.

6.2.1 Implementierung

Der algorithmische Aufbau der 2-Skalen-FEM ist in verkürzter Form in Tabelle 2 dargestellt. Den Ausgangspunkt bilden zunächst zwei Eingabedecks, die in verschiedenen Unix-Verzeichnissen abgelegt werden. Das mit `mac.inp` bezeichnete Eingabedeck stellt die gewöhnliche LS-DYNA-Eingabedatei dar, in welcher sämtliche Daten der zu analysierenden Struktur enthalten sind. Durch eine zwischen 41 und 50 definierte Materialnummer werden jene Elemente, die mittels der Zweiskalen-Methode analysiert werden sollen, über die LS-DYNA-Nutzerschnittstelle `dyn21.f` angesprochen. In dieser Schnittstelle werden in jedem Zeitschritt die entsprechenden Knotenwerte der 8-Knoten-Kontinuums-Elemente vorgegeben, wodurch der Deformationsgradient bestimmt werden kann. Im Zuge der Programmierung einfacher hyperelastischer Materialgesetze (siehe Timmel et al. [13]) wird der Deformationsgradient für die Berechnung der Invarianten des Cauchy-Green'schen-Verzerrungstensors verwendet, um anschließend die Elementspannungen gemäß dem vorgegebenen Potentialansatz zu ermitteln.

Diese Vorgehensweise entfällt bei der Berechnung der Spannungen der Hauptstruktur und wird ersetzt durch die FE-Analyse einer repräsentativen Mikrostruktur. Für dieses Mikrosystem wurde zuvor ein Ausgangs-Eingabedeck `mac_0.inp` erstellt. Dabei befindet sich ein ellipsoidförmiges Gebiet in der Mitte eines Kubus. Analog Bild 3 rechts werden über die Materialparameter eines vorgegebenen hyperelastischen Potentials, zum Beispiel Yeoh, unterschiedliche Steifigkeiten ψ^+ und ψ^- für inneres und umgebendes Gebiet modelliert. Um die linearen Verbindungen entlang der Elementkanten des fein diskretisierten Mikrosystems gemäß den periodischen Randbedingungen zu gewährleisten, werden entsprechende Knoten-Interpolations-Zwangsbedingungen angeordnet. Nach der Berechnung des makroskopischen Deformationsgradienten \mathbf{F}^n erfolgt anschließend die Kalkulation der Randverformungen der Mikrostruktur, wodurch eine Identität der Deformationszustände beider Ebenen gewährleistet wird. Anschließend wird über eine `call system`-Anweisung ein Shell Script der aktuellen Unix-Ebene angesprochen. In dieser Shell erfolgt zunächst der Start einer Fortran-Routine, wodurch auf der Basis des Ausgangs-Eingabedecks `mac_0.inp` und der zu erzielenden Randverformung das Eingabedeck `mac_1.inp` für den ersten Zeitschritt erzeugt wird. Anschließend wird der erste Rechenlauf mit diesem Eingabedeck durchgeführt. Das Ziel dieser Berechnung besteht einerseits darin, die

zu dieser Deformation gehörenden gemittelten Spannungen $\langle \underline{\sigma}_{mic}^n \rangle$ zu berechnen. Des Weiteren wird mittels der treibenden Kräfte eine die Gesamtenergie des Mikrosystems minimierende veränderte Konfiguration ermittelt.

- Start LS-DYNA-Rechenlauf des Makrosystem mac.inp
 - Schleife über alle Gausspunkte (=Anzahl der Elemente bei Unterintegration)
 - Aufruf LS-DYNA-USERMAT-ROUTINE dyn21.f in Zeitpunkt t^n
 - Vorgabe der aktuellen vektoriellen Knotenwerte $\mathbf{x}^n, \dot{\mathbf{x}}^n, \ddot{\mathbf{x}}^n, \mathbf{X}^n$
(Momentanposition, Geschwindigkeit, Beschleunigung, Referenzposition)
 - Berechnung Deformationsgradient, Geschwindigkeit, Beschleunigung
 $\underline{\mathbf{F}}^n = \underline{\mathbf{1}} + 0.5(\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u}^n + \nabla_{\mathbf{x}} (\mathbf{u}^n)^T), \dot{\mathbf{x}}^n = \partial \underline{\mathbf{F}}^n / \partial t, \ddot{\mathbf{x}}^n = \partial \dot{\mathbf{x}}^n / \partial t$
 - Berechnung der Randdeformation der Mikrostruktur (mic)
 $\mathbf{u}_{mic}^n|_{\partial B} = (\underline{\mathbf{F}}^n - \underline{\mathbf{1}}) \cdot \mathbf{X}_{mic}^n|_{\partial B}, \text{ mit } \mathbf{X}_{mic}^n|_{\partial B} = \text{const.}$
 - Aufruf eines Shell-Scripts mittels `call system`
 - Start Fortran-Routine für aktuelles Eingabedeck Mikrosystem mic_n.inp
 - Veränderung der Knotenkoordinaten mittels \mathbf{X}_{mic}^{n-1}
 - Veränderung der Loadcurves mittels $\mathbf{u}_{mic}^n|_{\partial B}$
 - Veränderung des Abbruch-Zeitschritts n
 - Start LS-DYNA-Rechenlauf des Mikrosystem mic_n.inp
 - Spannungen $\underline{\sigma}_{mic}^n$ mittels USERMAT-ROUTINE dyn21.f
 - Element-Spannungs-Mittelung $\rightarrow \langle \underline{\sigma}_{mic}^n \rangle$
(Wichtung mittels Jacobi-Determinante)
 - Kalkulation der Konfigurationskräfte τ_n in Zeitschritt n
(Postprocessing-Schritt nach Gleichung (6))
 - Geometriemodifikation \mathbf{X}_{mic}^n nach Gleichungen (10) und (13)
 - Abbruch in Zeitschritt n
- ← Rückgabe der gemittelten Mikrostruktur-Spannungen $\langle \underline{\sigma}_{mic}^n \rangle$ an Makroebene
- ← Rückgabe der modifizierten Mikrostrukturkoordinaten \mathbf{X}_{mic}^n

Tabelle 2: Struktogramm des Zweiskalen-Finite-Element-Algorithmus

Hierzu werden mittels der Gleichungen (10) und (13) die veränderten Formparameter des Ellipsoids berechnet. Die Knotenkoordinaten des Ellipsoids werden entsprechend der Ellipsengleichung und der neuen Formparameter verändert. Um eine Durchdringung von Knoten respektive eine Netzverzerrung zu vermeiden, werden die verbleibenden Knotenkoordinaten der Mikrostruktur inter- und extrapoliert und mit einer linear zum Rand abnehmenden Wichtung verändert. Diese effiziente Vorgehensweise, um die Knotenkoordinaten zu verändern, ist beschränkt auf mathematisch beschreibbare Einschluss-Geometrien. Für beliebige Formen ist eine ständige Neuvernetzung der Mikrostruktur erforderlich (siehe u.a. Kolling [6]). Nach erfolgter Abspeicherung der modifizierten Knotenkoordinaten \mathbf{X}_{mic}^n und der Spannungen $\langle \underline{\sigma}_{mic}^n \rangle$ wird die Simulation der Mikrostruktur beendet. Die vom oberen Rechenlauf mac.inp erwartete Spannung des Elements liegt nun der Schnittstelle vor, womit die Makroebene zum

nächsten Element beziehungsweise Zeitschritt weiterlaufen kann, um die Mikroprozedur zu wiederholen.

6.2.2 Modellproblem

Im Rahmen einer Anwendung der 2-Skalen-FEM wurde zunächst eine Struktur der Makroskala definiert (obere mittlere Grafik in Bild 7). Die Diskretisierung erfolgte mittels 5 Kontinuums-Elementen. Die oberen sowie unteren beiden Elemente wurden über das elastische Materialgesetz MAT_ELASTIC definiert, wobei die Steifigkeit von Stahl zugewiesen wurde. Das mittlere Element erhält per Definition gummiartige Materialeigenschaften. Hierfür wurde die Materialnummer 41 zugewiesen, um den Aufruf der Nutzerschnittstelle zu ermöglichen. Das am unteren Rand fixierte System wird an der Oberseite linear veränderlich bis zum Zeitpunkt $t=0.5 T_{\max}$ horizontal ausgelenkt und anschließend bis $t=T_{\max}$ linear entlastet.

Im Eingabedeck sind entgegen der üblichen Formulierung keine Materialparameter für das USER-MATERIAL 41 erforderlich. Über eine definierte Variable wird jedoch der Schnittstelle die Information übergeben, nach der Übergabe der Deformation ein Shell-Script aufzurufen. Über dieses Script wird indirekt die FE-Berechnung des im Bild 7 (oben links) dargestellten Mikrosystems angewiesen. Dieses besteht aus rund 200 8-Knoten-Kontinuums-Elementen für den inneren Teil (PART-ID 2) sowie verbleibenden rund 1300 Elementen für das umgebende Material (PART-ID 1). Die Materialdefinition erfolgt wiederum über den USER-Ansatz MAT41, nunmehr jedoch über eine direkte Spannungsberechnung auf der Basis eines vorgegebenen hyperelastischen YEOH-Stoffgesetzes (siehe Timmel et al. [14]). Über die gewählten Materialparameter wurde der PART-ID 2 eine wesentlich geringere Steifigkeit zugeordnet $\psi_{\text{PID1}} = 100\psi_{\text{PID2}}$. Die Randknoten des PID 2 unterliegen der Definition der Kugelgleichung als Sonderfall der räumlichen Ellipsoide. Die Mikrostruktur-Kantenlänge entspricht dem 12fachen des Ausgangskugeldurchmessers. Für den Fall, dass keine Mikrostrukturveränderung während des Belastungsprozesses erfolgen soll, siehe Bild 7 links, könnte auf der Basis der Steifigkeits- sowie geometrischen Verhältnisse eine direkte Spannungsermittlung ohne Betrachtung der zweiten Skala mit $\psi = \langle \psi^{\text{mic}} \rangle \approx \psi_{\text{PID1}}$ erfolgen. Die Simulationen beider Ebenen werden unterintegriert und mit zusätzlicher Hourglass-Versteifung durchgeführt.

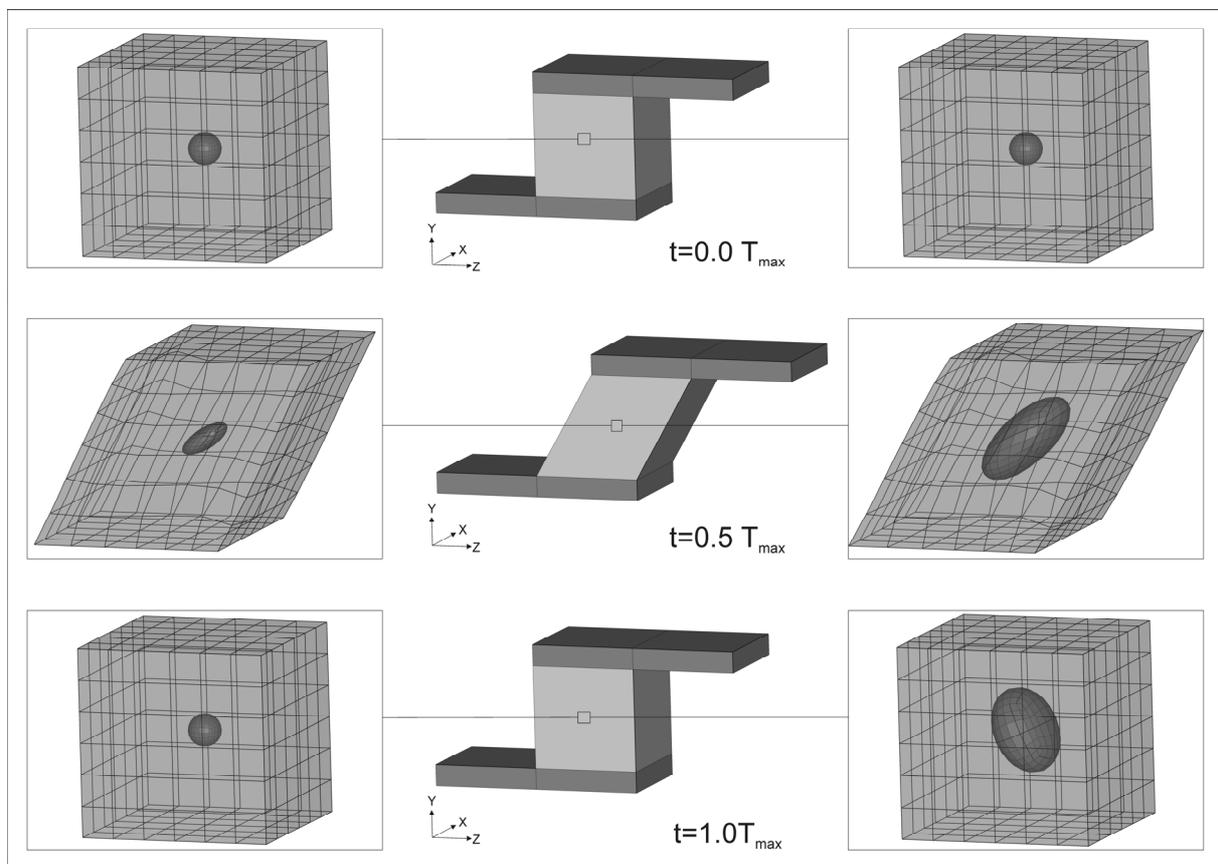


Bild 7: Makrosystem mit repräsentativer Mikrostruktur; links: ohne, rechts: mit Mikrostrukturevolution

Anhand der rechten Seite der Abbildung 7 kann die Evolution der Mikrostruktur verdeutlicht werden. Mit zunehmender Belastung und folglich auch zunehmenden Konfigurationskräften erhöhen sich die thermodynamisch treibenden Kräfte auf eine Modifikation des Einschlusses. Diese Veränderung wird durch eine Verschiebung sämtlicher Knoten der Mikrostruktur realisiert. In der Konsequenz verringert sich das Volumen des steifen Matrixbereichs, wodurch die mittlere und auf der oberen Ebene wahrgenommene Steifigkeit sinkt. Zudem können durch die treibenden Kräfte realistische Entwicklungen von Mikroporen während des Belastungsprozesses abgebildet werden. Dieser Effekt kann nach der Entlastung (untere rechte Grafik in Bild 7) gedeutet werden, da dieser Zustand die Referenzkonfiguration des letzten Schädigungszustands darstellt. Demnach hat sich die Mikropore infolge der Schubbeanspruchung in Richtung der maximalen Hauptspannung entwickelt, wobei sich eine deutliche Abkehr von der Kugelform eingestellt hat. Somit kann auf dieser Basis die Richtungsabhängigkeit auf der Makroebene ungeachtet der isotropen Ausgangsformulierung infolge der Schädigungsentwicklung in der Mikroskala abgebildet werden. Dieses Phänomen kann mit dem in Absatz 1 dargestellten makroskopischen Ansatz nicht modelliert werden, und die Erweiterung auf tensorielle anisotrope Schädigungsentwicklung (siehe u.a. Lemaitre, Desmorat [9]) erfordert einen enormen Aufwand mit der Gefahr sinkender Reproduzierbarkeit bei veränderten Ausgangsbedingungen infolge der komplexen Identifikation gekoppelter Materialparameter.

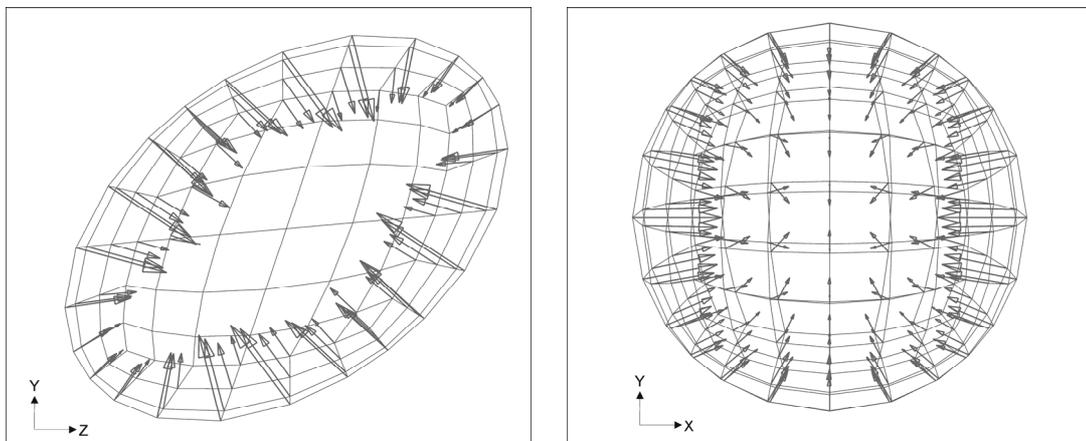


Bild 8: Treibende Kräfte τ_n auf Einschlussmodifikation; links: z-y-Ebene, rechts: x-y-Ebene

In Bild 8 sind die treibenden Kräfte nach Gleichung (6) für die beiden wesentlichen Ebenen dargestellt. Aufgrund der Schubverformung ergeben sich nach der linken Abbildung schräg ausgerichtete Konfigurationskräfte. Somit wird für das gesamte Mikrosystem eine Energieminimierung erzielt, wenn sich der Einschluss ebenfalls schräg entwickelt $\tau_\varphi \neq 0 \rightarrow \dot{\varphi} \neq 0$. Anhand der rechten Grafik von Bild 8 kann die ringförmige Einschluss-Entwicklung in der um den Winkel φ geneigten x-y-Ebene erklärt werden (siehe auch Bild 9 rechts). Die deutliche Ausprägung der Konfigurationskräfte in x-Richtung ergibt sich aufgrund der behinderten Querkontraktion.

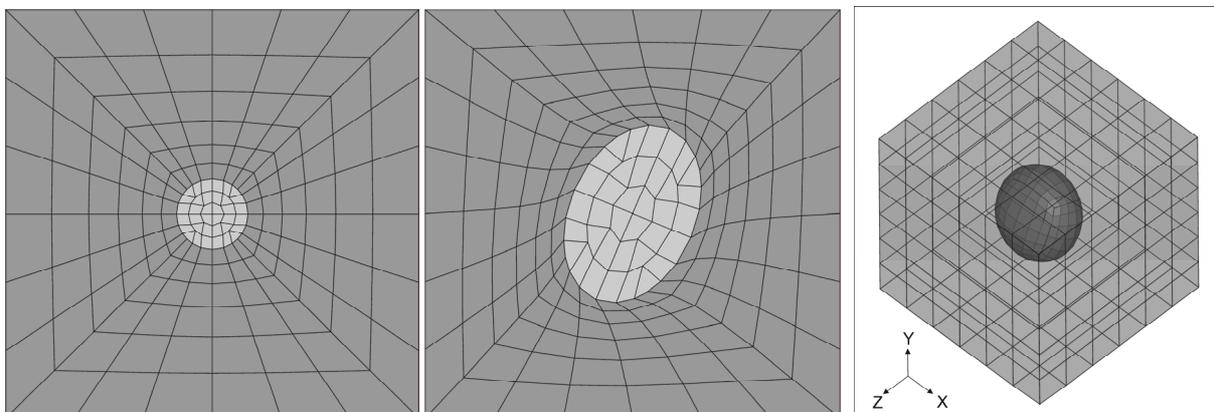


Bild 9: y-z-Querschnitt; links: vor Belastung, mitte: nach Entlastung, rechts: Perspektive Mikrostruktur

Anhand der linken sowie mittleren Grafik von Bild 7 kann die Vorgehensweise zur geometrischen Modifikation der Mikrostruktur erkannt werden. Die Knoten des Einschlussrands unterliegen der allge-

meinen Ellipsengleichung. Bei einer Veränderung der Formparameter werden die Ellipsoid-Rand-Koordinaten entsprechend versetzt. Die inneren Knoten werden gemäß dem Verhältnis ihrer Koordinaten zu den Koordinaten jenes Schnittpunkts verschoben, der sich ergibt, wenn eine Linie vom Koordinatenursprung durch die aktuelle Koordinate bis zum Ellipsoidrand verlängert wird. In analoger Form erfolgt die Verschiebung der Koordinaten der umgebenden Matrix.

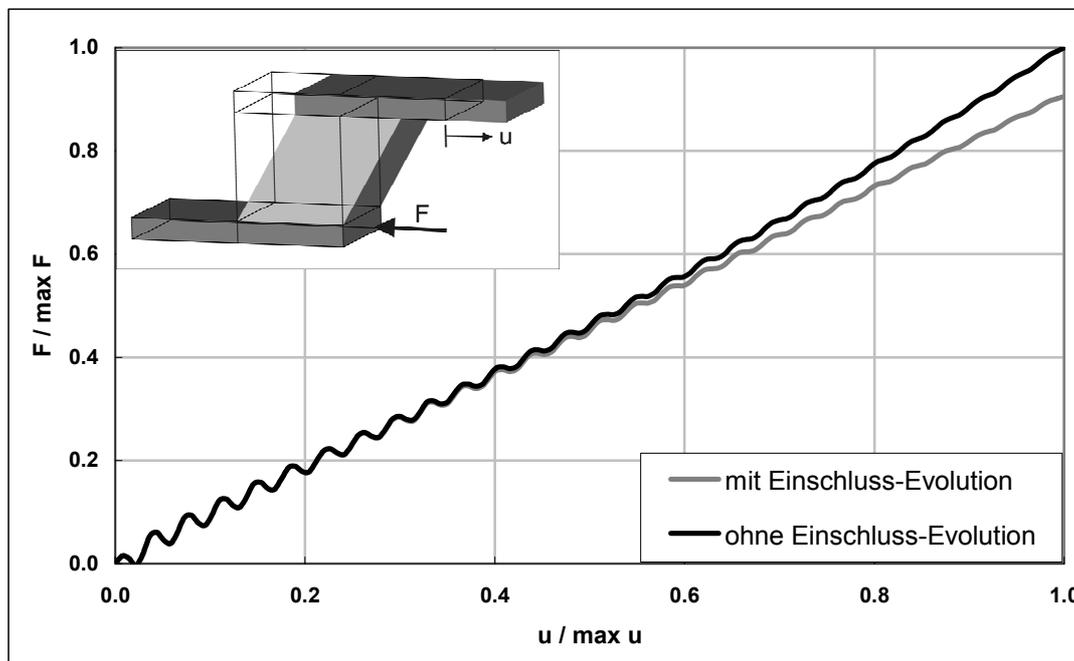


Bild 10: Spannungsabnahme infolge Mikroporenevolution

Hinsichtlich der quantitativen Veränderung ergibt sich nach Bild 10 mit zunehmender geometrischer Veränderung des weichen inneren Teils eine Reduktion der Reaktionskraft. Dieser Effekt basiert einerseits auf der Mittelung der Spannungen, wobei sich die Wichtung des steiferen Anteils verringert. Andererseits treten Umlagerungen auf, in deren Folge die Spannungsfelder verändert werden. Der relative geringe Steifigkeitsabbau nach Bild 10 resultiert in dem verhältnismäßig kleinen Ellipsoidvolumen. Über die Modifikation der Evolutionsparameter kann der Spannungsverlust durch einen deutlich größeren Ellipsoiden intensiviert werden.

Mithilfe des vorgestellten Ansatzes können nunmehr die mikroskopischen Schädigungseffekte in das numerische Modell übertragen werden. Eine Erweiterung auf beispielsweise inelastisches Materialverhalten ist unproblematisch, da lediglich die Materialformulierungen verändert werden müssen.

Der vorgestellte Zweiskalen-Ansatz ist hinsichtlich des Programmierungs-, Rechen- und Zeitaufwands sehr intensiv. Dieser Aufwand kann damit gerechtfertigt werden, dass es somit möglich ist, die physikalischen Phänomene in den tieferen Ebenen besser zu verstehen respektive abzubilden, um zu entwickelnde makroskopische Materialansätze zu verifizieren. Insbesondere die bei makroskopischen Materialansätzen anzuwendenden Homogenisierungsverfahren können für komplexes Materialverhalten wie zum Beispiel bei Plastizität (siehe Gross, Seelig [5]) deutliche Mängel bei der numerischen Approximation zur Folge haben.

7 Zusammenfassung

Im vorliegenden Beitrag erfolgte die Vorstellung eines Zweiskalen-Modells zur numerischen Abbildung von Spannungsaufweichen infolge des Wachstums von Mikroporen. Diese mikroskopischen Strukturveränderungen werden im dargestellten Ansatz durch weiche Einschlüsse in einem separaten Mikromodell, welches die Struktur der Mikroskala repräsentiert, approximiert. Für die thermodynamische Beschreibung der Expansion dieser Einschlüsse werden Konfigurationskräfte verwendet, womit die natürlichen strukturellen Phänomene in Form geometrischer Modifikation mit dem Ziel der Energiemimierung in die Numerik übertragen werden können. Für hyperelastische Werkstoffe unter kleinen Verzerrungen wurde ein Zweiskalen-Ansatz präsentiert, bei dem die Mikrostrukturänderung analytisch betrachtet werden kann, womit die numerische Effizienz aufrecht erhalten bleibt. Bei großen Verzerrungen ist eine explizite FE-Analyse der Mikrostruktur erforderlich. In diesem Zusammenhang wird die Methodik einer verschachtelten LS-DYNA-Simulation der eigentlichen Struktur und des Mikromodells

vorgestellt. Dabei wird die Mikrostruktur analog der veränderten geometrischen Randbedingungen infolge der abzubildenden Evolution der Mikroeinschlüsse permanent verändert. Mithilfe dieses, jedoch sehr aufwändigen, Zweiskalen-FEM-Ansatzes können zudem auch Softening-Effekte inelastischer oder makroskopisch anisotroper Materialien analysiert werden, wofür entweder keine oder sehr ungenaue Grundlösungen bereitstehen. Somit können für beliebige Werkstoffe und Belastungen komplexe und Schädigungsverhalten abbildende Materialansätze während deren Entwicklung verifiziert werden.

8 Literatur

- [1] COLEMAN, B.D.; NOLL, W. (1963): The Thermodynamics of Elastic Materials with Heat Conduction and Viscosity. *Archive for Rational Mechanics and Analysis* 13, 167-178.
- [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. (1957): The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion and related problems, *Proceedings Royal Society A*(241), 376-396.
- [5] GROSS, D.; SEELIG, T. (2001): Bruchmechanik mit einer Einführung in die Mikromechanik, Springer, Berlin.
- [6] KOLLING, S. (2001): Zur numerischen Simulation von Morphologieänderungen in mikroheterogenen Materialien, Institut für Mechanik, TU Darmstadt.
- [7] KOLLING, S.; Du Bois, P.A., Benson, D.J. (2005): A simplified rubber model with damage. LS-DYNA Forum, Bamberg, B-II-1/10.
- [8] KOLLING, S.; MUELLER, R. (2005): On configurational forces in short-time-dynamics and their computation with an explicit solver. *Computational Mechanics* 35, 392-399.
- [9] LEMAITRE, J.; DESMORAT, R. (2005): Engineering damage mechanics, Springer, Berlin.
- [10] MURA, T. (1991): *Micromechanics of Defects in Solids*. Kluwer, London.
- [11] MUELLER, 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] TIMMEL, M.; KALISKE, M.; KOLLING, S. (2004): Modellierung gummiartiger Materialien bei dynamischer Beanspruchung. LS-DYNA Forum, Bamberg, C-I-1/11.
- [14] TIMMEL, M.; KALISKE, M.; KOLLING, S. (2006): An Approach for Micromechanical Modelling of Damage Mechanisms, *Proceedings in Applied Mathematics and Mechanics*.
- [15] TIMMEL, M.; KALISKE, M.; KOLLING, S.; MUELLER, R. (2006): A micromechanical approach for the simulation of rubberlike materials with damage, *Proceedings of the 3. European Conference on Computational Mechanics*, Lissabon.
- [16] SCHMIDT, I.; GROSS, D. (1997): The equilibrium shape of an elastically inhomogeneous inclusion. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 45, 1521-1549.

