

Eine *multi-material arbitrary Lagrangian-Eulerian (ALE)* Methode für die Simulation des Deformationsverhaltens partikulärer Materialien bei Finiten Deformationen

D. Freßmann

Discipline of Civil Engineering
The University of Newcastle, NSW
Australia

P. Wriggers

Institut für Baumechanik und
Numerische Mechanik
Universität Hannover

DFG-Gemeinschaftsprojekt Schaumstoffe
Workshop 15./16. September 2005

„Simulation von Schaumstoffen
mit stark nichtlinearem Verhalten“

Gliederung

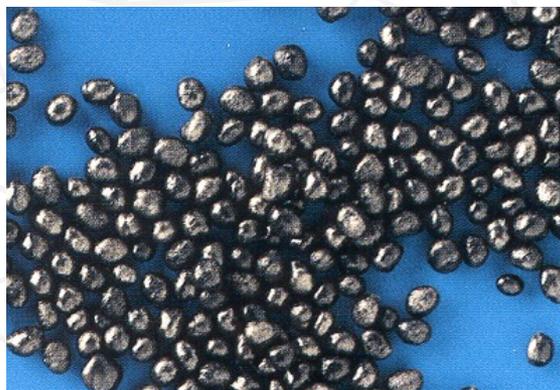
- Einleitung/Motivation
- Kontinuumsmechanische Grundgleichungen der ALE Methode
 - Kinematik, Bilanzgleichungen, konstitutive Gleichungen
- Globale Lösungsstrategie des gekoppelten ALE Problems
 - Berücksichtigung der multiplen Materialeigenschaften
 - Lösen des Transport-/Advektionsproblems
 - Transport elementbezogener Größen
 - Transport materialbezogener Größen
- Zusammenfassung des globalen Lösungsverfahrens
- Numerische Beispiele
- Ausblick

Motivation und Problemstellung

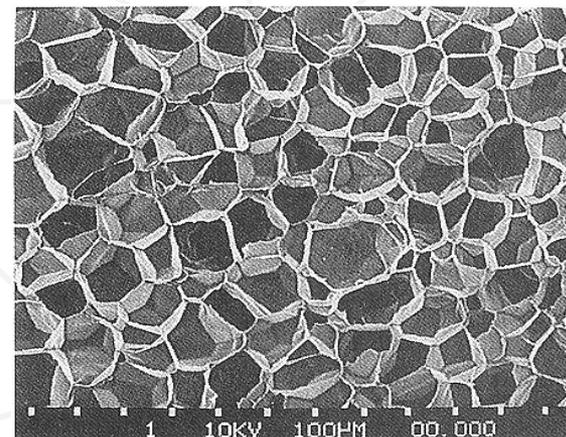
Größenskalen des partikulären Schaumstoffes Neopolen



Makroskale
Bauteil



Mesoskale
lose Schüttung einzelner
EPP-Partikel

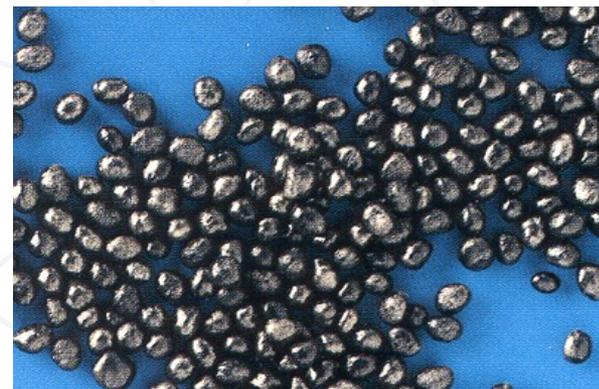


Mikroskale
geschlossenzelliger
Polypropylen-Schaum
(EPP)

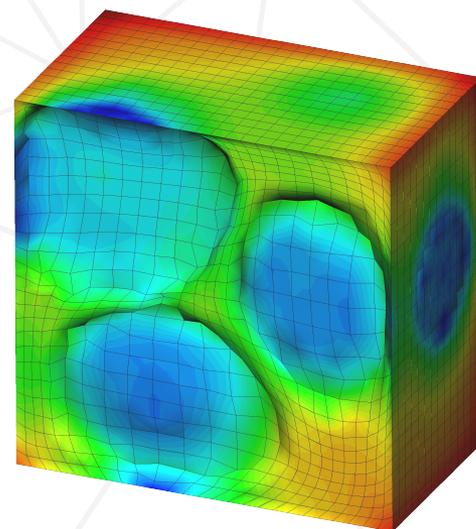
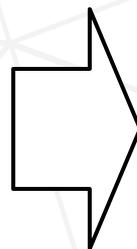
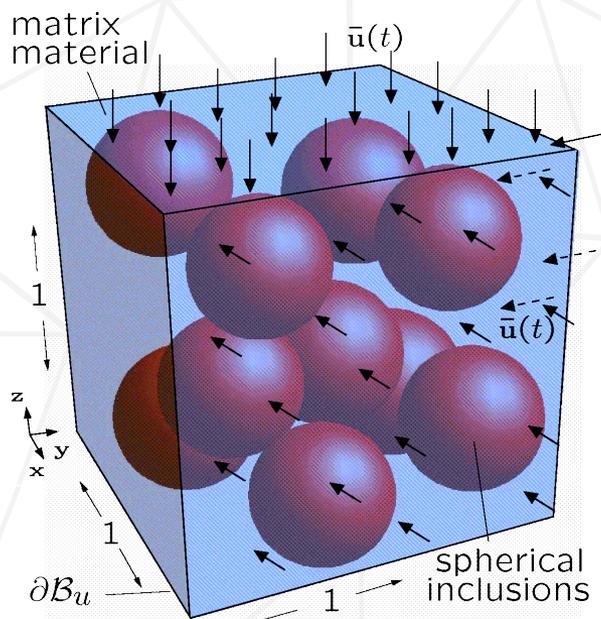
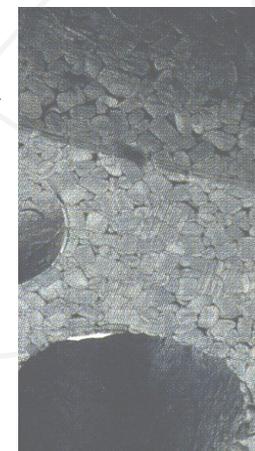
Motivation und Problemstellung

Herstellungsprozess eines partikulären Schaumstoffmaterials

- Ausgangssituation: lose Partikelschüttung in repräsentativem Volumen Element (RVE)
- Zusammenpressen + Verkleben der Partikel
 → führt auf extreme Materialdeformationen



Kompaktion,
Erwärmen +
Verkleben



→ *Multi-Material
ALE Methode*

Arbitrary Lagrangian-Eulerian (ALE) Methode

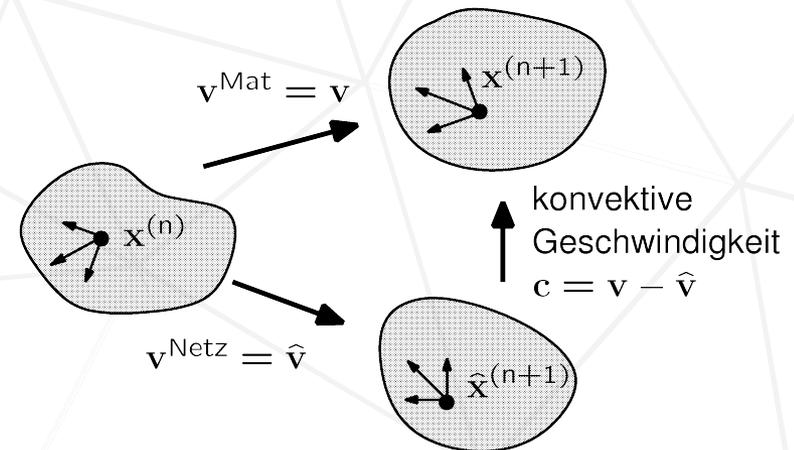
Allgemein

entkoppelte Material- und Netzbewegung

Berücksichtigung von Flußeffecten

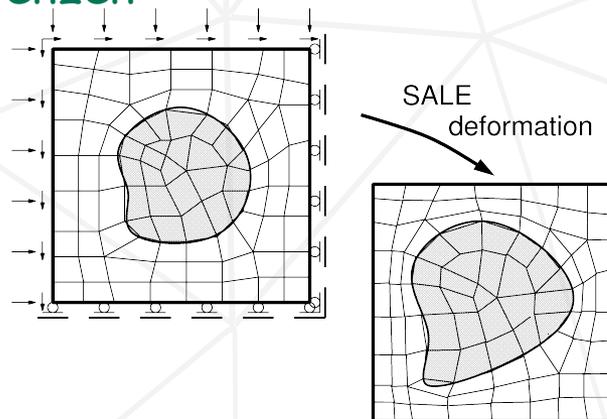
Materialgeschwindigkeit $\mathbf{v} = \frac{d\mathbf{u}}{dt} = \left. \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \right|_{\mathbf{x}}$

Netzgeschwindigkeit $\hat{\mathbf{v}} = \left. \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t} \right|_{\mathbf{x}}$



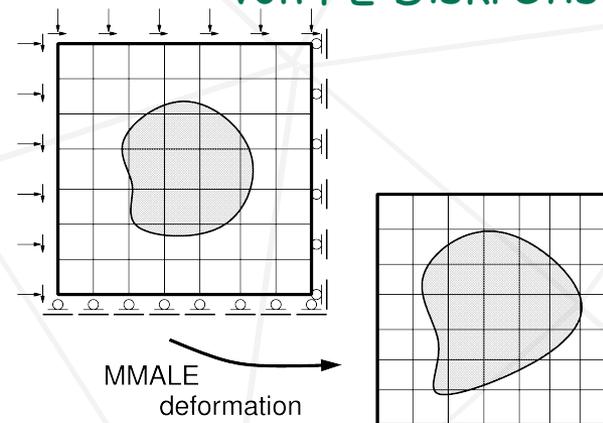
Single-Material ALE Methode (SALE)

explizite Auflösung der Materialgrenzen



Multi-Material ALE Methode (MMALE)

freie Materialgrenzen; unabhängig von FE Diskretisierung



Literaturübersicht

Generelle (S)ALE Methode (Auswahl)

- Liu, W.K.; Belytschko, T. and Chang, H.: *An Arbitrary Lagrangian-Eulerian Finite Element Method for Path-Dependent Materials*, CMAME, 1986
- Benson, D.J.: *An efficient, accurate, simple ALE Method for Nonlinear Finite Element Programs*, CMAME, 1989
- Rodriguez-Ferran, A.; Perez-Foguet, A. and Huerta, A.: *Arbitrary Lagrangian-Eulerian (ALE) Formulation for Hyperelastoplasticity*, IJNME, 2002
- etc. ...

Multi-Material ALE Methode

- Benson, D.J.: *Computational Methods in Lagrangian and Eulerian Hydrocodes*, CMAME, 1992
- Benson, D.J.: *An implicit Multi-Material Eulerian Formulation*, IJNME, 2000
- Peery, J.S. and Carroll, D.E.: *Multi-Material ALE Methods in unstructured Grids*, CMAME, 2000

Kontinuumsmechanische Basis: (ALE)-Kinematik

unabhängige Referenzkonfiguration χ

$$\overset{(\dagger)}{\mathbf{X}}(\chi, t) \longleftrightarrow \chi(t) \longleftrightarrow \mathbf{x}(\chi, t)$$

Verschiebungen

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{u}_\Phi(\chi, t) - \mathbf{u}_\Psi(\chi, t)$$

Deformationsgradienten

gesamt

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_\Phi \mathbf{F}_\Psi^{-1}$$

referentiell

$$\mathbf{F}_\Psi(\chi, t) := \text{Grad } \mathbf{X}(\chi, t)$$

relativ

$$\mathbf{F}_\Phi(\chi, t) := \text{Grad } \mathbf{x}(\chi, t)$$

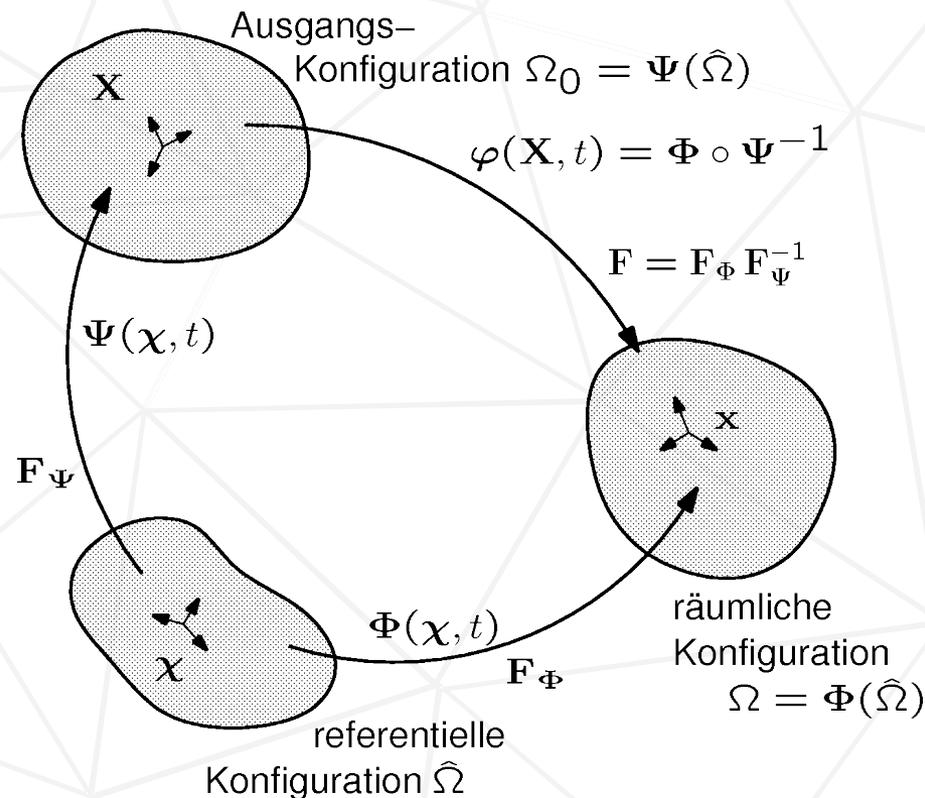
Deformationstensoren

rechter Cauchy-Green Tensor

$$\mathbf{C} = \mathbf{F}_\Psi^{-T} \mathbf{C}_\Phi \mathbf{F}_\Psi^{-1}$$

linker Cauchy-Green Tensor

$$\mathbf{b} = \mathbf{F}_\Phi \mathbf{b}_\Psi \mathbf{F}_\Phi^T$$



Kontinuumsmechanische Basis: Bilanzgleichungen

materielle Zeitableitung

explizite Zeitabhängigkeit der Referenzkonfiguration

$$\frac{d\phi}{dt}\Big|_{\mathbf{x}} = \frac{\partial\phi}{\partial t}\Big|_{\mathbf{x}} + \underline{\text{grad } \phi \mathbf{c}} = S$$

Bilanzsätze (starke Form)

Massenbilanz

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}\Big|_{\mathbf{x}} = \frac{\partial\rho}{\partial t}\Big|_{\mathbf{x}} + \text{grad } \rho \mathbf{c} = -\rho \text{div } \mathbf{v}$$

Impulsbilanz

$$\rho \frac{\partial\mathbf{v}}{\partial t}\Big|_{\mathbf{x}} = \rho \frac{\partial\mathbf{v}}{\partial t}\Big|_{\mathbf{x}} + \text{grad } \mathbf{v} \mathbf{c} = \text{div } \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{b}$$

allgemeine starke Form

$$\frac{\partial\phi}{\partial t}\Big|_{\mathbf{x}} = \frac{\partial\phi}{\partial t}\Big|_{\mathbf{x}} + \underline{\text{grad } \phi \mathbf{c}} = S \quad \text{mit } \phi = \{\rho, v_i, e, (\alpha_i)_{ij}\}^T$$

Variationsformulierung (schwache Form)

$$\int_{\mathcal{B}} \delta\phi \cdot (\dot{\phi}\Big|_{\mathbf{x}} + \text{grad } \phi \mathbf{c}) dv = \int_{\mathcal{B}} \delta\phi \cdot S dv \quad \text{mit } \delta\phi \in \bar{\mathcal{V}}^\phi \quad \phi \in \mathcal{V}^\phi$$

Kontinuumsmechanische Basis: Materialgleichungen

hyperelastische Materialmodellierung

Verzerrungsenergiefunktion W

$$W(\mathbf{F}) = \tilde{W}(\mathbf{U}) = \bar{W}(\mathbf{b}) = \hat{W}(\mathbf{C})$$

z.B. Neo-Hooke Material $W(I_b, J) = \frac{1}{2} \mu (I_b - 3 - 2 \ln J) + \frac{1}{2} \lambda (\ln J)^2$

→ Informationen über "Gesamtdeformation" notwendig!

Inkrementelle Betrachtung der Deformation (Rodriguez-Ferran et al. '02)

Geschichtsvariablen

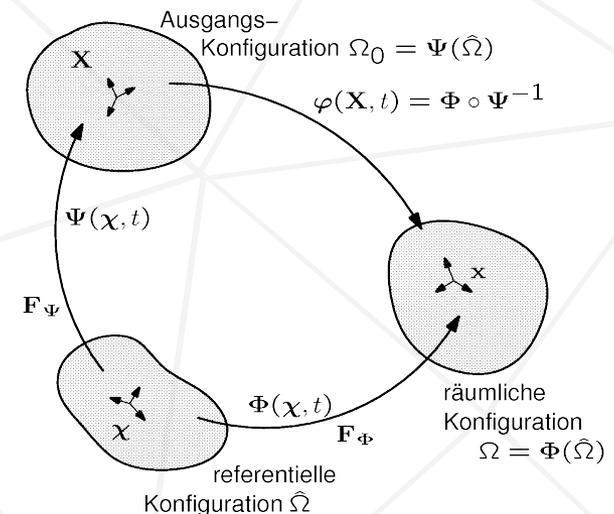
$$\mathbf{F}_\Psi(\chi, t) \quad \text{bzw.} \quad \mathbf{b}_\Psi(\chi, t)$$

push-forward mit relativem Def.-Grad.

$$\mathbf{F}_\Phi := \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \chi} = \mathbf{I} + \text{Grad } \mathbf{u}_\Phi$$

direkte Lösung

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_\Phi \mathbf{F}_\Psi^{-1} \quad \text{bzw.} \quad \mathbf{b} = \mathbf{F}_\Phi \mathbf{b}_\Psi \mathbf{F}_\Psi^T$$



Globale ALE Lösungsstrategie

Ziel: Lösung des gekoppelten ALE Problems

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial t} \right|_{\mathbf{x}} = \left. \frac{\partial \phi(\mathbf{v}, t)}{\partial t} \right|_{\mathbf{x}} + \text{grad } \phi(\mathbf{v}, t) \mathbf{c} = \mathbf{S}(\mathbf{x}, t) \quad \left\{ \begin{array}{l} \mathbf{v} - \text{Materialgeschwindigkeit} \\ \mathbf{c} - \text{konvektive Geschwindigkeit} \end{array} \right.$$

→ simultane Lösung sehr aufwendig!

Lösung mit „Operator-Split“ Methode (Chorin et al. '78, Benson '89)

Split des gekoppelten Problems in 2 Teilprobleme

1. Lagrange'scher Schritt: $\left. \frac{\partial \phi}{\partial t} \right|_{\mathbf{x}} = \Phi \quad \mathbf{c} = \mathbf{0} \quad \rightarrow \quad \mathbf{v} = \hat{\mathbf{v}}$

• numerisches Lösen des "physikalischen Problems" $t^{(n)} \rightarrow t^{(n+1)}$

2. Advektionsschritt: $\left. \frac{\partial \phi}{\partial t} \right|_{\mathbf{x}} + \text{grad } \phi \mathbf{c} = \mathbf{0} \quad \mathbf{v} = \mathbf{0} \quad \rightarrow \quad \mathbf{c} = -\hat{\mathbf{v}}$

- Transport der Lösung mit konvektiver Geschwindigkeit \mathbf{c}
- Lösen der homogenen Advektionsgleichung

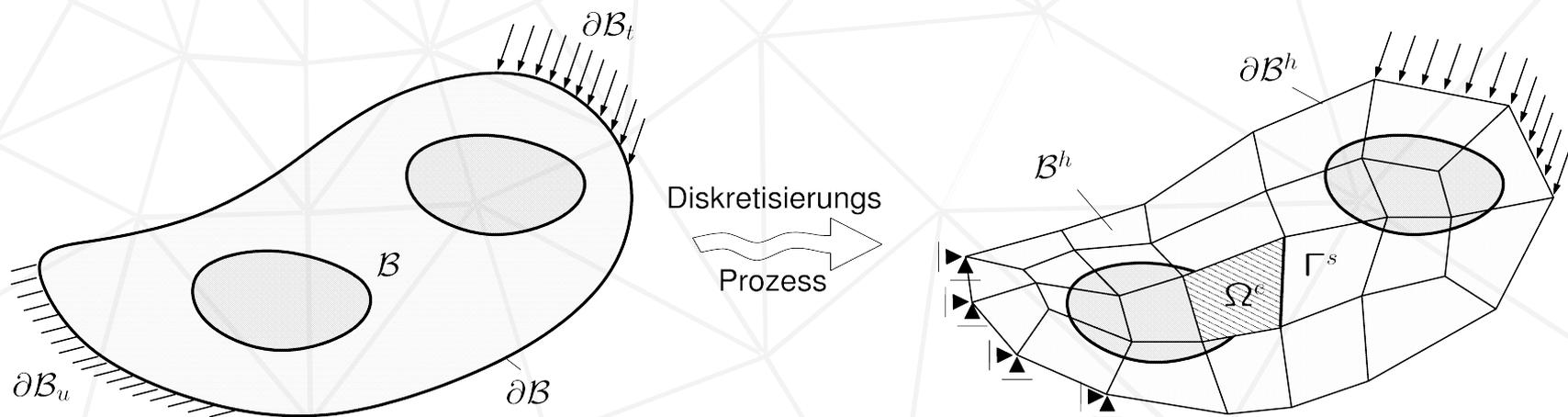
1. Schritt: Lagrange'sche Berechnungsphase

Numerisches Lösen des „physikalischen“ Problems

1. Schritt: Lagrange'sche Phase

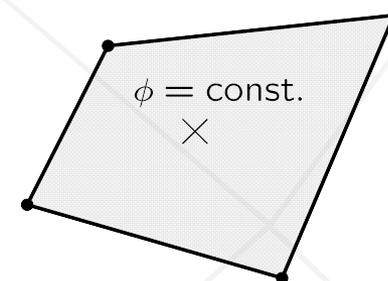
Finite-Element-Diskretisierung

$$\mathcal{B} \approx \mathcal{B}^h = \bigcup_{e=1}^{n_e} \Omega^e \quad \partial\mathcal{B} \approx \partial\mathcal{B}^h \subset \bigcup_{e=1}^{n_e} \partial\Omega^e \quad \partial\Omega^e = \bigcup_{s=1}^{n_f} \Gamma^s$$



reduzierte Integration der FE Gleichungen
(Belytschko et al. '84)

- Auswertung der FE-Gleichung im Elementmittelpunkt
- konstanter Verzerrungszustand im Element



1. Schritt: Lagrange'sche Phase (2)

Problem: Auflösen der multiplen Materialeigenschaften auf Elementebene

Volume-of-Fluid (VOF) Methode (Hirt & Nichols '81)

Volumen-Fraktion f^k für jede Materialphase k

$$f^k = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega^k} dv^k = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} c^k dv \quad \sum_{k=1}^m f^k = 1 \quad c^k = \begin{cases} 1 & \text{- Phase } k \\ 0 & \text{- sonst.} \end{cases}$$

Phasenweise Berechnung materialabhängiger Größen

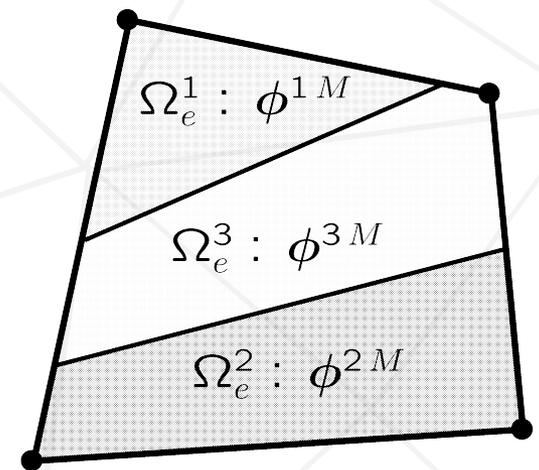
$$\rightarrow \sigma^k, \quad \mathbf{C}^k, \quad \varrho^k, \quad \Delta \mathbf{h}^k = (\text{grad } \Delta \mathbf{u})^k, \dots$$

Volumen-gemittelte Elementvariablen

$$\bar{\varrho} = \sum_k \varrho^k f^k \quad \bar{\sigma} = \sum_k \sigma^k f^k \quad \bar{\mathbf{C}} = \sum_k \mathbf{C}^k f^k$$

Elementsteifigkeitsmatrix und Residuum

$$\mathbf{K}^e = \mathbf{K}^e(\bar{\varrho}, \bar{\sigma}, \bar{\mathbf{C}}, \dots) \quad \mathbf{f}^e = \mathbf{f}^e(\bar{\varrho}, \bar{\sigma}, \dots)$$



2. Schritt: ALE-Advektionsphase

Lösen des Transportproblems

2. Schritt: ALE-Advektionsphase

Finite-Volumen basierte Advektionsmethode

Imkompressibler, advektiver Fluß

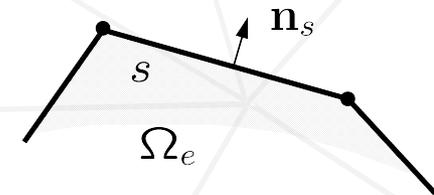
$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial t} \right|_{\chi} + \operatorname{div} \mathbf{f}(\phi) = 0$$

linearer Fluß: $\mathbf{f}(\phi) = \phi \mathbf{c}$

AB: $\phi(\mathbf{x}, t_0) = \phi_0(\mathbf{x})$

Integration über Elementgebiet Ω_e

$$\int_{\Omega_e} \left. \frac{\partial \phi}{\partial t} \right|_{\chi} dv = - \int_{\partial \Omega_e} \mathbf{f}^{\phi} \cdot \mathbf{n} da = - \sum_s \int_{\Gamma_s} \mathbf{f}_s^{\phi} \cdot \mathbf{n}_s da$$



Diskrete Finite-Volumen Advektion

explizite Zeitintegration

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial t} \right|_{\chi} \approx \frac{\phi^+ - \phi^-}{\Delta t}$$

(Euler-Vorwärts)

Courant Kriterium

$$C_r = \frac{|\mathbf{c}| \Delta t}{h} \leq 1$$

diskrete Advektion

$$\phi^+ V^+ = \phi^- V^- - \Delta t \sum_s \mathcal{F}_s^{\phi} \quad \mathcal{F}_s^{\phi} = \int_{\Gamma_s} \mathbf{f}_s^{\phi} \cdot \mathbf{n}_s da$$

→ Berechnung des numerischen Flußwertes \mathcal{F}_s^{ϕ} ?

2. Schritt: ALE-Advektionsphase

I. elementbezogene Variablen: z.B. Verzerrungen, Deformationen

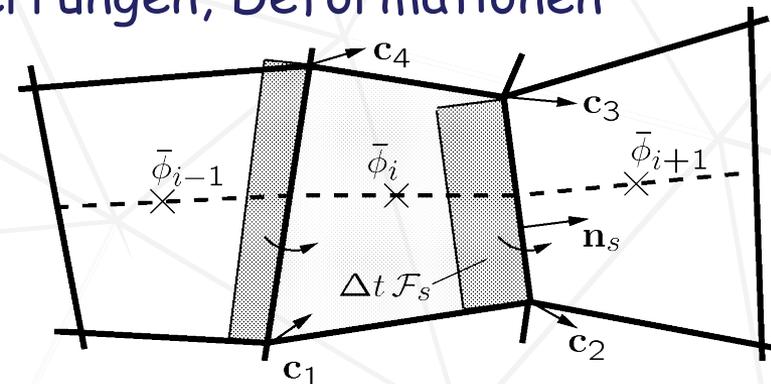
diskreter Flußwert

$$\mathcal{F}_s^\phi = \frac{1}{2} \mathcal{F}_s (\hat{\phi} + \hat{\phi}_s) + \frac{1}{2} |\mathcal{F}_s| (\hat{\phi} - \hat{\phi}_s)$$

Volumenflußrate $\mathcal{F}_s = \int_{\Gamma_s} \mathbf{c} \cdot \mathbf{n}_s \, da$

lineare Rekonstruktion $\hat{\phi}_i(\xi, t) = \bar{\phi}_i(t) + s_i(t) (\xi - \xi_i)$

→ Verfahren 2. Ordnung („im Raum“)

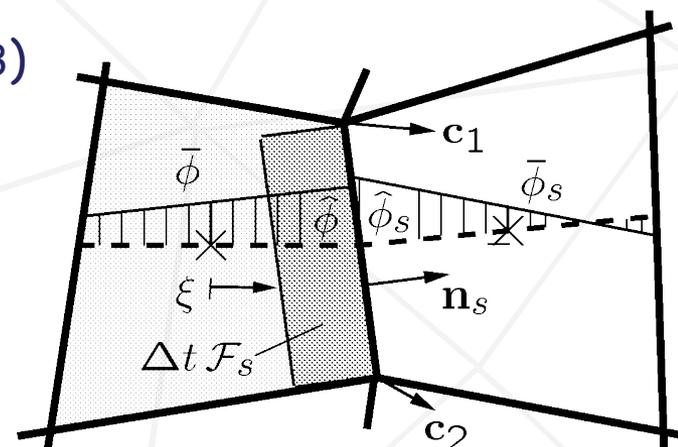


Total Variation Diminishing Konzept (Harten '83)

Einführung von *Slope-Limitern*

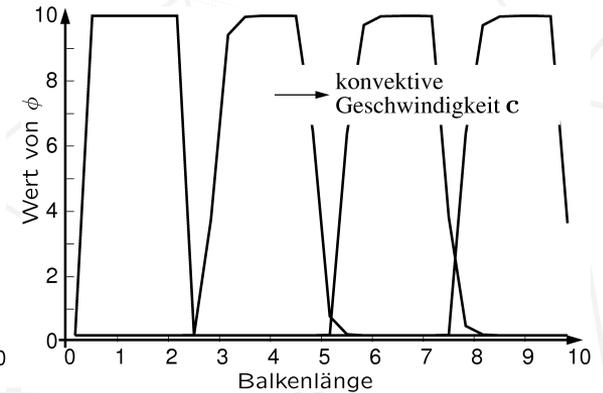
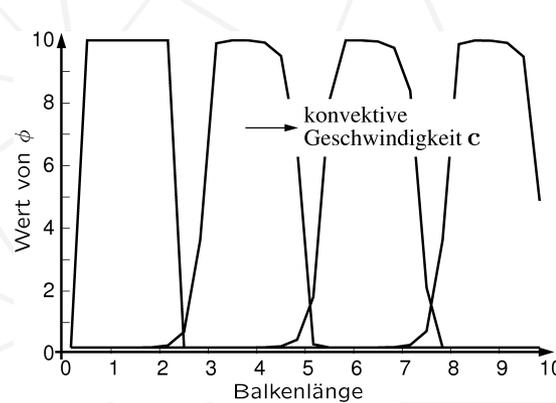
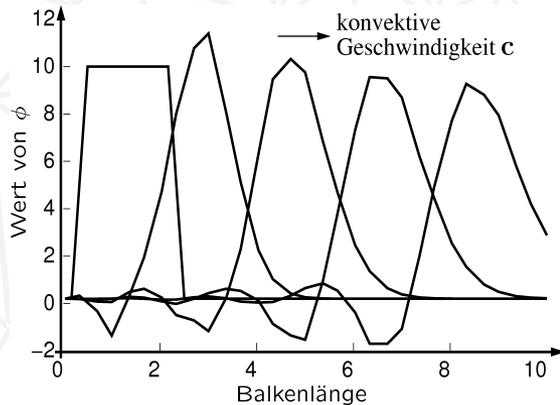
$$s_i^\xi = \frac{L_i}{l_i^\xi} (\bar{\phi}_{i+1} - \bar{\phi}_i) \quad L_i = L(\theta_i) \quad \theta_i = \frac{\bar{\phi}_i - \bar{\phi}_{i-1}}{\bar{\phi}_{i+1} - \bar{\phi}_i}$$

→ Steigungslimitierung - Vermeidung von *over- und undershoots*

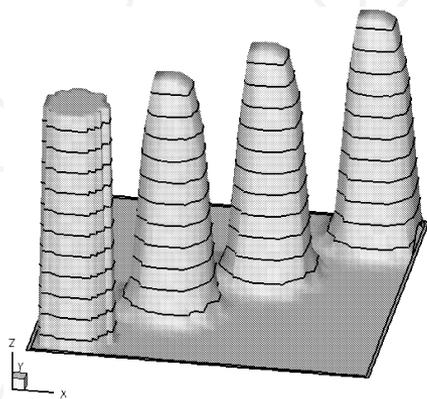


2. Schritt: ALE-Advektionsphase (2)

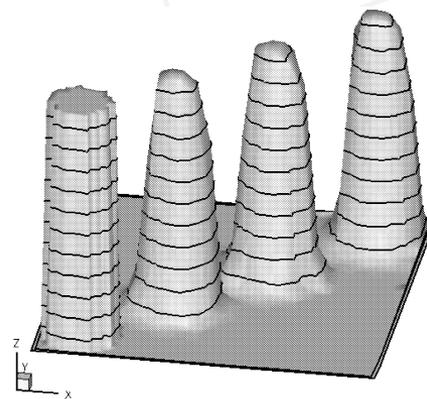
1D-Advektion einer Rechteckwelle ($C_r = 0.3/0.7$, 30 Elemente)



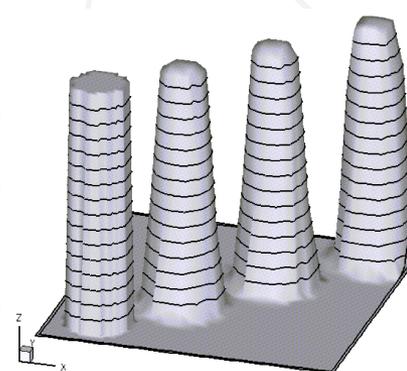
2D-Advektion einer kreisförmigen Diskontinuität ($C_r = 0.3/0.7$, 30x30 Elemente)



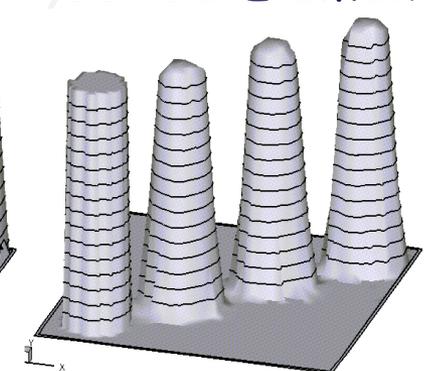
undeformiertes Netz



deformiertes Netz



undeformiertes Netz



deformiertes Netz

2. Schritt: ALE-Advektionsphase (3)

II. materialbezogene Variablen: z.B. Dichte, Volumenfraktion

Materialbezogene Advektion

"exakte" Bestimmung der Advektionsvolumina erforderlich

Piecewise Linear Interface Calculation (PLIC)

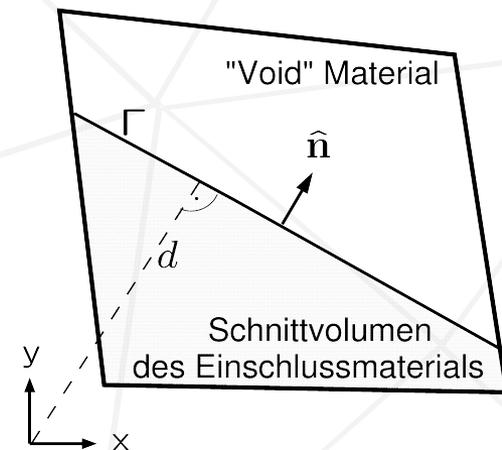
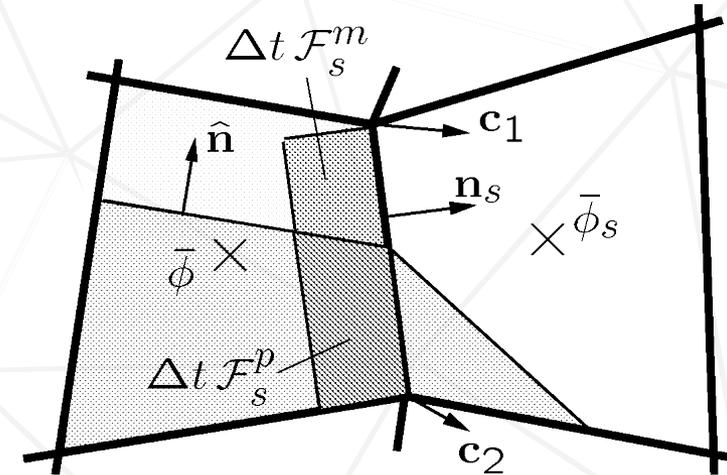
Beschreibung der Materialgrenze Γ

$$\Gamma : \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{x} - d = 0$$

$\hat{\mathbf{n}}$ Oberflächen-Normale
 d Oberflächen-Parameter

- Bestimmung der Flächennormalen $\hat{\mathbf{n}}$
- Bestimmung des Flächenparameters d

anhand der Volumenfraktionen f^k



2. Schritt: ALE-Advektionsphase (4)

IIa) Bestimmung der Flächennormalen $\hat{\mathbf{n}}$

räumliche Gradientenbildung (Youngs '82)

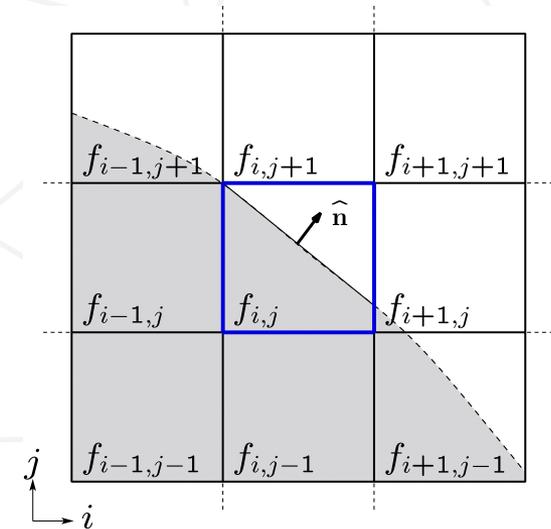
$$\hat{\mathbf{n}} \approx \frac{\text{grad } f^k}{|\text{grad } f^k|}$$

2D Approximation durch FD-Verfahren

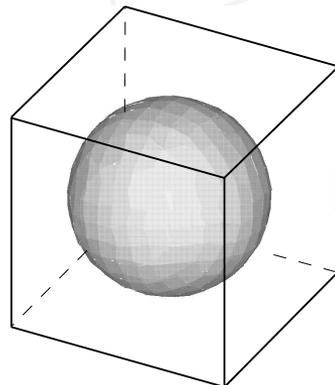
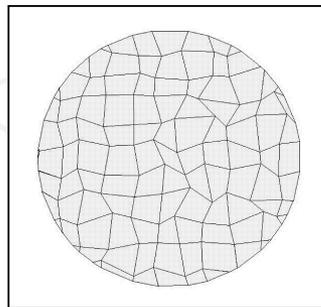
$$\frac{\partial f^k}{\partial x_1} = \frac{\bar{f}_{i+1,j}^k - \bar{f}_{i-1,j}^k}{2 h_\xi} \quad \frac{\partial f^k}{\partial x_2} = \frac{\bar{f}_{i,j+1}^k - \bar{f}_{i,j-1}^k}{2 h_\eta}$$

mit gewichteten Differenzen

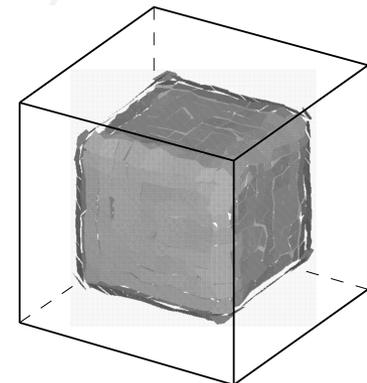
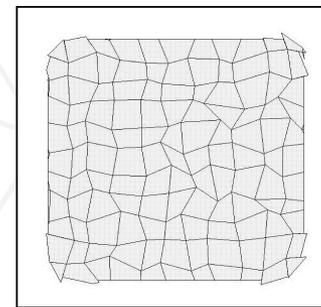
$$\bar{f}_{i+1,j}^k = \frac{1}{4} (f_{i+1,j-1}^k + 2 f_{i+1,j}^k + f_{i+1,j+1}^k).$$



3x3 Elementpatch



kreisförmige Rekonstruktion



quaderförmige Rekonstruktion

2. Schritt: ALE-Advektionsphase (5)

IIb) Bestimmung des Flächenparameters d

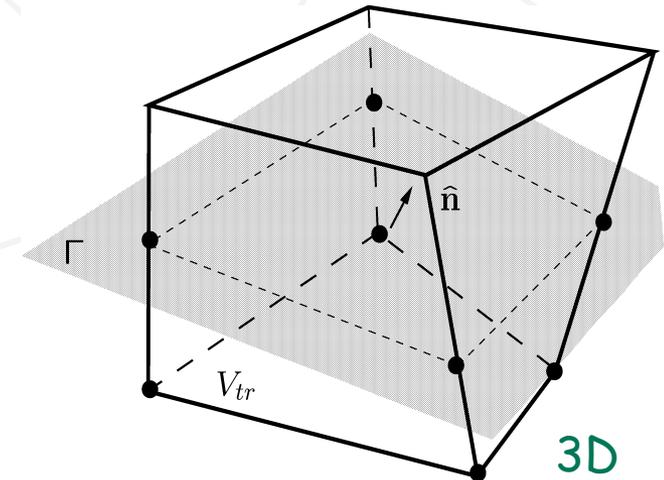
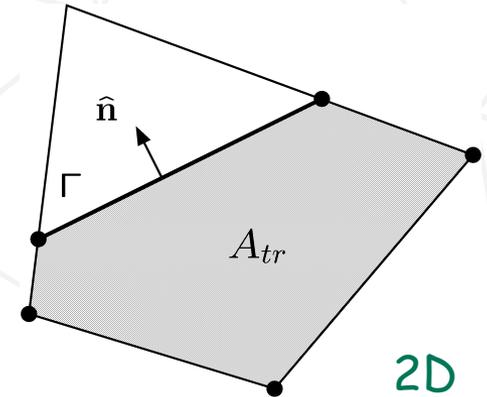
Minimierung des Fehlers im Materialvolumen
(Rider & Kothe '98)

$$e_v^k(d^k) = V(d^k) - V^k \quad V^k = f^k V$$

$V(d^k)$ Schnittvolumen in Abhängigkeit
von d^k (A_{tr} bzw. V_{tr})

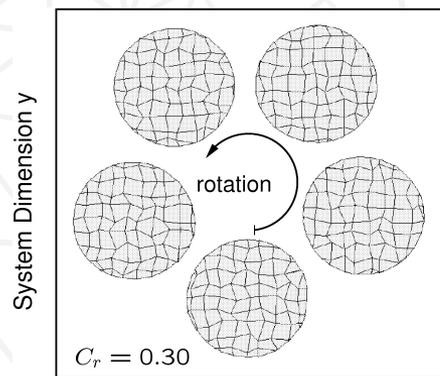
$f^k V$ exaktes Volumen aus Volumenfraktion

- eindimensionales, iteratives Minimierungsproblem in d^k
- gilt für beliebige Elementgeometrien
- erfordert Berechnung der Schnittvolumina A_{tr} bzw. V_{tr}

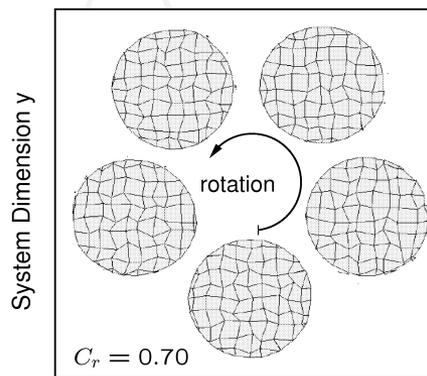


2. Schritt: ALE-Advektionsphase (6)

Kreisförmige Advektion einer Scheibe ($C_r = 0.3/0.7$, 30×30 Elemente)

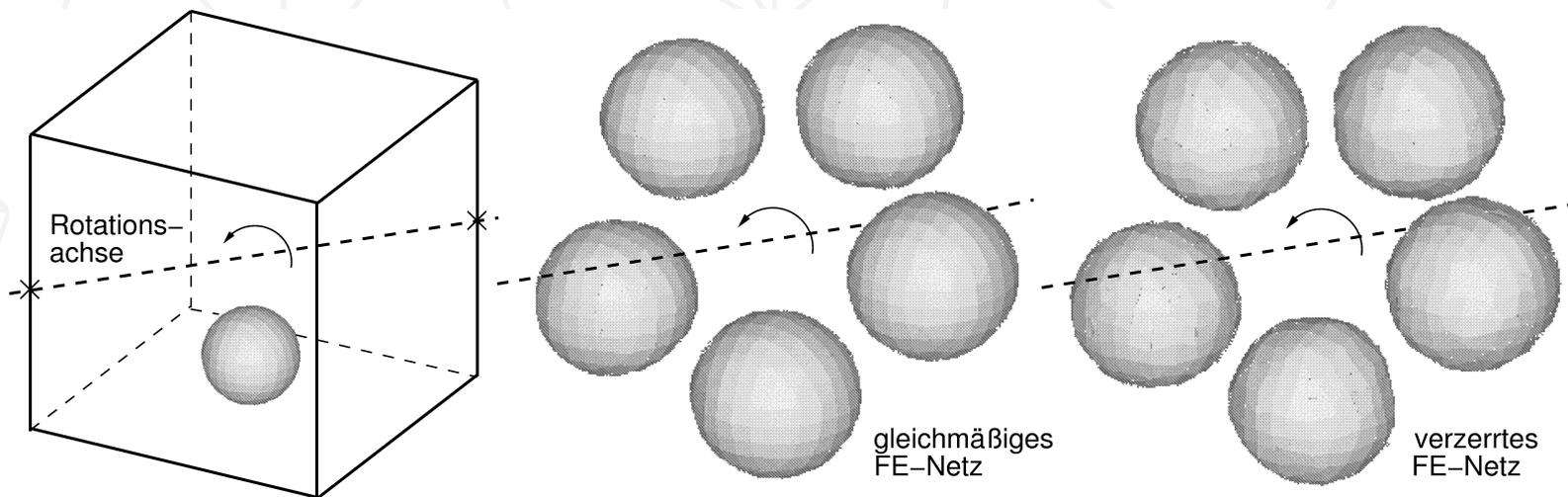


System Dimension x



System Dimension x

Kreisförmige Advektion einer Kugel ($C_r \approx 0.5$, $30 \times 30 \times 30$ Elemente)



Globaler ALE Algorithmus (vereinfachte Darstellung)

1. Lagrange'sche Berechnungsphase

- a. Inkrementierung des Zeitschrittes
- b. Berechnung der "physikalischen" Materialdeformationen

2. Netzglättungsphase

- a. Netzglättung und Berechnung der konvektiven Verschiebungsinkremente

3. Advektions-/Transportphase

- a. Transport des Materials (Volumenfraktion f_k)
- b. Transport der materialabhängigen Größen (Dichte ρ)
- c. Transport der elementabhängigen Größen (Deformationsgradient \mathbf{F})

Beispiel: Kompression einer 10-Partikel Probe (2D)

Numerisches Modell

- 10 Partikel \mathcal{P} in Matrix Material \mathcal{M}

$$\mathcal{B} = \mathcal{M} \cup \mathcal{P} \quad \mathcal{M} \cap \mathcal{P} = \emptyset$$

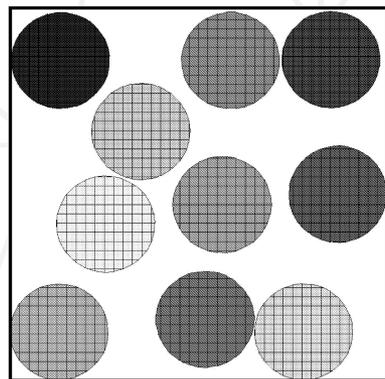
- 40x40 finite Elemente

- Verschiebungs-RB, durch Makro-Deformationsgradient

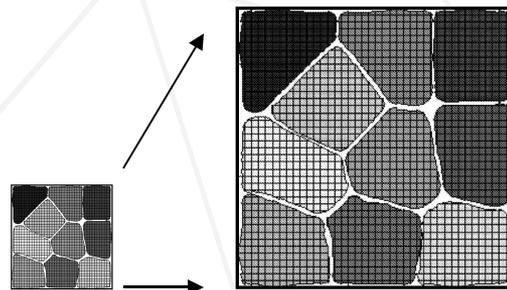
$$\mathbf{u}|_{\partial\mathcal{B}} = (\mathcal{F}(t) - \mathbf{I}) \mathbf{X}|_{\partial\mathcal{B}}$$

mehraxiale
Kompression

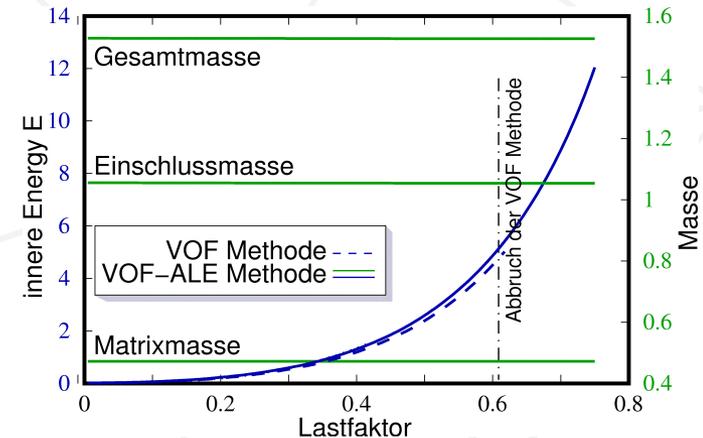
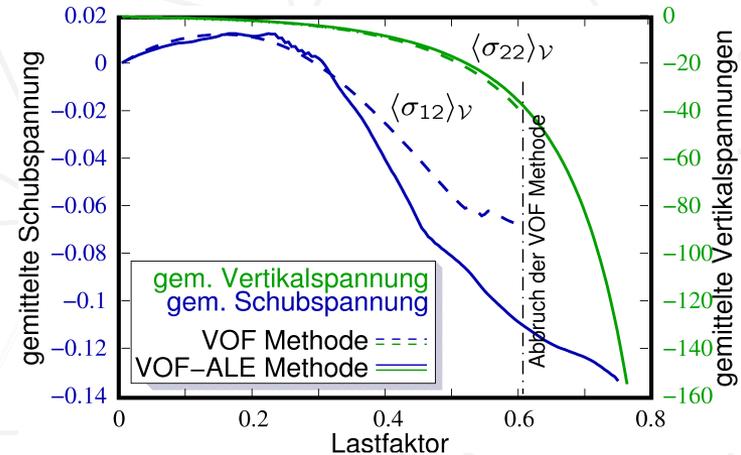
$$\mathcal{F}^V(t) = (1 - \alpha(t)) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$



Ausgangskonfiguration



75% Kompression



Ausblick

VOF-Elementformulierung

- verbesserte Mischungstheorien
- material-bezogene Speicherung der Deformationen
- *void-collapse* Mechanismen

Kopplung der Lagrange'schen und der Advektionsphase

- Gleichgewicht auf dem neuen Netz

Erweiterung der MMALE Methode auf 3D

- Verbesserung des Stabilisierungskonzeptes der reduzierten Integrationsprozedur

Einbindung von thermischen Effekten / Be- und Entlastungszyklen der Probe