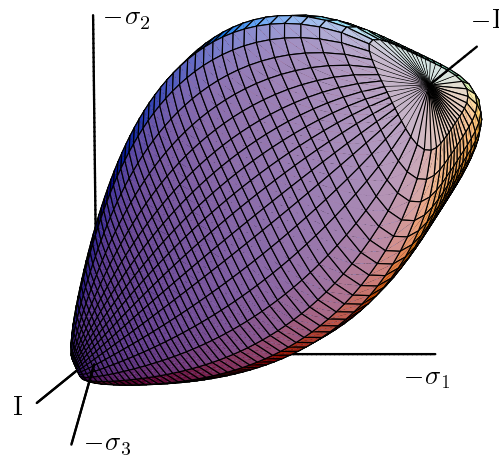


Zur Beschreibung komplexen Materialverhaltens:
Beiträge anlässlich des 50. Geburtstags von
Herrn Prof. Dr.-Ing. Wolfgang Ehlers



Universität Stuttgart

Institut für Mechanik
Lehrstuhl II

Bericht Nr. II-7 aus dem Institut für Mechanik (Bauwesen), Lehrstuhl II,
Universität Stuttgart

Herausgeber:

PD Dr.-Ing. S. Diebels

© Institut für Mechanik (Bauwesen)
Lehrstuhl II
Universität Stuttgart
Pfaffenwaldring 7
D-70 569 Stuttgart

Alle Rechte, insbesondere das der Übersetzung in fremde Sprachen, vorbehalten. Ohne Genehmigung des Herausgebers ist es nicht gestattet, dieses Heft ganz oder teilweise auf fotomechanischem Wege zu vervielfältigen.

Vorwort

Der vorliegende Bericht Nr. II-7 aus dem Institut für Mechanik (Bauwesen) „*Zur Beschreibung komplexen Materialverhaltens*“ ist anlässlich des fünfzigsten Geburtstags von Herrn Professor Dr.-Ing. Wolfgang Ehlers am 1. August 2001 entstanden. Als ich im Herbst vergangenen Jahres bei Kollegen, die zu den Forschungsarbeiten von Professor Ehlers einen engen Bezug haben, und bei seinen ehemaligen Mitarbeitern um einen Beitrag zu diesem Band gebeten habe, war die Resonanz groß. Als Resultat liegt nun ein über 300 Seiten starker Band mit 19 Einzelbeiträgen vor, der die vielen Facetten der Forschungstätigkeit von Professor Ehlers widerspiegelt. Die einzelnen Arbeiten sind zum Teil an Forschungsprojekte geknüpft, die Herr Professor Ehlers gemeinsam mit den Autoren im Rahmen von DFG-Forschergruppen bearbeitet, zum Teil knüpfen die Beiträge an Dissertationen und Habilitationen an, die von Professor Ehlers betreut und begutachtet wurden. Somit wird ein breites Spektrum der aktuellen Forschung in der Mechanik abgedeckt.

Der vorliegende Band enthält Artikel zu den kontinuumsmechanischen Grundlagen der Materialbeschreibung und der Modellbildung sowohl für Einphasen- als auch für Mehrphasenmaterialien. Die kontinuumsmechanische Sichtweise dieser Modelle wird aber auch durch ergänzende und weiterführende Untersuchungen im Mikrobereich und die zugehörigen Homogenisierungsstrategien untermauert. Weiterhin werden numerische Methoden beschrieben, die zur Umsetzung der Modelle in konkrete Berechnungsverfahren entwickelt werden müssen. Darüber hinaus wird in einigen Artikeln auf experimentelle Untersuchungen eingegangen, die zur Identifikation der Modellparameter unerlässlich sind. Letztendlich schließt sich der Kreis in Anwendungen der Theorie auf praxisbezogene Probleme. Anhand der geschilderten Vielfalt und des großen, durch die Beiträge abgedeckten Bereichs wird deutlich, wie weit die Interessen des Forschers Wolfgang Ehlers gestreut sind.

Neben der Forschungstätigkeit sei an dieser Stelle auch das Engagement von Professor Ehlers in der Ausbildung der Studenten und in der universitären Selbstverwaltung genannt. Als akademischer Lehrer schafft es Professor Ehlers immer wieder, die Studenten für den anspruchsvollen Stoff der Mechanik zu begeistern. Sein Erfolg zeigt sich in den gut besuchten Vertiefungsveranstaltungen und in der ständig steigenden Anzahl der an seinem Lehrstuhl angefertigten Diplomarbeiten. Weiterhin nimmt er seine Pflichten in der Selbstverwaltung der Universität aktiv wahr. Dies äußert sich unter anderem darin, daß er während seiner professoralen Laufbahn bereits zweimal das Amt des Dekans inne hatte und zur Zeit als Wahlsenator der Universität Stuttgart tätig ist.

An dieser Stelle sei allen Autoren, die sich an der Fertigstellung dieses Bandes beteiligt haben, ganz herzlich gedankt. Durch ihre Beiträge ist dieser Band erst möglich geworden. Mein weiterer Dank gilt den Mitarbeitern des Lehrstuhls II des Instituts für Mechanik (Bauwesen) für ihren Einsatz bei der endgültigen Fertigstellung des Bandes, insbesondere

für die Mühen bei der unerläßlichen Feinarbeit und der Vereinheitlichung des Layouts der einzelnen Beiträge.

Dieser Band sei Professor Ehlers mit den besten Wünschen, insbesondere für Glück, Gesundheit und fortwährende Kreativität, im Namen aller Autoren und aller Mitarbeiter des Instituts überreicht.

Stuttgart, im August 2001

Stefan Diebels (Herausgeber)

Inhaltsverzeichnis

1. Beruflicher Werdegang von Prof. Dr.-Ing. Wolfgang Ehlers	1
R. de Boer, Fachgebiet Mechanik, FB 10 – Bauwesen, Universität-GH-Essen	
2. Forschungstätigkeit am Lehrstuhl II des Instituts für Mechanik	5
M. Ammann, P. Blome, S. Diebels, O. Klar, B. Markert, T. Michelitsch, B. Scholz, H. Steeb & G. Thomas, Institut für Mechanik (Bauwesen), Universität Stuttgart	
3. Constitutive models for granular materials including quasi-static frictional behaviour: Toward a thermodynamic theory of plasticity	39
B. Svendsen, Lehrstuhl für Mechanik, Fakultät Maschinenbau, Universität Dortmund K. Hutter, Institut für Mechanik, AG III, Technische Universität Darmstadt L. Laloui, Swiss Federal Institute of Technology, Lausanne, Switzerland	
4. Ein vereinfachtes binäres Modell mit kompressiblen und inkompressiblen Phasen	57
J. Bluhm, Fachgebiet Mechanik, FB 10 – Bauwesen, Universität-GH-Essen	
5. Zur Modellierung poröser Medien bei großen Deformationen	69
D. Mahnkopf, Ludwigsburg	
6. Constitutive modelling of bonded granular materials	91
T. Schanz, Professur Bodenmechanik, Bauhaus-Universität Weimar	

7. Isothermal and nonisothermal multiphase multicomponent processes in the subsurface	107
R. Helmig, H. Class & R. Hinkelmann, Institut für Wasserbau, Lehrstuhl für Hydromechanik und Hydrosystemmodellierung, Universität Stuttgart	
8. Micro-macro transition for cohesive granular media	121
S. Luding & H. J. Herrmann, Institut für Computeranwendungen 1, Universität Stuttgart	
9. Modelling of cohesive frictional materials as continuum or discontinuum	135
E. Ramm, G. A. D'Addetta & E. Kuhl, Institut für Baustatik, Universität Stuttgart	
10. On the micromechanical modelling of the multiplicative decomposition of the deformation gradient in finite viscoelasticity	157
S. Reese, AG Numerische Mechanik & Simulationstechnik, Institut für Mechanik, Ruhr-Universität Bochum	
11. Mixed continuum-atomistic analysis of single crystals	175
R. Sunyk & P. Steinmann, Lehrstuhl für Technische Mechanik, Universität Kaiserslautern	
12. Analogiebetrachtungen für mikropolare Kontinua mit Anwendung auf den Biaxialversuch	189
W. Volk, München S. Diebels, Institut für Mechanik (Bauwesen), Universität Stuttgart M. Lätzel & S. Luding, Institut für Computeranwendungen 1, Universität Stuttgart	
13. Konsistente Linearisierung im Rahmen der Theorie Poröser Medien	207
G. Eipper, Waldenbuch	
14. Error-controlled Runge-Kutta time integration in elastoplasticity and viscoplasticity	221
P. Ellsiepen & S. Diebels, Institut für Mechanik (Bauwesen), Universität Stuttgart	
15. Untersuchung der Bewegung von FE- und Starrkörperstrukturen in Zentralkraftfeldern mit der „Energy-Momentum“ Methode	245
B. Göttlicher & K. Schweizerhof, Institut für Mechanik, Universität Karlsruhe	

16. Die Stabilität der Ortsbrust von Tunnels in homogenem Boden oder Fels	257
P. A. Vermeer & N. Ruse, Institut für Geotechnik, Universität Stuttgart	
17. Änderung des Korngefüges durch Abrasion	275
R. Katzenbach & G. Festag, Institut und Versuchsanstalt für Geotechnik, Technische Universität Darmstadt	
18. Optimization of material parameters using the response surface method in LS-OPT	287
H. Müllerschön, U. Franz & T. Münz, CAD-FEM GmbH, Grafing/München	
N. Stander, Livermore Software Technology Corporation, Livermore, CA, USA	
19. Approximated rank-1-convexification for the relaxation of non-convex elastoplastic materials	301
M. Lambrecht & C. Miehe, Institut für Mechanik (Bauwesen), Universität Stuttgart	
A. Lebenslauf von Prof. Dr.-Ing. W. Ehlers	319
B. Publikationsliste von Prof. Dr.-Ing. W. Ehlers	321
C. Doktoranden und Habilitanden	333

1

Beruflicher Werdegang von Prof. Dr.-Ing. Wolfgang Ehlers

R. de Boer
Fachgebiet Mechanik, FB 10 – Bauwesen
Universität-GH-Essen
D-45141 Essen

Wolfgang Ehlers, geboren am 1. August 1951, verbrachte seine Kindheit in Heepen (Bielefeld). Er besuchte die Grundschule in Heepen und das Max-Planck-Gymnasium in Bielefeld bis 1970.

Nach dem Abitur und Absolvierung des Wehrdienstes studierte er bis 1979 Bauingenieurwesen an der Technischen Universität Hannover. Bis zu seiner Berufung auf eine C3-Professur in Mechanik an die Technische Hochschule Darmstadt war er als wissenschaftlicher Mitarbeiter, wissenschaftlicher Assistent, akademischer Rat und Oberrat sowie als Hochschuldozent im Institut für Mechanik (Fachbereich Bauwesen) der Universität Essen tätig.

Bereits während seiner ersten Tätigkeit in Essen im Rahmen eines Forschungsvorhabens über die Viskoplastizität wurde seine wissenschaftliche Begabung erkennbar. Er erstellte zusammen mit mir einen Forschungsbericht über die Grundlagen der isothermen Plastizitäts- und Viskoplastizitätstheorie, der im Jahr 1980 erschien. Zu dieser Zeit arbeitete er sich tief in dieses Teilgebiet der Kontinuumsmechanik ein, so daß es ihm möglich war, seine Dissertation über die inkrementelle Beschreibung elastisch-plastischer Körper innerhalb der Theorie kleiner Verzerrungen und großer Rotationen in verhältnismäßig kurzer Zeit abzuschließen.

Nach der wissenschaftlichen Durchdringung von Teilgebieten der Plastizitäts- und Viskoplastizitätstheorie schloß sich Herr Dr.-Ing. Ehlers einer neuen Forschungsrichtung im Fachgebiet Mechanik an, nämlich der Entwicklung einer konsistenten Theorie saturierter und leerer poröser Festkörper. Bereits 1985 hat er über erste Ergebnisse auf der GAMM-Tagung berichtet. In der Folgezeit hat er mit mir auf dem Gebiet der Theorie poröser Medien, sei es im Bereich der Grundlagen, der historischen Entwicklung und auch der Anwendung, sehr eng zusammengearbeitet. Die Ergebnisse sind in verschiedenen nationalen und internationalen Zeitschriften publiziert worden. Seine Kenntnisse auf dem Gebiet poröser Medien hatten sich in den achtziger Jahren so weit vertieft und ausgeweitet, daß er 1988 auf der Grundlage der Bowenschen Arbeiten seine Habilitationsschrift anfertigen konnte. Die Schrift wurde von Fachbereich 10 Bauwesen der Universität Essen als Habi-

litationsschrift angenommen; es wurde ihm die *venia legendi* für das Fachgebiet Mechanik verliehen.

Diese Arbeit, die u. a. die Grundlagen der konstitutiven Theorie der saturierten porösen Festkörper enthält, hat in der Fachwelt große Beachtung gefunden. Für sie wurde Herr Professor Wolfgang Ehlers mit dem renommierten Wissenschaftspreis der Gottschalk-Diederich-Baedeker-Stiftung, Essen, ausgezeichnet; übrigens, bis jetzt der einzige Bauingenieur, der diese Auszeichnung erhalten hat.

Im Jahr 1991 erhielt Herr Dr.-Ing. Ehlers den ehrenvollen Ruf auf eine C3-Professur im Fachbereich Mechanik der Technischen Hochschule in Darmstadt. Neben seinen vielen Lehrverpflichtungen fand er an seiner neuen Wirkungsstätte immer wieder Zeit, sich mit der Theorie poröser Medien zu befassen. Aus dieser Zeit stammen so wichtige Veröffentlichungen wie Arbeiten über kompressible, inkompressible und hybride binäre Modelle in der Theorie poröser Medien sowie Arbeiten über dynamische Probleme in heterogen aufgebauten Materialien. Er hat seine wissenschaftlichen Ergebnisse jedoch nicht nur in hervorragenden Fachzeitschriften veröffentlicht, sondern auch auf z. T. großen internationalen Konferenzen vorgetragen. Sowohl seine Aufsätze als auch seine wissenschaftlichen Vorträge zeichnen sich durch Übersichtlichkeit, Klarheit und Konsequenz aus.

Für die Fachleute war es nicht überraschend, daß er nach wenigen Jahren Tätigkeit in Darmstadt in den Jahren 1993 und 1994 fast gleichzeitig zwei Rufe auf C4-Professuren in Magdeburg und Stuttgart erhielt. Er hat sich ziemlich kurzfristig für die Übernahme der Professur an dem renommierten Institut für Mechanik (Bauwesen) an der Universität Stuttgart entschieden. Unter großem persönlichen Einsatz richtete er ein effektives Programm für die Lehre ein und stellte ein Forschungsteam mit einem ambitionierten Programm zusammen. Dieses Programm, u. a. Untersuchung elastisch-plastischer Deformationen von flüssigkeitsgefüllten porösen Festkörpern, Entwicklung von Rechenprogrammen (Methode der finiten Elemente) zur numerischen Lösung von Anfangs- und Randwertproblemen in der Theorie poröser Medien, Cosserat-Theorie für gesättigte poröse Körper, Untersuchung von Scherbändern, Einbeziehung von viskoelastischen Formänderungen in der Theorie poröser Medien, wurde in weiten Bereichen erfolgreich umgesetzt; die Ergebnisse sind in rund 140 Veröffentlichungen niedergelegt, die zum größten Teil in renommierten nationalen und internationalen Fachzeitschriften erschienen sind. Darüber hinaus sind die herausragenden Forschungsergebnisse auf vielen nationalen und internationalen Konferenzen von Professor Dr.-Ing. Ehlers und seinen Mitarbeitern der Fachwelt vorgestellt worden.

Neben seiner Hochschultätigkeit in Lehre und Forschung hat Herr Professor Dr.-Ing. Ehlers auch in der Selbstverwaltung und in der Wissenschaftsorganisation erfolgreich gewirkt. Bereits während seiner Tätigkeit in Essen hat er sich engagiert an Selbstverwaltungsaufgaben im Mittelbau beteiligt. Diese Aufgabe wurde natürlich größer als er 1991 zum C3-Professor in Darmstadt ernannt worden war. Zunächst wurde er 1993 zum geschäftsführenden Direktor des Instituts für Mechanik eingesetzt. Im Jahre 1994 wurde er zum Dekan des Fachbereichs 6 Mechanik gewählt. Diese Tätigkeiten führte er auch bereits an neuer Wirkungsstätte, an der Universität Stuttgart, mit großem Erfolg aus. Hier ist er auch voriges Jahr zum Wahlsenator und Mitglied im Senatsausschuß für Forschung gewählt, und auf nationaler Ebene ist er zum Fachgutachter der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) für das Fach Mechanik bestimmt worden. In der Wissenschaftsorganisation erhielt er ehrenvolle Berufungen, als Mitglied in Scientific Committees mitzuarbeiten. Diese Berufungen

wurden 1999 gekrönt, als Herr Professor Dr.-Ing. Ehlers mit der Organisation des weltweiten Symposiums *Theoretical and Numerical Methods in Continuum Mechanics of Porous Materials* von der IUTAM beauftragt wurde.

Die vielen Artikel, die er zusammen mit Mitarbeitern veröffentlicht hat, zeugen davon, daß er die Teamarbeit liebt und daß er es versteht, seine Mitarbeiter für mechanische Probleme zu begeistern. Er stellt dabei hohe Anforderungen. Vor allem ist ihm jede unexakte Arbeit zuwider. Er läßt seinen Mitarbeitern aber immer genug Freiheiten, damit auch sie ihre Ideen verwirklichen können.

Abschließend kann festgestellt werden, daß Herr Prof. Dr.-Ing. Ehlers schon in verhältnismäßig jungen Jahren überragende Erfolge in Lehre, Forschung und Wissenschaftsorganisation erreicht hat. Dies ist 1998 von seinen Kollegen mit einer weiteren Berufung auf eine C4-Professur für Allgemeine Mechanik an der Ruhr-Universität Bochum gewürdigt worden.

Ich wünsche Herrn Professor Dr.-Ing. Ehlers für die Zukunft Glück, Zufriedenheit, Gesundheit und weiterhin nie versiegende wissenschaftliche Schaffenskraft.

2

Forschungstätigkeit am Lehrstuhl II des Instituts für Mechanik

Institut für Mechanik (Bauwesen)
Universität Stuttgart
D-70550 Stuttgart

2.1 Gemischt-hybride Finite Elemente für mikropolare Kontinua

(M. Ammann & S. Diebels)

Zusammenfassung. Für ein mikropolares poröses Festkörperskelett wird eine gemischt-hybride Elementformulierung auf der Basis eines Hu-Washizu-Funktional angegeben. Dabei werden für den Verschiebungs-Rotations-Dehnungs-Ansatz die Ansatzfunktionen vorgestellt und die Stabilitätsanforderungen diskutiert. An einer einfachen numerischen Beispielrechnung wird die Effizienz der neuen Elementformulierung gegenüber einer herkömmlichen gemischten Methode demonstriert, bei der nur die Verschiebungen und die Rotationen als FE-Freiwerte benutzt werden.

2.1.1 Hu-Washizu-Funktional

Die folgende gemischt-hybride Elementformulierung soll aus Gründen der besseren Übersichtlichkeit im Rahmen einer geometrisch wie auch materiell linearen Theorie hergeleitet werden. Dies führt bei einer Beschreibung innerhalb der Mikropolaren Theorie Poröser Medien (MTPM) zu folgenden Gleichungen für die Verzerrungen $\bar{\epsilon}_S$ und die Krümmungen $\bar{\kappa}_S$ (Ehlers & Volk [3]):

$$\bar{\epsilon}_S = \text{grad } \mathbf{u}_S + \overset{3}{\mathbf{E}} \bar{\varphi}_S, \quad \bar{\kappa}_S = \text{grad } \bar{\varphi}_S. \quad (2.1)$$

Dabei bildet der Operator $\text{grad}(\cdot) = \partial(\cdot)/\partial \mathbf{x}$ die partielle Ableitung nach den Ortsvektoren $\mathbf{x}$, und $\overset{3}{\mathbf{E}}$ stellt den 3-stufigen Ricci-Permutationstensor dar. Die Primärvariablen des betrachteten Modells setzen sich aus der Festkörperverschiebung $\mathbf{u}_S$ und der unabhängigen Festkörperrotation $\bar{\varphi}_S$ zusammen. Mittels eines modifizierten Hookeschen Gesetzes

können die folgenden Beziehungen für die Festkörperextraspansungen $\boldsymbol{\sigma}_E^S$ und die Momentenspannungen $\mathbf{M}^S$ aufgestellt werden (*de Borst* [2], *Ehlers & Volk* [3], *Steinmann & Willam* [5]):

$$\boldsymbol{\sigma}_E^S = \left(2 \mu^S \mathbf{I}_{\text{sym}}^4 + \lambda^S (\mathbf{I} \otimes \mathbf{I}) + 2 \mu_c^S \mathbf{I}_{\text{skw}}^4 \right) \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_S, \quad \mathbf{M}^S = 2 \mu_c^S (l_c^S)^2 \bar{\boldsymbol{\kappa}}_S. \quad (2.2)$$

Darin sind $\mathbf{I}_{\text{sym}}^4 = \frac{1}{2}[(\mathbf{I} \otimes \mathbf{I})^{23} + (\mathbf{I} \otimes \mathbf{I})^{13}]$ und $\mathbf{I}_{\text{skw}}^4 = \frac{1}{2}[(\mathbf{I} \otimes \mathbf{I})^{23} - (\mathbf{I} \otimes \mathbf{I})^{13}]$ die 4-stufigen Fundamentaltensoren, μ^S und λ^S die klassischen *Laméschen* Konstanten und μ_c^S und l_c^S die zusätzlichen mikropolaren Parameter.

Mit den obigen Gleichungen kann das *Hu-Washizu*-Funktional für das betrachtete Modell aufgestellt werden:

$$\begin{aligned} \delta \Pi_{HW} = & \int_{\Omega} \delta \mathbf{u}_S \cdot (\text{div } \boldsymbol{\sigma}_E^S + \rho \mathbf{b}) \, dv + \int_{\Omega} \delta \bar{\boldsymbol{\varphi}}_S \cdot (\text{div } \mathbf{M}^S + \mathbf{I} \times \boldsymbol{\sigma}_E^S) \, dv + \\ & \int_{\Omega} \delta \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_S \cdot (\boldsymbol{\sigma}_E^S - [2 \mu^S \mathbf{I}_{\text{sym}}^4 + \lambda^S (\mathbf{I} \otimes \mathbf{I}) + 2 \mu_c^S \mathbf{I}_{\text{skw}}^4] \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_S) \, dv + \\ & \int_{\Omega} \delta \boldsymbol{\sigma}_E^S \cdot (\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_S - \text{grad } \mathbf{u}_S - \overset{3}{\mathbf{E}} \bar{\boldsymbol{\varphi}}_S) \, dv. \end{aligned} \quad (2.3)$$

2.1.2 Verschiebungs-Rotations-Dehnungs-Ansatz

In Anlehnung an *Simo & Rifai* [4] wird in einem nächsten Schritt ein verbesserter Ansatz für die Verzerrungen $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_S$ und die Testfunktionen der Verzerrungen $\delta \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_S$ definiert:

$$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_S = \text{grad } \mathbf{u}_S + \overset{3}{\mathbf{E}} \bar{\boldsymbol{\varphi}}_S + \tilde{\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}}_S, \quad \delta \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_S = \text{grad } \delta \mathbf{u}_S + \overset{3}{\mathbf{E}} \delta \bar{\boldsymbol{\varphi}}_S + \delta \tilde{\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}}_S. \quad (2.4)$$

Unter Berücksichtigung der Orthogonalitätsbedingung $\int_{\Omega} \delta \boldsymbol{\sigma}_E^S \cdot \tilde{\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}}_S \, dv = \int_{\Omega} \delta \tilde{\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}}_S \cdot \boldsymbol{\sigma}_E^S \, dv = 0$ entfällt nach Einsetzen von (2.4) in (2.3) für das *Hu-Washizu*-Funktional die explizite Abhängigkeit von der Festkörperspannung $\boldsymbol{\sigma}_E^S$. $\delta \Pi_{HW}$ ist somit lediglich von den beiden Primärvariablen $\mathbf{u}_S$, $\bar{\boldsymbol{\varphi}}_S$ sowie dem zusätzlichen Anteil $\tilde{\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}}_S$ aus den in (2.4) definierten verbesserten Verzerrungen abhängig.

Nach der Ortsdiskretisierung ergibt sich für das Gesamtsystem der folgende Ausdruck:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{K}_{uu} & \mathbf{K}_{u\varphi} & \mathbf{K}_{u\alpha} \\ \mathbf{K}_{\varphi u} & \mathbf{K}_{\varphi\varphi} & \mathbf{K}_{\varphi\alpha} \\ \mathbf{K}_{\alpha u} & \mathbf{K}_{\alpha\varphi} & \mathbf{K}_{\alpha\alpha} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ \bar{\boldsymbol{\varphi}}_3 \\ \boldsymbol{\alpha} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{F}_u \\ \mathbf{F}_{\varphi} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}, \quad (2.5)$$

$$\boldsymbol{\alpha} = -\mathbf{K}_{\alpha\alpha}^{-1} (\mathbf{K}_{\alpha u} \mathbf{u} + \mathbf{K}_{\alpha\varphi} \bar{\boldsymbol{\varphi}}_3).$$

Darin sind die $\mathbf{K}_{ii}$ die nach der Ortsdiskretisierung entstandenen Einträge in der Steifigkeitsmatrix, $\mathbf{u} = [\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2]^T$ und $\bar{\boldsymbol{\varphi}}_3$ entsprechen den FE-Knotenwerten der Primärvariablen, und $\mathbf{F}_u$ bzw. $\mathbf{F}_{\varphi}$ sind die Oberflächenintegrale für die Verschiebungen bzw. die Rotationen. Der Vektor $\boldsymbol{\alpha}$ beinhaltet die zusätzlichen Anteile der verbesserten Verzerrungen, die

im Gegensatz zu den Verschiebungen und den Rotationen keinen FE-Knoten zugeordnet werden können. Die Dimension von α wird dabei durch den gewählten Ansatz für die verbesserten Verzerrungen bestimmt. Da für die zusätzlichen Anteile der verbesserte Verzerrungen keine Oberflächenterme definiert sind, kann das Gesamtsystem im folgenden durch statische Kondensation (vgl. (2.5)₂) auf die Primärvariablen reduziert werden, d. h. die zusätzlichen Freiheitsgrade α können auf Elementebene eliminiert werden. Somit ist bei dieser Vorgehensweise ein zusätzlicher numerischer Aufwand lediglich auf Elementebene vorhanden.

2.1.3 Ansatzfunktionen und Stabilitätsanforderungen

Für die neue Elementformulierung müssen im weiteren die einzelnen Ansatzfunktionen festgelegt werden. Dabei werden in einem Viereckselement für $\mathbf{u}_S^h$ und $\bar{\boldsymbol{\varphi}}_S^h$ jeweils bilineare Ansätze gewählt. Für den zusätzlichen Anteil aus den verbesserten Verzerrungen $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_S^h$ wird der folgende Ansatz benutzt:

$$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_S^h(\mathbf{x}, t) = \sum_{j=1}^E \begin{pmatrix} \Theta_{11}^j(\mathbf{x}) \alpha^j(t) \\ \Theta_{22}^j(\mathbf{x}) \alpha^j(t) \\ \Theta_{12}^j(\mathbf{x}) \alpha^j(t) \\ \Theta_{21}^j(\mathbf{x}) \alpha^j(t) \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad \begin{pmatrix} \boldsymbol{\Theta}_{11} \\ \boldsymbol{\Theta}_{22} \\ \boldsymbol{\Theta}_{12} \\ \boldsymbol{\Theta}_{21} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \xi & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \eta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \xi & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \eta \end{pmatrix}. \quad (2.6)$$

Die Anteile $\boldsymbol{\Theta}_{11}$ bzw. $\boldsymbol{\Theta}_{22}$ vermindern dabei den Effekt des volumetrischen Lockings, wohingegen $\boldsymbol{\Theta}_{33}$ bzw. $\boldsymbol{\Theta}_{44}$ das Schublocking abschwächen (vgl. *Andelfinger* [1]). Für ein stabiles Verhalten des neuen Elements muß bei der Wahl des Ansatzes für $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_S^h$ berücksichtigt werden, daß die neuen Ansätze linear unabhängig sind. Desweiteren müssen für die Einhaltung der im Abschnitt 2.1.2 aufgeführten Orthogonalitätsbedingung die Transformationen von $\boldsymbol{\Theta}$ von dem Einheitsraum auf den physikalischen Raum mit einer konstanten, am Elementmittelpunkt ausgewerteten Transformationsmatrix durchgeführt werden. Für die Erfüllung des Patch-Tests sind bei der *Gauß*-Quadratur sämtliche Größen, die mit den zusätzlichen Anteilen $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_S^h$ in Verbindung stehen, mit einer konstanten, ebenfalls am Elementmittelpunkt ausgewerteten *Jacobi*-Determinante zu integrieren (*Simo & Rifai* [4]).

2.1.4 Beispiel: Kragarm unter Schubbelastung

An einem einfachen Beispiel soll die Effizienz der neuen Elementformulierung (Q1R1E4) im Vergleich zu einer reinen Verschiebungs-Rotations-Formulierung (Q1R1) demonstriert werden. Hierfür wurde der in der Abbildung 2.1 dargestellte Kragarm auf Schub belastet und mit unterschiedlich feinen FE-Netzen berechnet. Um die beiden Elementformulierungen vergleichen zu können, wurde exemplarisch jeweils die Spannung σ_{E11}^S am Punkt A betrachtet. Man kann deutlich erkennen, daß die Berechnungen mit dem Q1R1E4-Element schneller gegen einen Referenzwert, der mit einem gleichmäßig verfeinerten FE-Netz (150x150 Elemente) ermittelt wurde, konvergieren als mit dem Q1R1-Element.

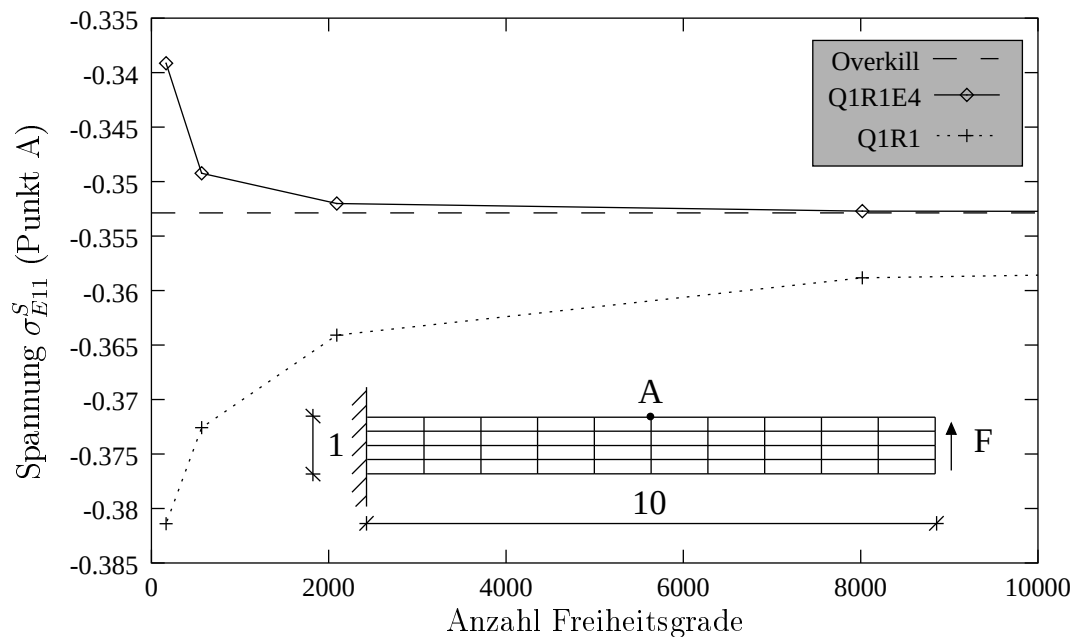


Abbildung 2.1: Kragarm unter Schubbelastung: Spannung σ_{E11}^S am Punkt A über Anzahl der Freiheitsgrade.

2.1.5 Literaturverzeichnis

- [1] U. Andelfinger. *Untersuchungen zur Zuverlässigkeit hybrid-gemischter Finiter Elemente für Flächentragwerke*. Dissertation, Bericht Nr. 13 aus dem Institut für Baustatik, Universität Stuttgart, 1991.
- [2] R. de Borst. Numerical modelling of bifurcation and localization in cohesive-frictional materials. *Pageoph.*, 137:368–390, 1991.
- [3] W. Ehlers und W. Volk. On shear band localization phenomena induced by elastoplastic consolidation of fluid-saturated soils. In D. J. R. Owen, E. Oñate und E. Hinton, Hrsg., *Computational Plasticity – Fundamentals and Applications, Vol. 2*, pages 1657–1664, CIMNE, Barcelona, 1997.
- [4] J. C. Simo und M. S. Rifai. A class of mixed assumed strain methods and the method of incompatible modes. *Int. J. Numer. Methods Eng.*, 29:1595–1638, 1990.
- [5] P. Steinmann und K. Willam. Localization within the framework of micropolar elasto-plasticity. In O. Brüller, V. Mannl und J. Najar, Hrsg., *Advances in continuum mechanics*, pages 296–313, Springer-Verlag, Berlin, 1991.

2.2 Residual based error estimation techniques for porous media

(H. Steeb & S. Diebels)

Abstract. *The goal of this work is to present a fully-coupled residual-based error estimation technique in space and time for a two phase porous media problem. Therefore a cG-dG Galerkin scheme (continuous in space and discontinuous in time) is applied. To capture the error in user-specified L_2 -norms the Aubin-Nitsche trick is applied and the abstract dual problem of the non-self-adjoint initial boundary value problem (IBVP) is solved numerically.*

2.2.1 Introduction

In the context of porous media, the initial boundary-value problem is leading directly to a saddle point problem by applying *Galerkin's* method. Without going into further details, we restrict ourselves on an incompressible pore fluid and a linear-elastic solid phase in this work. Due to the fact, that it is difficult to estimate analytically the stability, and therefore the underlying stability constant of the weak form, we circumvent this problem by solving an adjoint problem numerically. The basic concept was applied on certain types of partial differential equations and can be found e. g. in *Erikson et al.* [3], *Becker & Rannacher* [1] and *Larsson, Hansbo & Runesson* [6] for the two-field mechanical-thermal coupled problem of thermo-elasticity.

2.2.2 Boundary value problem and weak form

Applying the balance of momentum for the mixture and the balance of volume in combination with *Darcy's* law for the pore fluid flow we end up with the strong form of the IBVP, as given e. g. by *Ehlers & Ellsiepen* [2]:

$$-\operatorname{div}(\mathbf{T}_E^S - p \mathbf{I}) = (n^S \rho^{SR} + n^F \rho^{FR}) \mathbf{b} \quad \text{in} \quad \Omega \times (0, T), \quad (2.7)$$

$$\operatorname{div}(\mathbf{u}_S)_S' = \operatorname{div} \left(\frac{k^F}{\gamma^{FR}} (\nabla p - \rho^{FR} \mathbf{b}) \right) \quad \text{in} \quad \Omega \times (0, T), \quad (2.8)$$

$$\mathbf{u}_S = \bar{\mathbf{u}}_S \quad \text{on} \quad \Gamma_D^{\mathbf{u}_S} \times (0, T), \quad (2.9)$$

$$p = \bar{p} \quad \text{on} \quad \Gamma_D^p \times (0, T), \quad (2.10)$$

$$(\mathbf{T}_E^S - p \mathbf{I}) \mathbf{n} = \mathbf{t} \quad \text{on} \quad \Gamma_N^{\mathbf{u}_S} \times (0, T), \quad (2.11)$$

$$n^F \mathbf{w}_F \cdot \mathbf{n} = \bar{v} \quad \text{on} \quad \Gamma_N^p \times (0, T), \quad (2.12)$$

$$\mathbf{u}_S|_{t=t_0} = \mathbf{u}_{S,0} \quad \text{at} \quad \Omega \times t_0, \quad (2.13)$$

$$p|_{t=t_0} = p_0 \quad \text{at} \quad \Omega \times t_0. \quad (2.14)$$

Within a geometrically linear setting the second order extra *Cauchy* stress tensor $\mathbf{T}_E^S$ is

linked with the strains $\boldsymbol{\varepsilon}_S = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u}_S + \nabla^T \mathbf{u}_S)$ via *Hooke's law*:

$$\mathbf{T}_E^S = 2\mu^S \boldsymbol{\varepsilon}_S + \lambda^S (\boldsymbol{\varepsilon}_S \cdot \mathbf{I}) \mathbf{I}. \quad (2.15)$$

Multiplying (2.7)–(2.14) with testfunctions for the displacements $\mathbf{u}_S$ and the pore pressure p and applying *Green's formula* and *Cauchy's theorem* we end up in the weak form of the given IBVP:

$$a(\mathbf{u}_S, \delta \mathbf{u}_S)_{0,T} - (p, \operatorname{div} \delta \mathbf{u}_S)_{0,T} = (\mathbf{f}, \delta \mathbf{u}_S)_{0,T} + (\mathbf{t}, \delta \mathbf{u}_S)_{\Gamma_N^{\mathbf{u}_S} \times (0,T)}, \quad (2.16)$$

$$(\operatorname{div}(\mathbf{u}_S)')_{0,T} + b(p, \delta p)_{0,T} = (\mathbf{g}, \nabla \delta p)_{0,T} - (\bar{v}, \delta p)_{\Gamma_N^p \times (0,T)}, \quad (2.17)$$

$$(\mathbf{u}_S(t_0) - \mathbf{u}_{S,0}, \delta \mathbf{u}_S)|_{t=t_0} = 0, \quad (2.18)$$

$$(p(t_0) - p_0, \delta p)|_{t=t_0} = 0, \quad (2.19)$$

with the standard *Sobolev spaces* for $\mathbf{u}_S, \delta \mathbf{u}_S, p$ and δp :

$$\begin{aligned} \mathcal{U} &:= \left\{ \mathbf{u}_S(\mathbf{x}, \cdot) \in H^1(\Omega), \mathbf{u}_S|_{\Gamma_D^{\mathbf{u}_S}} = \bar{\mathbf{u}}_S, \mathbf{u}_S(\cdot, t) \in L_2(0, T) \right\}, \\ \mathcal{V} &:= \left\{ \delta \mathbf{u}_S(\mathbf{x}, \cdot) \in H_0^1(\Omega), \delta \mathbf{u}_S|_{\Gamma_D^{\mathbf{u}_S}} = \mathbf{0}, \mathbf{u}_S(\cdot, t) \in L_2(0, T) \right\}, \\ \mathcal{P} &:= \left\{ p(\mathbf{x}, \cdot) \in H^1(\Omega), p|_{\Gamma_D^p} = \bar{p}, p(\cdot, t) \in L_2(0, T) \right\}, \\ \mathcal{Q} &:= \left\{ \delta p(\mathbf{x}, \cdot) \in H_0^1(\Omega), \delta p|_{\Gamma_D^p} = 0, \delta p(\cdot, t) \in L_2(0, T) \right\}. \end{aligned}$$

In (2.20) and (2.20) the bilinearforms $a(\cdot, \cdot)$ and $b(\cdot, \cdot)$ are given as:

$$a(\mathbf{u}_S, \delta \mathbf{u}_S) := \int_{\Omega} \mathbf{T}_E^S(\mathbf{u}_S) \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_S(\delta \mathbf{u}_S) \, d\Omega; \quad b(p, \delta p) := \int_{\Omega} \nabla p \cdot \frac{k^F}{\gamma^{FR}} \nabla \delta p \, d\Omega. \quad (2.20)$$

2.2.3 Time-discontinuous *Galerkin* method

Now the time-discontinuous *Galerkin* method (*Eriksson et al.* [4]) is applied. Therefore, the time domain I is split into several time slabs $I_n = (t_n, t_{n+1})$. The length of each time slab I_n is defined by $\Delta t_n = t_{n+1} - t_n$, see Figure 2.2.

Discretizing (2.16) – (2.19) with the finite element approximations $\mathbf{u}_{S,h} \in \mathcal{U}_h \subset \mathcal{U}$, $\delta \mathbf{u}_{S,h} \in \mathcal{V}_h \subset \mathcal{V}$ and $p_h \in \mathcal{P}_h \subset \mathcal{P}$, $\delta p_h \in \mathcal{Q}_h \subset \mathcal{Q}$, the finite element problem reads:

Find any $\mathbf{u}_{S,h}$ and p_h such that there holds for any time slab I_n

$$\begin{aligned} &a(\mathbf{u}_{S,h}, \delta \mathbf{u}_{S,h})_{I_n} - (p_h, \operatorname{div} \delta \mathbf{u}_{S,h})_{I_n} + ([\mathbf{u}_{S,h}(\cdot, t_n)], \delta \mathbf{u}_{S,h})|_{t=t_n} \\ &= (\mathbf{f}, \delta \mathbf{u}_{S,h})_{I_n} + (\mathbf{t}, \delta \mathbf{u}_{S,h})_{\Gamma_N^{\mathbf{u}_S} \times I_n} \end{aligned} \quad (2.21)$$

and

$$\begin{aligned} &(\operatorname{div}(\mathbf{u}_{S,h})', \delta p_h)_{I_n} + b(p_h, \delta p_h)_{I_n} + ([p_h(\cdot, t_n)], \delta p_h)|_{t=t_n} \\ &= (\mathbf{g}, \nabla \delta p_h)_{I_n} - (\bar{v}, \delta p_h)_{\Gamma_N^p \times I_n}. \end{aligned} \quad (2.22)$$

The jump terms $\llbracket \cdot \rrbracket$ are defined as, see Figure 2.2:

$$\begin{aligned}\llbracket \mathbf{u}_{S,h}(\cdot, t_n) \rrbracket &:= \mathbf{u}_{S,h}(\cdot, t_n^+) - \mathbf{u}_{S,h}(\cdot, t_n^-), \\ \llbracket p_h(\cdot, t_n) \rrbracket &:= p_h(\cdot, t_n^+) - p_h(\cdot, t_n^-)\end{aligned}$$

and

$$\begin{aligned}\mathbf{u}_{S,h}(\cdot, t_n^+) &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0^+} \mathbf{u}_{S,h}(\cdot, t_n + \Delta t); & \mathbf{u}_{S,h}(\cdot, t_n^-) &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0^-} \mathbf{u}_{S,h}(\cdot, t_n + \Delta t), \\ p_h(\cdot, t_n^+) &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0^+} p_h(\cdot, t_n + \Delta t); & p_h(\cdot, t_n^-) &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0^-} p_h(\cdot, t_n + \Delta t).\end{aligned}$$

2.2.4 Error estimation via dual problems

Following the concept of *Johnson & Hansbo* [5], *Erikson et al.* [3], *Becker & Rannacher* [1] and *Larsson, Hansbo & Runesson* [6] we formulate a dual problem adjoint to the primal or original problem. Using operator notation for our two-field problem there has to hold:

$$\int_I (\mathbf{L}\mathbf{P}, \mathbf{G}) \, dt \stackrel{!}{=} \int_I (\mathbf{L}^*\mathbf{G}, \mathbf{P}) \, dt. \quad (2.23)$$

The differential operator $\mathbf{L}$ describes the primal and $\mathbf{L}^*$ the dual problem. The vectors $\mathbf{P} = [\mathbf{u}_S, p]^T$ and $\mathbf{G} = [\varphi, \psi]^T$ contain the primary variables of the primal and dual problems, respectively:

Inserting the left-hand side of the strong form of the IBVP (2.7), (2.8) in (2.23) and applying handy partial integration in space and time the differential operator is shifted from the primal to the dual problem defining the adjoint operator $\mathbf{L}^*$.

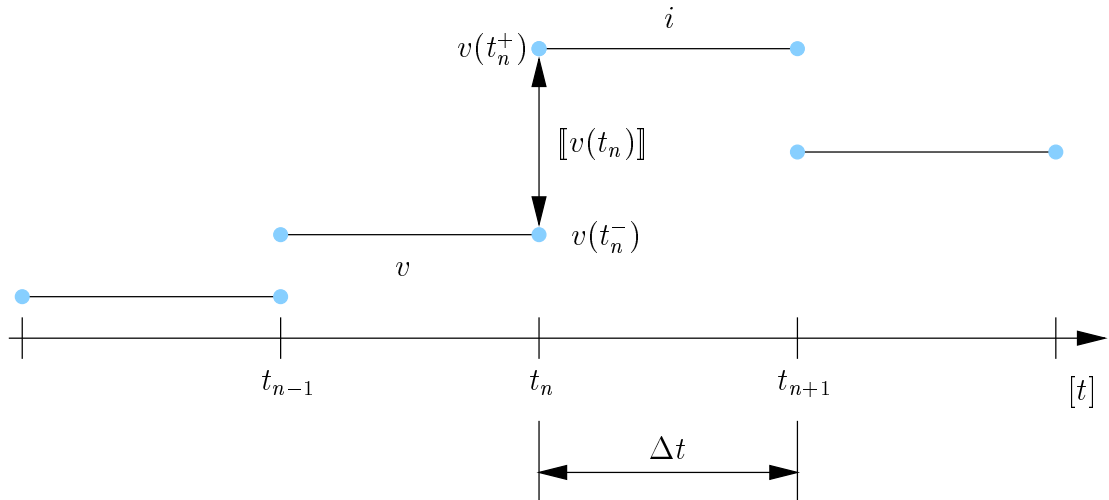


Figure 2.2: Time-discontinuous *Galerkin* method.

The error of the primary variables is defined as

$$\mathbf{e}_{\mathbf{u}_S} := \mathbf{u}_S - \mathbf{u}_{S,h} \quad \text{and} \quad \mathbf{e}_p := p - p_h. \quad (2.24)$$

Now, the *Aubin-Nitsche* trick [7] can be applied on the dual problem and the error of the primal problem itself. This means, that the dual problem is multiplied with the error of the primal problem. After defining the residuals, we end up in the error equation in weak form:

$$|\mathbf{e}(\bar{\mathbf{x}}, \bar{t})| = (\mathbf{e}(\mathbf{P}), \mathbf{j}(\bar{\mathbf{x}}, \bar{t})) = (\mathbf{Res}(\mathbf{u}_{S,h}, p_h), \mathbf{G}(\varphi, \psi)). \quad (2.25)$$

The weak form of the error equation (2.25) can be interpreted as an element-wise weighting of the residual terms of the primal problem with the continuous solution of the dual problem. Therefore, the name *weighted-error estimation* is also well known. In dependence on the chosen right-hand side of the dual problem, error estimators in the L_2 , L_∞ or in other user-prescribed norms can be developed.

Next, we apply the *Galerkin-orthogonality* for the dual problem:

$$|\mathbf{e}(\bar{\mathbf{x}}, \bar{t})| = (\mathbf{Res}(\mathbf{u}_{S,h}, p_h), \mathbf{G}(\varphi, \psi) - \mathbf{G}_h(\varphi_h, \psi_h)). \quad (2.26)$$

Now standard techniques can be applied to estimate (2.26). Separating the residual terms from the dual weighting part using the *Cauchy-Schwarz* inequality and applying standard interpolation estimates is leading to an error estimator, which can be calculated on the element level.

2.2.5 Conclusion

In this paper, we have presented an error estimation technique for porous media problems. The problem of solving stability constants analytically can be circumvented. On the other hand, it has to be said that the numerical effort is increasing, because the dual problem has to be solved for the whole space-time domain. In further studies, we hope to show that this is not necessary in practical applications.

2.2.6 References

- [1] R. Becker and R. Rannacher. A feed-back approach to error control in finite element methods. *East-West J. Numer. Math.*, 4:237–264, 1996.
- [2] W. Ehlers and P. Ellsiepen. Theoretical and numerical methods in environmental continuum mechanics based on the theory of porous media. In B. A. Schreffler, editor, *Environmental Mechanics*, volume 417 of *CISM Courses and Lectures*. Springer-Verlag, Wien, 2001.
- [3] K. Eriksson, D. Estep, P. Hansbo, and C. Johnson. Introduction to adaptive methods for differential equations. *Acta Numerica*, pages 105–158, 1995.

- [4] K. Eriksson, D. Estep, P. Hansbo, and C. Johnson. *Computational Differential Equations*. Cambridge University Press, Cambridge, 1996.
- [5] C. Johnson and P. Hansbo. Adaptive finite element methods in computational mechanics. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 101:143–181, 1991.
- [6] F. Larsson, P. Hansbo, and K. Runesson. Space-time finite elements and adaptivity strategy for the thermoelasticity problem. In *Developments in Theoretical Geomechanics*, pages 193–213. Balkema, Rotterdam, 2000.
- [7] J. Nitsche. Ein Kriterium für die Quasi-Optimalität des Ritzschen-Verfahrens. *Numer. Math.*, 11:346–348, 1968.

2.3 On two-phasic flow problems in elasto-plastic porous materials

(P. Blome)

Abstract. *In the present contribution, the formulation of the governing equations of coupled flow and deformation processes in porous materials is based on the well-founded Theory of Porous Media (TPM) [2, 3]. Embedded in this concept, the model under consideration represents a triphasic medium of a cohesive-frictional elasto-plastic solid skeleton and a binary pore-fluid, which is composed of a materially incompressible wetting phase (here water) and a materially compressible non-wetting phase (here air). The unsaturated domain (saturation in terms of liquid saturation) of the porous medium is included in the model by the application of a suitable capillary-pressure-saturation relation, which takes into account the interaction of the solid skeleton and the two pore-fluids. Furthermore, the interaction is described by Darcy’s filter law including a relative permeability, which depends on the deformation of the pore space and the degree of saturation.*

2.3.1 The material model

The material model is composed of a mixture of phases φ^α . These are the solid skeleton φ^S (S : *Solid*) with the pore space containing the pore-fluids φ^L (L : *Liquid*) and φ^G (G : *Gas*). In case of fluid saturated porous materials, the saturation condition holds. Thus,

$$n^S + n^L + n^G = 1 \quad \text{with the porosity} \quad n^F = n^L + n^G. \quad (2.27)$$

Therein, n^α are the volume fractions of the constituents. It is assumed that the solid and the liquid phases are materially incompressible, whereas the gas phase is materially compressible according to the ideal gas law (*Boyle’s law*). The volumetric ratio of the pore-fluids in the pore space is given by the saturation functions s^L and s^G , which specify the volume fractions n^L and n^G with regard to the volume fraction n^F of the overall fluid phase:

$$s^L = n^L/n^F, \quad s^G = n^G/n^F, \quad \text{where} \quad s^L + s^G = 1. \quad (2.28)$$

The primary variables of the model are the solid displacement $\mathbf{u}_S$ and the excess pore-liquid and pore-gas pressures p^{LR} and p^{GR} exceeding the air pressure p_0 . By use of a static gas-phase (*Reynold's* assumption: $p^{GR} \equiv 0$), where no excess gas pressure occurs and the porous solid is assumed to be ideally permeable for gas, the model can be simplified.

For the numerical determination of the primary variables, the sum of the partial momentum balances of all constituents, the partial volume balance of the liquid and the partial mass balance of the gas are used, whereas any volume or mass exchange is excluded. In the quasi-static case, the corresponding weak forms are (cf. [3])

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \delta \mathbf{u}_S \cdot (\rho^S + \rho^L + \rho^G) \mathbf{b} \, dv - \int_{\Omega} \text{grad } \delta \mathbf{u}_S \cdot (\mathbf{T}^S + \mathbf{T}^L + \mathbf{T}^G) \, dv &= \\ &= - \int_{\Gamma_t} \delta \mathbf{u}_S \cdot \bar{\mathbf{t}} \, da, \end{aligned} \quad (2.29)$$

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \delta p^{LR} [(n^L)'_S + n^L \text{div}(\mathbf{u}_S)'_S] \, dv - \int_{\Omega} \text{grad } \delta p^{LR} \cdot n^L \mathbf{w}_L \, dv &= \\ &= - \int_{\Gamma_v} \delta p^{LR} \bar{v}^L \, da, \end{aligned} \quad (2.30)$$

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \delta p^{GR} [(\rho^G)'_S + \rho^G \text{div}(\mathbf{u}_S)'_S] \, dv - \int_{\Omega} \text{grad } \delta p^{GR} \cdot \rho^G \mathbf{w}_G \, dv &= \\ &= - \int_{\Gamma_q} \delta p^{GR} \bar{q}^G \, da. \end{aligned} \quad (2.31)$$

Therein, $\mathbf{T}^\alpha$ is the partial *Cauchy* stress tensor related to each constituent φ^α , whereas $\rho^\alpha = n^\alpha \rho^{\alpha R}$ is the partial mass density given by the effective (true) mass density $\rho^{\alpha R}$ and the volume fraction n^α . The symbol $(\cdot)'_S$ characterizes the material time derivative following the motion of the solid phase. Furthermore, $\mathbf{b}$ denotes the volume force per unit mass (gravity) and $\mathbf{w}_L$ or $\mathbf{w}_G$ represent the seepage velocities of the respective fluid phases. Finally, $\delta \mathbf{u}_S$, δp^{LR} and δp^{GR} are test functions corresponding to the solid displacement and the excess pore pressures of the liquid and the gas, respectively.

On the *Neumann* boundary Γ_t of a considered domain Ω , there may act an external stress vector $\bar{\mathbf{t}} = (\mathbf{T}^S + \mathbf{T}^L + \mathbf{T}^G) \mathbf{n}$, whereas on the *Neumann* boundaries Γ_v acts a liquid volume efflux $\bar{v}^L = n^L \mathbf{w}_L \cdot \mathbf{n}$ and on Γ_q acts a gas mass efflux $\bar{q}^G = n^G \rho^{GR} \mathbf{w}_G \cdot \mathbf{n}$. Herein, $\mathbf{n}$ is the outward oriented unit surface normal on the respective boundary.

2.3.2 Constitutive assumptions

According to the *concept of effective stress* [1], the total stress tensor in (2.29) is the sum of the partial stress tensors

$$\begin{aligned} \mathbf{T}^S &= -n^S (s^L p^{LR} + s^G p^{GR}) \mathbf{I} + \mathbf{T}_E^S, \\ \mathbf{T}^\beta &= -n^\beta p^{\beta R} \mathbf{I} \quad \text{with } \beta \in \{G, L\} \end{aligned} \quad (2.32)$$

of all constituents φ^α (cf. [5]), where $\mathbf{T}_E^S$ denotes the solid extra (*effective*) stress. The extra stress $\mathbf{T}_E^S$ is described in the framework of a geometrically linear theory by a physically non-linear elasticity law and, considering plasticity, by a single surface yield criterion, isotropic work-hardening conditions and a non-associated flow rule [4].

The filter velocities $n^L \mathbf{w}_L$ in (2.30) and $n^G \mathbf{w}_G$ in (2.31) are replaced by Darcy's general filter law, where the Darcy permeability coefficient, originally defined for water-saturated materials with a constant porosity, is formulated in dependence on the degree of liquid saturation s^L and the solid deformation $\mathbf{u}_S$ by a weighting function (relative permeability). Furthermore, anisotropic permeability can be additionally taken into consideration.

The degree of liquid saturation s^L is determined in dependence on the difference pressure (capillary-pressure) p^C of the effective fluid pressures p^{GR} and p^{LR} . Here, an exemplary capillary-pressure-saturation relation is chosen:

$$s^L = \exp[-k(p^C)^2] \quad \text{with} \quad p^C = p^{GR} - p^{LR} \quad \text{and} \quad k > 0. \quad (2.33)$$

2.3.3 Example: Drainage of a sand column

In the numerical example, water is allowed to flow partly out of a cylindrical sand column (height h , diameter d). The upper end of the column is closed, the side walls are rigid and impermeable for both water and air. The lower end of the column is exposed to air pressure, whereas the initial condition for the liquid is $s^L = 1$ all over the column. This gravity-governed initial-boundary-value problem is known as *Liakopoulos'* problem. A parameter identification by experimental data from triaxial tests on dense *Berlin* sand was performed before [4], although the dead load of the soil does not result in plastic deformation.

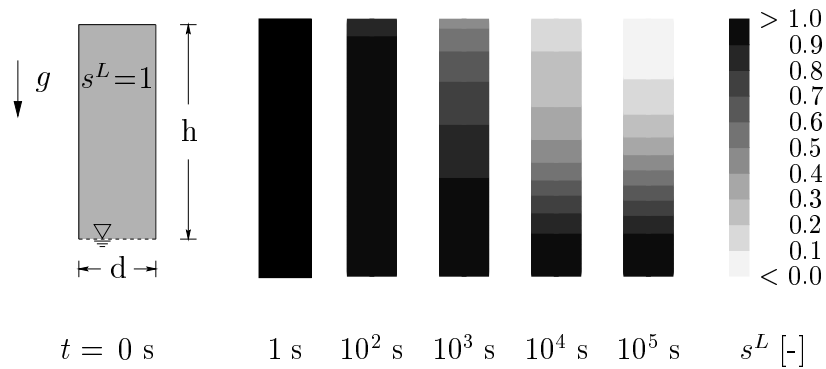


Figure 2.3: Boundary-value problem and distribution of the liquid saturation s^L versus time.

The finite element calculation yields the distribution of the liquid saturation s^L versus time (Figure 2.3). Starting with full saturation, the water leaks out partly.

In Figure 2.4, the vertical filter velocity $n^L w_{L2}$ at the bottom of the column versus time is given.

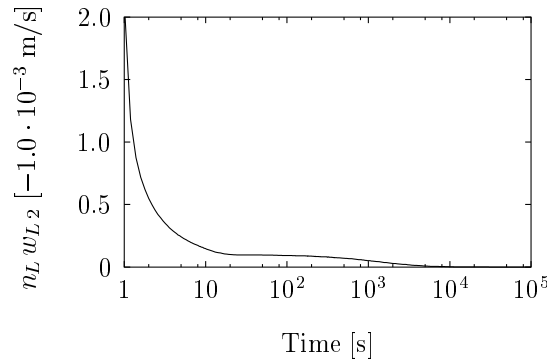


Figure 2.4: Vertical filter velocity $n^L w_{L2}$ of the liquid at the bottom of the column versus time.

2.3.4 References

- [1] A. W. Bishop. The principle of effective stress. *Teknisk Ukeblad*, 39:859–863, 1959.
- [2] R. de Boer and W. Ehlers. *Theorie der Mehrkomponentenkontinua mit Anwendung auf bodenmechanische Probleme*, Teil I. Forschungsberichte aus dem Fachbereich Bauwesen der Universität-GH-Essen 40, Essen 1986.
- [3] W. Ehlers and P. Blome. Consistent multiphase models for soils. *Darmstadt Geotechnics*, 6, 2001, to appear.
- [4] W. Ehlers and H. Müllerschön. Parameter identification of a macroscopic granular soil model applied to dense Berlin sand. *Granular Matter*, 2:105–112, 2000.
- [5] B. A. Schrefler, L. Simoni, L. Xikui and O. C. Zienkiewicz. Mechanics of partially saturated porous media. In C. S. Desai and G. Gioda, eds., *Numerical methods and constitutive modelling in geomechanics*, pages 169–209, Springer-Verlag, Wien, 1990.

2.4 Theoretical modelling of foamed polymers within the Theory of Porous Media

(B. Markert)

Abstract. Viscoelastic polymer foams are particularly suitable for protective and energy absorbing applications in common engineering disciplines. The cellular micro structure, as a result of the foaming process, gives these types of materials their outstanding mechanical characteristics. However, this complex structure demands for an appropriate model for the description at a suitable means of computational costs. The goal of this contribution is to present an efficient continuum mechanical model based on the Theory of Porous Media (TPM) accounting for the fluid-filled porous cell structure and the intrinsic viscoelastic behaviour of the polymeric skeleton. Therefore, an adequate viscoelastic material formula-

tion is developed in order to describe the intrinsic dissipative phenomena and the occurring effects at large deformations.

2.4.1 Preliminaries

Soft polymeric foams, like polyurethane (PU) and polypropylene (PP) foams, are often subject to large compressive deformations during their practical application, e.g. as bumpers, cushions or packaging. They consist of a multiphasic micro structure built by a combination of open and/or closed fluid-filled cells. In particular, each cell of the micro structure undergoes complex deformation mechanisms under external loads resulting in the characteristic high-grade nonlinear stress-strain behaviour of the macroscopic foam. Under compression, three stages can be identified in the stress-strain curve governed by the deformation mechanisms on the micro scale, i.e. bending, buckling and densification of the cell faces (*Gibson & Ashby* [9]). Moreover, this complex microstructural behaviour is strongly coupled with the trapped (closed-cell foam) or free moving (open-cell foam) and interacting pore-fluid.

One reasonable way to describe all the relevant physical properties of polymeric foams is to use statistical, multiphasic continuum mechanical models. Following this, proceeding from the well-founded Theory of Porous Media (TPM), a fluid-filled cellular solid foam can be treated as an immiscible mixture of constituents φ^α ($\alpha = S$: solid skeleton; $\alpha = F$: pore-fluid). Based on the assumption of superimposed continua, the constituents are averaged over a representative elementary volume (REV) occupied by the whole mixture (homogenized model). In the biphasic macro model, the local structure of the mixture is represented by scalar variables, the volume fractions n^α , where under the assumption of fully saturated conditions, the saturation constraint holds $n^S + n^F = 1$. For more details on the TPM approach, the reader is referred to *Bowen* [2] and *Ehlers* [4, 5].

2.4.2 Governing equations

For the numerical treatment of the problem within the finite element method (FEM), weak forms of the governing field equations, i.e. the mixture balance of momentum and the fluid balance of mass, are required. Therefore, after eliminating the seepage velocity by use of the *Darcy* filter law, the balance relations weighted by independent test functions and integrated over the spatial domain Ω with surface $\partial\Omega$ result in the respective weak formulations $\mathcal{G}_{\text{MM}}$ and $\mathcal{G}_{\text{MF}}$:

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{\text{MM}} \equiv & \int_{\Omega} \text{grad } \delta \mathbf{u}_S \cdot (\mathbf{T}_E^S - p \mathbf{I}) \, dv - \\ & - \int_{\Omega} \delta \mathbf{u}_S \cdot (\rho^S + \rho^F) \mathbf{b} \, dv - \int_{\partial\Omega} \delta \mathbf{u}_S \cdot \bar{\mathbf{t}} \, da = 0, \end{aligned} \quad (2.34)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{\text{MF}} \equiv & \int_{\Omega} \delta p \left[n^F (\rho^{FR})'_S + \rho^{FR} \text{Div} (\mathbf{u}_S)'_S \right] \, dv + \\ & + \int_{\Omega} \text{grad } \delta p \cdot \left[\frac{K^S}{\mu^{FR}} \rho^{FR} \left(\text{grad } p - \rho^{FR} \mathbf{b} \right) \right] \, dv + \int_{\partial\Omega} \delta p \, \bar{q} \, da = 0. \end{aligned} \quad (2.35)$$

Herein, $\delta \mathbf{u}_S$ and δp are the test functions corresponding to the solid displacement $\mathbf{u}_S$ and the pore pressure p , $\bar{\mathbf{t}} = (\mathbf{T}_E^S - p \mathbf{I}) \mathbf{n}$ is the external load vector acting on both constituents, where $\mathbf{T}_E^S$ is the solid *Cauchy* extra (effective) stress, $\mathbf{I}$ is the identity tensor and $\mathbf{n}$ is the outward oriented unit surface normal. Furthermore, $\bar{q} = n^F \rho^{FR} \mathbf{w}_F \cdot \mathbf{n}$ denotes the filter mass flow of the fluid draining through the surface $\partial\Omega$, $\mathbf{b}$ is the body force density, ρ^S and ρ^F are the partial densities and μ^{FR} is the fluid viscosity. In this representation, the pore-fluid can either be compressible, i.e. the effective (material) fluid density is a function of the pore pressure, $\rho^{FR} = \rho^{FR}(p)$, or incompressible, i.e. $\rho^{FR} = \text{const.}$, whereas the cellular solid skeleton is assumed to be materially incompressible, i.e. $\rho^{SR} = \text{const.}$ This assumption is valid, since the bulk compressibility of the entire foam dominates the compressive behaviour governed by porosity changes. Moreover, the intrinsic permeability K^S depends on the deformation state and is assumed to be a function of the actual porosity n^F . Therefore, K^S governs the property of an open-cell, i.e. permeable ($K^S > 0$), or a closed-cell, i.e. impermeable ($K^S \rightarrow 0$), structure.

2.4.3 Finite viscoelasticity model

To describe the intrinsic dissipative phenomena of the cellular polymer skeleton, an adequate viscoelastic material formulation is required including the property of structural densification towards the point of compaction. The fundamental approach is based on the one-dimensional rheological structure of the generalized *Maxwell* model (Figure 2), an elementary rheological model to describe the complex behaviour of a viscoelastic solid. The governing one-dimensional equations describing this parallel assembly of one *Hooke* element (elastic spring) and N *Maxwell* elements (spring and dashpot in series) can easily be obtained from the rheological structure and the constitutive laws representing the individual elements, cf. *Tschoegl* [19]. Restricting to the geometrically linear approach, the three-dimensional formulation results from a formal extension of these governing equations and can be included straight forward into porous media theories (*Ehlers & Markert* [6]).

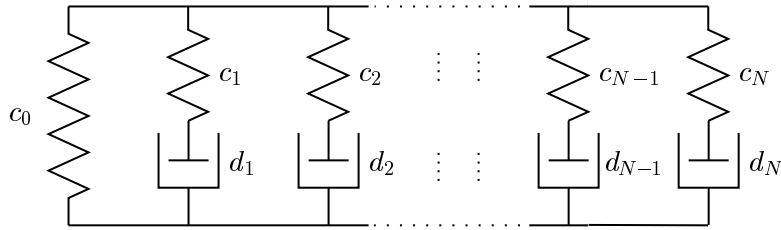


Figure 2.5: Generalized *Maxwell* model. c_n and d_n ($n = 1, \dots, N$) denote the elasticity and viscosity (damping) constants of the respective elements.

In the framework of a finite deformation theory of porous materials with elastic and inelastic (here: viscous) behaviour, it is convenient to proceed from a multiplicative split of the solid deformation gradient

$$\mathbf{F}_S = (\mathbf{F}_{Se})_n (\mathbf{F}_{Si})_n, \quad n = 1, \dots, N \quad (2.36)$$

into elastic parts $(\mathbf{F}_{Se})_n$ and inelastic parts $(\mathbf{F}_{Si})_n$ (*Sidoroff* [16]). From elasto-plasticity, it is commonly known that the concept of the multiplicative decomposition of deformation

gradients (Lee [11]) is connected with the suggestion of a stress-free intermediate configuration, where the purely inelastic state of deformation is frozen into the memory of the material. Furthermore, from thermodynamics with internal state variables (Coleman & Gurtin [3]) and rheological considerations (cf. e. g. Reese & Govindjee [15]), one obtains the ansatz of a decomposed solid *Helmholtz* free energy density and a decomposed solid extra stress

$$\begin{aligned}\psi^S[\mathbf{F}_S, (\mathbf{F}_{Se})_n] &= \psi_{EQ}^S[\mathbf{F}_S] + \psi_{NEQ}^S[(\mathbf{F}_{Se})_n], \\ \boldsymbol{\tau}_E^S[\mathbf{F}_S, (\mathbf{F}_{Se})_n] &= \boldsymbol{\tau}_{EQ}^S[\mathbf{F}_S] + \boldsymbol{\tau}_{NEQ}^S[(\mathbf{F}_{Se})_n], \quad n = 1, \dots, N\end{aligned}\tag{2.37}$$

into equilibrium parts (Index *EQ*) describing the basic elasticity and non-equilibrium parts (Index *NEQ*) vanishing in the thermodynamic equilibrium. Note that the *Kirchhoff* extra stress is a weighted *Cauchy* stress $\boldsymbol{\tau}_E^S = J_S \mathbf{T}_E^S$, where $J_S = \det \mathbf{F}_S$ is the solid *Jacobian*.

In general, the stress-strain behaviour of the cellular polymer matrix is very complex and high-grade nonlinear concerning both the basic elasticity and the viscoelastic overstress. Therefore, assuming isotropic material behaviour, one proceeds from an *Ogden* type material law (cf. *Ogden* [12,13]) which was extended towards porous media applications by *Eipper* [8] in the framework of purely elastic material behaviour and, in addition, from a modified *Ogden* type formulation describing the viscoelastic overstress. Thus, the equilibrium part of the solid extra stress can be obtained by

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\tau}_{EQ}^S[\mathbf{F}_S] &= \mu_0^S \sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^3 \mu_k^* (\lambda_j^{\alpha_k/2} - 1) \mathbf{N}_j + \\ &+ \Lambda_0^S (1 - n_{0S}^S)^2 \left(\frac{J_S}{1 - n_{0S}^S} - \frac{J_S}{J_S - n_{0S}^S} \right) \mathbf{I},\end{aligned}\tag{2.38}$$

whereas the non-equilibrium part is computed from

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\tau}_{NEQ}^S[(\mathbf{F}_{Se})_n] &= \sum_{n=1}^N \left(\mu_n^S \sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^3 (\mu_k^*)_n \left[(\lambda_{ej})_n^{(\alpha_k)_n/2} - 1 \right] (\mathbf{N}_{ej})_n + \right. \\ &\quad \left. + \Lambda_n^S \left[1 - (n_i^S)_n \right]^2 \left[\frac{(J_{Se})_n}{1 - (n_i^S)_n} - \frac{(J_{Se})_n}{(J_{Se})_n - (n_i^S)_n} \right] \mathbf{I} \right).\end{aligned}\tag{2.39}$$

In Equations (2.38) and (2.39), λ_j ($j = 1, \dots, 3$) are the eigenvalues of the *Cauchy-Green* deformation tensors $\mathbf{C}_S = \mathbf{F}_S^T \mathbf{F}_S$ or $\mathbf{B}_S = \mathbf{F}_S \mathbf{F}_S^T$, respectively, $(\lambda_{ej})_n$ ($j = 1, \dots, 3$) are the eigenvalues of the elastic *Cauchy-Green* deformation tensors $(\mathbf{C}_{Se})_n$ or $(\mathbf{B}_{Se})_n$, respectively, and $\mathbf{N}_j$ and $(\mathbf{N}_{ej})_n$ denote the eigentensors corresponding to the eigenvalues λ_i and $(\lambda_{ej})_n$. Furthermore, μ_0^S and μ_n^S are the first macroscopic *Lamé* constants and μ_k^* , α_k and $(\mu_k^*)_n$, $(\alpha_k)_n$ ($k = 1, \dots, 3$) are the dimensionless *Ogden* parameters. Moreover, in the volumetric extension terms which describe the finite volume change including the concept of the compaction point (*Ehlers & Markert* [7]), Λ_0^S and Λ_n^S are the second *Lamé* constants, $(J_{Se})_n = \det(\mathbf{F}_{Se})_n$ are the determinants of the elastic parts of the deformation gradient, n_{0S}^S is the initial solidity and $(n_i^S)_n = n_{0S}^S \det(\mathbf{F}_{Si})_n^{-1}$ are the inelastic solid volume fractions with respect to the intermediate configuration. Note that all *Lamé*

constants and *Ogden* parameters are macroscopic material parameters of the cellular solid skeleton structure and not of the microscopic polymer material itself.

In order to guarantee the downward compatibility to *Hookean* laws and to maintain stability (cf. *Ball* [1], *Ogden* [12], *Reese* [14]), the *Ogden* parameters have to fulfil the following conditions:

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^3 \mu_k^* \alpha_k &= 2 \wedge \{ \mu_k^* > 0, \alpha_k > 1 \vee \mu_k^* < 0, \alpha_k < 1 \} , \\ \sum_{k=1}^3 (\mu_k^*)_n (\alpha_k)_n &= 2 \wedge \{ (\mu_k^*)_n > 0, (\alpha_k)_n > 1 \vee (\mu_k^*)_n < 0, (\alpha_k)_n < 1 \} . \end{aligned} \quad (2.40)$$

The inelastic strains as internal state variables are obtained from linear evolution equations formulated with respect to the intermediate configuration, since this configuration acts as the actual configuration of the viscous deformation:

$$(\hat{\mathbf{D}}_{Si})_n = \hat{\mathbf{D}}_n^{-1} (\hat{\boldsymbol{\tau}}_{NEQ}^S)_n , \quad \hat{\mathbf{D}}_n^{-1} = \frac{1}{2\eta_n^S} (\mathbf{I} \otimes \mathbf{I})^{23} - \frac{\zeta_n^S}{2\eta_n^S (2\eta_n^S + 3\zeta_n^S)} (\mathbf{I} \otimes \mathbf{I}) . \quad (2.41)$$

Therein, $(\hat{\mathbf{D}}_{Si})_n$ are the inelastic solid deformation rates, $\hat{\mathbf{D}}_n^{-1}$ are the positive definite, isotropic, fourth order, viscous compliances, where η_n^S and ζ_n^S are the macroscopic viscosity parameters and $(\hat{\boldsymbol{\tau}}_{NEQ}^S)_n = (\mathbf{F}_{Se})_n^{-1} (\boldsymbol{\tau}_{NEQ}^S)_n (\mathbf{F}_{Se})_n^{T-1}$ are the respective non-equilibrium stress tensors, where the superscript $(\hat{\cdot})$ indicates the belonging to the intermediate configuration.

2.4.4 Application

In order to show the applicability and the efficiency of the presented biphasic viscoelastic model, one has to adapt the model to real material behaviour. Therefore, well defined experiments are required which are suitable to determine all relevant physical properties of the considered material allowing the application of numerical algorithms for the parameter optimization.

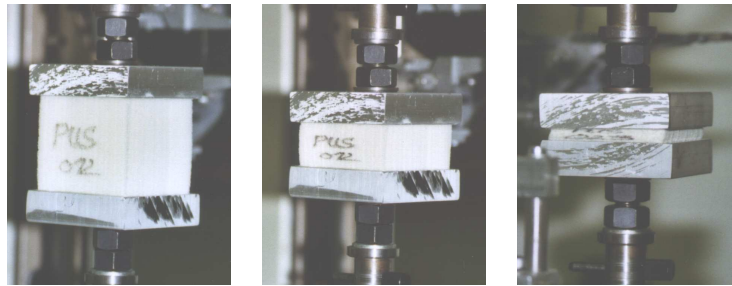


Figure 2.6: Uniaxial compression experiment performed on cubic PU foam samples.

In the present contribution, the model is applied to a highly porous, viscoelastic, open-cell polyurethane (PU) foam (bulk density $48 \text{ kg/m}^3 \rightarrow$ porosity 96 %) which finds its

application, e. g. as seat cushions, in the automotive industry. Concerning materials with elastic and inelastic behaviour, it is useful to separate the basic elasticity from the inelastic properties. Therefore, in case of viscoelastic material behaviour, experiments with holding times are necessary to allow the complete relaxation of the non-equilibrium stresses (overstresses) at several deformation states in order to obtain the purely elastic response of the material.

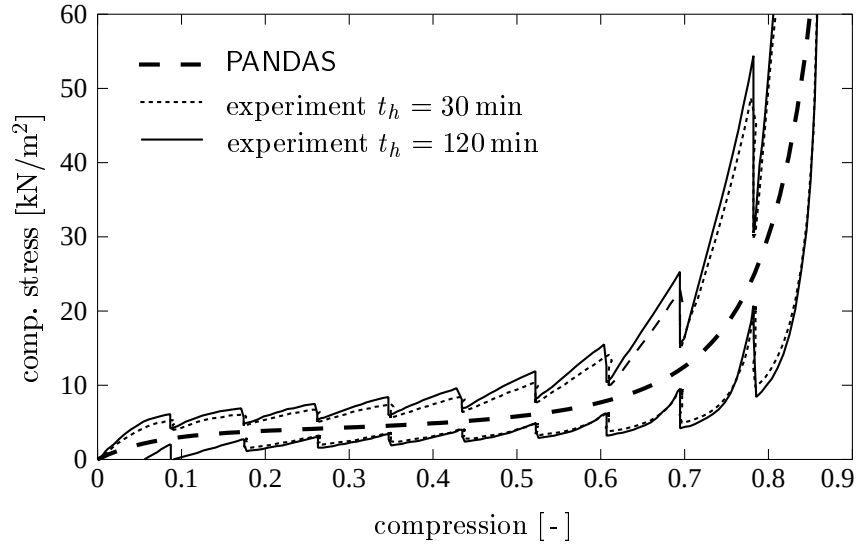


Figure 2.7: Experimental results of the uniaxial compression experiment with holding times and numerical simulation of the equilibrium stress with PANDAS after parameter optimization.

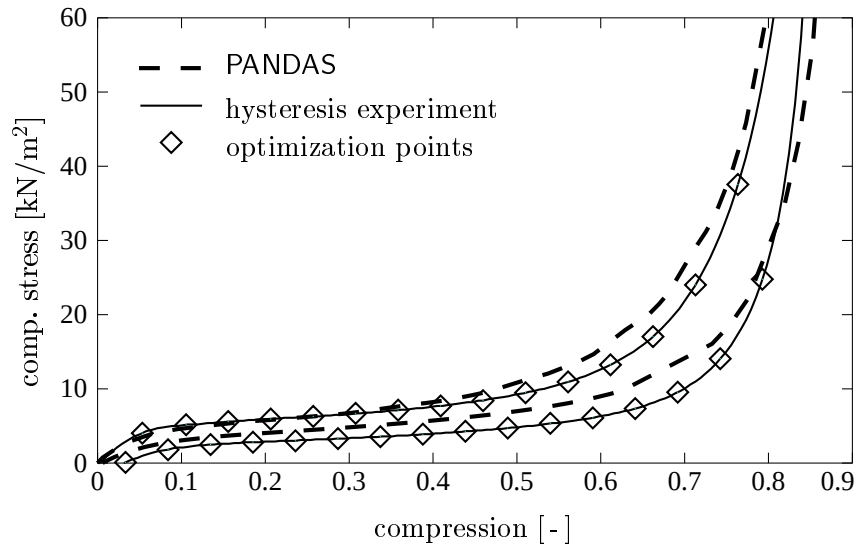


Figure 2.8: Experimental result of the uniaxial hysteresis experiment and numerical simulation with PANDAS after parameter optimization. Squares mark the used optimization points.

Following this, uniaxial compression experiments were performed on cubic PU foam specimens of size $70 \times 70 \times 70 \text{ mm}^3$ (Figure 2.6). The foam specimens were cemented on

aluminium platens at the top side and at the bottom side and were displacement driven loaded and unloaded with a constant deformation rate of $v(t) = 7 \text{ mm/s}$ and a maximal compression of 86 %, whereas the lateral walls were unconfined. During the loading and unloading cycles, several holding times of 30 min and 120 min were incorporated while recording the responding force. The experimental results are shown in the stress-strain diagram in Figure 2.7. It can easily be seen that even holding times of 120 min are too short, since the overstresses are not completely relaxed. Therefore, the mid points of the relaxed stresses between the loading and unloading cycles were taken as input for the numerical adjustment of the *Ogden* law (2.38) describing the equilibrium stress (*Klar* [10]). In particular, the optimization algorithm DONLP2 (© *Spellucci*) is applied which is based on a variation of the sequential quadratic programming (SQP) method and the gradient projection technique (*Spellucci* [17, 18]). Running a numerical simulation of the uniaxial experiment with PANDAS¹ shows the perfect fit of the basic elasticity to the experimental data, see Figure 2.7. Note that all finite element simulations are carried out fully three-dimensional, since, in general, the developed pore pressure leads to an inhomogeneous stress state.

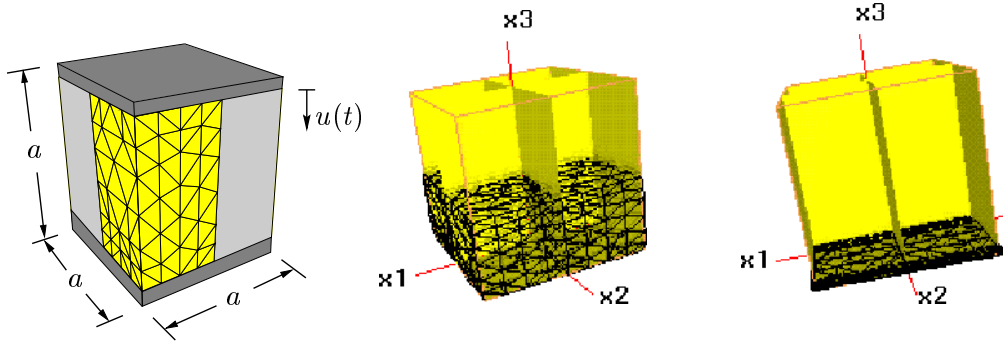


Figure 2.9: Initial boundary-value problem of the computed uniaxial compression test and two deformed configurations ($a = 70 \text{ mm}$, $v(t) = 7 \text{ mm/s}$, $u_{\max} = 66.5 \text{ mm}$).

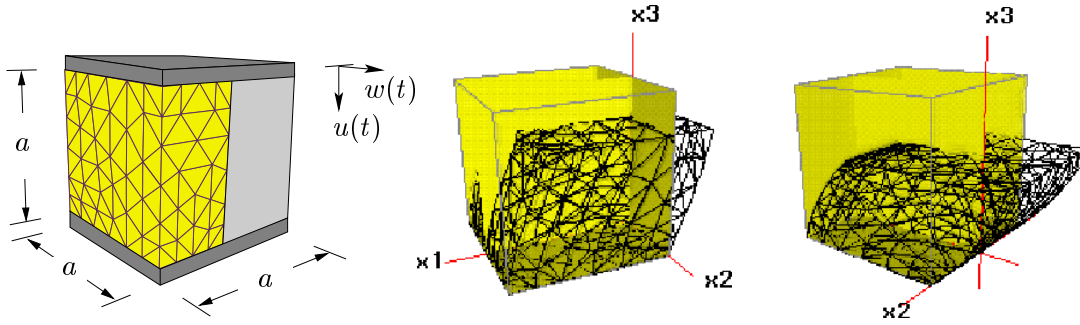


Figure 2.10: Initial boundary-value problem of the computed combined compression-shear test and two deformed configurations ($a = 70 \text{ mm}$, $v(t) = 5 \text{ mm/s}$, $u_{\max} = w_{\max} = 60.6 \text{ mm}$).

After the adjustment of the basic elasticity model, the parameters of the viscous material law are identified from hysteresis experiments without holding times. Since the viscous

¹PANDAS (Porous media Adaptive Nonlinear finite element solver based on Differential Algebraic Systems) is an adaptive finite element tool designed for multi-phase problems.

behaviour is time-dependent and, in case of the PU foam, high-grade nonlinear, the numerical optimization of the respective material parameters is unavoidable. For simplicity, only one *Maxwell* element is used for the description. Again, the respective parameters are optimized with the optimization tool DONLP2 as was also used for the basic elasticity. The result of the parameter adjustment is shown in Figure 2.8, where a fixed amount of equidistant optimization points and a constant time step size for the evaluation of the evolution equation is used. As can be seen, the *Ogden* model is able to describe the complex time-dependent behaviour of the considered PU foam. The boundary conditions, the finite element discretization and two deformation states of the simulated uniaxial compression experiment are shown in Figure 2.9. Furthermore, combined compression-shear tests are computed in order to show the applicability of the presented model to multi-axial problems. The respective initial boundary-value problem and two deformed configurations are given in Figure 2.10.

2.5 Conclusions

Proceeding from the Theory of Porous Media (TPM), the macroscopic model equations for the description of cellular polymer foams have been presented. Therefore, an appropriate finite strain viscoelasticity formulation which implies the property of structural densification of the cellular polymer skeleton has been developed. Furthermore, the model accounts for an independent compressible or incompressible pore-fluid constituent and a deformation-dependent permeability, since this is an important property of open-cell polymer foams under dynamical loading.

To show its suitability, the presented biphasic viscoelastic model has been applied for the description of a highly porous, open-cell polyurethane (PU) foam which finds its application, e.g. as seat cushions, in the automotive industry. Therefore, the model has been adapted to experimental data by use of the sequential quadratic programming (SQP) method. Finally, numerical simulations of large deformation uniaxial compression experiments and combined compression-shear tests show the applicability of the presented model.

2.5.1 References

- [1] J.M. Ball. Convexity conditions and existence theorems in nonlinear elasticity. *Arch. Rational Mech. Anal.*, 63:337–403, 1977.
- [2] R.M. Bowen. Incompressible porous media models by use of the theory of mixtures. *Int. J. Engng. Sci.*, 18:1129–1148, 1980.
- [3] B.D. Coleman and M.E. Gurtin. Thermodynamics with internal state variables. *J. Chem. Phys.*, 47:597–613, 1967.
- [4] W. Ehlers. Constitutive equations for granular materials in geomechanical context. In K. Hutter, editor, *Continuum Mechanics in Environmental Sciences and Geophysics*, CISM Courses and Lectures No. 337, pages 313–402. Springer-Verlag, Wien, 1993.

- [5] W. Ehlers. Grundlegende Konzepte in der Theorie poröser Medien. *Technische Mechanik*, 16:63–76, 1996.
- [6] W. Ehlers and B. Markert. On the viscoelastic behaviour of fluid-saturated porous materials. *Granular Matter*, 2:153–161, 2000.
- [7] W. Ehlers and B. Markert. Intrinsic viscoelasticity of porous materials. In A.M. Sändig, W. Schiehlen and W.L. Wendland, editors, *Multifield Problems – State of the Art*, pages 143–150. Springer-Verlag, Berlin, 2000.
- [8] G. Eipper. *Theorie und Numerik finiter elastischer Deformationen in fluidgesättigten porösen Medien*. Dissertation, Bericht Nr. II-1 aus dem Institut für Mechanik (Bauwesen), Universität Stuttgart, 1998.
- [9] L. J. Gibson and M. Ashby. *Cellular Solids, Structure and Properties*, 2nd ed. University Press, Cambridge, 1997.
- [10] O. Klar. *Gardientenbasierte Parameteroptimierung am Beispiel eines offenporigen Polyurethanschaums*, Diplomarbeit, Bericht Nr. 01-II-4 aus dem Institut für Mechanik (Bauwesen), Universität Stuttgart, 2001.
- [11] E. H. Lee. Elastic-plastic deformation at finite strains. *J. Appl. Mech.*, 1–6, 1969.
- [12] R. W. Ogden. Large deformation isotropic elasticity – On the correlation of theory and experiment for incompressible rubberlike solids. In *Proceedings of the Royal Society of London*, Series A. Vol. 326, pages 565–584, 1972.
- [13] R. W. Ogden. Large deformation isotropic elasticity – On the correlation of theory and experiment for compressible rubberlike solids. In *Proceedings of the Royal Society of London*, Series A. Vol. 328, pages 323–338, 1972.
- [14] S. Reese. *Theorie und Numerik des Stabilitätsverhaltens hyperelastischer Festkörper*. Dissertation, Fachbereich Mechanik, Technische Hochschule Darmstadt, 1994.
- [15] S. Reese and S. Govindjee. A theory of finite viscoelasticity and numerical aspects. *Int. J. Solids Structures*, 35:3455–3482, 1998.
- [16] F. Sidoroff. Un modèle viscoélastique non linéaire avec configuration intermédiaire. *Journal de Mécanique*, 13:679–713, 1974.
- [17] P. Spellucci. An SQP method for general linear programs using only equality constrained subproblems. *Math. Prog.*, 82:413–448, 1998.
- [18] P. Spellucci. A new technique for inconsistent QP problems in the SQP method. *Math. Meth. OR*, 47:335–400, 1998.
- [19] N. W. Tschoegl. *The Phenomenological Theory of Linear Viscoelastic Behaviour, An Introduction*. Springer-Verlag, New York, 1989.

2.6 Gradient-based optimization of a viscoelastic Ogden type model for cellular polymers

(O. Klar & B. Markert)

Abstract. *The parameter identification is the interface between a theoretical material model and its application in numerical computations. Only by an accurate identification of the theoretically introduced material parameters, an applicable simulation of the material is achieved. An increasing standard of the parameter identification is set by the requirements of complex material models used in computer-aided engineering.*

A common identification strategy is a gradient-based optimization of a least-squares functional, e. g. the Sequential Quadratic Programming (SQP) technique. In this paper, the SQP method is used to optimize material models of cellular polymers. In particular, the optimization is shown for a viscoelastic polyurethane (PU) foam. Due to the high-grade nonlinear material behaviour, the foam is modelled by a finite viscoelastic Ogden type law in the framework of the Theory of Porous Media (TPM).

2.6.1 Introduction to the SQP method

The handling of the parameter identification as an optimization problem requires effective numerical solution procedures. A general starting point is a nonlinear optimization problem with equality $h_j(\kappa)$ and inequality $g_k(\kappa)$ constraints for the set of parameters κ :

$$\begin{aligned} f(\kappa) &\rightarrow \min. \quad \text{with} \\ h_j(\kappa) &= 0; \quad j = 1, \dots, N_{ec} \quad \text{equality constraints and} \\ g_k(\kappa) &\geq 0; \quad k = 1, \dots, N_{nec} \quad \text{inequality constraints.} \end{aligned} \tag{2.42}$$

An efficient procedure for the determination of local minima is the SQP method (cf. [2, 3]). Similiar to any other gradient-based procedure, the SQP method does not ensure the determination of the global minimum. Thus, the investigation of the start parameter dependency plays a substantial role. Due to the possibility to consider equality and inequality constraints in the optimization problem and due to the desired convergence behaviour, the SQP technique is used in the following for the optimization of the material parameters of polyurthane foam.

Starting from the optimization problem (1), a dual *Lagrangean* equation can be set up which summarizes the function $f(\kappa)$ and the equality and inequality constraints $h_j(\kappa)$ and $g_k(\kappa)$ with the help of the *Lagrangean* multipliers μ_j and λ_k , where the minimization problem has changed into a saddle point problem:

$$\mathcal{L}(\kappa, \lambda, \mu) = f(\kappa) - \sum_{j=1}^{N_{ec}} \mu_j h_j(\kappa) - \sum_{k=1}^{N_{nec}} \lambda_k g_k(\kappa) \rightarrow \text{stationary.} \tag{2.43}$$

Necessary for the determination of the optimal parameter set are the *Karush-Kuhn-Tucker* conditions which must be fulfilled in the point of solution. This concerns the partial deriva-

tives of first order of (2) with respect to the parameters and the *Lagrangean* multipliers:

$$\nabla_{\kappa} \mathcal{L} = \mathbf{0}, \quad \nabla_{\mu} \mathcal{L} = \mathbf{0}, \quad \lambda_k \nabla_{\lambda_k} \mathcal{L} = 0, \quad \nabla_{\lambda} \mathcal{L} \geq \mathbf{0}, \quad \lambda \geq \mathbf{0}. \quad (2.44)$$

For the further calculation, the resulting nonlinear set of equations

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \mathbf{F}(\kappa, \lambda, \mu) = [\nabla_{\kappa} \mathcal{L}, \nabla_{\mu} \mathcal{L}, \lambda_k \nabla_{\lambda_k} \mathcal{L}]^T = \mathbf{0} \quad \text{with} \quad \mathbf{x} := (\kappa, \lambda, \mu)^T \quad (2.45)$$

is regarded that can be solved with *Newton's* method of approximation. Due to the large cost of the computation of the *Jacobi* matrix by the standard *Newton's* method, the *Quasi-Newton* procedure is used that replaces the *Jacobi* matrix by matrices which can be calculated more simply. A common *Quasi-Newton* procedure is the *BFGS*-update (cf. [2, 3]) that yields the advantage that the approximation of the *Hessian* matrix of the original *Lagrange* function is always positively definite. The positive definiteness of the *Hessian* matrix represents the sufficient condition for a local minimum of the point of solution, i. e. by the use of the *BFGS* procedure in each iteration step, an increase towards a minimum is ensured. Moreover, an improved parameter set can be calculated with an incrementation operator by minimize a merit function together with the *Lagrangean* function leading to a better convergence of the SQP method [4].

2.6.2 Application to a viscoelastic *Ogden* type model for PU foam

Observations and investigations on PU foam show that the foam belongs to a class of high-grade nonlinear, viscoelastic materials. Additionally, due to the permeable cellular structure, the model has to account for an independent pore-gas motion. Thus, proceeding from the Theory of Porous Media (TPM), a gas-filled cellular foam can be described as a twophasic material. In particular, to consider the high-grade nonlinear behaviour, the stress calculation has to be carried out on the basis of extended *Ogden* type material formulations [1]:

$$\begin{aligned} \tau_{EQ}^S = & \mu_0^S \sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^3 \mu_k^* (\lambda_j^{\alpha_k/2} - 1) \mathbf{N}_j + \\ & + \Lambda_0^S (1 - n_{0S}^S)^2 \left(\frac{J_S}{1 - n_{0S}^S} - \frac{J_S}{J_S - n_{0S}^S} \right) \mathbf{I}, \end{aligned} \quad (2.46)$$

$$\begin{aligned} \tau_{NEQ}^S = & \sum_{n=1}^N \left(\mu_n^S \sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^3 (\mu_k^*)_n \left[(\lambda_{ej})_n^{(a_k)_n/2} - 1 \right] (\mathbf{N}_{ej})_n + \right. \\ & \left. + \Lambda_n^S [1 - (n_i^S)_n]^2 \left[\frac{(J_{Se})_n}{1 - (n_i^S)_n} - \frac{(J_{Se})_n}{(J_{Se})_n - (n_i^S)_n} \right] \mathbf{I} \right). \end{aligned} \quad (2.47)$$

For the parameter identification, one-dimensional cyclic compression tests were performed, where several holding times were incorporated to obtain the basic elastic response (see

Figure 1). Thus, the separated identification of the elastic and inelastic (here: viscous) parts is possible and divides the unknowns into two optimization processes.

The optimization problem results from the comparison of the simulated stresses and the stresses observed in the experiments at discrete sampling points yielding to a least squares function:

$$f(\kappa) = \sum_{i=1}^N [\sigma_{i, \text{sim}}(\kappa) - \sigma_{i, \text{exp}}]^2 \rightarrow \min \quad (2.48)$$

with $\kappa = \{\mu_0^S, \Lambda_0^S, \mu_k^*, \alpha_k, \mu_n^S, \Lambda_n^S, (\mu_k^*)_n, (\alpha_k)_n\}$.

Furthermore, the macroscopic *Ogden* parameters have to fulfil additional stability conditions which can be included straight forward as constraints within the SQP algorithm:

$$\sum_{k=1}^3 \mu_k^* \alpha_k = 2 \quad \text{and} \quad \{\mu_k^* > 0, \alpha_k > 1 \quad \text{or} \quad \mu_k^* < 0, \alpha_k < 1\} \quad (2.49)$$

$\rightarrow$ e. g. : $g_1(\kappa) = \mu_1^*(\alpha_1 - 1) > 0$.

2.6.3 Example and results

The numerical simulation of uniaxial compression tests after the parameter identification shows the suitable conformity with the experimental data. In particular, the adjustment of the basic elasticity is given in Figure 1 and the adjustment of the intrinsic viscoelasticity is stated in Figure 2. In both cases, the simulation with the initial set of parameters is represented.

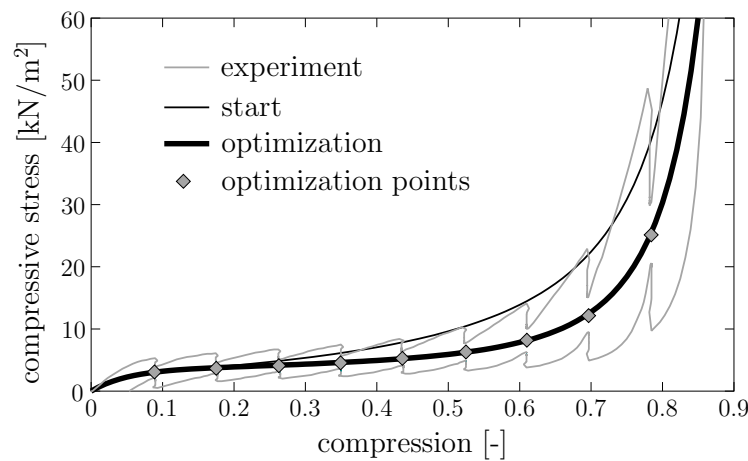


Figure 2.11: Adjustment of the basic elasticity.

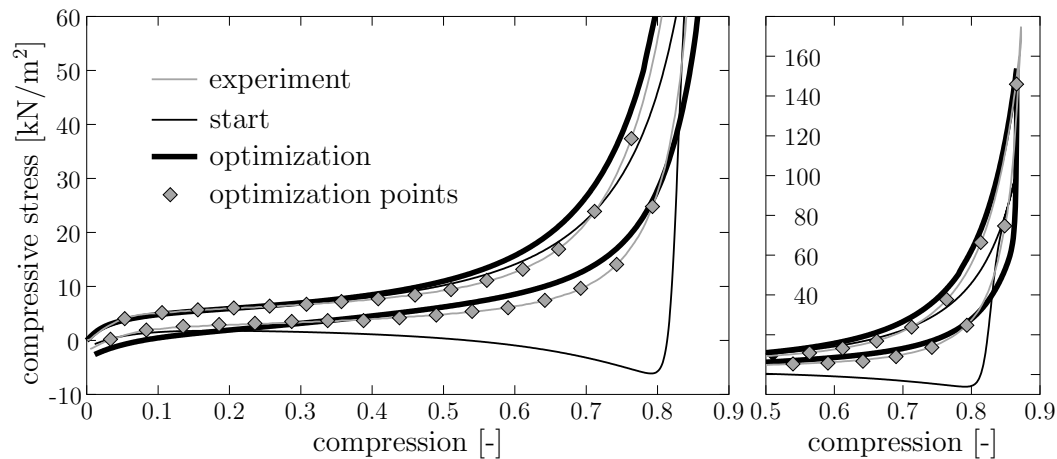


Figure 2.12: Adjustment of the intrinsic viscoelasticity.

2.6.4 References

- [1] W. Ehlers and B. Markert. Viscoelastic polyurethane foams at finite deformations. In W. A. Wall, K. Bletzinger, D. Schweizerhof eds., *Trends in Computational Structural Mechanics.*, CIMNE, pages 89–98, Barcelona, 2001.
- [2] D. G. Luenberger. *Linear and Nonlinear Programming*. Second Edition, Addison-Wesley Publishing Company, Reading, Massachusetts, 1984.
- [3] P. Spellucci. *Numerische Verfahren der nichtlinearen Optimierung*. Birkhäuser Verlag, Basel, 1993.
- [4] P. Spellucci. *DONLP2 short user's guide*. Technische Universität Darmstadt, Darmstadt, 1999.
<http://www.mathematik.tu-darmstadt.de/ags/ag8/spellucci/spellucci.html>

2.7 Sensitivitätsanalyse im Cosserat-Kontinuum

(B. Scholz)

Zusammenfassung. Die Hauptanwendung der Sensitivitätsanalyse ist die Bereitstellung von Gradienten bei der Optimierung bzw. bei der Parameteridentifikation. Die Sensitivitätsanalyse soll hier im weiteren auch zur Beurteilung der Bedeutung von Parametern des konstitutiven Gesetzes, welches zur Beschreibung der Cosserat-Theorie verwendet wird, angewandt werden. Durch die Einbeziehung der Cosserat-Theorie treten neben den Verschiebungsfreiheitsgraden auch Rotationsfreiheitsgrade sowie deren Sensitivitäten auf. Daher müssen bei der begleitenden Berechnung der Sensitivitäten der Cosserat-Theorie neben den Spannungen auch die Momentenspannungen und die erweiterten konstitutiven Gleichungen des elastischen und des plastischen Materialverhaltens berücksichtigt werden.

2.7.1 Kinematik und Konstitutivannahmen mikropolarer Materialien

Bei der Beschreibung eines mikropolaren Mediums wird ein materieller Punkt eines Kontinuums als ein Mikrostarrkörper mit kleiner, aber endlicher Ausdehnung angenommen. Dadurch erhält dieser neben einer bestimmten Lage im Raum auch eine Orientierung. Es wird hier der geometrisch lineare Fall behandelt, d. h. es wird sowohl von kleinen Deformationen als auch von kleinen Rotationen ausgegangen. Die Verdrehung $\bar{\varphi}$ eines Direktors kann dann additiv aufgeteilt werden in einen Anteil φ infolge des Verschiebungsfeldes $\mathbf{u}$ (Kontinuumsrotation) sowie einen Anteil $\bar{\varphi}^*$ der freien Verdrehung. Zur Konstruktion eines Verzerrungstensors wird in der mikropolaren Theorie die Differenz von Produkten zwischen Linienelementen und Direktoren betrachtet. Dies führt auf einen Verzerrungstensor $\bar{\epsilon}$, welcher sich aus einem symmetrischen Anteil $\bar{\epsilon}_{\text{sym}}$ infolge des Verschiebungsfeldes $\mathbf{u}$ sowie einem schiefsymmetrischen Anteil $\bar{\epsilon}_{\text{skw}}$ aus den freien Verdrehungen $\bar{\varphi}^*$ zusammensetzt:

$$\bar{\epsilon} = \frac{1}{2} (\text{grad } \mathbf{u} + \text{Grad}^T \mathbf{u}) + \mathbf{E} \bar{\varphi}^* = \text{grad } \mathbf{u} + \mathbf{E} \bar{\varphi}. \quad (2.50)$$

Desweiteren wird zur vollständigen Beschreibung die Krümmung $\bar{\kappa}$ benötigt, welche sich direkt aus dem Gradienten der Verdrehungen berechnet:

$$\bar{\kappa} = \text{grad } \bar{\varphi}. \quad (2.51)$$

Es wird versucht, das Verhalten des Materials mit möglichst einfachen konstitutiven Annahmen zu beschreiben. Für den Zusammenhang zwischen den nicht symmetrischen Spannungen und den mikropolaren Verzerrungen wird ein *Hookescher* Ansatz gewählt, welcher mit dem schiefsymmetrischen Anteil des elastischen Verzerrungstensors $\bar{\epsilon}_e = \bar{\epsilon} - \bar{\epsilon}_p$ erweitert wird:

$$\bar{\sigma} = 2 \mu \bar{\epsilon}_{e \text{ sym}} + \lambda (\bar{\epsilon}_e \cdot \mathbf{I}) \mathbf{I} + 2 \mu_c \bar{\epsilon}_{e \text{ skw}} =: \mathbf{C}_e^4 \bar{\epsilon}_e. \quad (2.52)$$

Die Momentenspannungen werden direkt proportional zu den elastischen Krümmungen $\bar{\kappa}_e = \bar{\kappa} - \bar{\kappa}_p$ angesetzt:

$$\bar{\mathbf{M}} = 2 \mu_c l_c^2 \bar{\kappa}_e =: \mathbf{D}_e^4 \bar{\kappa}_e. \quad (2.53)$$

Im Fall plastischer oder viskoplastischer Deformationen werden eine Fließbedingung

$$F = \sqrt{\left(1 + \gamma \frac{\mathbb{I}_{\text{sym}}^D}{(\mathbb{I}_{\text{sym}}^D)^{3/2}}\right)^m \mathbb{I}_{\text{sym}}^D + k_\sigma \mathbb{I}_{\text{skw}} + \frac{1}{2} \alpha \mathbb{I}^2 + \delta^2 \mathbb{I}^4 + k_M \sqrt{\mathbb{I}_M} + \beta \mathbb{I} + \epsilon \mathbb{I}^2 - \kappa} = 0 \quad (2.54)$$

sowie eine Fließregel der Form $\dot{\bar{\epsilon}}_p = \Lambda \partial G / \partial \bar{\sigma}$ benötigt, worin das plastische Potential G durch

$$G = \sqrt{\psi_1 \mathbb{I}_{\text{sym}}^D + k_\sigma \mathbb{I}_{\text{skw}} + \frac{1}{2} \alpha \mathbb{I}^2 + \delta^2 \mathbb{I}^4 + \psi_2 \beta \mathbb{I} + \epsilon \mathbb{I}^2} \quad (2.55)$$

gegeben ist. $\dot{\bar{\kappa}}_p$ wird über die mikropolare Kompatibilitätsbedingung ermittelt [2]. Es ergeben sich damit insgesamt 15 Materialparameter, wobei vier der mikropolaren Theorie zuzuordnen sind.

2.7.2 Sensitivitätsanalyse

Im allgemeinen Fall besitzt eine betrachtete kontinuumsmechanische Größe ϕ , (z. B. die mikropolare Verzerrung $\bar{\epsilon}$) eine indirekte Abhängigkeit von dem Vektor $\mathbf{s}$ der Materialparameter über die Primärvariablen, also die Verschiebungen $\mathbf{u}$ und die Verdrehungen $\bar{\varphi}$. Bei der Ableitung dieser Größe nach den Materialparametern müssen sowohl diese indirekte Abhängigkeit als auch eine eventuell vorhandene direkte Abhängigkeit von den Materialparametern berücksichtigt werden:

$$\phi_n = \phi_n(\mathbf{s}, \mathbf{u}(\mathbf{s}), \bar{\varphi}(\mathbf{s})) \rightarrow \frac{d\phi_n}{d\mathbf{s}} = \frac{\partial \phi_n}{\partial \mathbf{s}} + \frac{\partial \phi_n}{\partial \mathbf{u}} \frac{d\mathbf{u}}{d\mathbf{s}} + \frac{\partial \phi_n}{\partial \bar{\varphi}} \frac{d\bar{\varphi}}{d\mathbf{s}}. \quad (2.56)$$

Die Sensitivitätsanalyse erfolgt nun in zwei Schritten. Im ersten Schritt wird die Abhängigkeit der Primärvariablen von den Materialparametern ermittelt, im zweiten Schritt dann die gesuchte Sensitivität der betrachteten Größe, wobei der erste Schritt das hauptsächliche Problem darstellt. Dazu wird zunächst die Summe der schwachen Formen der Impulsbilanz und der Drallbilanz

$$\begin{aligned} G &= \int_V \text{grad } \delta \mathbf{u} \cdot \bar{\boldsymbol{\sigma}} \, dv + \int_V \delta \mathbf{u} \cdot \rho \mathbf{b} \, dv + \int_S \delta \mathbf{u} \cdot \bar{\boldsymbol{\sigma}} \mathbf{n} \, da + \\ &+ \int_V \delta \bar{\varphi} \cdot (\mathbf{I} \times \bar{\boldsymbol{\sigma}}) \, dv + \int_V \text{grad } \delta \bar{\varphi} \cdot \bar{\mathbf{M}} \, dv + \int_S \delta \bar{\varphi} \cdot \bar{\mathbf{M}} \mathbf{n} \, da = 0 \end{aligned} \quad (2.57)$$

nach den Materialparametern abgeleitet:

$$\frac{dG}{d\mathbf{s}} = \frac{\partial G}{\partial \mathbf{s}} + \frac{\partial G}{\partial \mathbf{u}} \frac{d\mathbf{u}}{d\mathbf{s}} = 0. \quad (2.58)$$

Dabei entspricht $\partial G / \partial \mathbf{u}$ gerade der *Jakobi*-Matrix des direkten Problems. Die Inverse der *Jakobi*-Matrix ist infolge der Lösung des direkten Problems bereits bekannt und muß daher nicht neu berechnet werden. $\partial G / \partial \mathbf{s}$ ergibt sich aus der direkten Abhängigkeit der schwachen Form bzw. des Residuums von den Materialparametern:

$$\frac{\partial G}{\partial \mathbf{s}} = \int_V \text{grad } \delta \mathbf{u} \cdot \frac{\partial \bar{\boldsymbol{\sigma}}}{\partial \mathbf{s}} \, dv + \int_V \text{grad } \delta \bar{\varphi} \cdot \frac{\partial \bar{\mathbf{M}}}{\partial \mathbf{s}} \, dv. \quad (2.59)$$

Zur Ermittlung der Ableitung der Spannungen nach den Materialparametern wird das lokale Gleichgewicht am *Gauß*-Punkt zum Zeitpunkt n betrachtet:

$$\begin{aligned}
\mathbf{L}_n^1 &= \bar{\boldsymbol{\sigma}}_n - \bar{\boldsymbol{\sigma}}_{n-1} - \overset{4}{\mathbf{C}}_e (\Delta \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_n - \Delta \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{pn}) = \mathbf{0}, \\
\text{mit } \Delta \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{pn} &= \frac{\Delta t}{\eta} \left\langle \frac{F(\bar{\boldsymbol{\sigma}}_n, \bar{\mathbf{M}}_n)}{\sigma_0} \right\rangle^r \frac{dG(\bar{\boldsymbol{\sigma}}_n)}{d\bar{\boldsymbol{\sigma}}_n} = \mathbf{0}; \\
\mathbf{L}_n^2 &= \bar{\mathbf{M}}_n - \bar{\mathbf{M}}_{n-1} - \overset{4}{\mathbf{D}}_e (\Delta \bar{\boldsymbol{\kappa}}_n - \Delta \bar{\boldsymbol{\kappa}}_{pn}) = \mathbf{0}, \\
\text{mit } \Delta \bar{\boldsymbol{\kappa}}_{pn} &= \Delta \bar{\boldsymbol{\kappa}}_{pn}(\text{grad}(\Delta \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{pn})) = \mathbf{0}.
\end{aligned} \tag{2.60}$$

$\Delta \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{pn}$ wird aus der o. g. viskoplastischen Evolutionsgleichung ermittelt, $\Delta \bar{\boldsymbol{\kappa}}_{pn}$ wird über die mikropolare Kompatibilitätsbedingung aus den Gradienten von $\Delta \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{pn}$ bestimmt. Durch formales Ableiten kann daraus $\partial G / \partial \mathbf{s}$ gewonnen werden, so daß die Sensitivität der Primärvariablen ermittelt werden kann.

Der zweite Schritt entspricht im wesentlichen einem „postprocessing“, bei welchem die Sensitivität der gesuchten Größe aus den ermittelten Sensitivitäten der Primärvariablen gebildet wird.

2.7.3 Literaturverzeichnis

- [1] W. Ehlers. A single surface yield function for geomaterials. *Arch. Appl. Mech.*, 65:246–259, 1995.
- [2] W. Ehlers und W. Volk. On theoretical and numerical methods in the theory of porous media based on polar and non-polar elasto-plastic solid materials. *Int. J. Solids Structures*, 35:4597–4617, 1998.

2.8 Microscopic Investigation of Cosserat Continua

(S. Diebels & T. Michelitsch)

2.8.1 Introduction

Granular material is characterized by non-uniform disordered solid particles (grains) with finite extensions. So far, the physics of granular materials is not yet completely developed [1]. A characteristic property of granular matter is the appearance of localization phenomena, for instance shear banding under the influence of gravity. The goal of this contribution is to show the importance of rotational degrees of freedom of the particles for the appearance of localization phenomena as shear banding. The finite dimensions of the particles play a crucial role for the transfer of moments of momentum between the

particles. By this transfer of moments of momentum, rotational degrees of freedom affect the overall dynamics of a granular material system.

2.8.2 Equations of motion and basic assumptions

There are two scales of description of granular materials: The microscopic description which is physically motivated and based on the solution of the *Newtonian* equations of motion for each particle [1] and the macroscopic description based on continuum theories. The transition from the microscopic to the macroscopic level is defined through a homogenization procedure smearing out the microscopic properties of the particles over a representative elementary volume.

In this contribution, the physics of an assembly is described on the scale of the discrete single particles. For implementation into a molecular dynamics simulation, we set up the *Eulerian-Newtonian* equations (EN equations) of motion which take into account both the balances of momentum and of moment of momentum. The *Newtonian* equations connect the balance of moment with the dynamics of the translational degrees of freedom, whereas the *Eulerian* equations connect the balance of angular momentum with the rotational motion of the particles. Details of the approach and of the corresponding macroscopic continuum model are discussed in [3].

In our simulation, we integrate the resulting system of EN equations for an assembly of $N = 400$ rigid particles subjected to gravity with given initial conditions. In this section, we formulate the EN equations of motion for a system of N rigid particles for D dimensions where $D = 2, 3$. The simulation is performed for $D = 2$.

The motion of a particle is uniquely determined by the translation $\mathbf{x}(t)$ of its center of mass and by its rotation vector $\boldsymbol{\varphi}(t) = \varphi(t) \mathbf{e}(t)$ (t indicates the time coordinate). Therein, $\varphi(t)$ is the rotation angle, whereas $\mathbf{e}(t)$ characterizes the rotation axis. The EN equations of motion for a particle can then be written in the form (particle indices are omitted)

$$m\ddot{\mathbf{x}} = \mathbf{k}(\varphi, \dot{\varphi}, \mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}), \quad \boldsymbol{\Theta}_M \ddot{\boldsymbol{\varphi}} + 2(\boldsymbol{\Omega} \boldsymbol{\Theta}_M)_{\text{sym}} \dot{\boldsymbol{\varphi}} = \mathbf{m}_M(\varphi, \dot{\varphi}, \mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}), \quad (2.61)$$

where m and $\boldsymbol{\Theta}_M$ denote the mass and tensor of inertia with respect to the center of mass, respectively. $\mathbf{k}$ and $\mathbf{m}_M$ stand for the forces and moments affecting a particle. In eq. (2.61)₂, the expressions

$$\dot{\boldsymbol{\Theta}}_M = 2(\boldsymbol{\Omega} \boldsymbol{\Theta}_M)_{\text{sym}}, \quad \boldsymbol{\Omega} = -\mathbf{E}^3 \dot{\boldsymbol{\varphi}} \quad (2.62)$$

represent the time derivative $\dot{\boldsymbol{\Theta}}_M$ of the tensor of inertia for a rigid particle rotating with angular velocity $\dot{\boldsymbol{\varphi}}$. Equations (2.61) are the microscopic analogue of the balances of momentum and of moment of momentum which govern the macroscopic *Cosserat* theory [2, 4, 5, 6]. The right hand sides of (2.61) imply coupling of translational and rotational degrees of freedom and their first time derivatives. The latter introduce frictional effects into the dynamics.

2.8.3 Simulation and example

An assembly consisting of 400 plain circular discs subjected to gravity has been simulated (see Figure 2.13): The right boundary of the assembly is a rigid wall uniformly moving rightwards. The figure shows the initial condition of the assembly and a state of the assembly at a time when localization occurs in the form of shear banding. The transition zones between these two parts of the assembly are strongly localized and can be identified as shear bands.

The physical interpretation is as follows: The coupling of translational and rotational degrees of freedom allows the generation of collective rolling modes of one part of the assembly with respect to the other part. As a consequence thereof, the number of particle contacts in the localization zone is reduced in such a way that frictional interactions between the particles are minimized. Furthermore, dilatancy may also be observed in the shear band.

We emphasize that in this simulation only simple contact laws have been employed. The observations from these simulation indicate that the coupling of particle rotations and translations induced by *Coulomb* type friction between the particles is one of the essential sources responsible for the generation of localization phenomena as shear bands in granular materials and should therefore be taken into account in a macroscopic theory. As a consequence, to model overall physical properties, granular matter must be conceived as a *Cosserat* continuum on a macroscopic scale.

In this simulation, we have assumed uniform particle diameters. New simulations, currently performed by the authors, show that the width of the particle diameter distribution may be a further crucial parameter that affects characteristic lengths and shapes of shear bands.

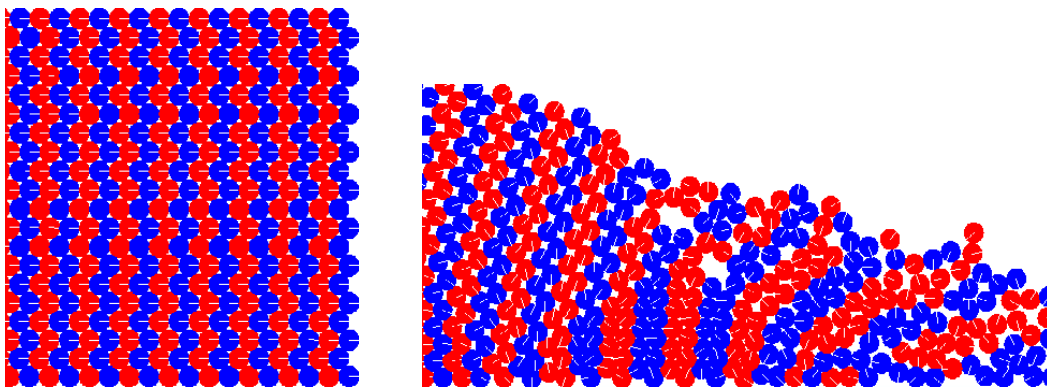


Figure 2.13: Assembly with 400 particles subjected to gravity, right boundary uniformly moving rightwards. The arrows on the particles indicate their director orientations characterized by angles $\varphi(t)$.

2.8.4 References

- [1] P. A. Cundall and O. D. L. Strack. A discrete numerical model for granular assemblies. *Geotechnique*, 29:47–65, 1979.

- [2] E. Cosserat and F. Cosserat. *Theorie de Corps Deformable*. A Herman, Paris, 1909.
- [3] W. Ehlers, S. Diebels, and T. Michelitsch. Microscopic modeling of granular materials taking into account particle rotations. In P. A. Vermeer et al., editors, *Continuous and Discontinuous Modelling of Cohesive Frictional Materials*, pages 259–274. Springer-Verlag, Berlin, 2001.
- [4] W. Ehlers and W. Volk. On shear band localization phenomena of liquid saturated granular elasto-plastic porous solids accounting for fluid viscosity and micropolar solid rotations. *Mech. Cohesive-frictional Mater.*, 2:301–320, 1997.
- [5] W. Ehlers and W. Volk. On theoretical and numerical methods in the theory of porous media based on polar and non-polar solid materials, *Int. J. Solids Structures*, 35:4597–4616, 1998.
- [6] A. C. Eringen and C.B. Kafadar. Polar field Theories. In A. C. Eringen, editor, *Continuum Physics IV*, pages 1–73. Academic Press, New York, 1976.

2.9 Eigenschaften approximativer Plattenmodelle

(G. Thomas)

Heute erfolgen Plattenberechnungen der Praxis mittels numerischer Verfahren, in denen erforderliche Energieausdrücke bekannten Plattenmodellen (*Kirchhoff*, *Mindlin*, *Hencky*, *Reissner*,...) zugeordnet sind, die kinematische oder statische Hypothesen enthalten; solche Rechnungen bilden folglich die Approximation einer Approximation des elastizitätstheoretischen Plattenmodells ($\hat{=}$ mit den Gleichungen der linearen mathematischen Elastizitätstheorie beschriebenes Modell).

Untersuchungen des Verfassers zeigen durch den Vergleich des spezifischen Formenergieinhalts approximativer Plattenmodelle mit dem des elastizitätstheoretischen Modells, daß auch in den Teilbereichen der Platte, deren Abstand von den seitlichen Berandungen (=Zylinderflächen) groß ist,

- die Genauigkeit des approximativen Plattenmodells wesentlich von der Erfüllung der Spannungsrandbedingung an den Plattendeckflächen abhängt (nur *Reissners* Theorie berücksichtigt diesen Umstand),
- alle approximativen Plattenmodelle nur für kleine Werte eines von den *Fourier*-variablen abhängigen Parameters λ physikalisch sinnvolle Resultate liefern (Rechtecklasten verursachen markante Fehler).

Solche unschönen Einflüsse der hohen Werte von λ auf das Energiefunktional (und damit auch auf nachfolgende numerische Prozesse) sind selbst in den als problemlos geltenden Innenbereichen der Platte vorhanden und dieser Sachverhalt berechtigt zur Frage nach dem Stellenwert von Ecken der Plattenmittelfläche im Energiefunktional, denn: In der Eckenumgebung ändern sich die Schnittgrößen stark und verlangen somit zu ihrer Beschreibung auch die hohen Werte von λ , die andererseits zu einem unrealistischem Modellverhalten führen.

- Ist der Eckeneinfluß auf die Funktionalwerte —vom *Saint-Venantschen* Prinzip beherrscht— klein (was für numerische Prozesse wünschenswert wäre) oder
- zum pollution-effect analog, der auch die Ergebnisse in den Innenbereichen beträchtlich verändert (was zu befürchten ist)?

Zur Klärung dieser Fragen ist u. a. die Lösung der elastizitätstheoretischen Aufgabe für verschiedene Randbedingungen auf den Zylinderflächen des Sektorgebiets (Öffnungswinkel ϕ) zu konstruieren; die Lösungsermittlung zerfällt in zwei Teilaufgaben:

Teilaufgabe P: Eine Primäraufgabe betrachtet die elastizitätstheoretische Platte als Schicht (die Zylinderflächen wandern ins Unendliche); diese Teilaufgabe erzwingt die exakte Erfüllung der Spannungsrandbedingung auf den Deckflächen. Die ermittelte Lösung der Primäraufgabe kann auf das Sektorgebiet restringiert werden und verletzt dann auf den entstehenden Zylinderflächen die dort vorgegebenen Randbedingungen.

Teilaufgabe S: Eine Folge von Randwertproblemen für die *Helmholtzgleichung* liefert bei einer speziellen Wahl der Parameter der Differentialgleichung Lösungen, die auch zum Definitionsbereich der Operatoren der Primäraufgabe gehören; die Bestimmung dieser Lösungen bildet die Sekundäraufgaben.

Beide Lösungssysteme erlauben gemeinsam das Erzwingen der vorgegebenen Randbedingungen auf den Zylinderflächen eines Sektors durch das Abstimmen der Koeffizientensysteme auftretender unendlicher Reihen.

Die Lösung der Primäraufgabe muß im Bildraum von Integraltransformationen geschehen, die Sekundäraufgaben werden zweckmäßig in den Zylinderkoordinaten eines Sektorgebietes behandelt. Diese unterschiedliche Darstellungsweise verursacht beim Erzwingen der Randbedingungen umfangreiche Umrechnungen der Lösungen des Primär- bzw. der Sekundärprobleme, so daß rationelle Rechenwege zu suchen sind.

1. Lösungsweg:

Das Primärproblem besitzt eine Spannungsfunktion und ein System auf die Spannungsfunktion wirkender Operatoren zum Ausrechnen der Verschiebungen und Spannungen als Lösung im *Fourier*raum. Spannungsfunktion und Operatoren werden getrennt der inversen *Fourier*transformation unterworfen. Bereits von *Sneddon* bei diesem Vorgehen an Aufgaben der ebenen Elastizitätstheorie beschriebene und dort approximativ gelöste Transformationsprobleme stellen sich auch bei der vorliegenden Aufgabe ein; sie werden —anders als von *Sneddon*— durch Reihenentwicklungen nach Eigenfunktionen des *Fourier*operators exakt gelöst. Die Verschiebungs- und Spannungsfelder sind im Originalraum durch Anwenden der rücktransformierten Operatoren (Differentialoperatoren unendlicher Ordnung) auf die rücktransformierte Spannungsfunktion zu bestimmen. Diese Differentiationsoperationen wirken auf Produkte transzendenter Funktionen in der rücktransformierten Spannungsfunktion und erzeugen durch die Produktregel unübersichtliche Formelsysteme; dieser Umstand läßt den 1. Lösungsweg als wenig vorteilhaft erscheinen.

2. Lösungsweg:

Die Verschiebungen und Spannungen werden mittels der Operatoren bereits im *Fourier*raum aus der Spannungsfunktion bestimmt und jedes Komponentenfeld getrennt in den Originalraum rücktransformiert. Es sind insgesamt neun Komponentenfelder über Reihenentwicklungen zu invertieren. Dieser Weg vermeidet durch erhöhte Rücktransformationsarbeit die im 1. Lösungsweg nachteiligen auffallenden Differentiationen im Originalraum; die

Weiterrechnung erfordert anschließend die Transformation der rücktransformierten Komponentenfelder auf die Zylinderkoordinaten des Sekundärproblems (dieser Schritt ist auch beim 1. Lösungsweg erforderlich).

3. Lösungsweg:

Das Primärproblem wird im *Fourier*raum gelöst und beachtet, daß bei Rotationssymmetrie zeigenden Aufgaben die in zwei Koordinatenrichtungen im Originalraum vorgenommene *Fourier*transformation der *Hankel*transformation 0. Ordnung in radialer Richtung des Sektorgebiets entspricht. Dank dieser Eigenschaft reduziert sich der Transformationsaufwand beim Invertieren der Komponentenfelder der Primäraufgabe auf jeweils eine *Hankel*invertierung (statt zwei *Fourier*invertierungen bei 1. und 2. Lösungsweg) und man hat zusätzlich die Annehmlichkeit, daß das Invertierungsergebnis in Zylinderkoordinaten vorliegt. Da die Zusammenhänge zwischen den Differentiationen und dem Transformationsparameter bei der *Hankel*transformation komplizierter sind als bei der *Fourier*transformation, vermindern sich die zunächst erhofften Rechenvorteile durch einen komplexeren Rechnungsgang, was Anlaß zur Untersuchung des 4. Lösungswegs ist.

4. Lösungsweg:

Die Primäraufgabe wird zunächst auf dem Sektorgebiet (Öffnungswinkel ϕ) definiert und durch periodische Fortsetzung zu einer Schichtaufgabe für periodische Felder gemacht. Diese Art der Aufgabenstellung gestattet die Behandlung des Primärproblems in Zylinderkoordinaten. Die Navierschen Differentialgleichungen der Primäraufgabe werden in Zylinderkoordinatendarstellung gebracht und lassen sich wieder in ein Differentialgleichungssystem 1. Ordnung mit operatorwertigen Koeffizienten umformen.

In diesem Zustand des Differentialgleichungssystems erfolgt eine zusätzliche Abbildung des Sektorgebiets auf einen Quader (die Ecke der Sektormittelfläche bei $r = 0$ wandert in den Punkt $-\infty$ einer mit dieser Abbildung neu eingeführten Variablen $r \rightsquigarrow \tau$). Auch die sekundären Randwertprobleme der *Helmholtz*gleichung werden dieser Abbildung unterworfen, wodurch aus der *Helmholtz*gleichung eine spezielle *Besselsche* Differentialgleichung entsteht.

Primär- und Sekundäraufgaben sind jetzt auf einem gemeinsamen Definitionsgebiet von sehr einfacher Geometrie erklärt: Es ist ein infinites Quader, dessen Breite der Öffnungswinkel des Sektors ist und dessen Höhe mit der Plattendicke zusammenhängt.

Die so umgestalteten Aufgaben (Primäraufgabe und Sekundäraufgaben) können in τ -Richtung der *Fourier*transformation und in ϕ -Richtung der *Fourier*transformation periodischer Funktionen unterworfen werden, wodurch die Operatorkoeffizienten des Differentialgleichungssystems 1. Ordnung der Primäraufgabe zu Parametern werden. Das so modifizierte Differentialgleichungssystem erlaubt seine Integration einschließlich der exakten Erfüllung der Spannungsrandbedingungen an den Quaderdeckflächen.

Die Vorteile dieses Vorgehens sind:

- Das Definitionsgebiet der Primär- und Sekundäraufgaben besitzt einfachste Geometrie (Quader).
- Es kommen nur die unkomplizierten Korrespondenzen und Eigenschaften der *Fourier*transformation zur Anwendung,
- welche beim Erzwingen der Randbedingungen auf den Zylinderflächen das Abstimmen der Reihenkoeffizienten bereits im *Fourier*raum erlauben, so daß nur mehr die

Komponentenfelder der vollständig an die Randbedingungen angepaßten Lösung den *Fourierrücktransformationen* zu unterwerfen sind.

- Bei der Lösung des Primärproblems tritt in Teilen der Lösung eine Gewichtung von Summanden mittels der Exponentialfunktion auf; ihr Wachstumsverhalten erleichtert die Erkennung wesentlicher und unwesentlicher Terme bei erforderlichen Abschätzungsvorgängen.

Dieser Lösungsweg wird z. Z. untersucht; nach den bis jetzt vorliegenden Einsichten gestattet er die übersichtliche Berechnung der elastizitätstheoretischen Referenzlösung, die für die Vergleiche mit den wesentlich einfacher zu bestimmenden Lösungen der approximativen Modelle erforderlich ist.

Die Verfasser wünschen Herrn Prof. Dr.-Ing. Wolfgang Ehlers zu seinem 50. Geburtstag viele angenehme Überraschungen und für die folgenden Jahrzehnte Freude, Erfolg und Gesundheit.

3

Constitutive models for granular materials including quasi-static frictional behaviour: Toward a thermodynamic theory of plasticity

B. Svendsen¹, K. Hutter² und L. Laloui³

¹Lehrstuhl für Mechanik, Fakultät Maschinenbau, Universität Dortmund, D-44221 Dortmund

²Institut für Mechanik, AG III, Technische Universität Darmstadt, D-64289 Darmstadt

³Swiss Federal Institute of Technology, Lausanne, Switzerland

Abstract. *This work deals with the thermodynamic formulation of constitutive models for materials whose quasi-static behaviour is governed by internal friction, e.g., dry granular materials. The process of internal friction is represented here phenomenologically with the help of a second-order, symmetric-tensor-valued internal variable. A general class of models for the evolution of this variable is considered, including as special cases a hypoelastic-like form for this relation as well as the hypoplastic form of Kolymbas [11]. The thermodynamic formulation is carried out in the context of the Müller-Liu entropy principle. Among other things, it is shown that for the hypoelastic-type models, a true equilibrium inelastic Cauchy stress exists. On the other hand, such a stress does not exist for the hypoplastic model due to its rate-independence and incremental non-linearity. With the help of a slight generalization of the notion of thermodynamic equilibrium, i.e., to thermodynamic “quasi-equilibrium,” however, such a Cauchy stress can be formulated for the hypoplastic model. As it turns out, this quasi-equilibrium for the Cauchy stress represents a thermodynamic generalization of the so-called quasi-static stress postulated for example by Goddard [3] in the context of his viscoplastic model for a frictional-dissipative, and in particular for granular, materials.*

3.1 Introduction

The behaviour of granular materials at low to moderate grain number density or volume fraction, and high (kinetic) energy, i.e., in the grain inertia regime of *Bagnold* [1], where short-term, nearly-elastic collisional interactions between the grains are dominant, appears to be modeled quite well by the application of *Enskog*’s theory of dense kinetic

gases to the problem (e.g., *Lun et al.* [15], *Jenkins & Richmann* [10]). Unfortunately, the extension of this approach to high grain density and moderate to low energy, where frictional interactions become dominant, appears intractable (see discussion in, e.g., *Hutter & Rajagopal* [9]). Limited in this regard as well are computer-based particle-dynamics simulations (see, e.g., *Herrmann & Luding* [8]). As such, simple *Mohr-Coulomb*-type phenomenological continuum models for the quasi-static frictional behaviour of granular materials enjoy wide use in the continuum modeling of granular flows (e.g., *Savage & Hutter* [21]; *Gray et al.* [5]). Among the generalizations of the *Mohr-Coulomb* idea in the realm of granular material modeling, one finds the viscoplastic model of *Goddard* [3], and more recently, the hypoplastic approach of *Kolymbas* (see, e.g., *Kolymbas* [11, 12]; *Gudehus* [7]; *Wu et al.* [26]). The formulation of all these models has been based up to this point on statistical mechanical and/or direct phenomenological constitutive considerations (e.g., rate-independence); the purpose of the current work is a formulation and analysis of such models from a phenomenological-thermodynamic point of view in the context of the *Müller-Liu* entropy principle (e.g., *Müller* [17]).

To begin, the basic constitutive assumptions of the formulation are introduced and discussed (§2), in particular the form of the evolution relation for the internal variable accounting for internal friction, and the assumption that the material behaviour is isotropic. Next, we formulate the corresponding form of the entropy inequality in the context of the *Müller-Liu* entropy principle (§3). The exploitation of the inequality yields direct restrictions on the forms of the coefficients of the so-called potential and flux one-forms defined on the manifold of independent constitutive variables (§3). In particular, the so-obtained restrictions on the flux one-form yield in turn restrictions on the constitutive forms of the entropy flux and energy *Lagrange* multiplier (§4). The exploitation of the entropy principle is completed by the restrictions obtained from the residual inequality in the context of thermodynamic equilibrium (§5). Lastly, the special cases of hypoelastic-like and hypoplastic-like evolution relations for the internal variable accounting for internal friction are investigated and discussed (§6), and the results compared with previous work.

Before we begin, a word on notation. If $\mathcal{W}$ and $\mathcal{Z}$ represent two finite-dimensional linear spaces, let $\text{Lin}(\mathcal{W}, \mathcal{Z})$ represent the set of all linear mappings from $\mathcal{W}$ to $\mathcal{Z}$. If $\mathcal{W}$ and $\mathcal{Z}$ are inner product spaces, the inner products on $\mathcal{W}$ and $\mathcal{Z}$ induce the transpose $\mathbf{A}^T \in \text{Lin}(\mathcal{Z}, \mathcal{W})$ of any $\mathbf{A} \in \text{Lin}(\mathcal{W}, \mathcal{Z})$, as well as the inner product $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} := \text{tr}_{\mathcal{W}}(\mathbf{A}^T \mathbf{B}) = \text{tr}_{\mathcal{Z}}(\mathbf{A} \mathbf{B}^T)$ on $\text{Lin}(\mathcal{W}, \mathcal{Z})$ for all $\mathbf{A}, \mathbf{B} \in \text{Lin}(\mathcal{W}, \mathcal{Z})$. In the context of three-dimensional Euclidean vector space $\mathcal{V}$, let $\mathbf{a} \wedge \mathbf{b} := \mathbf{a} \otimes \mathbf{b} - \mathbf{b} \otimes \mathbf{a}$ represent the wedge product of any two Euclidean vectors $\mathbf{a}, \mathbf{b} \in \mathcal{V}$, and $\mathbf{I} \in \text{Lin}(\mathcal{V}, \mathcal{V})$ the second-order Euclidean identity tensor. Further, use is made of the Euclidean norm $|\mathbf{M}| := \sqrt{\mathbf{M} \cdot \mathbf{M}}$, the “direction,” $\text{dir}(\mathbf{M}) := \mathbf{M}/|\mathbf{M}|$, and deviatoric part $\text{dev}(\mathbf{M}) := \mathbf{M} - \frac{1}{3} \text{tr}(\mathbf{M}) \mathbf{I}$, of any $\mathbf{M} \in \text{Lin}(\mathcal{V}, \mathcal{V})$. Finally, we work with the *Jacobi* $\langle \mathbf{A}, \mathbf{B} \rangle := \mathbf{A} \mathbf{B} + \mathbf{B} \mathbf{A}$ and *Lie* $[\mathbf{A}, \mathbf{B}] := \mathbf{A} \mathbf{B} - \mathbf{B} \mathbf{A}$ brackets of any two $\mathbf{A}, \mathbf{B} \in \text{Lin}(\mathcal{V}, \mathcal{V})$ in what follows.

3.2 Balance relations & constitutive assumptions

Since we are concerned in this work with isotropic material behaviour (see discussion below), which the majority of models for granular materials either tacitly or explicitly posit, it is convenient to base the formulation in the current configuration $C \subset E$ of the material in three-dimensional Euclidean point space E with translation vector space $\mathcal{V}$.

In this context, the spatial forms

$$\begin{aligned}
0 &= \dot{\varrho} + \varrho \operatorname{div} \mathbf{v} , \\
\mathbf{0} &= \varrho \dot{\mathbf{v}} - \operatorname{div} \mathbf{T} - \mathbf{b} , \\
\mathbf{0} &= \mathbf{T} - \mathbf{T}^T , \\
0 &= \varrho \dot{\varepsilon} + \operatorname{div} \mathbf{q} - \mathbf{T} \cdot \mathbf{D} - r , \\
\pi &= \varrho \dot{\eta} + \operatorname{div} \boldsymbol{\phi} - \sigma ,
\end{aligned} \tag{3.1}$$

of the balance relations for mass, momentum, moment of momentum, internal energy, and entropy, respectively, are relevant. The classical form (3.1)₃ of moment of momentum balance is assumed here for simplicity; a more realistic (and complicated) model, e.g., a micropolar or *Cosserat*-type one, would account for (average or effective) particle rotation and the corresponding friction as well, i.e., moment effects, something neglected here. In (3.1), ϱ represents the mass density, $\mathbf{v}$ the spatial velocity, $\mathbf{T}$ the *Cauchy* stress, $\mathbf{b}$ the momentum supply rate density, ε the specific internal energy, $\mathbf{q}$ the heat flux, $\mathbf{D} := \frac{1}{2}(\mathbf{L} + \mathbf{L}^T)$ the deformation rate,

$$\mathbf{L} = \dot{\mathbf{F}}\mathbf{F}^{-1} = \nabla \mathbf{v} = \mathbf{D} + \mathbf{W} \tag{3.2}$$

the velocity gradient, $\mathbf{F}$ the deformation gradient, $\mathbf{W} := \frac{1}{2}(\mathbf{L} - \mathbf{L}^T)$ the continuum spin, r the internal energy supply rate density, η the specific entropy, $\boldsymbol{\phi}$ the entropy flux, and σ the entropy supply rate density. In the current context, the mass balance (3.1) can also be expressed as

$$\varrho_r = \det(\mathbf{F}) \varrho = \sqrt{\det(\mathbf{B})} \varrho , \tag{3.3}$$

where ϱ_r represents the mass density of the reference configuration, and

$$\mathbf{B} := \mathbf{F}\mathbf{F}^T \tag{3.4}$$

the left *Cauchy-Green* deformation tensor. Since ϱ_r is constant, (3.3) implies that ϱ is a function of $\mathbf{F}$ alone here, as in the standard case. In soil mechanics, one often works with the void ratio e instead of ϱ . This ratio and the mass density γ of the solid grains determine the mass density ϱ of the granular material as

$$\varrho = \frac{\gamma}{(1 + e)} . \tag{3.5}$$

Approximating γ as constant, (3.1)₁ takes the form

$$\dot{e} = (1 + e) \operatorname{tr}(\mathbf{D}) \tag{3.6}$$

in terms of $\dot{e}$. This can be integrated to obtain

$$e = (1 + e_r) \sqrt{\det(\mathbf{B})} - 1 \tag{3.7}$$

via (3.3), again with $\gamma = \gamma_r$ constant. Such purely continuum modeling of e , or alternatively, the solid volume fraction $\nu = 1/(1 + e)$, is less sophisticated than that found in other works (e.g., *Goodman & Cowin* [4]; *Svendsen & Hutter* [25]). Indeed, on the basis of (3.6), no “micromechanical” effects influence the evolution of e . In contrast to these

earlier works, e is treated here via (3.7) simply as a function of $\mathbf{B}$, and as such does not appear among the independent constitutive variables to follow (see (3.9) below).

The phenomenological generalization of the *Mohr-Coulomb* model for internal friction in a granular material at low energy and high grain volume fraction pursued in this work is based upon a Euclidean frame-indifferent, stress-like, symmetric-tensor-valued *spatial* internal variable $\mathbf{Z}$. This variable is by interpretation associated with the effective “contact” stress in the granular material; as long as the corresponding *non-conservative* intergrain forces (depending only on the direction of the relative grain velocities in the rate-independent case) satisfy action-reaction, statistical mechanical considerations (e.g., Pitteri [18]; Svendsen [24]) show that the corresponding stress is in fact symmetric. In the current phenomenological setting, $\mathbf{Z}$ is modeled constitutively by an incremental relation of the form

$$\dot{\mathbf{Z}} - [\boldsymbol{\Omega}, \mathbf{Z}] = \boldsymbol{\Phi} \quad . \quad (3.8)$$

Here, $\boldsymbol{\Phi}$ represents the constitutive part of (3.8), and the left-hand side a so-called “corrotational” objective time derivative of the spatial tensor field $\mathbf{Z}$, $\boldsymbol{\Omega}$ being the corresponding spin. For example, $\boldsymbol{\Omega}$ is given by $\mathbf{W}$ in the *Jaumann* case (relevant, e.g., to the case of hypoplasticity).

Assuming next that the collective behaviour of the class of materials under consideration here, and in particular granular materials, is elastoviscoplastic, constitutive relations in this work take the general form

$$\mathcal{C} = \tilde{\mathcal{C}}(\theta, \mathbf{F}, \mathbf{Z}, \mathbf{g}, \dot{\theta}, \mathbf{L}) \quad (3.9)$$

for the dependent spatial constitutive fields $\mathcal{C} \in \{\mathbf{T}, \varepsilon, \mathbf{q}, \eta, \phi, \boldsymbol{\Phi}\}$, where $\mathbf{g} := \nabla\theta$ represents the spatial temperature gradient. The spatial velocity $\mathbf{v}$ has been left out of the above relations since these are eliminated from the constitutive relations by the requirement of material frame-indifference. On the other hand, the constitutive dependence of the dependent fields on $\dot{\theta}$, and in particular that of ε , is necessary (but of course not sufficient) for a hyperbolic temperature equation (Müller [17]).

To incorporate the assumption of isotropic material behaviour into the formulation, consider now the material symmetry of $\tilde{\mathcal{C}}$. As usual, any change $\mathbf{H}$ of local placement preserving density and orientation represents a symmetry transformation of $\tilde{\mathcal{C}}$ if

$$\tilde{\mathcal{C}}(\theta, \mathbf{F}, \mathbf{Z}, \mathbf{g}, \dot{\theta}, \mathbf{L}) = \tilde{\mathcal{C}}(\theta, \mathbf{F}\mathbf{H}^T, \mathbf{Z}, \mathbf{g}, \dot{\theta}, \mathbf{L}) \quad (3.10)$$

holds. In particular, for the case of isotropic material behaviour, $\mathbf{H}$ is an arbitrary rotation, in which case we may choose $\mathbf{H} = \mathbf{R}$ from the (left) polar decomposition $\mathbf{F} = \mathbf{V}\mathbf{R}$ of $\mathbf{F}$, yielding

$$\tilde{\mathcal{C}}(\theta, \mathbf{F}, \mathbf{Z}, \mathbf{g}, \dot{\theta}, \mathbf{L}) = \tilde{\mathcal{C}}(\theta, \mathbf{V}, \mathbf{Z}, \mathbf{g}, \dot{\theta}, \mathbf{L}) = \hat{\mathcal{C}}(\theta, \mathbf{B}, \mathbf{Z}, \mathbf{g}, \dot{\theta}, \mathbf{L}) \quad (3.11)$$

from (3.10) via (3.2) and the fact that $\mathbf{V} = \sqrt{\mathbf{B}}$. Requiring next that $\hat{\mathcal{C}}$ be material frame-indifferent yields the restriction

$$\tilde{\mathcal{C}}(\theta, \mathbf{F}, \mathbf{Z}, \mathbf{g}, \dot{\theta}, \mathbf{L}) = \mathbf{Q}^* \hat{\mathcal{C}}(\theta, \mathbf{Q}\mathbf{B}\mathbf{Q}^T, \mathbf{Q}\mathbf{Z}\mathbf{Q}^T, \mathbf{Q}\mathbf{g}, \dot{\theta}, \mathbf{Q}\mathbf{L}\mathbf{Q}^T + \dot{\mathbf{Q}}\mathbf{Q}^T) \quad (3.12)$$

for all time-dependent rotations $\mathbf{Q}$ in the case of isotropic material behaviour via (3.11), where $\mathbf{Q}^*$ represents the (pull-back) action induced by $\mathbf{Q}$. Since $\mathbf{Q}$ is arbitrary, we are in particular free to choose $\mathbf{Q}\mathbf{W}\mathbf{Q}^T = -\dot{\mathbf{Q}}\mathbf{Q}^T$, reducing (3.12) to

$$\tilde{\mathcal{C}}(\theta, \mathbf{F}, \mathbf{Z}, \mathbf{g}, \dot{\theta}, \mathbf{L}) = \mathbf{Q}^* \hat{\mathcal{C}}(\theta, \mathbf{Q}\mathbf{B}\mathbf{Q}^T, \mathbf{Q}\mathbf{Z}\mathbf{Q}^T, \mathbf{Q}\mathbf{g}, \dot{\theta}, \mathbf{Q}\mathbf{D}\mathbf{Q}^T) \quad (3.13)$$

via (3.10) and the isotropy of $\hat{\mathcal{C}}$. With $\mathbf{Q}(t) = \mathbf{I}$ for some time t , (3.13) yields the reduced form

$$\tilde{\mathcal{C}}(\theta, \mathbf{F}, \mathbf{Z}, \mathbf{g}, \dot{\theta}, \mathbf{L}) = \hat{\mathcal{C}}(\theta, \mathbf{B}, \mathbf{Z}, \mathbf{g}, \dot{\theta}, \mathbf{D}) \quad (3.14)$$

for $\tilde{\mathcal{C}}$ via (3.11). Together, then, (3.8) and (3.14) define the current constitutive class. With the basic constitutive relations in hand, we now turn to the restriction of these relations in the context of the entropy principle.

3.3 Entropy inequality & exploitation

As usual, the entropy principle is based on the general local form

$$\pi = \varrho \dot{\eta} + \operatorname{div} \boldsymbol{\phi} - \sigma \geq 0 \quad (3.15)$$

of the entropy inequality from (3.1)₅. Assuming that all solutions of the system of algebraic equations arising from combination of the balance (3.1)_{1–4}, evolution (3.8) and constitutive (3.14) relations also satisfy the algebraic inequality obtained from (3.8), (3.14) and (3.15), *Liu* [13] showed that (3.15) can be expressed in the alternative equivalent form¹

$$\begin{aligned} \pi &= \varrho \dot{\eta} + \operatorname{div} \boldsymbol{\phi} - \sigma \\ &- \lambda^\varepsilon \{ \varrho \dot{\varepsilon} + \operatorname{div} \mathbf{q} - \mathbf{T} \cdot \mathbf{D} - r \} \\ &- \boldsymbol{\lambda}^v \cdot \{ \varrho \dot{\mathbf{v}} - \operatorname{div} \mathbf{T} - \mathbf{b} \} \\ &- \boldsymbol{\Lambda}^z \cdot \{ \dot{\mathbf{Z}} - [\boldsymbol{\Omega}, \mathbf{Z}] - \boldsymbol{\Phi} \} \\ &\geq 0 . \end{aligned} \quad (3.16)$$

Here, linear momentum, and internal energy, balance, as well as the incremental constitutive relation (3.8), for the structure variables, appear as constraints on the entropy inequality. The quantities λ^ε , $\boldsymbol{\lambda}^v$ and $\boldsymbol{\Lambda}^z$ represent the corresponding constraint coefficients or “Lagrange multipliers.” In general, each of these may depend on the independent constitutive fields appearing in (3.14) as well as on $\mathbf{v}$ and the external supply rate densities r and $\mathbf{b}$. On the basis of (3.14) and (3.16), π and the material behaviour will be independent of such supplies when (i), λ^ε , $\boldsymbol{\lambda}^v$ and $\boldsymbol{\Lambda}^z$ are so, and (2), σ takes the form

$$\sigma = \lambda^\varepsilon r + \boldsymbol{\lambda}^v \cdot \mathbf{b} . \quad (3.17)$$

Indeed, in this case, the external supply rate densities vanish from (3.16) *identically*. For the material behaviour to be independent of the supplies, this must necessarily be the case.

The evaluation of (3.16) on the basis of (3.14) involves the generalized *Gibbs’* relations

$$\begin{aligned} \varrho d\eta &= \lambda^\varepsilon \varrho d\varepsilon + \mathcal{P} , \\ d\boldsymbol{\phi} &= \lambda^\varepsilon (d\mathbf{q}) + \mathcal{F} , \end{aligned} \quad (3.18)$$

¹Since we are treating ϱ as a function of the independent constitutive field $\mathbf{B}$ here via (3.3), the mass balance (3.1)₁ does not appear as a constraint in (3.16).

where

$$\begin{aligned}\mathcal{P} &= \mathcal{P}_\theta d\theta + \mathcal{P}_B \cdot d\mathbf{B} + \mathcal{P}_Z \cdot d\mathbf{Z} + \mathcal{P}_g \cdot d\mathbf{g} + \mathcal{P}_{\dot{\theta}} d\dot{\theta} + \mathcal{P}_D \cdot d\mathbf{D} , \\ \mathcal{F} &= \mathcal{F}_\theta d\theta + \mathcal{F}_B \cdot d\mathbf{B} + \mathcal{F}_Z \cdot d\mathbf{Z} + \mathcal{F}_g \cdot d\mathbf{g} + \mathcal{F}_{\dot{\theta}} d\dot{\theta} + \mathcal{F}_D \cdot d\mathbf{D}\end{aligned}\tag{3.19}$$

represent linear-space-valued one-forms on the manifold of independent constitutive variables appearing in (3.14). Indeed, substitution of (3.14) into (3.16) yields the form

$$\begin{aligned}\pi &= \mathcal{P}_\theta \dot{\theta} + \{\langle \mathcal{P}_B, \mathbf{B} \rangle + \lambda^\varepsilon \mathbf{T} - \text{sym}(\mathbf{g} \otimes \mathcal{P}_g)\} \cdot \mathbf{D} \\ &+ \{\mathcal{P}_Z - \mathbf{A}^Z\} \cdot \dot{\mathbf{Z}} + \mathcal{P}_{\dot{\theta}} \ddot{\theta} + \mathcal{P}_D \cdot \dot{\mathbf{D}} - \lambda^v \cdot \varrho \dot{\mathbf{v}} \\ &+ \{[\mathcal{P}_B, \mathbf{B}] - \text{skw}(\mathbf{g} \otimes \mathcal{P}_g)\} \cdot \mathbf{W} + [\mathbf{A}^Z, \mathbf{Z}] \cdot \boldsymbol{\Omega} \\ &+ \mathcal{F}_\theta \cdot \mathbf{g} + \mathcal{F}_B \cdot \nabla \mathbf{B} + \mathcal{F}_Z \cdot \nabla \mathbf{Z} + \mathcal{F}_g \cdot \nabla^2 \theta + \mathcal{F}_D \cdot \nabla \mathbf{D} + \{\mathcal{P}_g + \mathcal{F}_{\dot{\theta}}\} \cdot \nabla \dot{\theta} \\ &+ \lambda^v \cdot \text{div} \mathbf{T} + \mathbf{A}^Z \cdot \boldsymbol{\Phi} \\ &\geq 0\end{aligned}\tag{3.20}$$

of the inequality via (3.2) and (3.17) involving the coefficients of $\mathcal{P}$ and $\mathcal{F}$. To obtain this last form, use has been made of the symmetry of $\mathcal{P}_B = \varrho \eta_{,B} - \lambda^\varepsilon \varrho \varepsilon_{,B}$ via isotropy, the result

$$\dot{\mathbf{B}} = \mathbf{L}\mathbf{B} + \mathbf{B}\mathbf{L}^T\tag{3.21}$$

from (3.2) and (3.4), as well as the identity

$$\nabla \dot{\theta} = \dot{\mathbf{g}} + \mathbf{L}^T \mathbf{g} \quad .\tag{3.22}$$

In the context of (3.14), then, one can exploit (3.20) in the standard fashion. To this end, we first note that π is linear in the independent quantities $\dot{\mathbf{v}}$ and $\dot{\mathbf{Z}}$. Consequently, (3.15) could be violated during some thermodynamic process unless the corresponding coefficients vanish identically, yielding

$$\begin{aligned}\lambda^v &= \mathbf{0} , \\ \mathbf{A}^Z &= \mathcal{P}_Z ,\end{aligned}\tag{3.23}$$

for the *Lagrange* multipliers associated with linear momentum balance and the evolution of $\mathbf{Z}$, respectively, via (3.18)₁ and (3.19)₁. Similarly, note that π is linear in the independent fields $\dot{\theta}$, and $\dot{\mathbf{D}}$, yielding the restrictions

$$\begin{aligned}\mathcal{P}_{\dot{\theta}} &= 0 , \\ \mathcal{P}_D &= \mathbf{0} ,\end{aligned}\tag{3.24}$$

on the coefficients of $\mathcal{P}$. In particular, the first of these takes the alternative form

$$\eta_{,\dot{\theta}} = \lambda^\varepsilon \varepsilon_{,\dot{\theta}}\tag{3.25}$$

via (3.18)₁. In a similar fashion, the linearity of π in $\nabla \dot{\theta}$ leads to the restriction

$$\mathcal{P}_g + \mathcal{F}_{\dot{\theta}} = \mathbf{0}\tag{3.26}$$

on $\mathcal{P}$ and $\mathcal{F}$. Further, the linearity of π in $\nabla^2\theta$, $\nabla\mathbf{B}$, $\nabla\mathbf{Z}$, and $\nabla\mathbf{D}$ yields

$$\begin{aligned}\mathcal{F}_g \cdot \mathbf{a} \otimes \mathbf{b} &= -\mathcal{F}_g \cdot \mathbf{b} \otimes \mathbf{a} , \\ \mathcal{F}_B \cdot \mathbf{a} \otimes \mathbf{b} \otimes \mathbf{c} &= -\mathcal{F}_B \cdot \mathbf{a} \otimes \mathbf{c} \otimes \mathbf{b} , \\ \mathcal{F}_Z \cdot \mathbf{a} \otimes \mathbf{b} \otimes \mathbf{c} &= -\mathcal{F}_Z \cdot \mathbf{a} \otimes \mathbf{c} \otimes \mathbf{b} , \\ \mathcal{F}_D \cdot \mathbf{a} \otimes \mathbf{b} \otimes \mathbf{c} &= -\mathcal{F}_D \cdot \mathbf{a} \otimes \mathbf{c} \otimes \mathbf{b} ,\end{aligned}\tag{3.27}$$

for all non-zero $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c} \in \mathcal{V}$. Lastly, since π is linear in $\mathbf{W}$, and the inequality must be satisfied for all spins $\mathbf{\Omega}$, the restrictions

$$\begin{aligned}[\mathcal{P}_B, \mathbf{B}] &= \text{skw}(\mathbf{g} \otimes \mathcal{P}_g) , \\ \mathcal{P}_Z \mathbf{Z} &= \mathbf{Z} \mathcal{P}_Z ,\end{aligned}\tag{3.28}$$

hold for the case $\mathbf{\Omega} \neq \mathbf{W}$, and that

$$[\mathcal{P}_B, \mathbf{B}] + [\mathcal{P}_Z, \mathbf{Z}] = \text{skw}(\mathbf{g} \otimes \mathcal{P}_g)\tag{3.29}$$

for the *Jaumann* case $\mathbf{\Omega} = \mathbf{W}$. The necessary conditions (3.23), (3.24), (3.26), (3.27), and either (3.28) or (3.29), reduce (3.20) to its so-called residual form

$$\pi = \mathcal{P}_\theta \dot{\theta} + \{ \langle \mathcal{P}_B, \mathbf{B} \rangle + \lambda^\varepsilon \mathbf{T} - \text{sym}(\mathbf{g} \otimes \mathcal{P}_g) \} \cdot \mathbf{D} + \mathcal{F}_\theta \cdot \mathbf{g} + \mathcal{P}_Z \cdot \mathbf{\Phi}\tag{3.30}$$

for the current constitutive class defined by (3.8) and (3.14). To investigate the restrictions imposed by (3.24)–(3.29) on the constitutive relations, we now turn to consideration of the associated integrability conditions.

3.4 Flux one-form & entropy flux

As indicated by the results (3.24)–(3.29) of the last section, (3.16) places restrictions on the coefficients of the one-forms $\mathcal{P}$ and $\mathcal{F}$ defined in (3.18)–(3.19). The next step is to transform these restrictions into ones on the constitutive fields. In particular, we begin by examining the restrictions (3.27) on the flux one-form $\mathcal{F}$. To this end, consider the condition of isotropy

$$\mathbf{Q} \hat{\mathbf{f}}(\theta, \mathbf{A}_\alpha, \mathbf{g}, \dot{\theta}) = \hat{\mathbf{f}}(\theta, \mathbf{Q} \mathbf{A}_\alpha \mathbf{Q}^\top, \mathbf{Q} \mathbf{g}, \dot{\theta})\tag{3.31}$$

on vector-valued constitutive fields $\hat{\mathbf{f}}$ such as ϕ or $\mathbf{q}$, holding for all rotations $\mathbf{Q}$, with

$$\mathbf{A}_\alpha \in \{\mathbf{B}, \mathbf{Z}, \mathbf{D}\}\tag{3.32}$$

and $\alpha = 1, 2, 3$. To exploit (3.27) in the context of (3.31), we employ the approach of *Liu* [14] and work with the “differential” form of (3.31), i.e.,

$$\mathbf{\Omega} \mathbf{f} = (\mathbf{f}_{, \mathbf{A}_\alpha})[\mathbf{\Omega}, \mathbf{A}_\alpha] + (\mathbf{f}_{, \mathbf{g}}) \mathbf{\Omega} \mathbf{g}\tag{3.33}$$

(sum on $\alpha = 1, 2, 3$) holding for all skew-symmetric tensors $\boldsymbol{\Omega}$. The fact that $\boldsymbol{\Omega}$ is skew-symmetric yields the alternative form

$$\mathbf{a} \wedge \mathbf{f} = 2 [(\mathbf{f}_{\mathbf{A}_\alpha})^\top \mathbf{a}, \mathbf{A}_\alpha] + (\mathbf{f}_{\mathbf{g}})^\top \mathbf{a} \wedge \mathbf{g} \quad (3.34)$$

of (3.33) for all non-zero $\mathbf{a} \in \mathcal{V}$. In particular, the forms of (3.34) holding for $\boldsymbol{\phi}$ and $\lambda^\varepsilon \mathbf{q}$ yield that

$$\mathbf{a} \wedge \mathbf{k} = 2 [(\mathcal{F}_{\mathbf{A}_\alpha})^\top \mathbf{a}, \mathbf{A}_\alpha] - \mathcal{F}_{\mathbf{g}} \mathbf{a} \wedge \mathbf{g} \quad (3.35)$$

for the extra entropy flux

$$\mathbf{k} := \boldsymbol{\phi} - \lambda^\varepsilon \mathbf{q} \quad (3.36)$$

in terms of $\mathcal{F}_{\mathbf{A}_\alpha}$ and $\mathcal{F}_{\mathbf{g}}$ via (3.18)₂. In terms of $\mathbf{k}$, note that $\mathcal{F}$ takes the form

$$\mathcal{F} = d\mathbf{k} + \mathbf{q} d\lambda^\varepsilon \quad (3.37)$$

also via (3.18)₂.

Consider next the restrictions (3.27)_{2,3,4}. In contrast to these, the symmetry of $\mathbf{A}_\alpha$ implies

$$\mathcal{F}_{\mathbf{A}_\alpha} \cdot \mathbf{a} \otimes \mathbf{b} \otimes \mathbf{c} = \mathcal{F}_{\mathbf{A}_\alpha} \cdot \mathbf{a} \otimes \mathbf{c} \otimes \mathbf{b} \quad (3.38)$$

for all non-zero $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c} \in \mathcal{V}$. The only way both (3.27)_{2,3,4} and (3.38) can be satisfied is if

$$\mathcal{F}_{\mathbf{A}_\alpha} = \mathbf{0} \quad (3.39)$$

i.e., iff $\mathcal{F}_{\mathbf{A}_\alpha}$ vanishes identically for $\alpha = 1, 2, 3$. As such, (3.35) reduces to

$$\mathbf{k} \wedge \mathbf{a} = \mathcal{F}_{\mathbf{g}} \mathbf{a} \wedge \mathbf{g} \quad , \quad (3.40)$$

again for all $\mathbf{a} \in \mathcal{V}$. With respect to the Cartesian basis $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3)$, this last relation yields that

$$\delta_{ij} \mathbf{k} - k_i \mathbf{e}_j = g_i \mathcal{F}_{\mathbf{g}} \mathbf{e}_j - (\mathcal{F}_{\mathbf{g}})_{ij} \mathbf{g} \quad (3.41)$$

for $i, j = 1, 2, 3$, with $\delta_{ij} := \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j$, $k_i := \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{k}$, $g_i := \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{g}$, and $(\mathcal{F}_{\mathbf{g}})_{ij} := \mathbf{e}_i \cdot \mathcal{F}_{\mathbf{g}} \mathbf{e}_j$. In particular, (3.41) implies the system

$$\begin{aligned} \mathbf{k} - k_1 \mathbf{e}_1 &= g_1 \mathcal{F}_{\mathbf{g}} \mathbf{e}_1 \\ \mathbf{k} - k_2 \mathbf{e}_2 &= g_2 \mathcal{F}_{\mathbf{g}} \mathbf{e}_2 \\ \mathbf{k} - k_3 \mathbf{e}_3 &= g_3 \mathcal{F}_{\mathbf{g}} \mathbf{e}_3 \end{aligned} \quad (3.42)$$

for $i = j$ via the skew-symmetry of $\mathcal{F}_{\mathbf{g}}$ from (3.27)₁. Summing these three relations together and rearranging, one obtains the form

$$\mathbf{k} = \frac{1}{2} \mathcal{F}_{\mathbf{g}} \mathbf{g} \quad (3.43)$$

for $\mathbf{k}$. Next, (3.41) yields $(\mathcal{F}_{\mathbf{g}})_{ij} g_k + (\mathcal{F}_{\mathbf{g}})_{jk} g_i = 0$ for $i \neq j \neq k$, and so the system

$$\begin{bmatrix} (\mathcal{F}_{\mathbf{g}})_{23} & 0 & (\mathcal{F}_{\mathbf{g}})_{12} \\ (\mathcal{F}_{\mathbf{g}})_{23} & (\mathcal{F}_{\mathbf{g}})_{31} & 0 \\ 0 & (\mathcal{F}_{\mathbf{g}})_{31} & (\mathcal{F}_{\mathbf{g}})_{12} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} g_1 \\ g_2 \\ g_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} . \quad (3.44)$$

For arbitrary $\mathbf{g}$, then, the matrix in this last relation must be identically zero, implying

$$\mathcal{F}_{\mathbf{g}} = \mathbf{0} \quad , \quad (3.45)$$

and so

$$\mathbf{k} = \mathbf{0} \quad (3.46)$$

from (3.43). In particular, (3.46) implies the proportionality

$$\boldsymbol{\phi} = \lambda^\varepsilon \mathbf{q} \quad (3.47)$$

between the entropy flux and heat flux for the current constitutive class via (3.36), and so the reduced form

$$\mathcal{F} = \mathcal{F}_\theta d\theta + \mathcal{F}_{\dot{\theta}} d\dot{\theta} = \mathbf{q} d\lambda^\varepsilon \quad (3.48)$$

for $\mathcal{F}$ from (3.19)₂, (3.37), (3.39), (3.45) and (3.46). Necessarily, then,

$$\lambda^\varepsilon = \hat{\lambda}^\varepsilon(\theta, \dot{\theta}) \quad (3.49)$$

holds for $\hat{\lambda}^\varepsilon$ since $\mathbf{q} \neq \mathbf{0}$. In addition, note that (3.26), (3.48) and (3.49) result in the form

$$\mathcal{P}_{\mathbf{g}} = -\lambda_{,\dot{\theta}}^\varepsilon \mathbf{q} \quad \implies \quad \varrho \eta_{,\mathbf{g}} = \lambda^\varepsilon \varrho \varepsilon_{,\mathbf{g}} - \lambda_{,\dot{\theta}}^\varepsilon \mathbf{q} \quad (3.50)$$

for the $\mathbf{g}$ -coefficient of $\mathcal{P}$.

In summary, the general restrictions (3.27) from the entropy principle together with the isotropy of the material behaviour lead to the reduced forms

$$\begin{aligned} \mathcal{P} &= \mathcal{P}_\theta d\theta + \mathcal{P}_{\mathbf{B}} \cdot d\mathbf{B} + \mathcal{P}_{\mathbf{Z}} \cdot d\mathbf{Z} - \lambda_{,\dot{\theta}}^\varepsilon \mathbf{q} \cdot d\mathbf{g} \quad , \\ \mathcal{F} &= \mathbf{q} \{ \lambda_{,\theta}^\varepsilon d\theta + \lambda_{,\dot{\theta}}^\varepsilon d\dot{\theta} \} \quad , \end{aligned} \quad (3.51)$$

of $\mathcal{P}$ and $\mathcal{F}$ via (3.23), (3.24), (3.48), (3.49) and (3.50) for the current constitutive class. Likewise, the residual entropy inequality (3.30) reduces to

$$\pi = \mathcal{P}_\theta \dot{\theta} + \{ \langle \mathcal{P}_{\mathbf{B}}, \mathbf{B} \rangle + \lambda^\varepsilon \mathbf{T} + \lambda_{,\dot{\theta}}^\varepsilon \text{sym}(\mathbf{g} \otimes \mathbf{q}) \} \cdot \mathbf{D} + \lambda_{,\theta}^\varepsilon \mathbf{q} \cdot \mathbf{g} + \mathcal{P}_{\mathbf{Z}} \cdot \boldsymbol{\Phi} \geq 0 \quad , \quad (3.52)$$

via (3.50) and (3.51)₂. As usual, further restrictions on the form of the constitutive relations can be obtained from (3.52) in the context of thermodynamic equilibrium, to which we now turn.

3.5 Thermodynamic equilibrium

The results of this section are based on the condition of *thermodynamic equilibrium*, i.e.,

$$\pi_{\text{E}} = \hat{\pi}_{\text{E}}(\mathbf{e}) := \hat{\pi}(\mathbf{e}, 0) = 0 \quad , \quad (3.53)$$

via the split $\mathbf{x} = (\mathbf{e}, n)$ of the independent constitutive variables

$$\mathbf{x} := (\theta, \mathbf{B}, \mathbf{Z}, \mathbf{g}, \dot{\theta}, \mathbf{D}) \quad (3.54)$$

appearing in (3.14) into equilibrium $\mathbf{e} := (\theta, \mathbf{B}, \mathbf{Z})$ and nonequilibrium $\mathbf{n} := (\mathbf{g}, \dot{\theta}, \mathbf{D})$ subsets. Note that any dependent constitutive quantity $\mathcal{C} = \hat{\mathcal{C}}(\mathbf{x})$ can be represented in the form

$$\hat{\mathcal{C}}(\mathbf{x}) = \hat{\mathcal{C}}_{\text{E}}(\mathbf{e}) + \hat{\mathcal{C}}_{\text{N}}(\mathbf{e}, \mathbf{n}) \quad , \quad (3.55)$$

where

$$\hat{\mathcal{C}}_{\text{E}}(\mathbf{e}) := \lim_{n \rightarrow 0} \hat{\mathcal{C}}(\mathbf{e}, \mathbf{n}) \quad (3.56)$$

and

$$\hat{\mathcal{C}}_{\text{N}}(\mathbf{e}, \mathbf{n}) := \hat{\mathcal{C}}(\mathbf{e}, \mathbf{n}) - \hat{\mathcal{C}}_{\text{E}}(\mathbf{e}) \quad (3.57)$$

represent its equilibrium and nonequilibrium parts, respectively. In what follows, we also use the notation

$$\hat{\mathcal{C}}|_{\text{E}}(\mathbf{e}) := \lim_{n \rightarrow 0} \hat{\mathcal{C}}(\mathbf{e}, \mathbf{n}) \quad . \quad (3.58)$$

The representation (3.55) as based on (3.56) and (3.57) implies the relations $\mathcal{C}_{, \mathbf{e}_{\alpha}}|_{\text{E}} = \mathcal{C}_{\text{E}, \mathbf{e}_{\alpha}}$ and $\mathcal{C}_{, n_{\alpha}} = \mathcal{C}_{\text{N}, n_{\alpha}}$ for the partial derivatives of $\hat{\mathcal{C}}$ with respect to the equilibrium and non-equilibrium variables, respectively, as well as $\mathcal{C}_{\text{N}}|_{\text{E}} = \mathbf{0}$. Note that $\mathbf{e}_1 = \theta$, $\mathbf{e}_2 = \mathbf{B}$, and so on.

The residual form (3.52) of π fulfils (3.53) in particular since Φ is a production-like quantity, i.e.,

$$\Phi_{\text{E}} = \mathbf{0} \quad \implies \quad \Phi = \hat{\Phi}_{\text{N}}(\theta, \mathbf{B}, \mathbf{Z}, \mathbf{g}, \dot{\theta}, \mathbf{D}) \quad (3.59)$$

holds. With the help of the isotropic form

$$\begin{aligned} \Phi &= \phi_0 \mathbf{I} + \phi_{1\alpha} \mathbf{A}_{\alpha} + \phi_{2\alpha} \mathbf{A}_{\alpha}^2 \\ &+ \phi_{1\alpha\beta} \langle \mathbf{A}_{\alpha}, \mathbf{A}_{\beta} \rangle + \phi_{2\alpha\beta} \langle \mathbf{A}_{\alpha}^2, \mathbf{A}_{\beta} \rangle + \phi_{3\alpha\beta} \langle \mathbf{A}_{\alpha}, \mathbf{A}_{\beta}^2 \rangle \\ &+ \phi_3 \mathbf{g} \otimes \mathbf{g} + \phi_{4\alpha} \langle \mathbf{g} \otimes \mathbf{g}, \mathbf{A}_{\alpha} \rangle + \phi_{5\alpha} \langle \mathbf{g} \otimes \mathbf{g}, \mathbf{A}_{\alpha}^2 \rangle , \end{aligned} \quad (3.60)$$

for Φ (sum over $\alpha < \beta$), the equilibrium part of Φ is given by

$$\begin{aligned} \Phi_{\text{E}} &= \phi_0|_{\text{E}} \mathbf{I} + \phi_{11}|_{\text{E}} \mathbf{B} + \phi_{12}|_{\text{E}} \mathbf{Z} + \phi_{21}|_{\text{E}} \mathbf{B}^2 + \phi_{22}|_{\text{E}} \mathbf{Z}^2 \\ &+ \phi_{112}|_{\text{E}} \langle \mathbf{B}, \mathbf{Z} \rangle + \phi_{212}|_{\text{E}} \langle \mathbf{B}^2, \mathbf{Z} \rangle + \phi_{312}|_{\text{E}} \langle \mathbf{B}, \mathbf{Z}^2 \rangle \end{aligned} \quad (3.61)$$

via (3.32). For this to vanish, then, the restrictions

$$\begin{aligned} \phi_{11}|_{\text{E}} &= 0, & \phi_{12}|_{\text{E}} &= 0, & \phi_{21}|_{\text{E}} &= 0, & \phi_{22}|_{\text{E}} &= 0, \\ \phi_{112}|_{\text{E}} &= 0, & \phi_{212}|_{\text{E}} &= 0, & \phi_{312}|_{\text{E}} &= 0, \end{aligned} \quad (3.62)$$

on the corresponding coefficients appearing in (3.60) pertain in general. For the particular cases of Φ examined in the next section, these conditions are in fact satisfied identically.

The condition (3.53) of thermodynamic equilibrium motivates the expansion

$$\hat{\pi}(\mathbf{x}) = \hat{\pi}_{\text{N}}(\mathbf{e}, \mathbf{n}) = \hat{\pi}_{, n}(\mathbf{e}, 0) \cdot \mathbf{n} + \frac{1}{2} \mathbf{n} \cdot \hat{\pi}_{, nn}(\mathbf{e}, 0) \mathbf{n} + \dots \quad (3.63)$$

of $\hat{\pi}$ about thermodynamic equilibrium via (3.55). In the context of (3.63), $n = 0$ represents a *minimum* of $\hat{\pi}$ when the necessary conditions

$$\begin{aligned} \pi_{,n}|_{\mathbf{E}} &= (\pi_{,\mathbf{g}}|_{\mathbf{E}}, \pi_{,\dot{\theta}}|_{\mathbf{E}}, \pi_{,\mathbf{D}}|_{\mathbf{E}}) \quad \text{vanishes ,} \\ \pi_{,nn}|_{\mathbf{E}} &= \begin{pmatrix} \pi_{,\mathbf{g}\mathbf{g}}|_{\mathbf{E}} & \pi_{,\mathbf{g}\dot{\theta}}|_{\mathbf{E}} & \pi_{,\mathbf{g}\mathbf{D}}|_{\mathbf{E}} \\ \pi_{,\mathbf{g}\dot{\theta}}|_{\mathbf{E}} & \pi_{,\dot{\theta}\dot{\theta}}|_{\mathbf{E}} & \pi_{,\dot{\theta}\mathbf{D}}|_{\mathbf{E}} \\ \pi_{,\mathbf{g}\mathbf{D}}|_{\mathbf{E}} & \pi_{,\dot{\theta}\mathbf{D}}|_{\mathbf{E}} & \pi_{,\mathbf{D}\mathbf{D}}|_{\mathbf{E}} \end{pmatrix} \quad \text{non-negative definite ,} \end{aligned} \quad (3.64)$$

hold. The evaluation of (3.64) in what follows takes advantage of the fact that, for any scalar- or symmetric-tensor-valued constitutive relation $\hat{\mathcal{C}}$,

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_{,\mathbf{g}}|_{\mathbf{E}} &= \mathbf{0} , \\ \mathcal{C}_{,\mathbf{g}\dot{\theta}}|_{\mathbf{E}} &= \mathbf{0} , \\ \mathcal{C}_{,\mathbf{g}\mathbf{D}}|_{\mathbf{E}} &= \mathbf{0} , \end{aligned} \quad (3.65)$$

follow from the isotropy of $\hat{\mathcal{C}}$. Indeed, in this case, $\hat{\mathcal{C}}$ is “quadratic” in $\mathbf{g}$. Since $\hat{\pi}$ as given in (3.52) is such an isotropic function, (3.65) holds in particular for it.

In the context of (3.14) and (3.52), the restrictions (3.64) are evaluated as follows. Begin for example with the case $\pi_{,\mathbf{g}}|_{\mathbf{E}} = \mathbf{0}$. Given that $\lambda_{\mathbf{E},\theta}^{\varepsilon} \neq 0$, $\mathbf{q}_{\mathbf{E}}$ vanishes identically via isotropy, and $\mathcal{P}_{\mathbf{Z}}|_{\mathbf{E}} \neq \mathbf{0}$, (3.64)₁ yields

$$\Phi_{,\mathbf{g}}|_{\mathbf{E}} = \mathbf{0} \quad (3.66)$$

in this case. On the other hand, as just discussed, this also follows directly from the fact that the coefficients of Φ in (3.60) are isotropic constitutive functions, and so in particular “quadratic” in $\mathbf{g}$. Next, the case $\pi_{,\dot{\theta}}|_{\mathbf{E}} = 0$ from (3.64)₁ implies

$$\mathcal{P}_{\theta}|_{\mathbf{E}} = -\mathcal{P}_{\mathbf{Z}}|_{\mathbf{E}} \cdot \Phi_{,\dot{\theta}}|_{\mathbf{E}} . \quad (3.67)$$

And $\pi_{,\mathbf{D}}|_{\mathbf{E}} = \mathbf{0}$ leads to the result

$$\lambda_{\mathbf{E}}^{\varepsilon} \mathbf{T}_{\mathbf{E}} = -\langle \mathcal{P}_{\mathbf{B}}|_{\mathbf{E}}, \mathbf{B} \rangle - (\Phi_{,\mathbf{D}})^{\mathbf{T}}|_{\mathbf{E}} \mathcal{P}_{\mathbf{Z}}|_{\mathbf{E}} \quad (3.68)$$

for the equilibrium *Cauchy* stress $\mathbf{T}_{\mathbf{E}}$. The result (3.67) leads in particular to the equilibrium form

$$\mathcal{P}|_{\mathbf{E}} = -(\mathcal{P}_{\mathbf{Z}} \cdot \Phi_{,\dot{\theta}})|_{\mathbf{E}} d\theta + \mathcal{P}_{\mathbf{B}}|_{\mathbf{E}} \cdot d\mathbf{B} + \mathcal{P}_{\mathbf{Z}}|_{\mathbf{E}} \cdot d\mathbf{Z} \quad (3.69)$$

for $\mathcal{P}$ from (3.51)₁, implying

$$\varrho(d\eta)|_{\mathbf{E}} = \lambda_{\mathbf{E}}^{\varepsilon} \varrho(d\varepsilon)|_{\mathbf{E}} - \mathcal{P}_{\mathbf{Z}}|_{\mathbf{E}} \cdot \Phi_{,\dot{\theta}}|_{\mathbf{E}} d\theta + \mathcal{P}_{\mathbf{B}}|_{\mathbf{E}} \cdot d\mathbf{B} + \mathcal{P}_{\mathbf{Z}}|_{\mathbf{E}} \cdot d\mathbf{Z} \quad (3.70)$$

for the generalized *Gibbs*’ relation (3.18)₁. So, except for the terms involving the inelastic behaviour, this last result takes the form of the classical (i.e., thermostatic) *Gibbs*’ relation, identifying

$$\lambda_{\mathbf{E}}^{\varepsilon} = \hat{\lambda}_{\mathbf{E}}^{\varepsilon}(\theta) = \theta^{-1} \quad (3.71)$$

as the absolute coldness (e.g., Müller [17]).

To cast the results up to this point in a more familiar form, it is useful to introduce the referential free energy density

$$\psi := \varepsilon_{\text{E}} - \theta \eta_{\text{E}} = \hat{\psi}(\theta, \mathbf{B}, \mathbf{Z}) \quad . \quad (3.72)$$

In terms of ψ , we then have

$$-\theta \mathcal{P}|_{\text{E}} = \varrho d\psi + \varrho \eta_{\text{E}} d\theta \quad (3.73)$$

for the equilibrium part $\mathcal{P}|_{\text{E}}$ of $\mathcal{P}$ from (3.18)₁ and (3.71). In the equilibrium context, the restriction (3.28) reduces to

$$\begin{aligned} \psi_{,\mathbf{B}} \mathbf{B} &= \mathbf{B} \psi_{,\mathbf{B}} , \\ \psi_{,\mathbf{Z}} \mathbf{Z} &= \mathbf{Z} \psi_{,\mathbf{Z}} , \end{aligned} \quad (3.74)$$

for the case $\mathbf{\Omega} \neq \mathbf{W}$, and (3.29) to

$$[\psi_{,\mathbf{B}}, \mathbf{B}] + [\psi_{,\mathbf{Z}}, \mathbf{Z}] = \mathbf{0} \quad (3.75)$$

for the *Jaumann* case $\mathbf{\Omega} = \mathbf{W}$ in terms of ψ in the equilibrium context, both representing restrictions on the form of ψ . In addition, the relations (3.67) and (3.73) then yield

$$\eta_{\text{E}} = -\{\psi_{,\theta} + \psi_{,\mathbf{Z}} \cdot \mathbf{\Phi}_{,\dot{\theta}}|_{\text{E}}\} \quad (3.76)$$

for the equilibrium part of the entropy density η . As such, in addition to the usual “elastic” part $-\psi_{,\theta}$, frictional processes could contribute in equilibrium to η via a $\dot{\theta}$ -dependence of $\mathbf{\Phi}$. Lastly, the result (3.68) reduces to

$$\mathbf{T}_{\text{E}} = \varrho \langle \psi_{,\mathbf{B}}, \mathbf{B} \rangle + \varrho (\mathbf{\Phi}_{,\mathbf{D}})^{\text{T}}|_{\text{E}} \psi_{,\mathbf{Z}} \quad (3.77)$$

for $\mathbf{T}_{\text{E}}$ via (3.73). The first term on the right-hand side clearly represents the elastic, and the second the frictional or contact, contribution to $\mathbf{T}_{\text{E}}$, as mediated by the dependence of $\mathbf{\Phi}$ on $\mathbf{D}$. To summarize, the results (3.71), (3.76) and (3.77) yield the forms

$$\begin{aligned} \lambda^{\varepsilon} &= \theta^{-1} + \lambda_{\text{N}}^{\varepsilon} , \\ \eta &= -\psi_{,\theta} - \psi_{,\mathbf{Z}} \cdot \mathbf{\Phi}_{,\dot{\theta}}|_{\text{E}} + \eta_{\text{N}} , \\ \mathbf{T} &= \varrho \langle \psi_{,\mathbf{B}}, \mathbf{B} \rangle + \varrho (\mathbf{\Phi}_{,\mathbf{D}})^{\text{T}}|_{\text{E}} \psi_{,\mathbf{Z}} + \mathbf{T}_{\text{N}} , \end{aligned} \quad (3.78)$$

for the decomposition of λ^{ε} , η , and $\mathbf{T}$, respectively, into equilibrium and non-equilibrium parts, via (3.55). In particular, since λ^{ε} depends constitutively only on θ and $\dot{\theta}$, note that $\lambda_{\text{N}}^{\varepsilon}$ could be expressed in general as quasi-linear form in $\dot{\theta}$. Further, $\mathbf{T}_{\text{N}}$ represents a viscous contribution to the *Cauchy* stress including for example the *Bagnold* [1] contribution to the stress in the grain-inertia regime.

We turn next to the condition (3.64)₂. In particular, this yields the restriction

$$2 \text{sym}(\mathbf{q}, \mathbf{g})|_{\text{E}} + \theta (\mathbf{\Phi}, \mathbf{g}\mathbf{g})^{\text{T}}|_{\text{E}} \psi_{,\mathbf{Z}} \quad \text{non-positive definite} \quad (3.79)$$

on the symmetric part of the equilibrium thermal conductivity tensor $\mathbf{q}_{,g}|_E$ via (3.71). Further, it requires that

$$\varepsilon_{,\dot{\theta}}|_E \leq -\theta \lambda_{,\dot{\theta}}^\varepsilon|_E \theta \varepsilon_{E,\theta} - \psi_{,Z} \cdot \theta \Phi_{,\dot{\theta}\dot{\theta}}|_E \quad (3.80)$$

hold for $\varepsilon_{,\dot{\theta}}|_E$ via (3.25). In the particular case that $\hat{\Phi}$ is independent of $\dot{\theta}$, for example, this last result implies that $\varepsilon_{,\dot{\theta}}|_E$ will be positive only if $\lambda_{,\dot{\theta}}^\varepsilon|_E$ is negative, and so lead to a hyperbolic temperature evolution relation. Beyond (3.79) and (3.80), (3.64)₂ leads to the condition

$$2 \text{sym}(\mathbf{T}_{N,D})|_E - (\Phi_{,DD})^T|_E \psi_{,Z} \quad \text{non-negative definite} \quad (3.81)$$

on the symmetric part of the “viscosity” tensor $\mathbf{T}_{N,D}$. Finally, the sole non-zero “off-diagonal” element of $\pi_{,nn}|_E$ takes the form

$$\theta \pi_{,\dot{\theta}D}|_E = -\theta^{-1} \varepsilon_{,D}|_E + \theta \lambda_{,\dot{\theta}}^\varepsilon|_E \{ \langle \varepsilon_E, \mathbf{B}, \mathbf{B} \rangle + (\Phi_{,D})^T|_E \varepsilon_{E,Z} \} + \theta (\lambda^\varepsilon \mathbf{T})_{,\dot{\theta}}|_E - (\Phi_{,D\dot{\theta}})^T|_E \psi_{,Z} \quad (3.82)$$

via (3.25), (3.80) and (3.81). Its Cartesian components satisfy the restriction

$$(\pi_{,\dot{\theta}D}|_E)_{ij} (\pi_{,\dot{\theta}D}|_E)_{kl} \leq (\pi_{,\dot{\theta}\dot{\theta}}|_E) (\pi_{,DD}|_E)_{ijkl} \quad (3.83)$$

in the context of (3.64)₂.

This last restriction completes the investigation and exploitation of thermodynamic equilibrium. Now we turn to the investigation and discussion of two major special cases of the above formulation having to do with the constitutive form for Φ in light of the above general results.

3.6 Hypoelastic & hypoplastic special cases

The exploitation of thermodynamic equilibrium presented in the last section is based on the tacit assumption that $\hat{\pi}(\mathbf{e}, n)$ as given by (3.52) is k -times continuously differentiable ($k \geq 2$) in n at $n = 0$. This is of course the case only when all constitutive functions, and in particular $\hat{\Phi}$, are such. For example, the “hypoelastic” form

$$\hat{\Phi}(\mathbf{B}, \mathbf{Z}, \mathbf{D}) = \hat{L}(\mathbf{B}, \mathbf{Z}) \mathbf{D} \quad (3.84)$$

for $\hat{\Phi}$ fulfils this requirement since it is linear in $\mathbf{D}$. Here, $\hat{L}(\mathbf{B}, \mathbf{Z})$ represents a fourth-order-tensor-valued isotropic function. In the soil mechanics context, the dependence of (3.84) (and that of the hypoplastic form (3.86) considered below) on $\mathbf{B}$ is via one on the void ratio e as given by (3.7). From (3.84) follow in particular the forms

$$\begin{aligned} \eta_E &= -\psi_{,\theta} \\ \mathbf{T}_E &= \varrho \langle \psi_{,B}, \mathbf{B} \rangle + \varrho L^T \psi_{,Z} \end{aligned} \quad (3.85)$$

for the equilibrium entropy and Cauchy stress via (3.76) and (3.77), respectively, with ψ given by (3.72). Models for granular materials based on (3.84) in the realm of soil mechanics have been considered by, e.g., Stutz [23], Romano [20], as well as Davis &

Mullenger [2], and criticized by Gudehus [6]. The basic problem with (3.84) is that it cannot capture the fact that the material behaviour of granular materials is in general different in extension than in compression.

In contrast to (3.84), the *hypoplastic* form

$$\hat{\Phi}(\mathbf{B}, \mathbf{Z}, \mathbf{D}) = \hat{L}(\mathbf{B}, \mathbf{Z})\mathbf{D} + \hat{N}(\mathbf{B}, \mathbf{Z})|\mathbf{D}| \quad (3.86)$$

for $\hat{\Phi}$ does account for the fact that the material behaviour of granular materials is in general different in extension than in compression, i.e., via the second term non-linear in $\mathbf{D}$. Particular forms of $\hat{L}$ and $\hat{N}$ include those

$$\begin{aligned} \hat{L}(\mathbf{B}, \mathbf{Z}) &= c_1(\mathbf{B}) \operatorname{tr}(\mathbf{Z}) \mathbf{I} + c_2(\mathbf{B}) \frac{\mathbf{Z} \otimes \mathbf{Z}}{\operatorname{tr}(\mathbf{Z})} \\ \hat{N}(\mathbf{B}, \mathbf{Z}) &= c_3(\mathbf{B}) \frac{\mathbf{Z}^2}{\operatorname{tr}(\mathbf{Z})} + c_4(\mathbf{B}) \frac{\operatorname{dev}(\mathbf{Z})^2}{\operatorname{tr}(\mathbf{Z})} \end{aligned} \quad (3.87)$$

used by Wu *et al.* [26] in modeling the failure of various types of soils. Here, $\mathbf{I}$ represents the fourth-order identity tensor, and the material coefficients c_{1-4} depend on $\mathbf{B}$ through the void ratio e via (3.7). These coefficients are determined, e.g., with the help of triaxial extension-compression tests. Note that, in contrast to (3.84), (3.86) is not (Fréchet) differentiable in $\mathbf{D}$ at $\mathbf{D} = \mathbf{0}$ since the Euclidean norm is not. Indeed, we have

$$\hat{\Phi}_{,\mathbf{D}}(\mathbf{B}, \mathbf{Z}, \mathbf{D}) = \hat{L}(\mathbf{B}, \mathbf{Z}) + \hat{N}(\mathbf{B}, \mathbf{Z}) \otimes \operatorname{dir}(\mathbf{D}) \quad . \quad (3.88)$$

Consequently, the concept of thermodynamic equilibrium introduced and exploited in §6 is not applicable to the hypoplastic case; all non-equilibrium results, i.e., those from §§4-5, of course still apply.

Formally, at least, one can deal with this difficulty by generalizing the notion of thermodynamic equilibrium presented in the last section to one of “quasi-equilibrium” with the help of so-called non-standard analysis (e.g., Robert [19]). In particular, this involves a generalization of the limit (3.58) to the form

$$\hat{C}|_{\text{QE}}(\mathbf{e}, \boldsymbol{\epsilon}) := \lim_{n \rightarrow \boldsymbol{\epsilon}} \hat{C}(\mathbf{e}, n) \quad (3.89)$$

with $\boldsymbol{\epsilon} := (\mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{A})$, $\mathbf{A}$ being an element of the set of all *infinitesimal* symmetric tensors, i.e., symmetric tensors whose magnitude is *infinitely near* (but not equal to) zero. In the context of non-standard analysis, such quantities are indicated by the notation $\mathbf{A} \simeq \mathbf{0}$, where $\mathbf{0}$ represents the unique “standard” infinitesimal (i.e., number, vector, tensor). Analogous to (3.57), we then have

$$\hat{C}_{\text{QN}}(\mathbf{e}, n, \boldsymbol{\epsilon}) := \hat{C}(\mathbf{e}, n) - \hat{C}|_{\text{QE}}(\mathbf{e}, \boldsymbol{\epsilon}) \quad . \quad (3.90)$$

In particular, (3.86) and (3.89) imply that $\hat{\Phi}_{\text{QE}}$ is infinitesimal, i.e., $\hat{\Phi}_{\text{QE}} \simeq \mathbf{0}$. Likewise, $\pi_{\text{QE}} \simeq 0$ follows from (3.52) and (3.86) via (3.89). The corresponding analysis of thermodynamic quasi-equilibrium is then based on the generalization²

$$\hat{\pi}(x) \simeq \hat{\pi}_{,n}(\mathbf{e}, \boldsymbol{\epsilon}) \cdot (n - \boldsymbol{\epsilon}) + \frac{1}{2} (n - \boldsymbol{\epsilon}) \cdot \hat{\pi}_{,nn}(\mathbf{e}, \boldsymbol{\epsilon}) (n - \boldsymbol{\epsilon}) + \cdots \quad (3.91)$$

²The notation $a \simeq b$ indicates that $a = b + \epsilon$, with ϵ infinitesimal.

of (3.63), with

$$\begin{aligned}\pi_{,n}|_{\text{QE}} &\simeq \mathbf{0} , \\ \pi_{,nn}|_{\text{QE}} &\simeq \text{non-negative definite} ,\end{aligned}\tag{3.92}$$

the corresponding generalizations of (3.64). In particular, the second of these last conditions means that $\pi_{,nn}|_{\text{QE}}$ is infinitely close to being non-negative definite. On this basis, then, all results of the previous section generalize accordingly; in particular,

$$\begin{aligned}\mathbf{T}_{\text{QE}} &\simeq \varrho \langle \psi_{,\mathbf{B}}, \mathbf{B} \rangle + \varrho (\boldsymbol{\Phi}_{,\mathbf{D}})^{\text{T}}|_{\text{QE}} \psi_{,\mathbf{Z}} \\ &\simeq \varrho \langle \psi_{,\mathbf{B}}, \mathbf{B} \rangle + \varrho \mathbf{L}^{\text{T}} \psi_{,\mathbf{Z}} + (\mathbf{N} \cdot \psi_{,\mathbf{Z}}) \text{dir}(\mathbf{A})\end{aligned}\tag{3.93}$$

generalizes the equilibrium form (3.77) for the *Cauchy* stress to the case of quasi-equilibrium, the second expression following from (3.86).

Comparing in particular (3.93) to previous work, one sees that it represents a thermodynamic generalization of models for the “quasi-static” stress in granular materials discussed by *McTigue* [16], *Sayed & Savage* [22], and especially *Goddard* [3]. Comparing the current formulation with this latter work, one establishes in particular that $\text{dir}(\mathbf{A})$ appearing in (3.93) is nothing other than the (quasi-equilibrium form) of the so-called versor

$$\mathbf{E} := \text{dir}(\mathbf{D})\tag{3.94}$$

of *Goddard* [3]. Consequently, such models represent special cases of the hypoplastic approach. These models were formulated from the point of view that the corresponding special cases of $\mathbf{T}_{\text{QE}}$ obtained by them should describe the stress in a granular material that is “at failure” everywhere as $\mathbf{D}$ “vanishes”. The remaining “kinetic” (i.e., non-equilibrium) part $\mathbf{T}_{\text{QN}}$ of $\mathbf{T}$ then determines any rate-dependent behaviour of the granular material, and in particular that in the grain-inertia regime of *Bagnold* [1]. For both cases considered in this section, the corresponding constitutive model obtained for $\mathbf{T}$ represents an elastoviscoplastic type of material behaviour. As shown in the special case of (3.93) considered by *Goddard* [3], such models for $\mathbf{T}_{\text{QE}}$ can account for both *Mohr-Coulomb* or more general yield-type behaviour as well as normal-stress effects. A yet more encompassing formulation of such material behaviour would involve of course stability considerations, the subject of future work.

Acknowledgements. We thank I.-S. Liu for reviewing the first version of the paper and providing many helpful comments leading to its improvement. This work was partially supported by the Max Planck Society and the Alexander von Humboldt Foundation.

Bibliography

- [1] R. A. Bagnold. Experiments on a gravity free dispersion of large solid spheres in a newtonian fluid under shear. *Proc. Roy. Soc. London*, A225:49–63, 1954.
- [2] R. O. Davis and G. Mullenger. A rate-type constitutive model for soil with a critical state. *Int. J. Numer. Anal. Methods Geomech.*, 2:255–282, 1978.
- [3] J. D. Goddard. Dissipative materials as constitutive models for granular materials. *Acta Mech.*, 63:3–13, 1986.

- [4] D. C. Goodman and S. Cowin. A theory of granular materials. *Arch. Rat. Mech. Anal.*, 44:249–266, 1972.
- [5] J. M. N. T. Gray, M. Weiland, and K. Hutter. Gravity-driven free surface flow of granular avalanches over complex topography. *Proc. Roy. Soc. London*, in press, 1999.
- [6] G. Gudehus. A comparison of some constitutive laws for soils under radially symmetric loading and unloading. In W. Wittke, editor, *Proceedings of the 3rd International Conference on Numerical Methods in Geomechanics*, pages 1309–1323, 1979.
- [7] G. Gudehus. A comprehensive constitutive relation for granular materials. *Soils and Foundations*, 36:1–12, 1996.
- [8] H. Herrmann and S. Luding. Modeling granular media on the computer. *Cont. Mech. Thermodyn.*, 10:189–231, 1998.
- [9] K. Hutter and K. R. Rajagopal. On flows of granular materials. *Cont. Mech. Thermodyn.*, 6:81–139, 1994.
- [10] J. G. Jenkins and M. W. Richman. Grad’s 13-moment system for a dense gas of inelastic spheres. *Arch. Rat. Mech. Anal.*, 87:355–377, 1985.
- [11] D. Kolymbas. An outline of hypoplasticity. *Ing. Arch.*, 61:143–151, 1991.
- [12] D. Kolymbas. Introduction to hypoplasticity. In D. Kolymbas, editor, *Modern Approaches to Plasticity*, pages 213–223, 1993.
- [13] I.-S. Liu. Method of Lagrange multipliers for exploitation of the entropy principle. *Arch. Rat. Mech. Anal.*, 46:131–148, 1972.
- [14] I.-S. Liu. On entropy flux-heat flux relations in thermodynamics with Lagrange multipliers. *Cont. Mech. Thermodyn.*, 8:247–256, 1996.
- [15] C. K. K. Lun, S. B. Savage, D. J. Jeffrey, and N. Chepurniy. Kinetic theories for granular flow: inelastic particles in couette flow and slightly inelastic particles in a general flow field. *J. Fluid Mech.*, 140:223–256, 1984.
- [16] D. F. McTigue. A non-linear constitutive model for granular materials: application to gravity flow. *J. Appl. Mech.*, 49:291–296, 1982.
- [17] I. Müller. *Thermodynamics*. Pitmann, 1985.
- [18] M. Pitteri. Continuum equations of balance in classical statistical mechanics. *Arch. Rat. Mech. Anal.*, 94:291–305, 1986.
- [19] A. Robert. *Non-standard Analysis*. John Wiley & Sons, 1988.
- [20] M. A. Romano. A continuum theory for granular media with a critical state. *Arch. Mech.*, 20:1011–1028, 1974.
- [21] S. B. Savage and K. Hutter. The motion of a finite mass of granular material down a rough incline. *J. Fluid Mech.*, 199:177–215, 1989.
- [22] M. Sayed and S. B. Savage. Rapid gravity flows of cohesionless granular materials down incline chutes. *ZAMP*, 34:84–100, 1983.

- [23] A. Stutz. Comportment elasto-plastique des milieux granulairesn. In A. Sawczuk, editor, *Foundations of Plasticity*, pages 22–49, Noordhoff, 1972.
- [24] B. Svendsen. A statistical mechanical formulation of continuum fields and balance relations for granular and other materials with internal degrees of freedom. In K. Hutter and K. Wilanski, editors, *Kinetic and continuum theories of granular and porous media*, volume 400 of *CISM International Centre for Mechanical Sciences*. Springer-Verlag, 1999.
- [25] B. Svendsen and K. Hutter. On the thermodynamics of a mixture of isotropic materials with constraints. *Int. J. Engrg. Sci.*, 33:2021–2054, 1995.
- [26] W. Wu, E. Bauer, and D. Kolymbas. Hypoplastic constitutive model with critical state for granular materials. *Mech. Mat.*, 23:45–69, 1996.

4

Ein vereinfachtes binäres Modell mit kompressiblen und inkompressiblen Phasen

J. Bluhm

Fachgebiet Mechanik, FB 10 – Bauwesen

Universität-GH-Essen

D-45141 Essen

4.1 Einführung

In dieser Arbeit wird ein vereinfachtes binäres Modell zur Beschreibung saturierter poröser Medien vorgestellt. Das Porenfluid (Flüssigkeit oder Gas) als auch der elastische Festkörper können kompressibel bzw. inkompressibel sein. Für die vier Modellvarianten (kompressibles Modell, hybrides Modell Typ 1, hybrides Modell Typ 2 und inkompressibles Modell) werden die konstitutiven Gleichungen diskutiert, wobei lediglich isotherme Prozesse betrachtet werden.

4.2 Feldgleichungen

Die reale Dichte $\rho^{\alpha R}$ der Konstituierenden φ^α ($\alpha = S = \text{Solid}$, $F = \text{Fluid}$: Festkörper, Flüssigkeit bzw. Gas) eines porösen Mediums an der Stelle $\mathbf{x}$ zum Zeitpunkt t der aktuellen Konfiguration des betrachteten Kontrollraums ist definiert als die auf das Partialvolumenelement dv^α bezogene Masse dM^α . Die Partialdichte ρ^α von φ^α ist die auf das Volumenelement dv bezogene Masse. Mit Hilfe des Volumenanteils $n^\alpha = dv^\alpha/dv$ läßt sich der Zusammenhang zwischen diesen beiden Dichten bezüglich des Festkörpers und des Porenfluids (Flüssigkeit oder Gas) herstellen:

$$\rho^S = n^S \rho^{SR} \quad , \quad \rho^F = n^F \rho^{FR} \quad . \quad (4.1)$$

Bei Vernachlässigung von Massenaustauschprozessen und thermischen Effekten wird das Verhalten von flüssigkeits- oder gasgefüllten porösen Festkörpern durch die folgenden lokalen Aussagen der Massenbilanzen und den Bilanzen der Bewegungsgrößen bezüglich der Konstituierenden φ^S und φ^F ,

$$(\rho^S)'_S + \rho^S \operatorname{div} \mathbf{x}'_S = 0 \quad , \quad (\rho^F)'_F + \rho^F \operatorname{div} \mathbf{x}'_F = 0 \quad (4.2)$$

und

$$\operatorname{div} \mathbf{T}^S + \rho^S (\mathbf{b} - \mathbf{x}''_S) = -\hat{\mathbf{p}}^S \quad , \quad \operatorname{div} \mathbf{T}^F + \rho^F (\mathbf{b} - \mathbf{x}''_F) = -\hat{\mathbf{p}}^F \quad , \quad (4.3)$$

sowie der Saturierungsbedingung

$$\mathbf{n}^S + \mathbf{n}^F = \mathbf{1} \quad . \quad (4.4)$$

beschrieben. In diesen Gleichungen ist $\mathbf{T}^\alpha = (\mathbf{T}^\alpha)^T$ der partielle Cauchysche Spannungstensor, $\mathbf{x}'_\alpha$ die Geschwindigkeit, $\mathbf{x}''_\alpha$ die Beschleunigung und $\mathbf{b}$ die eingeprägte Beschleunigung der Konstituierenden φ^α . Die Symmetrieeigenschaft des Spannungstensors $\mathbf{T}^\alpha$ ist das Ergebnis der Drallbilanz bezüglich φ^α (es werden nicht-polare Konstituierende vorausgesetzt). Der Ausdruck „div“ steht für den Divergenz-Operator und das Symbol $(\dots)'_\alpha$ kennzeichnet die materielle Zeitableitung entlang der Bewegungstrajektorie von φ^α . Die Größe $\hat{\mathbf{p}}^\alpha$ in (4.3) ist der lokalen Zuwachsterm der Bewegungsgröße von φ^α , der durch die Existenz der übrigen $\kappa - 1$ Konstituierenden verursacht wird, die zum Zeitpunkt t ebenfalls die Position $\mathbf{x}$ einnehmen. Mit der Annahme, daß die Summation der Bilanzen der Bewegungsgrößen über alle κ Konstituierenden formal in die Bilanz der Bewegungsgröße eines Einkomponentenmaterials übergehen muß, ergibt sich die Restriktion

$$\hat{\mathbf{p}}^S + \hat{\mathbf{p}}^F = \mathbf{0} \quad (4.5)$$

für die lokalen Bewegungsgrößenzuwächse für das binäre Modell. Eine detaillierte Diskussion der Bilanzgleichungen ist z. B. *de Boer & Ehlers* [9], *Ehlers* [10] oder *de Boer* [7] zu entnehmen.

4.3 Konstitutive Beziehungen

Die im folgenden diskutierten binären Modelle werden durch $(2+2+6+1+3 =) 14$ Feldgleichungen beschrieben, siehe (4.1) – (4.5). Die Anzahl der in den Gleichungen auftretenden Feldgrößen beläuft sich auf 33:

$$\mathcal{F} = \{ \mathbf{T}^S, \mathbf{T}^F, \chi_S, \chi_F, \hat{\mathbf{p}}^S, \hat{\mathbf{p}}^F, \mathbf{b}, \rho^S, \rho^F, \rho^{SR}, \rho^{LR}, \mathbf{n}^S, \mathbf{n}^F \} \implies \mathcal{V}^{33} \quad . \quad (4.6)$$

Die Geschwindigkeit $\mathbf{x}'_\alpha$ und die Beschleunigung $\mathbf{x}''_\alpha$ der Konstituierenden φ^α werden in (4.6) durch die Bewegungsfunktion $\chi_\alpha = \chi_\alpha(\mathbf{x}, t)$ repräsentiert. Des weiteren wurden die Symmetrieeigenschaften der Cauchyschen Spannungstensoren berücksichtigt ($\mathbf{T}^\alpha \Rightarrow \mathcal{V}^6$).

Um das Gleichungssystem zu schließen, d. h. die Anzahl der Feldgleichungen ist gleich mit der Anzahl der unbekannten Feldgrößen, ist es erforderlich, zusätzliche Gleichungen zu formulieren. Im Rahmen dieser Arbeit werden im Gegensatz z. B. zu den Arbeiten

von *Bowen* [4], *Passman et al.* [13] und *Ehlers* [11] ausschließlich konstitutive Beziehungen verwendet. Nachstehend werden die bekannten, die konstitutiven und die unbekannten Feldgrößen der vier unterschiedlichen binären Modelle in den Listen $\mathcal{B}_{(\dots)}$, $\mathcal{K}_{(\dots)}$ und $\mathcal{U}_{(\dots)}$ zusammengefaßt:

– Model A: kompressibles Modell (kompressibler Festkörper, kompressibles Porenfluid)

$$\begin{aligned}\mathcal{B}_A &= \{ \mathbf{b}, \rho_{0S}^{\text{SR}} \} & \implies & \mathcal{V}^4, \\ \mathcal{K}_A &= \{ \mathbf{T}^S, \mathbf{T}^F, \hat{\mathbf{p}}^F, J_{\text{SR}} \} & \implies & \mathcal{V}^{16}, \\ \mathcal{U}_A &= \{ \chi_S, \chi_F, \hat{\mathbf{p}}^S, \rho^S, \rho^F, \rho^{\text{FR}}, n^S, n^F \} & \implies & \mathcal{V}^{14}.\end{aligned}\tag{4.7}$$

– Model B: hybrides Modell Typ 1 (kompressibler Festkörper, inkompressibles Porenfluid)

$$\begin{aligned}\mathcal{B}_B &= \{ \mathbf{b}, \rho_{0S}^{\text{SR}}, \rho^{\text{FR}} = \text{konst.} \} & \implies & \mathcal{V}^5, \\ \mathcal{K}_B &= \{ \mathbf{T}^S, \mathbf{T}^F, \hat{\mathbf{p}}^F \} & \implies & \mathcal{V}^{15}, \\ \mathcal{U}_B &= \{ \chi_S, \chi_F, \hat{\mathbf{p}}^S, \rho^S, \rho^F, J_{\text{SR}}, n^S, n^F \} & \implies & \mathcal{V}^{14}.\end{aligned}\tag{4.8}$$

– Model C: hybrides Modell Typ 2 (inkompressibler Festkörper, kompressibles Porenfluid)

$$\begin{aligned}\mathcal{B}_C &= \{ \mathbf{b}, \rho_{0S}^{\text{SR}}, J_{\text{SR}} = 1 \} & \implies & \mathcal{V}^5, \\ \mathcal{K}_C &= \{ \mathbf{T}^S, \mathbf{T}^F, \hat{\mathbf{p}}^F \} & \implies & \mathcal{V}^{15}, \\ \mathcal{U}_C &= \{ \chi_S, \chi_F, \hat{\mathbf{p}}^S, \rho^S, \rho^F, \rho^{\text{FR}}, n^S, n^F \} & \implies & \mathcal{V}^{14}.\end{aligned}\tag{4.9}$$

– Model D: inkompressibles Modell (inkompressibler Festkörper, inkompressibles Porenfluid)

$$\begin{aligned}\mathcal{B}_D &= \{ \mathbf{b}, \rho_{0S}^{\text{SR}}, J_{\text{SR}} = 1, \rho^{\text{FR}} = \text{konst.} \} & \implies & \mathcal{V}^6, \\ \mathcal{K}_D &= \{ \mathbf{T}^S, \mathbf{T}^F, \hat{\mathbf{p}}^F \} & \implies & \mathcal{V}^{15}, \\ \mathcal{U}_D &= \{ \chi_S, \chi_F, \hat{\mathbf{p}}^S, \rho^S, \rho^F, n^S, n^F, \tilde{\kappa} \} & \implies & \mathcal{V}^{14}.\end{aligned}\tag{4.10}$$

Man erkennt, daß für alle vier Modelle die Anzahl der Gleichungen mit der Anzahl der unbekannten Feldgrößen übereinstimmt. Dabei wurde bei dem inkompressiblen Modell (Modell D) eine zusätzliche unbekannte Feldgröße ($\tilde{\kappa}$) eingeführt, um das Gleichungssystem zu schließen. Diese Größe ist im mathematischen Sinne als eine unbestimmte Feldgröße zu verstehen, die einer überzähligen Gleichung des Modells zugeordnet ist, nämlich der Saturierungsbedingung. Es ist zu erwähnen, daß die in (4.1)₁ auftretende Größe ρ^{SR} ausgedrückt werden kann mit Hilfe der Größen ρ_{0S}^{SR} und J_{SR} ($\rho^{\text{SR}} = \rho_{0S}^{\text{SR}}/J_{\text{SR}}$), wobei ρ_{0S}^{SR} die reale Dichte des Festkörpers an der Stelle $\mathbf{X}_S$ der Referenzplatzierung von φ^S zum Zeitpunkt $t = t_0$ kennzeichnet, und J_{SR} ist die Determinante des realistischen Deformationsanteil $\mathbf{F}_{\text{SR}}$ des Deformationsgradienten $\mathbf{F}_S = \mathbf{F}_{\text{SN}}\mathbf{F}_{\text{SR}}$ des Festkörpers. Bezüglich der zuvor erwähnten Zerlegung von $\mathbf{F}_S$ wird auf *Bluhm & de Boer* [3] und *Bluhm* [1] verwiesen.

Restriktionen bezüglich der konstitutiven Feldgrößen lassen sich in Verbindung mit der Festlegung von Prozeßvariablen mit Hilfe der Entropiegleichung für die Mischung unter

Einbeziehung der Saturierungsbedingung herleiten, siehe *de Boer* [7]. Die nachstehenden konstitutiven Beziehungen für die Spannungen des Festkörpers und des Porenfluids erfüllen die zuvor erwähnte Ungleichung, sie sind allerdings im Hinblick auf gewisse Abhängigkeiten, auf die noch eingegangen wird, einschränkend angesetzt worden:

– Model A: kompressibles Modell (kompressibler Festkörper, kompressibles Porenfluid)

$$\begin{aligned} \mathbf{T}^S &= -n^S p \left(1 - \frac{J_S}{J_{SR}} \frac{\partial J_{SR}(J_S)}{\partial J_S} \right) \mathbf{I} + 2\rho^S \mathbf{F}_S \frac{\partial \psi^S(\mathbf{C}_S)}{\partial \mathbf{C}_S} \mathbf{F}_S^T, \\ \mathbf{T}^F &= -n^F p \mathbf{I}, \quad p = (\rho^{FR})^2 \frac{\partial \psi^F(\rho^{FR})}{\partial \rho^{FR}}. \end{aligned} \quad (4.11)$$

– Model B: hybrides Modell Typ 1 (kompressibler Festkörper, inkompressibles Porenfluid)

$$\begin{aligned} \mathbf{T}^S &= -n^S p \mathbf{I} + 2\rho^S \mathbf{F}_S \frac{\partial \psi^S(\mathbf{C}_S, J_{SR})}{\partial \mathbf{C}_S} \mathbf{F}_S^T, \\ \mathbf{T}^F &= -n^F p \mathbf{I}, \quad p = -\rho^{SR} J_{SR} \frac{\partial \psi^S(\mathbf{C}_S, J_{SR})}{\partial J_{SR}}. \end{aligned} \quad (4.12)$$

– Model C: hybrides Modell Typ 2 (inkompressibler Festkörper, kompressibles Porenfluid)

$$\begin{aligned} \mathbf{T}^S &= -n^S p \mathbf{I} + 2\rho^S \mathbf{F}_S \frac{\partial \psi^S(\mathbf{C}_S)}{\partial \mathbf{C}_S} \mathbf{F}_S^T, \\ \mathbf{T}^F &= -n^F p \mathbf{I}, \quad p = (\rho^{FR})^2 \frac{\partial \psi^F(\rho^{FR})}{\partial \rho^{FR}}. \end{aligned} \quad (4.13)$$

– Model D: inkompressibles Modell (inkompressibler Festkörper, inkompressibles Porenfluid)

$$\mathbf{T}^S = -n^S p \mathbf{I} + 2\rho^S \mathbf{F}_S \frac{\partial \psi^S(\mathbf{C}_S)}{\partial \mathbf{C}_S} \mathbf{F}_S^T, \quad \mathbf{T}^F = -n^F p \mathbf{I}. \quad (4.14)$$

In den Beziehungen (4.11) – (4.14) kennzeichnen ψ^α die freie Helmholtzsche Energie der Konstituierenden φ^α , $\mathbf{C}_S = \mathbf{F}_S^T \mathbf{F}_S$ den rechten Cauchy Greenschen Deformationstensor und p den Porenfluiddruck. Dieser entspricht der unbestimmten Größe $\tilde{\kappa}$ beim Modell D, siehe (4.10)₃. Die zuvor erwähnten Einschränkungen in bezug auf die Spannungen beziehen sich im wesentlichen darauf, daß für die Fluid- bzw. Festkörperphase die mögliche Abhängigkeit der freien Helmholtzsche Energie ψ^L bzw. ψ^S von ρ^L und ρ^S bzw. ρ^L vernachlässigt wurde. Diese Einschränkungen sind nach Meinung des Verfassers für das hier diskutierte binäre Modell sinnvoll, für ein ternäres Modell (Festkörper, Flüssigkeit und Gas) sind sie jedoch zu restriktiv, will man z. B. Effekte wie Kapillarität erfassen, siehe *de Boer* [5, 6].

Für die freie Helmholtzsche Energie des Festkörpers, wobei isotropes Materialverhalten vorausgesetzt wird, wird der folgende Ansatz in Abhängigkeit der ersten Invariante von $\mathbf{C}_S$ ($I_{C_S} = \mathbf{C}_S \cdot \mathbf{I}$) und den Jacobi-Determinanten $J_S = \det \mathbf{F}_S$ und $J_{SR} = \det \mathbf{F}_{SR}$ postuliert:

$$\psi^S = \hat{\psi}^S = \hat{\psi}_E^S(I_{C_S}, J_S) + \underbrace{\hat{\psi}_p^S(J_S, J_{SR})}_{\text{n. e. (A, C, D)}} \quad (4.15)$$

mit

$$\begin{aligned}\hat{\psi}_E^S &= \frac{1}{\rho_{0S}^S} \left\{ \lambda_{cp}^S \left[\frac{1}{2} (\ln J_S)^2 + \xi^S \right] - \mu^S \ln J_S + \frac{1}{2} \mu^S (I_{C_S} - 3) \right\} , \\ \hat{\psi}_p^S &= \underbrace{\frac{1}{2 \rho_{0S}^S} n_{0S}^S \lambda_{cp}^S k_p \left(\ln \frac{J_{SR}}{J_S^{k^S/k^{SR}}} \right)^2}_{\text{n. e. (A, C, D)}} .\end{aligned}\quad (4.16)$$

Der Anteil $\hat{\psi}_p^S$ ist lediglich für das Modell B (hybrides Modell Typ 1) in Ansatz zu bringen, d. h. $\hat{\psi}_p^S$ existiert nicht für die Modelle A, C und D (n. e.: nicht existent). Die Größe ξ^S in (4.16)₁ steht für den Ausdruck

$$\xi^S = J_{cp}^S \ln J_S + \frac{1 - J_{cp}^S}{J_{cp}^S - 2} \left[\ln \frac{J_{cp}^S - J_S}{J_S (J_{cp}^S - 1) - J_{cp}^S} - \ln(1 - J_{cp}^S) \right] . \quad (4.17)$$

In (4.17) stehen die Größen ρ_{0S}^S und n_{0S}^S für die Dichte und den Volumenanteil des Festkörpers an der Stelle $\mathbf{X}_S$ der Referenzplatzierung von φ^S zum Zeitpunkt $t = t_0$. Des weiteren kennzeichnen μ^S , λ_{cp}^S und k^S die makroskopischen Lamé Konstanten und den makroskopische Kompressionsmodul der Konstituierenden φ^S ; k^{SR} ist der Kompressionsmodul des realen Festkörpers, und k_p ist zu verstehen als ein Kompressionsmodul, mit dessen Hilfe das volumetrische Deformationsverhalten des realen Festkörpermateri als in Abhängigkeit vom Porendruck p gesteuert werden kann. Die Größe J_{cp}^S ($0 \leq J_{cp}^S \leq 1$) in (4.17) ist dem sogenannten Kompressionspunkt des Festkörpers zugeordnet, d. h. $J_{cp}^S = 0$ bzw. $J_{cp}^S = n_{0S}^S$ für einen kompressiblen bzw. einen inkompressiblen Festkörper. Anzumerken ist, daß λ_{cp}^S im Gegensatz zu μ^S und k^S vom Kompressionspunkt des Materials abhängt.

Mit der additiven Zerlegung der freien Helmholtzschen Energie ψ^S läßt sich der aus ψ^S resultierende Anteil von $\mathbf{T}^S$, der im folgenden als klassischer Cauchyscher Spannungstensor bezeichnet wird ($\mathbf{T}_C^S$, C: classic), in die beiden Anteile

$$\mathbf{T}_C^S = 2 \rho^S \mathbf{F}_S \frac{\partial \hat{\psi}^S}{\partial \mathbf{C}_S} \mathbf{F}_S^T = 2 \rho^S \mathbf{F}_S \frac{\partial \hat{\psi}_E^S}{\partial \mathbf{C}_S} \mathbf{F}_S^T + \underbrace{2 \rho^S \mathbf{F}_S \frac{\partial \hat{\psi}_p^S}{\partial \mathbf{C}_S} \mathbf{F}_S^T}_{\text{n. e. (A, C, D)}} \quad (4.18)$$

aufspalten. Der erste Anteil ist der sogenannte effektive Cauchysche Spannungstensor,

$$\mathbf{T}_E^S = 2 \rho^S \mathbf{F}_S \frac{\partial \hat{\psi}_E^S}{\partial \mathbf{C}_S} \mathbf{F}_S^T = \frac{1}{J_S} [2 \mu^S \mathbf{K}_S + \lambda_{cp}^S (\ln J_S + \zeta^S) \mathbf{I}] , \quad (4.19)$$

der zweite Anteil

$$\mathbf{T}_p^S = 2 \rho^S \mathbf{F}_S \frac{\partial \hat{\psi}_p^S}{\partial \mathbf{C}_S} \mathbf{F}_S^T = \underbrace{- \frac{1}{J_S} n_{0S}^S \lambda_{cp}^S k_p \frac{k^S}{k^{SR}} \ln \frac{J_{SR}}{J_S^{k^S/k^{SR}}} \mathbf{I}}_{\text{n. e. (A, C, D)}} , \quad (4.20)$$

der nur für das Modell B existiert, ist, wie noch gezeigt wird, dem Porenfluiddruck p zugeordnet. In (4.19) kennzeichnet

$$\mathbf{K}_S = \frac{1}{2} (\mathbf{B}_S - \mathbf{I}) = \frac{1}{2} (\mathbf{F}_S \mathbf{F}_S^T - \mathbf{I}) \quad (4.21)$$

den Karni-Reiner Verzerrungstensor bezüglich der aktuellen Plazierung von φ^S , die Größe ζ^S steht für

$$\zeta^S = J_{cp}^S \left(1 - \frac{J_S}{J_S^2 + \frac{(J_{cp}^S)^2}{1 - J_{cp}^S} (J_S - 1)} \right) . \quad (4.22)$$

Wie bereits erwähnt, ist der Spannungsanteil $\mathbf{T}_p^S$ dem Porenfluiddruck zugeordnet. Bei Beachtung von (4.12)₃, (4.15) und (4.16)₂ läßt sich der Porenfluiddruck für das Modell B darstellen als

$$p = -\rho^{SR} J_{SR} \frac{\partial \hat{\psi}^S}{\partial J_{SR}} = -\rho^{SR} J_{SR} \frac{\partial \hat{\psi}_p^S}{\partial J_{SR}} = \underbrace{-\frac{1}{J_{SR}} \lambda_{cp}^S k_p \ln \frac{J_{SR}}{J_S^{k^S/k^{SR}}}}_{\text{n. e. (A, C, D)}} , \quad (4.23)$$

wobei die Beziehungen $J_{SR} = \rho_{0S}^{SR}/\rho^{SR}$ und $\rho_{0S}^S = n_{0S}^S \rho_{0S}^{SR}$ verwendet wurden. Ein Vergleich von (4.23) mit (4.20) liefert

$$\mathbf{T}_p^S = \underbrace{\frac{J_{SR}}{J_S} n_{0S}^S \frac{k^S}{k^{SR}} p \mathbf{I}}_{\text{n. e. (A, C, D)}} = n^S \frac{k^S}{k^{SR}} p \mathbf{I} . \quad (4.24)$$

Für das Modell A (kompressibler Festkörper, kompressibles Porenfluid) ist die Größe J_{SR} als konstitutive Feldgröße postuliert worden, siehe (4.7)₂. Mit dem Ansatz

$$J_{SR} = (J_S)^m , \quad m = \frac{k^S}{k^{SR}} , \quad (4.25)$$

siehe *Bluhm & de Boer* [2] und *de Boer & Bluhm* [8], und der daraus resultierenden Beziehung

$$J_S J_{SR}^{-1} \frac{\partial J_{SR}}{\partial J_S} = \frac{k^S}{k^{SR}} \quad (4.26)$$

ergibt sich unter Einbeziehung von (4.24) für die Modelle mit kompressiblem Festkörper (Modelle A und B) der folgende Cauchy Spannungstensor:

$$\mathbf{T}^S = -n^S p \left(1 - \frac{k^S}{k^{SR}} \right) \mathbf{I} + \mathbf{T}_E^S . \quad (4.27)$$

Die Form (4.27) geht auf *Suklje* [15] zurück; ihre Gültigkeit wurde experimentell von *Lade & de Boer* [12] bestätigt. Man erkennt, daß für kompressible Festkörper der mit $n^S p \mathbf{I}$ gewichtete Abminderungsfaktor der Spannungen zum einen aus dem konstitutiven Ansatz für die Größe J_{SR} (Modell A) und zum anderen aus der Berücksichtigung von J_{SR} als Prozeßvariable (Modell B) resultiert. Für inkompressible Festkörper (Modelle C und D),

d. h. $k^{\text{SR}} = \infty$, geht (4.27) über in von Terzaghis Aussage in bezug auf das Prinzip der effektiven Spannungen (von Terzaghi [16]):

$$\mathbf{T}^{\text{S}} = -n^{\text{S}} p \mathbf{I} + \mathbf{T}_{\text{E}}^{\text{S}} \quad . \quad (4.28)$$

Die Linearisierung der effektiven bzw. extra Spannungen des Festkörpers bezogen auf die Referenzkonfiguration von φ^{S} ,

$$\mathbf{S}_{\text{E}}^{\text{S}} = \mathbf{J}_{\text{S}} \mathbf{F}_{\text{S}}^{-1} \mathbf{T}_{\text{E}}^{\text{S}} \mathbf{F}_{\text{S}}^{\text{T}-1} = 2\mu^{\text{S}} \mathbf{K}_{\text{S}}^{\text{R}} + \lambda_{\text{cp}}^{\text{S}} (\ln J_{\text{S}} + \zeta^{\text{S}}) \mathbf{C}_{\text{S}}^{-1} \quad (4.29)$$

mit dem Karni-Reiner Verzerrungstensor

$$\mathbf{K}_{\text{S}}^{\text{R}} = \frac{1}{2} (\mathbf{I} - \mathbf{C}_{\text{S}}^{-1}) \quad (4.30)$$

bezogen auf die unverformte Konfiguration von φ^{S} , in der Form

$$\mathbf{S}_{\text{Elin}}^{\text{S}} = \mathbf{S}_{\text{E}}^{\text{S}} \Big|_{\mathcal{P}_0} + \frac{\partial \mathbf{S}_{\text{E}}^{\text{S}}}{\partial \mathbf{C}_{\text{S}}} \Big|_{\mathcal{P}_0} \Delta \mathbf{C}_{\text{S}} \quad , \quad (\dots) \Big|_{\mathcal{P}_0} = (\dots) \Big|_{\mathbf{C}_{\text{S}} = \mathbf{I}} \quad , \quad (4.31)$$

soll über die Struktur des Parameters $\lambda_{\text{cp}}^{\text{S}}$ Aufschluß geben. Mit

$$\mathbf{S}_{\text{E}}^{\text{S}} \Big|_{\mathcal{P}_0} = \mathbf{0} \quad , \quad \frac{\partial \mathbf{S}_{\text{E}}^{\text{S}}}{\partial \mathbf{C}_{\text{S}}} \Big|_{\mathcal{P}_0} = \mu^{\text{S}} \mathbf{I}^4 + \frac{1}{2} \lambda_{\text{cp}}^{\text{S}} \left[1 + J_{\text{cp}}^{\text{S}} \left(1 + \frac{(J_{\text{cp}}^{\text{S}})^2}{1 - J_{\text{cp}}^{\text{S}}} \right) \right] \mathbf{I} \quad (4.32)$$

und

$$\Delta \mathbf{C}_{\text{S}} = \mathbf{C}_{\text{S}} - \mathbf{C}_{\text{S}} \Big|_{\mathcal{P}_0} = \mathbf{C}_{\text{S}} - \mathbf{I} = 2 \mathbf{E}_{\text{S}} \quad , \quad (4.33)$$

d. h. daß im Rahmen der linearen Theorie der Zuwachs von $\mathbf{C}_{\text{S}}$ mit Hilfe des Lagrangeschen Verzerrungstensors $\mathbf{E}_{\text{S}} = 1/2 (\mathbf{C}_{\text{S}} - \mathbf{I})$ dargestellt werden kann, folgt aus (4.31)

$$\mathbf{S}_{\text{Elin}}^{\text{S}} = 2\mu^{\text{S}} \mathbf{E}_{\text{S}} + \lambda^{\text{S}} (\mathbf{E}_{\text{S}} \cdot \mathbf{I}) \mathbf{I} \quad . \quad (4.34)$$

Diese Form eines Stoffgesetzes Hookeschen Typs erhält man, wenn man für Lamé Konstante λ^{S} gilt:

$$\lambda^{\text{S}} = \lambda_{\text{cp}}^{\text{S}} \left[1 + J_{\text{cp}}^{\text{S}} \left(1 + \frac{(J_{\text{cp}}^{\text{S}})^2}{1 - J_{\text{cp}}^{\text{S}}} \right) \right] \quad . \quad (4.35)$$

Für kompressible Materialien ($J_{\text{cp}}^{\text{S}} = 0$) gilt $\lambda^{\text{S}} = \lambda_{\text{cp}}^{\text{S}}$ und $\zeta^{\text{S}} = 0$, siehe (4.22). Somit geht für kompressible poröse Festkörper die konstitutive Gleichung (4.19) für die effektive Spannung $\mathbf{T}_{\text{E}}^{\text{S}}$ über in die bekannte Beziehung von *Simo & Pister* [14]:

$$\mathbf{T}_{\text{E}}^{\text{S}} = \frac{1}{J_{\text{S}}} [2\mu^{\text{S}} \mathbf{K}_{\text{S}} + \lambda^{\text{S}} (\ln J_{\text{S}}) \mathbf{I}] \quad . \quad (4.36)$$

Für die Modelle A und C ist es erforderlich, eine konstitutive Beziehung für den Fluiddruck p der kompressiblen Fluidphase zu formulieren. Es wird angenommen, daß es sich bei dem kompressiblen Fluid um ein ideales Gas handelt. Mit dem Ansatz

$$\psi^F = \hat{\psi}^F = -\frac{R}{M} \Theta^F \ln \frac{1}{\rho^{FR}} \quad (4.37)$$

erhält man die bekannte Beziehung

$$p = \frac{R}{M} \Theta^F \rho^{FR} \quad , \quad (4.38)$$

vgl. *de Boer* [7]. Will man im Hinblick auf die numerische Simulation von Anfangs- und Randwertprobleme lediglich den Überdruck berücksichtigen, so ist von dem Ansatz

$$\psi^F = \hat{\psi}^F = -\frac{R}{M} \Theta^F \left(\ln \frac{1}{\rho^{FR}} - \frac{\rho_{0F}^{FR}}{\rho^{FR}} + 1 \right) \quad (4.39)$$

auszugehen. Der Überdruck ergibt sich dann zu

$$p = \tilde{p} = \frac{R}{M} \Theta^F (\rho^{FR} - \rho_{0F}^{FR}) \quad . \quad (4.40)$$

In (4.37) – (4.40) ist der Faktor $\Theta^F R/M$ eine Konstante, da lediglich isotherme Prozesse betrachtet werden. Die einzelnen Größen R , M und Θ^F sind die universelle Gaskonstante, die relative Molekülmasse und die absolute Temperatur der Fluidphase.

Zur Vervollständigung des Gleichungssystems wird noch die konstitutive Beziehung für den Interaktionsterm $\hat{\mathbf{p}}^F$ der Bilanz der Bewegungsgröße Fluid benötigt. Aus der Entropieungleichung für das binäre Modell in Verbindung mit dem Dissipationsmechanismus erhält man die folgende Beziehung für $\hat{\mathbf{p}}^F$:

$$\hat{\mathbf{p}}^F = p \operatorname{grad} n^F - \beta (\mathbf{x}'_F - \mathbf{x}'_S) \quad (4.41)$$

mit $\beta \geq 0$, siehe *Ehlers* [10].

4.4 Beispiel: leerer Festkörper

Im folgenden wird die konstitutive Beziehung bezüglich $\mathbf{T}^S$ für einen kompressiblen bzw. einen inkompressiblen leeren Festkörper diskutiert, d. h. das Porenfluid besitzt keine physikalischen Eigenschaften. Somit geht $\mathbf{T}^S$ in die effektive Spannung über ($\mathbf{T}^S = \mathbf{T}_E^S$). Das betrachtete Randwertproblem ist in Abbildung 4.1 a) dargestellt. Abbildung 4.1 b) zeigt die Last-Verschiebungs-Kurven eines kompressiblen Festkörpers und zweier inkompressibler Festkörper mit unterschiedlicher Anfangsporosität. Die Kraft ist auf die Lamé Konstante μ^S bezogen; der Faktor λ^S ist proportional zu μ^S gewählt worden ($\lambda^S = 0.6667\mu^S$, d. h. die Querkontraktionszahl ist 0,2). In der Abbildung 4.1 c) ist für den kompressiblen Festkörper der Verlauf der realistischen Volumendeformation über die Determinante von $\mathbf{F}_S$ dargestellt; das Verhältnis von k^S/k^{SR} wurde mit 1/3 angesetzt.

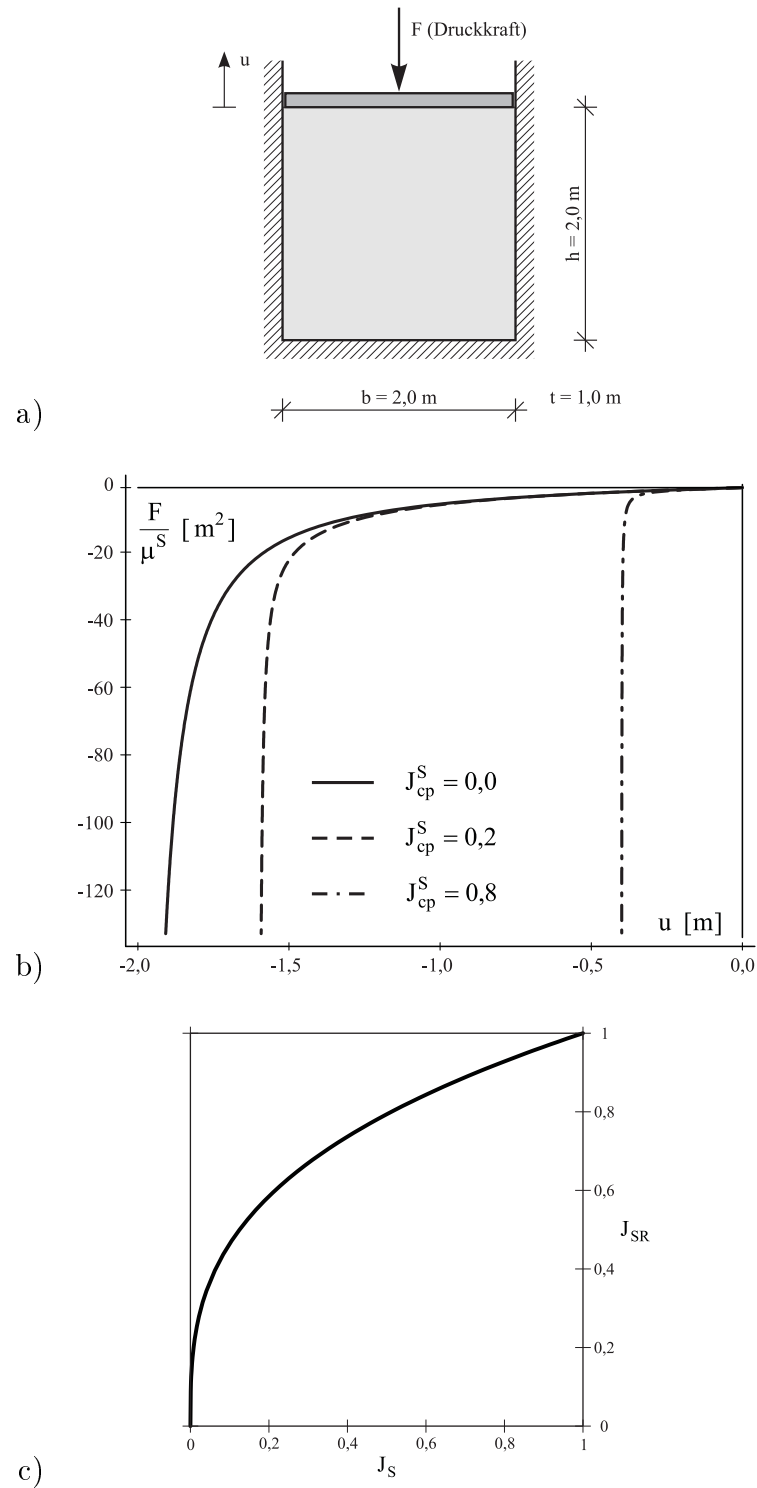


Abbildung 4.1: a) System und Belastung, b) Last-Verschiebungs-Diagramm (kompressibler und inkompressibler Festkörper), c) Verlauf von J_{SR} über J_S für $k^S/k^{SR} = 1/3$ (kompressibler Festkörper)

4.5 Schlußbemerkung

In der vorliegenden Arbeit wurden die Feldgleichungen und die konstitutiven Beziehungen zur Beschreibung eines saturierten elastischen porösen Festkörpers bei Vernachlässigung thermischer Effekte diskutiert. Die Konstituierenden des porösen Mediums können sowohl kompressibel als auch inkompressibel sein. Die Anwendbarkeit des Elastizitätsgesetzes für den Festkörper im Bereich finiter Deformationen wurde an einem Beispiel aufgezeigt.

Literaturverzeichnis

- [1] J. Bluhm. *A consistent model for saturated and empty porous media*. Band 74 aus Forschungsberichte aus dem Fachbereich Bauwesen. Universität-GH-Essen, Essen, 1997.
- [2] J. Bluhm and R. de Boer. Effective stresses – a clarification. *Arch. Appl. Mech.*, 66:479–492, 1996.
- [3] J. Bluhm and R. de Boer. The volume fraction concept in the porous media theory. *Z. angew. Math. Mech.*, 77:S563–S577, 1997.
- [4] R. M. Bowen. Compressible porous media models by use of the theory of mixtures. *Int. J. Engng. Sci.*, 20:697–735, 1982.
- [5] R. de Boer. *Capillarity in porous bodies: macromechanical investigations*. Report MECH 00/2, FB 10 Mechanik. Universität-GH-Essen, Essen, 2000.
- [6] R. de Boer. *The capillarity phenomenon in porous solids: a continuum thermomechanical approach*. Report MECH 00/1, FB 10 Mechanik. Universität-GH-Essen, Essen, 2000.
- [7] R. de Boer. *Theory of porous media – highlights in the historical development and current state*. Springer-Verlag, New York · Berlin · Heidelberg · Tokyo, 2000.
- [8] R. de Boer and J. Bluhm. The influence of compressibility on the stresses of elastic porous solids – semimicroscopic investigations. *Int. J. Solids and Structures*, 36:4805–4819, 1999.
- [9] R. de Boer and W. Ehlers. *Theorie der Mehrkomponentenkontinua mit Anwendung auf bodenmechanische Probleme, Teil I*. Band 40 aus Forschungsberichte aus dem Fachbereich Bauwesen. Universität-GH-Essen, Essen, 1986.
- [10] W. Ehlers. *Poröse Medien – ein kontinuumsmechanisches Modell auf der Basis der Mischungstheorie*. Band 47 aus Forschungsberichte aus dem Fachbereich Bauwesen. Universität-GH-Essen, Essen, 1989.
- [11] W. Ehlers. Constitutive equations for granular materials in geomechanical context. In K. Hutter, editor, *Continuum Mechanics in Environmental Sciences and Geophysics*, volume 337 of *CISM Courses and Lectures*. Springer-Verlag, Wien, 1993.
- [12] P. V. Lade and R. de Boer. The concept of effective stress for soil, concrete and rock. *Geotechnique*, 47:No. 1, 61–78, 1997.

-
- [13] S. L. Passman, J. W. Nunziato, and E. K. Walsh. A theory of multiphase mixtures. In C. Truesdell, editor, *Rational Thermodynamics*. Springer-Verlag, New York · Berlin · Heidelberg · Tokyo, 2 edition, 1984.
 - [14] J. C. Simo and K. S. Pister. Remarks on rate constitutive equations for finite deformation problems: Computational implications. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 46:201 – 215, 1984.
 - [15] L. Suklje. *Rheological aspects of soil mechanics*. Wiley Interscience, New York, 1969.
 - [16] K. von Terzaghi. The shearing resistance of saturated soils and the angle between the planes of shear. In A. Casagrande *et al.*, editor, *Proceedings of the Internationale Conference on Soil Mechanics and Foundation Engineering*, Vol. I, pages 54–56. Harvard University, 1936.

5

Zur Modellierung poröser Medien bei großen Deformationen

D. Mahnkopf
Hartmannstr. 4
D-71634 Ludwigsburg

5.1 Motivation

Poröse, fluidgesättigte, deformierbare Festkörper gewinnen zunehmend an Bedeutung für die Behandlung relevanter Probleme der Ingenieurspraxis. Es handelt sich um Materialien, die aus einem porösen Festkörperskelett bestehen, dessen Porenraum mit Flüssigkeiten oder Gasen gefüllt ist. Sie finden sich in den unterschiedlichsten Anwendungsbereichen, so z. B. in der Bodenmechanik beim Konsolidationsproblem, oder bei hochporösen Polymer- und Metallschäumen. Auch wenn die Materialien speziell im Bereich plastischer Deformation teilweise unterschiedlichstes Verhalten aufzeigen, wie z. B. Sand und Polymerschäume, ist ihnen gemein, daß das Deformationsverhalten des Festkörpers erheblich vom Porenfluid beeinflusst werden kann.

In dem Maße, wie das Interesse an porösen, fluidgefüllten Körpern steigt, gewinnt auch deren Modellierung als Grundlage der Simulation an Bedeutung. Zur Beschreibung des volumengekoppelten Festkörper-Fluid-Problems wird hier ein Zugang mit Hilfe der Theorie Poröser Medien (TPM) gewählt, vgl. *Bowen* [1], *Ehlers* [2]. Die TPM folgt aus der Mischungstheorie, einer kontinuumsmechanischen Theorie für heterogen zusammengesetzte Körper mit inneren Wechselwirkungen, ergänzt um das Konzept der Volumenanteile.

Bei der Wahl der konstitutiven Ansätze poröser Materialien sind einige Besonderheiten zu beachten. So zeigen Metall- und Polymerschäume große elastoplastische Deformationen. Dies bedingt die Beschreibung im Rahmen der geometrisch nichtlinearen Theorie. Beim Kompressionsversuch beispielsweise schließt sich an einen kleinen elastischen Bereich ein plastisches Plateau mit nahezu konstanten Spannungen und großen Volumendeformationen an, s. Abschnitt 5.6. Ihm folgt der Bereich der Verdichtung mit einem extremen Anstieg der hydrostatischen Spannungen. Hierfür wurde ein neuartiges elastoplastisches Materialgesetz entwickelt, das mit Hilfe der „strukturellen Verfestigung“ den Kompressionspunkt sicherstellt (*Mahnkopf* [12]).

Bei der Beschreibung realer Porenfluid zeigen sich sowohl inkompressible als auch idealkompressible Fluide, d. h. Fluide, die bis auf einen Punkt komprimierbar sind, wie z. B.

ideales Gas, als ungeeignet. Um deren Einfluß auf das Verhalten der gesamten Mischung möglichst realistisch abbilden zu können, wird ein kompressibles Porenfluid benötigt, das lediglich bis zu einer maximalen, kritischen Dichte komprimiert werden kann. Hierzu wird konsistent im Rahmen der TPM aufbauend auf einem kompressiblen und einem inkompressiblen Porenfluid eine Mischphase entwickelt. Bei der gesamten konstitutiven Formulierung wird Wert auf eine sehr flexible Formulierung gelegt, die der Vielzahl unterschiedlicher poröser Materialien Rechnung trägt.

5.2 Theorie poröser Medien

Die folgende Modellierung basiert auf der Theorie poröser Medien (TPM). Eine umfassende Darstellung findet sich u. a. bei *Bowen* [1] und *Ehlers* [2]. Es handelt sich dabei um die Mischungstheorie, erweitert um das Konzept der Volumenanteile, wobei die Vorstellung eines statistisch verschmierten Modells zugrunde liegt, bei dem alle Phasen, hier Festkörper und Fluid, gleichzeitig den gesamten Raum der Mischung einnehmen.



Abbildung 5.1: Verschmiertes Modell

Jeder Raumpunkt $\mathbf{x}$ wird dabei zu jedem Zeitpunkt t von Partikeln aller Konstituierenden φ^α eingenommen. Sie besitzen somit eigene Bewegungsfunktionen χ_α und eigene Deformationsgradienten $\mathbf{F}_\alpha$, der ein Maß für die lokale Deformation darstellt:

$$\mathbf{F}_\alpha = \text{Grad}_\alpha \mathbf{x} \quad , \quad \mathbf{x} = \chi_\alpha(X_\alpha, t) . \quad (5.1)$$

Ihre Anteile am Gesamtkörper werden durch den Volumenanteil

$$n^\alpha = \frac{dv^\alpha}{dv} \quad (5.2)$$

beschrieben, dem Verhältnisse der Partialvolumina dv^α zum Volumen der gesamten Mischung dv . Der Index $(\dots)^\alpha$ kennzeichnet hierbei die einzelnen Konstituierenden. Im Falle gesättigter Mischungen, die hier ausschließlich betrachtet werden, gilt zusätzlich die Sättigungsbedingung:

$$\sum_\alpha n^\alpha = 1 . \quad (5.3)$$

Das Konzept der Volumenanteile (5.2) bedingt zwei verschiedene Dichtefunktionen, die materielle oder auch effektive Dichte $\rho^{\alpha R}$ und die partiale Dichte ρ^α

$$\rho^\alpha := \frac{dm_\alpha}{dv} \quad , \quad \rho^{\alpha R} := \frac{dm_\alpha}{dv^\alpha} \quad \longrightarrow \quad \rho^\alpha = n^\alpha \rho^{\alpha R} \quad (5.4)$$

Die Unterscheidung und das Verständnis der beiden Dichtefunktionen (5.4) ist von zentraler Bedeutung für die Modellierung der konstitutiven Gleichungen - sowohl des Fluids, wie auch des Festkörpers. Da jede Phase φ^α ihre eigene Bewegungsfunktion $\chi_\alpha(X_\alpha, t)$ und somit auch eigene Geschwindigkeit

$$\dot{\mathbf{x}}_\alpha = \frac{d}{dt} \chi_\alpha(X_\alpha, t) \quad (5.5)$$

besitzt, existieren unterschiedliche Zeitableitungen. Sei ψ eine differenzierbare, skalarwertige Funktion der Variablen $\mathbf{x}$ und t , dann existiert für jede Bewegungsfunktion χ_α eine unabhängige Zeitableitung:

$$(\psi)'_\alpha = \frac{d_\alpha \psi}{dt} = \frac{\partial \psi}{\partial t} + \text{grad } \psi \cdot \dot{\mathbf{x}}_\alpha. \quad (5.6)$$

Der Operator $\text{grad}(\dots)$ bezeichnet die Ableitung nach dem Ortsvektor der aktuellen Konfiguration, und $\text{Grad}_\alpha(\dots)$ die Ableitung nach dem Ortsvektor der Referenzkonfiguration der Phase φ^α .

Eine ausführliche Darstellung der Bilanzgleichungen poröser Medien findet sich u. a. bei Ehlers [4]. Die Massen- und Impulsbilanzen der einzelnen Konstituierenden im quasistatischen Fall lauten:

$$\text{Massenbilanz} \quad (\rho^\alpha)'_\alpha + \rho^\alpha \text{div } \dot{\mathbf{x}}_\alpha = \hat{\rho}^\alpha, \quad \sum_\alpha \hat{\rho}^\alpha = 0 \quad (5.7)$$

$$\text{Impulsbilanz} \quad \rho^\alpha \ddot{\mathbf{x}}_\alpha - \text{div}(\mathbf{T}^\alpha) - \rho^\alpha \mathbf{b} = \hat{\mathbf{p}}^\alpha, \quad \sum_\alpha \hat{\mathbf{p}}^\alpha = \mathbf{0} \quad (5.8)$$

Hierin bezeichnet $(\hat{\cdot})$ die Austauschtermen zwischen den einzelnen Konstituierenden, die die Nebenbedingung (5.7)₂ bzw. (5.8)₂ erfüllen müssen. Im Falle singulärer Flächen, die die Grundlage der Lokalisierungsanalyse bilden, müssen zusätzliche Gleichungen berücksichtigt werden, vgl. Mahnkopf [12].

5.3 Konstitutive Modellierung

Es werden an dieser Stelle lediglich die getroffenen Annahmen und resultierenden Ergebnisse dargestellt. Eine umfassenden Diskussion findet sich bei u. a. bei Ehlers [2], Mahnkopf [12]. Es werden, soweit nicht ausdrücklich anders erwähnt, ausschließlich poröse Körper betrachtet, die aus zwei Phasen bestehen, dem Porenfluid φ^F und dem Festkörperskelett φ^S . Die Mischung sei darüber hinaus gesättigt.

$$dv = dv^S + dv^F. \quad (5.9)$$

Der Festkörper sei materiell inkompressibel, seine materielle Dichte ρ^{SR} somit konstant:

$$(\rho^{SR})'_S = 0. \quad (5.10)$$

Die partielle Dichte ρ^S kann sich jedoch durchaus über die Zusammensetzung der Mischung und den Volumenanteil n^S ändern (5.4). Die Annahmen bzgl. des Fluids werden im nächsten Abschnitt bei der Entwicklung der neuen Formulierung diskutiert. Die Beschreibung ist isotherm:

$$\Theta^S = \Theta^F =: \text{konst.} \quad (5.11)$$

Die Spannungen der beiden Konstituierenden φ^α können in einen Anteil proportional dem Porenfluiddruck p und den sogenannten Extraanteil $\mathbf{T}_E^\alpha$ aufgeteilt werden, vgl. Ehlers [2]

$$\mathbf{T}^\alpha = -n^\alpha p \mathbf{I} + \mathbf{T}_E^\alpha \quad (5.12)$$

für den zusätzliche konstitutive Gleichungen benötigt werden. Das Porenfluid sei nichtviskos:

$$\mathbf{T}_E^F = 2 \mu^F \mathbf{D}_F \approx \mathbf{0} \quad (5.13)$$

Das Materialmodell zur Auswertung der Extraspannungen des Festkörperskeletts wird in Abschnitt 5.5 vorgestellt. Der Impulsaustausch zwischen den Konstituierenden kann analog in zwei Anteile aufgeteilt werden:

$$\hat{\mathbf{p}}^\alpha = p \text{grad } n^F + \hat{\mathbf{p}}_E^\alpha. \quad (5.14)$$

Für den Extraanteil $\hat{\mathbf{p}}_E^\alpha$ wird der folgenden Ansatz gewählt, vgl. Ehlers [2]:

$$\hat{\mathbf{p}}_E^F = -\frac{(n^F)^2 \gamma^{FR}}{k^F} \mathbf{w}_F \quad (5.15)$$

Hierin bezeichnet k^F den Darcyschen Durchlässigkeitskoeffizienten, $\mathbf{w}_F$ die Sickergeschwindigkeit des Fluids relativ zum Festkörperskelett und $\gamma^{FR} = \|\mathbf{b}\| \rho^{FR}$ die effektive (wahre) Dichte des Fluids. Massenaustausch, wie z. B. im Falle einer schmelzenden Festkörperphase wird nicht betrachtet. Aus den Bilanzgleichungen (5.7, 5.8), die die Grundlage der numerischen Umsetzung darstellen, folgt mit den konstitutiven Annahmen:

$$\text{div} (\mathbf{T}_E^S - p \mathbf{I}) + (n^S \rho^{SR} + n^F \rho^{FR}) \mathbf{b} = \mathbf{0} \quad (5.16)$$

$$\rho^{FR} \text{div } \dot{\mathbf{x}}_S + \text{div} \left[\rho^{FR} \frac{k^F}{\gamma^{FR}} (\rho^{FR} \mathbf{b} - \text{grad } p) \right] + n^F (\rho^{FR})'_S = 0 \quad (5.17)$$

5.4 Ein neues konsistentes Fluid

Übliche Formulierungen wie z. B. ideales Gas, Van-der-Waals-Gase oder vollständig inkompressible Fluide führen im Rahmen der TPM zu z. T. unsinnigen Ergebnissen (negative Drücke), vgl. Abschnitt 5.6, Mahnkopf [12] und Zitate darin. Es wird ein Fluid benötigt, daß sowohl den materialtheoretischen Anforderungen genügt, als auch dem Verhalten realer Fluide entspricht. Sie müssen kompressibel sein, jedoch nur bis zu einer maximalen,

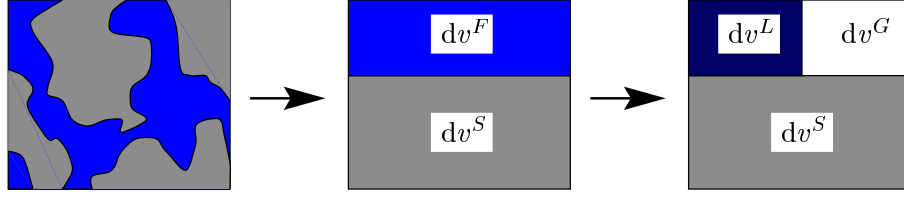


Abbildung 5.2: Verschmiertes Drei-Phasen-Modell: Mischphase

der kritischen, Dichte ρ_C^{FR} . Bei fallenden Drücken muß das Fluid sich ausdehnen und den gesamten Raum einnehmen, ohne daß negative Drücke auftreten (Kavitation). Speziell im Bereich großer Deformationen oder bei der Untersuchung von Lokalisierungsverhalten kommt diesen Gesichtspunkten eine zentrale Bedeutung zu.

Es wurde von *Mahnkopf* [12] der folgende Ansatz gewählt: Ausgehend von den Eigenschaften eines vollständig kompressiblen Fluids φ^G („Gas“) und eines inkompressiblen Fluids φ^L („Flüssigkeit bzw. Liquid“) wird die Dichtefunktion der Mischphase mit Hilfe der TPM hergeleitet. Es handelt sich dabei prinzipiell um ein Dreiphasenmodell, das aufgrund der folgenden Annahmen einer Beschreibung mittels zweier Phasen zugänglich ist. Der Index $(\dots)^F$ für die Mischphase wurde in Analogie zur bisherigen Beschreibung gewählt, da die Modellgleichungen unter Verwendung der Mischphase die gleiche Form annehmen.

Die partielle Mischungsdichte des Porenfluids ρ^F ergibt sich direkt aus der Summe der partialen Dichten der Fluide φ^G und φ^L bzw. aus der Summe ihrer materiellen Dichten, gewichtet mit ihren Volumenanteilen:

$$n^F \rho^{FR} = n^G \rho^{GR} + n^L \rho^{LR}. \quad (5.18)$$

Die materielle Dichte ρ^{LR} der Flüssigkeit ist, da materiell inkompressibel, konstant (vgl. (5.10)), während die materielle Dichte ρ^{GR} des kompressiblen Fluids einer Entwicklungsgleichung folgt, z. B. dem idealen Gasgesetz $\rho^{FR} = \rho^{FR}(p)$. Die Sättigungsbedingung (5.3) lautet für die dreiphasige Formulierung

$$1 = n^S + n^G + n^L \quad (5.19)$$

bzw. bei Betrachtung der Mischphase als Summenphase der beiden Porenfluide φ^L und φ^G im Sinne der TPM

$$1 = n^S + n^F \quad \text{mit} \quad n^F = n^G + n^L. \quad (5.20)$$

Es wird vorausgesetzt, daß keine Entmischung stattfindet und die Mischphase homogen bleibt. Die beiden Fluide φ^G und φ^L folgen somit der gleichen Bewegungsfunktion χ_F und besitzen die gleiche Geschwindigkeit:

$$\dot{\mathbf{x}}_F := \dot{\mathbf{x}}_L = \dot{\mathbf{x}}_G. \quad (5.21)$$

Dies stellt die zentrale Annahme dar, die die Mischphase in dem hier vorgestellten Modell charakterisiert! Mit der Voraussetzung, daß Massenaustausch zwischen den beiden Poren-

fluiden, wie beispielsweise beim Lösen von Gas im inkompressiblen Fluid, ausgeschlossen sind, ergeben sich die Massenbilanzen der beiden Fluide zu

$$\begin{aligned} (\rho^G)'_F + \rho^G \operatorname{div} \dot{\mathbf{x}}_F &= 0, \\ (\rho^L)'_F + \rho^L \operatorname{div} \dot{\mathbf{x}}_F &= 0. \end{aligned} \quad (5.22)$$

Die materiellen Zeitableitungen werden dabei für beide Fluide mit der Bewegung der Mischphase gebildet, vgl. (5.21). Auflösen der Massenbilanzen (5.22) nach $\operatorname{div} \dot{\mathbf{x}}_F$, Gleichsetzen und analytische Integration führt auf

$$\rho^L = \rho^G M_{LG} \quad (5.23)$$

mit der Integrationskonstanten M_{LG} , die direkt aus den Volumenanteilen und materiellen Dichten der beiden Fluide zum Zeitpunkt $t = t_0$ bestimmt werden kann:

$$M_{LG} = \left. \frac{n^L \rho^{LR}}{n^G \rho^{GR}} \right|_{t=t_0} = \frac{n_{0F}^L \rho_{0F}^{LR}}{n_{0F}^G \rho_{0F}^{GR}}. \quad (5.24)$$

M_{LG} stellt in diesem Sinne keinen zusätzlichen Materialparameter dar, der aus Versuchen bestimmt werden müßte, sondern vielmehr einen Strukturparameter, der die Zusammensetzung der Mischphase und somit ihre Eigenschaften kontrolliert. Zusammen mit der Sättigungsbedingung (5.20)₂ und (5.18) folgt nach Umformung der gewünschte Zusammenhang zwischen dessen materieller Dichte ρ^{FR} und dem Druck p

$$\boxed{\rho^{FR}(p) = \rho^{LR} \frac{1 + M_{LG}}{M_{LG} + \frac{\rho^{LR}}{\rho^{GR}(p)}}} \quad (5.25)$$

mit $\rho^{GR} = \rho^{GR}(p)$. Gegenüber rein konstitutiven Ansätzen für die Dichtefunktion der Mischphase genügt dieser Zugang automatisch den Grenzzuständen für rein kompressibles bzw. rein inkompressibles Fluid und den Grenzzuständen des Drucks $p \rightarrow 0$ und $p \rightarrow \infty$. Für rein kompressibles Fluid ($n^L = 0$, $n^G = n^F$) folgt aus (5.24) $M_{LG} = 0$ und für die materielle Dichte der Mischphase

$$\lim_{M_{LG} \rightarrow 0} \rho^{FR} = \rho^{GR}(p). \quad (5.26)$$

Für den Fall rein inkompressiblen Fluids ($n^G = 0$, $n^L = n^F$) folgt entsprechend

$$\lim_{1/M_{LG} \rightarrow 0} \rho^{FR} = \rho^{LR}. \quad (5.27)$$

Sinkt der Druck auf Null, muß die Dichte der Mischphase ebenfalls auf Null absinken. Mit der Voraussetzung, daß die materielle Dichte des kompressiblen Fluids dem genügt wie z. B. beim idealen Gasgesetz, folgt für ρ^{FR}

$$\lim_{p \rightarrow 0} \rho^{FR} = 0. \quad (5.28)$$

Steigt der Druck gegen unendlich wird die maximale bzw. kritische Dichte ρ_C^{FR} erreicht:

$$\lim_{p \rightarrow \infty} \rho^{FR} = \rho^{LR} \frac{1 + M_{LG}}{M_{LG} + \frac{\rho^{LR}}{\rho_C^{GR}}} =: \rho_C^{FR}. \quad (5.29)$$

Hierbei kennzeichnet $\rho_C^{GR} = \lim_{p \rightarrow \infty} (\rho^{GR}(p))$ die kritische Dichte des kompressiblen Fluids φ^G . Wird die materielle Dichte des kompressiblen Fluids beispielsweise über das ideale Gasgesetz beschrieben, beträgt die kritische Dichte des Gases $\rho_C^{GR} = \infty$ und die kritische Dichte ρ_C^{FR} der Mischphase lautet

$$\rho_C^{FR} = \rho^{LR} \frac{1 + M_{LG}}{M_{LG}}. \quad (5.30)$$

Da das Gas kein Volumen mehr einnimmt, wird die Gesamtmasse auf das Volumen des inkompressiblen Fluids φ^L bezogen. Sie bleibt im Gegensatz zum ideal kompressiblen Fluid endlich!

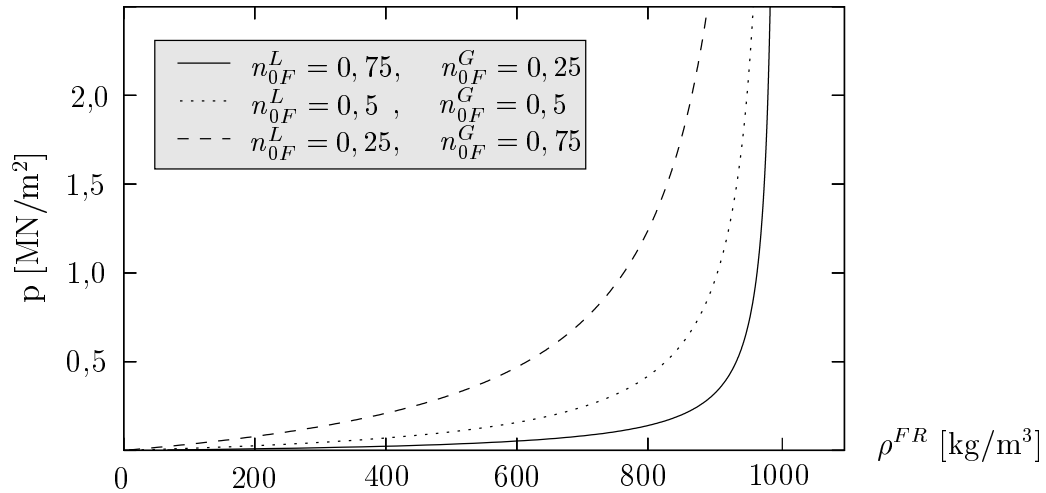


Abbildung 5.3: Entwicklung der materiellen Dichte der Mischphase in Abhängigkeit des Drucks mit $\rho^{LR} = 1000 \text{ kg/m}^3$, $R = 8,314 \text{ kJ/kmol K}$, $\Theta = 293,15^\circ \text{K}$ und $M = 28,96 \text{ kg/kmol}$.

In Abbildung 5.3 ist der Verlauf des Drucks über der materiellen Dichte des Fluids für verschiedene Zusammensetzungen der Mischphase aufgetragen. Es wurden dabei Materialparameter für Wasser und Luft verwendet. Die Summe der Volumenanteile der beiden Fluide φ^L und φ^G beträgt ohne Beschränkung der Allgemeinheit jeweils eins und die Dichte des Gases in der Referenzkonfiguration $1,293 \text{ kg/m}^3$.

Auswertung der Bilanzgleichungen

Die Massenbilanz der Mischphase folgt direkt aus der Summe der Massenbilanzen der Porenfluide (5.22):

$$\underbrace{(\rho^G + \rho^L)}_{\rho^F} \overset{!}{F} + \underbrace{(\rho^G + \rho^L)}_{\rho^F} \operatorname{div} \overset{!}{\mathbf{x}}_F = 0 \quad (5.31)$$

Sie ergibt durch Einsetzen der Definition (5.18) der materiellen Dichte der Mischphase die gleiche Form wie im Falle eines einphasigen Porenfluids s. *Mahnkopf* [12], entsprechend den *Truesdellschen* Prinzipien. Die Summe der Impulsbilanzen der beiden Porenfluide φ^G und φ^L ergibt unter Verwendung von (5.21)

$$\underbrace{(n^L \rho^{LR} + n^G \rho^{GR})}_{n^F \rho^{FR}} \overset{''}{\mathbf{x}}_F + \operatorname{div} \left[\underbrace{(n^L + n^G)}_{n^F} p \mathbf{I} \right] + \underbrace{(n^L \rho^{LR} + n^G \rho^{GR})}_{n^F \rho^{FR}} \mathbf{b} = \hat{\mathbf{p}}^F \quad (5.32)$$

Dabei wurden die konstitutiven Ansätze für die Fluidspannungen (5.12) und (5.13) für beide Porenfluide getrennt getroffen. Der Impulsaustausch wird entsprechend der physikalischen Anschauung zwischen der gesamten Mischphase φ^F und dem Festkörperskelett φ^S über (5.15) und (5.14) modelliert. Ferner wurde der Volumenkraftvektor $\mathbf{b}$ für beide Fluide gleich angenommen: $\mathbf{b}^G = \mathbf{b}^L = \mathbf{b}$. Mit der materiellen Dichte ρ^{FR} der Mischphase (5.18) und (5.20) hat die Impulsbilanz des Fluids der Mischphase wieder die identische Form wie im Falle des einphasigen, kompressiblen Porenfluids.

Das hybride Modell mit Mischphase kann auf eine zweiphasige Beschreibung reduziert werden, die mit der Beschreibung eines einzelnen, kompressiblen Porenfluids identisch ist. Es genügt für die Implementierung, die Entwicklungsgleichung der materiellen Dichte des kompressiblen Porenfluids durch (5.25) zu ersetzen.

5.5 Elastoplastisches Festkörperskelett

Zur Auswertung der Extraspannungen des Festkörperskeletts wird ein neues elastoplastisches Materialmodell verwendet, das den besonderen Anforderungen poröser Medien gerecht wird und die Abwärtskompatibilität zu konventionellen Gesetzen wart. Um eine möglichst flexible und realistische Modellierung als Grundlage der Berechnung und Simulation zu erhalten, kommt ihm eine ähnlich große Bedeutung zu wie dem des Fluids.

Der Deformationsgradient wird multiplikativ in einen elastischen und einen plastischen Anteil zerlegt:

$$\mathbf{F}_S = \mathbf{F}_{Se} \mathbf{F}_{Sp} \quad (5.33)$$

Bzgl. einer Diskussion dieses Konzeptes und der resultierenden Kinematik sei auf die umfangreiche Fachliteratur verwiesen (z. B. *Haupt* [10], *Ehlers* [2]). Bei der üblichen Metallplastizität wird von volumenneutralen Fließen ausgegangen. Mit der plastischen Volumendehnung $e_p = \det \mathbf{F}_{Sp} - 1$ und dem plastischen Deformationsgeschwindigkeitstensor $\hat{\mathbf{D}}_{Sp}$, der die Entwicklung plastischer Deformation beschreibt, erhält man für den Fall plastischer Inkompressibilität:

$$\begin{aligned} e_p &= \det \mathbf{F}_{Sp} - 1 &= \text{konst.} \\ (e_p)_S &= \det (\mathbf{F}_{Sp}) \hat{\mathbf{D}}_{Sp} \cdot \mathbf{I} &= 0 \end{aligned} \quad (5.34)$$

Im Falle poröser Medien, die z. T. erhebliche plastische Volumendeformationen aufweisen müssen die Aussagen (5.34) durch die Bedingung des Kompressionspunktes ersetzt werden.

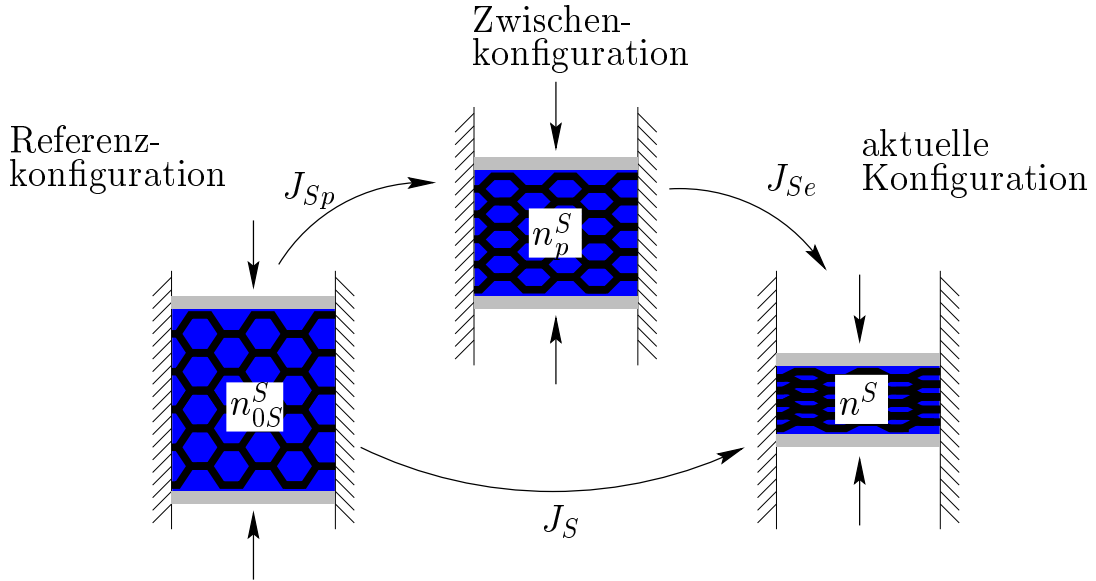


Abbildung 5.4: Elastoplastische Volumendeformation poröser Körper

In Abb. (5.5) sind die Referenzkonfiguration, die Zwischenkonfiguration und die aktuelle Konfiguration für einen Modellkörper dargestellt. Hierin bezeichnet $J_{Se} = \det \mathbf{F}_{Se}$ den elastischen und J_{Sp} den plastischen Anteil der Volumendeformation. Die elastische und plastische Volumendehnung werden gemeinsam durch den Kompressionspunkt, den Punkt der dichtesten Packung auf der aktuellen Konfiguration, beschränkt. Formal erhält man die Bedingungen

$$\boxed{\begin{aligned} n^S \leq 1 &\rightarrow J_{Se} \geq n_p^S \\ \lim_{n^S \rightarrow 1} (e_p)'_S &\geq 0 \end{aligned}} \quad (5.35)$$

die für poröse Medien anstatt der Bedingungen (5.34) im Falle isochorer Plastizität gelten. Die erste Bedingung besagt, daß das Festkörperskelett lediglich soweit komprimiert werden kann, bis kein Fluid mehr vorhanden ist, als $n^S \leq 1$ gelten muß. Der Grenzwert wird durch das materiell inkompressible Festkörperskelett gebildet. Die zweite Bedingung besagt, daß, falls der Kompressionspunkt erreicht ist, kein kontraktantes Fließen mehr auftreten darf. Dilatantes oder volumenneutrales Fließen muß aber weiterhin möglich bleiben. Anm.: Die Abhängigkeit von n^S zeigt, daß eine Verfestigungsformulierung in Abhängigkeit der Gesamtdeformation benötigt wird bzw., daß das elastische Gesetz Kenntnis von der plastischen Deformation haben muß! Die Zulässigkeit einer derartigen Formulierung wurde von Ehlers [2] gezeigt.

Zur Beschreibung der elastischen Verformung wird ein von Eipper [6] vorgeschlagenes Gesetz verwendet, daß für die Verwendung im Rahmen der elastoplastischen Formulierung modifiziert wurde, dargestellt für die Cauchy-Extraspannungen. Die Abhängigkeit von der

plastischen Volumendeformation ist in n_p^S enthalten.

$$\boldsymbol{\tau}_E^S = \mu^S (\mathbf{B}_{Se} - \mathbf{I}) + \lambda^S (1 - n_p^S)^2 \left(\frac{J_{Se}}{1 - n_p^S} - \frac{J_{Se}}{J_{Se} - n_p^S} \right) \mathbf{I} \quad (5.36)$$

Für die Fließfläche und das plastische Potential, aus dem die Fließregel hervorgeht, wurde die „strukturelle Verfestigung“ entwickelt, siehe *Mahnkopf* [12]. Ausgangspunkt stellt die von *Ehlers* [3] vorgeschlagene Formulierung einer Fließfläche zur Beschreibung von Reibungsmaterialien dar, formuliert in *Reuß*-schen Variablen:

$$\begin{aligned} \hat{r}(\hat{\Theta}, \hat{\mathbf{I}}) &= F_h(\hat{\mathbf{I}}) F_d(\hat{\Theta}) \quad \text{mit} \quad \hat{r} = \sqrt{2 \hat{\Pi}^D} \quad , \\ \hat{\Theta} &= \frac{1}{3} \arcsin \left(\sqrt{27}/2 \hat{\Pi}^D / \hat{\Pi}^{D^{3/2}} \right) \end{aligned} \quad (5.37)$$

Der hydrostatische Anteil F_h und der deviatorische Anteil F_d lauten:

$$\begin{aligned} F_h &= \sqrt{2} \left[(\varepsilon^2 - \delta^2) \hat{\mathbf{I}}^4 + 2 \beta \varepsilon \hat{\mathbf{I}}^3 + \left(\beta^2 - \frac{\alpha}{2} - 2 \varepsilon \kappa \right) \hat{\mathbf{I}}^2 - 2 \beta \kappa \hat{\mathbf{I}} + \kappa^2 \right]^{1/2} \\ F_d &= \left[1 + \frac{2}{\sqrt{27}} \gamma \sin(3 \hat{\Theta}) \right]^{-m/2} \end{aligned} \quad (5.38)$$

Aus den Bedingungen (5.35) folgt für die Fließfläche

$$\begin{aligned} \lim_{n^S \rightarrow 1} F_h(\hat{\mathbf{I}}) &> 0 \quad , \quad \forall \quad \hat{\mathbf{I}} < \hat{\mathbf{I}}_{01} \\ \lim_{n^S \rightarrow 1} \partial F_h(\hat{\mathbf{I}}) / \partial \hat{\mathbf{I}} &\leq 0 \quad , \quad \forall \quad \hat{\mathbf{I}} < \hat{\mathbf{I}}_{01} \end{aligned} \quad (5.39)$$

Unter Nutzung der Abwärtskompatibilität wurde die Fließfläche derart modifiziert, daß die Parameter ε , m und δ zusätzlich mit einer Funktion $h(n^S)$ multipliziert werden. Die Funktion muß dabei zur Sicherstellung der Bedingungen (5.35) bzw. (5.39) den Anforderungen

$$h(n_{0S}^S) = 1 \quad , \quad h(1) = 0 \quad , \quad h(0) = \infty \quad (5.40)$$

genügen. Es wurde der folgende Ansatz gewählt:

$$h(n^S) = \left(\frac{n_{0S}^S}{n^S} \frac{1 - n^S}{1 - n_{0S}^S} \right)^\rho \quad (5.41)$$

Für m gelten abweichende Bedingungen, die an dieser Stelle aus Platzgründen nicht diskutiert werden können. Eine ausgiebige Diskussion findet sich bei *Mahnkopf* [12].

Da die Veränderung der Fließfläche, die eine Verfestigung im allgemeinen Sinne darstellt, auf der Struktur des Materials beruht und im Gegensatz zur Verfestigung des reinen Matrixmaterials eine reversible Natur aufweist, wurde sie „strukturelle Verfestigung“ genannt, im Gegensatz zur herkömmlichen „materiellen Verfestigung“. Sie stellt keinen Ersatz der klassischen materiellen Verfestigung dar, sondern vielmehr eine im Bereich poröser Medien notwendige Ergänzung.

Die Entwicklung des plastischen Potentials, zur Beschreibung der plastischen Deformationsgeschwindigkeit, unterlag den Anforderungen stetiger Differenzierbarkeit, der Fähigkeit volumenneutrales Fließen abbilden zu können, der Sicherstellung des Kompressionspunktes (5.35) und dem Wunsch, den Dilatanzwinkel möglichst flexibel an die Eigenschaften realer Materialien anpassen zu können. Mit dem Begriff der Abwärtskompatibilität wird hier die Abwärtskompatibilität sowohl zur materiellen wie auch zur strukturellen Verfestigung der Fließfläche gemeint. Es wurde der folgende Ansatz gewählt:

$$G(\hat{\mathbf{I}}, \hat{\mathbf{II}}^D, \hat{\mathbf{III}}^D, \mathbf{q}, \mathbf{r}) = \left(\Psi_1 \hat{\mathbf{II}}^D + \frac{1}{2} \tilde{\alpha} \hat{\mathbf{I}}^2 + \tilde{\delta}^2 \hat{\mathbf{I}}^4 \right)^{1/2} + \Psi_2 \beta \hat{\mathbf{I}} + \tilde{\varepsilon} \hat{\mathbf{I}}^2 \quad (5.42)$$

wobei die Parameter Ψ_1 und Ψ_2 eine flexible Einstellung des Dilatanzwinkels ermöglichen. $\mathbf{r}$ bezeichnet dabei die klassischen Verfestigungsvariablen, für die zusätzliche Entwicklungsgleichungen benötigt werden, und $\mathbf{q}$ die Abhängigkeiten im Rahmen der strukturellen Verfestigung.

Für eine ausführliche Diskussion der konstitutiven Modellierung und ihrer Aspekte, z. B. der Vorteile der strukturellen Verfestigung auch im Rahmen der numerischen Implementierung, sei auf *Mahnkopf* [12] verwiesen.

5.6 Beispiele

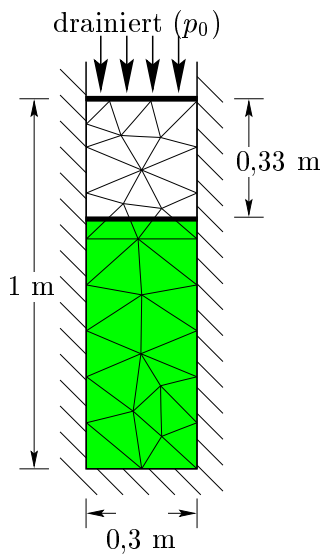
Die entwickelten Materialmodelle wurden in das FE-System *PANDAS* [7] implementiert. Dessen modulare Struktur ermöglicht die Verwendung verschiedener impliziter Zeitintegrationsverfahren und einer zugehörigen Zeitschrittweitensteuerung von *Ellsiepen* [7]. Dies war speziell bei Lokalisierungsrechnungen unbedingt notwendig. Es hat sich gezeigt, daß mit einfacheren Integrationsverfahren die numerische Regularisierung die Ergebnisse stark verfälscht, auch wenn diese von etlichen Autoren eingesetzt werden. Darüber hinaus stehen verschiedenste Elementansätze zur Verfügung. Bei den zweidimensionalen Rechnungen wurde der ebene Verzerrungszustand betrachtet. Für eine effektive numerische Umsetzung kommt der konsistenten Linearisierung eine große Bedeutung zu, speziell der des Spannungsberechnungsalgorithmus, s. *Mahnkopf* [12].

5.7 Konsolidationsproblem

Das erste Beispiel dient der Verifizierung der Materialmodellierung. Hierbei wird speziell der Kompressionspunkt und der Einfluß der Mischphase diskutiert. Das Festkörperskelett ist noch rein elastisch formuliert.

Beim Konsolidationsproblem (s. Abbildung 5.5) wird eine Wanne gestaucht. An den seitlichen Wänden ist die Horizontalverschiebung und am Boden die Vertikalverschiebung behindert. Die Oberfläche ist drainiert, die anderen Ränder undrainiert. Die Belastung der Oberfläche wird innerhalb 1/1000 Sekunde auf 10 MN/m² gesteigert und dann konstant gehalten. Die Probe besteht zu 67 % aus Festkörper und zu 33 % aus Fluid.

Aufgrund der Fluidviskosität, die über den Impulsaustausch formuliert ist (5.15), ist der Prozeß auch unter Vernachlässigung dynamischer Effekte im Rahmen der quasistatischen



Materialparameter				
ρ^{LR}	1000	ρ^{SR}	2600	kg/m ³
n^F	0,33	k^F	$1,00 \cdot 10^{-6}$	m/s
μ	10,00	λ	12,00	MN/m ²
Plastisches Potential		Fließfläche		
ψ_1	4,545	α	0,01	
ψ_2	0,770	β	0,25	
		γ	1,664	
		δ	$1,53 \cdot 10^{-7}$	m ² /kN
		ε	$2,65 \cdot 10^{-7}$	m ² /kN
		κ	1,0	N/m ²
		m	0,5690	

(Ehlers & Müllerschön [5])

Abbildung 5.5: Stauchen einer Wanne: Randwertproblem und Materialparameter

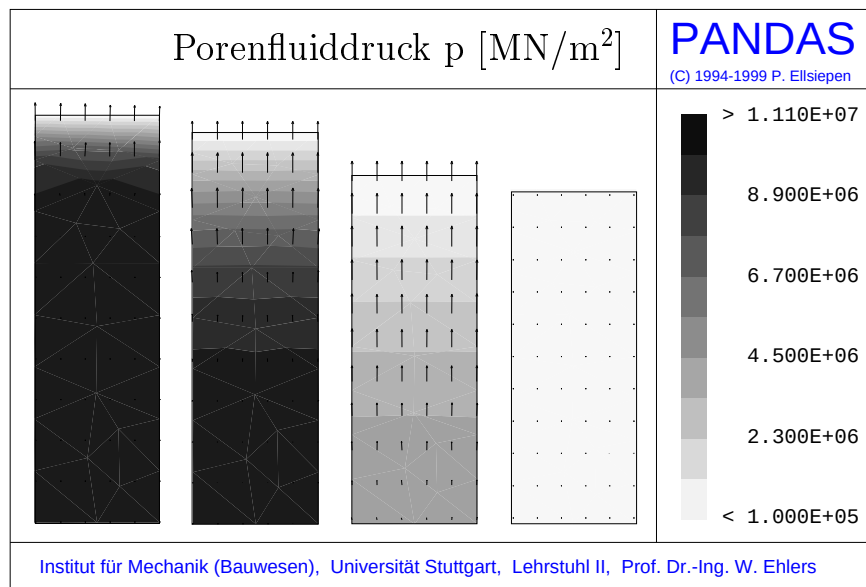


Abbildung 5.6: Stauchen einer Wanne: Porenfluiddruck p und Sickergeschwindigkeit $\mathbf{w}_F$ (normiert) zu den Zeitpunkten $t = 1$ s, $t = 10$ s, $t = 100$ s und $t = 1000$ s

Formulierung zeitabhängig. Nach der Lastaufbringung ergibt sich direkt unter der Oberfläche ein Druckgradient, und das Porenfluid beginnt auszusickern, vgl. Abbildung 5.6. Die Vektoren in der Abbildung stellen die Sickergeschwindigkeit $\mathbf{w}_F$ dar, die bezüglich des jeweiligen Maximalwertes normiert ist. Im Verlauf des Konsolidationsprozesses pflanzt sich der Druckgradient über das gesamte Randwertproblem fort. Nach 1000 Sekunden ist der Konsolidationsprozeß weitgehendst abgeschlossen. Der Porenfluiddruck entspricht im gesamten Körper dem Umgebungsdruck p_0 . Es kann somit kein Porenfluid mehr aussickern.

Das Festkörperskelett trägt die Belastung allein und es ergibt sich der Deformationszustand, den ein leeres Festkörperskelett instantan liefert.

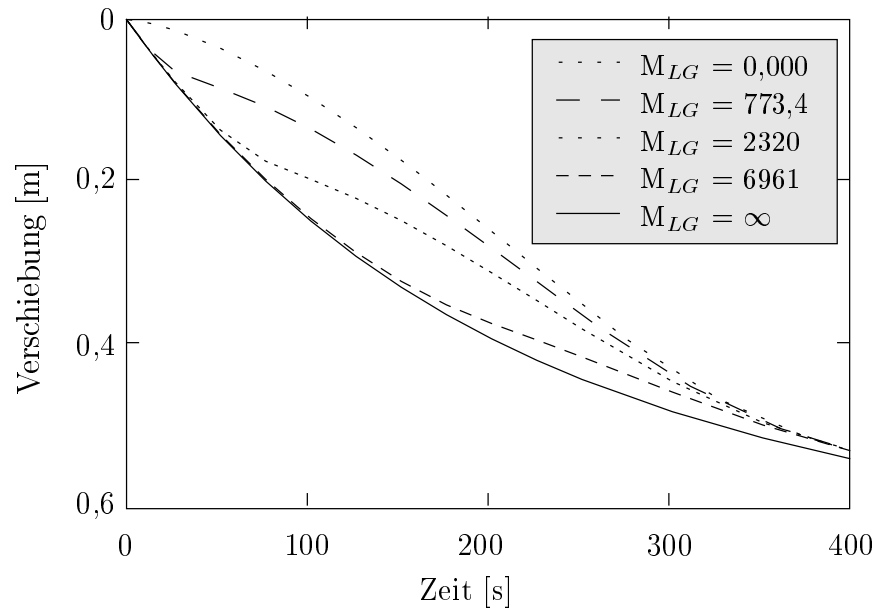


Abbildung 5.7: Konsolidationsproblem: Einfluß der Modellierung des Porenfluids bei linearer Laststeigerung für $t = 0 \dots 400$ Sekunden

Das Verhalten hängt dabei stark von der Modellierung des Porenfluids ab. Während bei einem inkompressiblen Porenfluid eine Deformation des Körpers lediglich durch Ausströmen möglich ist, kann im Falle eines kompressiblen Fluids zusätzlich eine Deformation aufgrund dessen Kompressibilität eintreten.

In Abbildung 5.7 ist die Absenkung der Oberfläche in Abhängigkeit der Zeit bei linearen Laststeigerung mit $100 \text{ kN}/(\text{m}^2\text{s})$ für $0 \dots 400$ Sekunden dargestellt. Der Volumenanteil des Festkörpers in der Referenzkonfiguration beträgt $n_{0S}^S = 0,25$ und der Durchlässigkeitskoeffizient $k^F = 10^{-6} \text{ m/s}$. Es wurden dabei ideales Gas ($M_{LG} = 0$, vgl. 5.24), Mischphase mit 50 % Volumenanteil inkompressiblen Porenfluids im Ausgangszustand ($M_{LG} = 773,40$), 75 % Volumenanteil ($M_{LG} = 2320$), 90 % Volumenanteil ($M_{LG} = 6961$) und vollständig inkompressibles Porenfluid ($M_{LG} = \infty$) modelliert. Die Verläufe nähern sich für unterschiedliche Porenfluide im auskonsolidierten Zustand dem gleichen Grenzwert an, der aus dem elastischen Gesetz resultiert. In Abbildung 5.7 ist gut zu erkennen, wie der Deformationsprozeß bei Verwendung der Mischphase zuerst durch die Kompressibilität des Fluids dominiert wird. Bei weiterer Laststeigerung und einhergehender Kompression nimmt die Bedeutung der Konsolidation zu und die Kurven zeigen das gleiche Verhalten auf, wie im Falle eines vollständig inkompressiblen Fluids. Der Punkt des Umschaltens hängt von der Zusammensetzung der Mischphase ab.

Der Einfluß der Modellierung des Porenfluids und der Bedeutung der Mischphase ist offensichtlich. Speziell das Deformationsverhalten bei kleiner Permeabilität bzw. hoher Belastungsgeschwindigkeit hängt stark von der Kompressibilität des Porenfluids ab. Dies ist bei der Verwendung poröser Materialien zur Dämpfung und Energieabsorption (Crash) von besonderem Interesse.

5.8 Anpassung des Modells an einen Polymerschaum

Zur Demonstration der Anpassungsfähigkeit des Materialmodells und der Bedeutung der Modellierung des Kompressionspunktes im Festkörperskelett wurden Polyethylenschäume mit unterschiedlichen Dichten und somit Volumenanteilen n^S des Festkörpers verwendet. Das Randwertproblem ist in Abbildung 5.8 dargestellt. Für eine Validierung des Kompressionspunktes der gesamten Mischung und der Validierung der Leistungsfähigkeit der Kombination aus struktureller und materieller Verfestigung sei auf *Mahnkopf* [12] verwiesen. Für die Vernetzung wurden 20-knotige Quaderelemente verwendet. Da bei offenporigen, luft- bzw. gasgefüllten Schäumen das Fluid keinen nennenswerten Einfluß hat, wurde der *Darcysche* Durchlässigkeitsparameter k^F auf 1,0 m/s gesetzt. Die Form der Probe ist daher auch ohne Bedeutung. Das Festkörperskelett ist elastoplastisch ohne materielle und mit struktureller Verfestigung modelliert.

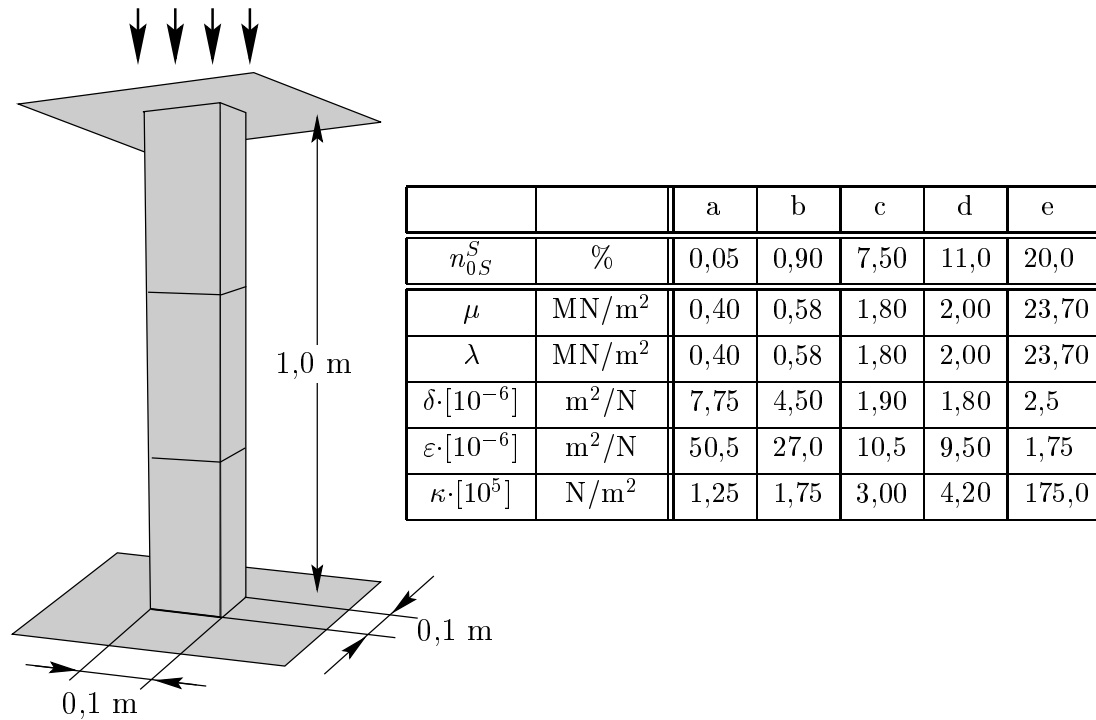


Abbildung 5.8: Einaxialer Kompressionsversuch:
Materialparameter für Polyethylenschäume

In Abbildung 5.9 sind die experimentell bestimmten Verläufe (*Gibson & Ashby* [9], S. 180) und die der Simulationsrechnung aufgetragen. Die Materialparameter wurden für jeden Polyethylenschäum einzeln angepaßt.

Während die Kurven (a) - (d) nahezu deckungsgleich angepaßt werden konnten und die Parameter entsprechend dem Volumenanteil $n_{0,S}^S$ monotone Reihen bilden (vgl. Abbildung 5.8), war eine ähnlich gute Anpassung für die Kurve (e) nicht möglich. Die bei hochporösen Schäumen dominanten strukturellen Effekte, die die Verläufe der Kurven (a) - (d) regieren, werden durch die strukturelle Verfestigung sehr gut abgebildet. Bei dem Schaum

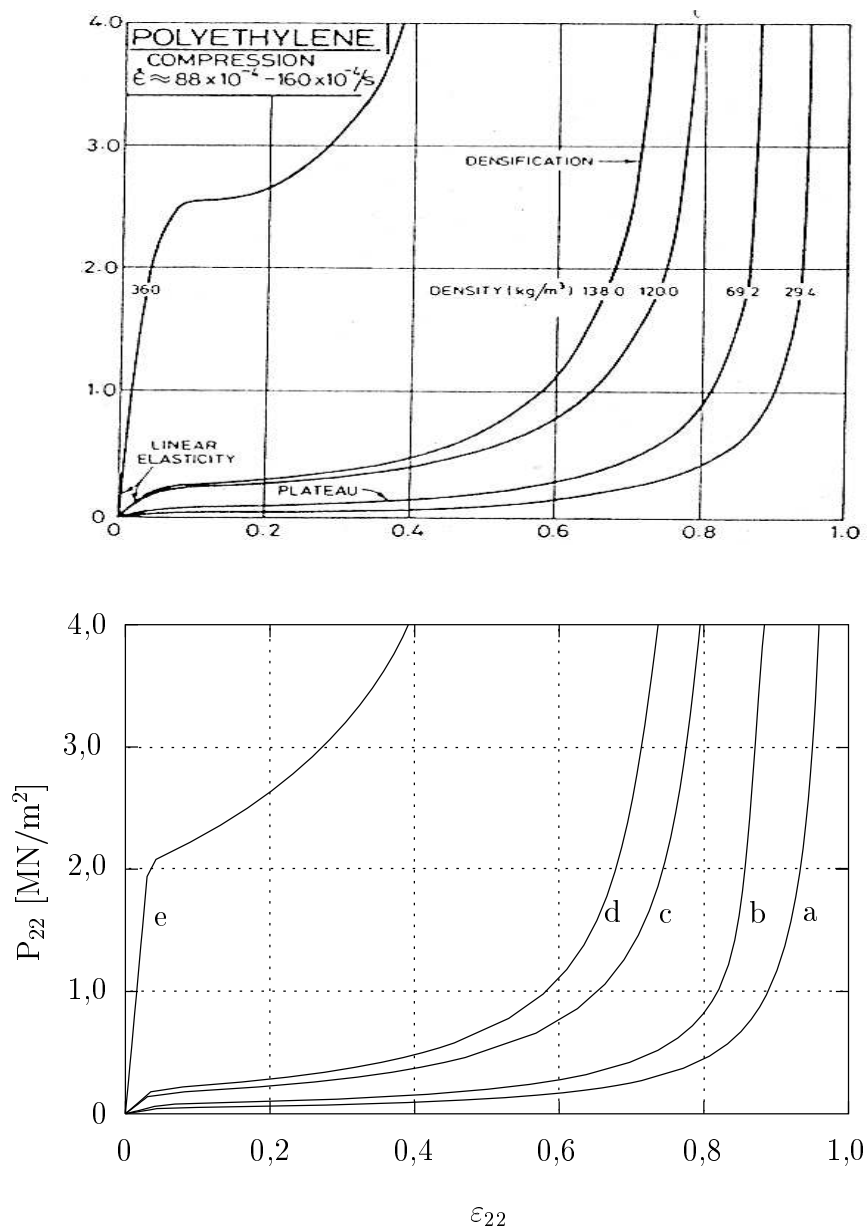


Abbildung 5.9: Kompressionsversuch von Polyethylenschäumen unterschiedlicher Porosität: Versuche nach Gibson & Ashby [9] (S. 180) und FE-Simulation mit struktureller Verfestigung

(e) hingegen liegt ein deutlich höherer Volumenanteil n_{0S}^S der Festkörpermatrix vor. Der Einfluß materielle Effekte wie z. B. materielle Verfestigung und hier speziell Schädigung nimmt an Bedeutung zu. Diese wurden jedoch nicht modelliert. Die strukturelle Verfestigung ist nicht in der Lage, die materielle Verfestigung zu ersetzen. Sie stellt vielmehr eine notwendige Ergänzung dar.

Die Besonderheiten poröser Schäume bei großen Deformationen werden sehr gut durch die strukturelle Verfestigung abgebildet. Hierin liegt ein besonderes Interesse der Modellierung und darauf aufbauenden Simulation, da das Kompressionsverhalten dieser Materialien häufig zur Energieabsorption genutzt wird, z. B. bei Crashtests.

5.9 Biaxialversuch

Die Lokalisierung und speziell der Einfluß des Porenfluids und seiner Koppelung mit dem Festkörperskelett werden anhand des Biaxialversuchs durchgeführt, vgl. *Simo & Meschke* [15], *Schrefler et al.* [13, 14], *Loret & Prévost* [11] und *Gawin et al.* [8]. Das Anfangsrandwertproblem ist in Abbildung 5.10 dargestellt. Es besteht aus 200 quadratischen 8-Knoten-elementen. Die seitlichen Ränder sind drainiert, der Boden und die Fläche unter der Last undrainiert. Zunächst werden sämtliche freien Oberflächen mit einer linear ansteigenden Last beaufschlagt, deren Maximalwert nach 10^{10} Sekunden 100 kN/m^2 beträgt. Aufgrund der langsamen Steigerung der Last kann die Probe zu diesem Zeitpunkt als vollständig auskonsolidiert betrachtet werden. Anschließend wird die Last konstant gehalten und die Oberfläche mit $v_0 = 0,0018 \text{ mm/s}$ verschiebungsgesteuert abgesenkt. Die Materialparameter entsprechen wieder Abbildung 5.5. Auf etwaige Abweichungen der Materialparameter wird im Text bzw. in den Abbildungen explizit hingewiesen.

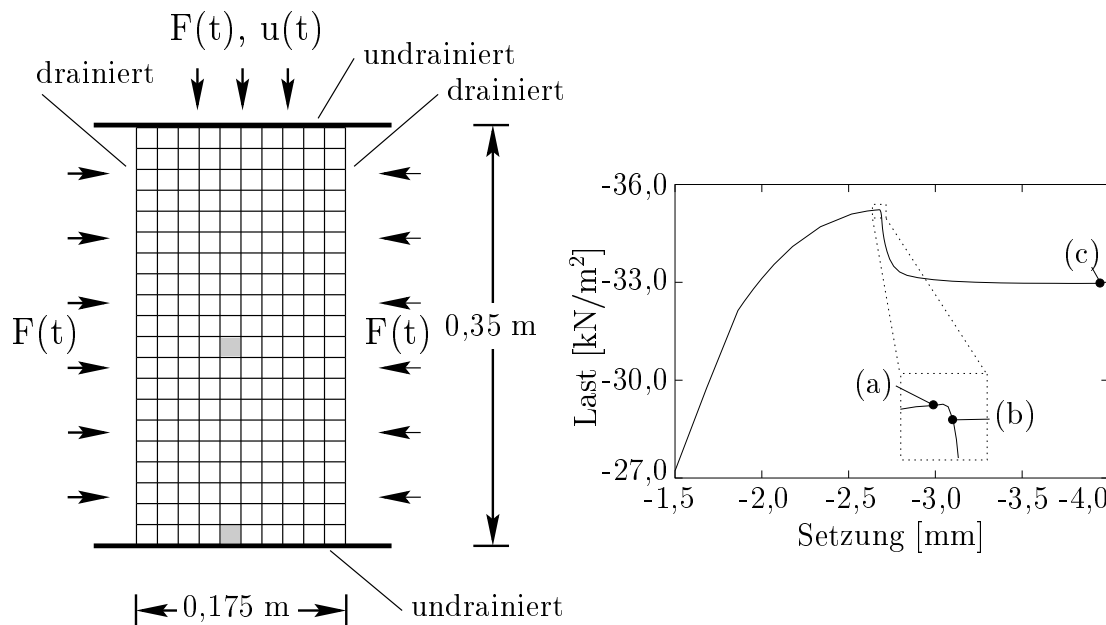


Abbildung 5.10: Randwertproblem und Last-Setzungs-Kurve des Biaxialversuchs

In Abbildung 5.10 ist eine für den Biaxialversuch typische Last-Setzungs-Kurve dargestellt. Für die Berechnung der Last wurden sowohl die Vertikalspannung als auch der Porenfluiddruck über den oberen Rand integriert und addiert, da sie der gesamten Mischung getragen wird. Das grau unterlegte Element im mittleren Bereich des Netzes wurde geschwächt, durch Verringerung der *Laméschen* Konstanten um 15 %. Nachdem die Probe plastisch geworden ist, steigt die Last immer geringer, bis sie schließlich ihren Maximalwert erreicht hat. Die Probe wird instabil und die Kurve zeigt einen deutlichen Abfall der Last. Es setzt Lokalisierung in Form eines Scherbandes ein. Eine detaillierte Diskussion dieses Beispiels und der Problematik der Lokalisierung poröser Medien findet sich bei *Mahnkopf* [12].

Zur genaueren Untersuchung des Einflusses des Porenfluids und speziell der entscheidenden

volumetrischen Koppelung zwischen Fluid und Festkörper, die sich bei einer theoretischen Lokalisierungsanalyse von *Mahnkopf* [12] gezeigt hat, werden zwei unterschiedliche Materialien betrachtet. Zum einen der in Abb. 5.5 beschriebene kohäsionslose Sand, der i. a. kontraktante Scherbänder liefert und um den Grenzzustand der strukturellen Verfestigung, bei dem die Parameter ε und δ zu Null werden, woraus dilatante plastische Volumendeformationen folgen, d. h. $\hat{\mathbf{D}}_{Sp} \cdot \mathbf{I} \geq 0$. Die Fließfläche entspricht dann im hydrostatischen Bereich dem *Drucker & Prager*-Kriterium, mit einer abgerundeten Kappe im Zugbereich. Um den Bifurkationspunkt im betrachteten Bereich zu vermeiden, wurde das untere grau unterlegte Element in Abbildung 5.10 geschwächt.

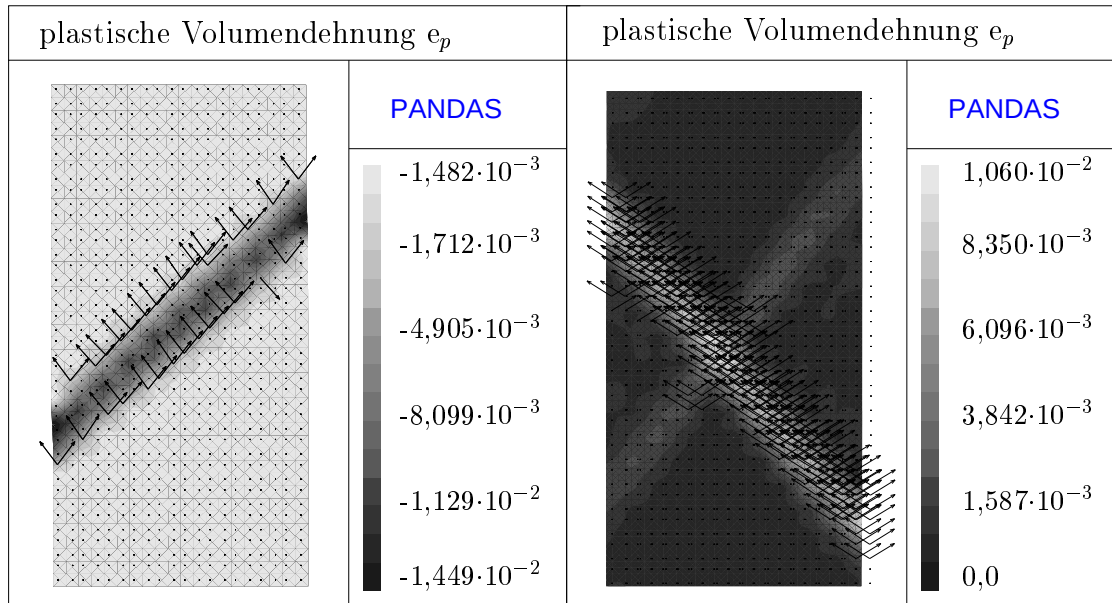


Abbildung 5.11: Vergleich der plastischen Volumendehnung und der Lokalisierungsanalyse. Links: Kohäsionsloser Sand; rechts: Grenzzustand der strukturellen Verfestigung ($\delta = \varepsilon = 0$).

Während das erste Material bedingt durch die Kappe im Druckbereich kontraktante plastische Volumendehnungen zeigt, vgl. Abbildung 5.11 (links), treten in Abbildung 5.11 (rechts) für den zweiten Fall die erwarteten dilatanten Volumendehnungen auf. Als Folge der Volumendeformation stellt sich ein unterschiedlicher Verlauf des Porenfluiddrucks ein, vgl. Abbildung 5.12. Links zeigt sich, bedingt durch kontraktante Dehnungen in Verbindung mit inkompressiblem Porenfluid ein Überdruck. Im rechten Bild stellt sich entsprechend ein Unterdruck im Scherband ein. Da beim Modell mit inkompressiblem Porenfluid die Variable p lediglich einen Differenzdruck, nicht aber den absoluten Druck, darstellt, kann es dabei zu extremen Unterdrücken kommen, die weit außerhalb des realistischen Bereichs liegen, vgl. *Gawin et al.* [8].

In Abbildung 5.11 ist das Ergebnis für eine Lokalisierungsanalyse für die beiden unterschiedlichen Materialien zusammengefasst. Sie beruht auf den von *Mahnkopf* [12] entwickelten Formeln. Die Vektoren entsprechen dabei den Normaleneinheitsvektoren $\mathbf{n}_\Gamma$ an mögliche singuläre Flächen Γ . Der Zustand im rechten Bild entspricht dabei dem Zustand (a)

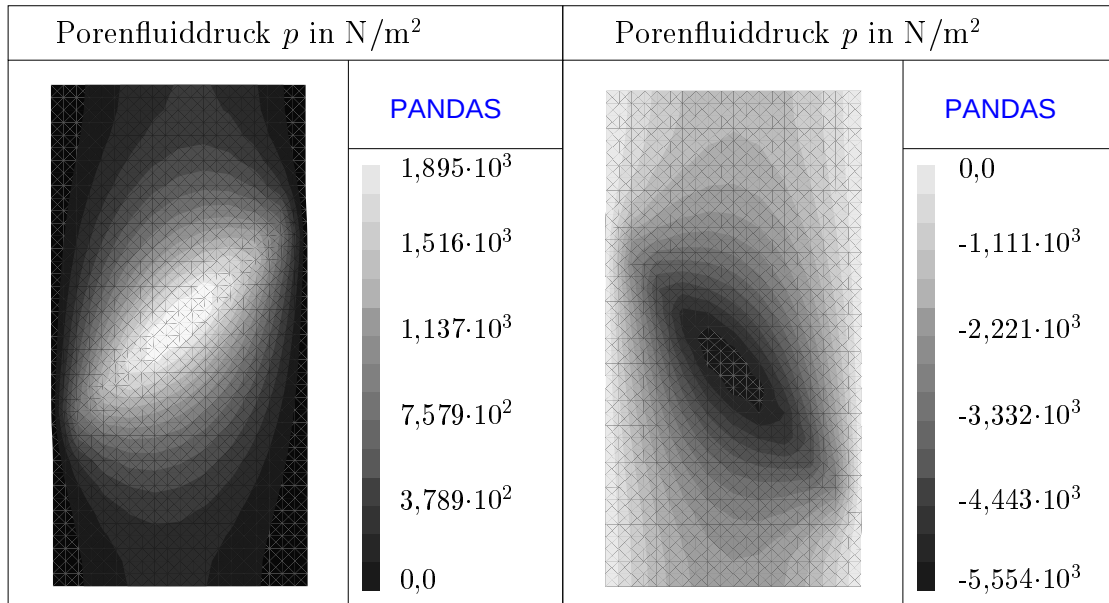


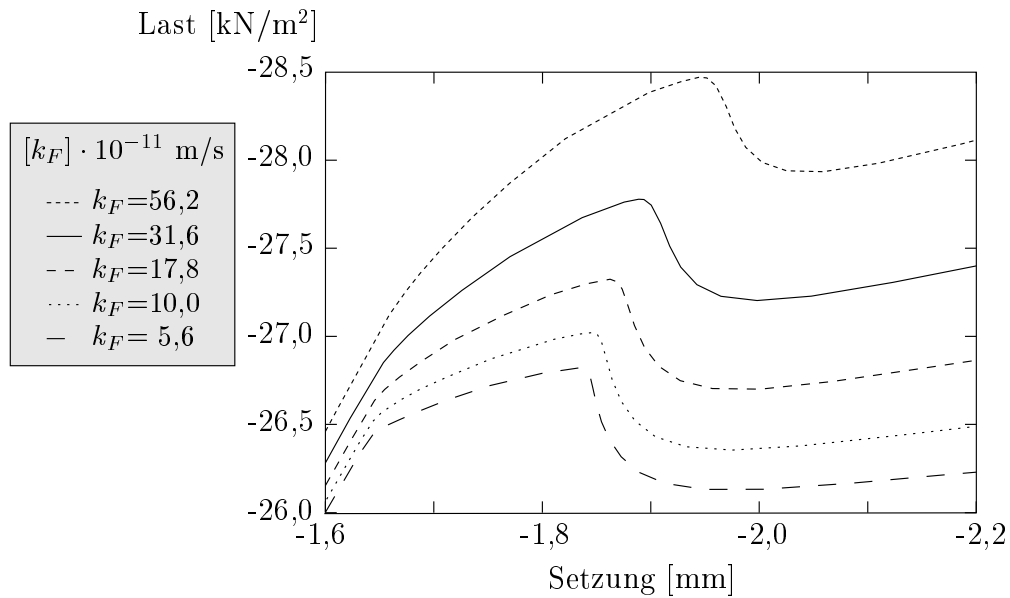
Abbildung 5.12: Vergleich des Porenfluiddrucks

in Abbildung 5.10. Es stellen sich im weiteren Verlauf singuläre Flächen an den Rändern des Bandes ein, vgl. Abbildung 5.11. Dies entspricht den Untersuchungen von *Mahnkopf* [12], wonach ein Scherband durch singuläre Flächen eingegrenzt wird, selbst aber keine enthält!

Zunächst wird das Interesse dem ersten Fall mit kontraktantem Scherband zugewandt. Bei den folgenden Rechnungen wurde der Umgebungsdruck wieder auf $p_0 = 108845 \text{ N/m}^2$ gesetzt, um auch kompressible Fluide für die Abbildungen 5.14 und 5.15 berechnen zu können. Für alle anderen Diagramme wurde weiterhin inkompressibles Porenfluid verwendet. In Abbildung 5.11. ist die Last-Setzungs-Kurve für unterschiedliche Permeabilitäten k^F aufgetragen. Der Faktor zwischen den einzelnen Werten von k^F ist konstant und beträgt $10^{1/4}$. Im folgenden werden in den Diagrammen als Last nur noch die Festkörperextraspannungen aufgetragen.

Im Falle kleiner Permeabilitäten und somit geringerer Sickergeschwindigkeiten und verlangsamer Konsolidation steigt der Porenfluiddruck an. Der hydrostatische Anteil der Extraspannungen des Festkörperskeletts sinkt in entsprechendem Maße ab. Dies führt bei Reibungsmaterialien zu einer geringeren Festigkeit, bedingt durch die Kegelform der Fließfläche in der hydrostatischen Ebene. Das Scherband tritt bereits bei kleineren Lasten auf. Der beschriebene Effekt läßt sich mit dem „Aufschwimmen“ gesättigter Tonböden vergleichen.

Unter Verwendung der Mischphase läßt sich dieser Effekt verifizieren. Hierzu werden drei verschiedene Mischphasen mit Volumenanteilen von 0 %, 0,25 % und 0,5 % Gas modelliert. Die Permeabilität beträgt $1,0 \cdot 10^{-11} \text{ m/s}$. In Abb. 5.14 wird deutlich, daß der destabilisierende Effekt des Fluids durch steigende Kompressibilität reduziert wird, der „Aufschwimmeffekt“ an Bedeutung verliert, da das Porenfluid zusätzlich durch Kompression auswei-

Abbildung 5.13: Last-Setzungs-Kurve für unterschiedliche Permeabilitäten k_F

chen kann. Eine weitere Erhöhung des Volumenanteils des kompressiblen Porenfluids zeigt keinen weiteren Einfluß, da die plastischen Volumendehnungen e_p nur geringfügig über $0,5 \cdot 10^{-3}$ liegen, s. Abbildung 5.11.

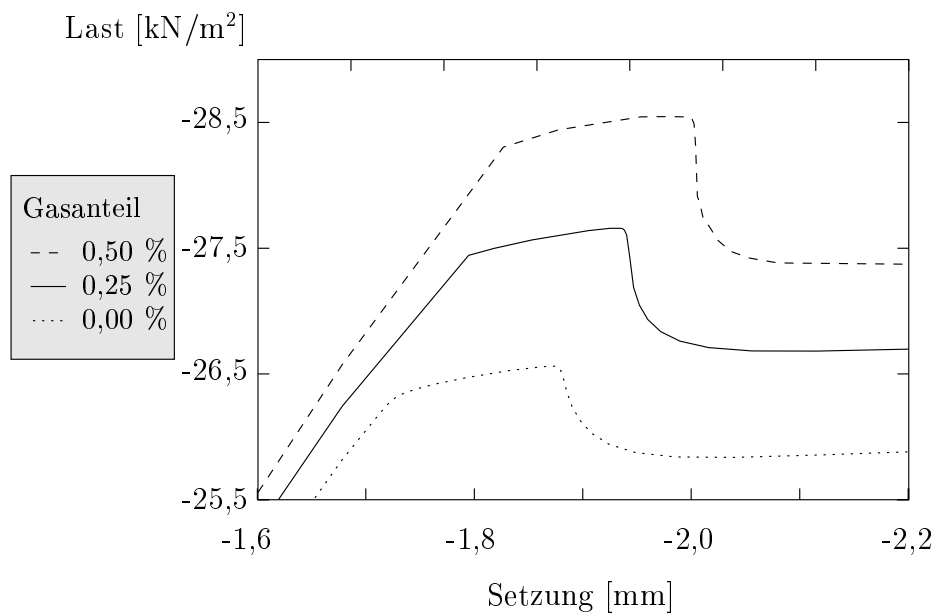


Abbildung 5.14: Last-Setzungs-Kurve für unterschiedliche Zusammensetzungen der Mischphase

Es kann festgehalten werden, daß der destabilisierende Einfluß des Porenfluids den regularisierenden Einfluß, der aufgrund der starken Netzabhängigkeit von geringer Bedeutung

ist, beim untersuchten Beispiel überwiegt.

Eine Untersuchung unter Verwendung der Mischphase bestätigt den Effekt der Stabilisierung durch den Unterdruck infolge inkompressiblen Fluids, wobei die Permeabilität $1,0 \cdot 10^{-7} \text{ m/s}$ beträgt. Kompressibel formuliert kann es nun den sich vergrößernden Porenraum nicht nur durch Konsolidation sondern zusätzlich durch Dekompression füllen, wobei der Druck entsprechend absinkt (Kavitation). In Abbildung 5.15 sind die Last-Setzungs-Kurven für verschiedene Zusammensetzungen der Mischphase dargestellt. Man sieht, wie in Abhängigkeit des steigenden Anteils kompressiblen Porenfluids die Lokalisierung immer früher eintritt, und der Lastabfall immer ausgeprägter wird. Dieser Effekt ist von besonderem Interesse, da bei realen Fluiden bei großen Unterdrücken Kavitation einsetzt somit auch im Falle nahezu inkompressibler Fluide eine kompressible Formulierung benötigt wird. Die Mischphase ist in der Lage, sowohl die scheinbare Inkompressibilität bei steigendem Druck als auch die Kompressibilität bei fallendem Druck abzubilden.

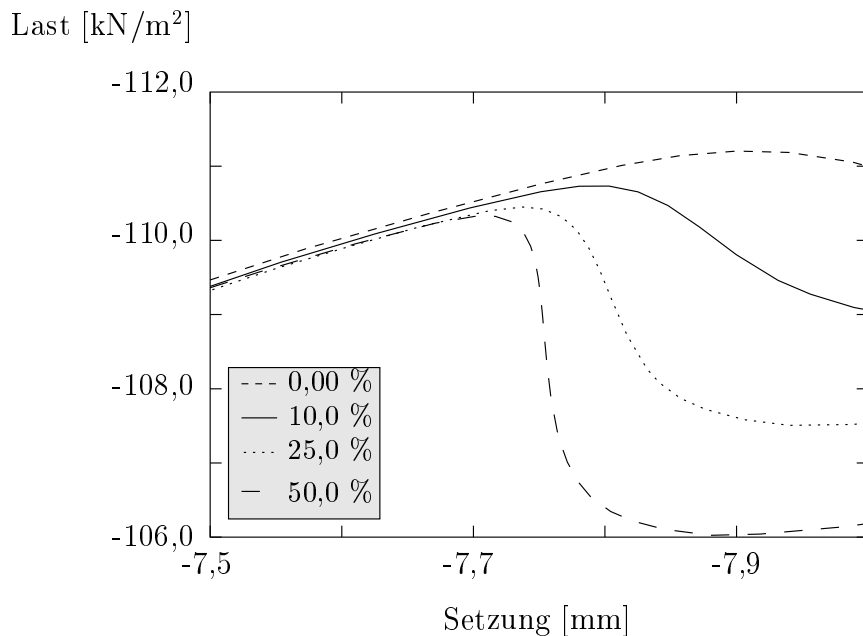


Abbildung 5.15: Last-Setzungs-Kurve für unterschiedliche Zusammensetzungen der Mischphase

Es liegt in Abbildung 5.15 der Verdacht nahe, daß das betrachtete Problem unter Verwendung des inkompressiblen Porenfluids (oberste Kurve) regularisiert sein könnte. Dies hat sich jedoch nicht bestätigt, vielmehr ist das Problem nach wie vor stark netzabhängig, s. Mahnkopf [12]. Das Fluid hat lediglich eine stabilisierende Wirkung. Zusammenfassend kann festgehalten werden, daß das Porenfluid vorwiegend die Stabilität der Mischung beeinflusst. Eine Regularisierung des Randwertproblems konnte im Rahmen der numerischen Simulation nicht festgestellt werden. Ausschlaggebend für den Einfluß des Porenfluids auf die Lokalisierung ist die volumetrische Koppelung, da die Fluidextraspansungen *a priori* vernachlässigt wurden (5.13). Dies konnte sowohl theoretisch von Mahnkopf [12] bei der Lokalisierungsanalyse wie auch bei der Simulation im Rahmen der FE-Rechnung gezeigt werden.

Literaturverzeichnis

- [1] R. M. Bowen. Compressible porous media models by use of the theory of mixtures. *Int. J. Engng. Sci.*, 20:697–735, 1982.
- [2] W. Ehlers. *Poröse Medien – ein kontinuumsmechanisches Modell auf der Basis der Mischungstheorie*, volume 47 of *Forschungsberichte aus dem Fachbereich Bauwesen*. Universität-GH-Essen, Essen, 1989.
- [3] W. Ehlers. Constitutive equations for granular materials in geomechanical context. In K. Hutter, editor, *Continuum Mechanics in Environmental Sciences and Geophysics*, volume 337 of *CISM Courses and Lectures*. Springer-Verlag, Wien, 1993.
- [4] W. Ehlers. Grundlegende Konzepte in der Theorie Poröser Medien. *Technische Mechanik*, 16:63–76, 1996.
- [5] W. Ehlers and H. Müllerschön. On Coupled Solid-Fluid Problems for Cohesionless Soils. In N. Vitharana and R. Colman, editors, *The 8th Australia New Zealand Conference on Geomechanics: Consolidating Knowledge*, volume 2, pages 945–951, Hobart (Australia), 1999.
- [6] G. Eipper. *Theorie und Numerik finiter elastischer Deformationen in fluidgesättigten porösen Medien*. Dissertationen aus dem Institut für Mechanik im Bauwesen, Nr. II-1. Universität Stuttgart, 1998.
- [7] P. Ellsiepen. *Zeit- und ortsadaptive Verfahren angewandt auf Mehrphasenprobleme poröser Medien*. Dissertationen aus dem Institut für Mechanik im Bauwesen, Nr. II-3. Universität Stuttgart, 1999.
- [8] D. Gawin, L. Sanavia, and B.A. Schrefler. Cavitation modelling in saturated geomaterials with application to dynamic strain localization. *International Journal for numerical Methods in Fluids*, 27:109–125, 1998.
- [9] L. Gibbson and M. Ashby. *Cellular Solids - Structure and Properties*. Cambridge University Press, 1997.
- [10] P. Haupt. On the concept of an intermediate configuration and its application to a representation of viscoelastic-plastic material behavior. *Int. J. Plasticity*, 1:303–316, 1985.
- [11] B. Loret and J. H. Prévost. Dynamic strain localization in fluid-saturated porous media. *J. Eng. Mech.*, 117:907–922, 1991.
- [12] D. Mahnkopf. *Lokalisierung fluidgesättigterporöser Festkörper bei finiten elastoplastischen Deformationen*. Dissertationen aus dem Institut für Mechanik im Bauwesen, Nr. II-5. Universität Stuttgart, 2000.
- [13] B. Schrefler, L. Sanavia, and D. Gawin. Strain localization modelling in fully and partially saturated porous media. In D. R. J. Owen, E. Onate, and E. Hinton, editors, *Computational Plasticity: Fundamentals and Applications*, pages 88–100, Barcelona, 1997. CIMNE.

- [14] B.A. Schrefler, C.E. Majorana, and L. Sanavia. Shear band localization in saturated porous media. *Arch. Mech.*, 47:577–599, 1995.
- [15] J. C. Simo and G. Meschke. New algorithms for multiplicative plasticity that preserve the classical return mappings. Application to soil mechanics. *Division of applied mechanics*, pages 765–790, keine Angabe.

6

Constitutive modelling of bonded granular materials

T. Schanz
Professur Bodenmechanik
Bauhaus-Universität Weimar
D-99421 Weimar

Abstract. *A theoretical investigation¹ on the behaviour of cemented sand subjected to different triaxial compression loading is reported. The essential feature of the model presented is the combined frictional hardening and cohesion softening. The model is formulated in an integral continuum approach. The volumetric strain measure which controls the evolution law of the softening is defined in a non-local way. By introducing a parameter with the quality of an internal length the results of simulations get independent of the discretization when using FEM. The physical bases for the proposed forms are discussed in detail. The model is verified with the calculation of shear tests on different cemented sands found in literature. Additionally a biaxial test with an imperfection is simulated to study the evolution of strain localisation. The model is also capable to simulate the main characteristics of the load displacement behaviour of a shallow foundation, both qualitatively and quantitatively.*

6.1 Introduction

The stress-strain behaviour of cemented sands (Fig. 6.1) has been investigated, both experimentally and theoretically, for a long time by a number of authors. Several experiments on artificially prepared and natural samples have been described [28, 11, 15, 24, 1].

Because these experimental results are rarely consistent, referring to failure criteria and the evolution of hardening/softening [1], this paper mainly refers to the experimental findings by [8, 1].

There also exists a large number of different constitutive models for cemented sands. The common approach is a formulation for uncemented sands in the frame of the theory of plasticity, extended by some additional features concerning the formulation of hardening/softening in order to take into account the special nature of cemented sands [22, 18, 25]. More recent work including [19, 21] showed the general applicability of this concept for simulating the various experimental findings.

Other concepts include analytical contact mechanics of elastic spheres with cemented,

¹Contents of this paper is published in [29]

plastic contacts [12] and micro-mechanical approaches which consider the multi-phase nature of cemented sands explicitly [2].

The model presented here is developed for sand at a single initial density. Being aware of the fact that this missing link of the model parameters to the state of the sand is a major restriction, we gain simplicity in the sense of an implementation and application of the model to practical boundary condition problems. Recently more complex models for bonded materials were derived in the frame of hypo-plasticity [16, 17] which are able to overcome this shortage to a certain extent.

The approach presented in the following tries to introduce a straight forward way to derive the relevant equations from classical soil mechanic theory.

6.2 Constitutive model

In this section a short outline is given of an isotropic, elastic-plastic, strain-hardening model which has the same conceptual structure of the constitutive laws currently used to describe virgin, uncemented sand behaviour.

We shall simply recall the essential components of such a model as the yield function, the hardening rule and the plastic potential, which completely determine the plastic strain rates as a function of assigned stress rates.

Sands usually show a distinct anisotropic mechanical behaviour. The evolution of cementation tends to remove this anisotropy, resulting in a more isotropic yielding. The physical reason for this statement is the tendency of the cement bonds between the grains to develop more or less isotropically in all directions at the inter-particle contacts.

In the proposed model the effect of cemented bonds between the individual grains is described by the introduction of a cohesion which is interpreted as a kind of *internal pre-stressing*. It gives rise to non-zero tensile and compressive uniaxial strength. This strength parameter is not fixed, but decreases with the increase of plastic strains. It is then possible to model the strength degradation of the cemented specimens.

The following model was chosen for its simple structure and the familiarity concerning the model parameter the users have to work with it. It is a model with an isotropic hardening

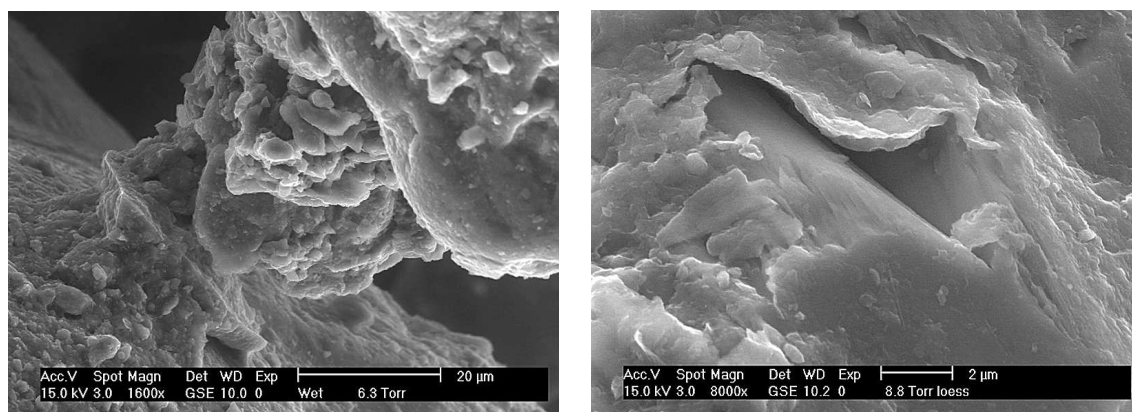


Figure 6.1: Left: cemented contact between two grains; right: calcite skin of single grain (Schanz 1998)

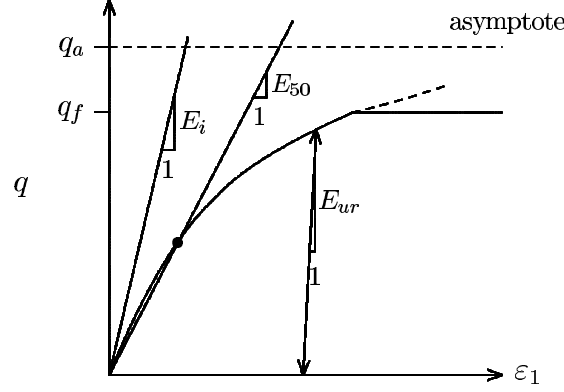


Figure 6.2: Idealized soil behaviour for deviatoric loading

law and a non-associated flow rule. Hardening depends on one single variable, the plastic deviatoric strain γ^p .

The formulation of the constitutive model in this paper deals only with states of triaxial compression $\sigma_1 > \sigma_2 = \sigma_3$. All stresses are effective stresses $\underline{\sigma} = \underline{\sigma}'$. In complying with the sign convention in soil mechanics compressive stress, strain and their rates are taken to be positive.

For a more detailed description of the model the interested reader is referred to [30].

6.2.1 Stiffness

Fig. 6.2 shows a typical triaxial deviatoric stress-axial strain path with both a virgin loading and an un-/reloading branch. The behaviour is highly non-linear for the virgin loading (In general, $\dot{\sigma}_3 \neq 0$, also for the un-/reloading branch). Additionally the different modules E_i , E_{50} and E_{ur} are displayed, which are used in the model and which are explained in the following. Herein E_i describes the initial stiffness for very small strains which might be significantly higher than the obvious tangent.

Elastic un-/reloading

The elastic component of the strain tensor $\underline{\varepsilon}^e$ is calculated by using a Hookean type law with stress dependent stiffness E_{ur} and a constant Poisson ratio ν_{ur} according to Eqs. 6.1 and 6.2. It is convenient to account for this kind of hypoelasticity by variable elastic moduli. On the other side it may cause problems, because it is not simple to choose an appropriate elastic potential. When only monotonic loading paths are considered, however, such a simplified law can be acceptable for practical purposes.

$$E_{ur} = E_{ur}^{ref} \left(\frac{\sigma_3 + c \cot \varphi_p}{p^{ref} + c \cot \varphi_p} \right)^m \quad (6.1)$$

$$G_{ur} = \frac{1}{2(1 + \nu_{ur})} E_{ur} \quad p^{ref} = 100 \text{ kPa} \quad (6.2)$$

Here E_{ur}^{ref} is an elastic reference stiffness determined for a *reference stress* p^{ref} . Because c is interpreted as a kind of internal prestressing it seems to be reasonable to introduce it as an additional term in the denominator of Eq. 6.1. This increase of the elastic stiffness, combined with a larger elastic domain, compared to the same but uncemented material, was also observed in experiments. Studying Eq. 6.1 we find a weaker response for un-reloading from a damaged state of the microstructure, caused by a degradation of the cohesion.

Initial loading

Instead of using the initial tangent modulus E_i , which is difficult to measure in a standard triaxial test, initial loading is described by the stress dependent secant stiffness E_{50} according to Eq. 6.3. This formulation has the same mathematical form as Eq. 6.1. E_{50} is determined as a secant modulus from a triaxial stress-strain curve. Therefore the stress level corresponds to a mobilization of 50% of the maximum deviatoric stress q_f .

$$E_{50} = E_{50}^{ref} \left(\frac{\sigma_3 + c \cot \varphi_p}{p^{ref} + c \cot \varphi_p} \right)^m \quad (6.3)$$

6.2.2 Yield surface and hardening

The yield function f is defined according to Eq. 6.4, using the plastic deviatoric strain γ^p according to Eq. 6.5 as the hardening variable. The first part of Eq. 6.4, $2\varepsilon_1$, is derived by assuming a hyperbolic stress-strain law for deviatoric loading [20].

$$f = 2 \underbrace{\frac{q_a}{E_i} \frac{q}{q_a - q}}_{2\varepsilon_1} - \underbrace{\frac{2q}{E_{ur}}}_{2\varepsilon_1^e} - \gamma^p = 0 \quad (6.4)$$

$$\gamma^p = \varepsilon_1^p - \varepsilon_2^p - \varepsilon_3^p \approx 2\varepsilon_1^p = 2\varepsilon_1 - 2\varepsilon_1^e \quad (6.5)$$

R_f , often about $R_f \approx 0.9$, is the ratio between the ultimate deviatoric stress q_f for finite strain from a test and the asymptotic stress q_a for infinite strain, assuming a hyperbolic relation between q and ε_1 . For ongoing loading the hardening yield surface f approaches a Mohr-Coulomb type surface as a failure condition q_f according to Eq. 6.6.

$$q_a = \frac{q_f}{R_f} = M (p + c \cot \varphi_p) R_f^{-1} \quad (6.6)$$

where

$$M = \frac{6 \sin \varphi_p}{3 - \sin \varphi_p} \quad (6.7)$$

6.2.3 Plastic potential and flow rule

In the triaxial case the plastic potential is defined by the two functions g_{12} and g_{13} according to Eq. 6.8.

$$\begin{aligned} g_{12} &= \sqrt{(\sigma_1 + \sigma_2)(\tilde{\sigma}_1 + \tilde{\sigma}_2)} \cdot \sin \psi_m - q \\ g_{13} &= \sqrt{(\sigma_1 + \sigma_3)(\tilde{\sigma}_1 + \tilde{\sigma}_3)} \cdot \sin \psi_m - q \end{aligned} \quad (6.8)$$

Here ψ_m is the mobilized angle of dilatancy. The angle of dilatancy at peak is denoted with ψ_p , and is determined from a triaxial test with constant mean pressure corresponding to the reference stress state $(\tilde{\sigma}_1, \tilde{\sigma}_3)$.

The plastic strain rates are given, with the rates of the plastic multipliers $\dot{\lambda}_{12}$ and $\dot{\lambda}_{13}$, by

$$\underline{\dot{\varepsilon}}^p = \begin{bmatrix} \dot{\varepsilon}_1^p \\ \dot{\varepsilon}_2^p \\ \dot{\varepsilon}_3^p \end{bmatrix} = \dot{\lambda}_{12} \frac{\partial g_{12}}{\partial \sigma} + \dot{\lambda}_{13} \frac{\partial g_{13}}{\partial \sigma} \quad (6.9)$$

Using Eqs. 6.8 the rate of dilation is dependent on the stress state, but independent of the stress rate. This definition of g is equivalent to the formulation of a flow rule, describing the relation between the plastic volumetric strain rate $\dot{\varepsilon}_v^p$ and the plastic deviatoric strain rate $\dot{\gamma}^p$, according to Eq. 6.10. For $\sigma_1 + \sigma_3 = \tilde{\sigma}_1 + \tilde{\sigma}_3$ Eq. 6.10 corresponds very well to the results of the classical theory of dilatancy [27].

$$\frac{\dot{\varepsilon}_v^p}{\dot{\gamma}^p} = -\frac{(\tilde{\sigma}_1 + \tilde{\sigma}_3)}{(\sigma_1 + \sigma_3)} \cdot \sin \psi_m \quad (6.10)$$

For the triaxial case ψ_m can be calculated from the mobilized and residual friction angles φ_m and φ_{cv} according to [31]

$$\sin \psi_m = \frac{\sin \varphi_m - \sin \varphi_{cv}}{1 - \sin \varphi_m \sin \varphi_{cv}} \quad (6.11)$$

6.2.4 Regularization

The type of regularization considered in this paper is the non-local theory (integral continuum). In a fully non-local model a relation between average stresses and average strains is formulated [13, 14, 4]. It is convenient to use only a particular strain measure as non-local, whereas general stresses $\underline{\sigma}$ and strains $\underline{\varepsilon}$ remain local [5]. Doing so, in the approach presented here all non-local aspects are concentrated in the softening parameter, and a near-local treatment of the constitutive equations is possible. A special kind of the integral continuum approach is used in the following which is based on [6, 7]. The non-local,

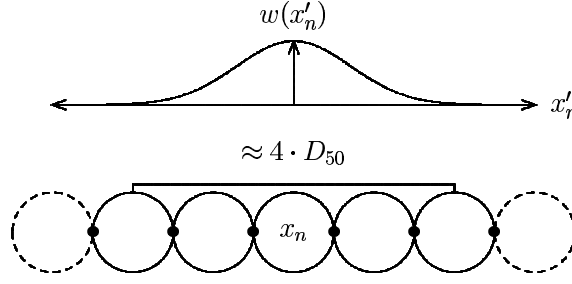


Figure 6.3: One-dimensional physical interpretation of internal length l where $l = D_{50} = 0.5 \text{ mm}$

plastic volumetric strain rate, $\dot{\epsilon}_v^{p*}$, is defined by the local, plastic volumetric strain rate $\dot{\epsilon}_v^p$, a weighting function w and the additional parameter α

$$\dot{\epsilon}_v^{p*}(x_n) = (1 - \alpha) \dot{\epsilon}_v^p(x_n) \quad (6.12)$$

$$+ \frac{\alpha}{A} \int \int \int w(x'_n) \dot{\epsilon}_v^p(x_n + x'_n) dx'_1 dx'_2 dx'_3$$

where

$$A = \int \int \int w(x'_n) dx'_1 dx'_2 dx'_3 \quad (6.13)$$

$$w(x'_n) = \frac{1}{l\sqrt{\pi}} e^{-\left(\frac{x'_n}{l}\right)^2} \quad (6.14)$$

Fig. 6.3 gives a physical interpretation of the internal length l for the 1-dimensional case which is a measure for the decline of the weighting function with the distance x'_n from the local coordinate x_n under consideration.

In the formulation of the new non-local strain rate according to Eq. 6.12 we find both a local and a purely non-local part. α is a kind of weighting factor between the local and non-local component. It can be chosen more-or-less arbitrarily. For $\alpha = 0$ we get the local formulation and for $\alpha = 1.0$ we find a purely non-local description. An effective non-local regularization is obtained for $\alpha > 1$. Because of physical inconsistencies for this case, [6] suggests to use values of about $\alpha \approx 2.0$.

The influence of α on the width of the localization zone will be studied later.

To avoid complex numerical procedures when determining the plastic multipliers from Prager's consistency condition we finally adopt the following approximation:

$$\begin{aligned} \dot{\epsilon}_v^{p*} &= \dot{\epsilon}_v^p + \alpha \cdot \left[\frac{1}{A} \int_V w \cdot \dot{\epsilon}_v^p dV - \dot{\epsilon}_v^p \right] \\ &\approx \dot{\epsilon}_v^p + \alpha \cdot \left[\frac{1}{A} \int_V w \cdot \dot{\epsilon}_v dV - \dot{\epsilon}_v \right] \end{aligned} \quad (6.15)$$

Assuming the non-local character of the constitutive relationship to fade away for larger distances x'_n , the integrals in Eq. 6.15 are evaluated numerically over the entire domain.

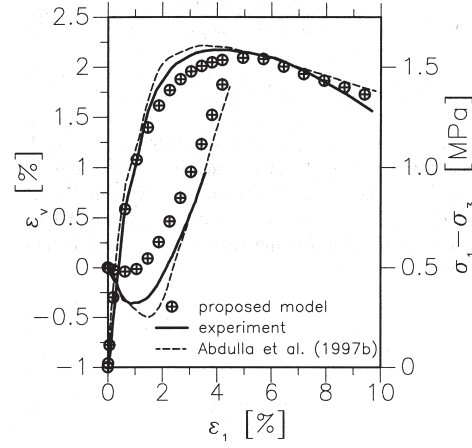


Figure 6.4: Experimental and predicted results for a triaxial compression test on an artificially cemented sand ($\sigma_3 = 200 \text{ kPa}$, cementation=6%)

With the softening modulus $\tilde{h}$ we use a linear relation between the degradation of the cohesion, $\dot{c}$, and the amount of non-local plastic volumetric strain rate, $\dot{\varepsilon}_v^{p*}$, according to Eq. 6.16.

$$\dot{c} = \tilde{h} \cdot |\dot{\varepsilon}_v^{p*}| \quad (6.16)$$

This simple relation is motivated by the experimental results by [8] where the difference in triaxial test results on cemented and uncemented samples under same loading conditions are compared. This equation of evolution can easily be made more general and flexible when more experimental evidence is available. Combining Eqs. 6.15 and 6.16, and using the identity $\dot{\lambda} = \dot{\gamma}^p$, we obtain Eq. 6.17.

$$\dot{c} = \tilde{h} \cdot |\sin \psi_m \cdot \dot{\gamma}^p| \quad (6.17)$$

$$+ \alpha \cdot \tilde{h} \cdot \left[\frac{1}{A} \int_V w \cdot |\dot{\varepsilon}_v| dV - |\dot{\varepsilon}_v| \right]$$

	Clough et al.	Schanz (1997)
ν_{ur} [-]	-/-	0.1/0.1
E_{ur}^{ref} [MPa]	-/-	200.0/544.0
m [-]	0.6/0.45	0.6/0.45
E_i^{ref} [MPa]	75.0/170.0	120.0/272.0
φ_p [°]	40.0/37.0	37.0/38.0
φ_{cv} [°]	35.0/35.0	-/-
c_p [kPa]	25.0/175.0	25.0/175.0
c_{cv} [kPa]	5.0/60.0	0.0-8.0/40.0-130.0
ψ_p [°]	-/-	3.0/5.0-14.0

Table 6.1: Soil parameter for weakly and moderately cemented PAC-1/PAC-2 sand

A direct consequence of Eq. 6.17 is an additional term to the consistency condition according to Eq. 6.18, including the derivative of the yield function f with respect to c :

$$\frac{\partial f^T}{\partial \underline{\sigma}} \cdot \dot{\underline{\sigma}} - \frac{\partial f}{\partial \gamma^p} \cdot \dot{\gamma}^p + \frac{\partial f}{\partial c} \cdot \dot{c} = 0 \quad (6.18)$$

6.2.5 Implementation, Verification

The cohesion for a new load step c^{n+1} is updated from the cohesion of the last load step converged c^n according to Eq. 6.19.

$$c^{n+1} = c^n - \tilde{h} \cdot |\sin \psi_m \cdot \Delta \gamma^p| - \alpha \cdot \tilde{h} \cdot \left[\frac{1}{A} \int_V w \cdot |\Delta \varepsilon_v| dV - |\Delta \varepsilon_v| \right]^{n+1} \quad (6.19)$$

Eq. 6.19 ensures that softening increases monotonically, independently of the sign of the non-local plastic strain. To check the overall capability of the model to simulate qualitatively the stress strain behaviour of a cemented sand a triaxial compression test by [1] is calculated. The results are given in Fig. 6.4. Comparing numerical and experimental results the following observations can be made:

The overall performance of the model is very well, but the initial volumetric compression of a dilatant sand which increase as a function of cement content and confinement is underestimated by the model. The ultimate dilation rate is matched well. Its decrease with increasing confinement is modelled correctly (see Fig. 6.6). The post-peak degradation of the shearing resistance is modelled correctly, but its increase with decreasing confinement is not described precisely by the simple linear law of Eq. 6.16.

The model was further verified by simulating two series of triaxial tests on weakly and a moderately cemented, natural samples [8] by means of the proposed constitutive model. The material parameters resulting from these tests and those used in the calculations are given in Tab. 6.1. For both series we used constant values of $\tilde{h} = 6000$, $\alpha = 2.0$ and $l = 1.0$. Figs. 6.5 and 6.6 show the results for various cell pressures.

Comparing both axial strain versus deviatoric stress and versus volumetric strain, the model reproduces at least qualitatively well the observed behaviour. For increasing confining pressure the quantitative agreement is better, while the lower the confining pressure the less good are the calculations.

As confining stress increases, cemented samples tested in triaxial shear show a transition from a brittle/ dilatant behaviour to a more ductile/compressive one. The different volumetric behaviour is captured by the model but the decreasing rate of softening with increasing confining pressure, especially relevant for the moderately cemented samples, is not simulated correctly. This limitation of the linear relation according to Eq. 6.16 can be reduced by taking into account the influence of the mean stress state on the softening modules $\tilde{h}$ as shown by the dotted line in Fig. 6.6.

The sharp bends in the experimental curves, where the degradation of the specimens suddenly accelerates, are interpreted as the development of well defined shear bands. The strain field is no more uniform within the samples, so a comparison between the measured and calculated results becomes meaningless from this point onward, at least without the use of any regularization technique.

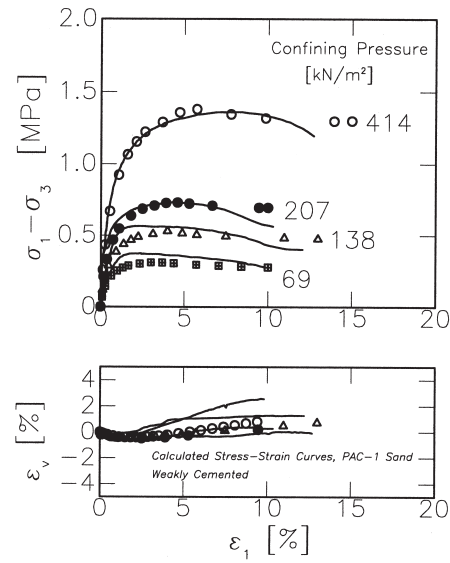


Figure 6.5: Simulation of triaxial compression tests on lightly cemented PAC1 sand

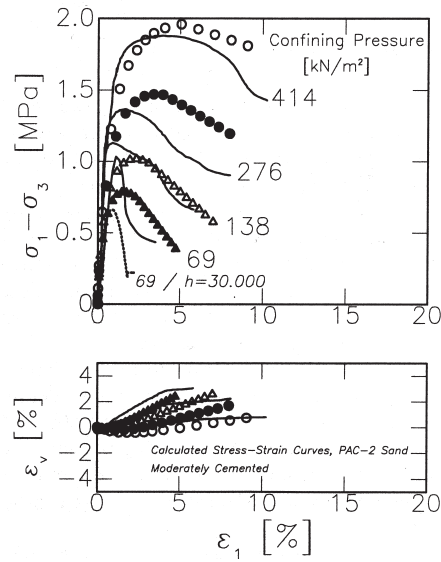


Figure 6.6: Simulation of triaxial compression tests on moderately cemented PAC2 sand

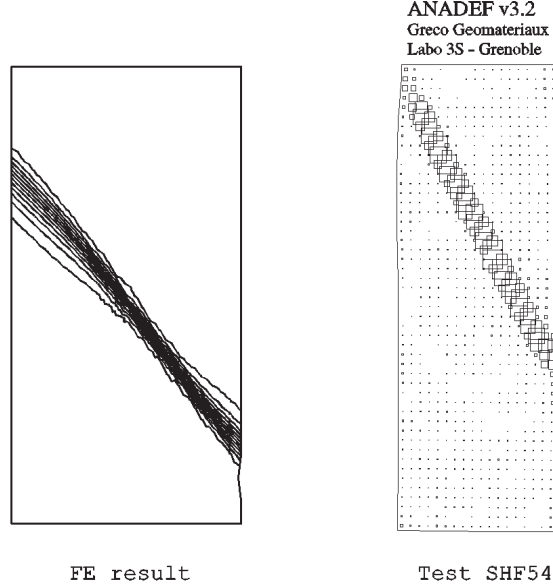


Figure 6.7: Shear localisation under biaxial condition: comparison of incremental deformation in numerical simulation (left) and experiment (right)

6.3 Localization under biaxial conditions

In addition to the simulations presented above a plane strain calculation ($\sigma_3 = 100 \text{ kPa}$), assuming a cemented, medium dense sand ($\varphi_p = 35^\circ$, $c = 12 \text{ kPa}$, $\psi_p = 5^\circ$, $\bar{h} = 6000$, $l = 0.5 \text{ mm}$, $\alpha = 2.0$), was performed. The localisation was forced by a geometrical imperfection at the lower right boundary. In Fig. 6.7 the incremental deformation field for a axial straining of 0.2 is compared qualitatively to experimental results [9] of an uncemented sand with similar soil properties as the simulated material for the residual state. To our knowledge there are no results on (initially) cemented sands in literature to compare with.

The shear band is not straight but gently curved. The width of the localised zone, resulting from an 1-dimensional analysis in the frame of the non-local theory, is a function of α and the internal length l according to Eq. 6.20 [6].

$$L = \frac{\pi \cdot l}{\sqrt{\ln(\alpha) - \ln(\alpha - 1)}} = 2 \text{ mm} \quad (6.20)$$

As a limitation of Eq. 6.20 it has to be recognized that there is no influence corresponding to the stress state nor to the material gradation of the sample. The calculated width of $L_N \approx 7 - 9 \text{ mm}$ for the 2-dimensional case is significantly larger then for the 1-dimensional case. If we interpret the internal length l as the mean grain size D_{50} we find a ratio of $\frac{L_N}{D_{50}} \approx 14 - 18$, which is of a factor of 2 larger then recent findings by [23].

The theoretical and experimental studies of localization in literature concentrate on predicting the orientation of the shear band with respect to the direction of the minor principal stress σ_3 . This inclination is strongly depending on the type of testing device, the material grading and density and the confining pressure. The classical solutions based on perfectly plastic models [33], called Coulomb's solution, Θ_C , and Roscoe's solution [26], Θ_R , in the

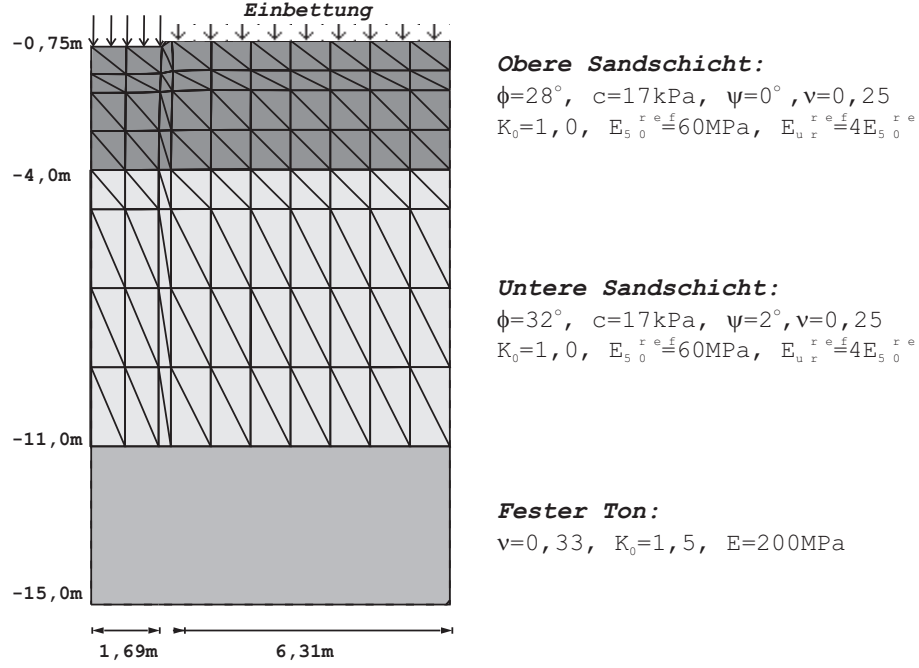


Figure 6.8: Soil profile and discretization

following, give an upper and a lower bound for the inclination of the shear band. Utilizing a model with hardening/softening plasticity and equilibrium bifurcation, [3] find an intermediate solution, Θ_A .

$$\begin{aligned}
 \Theta_R &= 45^\circ + \frac{\psi_p}{2} = 47.5^\circ \\
 \Theta_A &= 45^\circ + \frac{\varphi_p + \psi_p}{4} = 55.0^\circ \\
 \Theta_C &= 45^\circ + \frac{\varphi_p}{2} = 62.5^\circ
 \end{aligned} \tag{6.21}$$

The calculated orientation of the shear band of $\Theta_N \approx 51^\circ$ lies between the theoretical values of Θ_A and Θ_R according to Eqs. 6.21. This is different to the findings from experimental results by [33]. There it is stated that there is experimental evidence that coarse sands tend to give the Roscoe-orientation Θ_R and fine sands tend to give the Coulomb-orientation Θ_C . On the other side these results are in line with findings by [32], observing $\Theta \approx \Theta_A$ for Karlsruhe sand ($D_{50} = 0.33 - 0.8\text{ mm}$, $\sigma_3 = 60 - 200\text{ kPa}$), and [10] finding $\Theta \approx \Theta_R$ for Ottawa sand ($D_{50} = 0.72\text{ mm}$, $\sigma_3 = 200\text{ kPa}$)

6.4 Load-displacement behaviour of a shallow foundation

In 1994 full-scale field tests on 5 different shallow foundations were performed in Texas (USA). The foundations of 9 m^2 (squares; embedding 0.75 m) were loaded until failure.

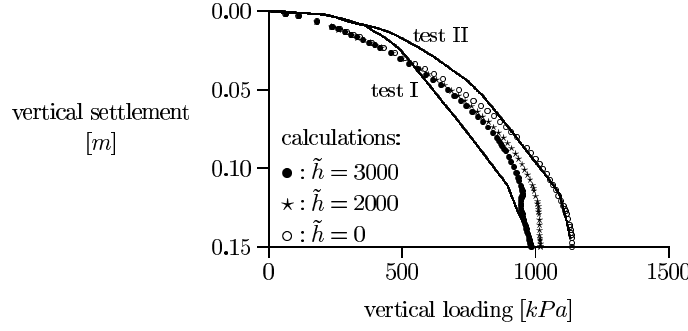


Figure 6.9: Load-settlement behaviour without preconsolidation

The subsoil of the foundations (see Fig. 6.8) mainly consists of sand ($I_D \approx 0.55, \gamma_d = 15.0 \text{ kN/m}^3$). The lower boundary of the discretization ($z = -11.0 \text{ m}$) is formed by a rather stiff layer of clay. Parallel to the field tests a large in-situ field investigation was performed, including SPT-, CPT-, pressiometer- and dilatometer tests. Because the groundwater table was found at -4.9 m below ground surface it was not possible to quantify the observed *cohesion* of the sand. Both, effects of capillary stress and cementation, occur simultaneously at the same time. The soil parameters which were chosen for the different soil layers are given in Fig 6.8.

For the axis-symmetric calculation ($r = 1.69 \text{ m}$), the foundation was modelled as a *stiff* beam (plate) with full contact between soil and foundation. Loading was applied as a prescribed displacement of this beam. Two kinds of calculations were performed: in the first case primary stresses were calculated just from the vertical overburden pressure as $\sigma_1 = \Sigma \gamma \cdot \Delta z$ and $\sigma_3 = K_0 \cdot \sigma_1$. In the second case an additional vertical loading of $\sigma_v = 100 \text{ kPa}$ was simulated and removed before the activation of the foundation. By this *preloading* we enlarge the initial yield surface and force a higher reloading stiffness of the subsoil for the first load steps (instead of a initial loading stiffness). Additionally to the parameters already mentioned values of $m = 0.5, R_f = 0.9, \alpha = 1.0, l = 0.001$ and $\sigma^{ref} = 100 \text{ kPa}$ were used for all calculations.

In Figs. 6.9 and 6.10 we compare the load-settlement-curves for the different cases of primary stresses with the measured values of two tests I and II. Additionally for both cases the influence of the softening modulus $\tilde{h}$ on the load-settlement behaviour is displayed. Here $\tilde{h} = 0$ corresponds to the situation without softening.

Considering first the case without preconsolidation, referring to the ultimate load, we

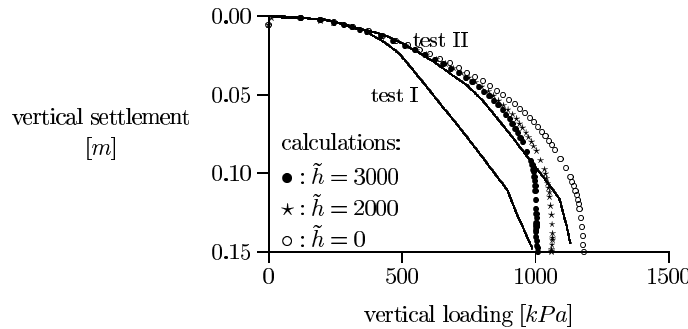


Figure 6.10: Load-settlement behaviour with preconsolidation

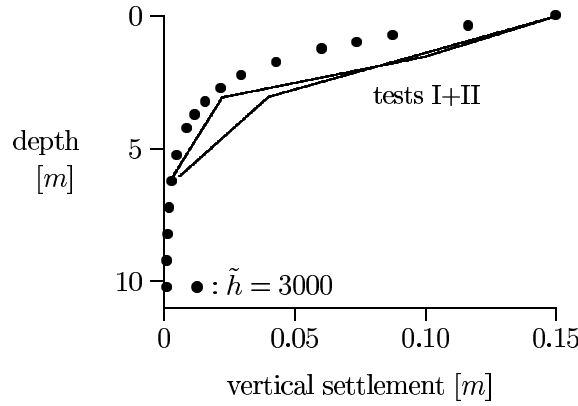


Figure 6.11: Measured and calculated settlements with depth

find for all values of $\tilde{h}$ a satisfying agreement between the measured and calculated data. The influence of the softening becomes significant for settlements greater than 4 cm. All three calculations show rather large difference for the initial part of the curves. Here the calculated curves imply a much too low stiffness of the subsoil. This behaviour can be improved by the application of a preconsolidation mentioned above. Doing so a much better agreement between measured and calculated data can be gained. The influence of softening becomes very clear for this situation: only for values of $\tilde{h} \approx 2000 - 3000$ we find realistic values for the ultimate bearing capacity of the footing.

Additionally to the global settlements also settlement profiles by extensimeters and horizontal deflections by inclinometers were recorded with depth. For the case with preconsolidation and $\tilde{h} = 3000$ results are displayed in Figs. 6.11 and 6.12. The quality of the chosen approaches is demonstrated by these results: Beside the good fit of the depth of influence of about 6 m, the whole settlement profile shows very small differences. With some limitations the same holds for the horizontal deflections: again the depth of influence fits very well but the exact calculated numbers are too large.

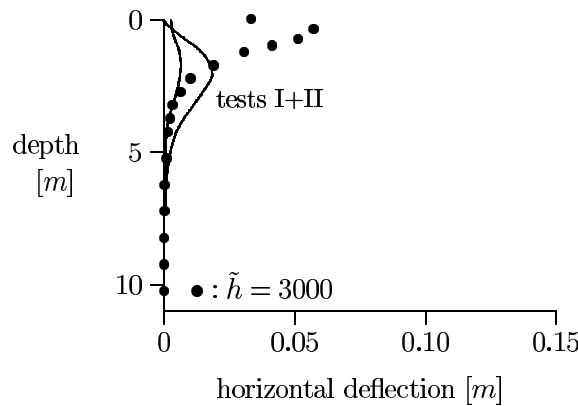


Figure 6.12: Measured and calculated deflections with depth

6.5 Summary

Taking into account different characteristics of cemented sands from experimental observations and basic plasticity concepts we derive an elastoplastic strain-hardening model which is able to simulate a number of typical patterns of this type of geomaterial. We purposely keep the model as simple as possible, so the effect of the different components is obvious. Doing so we find limitations for the range of effects successfully modelled. Quantitative agreement is not satisfactory in all cases analysed. Discrepancies between calculated and experimental results are mostly due to the insufficient modelling of the law of evolution for the softening.

The description of the degradation of bonds between individual grains of a cemented sand by means of a non-local evolution equation shows to be an effective tool for the objective modelling of their stress-strain behaviour including (cohesional) strain-softening.

At the moment the degradation effect of debonding is coupled with a frictional hardening process only. Further work is planned for the additional coupling with frictional-softening. Therefore the next step will be the implementation of (non-local) frictional strain-softening. Here mainly the interaction of the different non-local processes will be considered in detail. Beside these remarks the models quantitative description of the *collapse* of the micro structure for small strains must be improved.

As another example for the quality of the proposed approach the load displacement curve of a shallow foundation on cemented sand is backcalculated. The range of loading simulated reaches until failure. Results of the calculations relate very nice to the measured results only when considering cohesional softening, also for the deformation-field below the footing.

Bibliography

- [1] A. A. Abdulla and P. D. Kioussis. Behaviour of cemented sands - I. Testing. *Int. J. Num. Anal. Methods Geomech.*, 21:533–547, 1997.
- [2] A. A. Abdulla and P. D. Kioussis. Behaviour of cemented sands - II. Modelling. *Int. J. Num. Anal. Methods Geomech.*, 21:549–568, 1997.
- [3] J. R. F. Arthur and T. Dunstan. Plastic deformation and failure in granular media. *Géotechnique*, 27:53–74, 1977.
- [4] Z. P. Bažant and T. B. Belytschko. Continuum theory for strain-softening. *J. Geotech. Eng. Div. ASCE*, 110(12):1666–1692, 1977.
- [5] Z. P. Bažant and F. B. Lin. Yield limit degradation: Non-local continuum model with local strain. In *Proc. Int. Conf. Computational Plasticity*, pages 757–1780. CIMNE, Barcelona, Spain, 1987.
- [6] R. B. J. Brinkgreve. *Geomaterial models and numerical analysis of softening*. PhD thesis, TU Delft, 1994.

- [7] R. B. J. Brinkgreve and P. A. Vermeer. A new effective non-local strain-measure for softening plasticity. *Chambon, ed., Localisation and Bifurcation Theory for Soils and Rocks*, pages 89–100, 1994.
- [8] G. W. Clough, N. Sitar, R. C. Bachus, and N. S. Rad. Cemented sands under static loading. *J. Geotech. Eng. Div. ASCE*, 107:799–817, 1981.
- [9] J. Desrues, J. Lanier, and P. Stutz. Localization of the deformation in tests on sand samples. *Engineering fracture mechanics*, 21(4):909–921, 1985.
- [10] A. Drescher and C. Han I. Vardoulakis. A biaxial apparatus for testing soils. *Geotechnical Testing journal*, 13(3):226–234, 1990.
- [11] J. M. Dupas and A. Pecker. Static and dynamic properties of sand-cement. *J. Geotech. Eng. Div. ASCE*, 105:419–436, 1979.
- [12] J. Dvorkin and D. Yale. Plastic compaction of cemented granular materials. *Computer and Geotechnics*, 20(3):287–302, 1997.
- [13] A. C. Ehrlingen. Nonlocal polar elastic continua. *Int. J. Engineering Science*, 10:1–16, 1972.
- [14] A. C. Ehrlingen. On nonlocal plasticity. *Int. J. Engineering*, 19:1461–1474, 1981.
- [15] S. Frydman, D. Hendron, J. Steinbach, R. Baker, and B. Shaal. Liquefaction study of cemented sands. *J. Geotech. Eng. Div.*, 106:275–297, 1980.
- [16] G. Gudehus. A comprehensive constitutive equation for granular materials. *Soils Fdns*, 36(1):1–12, 1996.
- [17] G. Gudehus and V. Mikulitsch. Materialverhalten zementierter Korngerüste. *Bauingenieur*, 71:119–126, 1996.
- [18] H. Hirai, M. Takahashi, and M. Yamada. An elastic-plastic constitutive model for the behaviour of improved sandy soils. *Soils Fdns*, 29:69–84, 1989.
- [19] M. Kavvas, A. Anagnostopoulos, and N. Kaltefleiter. A framework for the the mechanical behaviour of the cemented corinth marl. *Proc. of the Int. Symp. on Geotech. Eng. of Hard Soils - Soft Rocks*, pages 577–583, 1993.
- [20] R. L. Kondner and J. S. Zelasko. A hyperbolic stress strain formulation for sands. *Proc. 2nd Pan. Am. ICOSFE Brazil*, 1:289–394, 1963.
- [21] R. Lagioia and R. Nova. An experimental and theoretical study of the behaviour of a calcarenite in triaxial compression. *Géotechnique*, 45(4):633–648, 1995.
- [22] R. Nova and G. Sacchi. A model of the stress strain relationship of orthotropic geological media. *J. Mec. Theor. Appl.*, 1(6):924–949, 1982.
- [23] M. Oda and H. Kazama. Micro-structure of shear band and its relation to the mechanisms of dilatancy and failure of dense granular soils. *Géotechnique*, 48(4):465–481, 1998.

- [24] T. D. O'Rourke and E. Crespo. Geotechnical properties of cemented volcanic soils. *J. Geotech. Eng. Div. ASCE*, 114:1126–1147, 1988.
- [25] O. A. Pekau and V. Gocevski. Elasto-plastic model for cemented and pure sand deposits. *Comput. Geotech.*, 7:155–187, 1989.
- [26] K. H. Roscoe. The influence of strains in soil mechanics. *Géotechnique*, 20(2):129–170, 1970.
- [27] P. W. Rowe. The stress-dilatancy relation for static equilibrium of an assembly of particles in contact. *Proc. Roy. Soc. A.*, 269:500–527, 1962.
- [28] S. K. Saxena and R. M. Lastrico. Static properties of lightly cemented sands. *J. Geotech. Eng. Div. ASCE*, 104:1449–1464, 1978.
- [29] T. Schanz. A constitutive model for cemented sands. *Adachi, Oka & Yashima, eds, Localisation and Bifurcation Theory for Soils and Rocks, Gifu, A. A. Balkema Publishers, Rotterdam*, pages 165–172, 1998.
- [30] T. Schanz. Zur Modellierung des mechanischen Verhaltens von Reibungsmaterialien. *Mitteilung 45 des Instituts für Geotechnik, Universität Stuttgart*, 1998 b.
- [31] T. Schanz and P. A. Vermeer. Angles of friction and dilatancy of sand. *Géotechnique*, 46(1):145–151, 1996.
- [32] I. Vardoulakis. Shear band inclination and shear modulus of sand in biaxial tests. *Int. J. Num. Anal. Methods Geomech.*, 119:103–119, 1980.
- [33] P. A. Vermeer. The orientation of shear bands in biaxial tests. *Géotechnique*, 40(2):223–236, 1990.

7

Isothermal and nonisothermal multiphase multicomponent processes in the subsurface

R. Helmig, H. Class und R. Hinkelmann
Institut für Wasserbau
Lehrstuhl für Hydromechanik und
Hydrosystemmodellierung
Universität Stuttgart
D-70550 Stuttgart

7.1 Introduction

One of the key interests of environmental protection should be not to pollute the subsurface and the entire environment at all. This is particularly important for the hydrosystem *subsurface* because a remediation is extremely complex, if at all possible (see e. g. [13, 17]). The hydrosystem *subsurface* is a multiphase system. The loose and solid rock matrices represent the spatially fixed subsystem, whereas cavity-filling fluids like *groundwater* and *soil air* represent mobile subsystems (see [3]). The hydrosystem *subsurface* is an open system whose boundary conditions can be subject to strong spatial and temporal oscillations. A special difficulty is that the coupling of the physical, chemical, and microbiological processes varies strongly, so that the flow and transport processes take place at extremely different scales. These range from the regional scale of an investigated area and the geological structures of the subsurface, and the pore space to the molecular scale of the microbiological processes.

By numerical flow and transport models, we can take an integrating look at the physical, chemical, and microbiological aspects, i. e. they are a useful basis for decisions concerning the preservation or improvement of the groundwater quality. In many cases, these models have successfully made possible

- the planning of groundwater management measures with respect to groundwater quality and protection,
- the prediction of the presumed effects of groundwater contaminations,
- the planning and specification of protection, and remediation measures

(see e. g. [5, 11, 12, 14]).

Most of the existing flow and transport models describe the groundwater flow and the convective-dispersive spreading of one or more components entirely dissolved in water (multicomponent/single-phase model). Some substance groups frequently used in industry, however, are hydrophobic, i. e. they are immiscible with water and only slightly soluble (for example, halogenated hydrocarbons and petroleum products). In contrast to the transport of dissolved contaminants, these contaminants represent an individual phase (NAPL¹) whose flow movement must be described. Thus, the unsaturated zone is a three-phase system consisting of the water, air, and NAPL-phase. The balance equations in such a multiphase system are described by far more complex laws than in the case of components dissolved in only one water phase (see [2, 15, 17]).

For a quantitative description and predictive computation of temperature dependent processes, as they occur, for example, during the storage of radioactive waste or during thermal remediation processes, in addition to the movement of the individual phases, phase transitions, and transport and heat transfer processes must also be accounted for. The generation of the necessary model concepts and of the corresponding prediction instruments is an interdisciplinary problem which joins, among others, aspects from geology, fluid mechanics, geophysics, thermodynamics, chemistry, mathematics, and microbiology.

The numerical modelling of the isothermal and non-isothermal multiphase processes is a central element in the range of methods, which helps for a better understanding of the complex flow and transport processes and allows for predictional computations, for example, with respect to possible remediation strategies.

In this paper, we present the basic partial differential equations for nonisothermal multiphase multicomponent flow in a porous medium. At the end, we show two application examples of the model. The first one deals with the verification of the presented model for a nonisothermal water-gas system and in the second one an attempt is made to validate the model by a comparison with experimental data.

7.2 Balance equations

In this section, we will describe some basic elements of mathematical modelling of (non-isothermal) multiphase multicomponent flow and transport processes in porous media. The formulations are set up from continuum mechanics which express the conservation laws for mass, momentum, and energy. For each phase respectively for each component a continuity equation is required.

7.2.1 General multiphase flow differential equation

In fluid mechanics, it is normally necessary that both a continuity and a momentum equation are formulated in order to completely describe the flow of a fluid (e. g. *Navier-Stokes* equations). A general form of the continuity equation in integral form is given

¹NAPL (non-aqueous phase liquid)

by

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \varrho \, d\Omega + \int_{\Gamma} (\varrho \mathbf{v}) \cdot \mathbf{n} \, d\Gamma = 0. \quad (7.1)$$

In (7.1) the mass flux density $\varrho \mathbf{v}$ is multiplied with the normal vector $\mathbf{n}$ considering only velocities orthogonal to the boundary Γ . Ω represents a volume in the 3-d-case and an area in 2-d. Analogously, Γ is an area in 3-d and a line in 2-d. Applying the *Gauß integral theorem* and writing in differential form yields

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \operatorname{div}(\varrho \mathbf{v}) = 0. \quad (7.2)$$

Regarding multiphase flow in a porous medium, we can formulate the continuity equation for each phase α :

$$\frac{\partial(\phi S_{\alpha} \varrho_{\alpha})}{\partial t} + \operatorname{div}(\varrho_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha}) = 0. \quad (7.3)$$

In (7.3), $\mathbf{v}_{\alpha}$ is the flow velocity of phase α averaged over a cross-section (*Darcy velocity*). S_{α} is the saturation of phase α and ϕ is the porosity of the porous medium.

The momentum equation for an *Eulerian* control volume can be written in differential form as (gravity is considered to be the only external force acting on the control volume)

$$\frac{\partial(\varrho \mathbf{v})}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \operatorname{div}(\varrho \mathbf{v}) = \varrho \mathbf{g}. \quad (7.4)$$

For the macroscopic description of flow processes in a porous medium it has become practice that this form of the momentum equation is replaced by the application of *Darcy's Law* (see e. g. [1]), given as follows for a single-phase system by

$$\mathbf{v} = -\mathbf{K}_f \cdot \operatorname{grad} h \quad (7.5)$$

and in its enhanced form for a multiphase system

$$\mathbf{v}_{\alpha} = -\frac{k_{r\alpha}}{\mu_{\alpha}} \mathbf{K} \cdot (\operatorname{grad} p_{\alpha} - \varrho_{\alpha} \mathbf{g}), \quad (7.6)$$

where $k_{r\alpha}$ is the relative permeability of phase α and μ_{α} the dynamic viscosity. Thus, the momentum condition (*Darcy velocity*) can be inserted into the continuity equation (7.3), and one obtains the multiphase flow differential equation (without sinks and sources):

$$\frac{\partial(\phi S_{\alpha} \varrho_{\alpha})}{\partial t} - \operatorname{div} \left(\varrho_{\alpha} \frac{k_{r\alpha}}{\mu_{\alpha}} \mathbf{K} \cdot (\operatorname{grad} p_{\alpha} - \varrho_{\alpha} \mathbf{g}) \right) = 0. \quad (7.7)$$

7.2.2 Mass balance in multicomponent systems

In case of a multiphase multicomponent system, it is necessary to describe the transfer of mass components between the phases, e. g. due to dissolution, degassing, evaporation, condensation, adsorption. The easiest way to do that is by formulating the mass balance equations for each component. In the following, we will exemplarily present the mathematical formulation of a nonisothermal three-phase three-component system consisting of the phases water (subscript w), NAPL (n), gas (g), and the components water (superscript w), organic contaminant (c), and air (a). Details may be found e. g. in [4, 8, 10].

The transport of the components may occur advectively with the flowing phases or by diffusion in the gas-phase. We describe the mass balances in molar form, therefore the *Darcy* velocity is multiplied with the molar density $\varrho_{mol,\alpha}$. The mass balance equation for a component can then be formulated as

$$\begin{aligned}
& \phi \frac{\partial (\sum_{\alpha} \varrho_{mol,\alpha} x_{\alpha}^K S_{\alpha})}{\partial t} \\
& - \sum_{\alpha} \operatorname{div} \left\{ \frac{k_{r\alpha}}{\mu_{\alpha}} \varrho_{mol,\alpha} x_{\alpha}^K \mathbf{K} (\mathbf{grad} p_{\alpha} - \varrho_{mass,\alpha} \mathbf{g}) \right\} \\
& - \operatorname{div} \{ D_{pm}^K \varrho_{mol,g} \mathbf{grad} x_g^K \} \\
& - q^K = 0, \quad K \in \{w, a, c\}, \quad \alpha \in \{w, n, g\}.
\end{aligned} \tag{7.8}$$

7.2.3 Energy balance

The energy stored in a fluid mechanical system consists of mechanical and thermodynamical parts. Due to heat and work, these parts can be transformed into one another. The mechanical energy contains the gravity potential and the kinetic energy (velocity). The kinetic energy corresponds to the work performed by the inertial force. If only balancing the mechanical parts of a system, this is called the *energy equation of fluid mechanics* (see e. g. [19]):

$$\frac{dE}{dt} = \frac{dW_A}{dt} + \frac{dW_B}{dt} + \frac{dW_i}{dt}, \tag{7.9}$$

$$\text{with } E = \int_{\Omega} \frac{\varrho}{2} v^2 d\Omega. \tag{7.10}$$

The change of the work W with time represents the power P . W_A is the work of external stress acting on the control volume Ω . Then, W_B stands for the work of the gravity force and W_i for the work of the internal stress. W_i can also be considered as the negative

internal energy U_i in the sense of mechanics, thus $W_i = -U_i$. It is composed of parts induced by pressure and by friction. E is the kinetic energy.

If in addition thermodynamic parts are considered, we have to take into account also the internal energy U in the sense of thermodynamics. Corresponding to the transformation of mechanical energy due to work, one can view heat as the analogue for the transformation of thermodynamical energy. Mechanical work can also be transformed into heat, e. g. due to friction, dissipation. The energy balance equation considering both mechanical and thermodynamical parts can then be written as

$$\frac{dE_t}{dt} = \frac{dW_A}{dt} + \frac{dW_B}{dt} + \frac{dQ}{dt}, \quad (7.11)$$

$$\text{with } E_t = E + U = \int_{\Omega} \frac{\rho}{2} v^2 d\Omega + \int_{\Omega} u d\Omega. \quad (7.12)$$

Here, E_t is the total kinetic energy, Q is the heat transported over the system boundaries.

By subtraction (7.11) and (7.9), we obtain the heat transport equation, which we want to use in the following solely:

$$\frac{dU}{dt} = \frac{dQ}{dt} - \frac{dW_i}{dt}. \quad (7.13)$$

With

$$\frac{dW_i}{dt} = -\frac{dW_V}{dt} - \frac{dW_D}{dt} \quad (7.14)$$

we obtain

$$\frac{dU}{dt} = \frac{dQ}{dt} + \frac{dW_V}{dt} + \frac{dW_D}{dt}, \quad (7.15)$$

where W_V and W_D are the parts of the volume changing work and the work due to dissipation. The individual terms in (7.15) can be computed for an *Eulerian* control volume as

$$\frac{dU}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} u d\Omega + \int_{\Omega} \operatorname{div}(\rho u \mathbf{v}) d\Omega \quad (7.16)$$

$$\frac{dQ}{dt} = \int_{\Gamma} \lambda \mathbf{grad} T d\Gamma = \int_{\Omega} \operatorname{div}(\lambda \mathbf{grad} T) d\Omega \quad (7.17)$$

$$\frac{dW_V}{dt} = - \int_{\Omega} \operatorname{div}(p \mathbf{v}) d\Omega. \quad (7.18)$$

Dissipation can be neglected since the velocities occurring in multiphase subsurface flow are normally very low ($\frac{dW_D}{dt} \approx 0$). Inserting (7.16), (7.17), (7.18) in (7.15) and writing in differential form yields

$$\frac{\partial(u\rho)}{\partial t} + \underbrace{\operatorname{div}(\rho u \mathbf{v}) + \operatorname{div}(p \mathbf{v})}_{= \operatorname{div}(\rho h \mathbf{v})} - \operatorname{div}(\lambda \mathbf{grad} T) = 0. \quad (7.19)$$

Now we have with (7.19) the heat balance of a flowing fluid-phase on the micro-scale. Going to the REV-scale in a porous medium filled with multiple fluid phases, we have to account for the heat balances of all fluid phases as well as the solid matrix. By assuming *local thermal equilibrium* it is sufficient to formulate a single heat balance for the fluid-filled porous medium:

$$\begin{aligned}
& \phi \frac{\partial (\sum_{\alpha} \varrho_{mass,\alpha} u_{\alpha} S_{\alpha})}{\partial t} + (1 - \phi) \frac{\partial \varrho_s c_s T}{\partial t} \\
& - \operatorname{div} (\lambda_{pm} \mathbf{grad} T) \\
& - \sum_{\alpha} \operatorname{div} \left\{ \frac{k_{r\alpha}}{\mu_{\alpha}} \varrho_{mass,\alpha} h_{\alpha} \mathbf{K} (\mathbf{grad} p_{\alpha} - \varrho_{mass,\alpha} \mathbf{g}) \right\} \\
& - \sum_K \operatorname{div} \{ D_{pm}^K \varrho_{mol,g} h_g^K M^K \mathbf{grad} x_g^K \} \\
& - q^h = 0, \quad K \in \{w, a, c\}, \alpha \in \{w, n, g\}.
\end{aligned} \tag{7.20}$$

c_s is the specific heat capacity of the solid matrix. With the mass balances (7.8) and (7.20), we obtain a system of four coupled, nonlinear partial differential equations to be solved. Details for the solution and discretization are given, e. g. in [4, 8].

7.3 Example 1: The heatpipe effect

The heatpipe problem was used for the verification of the numerical model. The problem with a nonisothermal three-phase three-component model is the fact that no appropriate analytical solutions are available. In this case, the verification is done with a slightly modified semianalytical solution of the heatpipe effect [20], which is a nonisothermal two-phase two-component system. This makes sense, because the new simulation method is developed with the ability to handle different phase states inclusive two-phase two-component systems (see Section 7.2.3). At the right-hand boundary of a horizontal column (Figure 7.1) with an initially constant water saturation of 0.5, a constant heat flux ($q = 100 \text{ W}$) into the column is given. At the left-hand boundary constant values (Dirichlet conditions) for the gas phase pressure ($p_g = 101330 \text{ Pa}$), the effective water saturation ($S_{we} = 1.0$), and the air mole fraction in the gas phase ($x_g^a = 0.71$). Thus, the temperature is also stated to $T = 68.6^\circ \text{C}$. Due to the heat flux the system is heated up until the boiling temperature is reached and steam is built at the right-hand boundary. This causes a pressure gradient in the gas phase and the steam flows away from the heat source. After reaching cooler regions of the column the steam condenses and sets free its latent heat of vaporization. After a while, a non-uniform saturation profile is obtained and a gradient of the capillary pressure is produced. Hence, the pressure gradients of the phases have opposite directions and a circulation flow is built. *Udell & Fitch* (1985) [20] derive four coupled first order differential equations for pressure, saturation, temperature, and gas-

phase mole fraction. These equations are solved by numerical integration with a fourth order *Runge-Kutta* method.

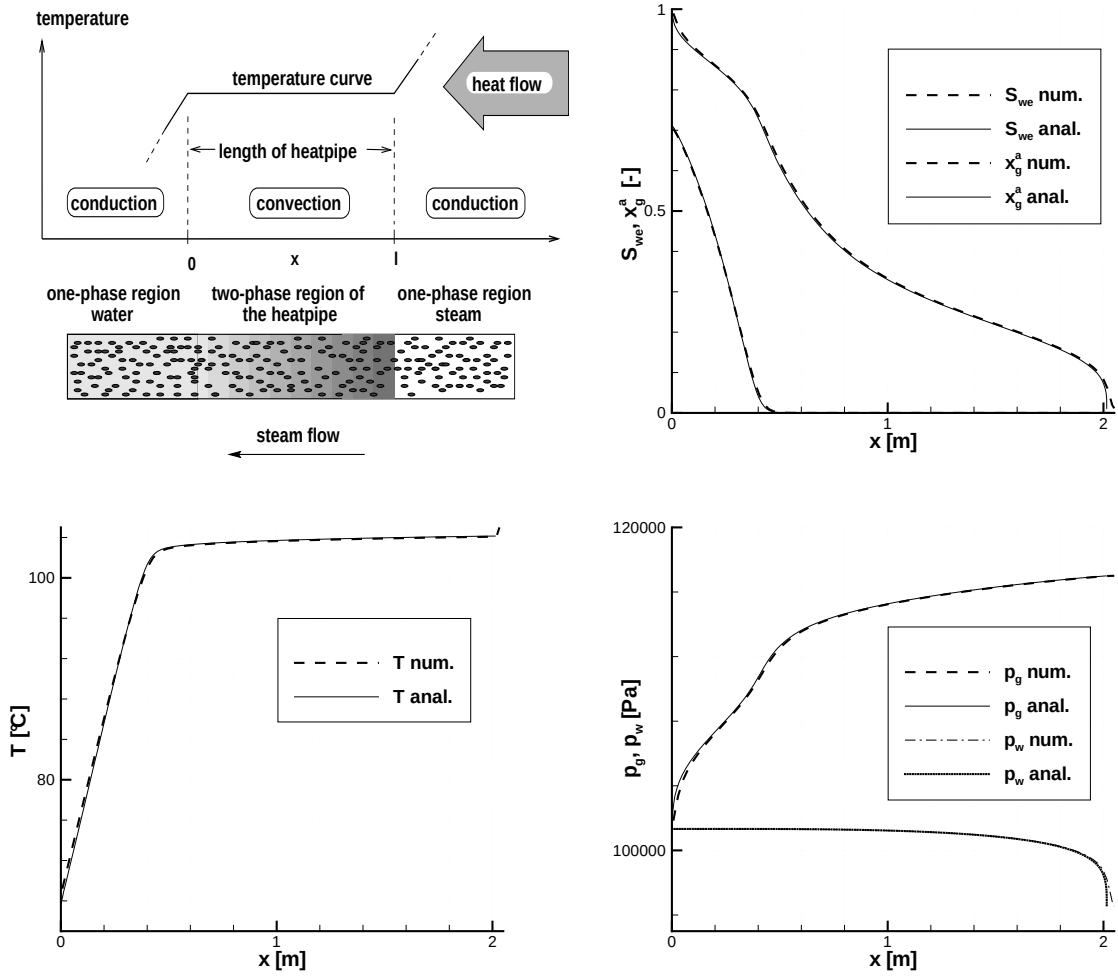


Figure 7.1: The heatpipe effect – schematic sketch and comparisons between numerical and analytical results.

Figure 7.1 gives a schematic sketch of the heatpipe and shows that the numerical results match the analytical solutions excellently.

The numerical simulation of the heatpipe system was carried out with the BOX discretization method [4, 8, 10]. The following model parameters were used for the simulation run:

Permeability	: $K = 10^{-12} \text{ m}^2$
Porosity	: $\Phi = 0.4$
Residual water saturation	: $S_{wr} = 0.15$
Heat conductivity of the fully-saturated porous medium	: $\lambda_{pm}^{S_w=1} = 1.13 \text{ W/(m K)}$
Heat conductivity of the dry porous medium	: $\lambda_{pm}^{S_w=0} = 0.582 \text{ W/(m K)}$
Soil grain density	: $\rho_s = 2600 \text{ kg/m}^3$

Specific heat capacity of the soil grains	: $c_s = 700 \text{ J/(kg K)}$
Density of water	: $\varrho_w = 958.4 \text{ kg/m}^3$
Dynamic viscosity of water	: $\mu_w = 2.938 \cdot 10^{-4} \text{ Pa s}$
Dynamic viscosity of air	: $\mu_g^a = 2.08 \cdot 10^{-5} \text{ Pa s}$
Dynamic viscosity of steam	: $\mu_g^w = 1.20 \cdot 10^{-5} \text{ Pa s}$

A function according to [7] is chosen for the relative permeability-saturation relationship:

$$\begin{aligned} k_{rg} &= (1 - S_e)^3 \quad \text{for steam (gas phase),} \\ k_{rw} &= S_e^3 \quad \text{for water.} \end{aligned} \quad (7.21)$$

For the capillary pressure-saturation relationship, the following function of [16] is used

$$p_c = p_0 \cdot \gamma \cdot 1.417(1 - S_e) - 2.120(1 - S_e)^2 + 1.263(1 - S_e)^3. \quad (7.22)$$

The surface tension γ at $T = 100.5^\circ\text{C}$ is 0.05878 Nm^{-1} and for the scaling pressure applies $p_0 = \sqrt{\phi/K}$. A constant value of 0.5 is assigned to the tortuosity τ and the binary diffusion constant D_g^{aw} takes the value $2.6 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$.

The dimension of the model domain in x-direction is chosen to 2.4 m. However, this is not important for the length of the heatpipe after reaching stationary state as long as the domain is sufficiently large for the heatpipe to be built. We used a discretization length of $\Delta x = 0.04 \text{ m}$. The initial conditions were chosen to $p_g = 101330 \text{ Pa}$, $S_w = 0.5$ und $T = 70^\circ\text{C}$.

7.4 Example 2: A VEGAS column experiment

We present here a numerical simulation of laboratory column experiment which was carried out in the VEGAS² laboratory in Stuttgart. The aim was to investigate, if the model is able to reproduce the relevant physical processes. Identification of these processes and a reliable determination of the model parameters is a necessary presumption for a successful model validation and the applicability of the model for natural systems and field-scale problems. In the previous section, we presented a partial verification of this model for a nonisothermal water-gas system.

A schematic description of the experimental configuration and a photo of the sand-filled glass column 30 cm in length and 10 cm in diameter are shown in Figure 7.2. The column was insulated to minimize heat loss. The sand was filled into the column under air-dry conditions so that the initial water saturation is expected to be below 1 %. After being saturated with xylene, the column was allowed to drain through the bottom for several hours, reaching close to residual xylene saturation. The mass of xylene then present in the column immediately before steam injection was determined by weighing the column after the drainage and comparing it with the weight of the fully xylene-saturated column. From that, a xylene mass of 315 g to be removed by steam flooding could be calculated. Knowing the density of the sand grains and the total volume of the column, we calculated the porosity of the sand from the weight of the sand charge to be 46 %. Steam was injected

²Versuchseinrichtung zur Grundwasser- und Altlastensanierung

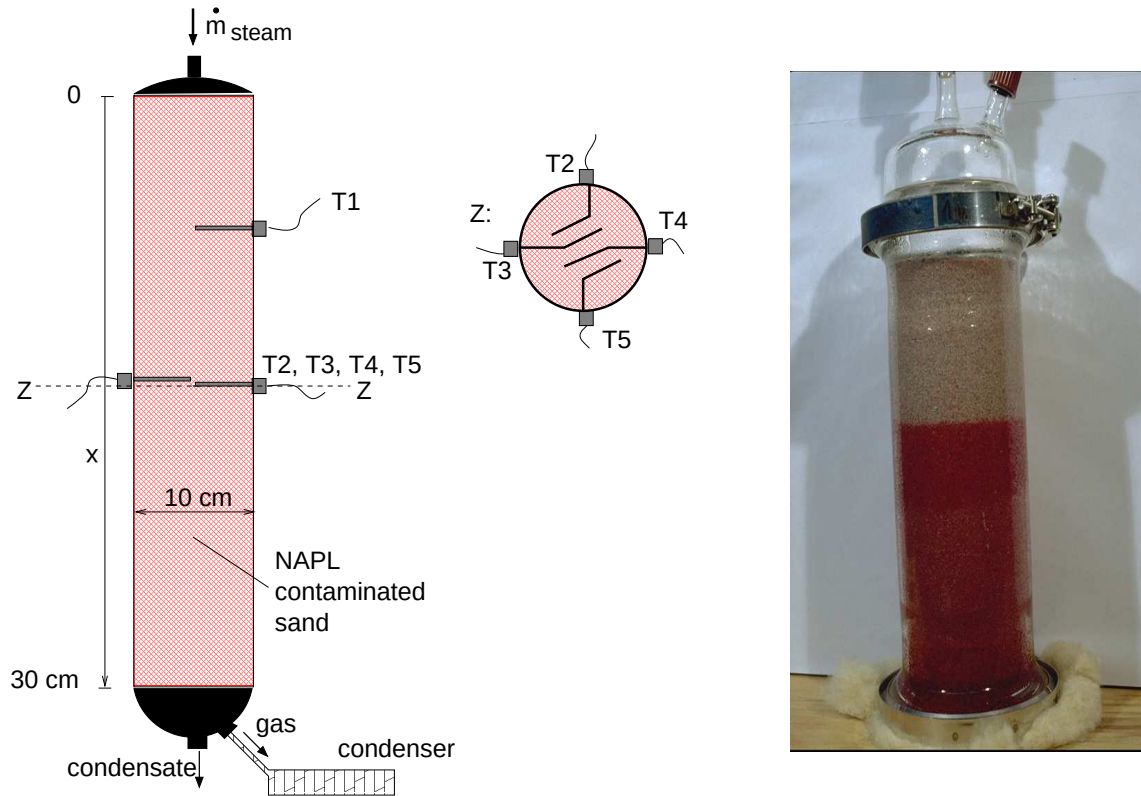


Figure 7.2: Configuration of the experiment.

from the top of the column with an average rate of $q_{st} = 0.21$ kg/h. The standard deviation of the mean value of the injection rate was $\sigma = 0.04$. The enthalpy of the steam is assumed to be approximately 2590 kJ/kg, which corresponds to a composition of 96 % steam and 4 % condensate. When steam came into contact with the cooler soil matrix, it transferred its latent heat of vaporization (≈ 2257 kJ/kg) to the soil grains. Steam condensed while the temperature of the porous medium increased and a very stable propagating steam front developed.

Vaporized xylene is transported in the gas phase towards the condensation front, where it recondenses, increasing the xylene saturation at the front. An increased effective NAPL permeability allows more xylene to be displaced by pressure and gravitational forces.

The temperature curves monitored during the steam flooding are shown in Figure 7.3. The sensors were located at 6.5 cm (T1, also called T_{upp}), 14.5 cm (T2, T3, T4, T5, collectively called T_{mid}) and 23 cm (T6) from the top of the column. Four sensors were placed on the same horizontal level for the observation of potential fingering effects. After going through the temperature plateau, the temperature in all six sensors increased to the boiling temperature of pure water. This means that all NAPL disappeared from the column. The plateau of sensor 1 was – as expected – significantly shorter than those of the sensors further downstream. The slope of the signal of sensor 1 was not as steep as it was at sensors 2 to 5. At the beginning of the injection, the steam must heat up the whole mass of the glass column head and the steam supply pipe to operation temperature. During this time, only part of the injected energy could be brought into the sand since the rest of the energy is lost in the column head. Thus, the temperature increase at sensor 1

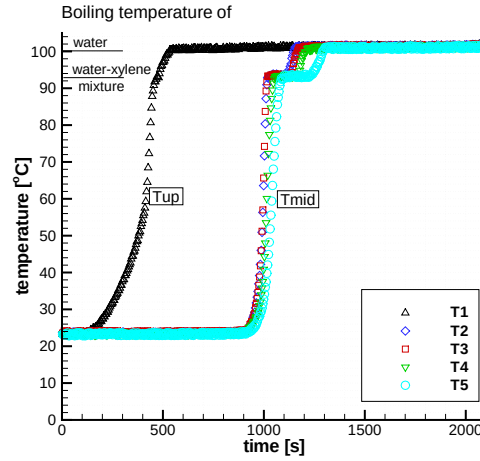


Figure 7.3: Measured from the temperature sensors inside the column.

was flatter before operation temperature is reached, and all of the energy of the injected steam could be brought into the sand.

Examining the slight time shift of the steam-front breakthroughs at sensors 2, 3, 4, and 5 strengthened the assumption that the front did not propagate uniformly, but that some fingering occurred as a result of small-scale heterogeneity. Nevertheless, these sensors showed a good agreement in the length of the temperature plateau.

For the same sand as used here in this experiment, *Färber* (1997) [6] measured heat capacity $c_s = 840 \text{ J/(kg K)}$, density $\rho_s = 2650 \text{ kg/m}^3$ of the soil grains, as well as the permeability of the sand $K = 1.4 \cdot 10^{-11} \text{ m}^2$ (see Table 7.1). *Helmig et al.* (1998) [9] present numerical simulations of *Färber's* experiments. By matching the experimental data, they determined the *van Genuchten* parameters $vg_\alpha = 0.0005 \text{ Pa}^{-1}$ and $vg_n = 4.0$.

Parameter

Rock grain density	ρ_s	2650 kg/m^3
Specific heat capacity of the sand	$c_{s,Sand}$	840 J/(kg K)
Specific heat capacity of the glass	$c_{s,Glass}$	775 J/(kg K)
Porosity	ϕ	0.46
Heat conductivity of water saturated porous medium	λ_{Sand}	1.60 J/(m s K)

Table 7.1: Properties of the porous medium and the glass wall.

For the three-phase capillary pressure-saturation relationship, we used the *Parker* approach, presented in [18]. This approach is based on the *van Genuchten* relationships [21]. Therefore, we need to determine the curve parameters vg_α and vg_n . As described above, we used therefore the values $vg_\alpha = 0.0005 \text{ Pa}^{-1}$ and $vg_n = 4.0$. The relative permeability-saturation relationship used for the simulation is given also by the *Parker* approach for the NAPL phase. The water-phase and gas-phase relative permeabilities are calculated

using the *van Genuchten* functions. For the residual saturations we assumed a total liquid residual saturation of 12 % and a gas-phase residual saturation of 0.

Three-dimensional effects, due to heat loss through the column walls or from heterogeneities, are neglected. Therefore we discretized the domain by 60 one-dimensional elements of $\Delta x = 0.5$ cm. The heat capacities of head, bottom, and column walls are taken into account by assigning an increased effective heat capacity c_{eff} to the elements. For the standard elements (only considering the column walls), this yielded an effective heat capacity of 970 J/(kg K); for top and bottom elements, we used 1125 J/(kg K).

We assigned initial conditions to the primary variables water saturation $S_w = 0.005$, temperature $T = 23^\circ\text{C}$, and gas-phase pressure $p_g = 101300$ Pa. The initial condition for the NAPL saturation S_n can be determined from the condition that the mass of NAPL measured in the experiment is distributed in the column according to the profile of the capillary pressure-saturation curve. The maximum NAPL saturation at the column bottom is assumed to be 99 %.

The boundary conditions at the top are given by the mass flux of the steam along with the corresponding enthalpy flux. At the bottom, the fluid phases could break through into the environment at atmospheric pressure. With that it is obvious that the conditions at the bottom do change with time during the experiment. The gas-phase is displaced such that immediately after starting the steam injection, the NAPL saturation at the bottom has to decrease for allowing the gas to pass and enter into the environment. Furthermore, after the breakthrough at the bottom the water saturation increases.

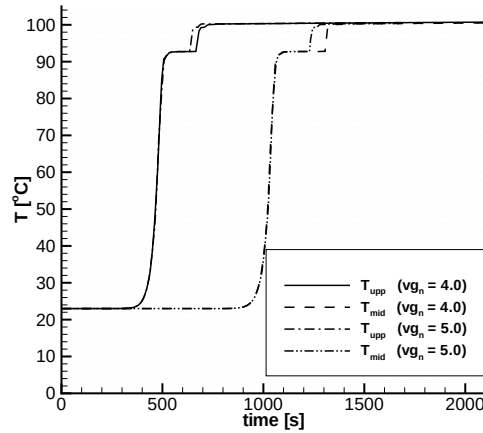


Figure 7.4: Numerical temperature curves at $x = 6.5$ cm (T_{upp}) and $x = 14.5$ cm (T_{mid}) for different vg_n .

The results of the numerical simulation for the temperature curves T_{upp} and T_{mid} are shown in Figure 7.4. Comparing them with the measured curves given by Figure 7.3, one can see that the propagating of the steam front is reproduced in good agreement with the measurements. The temperature rise due to the passing of the front at sensor T_{upp} is obviously steeper in the numerical simulation. We explained that above with boundary effects that could not be exactly reproduced by the model. The steepness of the temperature front could also be matched well. Note, that the steepness of the numerical front is de-

pendent on the discretization length due to numerical diffusion. The temperature plateau at the water-xylene boiling point is reproduced exactly by the model. It is significant to note, that the results of Figure 7.4 is obtained without any model calibration, only by using the parameters described above. The length of the temperature plateau critically depends on several factors such that it is difficult to calibrate the model. For example, a higher steam injection rate leads to an increased evaporation rate of liquid xylene and thus to a shorter temperature plateau. A similar effect is conceivably achieved when the enthalpy of the injected steam is changed. Furthermore, the effective permeability of the porous medium is important, resulting from the interaction of the pore space with the flowing fluids. In particular, the relative permeability relationships are extremely complex to determine in three-fluid-phase systems. When changing the *van Genuchten* parameter to $vg_n = 5.0$, we get a better match of the plateau length. An increased vg_n value yields a higher mobility of liquid xylene; thus the recondensed xylene at the front can be better displaced by gravity and less xylene has to be reevaporated.

Bibliography

- [1] J. Bear. *Dynamics of Fluids in Porous Media*. Elsevier, New York, 1972.
- [2] J. Bear and Y. Bachmat. *Introduction to Modeling of Transport Phenomena in Porous Media*. Kluwer Academic Publishers, The Netherlands, 1990.
- [3] K.-F. Busch, L. Luckner, and K. Tiemer. *Lehrbuch der Hydrogeologie, Band 3, Geohydraulik*. Gebrüder Borntraeger, Berlin, 1993.
- [4] H. Class. *Theorie und numerische Modellierung nichtisothermer Mehrphasenprozesse in NAPL-kontaminierten porösen Medien*. PhD thesis, Mitteilungsheft 105, Institut für Wasserbau, Universität Stuttgart, 2001.
- [5] Th. Dracos and F. Stauffer, editors. *Transport and Reactive Processes in Aquifers*. A.A. Balkema, Rotterdam, 1994.
- [6] A. Färber. *Wärmetransport in der ungesättigten Bodenzone: Entwicklung einer thermischen in-situ Sanierungstechnologie*. PhD thesis, Institut für Wasserbau, Universität Stuttgart, 1997.
- [7] I. Fatt and W.A. Klikoff. Effect of fractional wettability on multiphase flow through porous media. *AIIME Transactions*, 216:246, 1959.
- [8] R. Helmig. *Multiphase Flow and Transport Processes in the Subsurface - A Contribution to the Modeling of Hydrosystems*. Springer Verlag, 1997.
- [9] R. Helmig, H. Class, A. Färber, and M. Emmert. Heat transport in the unsaturated zone - comparison of experimental results and numerical simulations. *Journal of Hydraulic Research*, 36(6):933–962, 1998.
- [10] R. Huber. *Immiscible and Compositional Multiphase Flow and Transport in Heterogeneous Porous Media: Modelling, Formulation, and Numerical Simulation*. PhD thesis, Institut für Computeranwendungen im Bauingenieurwesen, TU Braunschweig, 1999.

-
- [11] W. Kinzelbach. *Numerische Methoden zur Modellierung des Transports von Schadstoffen im Grundwasser*. R. Oldenbourg Verlag, München, Wien, 1987.
 - [12] H. Kobus, editor. *Schadstoffe im Grundwasser; Band 1: Wärme- und Schadstofftransport im Grundwasser*. VCH, Weinheim, 1992.
 - [13] H. Kobus, B. Barczewski, and H.-P. Koschitzky, editors. *Groundwater and Subsurface Remediation*. Environmental Engineering. Springer-Verlag, Berlin, 1996.
 - [14] H. Kobus and W. Kinzelbach, editors. *Contaminant Transport in Groundwater*. A.A. Balkema, Rotterdam, Brookfield, 1989.
 - [15] L.W. Lake. *Enhanced Oil Recovery*. Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey, 1989.
 - [16] M.C. Leverett. *Capillary Behavior in Porous Solids*, volume 142. AIME Transactions, 1941.
 - [17] J.F. Pankow and J.A. Cherry. *Dense Chlorinated Solvents and other DNAPL's in Groundwater*. Waterloo Press, Waterloo, 1996.
 - [18] J.C. Parker, R.J. Lenhard, and T. Kuppusami. A Parametric Model for Constitutive Properties Governing Multiphase Flow in Porous Media. *Water Resour. Res.*, 23(4):618–624, 1987.
 - [19] E. Truckenbrodt. *Fluidmechanik*. Springer Verlag, 3. edition, 1996.
 - [20] K.S. Udell and J.S. Fitch, editors. *Heat and mass transfer in capillary porous media considering evaporation, condensation and non-condensable gas effects*, Denver, CO, August 1985. Paper presented at 23rd ASME/AIChE National Heat Transfer Conference.
 - [21] M.Th. van Genuchten. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 44:892–898, 1980.

8

Micro-macro transition for cohesive granular media

S. Luding und H. J. Herrmann
Institut für Computeranwendungen 1
Universität Stuttgart
D-70550 Stuttgart

8.1 Introduction

A basic question in mechanics and physics is how to bridge the gap between a microscopic model and a macroscopic (continuum) description. The former involves contact forces and deformations, whereas the latter concerns tensorial quantities like the stress or the deformation gradient.

The macroscopic balance equations for mass, momentum and energy can be used for the continuum modelling of the behaviour of granular media. However, in order to close the system of equations, they rely on constitutive relations between the physical quantities (expressed in terms of material parameters [8, 13]), since the microscopic details of a granular material are not directly taken into account on the macro-scale. The aim of this paper is to present a micro-macro transition from “microscopic” simulations to macroscopic constitutive relations for the material behaviour.

The model system, a two-dimensional bi-axial box filled with cohesive, frictionless disks of different sizes, is examined by means of a “microscopic” discrete element method (DEM). The microscopic interaction model for cohesion is tested via several stress- or strain-controlled bi-axial deformation paths.

Using the whole box as representative elementary volume, the stress is examined as a function of the applied strain, and the yield surface is determined from bi-axial compression tests. Other measured macroscopic parameters are the *Young* modulus, the *Poisson* ratio, the dilatancy angle, the friction angle, and the cohesion.

8.2 Model system

One possibility to obtain information about the material behaviour is to perform elementary tests in the laboratory. An alternative are simulations with the discrete element

model (DEM) [1–3, 9, 10, 12, 14] and the average over the “microscopic” quantities in some averaging volume. The experiment chosen is the bi-axial box set-up, see Figure 8.1, where the left and bottom walls are fixed, and stress- or strain-controlled deformation is applied. In the first case both the top and right walls are subject to a predefined pressure, in the second case, the top wall is subject to a defined strain ε_{zz} , and the right wall is subject to constant pressure p_x . In a typical ‘experiment’, the top wall is slowly shifted downwards while the right wall moves dependent on the force exerted on it by the material in the box. The strain-controlled position of the top wall as function of time t is

$$z(t) = z_f + \frac{z_0 - z_f}{2}(1 + \cos \omega t) \quad \text{with} \quad \varepsilon_{zz} = 1 - \frac{z}{z_0}, \quad (8.1)$$

where the initial and final positions z_0 and z_f can be specified together with the rate of deformation $\omega = 2\pi f$ so that after a half-period $T/2 = 1/(2f)$ the extremal deformation is reached. With other words, the cosine is active for $0 \leq \omega t \leq \pi$. For larger times, the top-wall is fixed and the system can relax. The cosine function is chosen in order to allow for a smooth start-up and finish of the motion so that shocks and inertia effects are reduced, however, the shape of the function is arbitrary as long as it is smooth.

The stress-controlled motion of the side-wall is described by

$$m_x \ddot{x}(t) = F_x(t) - p_x z(t) - \gamma_x \dot{x}(t), \quad (8.2)$$

where m_x is the mass of the wall. Large values of m_x lead to slow adaption, small values allow for a rapid adaption to the actual situation. Three forces are active: (i) the force $F_x(t)$ due to the bulk material, (ii) the force $-p_x z(t)$ due to the external pressure, and (iii) a strong frictional force which damps the motion of the wall so that oscillations are reduced.

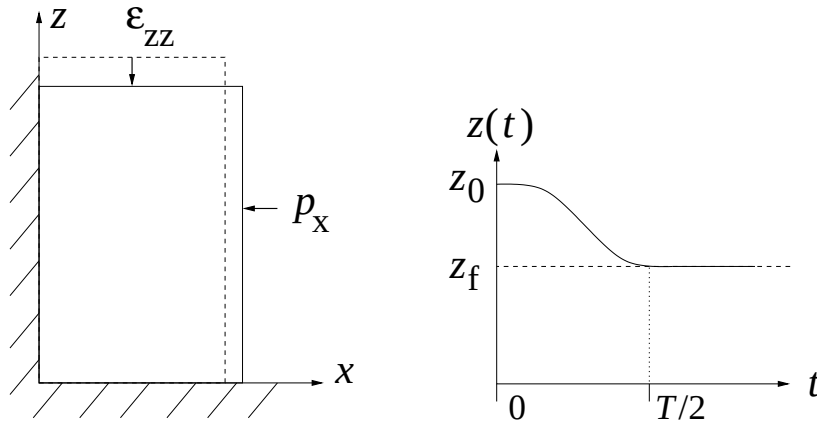


Figure 8.1: (Left) Schematic drawing of the model system. (Right) Position of the top-wall as function of time for the strain-controlled situation.

For small deviations $\xi = x_f - x$ from the equilibrium position x_f , a first order series expansion leads to a damped oscillation $m_x^{\text{eff}} \ddot{\xi} + \gamma_x^{\text{eff}} \dot{\xi} + K_x \xi = 0$, with the stiffness K_x of

the material in the horizontal direction, and the eigen-frequency

$$\omega_x = \sqrt{\frac{K_x}{m_x^{\text{eff}}} + \left(\frac{\gamma_x^{\text{eff}}}{2m_x^{\text{eff}}}\right)^2}, \quad (8.3)$$

with the effective mass m_x^{eff} and effective dissipation γ_x^{eff} .

8.3 Discrete particle model

The elementary units of granular materials are mesoscopic grains which deform under stress. Since the realistic modelling of the deformations of the particles is much too complicated, we relate the interaction force to the overlap δ of two particles, see Figure 8.2. Note that the evaluation of the inter-particle forces based on the overlap may not be sufficient to account for the inhomogeneous stress distribution inside the particles. Consequently, our results presented below are of the same quality as the simple assumptions about the force-overlap relation.

If all forces $\vec{f}_i$ acting on the particle i , either from other particles, from boundaries or from external forces, are known, the problem is reduced to the integration of Newton's equations of motion for the translational degrees of freedom

$$m_i \frac{d^2}{dt^2} \vec{r}_i = \vec{f}_i, \quad (8.4)$$

with the mass m_i of particle i , its position $\vec{r}_i$ and the total force $\vec{f}_i = \sum_c \vec{f}_i^c$ acting on it due to contacts with other particles or with the walls. For the sake of simplicity, we neglect tangential forces as well as external forces in the following.

Two particles i and j interact only if they are in contact so that their overlap

$$\delta = \frac{1}{2}(d_i + d_j) - (\vec{r}_i - \vec{r}_j) \cdot \vec{n} \quad (8.5)$$

is positive, $\delta > 0$, with the unit vector $\vec{n} = \vec{n}_{ij} = (\vec{r}_i - \vec{r}_j)/|\vec{r}_i - \vec{r}_j|$ pointing from j to i . The force on particle i , from particle j can be written as $\vec{f}_{ij} = f_{ij} \vec{n}$.

Here, we apply a variant of the linear hysteretic spring model [4, 11, 15], as an alternative to the frequently applied spring-dashpot models. This model is the simplest version of some more complicated nonlinear-hysteretic force laws [7, 15, 16] which reflect the fact that at the contact point, plastic deformations may take place. The repulsive (hysteretic) force can be written as

$$f_{ij}^{\text{hys}} = \begin{cases} k_1 \delta & \text{for loading,} & \text{if } k_2(\delta - \delta_0) \geq k_1 \delta, \\ k_2(\delta - \delta_0) & \text{for un/reloading,} & \text{if } k_1 \delta > k_2(\delta - \delta_0) > -k_c \delta, \\ -k_c \delta & \text{for unloading,} & \text{if } -k_c \delta \geq k_2(\delta - \delta_0), \end{cases} \quad (8.6)$$

with $k_1 \leq k_2$, see Figure 8.2.

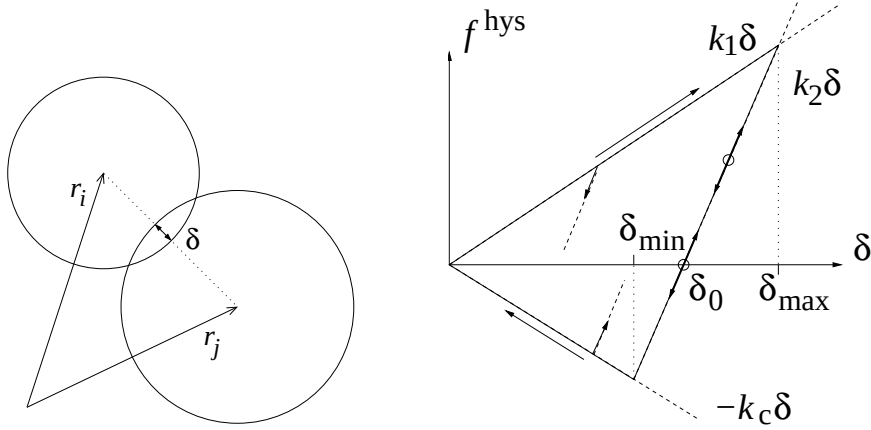


Figure 8.2: (Left) Two particle contact with overlap δ . (Right) Force law for two springs with stiffness k_1 and k_2 for initial loading and subsequent un/reloading, respectively. Attractive forces are possible due to the cohesion strength k_c .

During the initial loading the force increases linearly with the overlap δ , until the maximum overlap δ_{max} is reached (which has to be kept in memory as a history parameter). The line with slope k_1 thus defines the maximum force possible for a given δ . During unloading the force drops from its value at δ_{max} down to zero at overlap $\delta_0 = (1 - k_1/k_2)\delta_{\text{max}}$, on the line with slope k_2 . Reloading at any instant leads to an increase of the force along this line, until the maximum force is reached; for still increasing δ , the force follows again the line with slope k_1 and δ_{max} has to be adjusted accordingly. Unloading below δ_0 leads to negative, attractive forces until at the overlap $\delta_{\text{min}} = \frac{k_2 - k_1}{k_2 + k_c} \delta_{\text{max}}$, the minimum force $-k_c \delta_{\text{min}}$, i.e. the maximum attractive force, is obtained as a function of the model parameters k_1 , k_2 , k_c , and the history parameter δ_{max} . Further unloading leads to attractive forces $f^{\text{hys}} = -k_c \delta$. The highest possible attractive force, for given k_1 and k_2 , is reached for $k_c \rightarrow \infty$ so that $f_{\text{max}}^{\text{hys}} = -(k_2 - k_1)\delta_{\text{max}}$. This would lead to a discontinuity at $\delta = 0$ what is avoided by using finite k_c .

The lines with slope k_1 and $-k_c$ define the range of possible force values and departure from these lines takes place in the case of unloading and reloading, respectively. Between these two extremes, unloading and reloading follow the same line. Possible equilibrium states are indicated as circles in Figure 8.2, where the upper and lower circle correspond to a pre-stressed and stress-free state, respectively. In the case of collisions of particles and for large deformations, dissipation takes place due to the hysteretic nature of the force law. However, for small displacements around some equilibrium state, the model does not contain dissipation. Therefore, in order to allow for stronger dissipation, also a viscous, velocity dependent dissipative force

$$f_{ij}^{\text{diss}} = \gamma_0 \dot{\delta} \quad (8.7)$$

is assumed with some damping coefficient γ_0 . The half-period of a vibration around the equilibrium position, see Figure 8.2, can be computed for arbitrary values of k_1 and k_c , as long as the overlap fulfills the condition $\delta_{\text{min}} < \delta < \delta_{\text{max}}$, and one obtains a typical

response time on the contact level,

$$t_c = \frac{\pi}{\omega}, \quad \text{with} \quad \omega = \sqrt{\frac{k_2}{m_{12}} - \eta_0^2}, \quad (8.8)$$

the eigenfrequency of the contact, and the rescaled damping coefficient $\eta_0 = \gamma_0 / (2 m_{12})$.

Note that the viscous dissipation takes place in a two-particle contact. In the bulk material, where many particles are in contact with each other, dissipation is very inefficient due to long-wavelength cooperative modes of motion [5, 6]. Therefore, an additional damping with the background is introduced, so that the total force on particle i is

$$\vec{f}_i = \sum_j (f_{ij}^{\text{hys}} + f_{ij}^{\text{diss}}) \vec{n} - \gamma_b \vec{v}_i, \quad (8.9)$$

with the damping artificially enhanced in the spirit of a rapid equilibration.

8.4 Simulation results

The systems examined in the following contain $N = 1950$ particles with radii a_i randomly drawn from a homogeneous distribution with minimum $a_{\min} = 0.5 \cdot 10^{-3}$ m and maximum $a_{\max} = 1.5 \cdot 10^{-3}$ m. The masses $m_i = (4/3)\rho\pi a_i^3$, with the density $\rho = 2 \cdot 10^3$ kg m $^{-3}$, are computed as if the particles were spheres. This is an artificial choice and introduces some dispersity in mass in addition to the dispersity in size. However, since we are mainly concerned about slow deformation and equilibrium situations, the choice for the calculation of mass should not matter. The total mass of the particles in the system is thus $M \approx 0.02$ kg with the typical reduced mass of a pair of particles with mean radius, $m_{12} \approx 0.42 \cdot 10^{-5}$ kg. If not explicitly mentioned, the material parameters are $k_2 = 10^5$ N m $^{-1}$ and $\gamma_0 = 0.1$ kg s $^{-1}$. The other spring-constants k_1 and k_c will be defined in units of k_2 . In order to switch on cohesion, $k_1 < k_2$ and $k_c > 0$ is used; in the following, we have $k_1 = k_2/2$.

Using the parameters $k_1 = k_2$ and $k_c = 0$ in (8.8) leads to a typical contact duration (half-period): $t_c \approx 2.03 \cdot 10^{-5}$ s for $\gamma_0 = 0$, $t_c \approx 2.04 \cdot 10^{-5}$ s for $\gamma_0 = 0.1$ kg s $^{-1}$, and $t_c \approx 2.21 \cdot 10^{-5}$ s for $\gamma_0 = 0.5$ kg s $^{-1}$ for a collision. Accordingly, an integration time-step of $t_{\text{MD}} = 5 \cdot 10^{-7}$ s is used, in order to allow for a ‘safe’ integration of contacts involving smaller particles. Large values of k_c lead to strong cohesive forces so that also more energy can be dissipated in one collision. The typical response time of the particle pairs, however, is not affected so that the numerical integration works well.

8.4.1 Initial configuration

Initially, the particles are randomly distributed in a huge box, with rather low overall density. Then the box is compressed, either by moving the walls to their desired position, or by defining an external pressure $p = p_x = p_z$, in order to achieve an isotropic initial condition. Starting from a relaxed, isotropic initial configuration, the strain is applied to the top wall and the response of the system is examined. In Figure 8.3, the contact network from a typical simulation is shown before compression, at failure and in the final, relaxed

state. The dark lines indicate strong contact forces so that the contact network appears denser in the last image due to the deformation and compression. A more quantitative study of the fabric tensor, however, is far from the scope of this study and will be presented elsewhere. Before presenting more detailed results, we have to remark that the initial preparation and set-up of the system is still an open issue to be examined. A possible alternative to the approach used here is the preparation of the system in a critical flow state, which should not depend on the history any more.

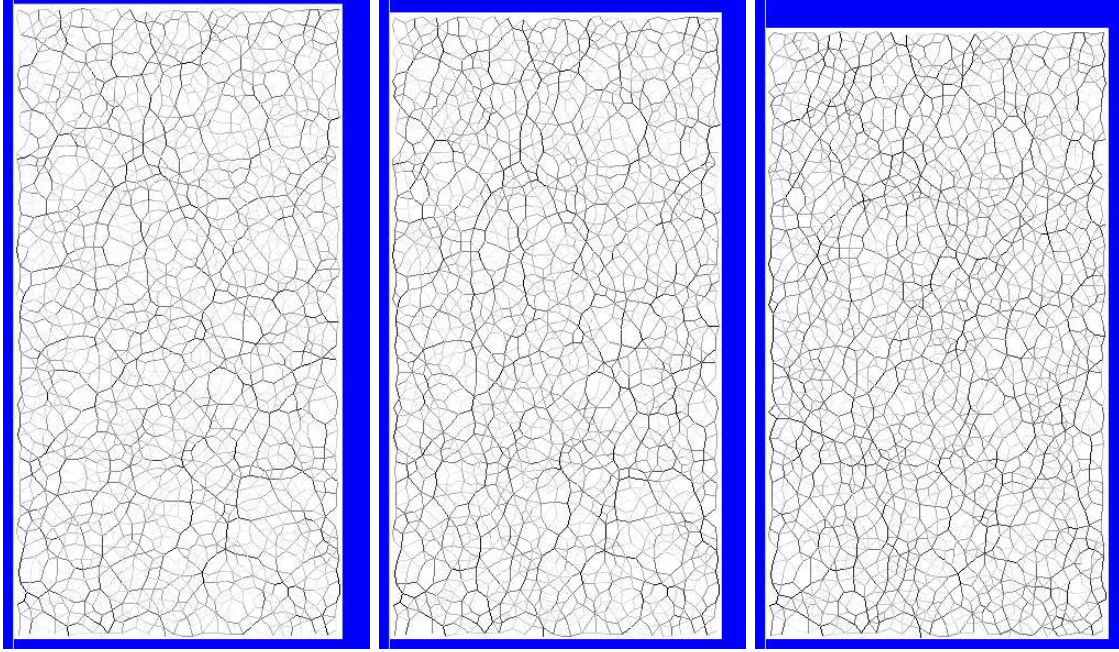


Figure 8.3: Contact networks for a typical simulation with $k_2 = 10^5 \text{ N m}^{-1}$, $k_1/k_2 = 1/2$, $k_c/k_2 = 2$, $\gamma_0 = 10^{-1} \text{ kg s}^{-1}$, $\gamma_b = \gamma_0/10$, and $\gamma_x = 193.5 \gamma_0$. The grey-scale codes the strength of the contact force (dark lines correspond to strong forces) and the strain is (from left to right) $\varepsilon_{zz} = 0$, $\varepsilon_{zz} = 0.013$, and $\varepsilon_{zz} = 0.036$.

8.4.2 Relaxation

For some cases of isotropic relaxation, the final approach of stress to equilibrium is plotted in Figure 8.4 for systems with $p = 400 \text{ N m}^{-2}$ and different parameters as discussed below. The unit of pressure is obtained by assuming that the system is extended in the third dimension for a length $h = 1 \text{ m}$. The pressure p_x exerted from the material on the right wall is then the sum over all forces divided by the wall-area $F_x/(hz)$. In the following, we present the pressure in these units, implying the h defined above as the system-extension in the third dimension. For a typical $z \approx 0.12 \text{ m}$, and assuming $N_x \approx 60$ contacts, one obtains an estimated mean overlap per particle $\delta_{\text{mean}} \approx phz/N_x k_1 = 1.6 \cdot 10^{-5} \text{ m}$.

In Figure 8.4(a), the influence of the wall mass is examined for a system with standard γ_0 (see above) and no other dissipation $\gamma_x = \gamma_b = 0$. Weakly damped oscillations are obtained for rather large mass m_x , whereas the final pressure is rapidly approached for

smaller mass, e. g. $m_x \leq 10^{-3}$ kg. Therefore, a small wall mass will be used in the following. However, a closer look at the approach to equilibrium leads to the conclusion that it is very slow. Therefore, we increase the dissipation in the spirit of faster relaxation.

One possible means of dissipation is the wall dissipation, γ_x . Small values of γ_x do not change the response as compared to Figure 8.4(a). However, for larger values, a more complicated oscillation pattern is evidenced. Only for the largest $\gamma_x = 1935\gamma_0$, one can obtain sufficiently strong damping of the oscillation – but unfortunately on a rather long time-scale.

In order to achieve a more rapid approach to the final steady-state configuration, the (artificial) dissipation with the background is tuned on. For the combination of parameters, $m_x = 10^{-4}$ kg, $\gamma_x = 193.5\gamma_0$ and different γ_b , a rapid relaxation is obtained only for $\gamma_b \approx \gamma_0/10$, see Figure 8.4(b). The time-scale of this exponential relaxation is $\tau \approx 0.0023$ s.

Having performed these test-simulations, we choose the parameters $m_x = 10^{-4}$ kg, $\gamma_x = 193.5\gamma_0$, and $\gamma_b = \gamma_0/10$ for the following simulations.

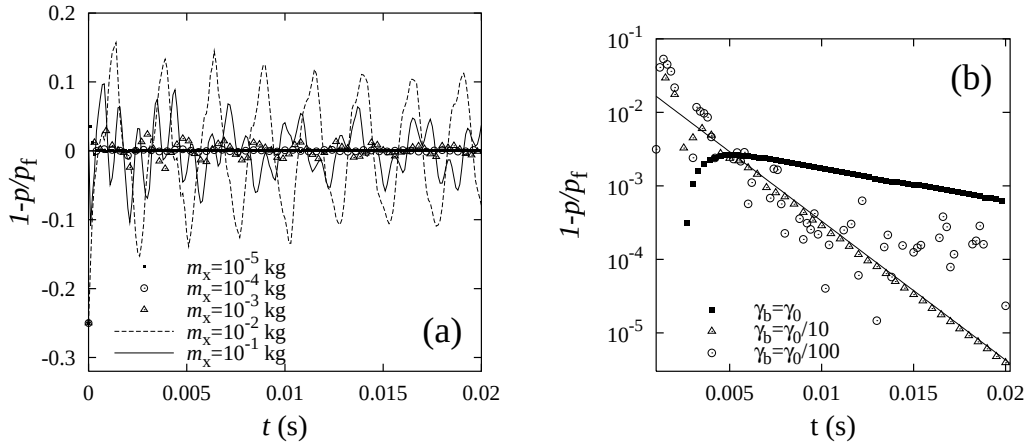


Figure 8.4: Approach to equilibrium pressure $p_f = 400$ for stiffness $k_2 = 10^5 \text{ N m}^{-1}$, $k_1 = k_2/2$, $k_c = 0$, and contact dissipation $\gamma_0 = 0.1 \text{ kg s}^{-1}$. (a) No additional dissipation $\gamma_b = \gamma_x = 0$, and different wall mass m_x as given in the inset. (b) Wall dissipation $\gamma_x = 193.5\gamma_0$ and different bottom dissipation γ_b as given in the inset for $m_x = 10^{-4}$ kg. The solid line indicates an exponential approach to equilibrium with relaxation time $\tau = 0.0023$ s as given in the inset.

8.4.3 Rate-dependency

In Figure 8.5, simulations with the same material parameters are presented, when a different rate of change of the position of the vertical wall is used, according to (8.1). The quantities examined are the volumetric strain, ε_v , the vertical stress σ_{zz} , the horizontal stress $\sigma_{xx} \approx p_x$, and the ratio of these stresses. The simulations show qualitatively similar behaviour, only the strain and the stresses are higher for faster movement of the vertical wall. This is due to the artificial, velocity-dependent dissipation, see (8.9). With decreasing f , the simulation results almost coincide, only a tiny viscous stress remains in both directions. Note that the ratio of stresses σ_{zz}/σ_{xx} is not affected by the rate of

deformation.

Since the error introduced by the artificial damping and the dynamic, strain-controlled set-up is well below 5 per-cent already for $f = 10 \text{ s}^{-1}$, we use this frequency in the following, in order to save computing time. The strain of 3.5 per-cent is thus reached after $t \approx 0.05 \text{ s}$, corresponding to several computing hours on a typical PC.

In the next subsection, we will use the fact that the stress ratio is not affected by the rate of deformation. From the horizontal stress we obtain the viscous over-stress $\sigma_{xx}^{\text{visc}} = \sigma_{xx} - p_x$, and thus can obtain the corrected vertical stress using

$$\frac{\sigma_{zz}}{\sigma_{xx}} = \frac{\sigma_{zz}^{\text{corr}}}{p_x} \quad \text{so that} \quad \sigma_{zz}^{\text{corr}} = p_x \frac{\sigma_{zz}}{\sigma_{xx}}. \quad (8.10)$$

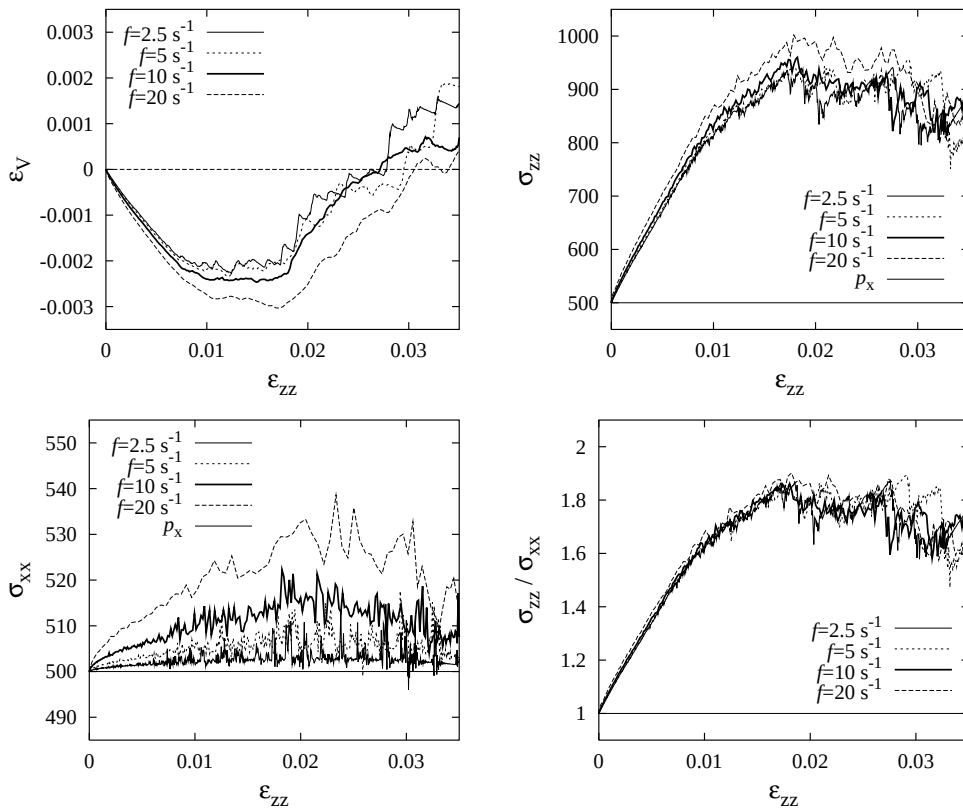


Figure 8.5: Simulation results from runs with $k_1 = k_2/2$, $k_c = 2 k_1$, and different rate of compression f , as given in the inset. After initial compression, one obtains a smooth transition to a dilatant state with maximum, yield stress.

8.4.4 Measurement of the material parameters

The first series of simulations with varying cohesion strength k_c is performed at an initial pressure $p = 500$, see Figure 8.6, the second series is performed at $p = 100$, see Figure 8.7. For small strain ϵ_{ZZ} , the material is compressed, the change in density ϵ_V/ϵ_{ZZ} being larger

for stronger cohesion k_c and smaller external pressure p . The initial negative slope can be identified with a function of the *Poisson ratio* ν , from the relation $-\varepsilon_V/\varepsilon_{zz} = 1 - \nu$ so that the simulations indicate $\nu \approx 0.69$.

When the upper wall moves further, dilatancy is evidenced at ε_{zz} -values between one and two per-cent for large external stress, but already for much smaller strain if the external pressure is smaller. The positive slope can be identified with the dilatancy function $d' = \tan \frac{2 \sin \psi}{1 - \sin \psi}$ [13], with the *dilatancy angle* $\psi \approx 5^\circ$ for $p = 500$ and $\psi \approx 11^\circ$ for $p = 100$. The onset of dilatancy takes place before the maximum vertical stress is achieved and thus before the failure of the material. The transition from the compressive to the dilatant regime is delayed to larger strain by stronger cohesion and stronger external pressure.

From the stress strain curves, one can extract the *Young modulus* E of the material from the slope of the initial increase of the vertical stress. From the simulation data, we evidence $E \approx k_1 = k_2/2$ at very small strain after the onset of the wall motion. For larger deformation, the slope and thus E decreases. After failure (see figures), softening is obtained for large p and weak cohesion, however, after further deformation, the material seems to reach a steady state. The maximum stress from each experiment is indicated by an arrow in the figures. Note that we use the maximum including fluctuations and not the maximum of the mean, fact which may lead to some overestimation.

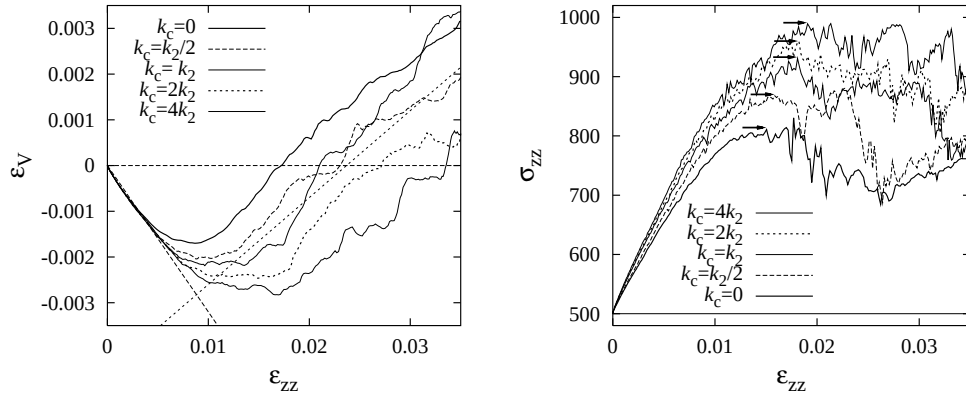


Figure 8.6: Simulation results from runs with $k_1 = k_2/2$, and different cohesion strength k_c , as given in the inset for $p_x = 500$. (Left) Volume change is plotted against ε_{zz} , and the straight lines indicate the slopes -0.32 and $+0.19$. (Right) Vertical stress σ_{zz} plotted against ε_{zz} ; the arrows indicate the peak-stress.

8.4.5 Failure and yield-stress

Comparing the simulations with different densities, one obtains similar material parameters E and ν for different external stress. The different p , however, leads to stronger dilation for weak external stress and to stronger peak-stress at failure for larger external stress. Furthermore, the relative increase of the stress, i.e. σ_{zz}/p_x , is stronger for weak p , and, after failure, the cohesive material does not show clear softening behaviour, only strong fluctuations can be observed for strong cohesion.

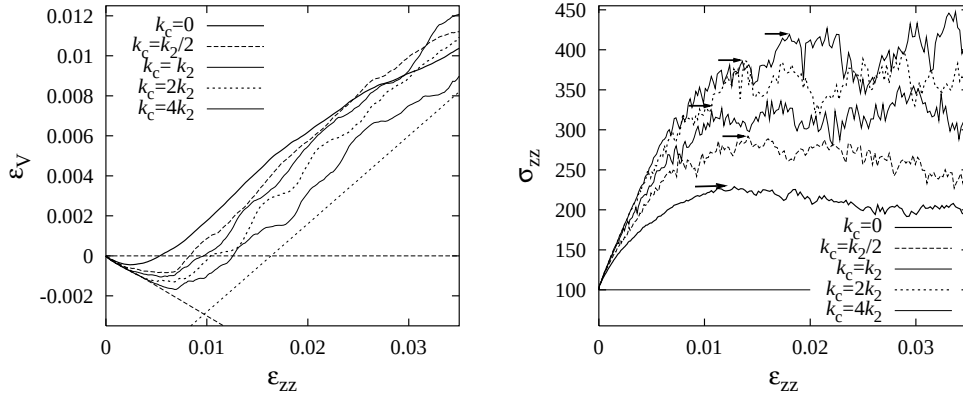


Figure 8.7: The same as in Figure 8.6, only here $p_x = 100$, and the straight lines indicate the slopes -0.30 and $+0.44$.

The yield-stresses from Figures 8.6 and 8.7 are combined in Figure 8.8 as *Mohr* circles (where the corrected stresses, see (8.10), are used). Each set of *Mohr* circles corresponds to a fixed external pressure p and different circles correspond to different $k_c/k_2 = 0, 1/2, 1, 2$, and 4 from the smallest to the largest circle. The tangent to a pair of circles with the same cohesion strength is plotted as a dotted line for all pairs. The slope of the lines is $\tan \phi \approx 0.23$ corresponding to an internal *friction angle* $\phi \approx 13^\circ$. Due to the absence of any friction in the model, ϕ has to be caused by the geometry of the packing which causes a shear resistance due to inter-locked particles.

The macroscopic *cohesion* c of the material can be obtained as the point of intersection of the dashed line and the zero vertical axis, as summarized in Table 8.1.

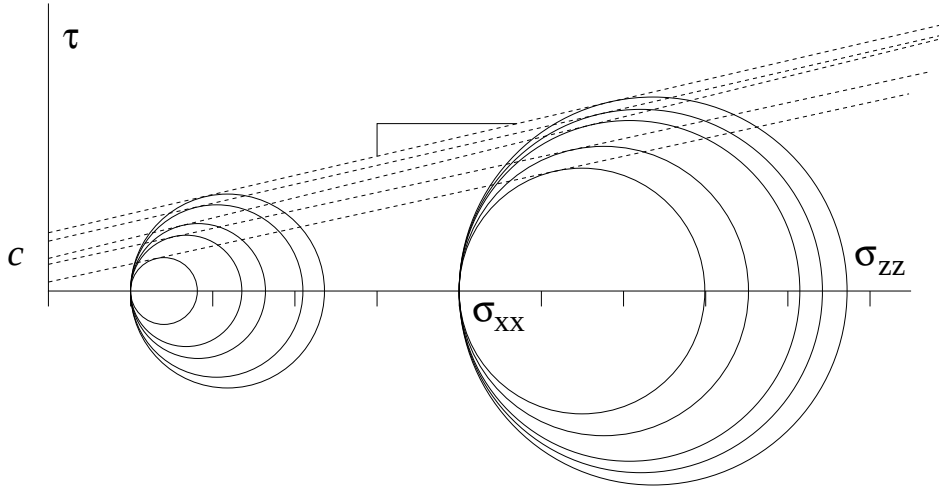


Figure 8.8: *Mohr* circles at failure, for the simulations in Figures 8.6 and 8.7. The left end of the circle corresponds to the fixed pressure p_x , the right end to the corrected vertical pressure $\sigma_{zz}^{\text{corr}}$ at failure. The angle indicates a slope of about 0.23.

k_c/k_2	p_x	$\sigma_{zz}^{\text{corr}}$	p_x	$\sigma_{zz}^{\text{corr}}$	c
0	100	183	500	798	11
1/2	100	234	500	853	32
1	100	264	500	915	40
2	100	310	500	941	60
4	100	336	500	972	71

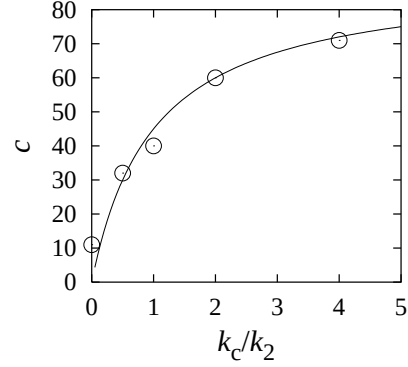


Table 8.1: Summary of the corrected peak-stress values and the corresponding cohesion c . The error for the stresses is about ± 3 , the error for c is about ± 10 . Note the artificially large c for $k_c = 0$, which we attribute also to the systematic error introduced by choosing the peak-stress as the maximum of the fluctuating data and not of some mean. The figure to the right shows the c -values as function of the cohesion strength, with the maximum attractive force $c \propto (k_2 - k_1)/(k_2 + k_c)$ given as solid line.

8.5 Summary and conclusion

Using discrete element simulations of frictionless, cohesive granular material in a bi-axial box, the macroscopic material behaviour was examined for different microscopic model parameters. The parameters under investigation were the *Young* modulus, the *Poisson* ratio, the dilatancy angle, the internal friction angle and the cohesion.

The interaction model can be seen as appropriate for rather small particles, where plastic deformations lead to the hysteretic response for loading, the material behaves rather soft, whereas for unloading/reloading, the compressed contact area behaves more stiff. Due to its nature, the cohesive force depends on the maximum compression and is always recovered, i. e. the cohesive forces are reversible. Thus, the model seems appropriate for restorable cohesive forces, but not for damageable attraction like in e. g. concrete. For the latter, some damage parameter can be introduced in order to make the cohesion history dependent and unrecoverable.

During the strain controlled bi-axial test with fixed horizontal pressure, the material is first compressed, then starts to dilate and eventually yields at some peak-stress value. For strong external pressure, one obtains softening and, for weaker pressure, the vertical stress remains constant in a steady state, besides fluctuations. The material parameters from elasticity theory do not depend on the external pressure, but the dilatancy angle increases with decreasing external pressure. Even without microscopic friction, one obtains a macroscopic friction angle of the order of 13° . The macroscopic cohesion is proportional to the maximum attractive force in the microscopic model.

Future studies will involve microscopic friction and its effect on the material behaviour. Furthermore, the preparation of the specimen before loading is started has to be defined in a more reproducible and history independent manner as in the present situation.

8.6 Acknowledgements

The authors thank M. Lätzel, J. Tomas, S. Diebels, H. Besserer, and G. A. D'Addetta for discussions and acknowledge financial support by the Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG).

Bibliography

- [1] Y.M. Bashir and J.D. Goddard. A novel simulation method for the quasi-static mechanics of granular assemblages. *J. Rheol.*, 35(5):849–885, 1991.
- [2] P. A. Cundall and O. D. L. Strack. A discrete numerical model for granular assemblies. *Géotechnique*, 29(1):47–65, 1979.
- [3] H. J. Herrmann, J.-P. Hovi, and S. Luding, editors. *Physics of dry granular media - NATO ASI Series E 350*. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1998.
- [4] S. Luding. Collisions & contacts between two particles. In H. J. Herrmann, J.-P. Hovi, and S. Luding, editors, *Physics of dry granular media - NATO ASI Series E350*, page 285. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1998.
- [5] S. Luding, E. Clément, A. Blumen, J. Rajchenbach, and J. Duran. Anomalous energy dissipation in molecular dynamics simulations of grains: The “detachement effect”. *Phys. Rev. E*, 50:4113, 1994.
- [6] S. Luding, E. Clément, A. Blumen, J. Rajchenbach, and J. Duran. The onset of convection in molecular dynamics simulations of grains. *Phys. Rev. E*, 50:R1762, 1994.
- [7] M. H. Sadd, Q. M. Tai, and A. Shukla. Contact law effects on wave propagation in particulate materials using distinct element modeling. *Int. J. Non-Linear Mechanics*, 28(2):251, 1993.
- [8] J. Schwedes. *Fließverhalten von Schüttgütern in Bunkern*. Verlag Chemie, Weinheim, 1968.
- [9] C. Thornton. Numerical simulations of deviatoric shear deformation of granular media. Submitted to: *Géotechnique*, 1998.
- [10] C. Thornton and S. J. Antony. Quasi-static deformation of particulate media. Submitted to: *Phil. Trans. Roy. Soc. A*, 1998.
- [11] J. Tomas. Particle adhesion fundamentals and bulk powder consolidation. *KONA*, 18:157–169, 2000.
- [12] S. van Baars. *Discrete Element Analysis of Granular Materials*. PhD thesis, Technische Universiteit Delft, Delft, Netherlands, 1996.
- [13] P. A. Vermeer. Non-associated plasticity for soils, concrete and rock. In H. J. Herrmann, J.-P. Hovi, and S. Luding, editors, *Physics of dry granular media - NATO ASI Series E350*, page 163. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1998.

-
- [14] P. A. Vermeer, S. Diebels, W. Ehlers, H. J. Herrmann, S. Luding, and E. Ramm, editors. *Continuous and Discontinuous Modelling of Cohesive Frictional Materials*. Lecture Notes on Physics 568. Springer, Berlin, 2001.
 - [15] O. R. Walton and R. L. Braun. Viscosity, granular-temperature, and stress calculations for shearing assemblies of inelastic, frictional disks. *Journal of Rheology*, 30(5):949–980, 1986.
 - [16] C. Y. Zhu, A. Shukla, and M. H. Sadd. Prediction of dynamic contact loads in granular assemblies. *J. of Applied Mechanics*, 58:341, 1991.

9

Modelling of cohesive frictional materials as continuum or discontinuum

E. Ramm, G. A. D’Addetta und E. Kuhl
Institut für Baustatik
Universität Stuttgart
D-70550 Stuttgart

9.1 Introduction

The failure mechanisms of heterogeneous geomaterials like concrete, ceramics or marl are characterized by complex failure modes under various loading situations and a highly anisotropic bias due to their inhomogeneous microstructure. The growth and coalescence of microcracks lead to the formation of macroscopic crack patterns resulting in an overall stiffness degradation and eventually in a structural failure. Behaving quasi-brittle under load, these materials are characterized by a localization of deformations in typically narrow zones.

This class of materials show different physical and geometrical properties depending on the level of observation. Taking into account the point of view and the chosen scale the structural fluctuations play a more or less dominant role and thus determine the point for which a material can be regarded as homogeneous. This is accompanied by the fact, that with decreasing resolution length on a specific level the internal material structure is less identifiable up to the point when the material is considered as continuous.

The observed size scales in geomaterials like concrete are typically subdivided into hierarchical levels, like the atomic, micro-, meso- and macrolevel [36]. The basic question regarding the analytical description of a certain material focuses on how the constitutive behaviour on different size scales can be described. Generally geometric and kinematic effects on smaller scales lead to a more complex material behaviour on larger scales.

The range of applicability of different simulation models is directly related to the observation scale, as can be seen in Figure 9.1. The application area ranges from the simulation of a crystal structure and calcium silicate hydrates over a concrete particle stack and laboratory scale measurements on test specimens to structural scale simulations of large structures like earth dams or cooling towers. Basically a class of continuum models can be applied at each size scale, if the local quantities, e.g. damage, are smeared over a certain region. Usually a verification of these models is done via a comparison with experiments of

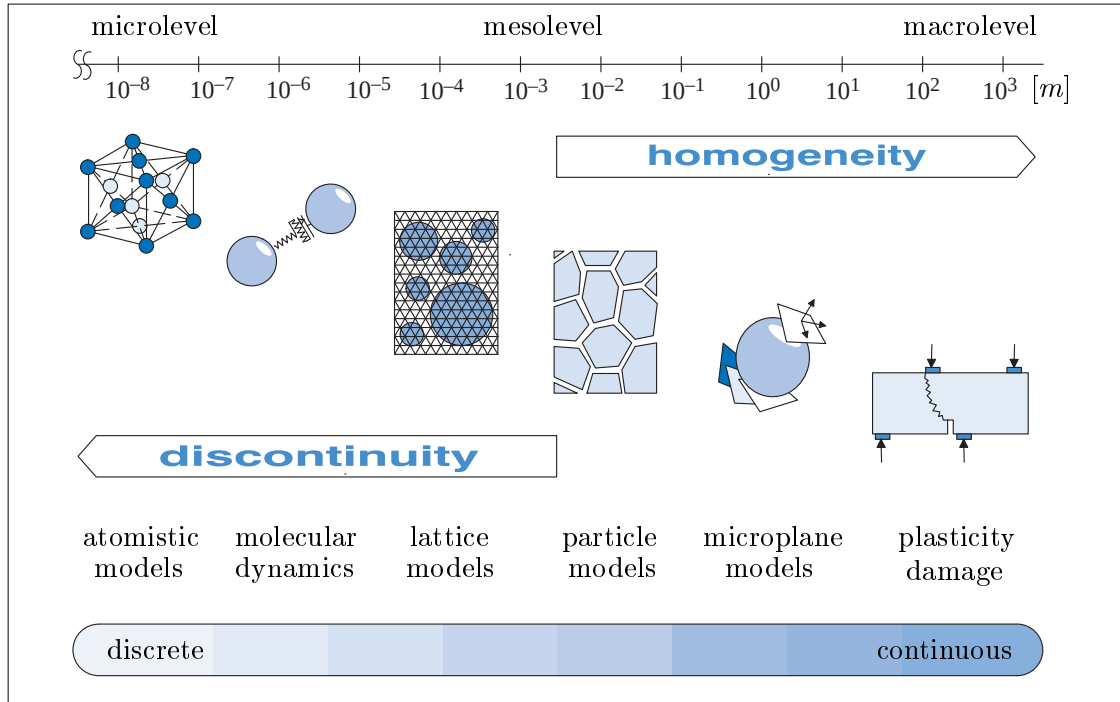


Figure 9.1: Observation scales and applicable simulation models for geomaterials like concrete.

finite size. Emerging heterogeneities, anisotropies and discontinuities are then cast in the form of macroscopic continuum variables. In order to allow for a realistic localization and to overcome mathematical difficulties, as the loss of ellipticity, a need for enhancements of the classical continuum models is necessary. Therefore, an internal length scale has to be introduced into the model to account for the neighbored influence within a material, like crack interaction or stress redistribution effects. Usual enhancements of continuum formulations are based on the introduction of localization limiters like non-local, gradient-enhanced, viscous or *Cosserat* formulations. From the point a localization phenomenon, like a crack, occurs due to a specific loading the material cannot be treated as continuous any longer. Due to their theoretical basis continuous simulation models cannot account for the discrete nature of material failure in a natural way. Therefore, discrete models like particle, lattice or molecular/granular dynamics models are used. Although prohibitive in large scale computations this class of models is able to predict and simulate the fracture behaviour of small scale applications of geomaterials.

In the following sections we will present different numerical mesolevel models allowing completely diverse views of material modelling, followed by a comparison of basic discrete and continuous models in terms of the macroscopic constitutive behaviour. In the first part we will outline the theoretical background of the combined beam-particle model as an example for a discrete simulation scheme. Within this approach heterogeneous materials are considered as a cohesive granular frame represented by polygonal mesostructure elements bonded together by beams in order to allow for failure induced anisotropy in an unsmeared fashion. The material is not thought as granular material *ab initio*, but gradually develops towards this constitution by the disintegrative process of crack propagation. Since each material particle is represented individually by a certain statistically

influenced grainsize and surrounding area, an internal length scale is incorporated intrinsically into the model. In order to verify the presented numerical scheme and the effects taking place at the mesostructural level the failure evolution of compressive loading scenarios will be examined and discussed. The most popular models in the framework of computational material mechanics are based on continuum mechanical material theories and are usually discretized by finite element formulations. Therefore in the second part a typical continuum-oriented formulation, namely the microplane model, is briefly outlined. Within the microplane theory an anisotropic description of materials is incorporated, defining uniaxial material laws on different characteristic material planes and thus allowing an obvious physical interpretation to the individual material parameters. In order to account for long-ranging nonlocal microstructural effects, such as microcrack interaction, strain gradients are incorporated into the constitutive formulation, thus introducing an internal length scale in a natural way. In the last part of the paper we will schematically depict a confrontation of a simple discrete sphere model and a basic form of the microplane model. The discrete sphere model describes a simple and basic form of the primarily introduced combined beam-particle model, thus allowing for a direct comparison with the corresponding simple microplane model, that can be considered as an elastic or elasto-plastic version of the general formulation introduced before. The motivation for this idea stems from the interpretation that both models interact with their neighbourhood in a spring like fashion, namely the particle model in a sense of finite dimensions and the microplane model on the material point level. The examination of the appropriate smearing and discretization processes and their comparison are thought to be a first step bridging the gap between discrete and continuous models.

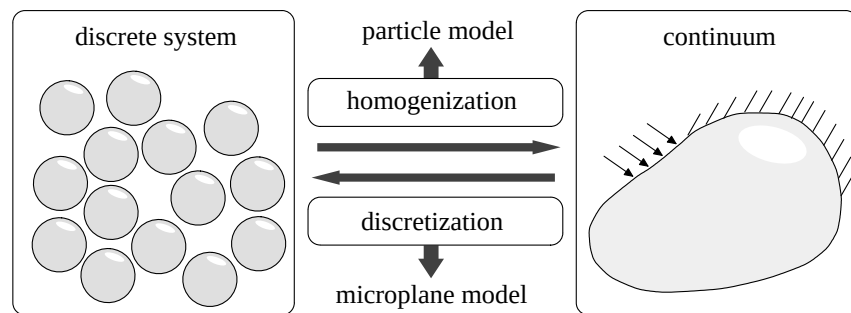


Figure 9.2: Discrete vs. continuous models.

Figure 9.2 sketches the relation between a discrete sphere model and a continuum-based microplane model. While the particle model is of discrete nature and an overall characterization can only be derived through appropriate homogenization techniques, the microplane model is initially continuous and has to be discretized for computational reasons.

9.2 Discontinuous model - combined beam-particle model

The combined beam-particle model was introduced in its general form for solely particle composites in [35] and enhanced by adding beam elements in [24]. So far, it has been used

as a pure physical scheme for the dynamic fragmentation of solids, like the fragmentation of colliding discs in [23], the compression of solid-like specimens in [25] and a comprehensive examination of the failure evolution of different basic loading scenarios in [15], [16].

The model is based on a particle composite, where the polygonal mesh is determined by a *Voronoi* tessellation and a triangulation of the particle's centres of mass leads to the overlaying beam mesh [24]. The mesh generation of the structured system is controlled by a local statistical influence during the generation process and thus introduces a global regularity to the system according to [29]. Within this two-dimensional dynamic model including damping, an incorporation of the particle rotations is achieved by a formulation based on three degrees of freedom at each particle centre. The deformational behaviour of the particles due to an externally applied loading is approximated by an elastic repulsive force related to the overlapping area of contacting particles [35]. Corresponding beam forces and moments are calculated according to the positions of the centres of mass of the polygons on the basis of the *Timoshenko* beam theory. These forces and moments are inserted into the equation of motion, that is solved numerically for each particle. Beam elements are removed according to a breaking criterion depending on the bending and elongation mode of the beams.

9.2.1 Particle geometry

The particle geometry and motion is defined by the vectors $\mathbf{x}_i = (x_i \ y_i \ \varphi_i^z)^T$, $\dot{\mathbf{x}}_i = (\dot{x}_i \ \dot{y}_i \ \dot{\varphi}_i^z)^T$ etc., where the index i refers to the appropriate particle. The first vector describes the position vector, denoting the coordinates of the centre of mass of the polygon, while the velocity vector $\dot{\mathbf{x}}_i$ and the further time derivatives of $\mathbf{x}_i$ refer to the kinematic information of the particles. The rotational part of the position vector, described by the coordinate φ_i^z , is 0 for every particle in the initial state and describes the total rotation of the considered particle during the deformation process. Through the introduction of the total displacements and rotations of the particles the actual state of deformation within the sample with respect to the initial configuration can be obtained in vectorial form according to $\mathbf{u}^i = (u_i^x \ u_i^y \ \phi_i^z)^T$. It should be mentioned that the term deformation is used here only in the context of the complete, global particle assembly. The particles are unbreakable and undeformable in this sense and can therefore solely undergo translational and rotational displacements.

9.2.2 Particle contact

Since an analytical derivation of the real deformational behaviour of contacting polygons with arbitrary shape is impossible an approximative model is used for the solution of this problem. Within this scheme the overlapping area of contacting polygons is related to the elastic repulsive force due to deformation.

The unit contact vectors in tangential and normal direction $\mathbf{t}$ and $\mathbf{n}$ are defined by the shear line vector $\overline{\mathbf{P}_1\mathbf{P}_2}$ connecting the intersection points P_1 and P_2 and its perpendicular bisector as shown in Figure 9.3. The local coordinate system of the contact is defined at the midpoint of this effective shear line $\overline{\mathbf{P}_1\mathbf{P}_2}$. Neglecting the rotations the relative

velocity at the contact zone can be decomposed in a normal and tangential part

$$\mathbf{v}^{rel} = \dot{\mathbf{x}}_j - \dot{\mathbf{x}}_i = v_N^{rel} \mathbf{n} + v_T^{rel} \mathbf{t}. \quad (9.1)$$

The effective mass m_{ij}^{eff} and the characteristic diameter of the contact region d^c are formulated in the following form

$$m_{ij}^{eff} = \frac{m_i m_j}{m_i + m_j} \quad \frac{1}{d^c} = \frac{1}{d_i} + \frac{1}{d_j}, \quad (9.2)$$

where d_i and d_j define the diameters which represent circles of equivalent areas as the polygons i and j . The upper indices ij refer to the two contacting polygons i and j .

According to [35] the contact force $\mathbf{f}_{ij}^c$ can be divided up into a normal and tangential force component

$$f_{N,ij} = -\frac{E^p A^p}{d^c} - m_{ij}^{eff} \gamma_N v_N^{rel} \quad f_{T,ij} = -\min \left(m_{ij}^{eff} \gamma_T |v_T^{rel}|, \mu |f_{N,ij}| \right) \quad (9.3)$$

and can be cast in the form

$$\mathbf{f}_{ij}^p = f_{N,ij} \mathbf{n} + f_{T,ij} \mathbf{t}. \quad (9.4)$$

The coefficients γ_N and γ_T refer to the viscous dissipative damping and μ is chosen according to *Coulomb's* friction law. E^p denotes the elastic modulus of the particle material and A^p the overlapping area of two contacting polygons indicated by the shaded region in Figure 9.3, left.

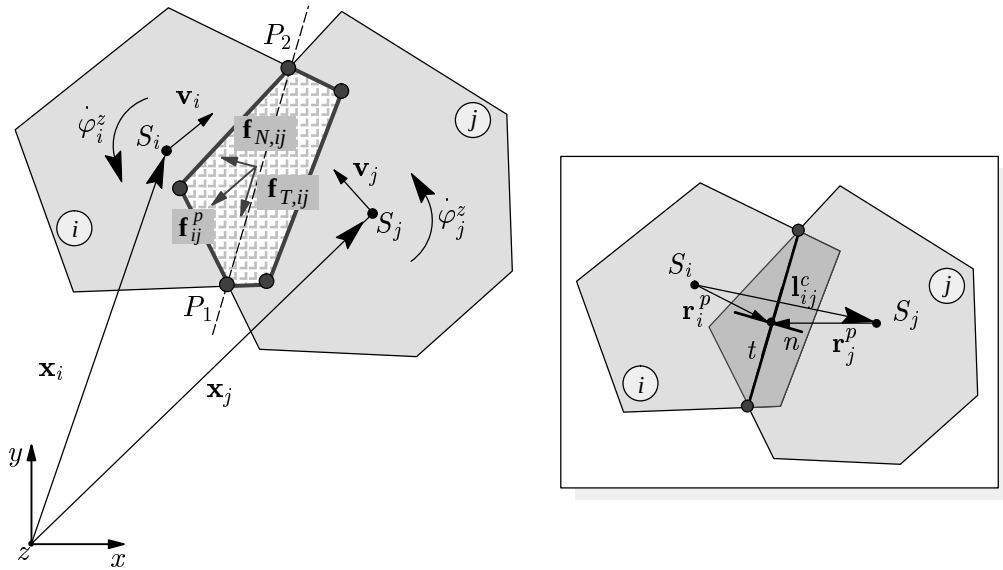


Figure 9.3: Geometry of the polygonal contact.

The complete particle force vector can be calculated if also the particle moment $m_{ij}^{p,z} = \mathbf{f}_{ij}^p \times \mathbf{r}_i^p$ is introduced

$$\mathbf{F}_{ij}^p = \begin{bmatrix} \mathbf{f}_{ij}^p \\ m_{ij}^{p,z} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_{ij}^{p,x} \\ f_{ij}^{p,y} \\ m_{ij}^{p,z} \end{bmatrix}. \quad (9.5)$$

The contact vector $\mathbf{r}_i^p$, defining the connection of the contact point and the centre of mass of the particle i , is illustrated together with the branch vector $\mathbf{l}_{ij}^c$ on the right hand side of Figure 9.3. Here $\mathbf{l}_{ij}^c$ connects the centres of mass of the two contacting polygons. Please note that the force vectors written in capital letters $\mathbf{F}$ include a moment component while those written in small letters $\mathbf{f}$ do not.

9.2.3 Beam mesh deformation

Beam elements with three degrees of freedom are introduced at each node in the model accounting for the physical effect of activating an attractive force representing some cohesion to bond the particles in the case they start to move [24]. It is important to note that this beam model is thought as an idealized abstraction of the real material behaviour.

Due to the displacements and rotations of the particles a deformation of the overlaying beams follows. The stored potential energy due to the deformation is reflected in form of the elastic repulsive forces and moments to the particles. The beam force vectors $\mathbf{F}_{ij}^b$ of the particles i and j , respectively, are calculated with the beam end deformations

$$\mathbf{F}_{ij}^b = \begin{bmatrix} \mathbf{f}_{ij}^b \\ m_{ij}^{b,z} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_{ij}^{b,x} \\ f_{ij}^{b,y} \\ m_{ij}^{b,z} \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} \mathbf{F}_{ij}^b \\ \mathbf{F}_{ji}^b \end{bmatrix} = \mathbf{K}_{ij}^b \begin{bmatrix} \mathbf{u}^i \\ \mathbf{u}^j \end{bmatrix}. \quad (9.6)$$

$\mathbf{K}_b^{ij}$ resembles the symmetric *Timoshenko* stiffness matrix, computed from the normal, shear and bending flexibilities of the beams. Different flexibility values are assigned to each beam at the beginning of the simulation on the basis of the initially defined geometric parameters beam length l_{ij} , cross-section A_{ij} and moment of inertia I_{ij} .

9.2.4 Solution of equation of motion

Within this dynamical method the equation of motion is solved at discrete time steps for each particle i . The equation of motion in tensorial form with the contribution of the particle and beam forces and under absence of gravity forces can be cast into matrix form

$$\mathbf{M}^i \ddot{\mathbf{x}}^i = \sum_{j=1}^{n^p} \mathbf{F}_{ij}^p + \sum_{k=1}^{n^b} \mathbf{F}_{ik}^b \quad ; \text{ with } i = 1, 2, \dots, N \quad (9.7)$$

with the two-dimensional mass matrix $\mathbf{M}_i$ and the corresponding components: particle mass m_i and polygon mass moment of inertia θ_i . n^p and n^b describe the number of particle contacts and the number of beam connections of each particle i , respectively, and N denotes the sum of all particles within the sample. A *Gear*-Predictor-Corrector scheme [1] of fifth order is used for the integration of the second order differential equation system in equation (9.7). Therewith we are able to predict the new positions, velocities and accelerations of the particle sample.

9.2.5 Microscopic cracking by beam elimination

The primary microscopic fracture process within geomaterials is caused by a tensile failure of the cohesive bonds between the grain boundaries. The beams in this model are thought to represent this cohesive effect between the initially bonded particles. Therefore, a breaking situation is attained solely in the case of elongation of the beams. In the way applied here, with the elastic modulus of the beams being of one magnitude higher than the modulus of the particles, the fracturing of the beams provides a transition from a continuous representation of a solid in form of a lattice network to a discrete representation in form of an accumulation of partly connected polygon clusters.

The beam breakage is controlled by two predefined parameters each defining a different physical fracture mode [17] by the formula

$$\Phi_{ij}^b = \left[\frac{\varepsilon_{ij}^b}{\varepsilon_{max}^b} \right]^2 + \frac{\max(|\phi_i^z|, |\phi_j^z|)}{\phi_{max}^z} - 1 \leq 0 \quad ; \quad \varepsilon_{ij}^b \geq 0. \quad (9.8)$$

In this failure surface formulation ε_{ij}^b denotes the local axial beam strain due to the new positions of particles i and j , updated after each time step. This value is related to the threshold value for the elongation mode ε_{max}^b , while the maximum rotation ϕ^z of one of the particles i or j is related to the threshold value for the bending mode ϕ_{max}^z .

9.2.6 Stress calculation

By applying the divergence theorem to the weak form of the equilibrium equations the average stress tensor [12] of the sample in matrix form can be found

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{1}{V} \sum_c \mathbf{f}^c \otimes \mathbf{l}^c \quad \text{with} \quad \mathbf{f}^c = \mathbf{f}^p + \mathbf{f}^b. \quad (9.9)$$

For simplicity the stress calculation is carried out without taking into account the rotational degree of freedom as can be followed by the composition of the force vector $\mathbf{f}^c$. The summation in equation (9.9) is taken over all contacts c within the particle set. In this context the term “contact” is used for the description of both, particle contacts and beam connections. In the two dimensional framework considered here the sample volume V reduces to the area enclosed by the centres of gravity of the boundary particles.

9.2.7 Simulation results

The simulations are thought as academic examples showing the basic features of the combined beam-particle model in the framework of solid and damage mechanics. The emphasis lies on the qualitative application of the model to realistic experimental setups in order to reproduce typical failure phenomena in heterogeneous materials as presented in [25], [15] and [16]. It should be mentioned that no parameter identification with respect to the output of experiments has been done so far for the following simulations. Within the oncoming diagrams units are not indicated in order to focus only on the qualitative aspects of the simulations.

Compression simulation

A rectangular specimen consisting of 1000 particles (25×40) was uniaxially loaded in vertical direction under constant strain rate conditions by moving inward both loading plates, marked in black in Figure 9.4.

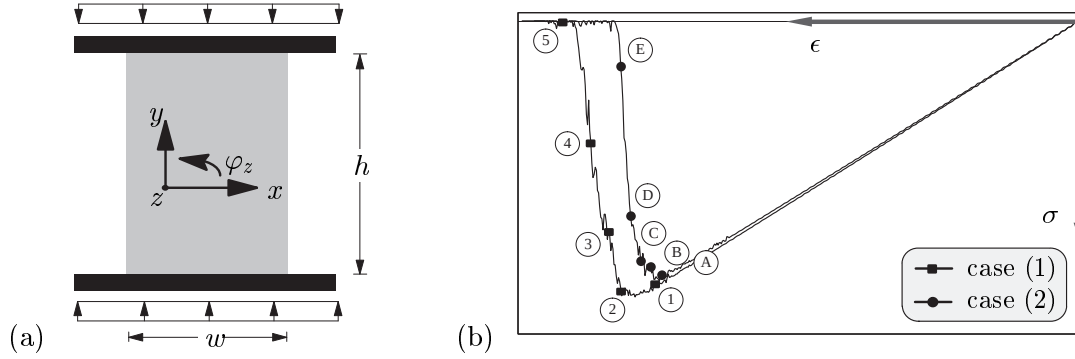


Figure 9.4: Setup (a) and stress-strain diagrams (b) of compression simulations.

Two different boundary conditions have been examined within this study: with and without lateral confinement of the inferior and upper boundaries of the specimen, noted as case (1) and (2) within the following text. According to the simplified geometry plot in Figure 9.4 the boundary particles have been kept fixed in x - and ϕ -direction for case (1) in order to provide the lateral confinement, whereas no lateral confinement of these boundary particles is provided for case (2). The stress-strain relations for both cases are plotted in Figure 9.4 and reveal a linear-elastic regime with a constant “macroscopic” elasticity modulus up to the peak, followed by a rather sharp drop indicating the “macroscopic” disintegration of the material. In this framework the beam breaking can be considered as “microscopic” failure of the material. The complete failure is a highly dynamic process driven by progressive beam bursts. The longitudinal strain ϵ in the diagram is computed by averaging the length change over the width w , while the corresponding normal stress σ in y -direction is calculated according to equation (9.9).

As shown in the graphical output of the simulation program in Figure 9.5 for case (1), following a localization of deformations on diagonal bands within the specimen, the failure planes start to orient on the two main diagonals connecting the edges of the specimen.

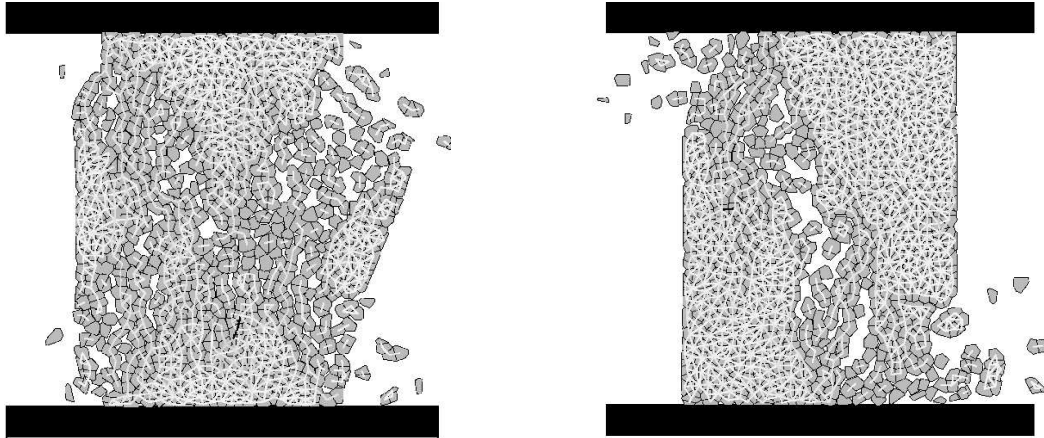


Figure 9.5: Fractured state of specimens with (1) and without lateral confinement (2).

The loss of lateral stiffness due to progressive beam breaking in the horizontal direction leads to a bulging of the specimen accompanied by the development of a column-type structure in the mid part region of the specimen. This hourglass failure mode agrees qualitatively well with the failure formation of uniaxially compressed concrete cylinders with a persistent effect of friction. The development of a biaxial (triaxial in 3D) compressive state hinders cracks to appear within a triangular region neighbouring the boundary confinements. Similar as observed in experiments in [33] and [37] a buckling of the arising load transferring “particle bridges” leads to the final failure of the tested specimens. In contrast to the failure mode for the confined specimen, in case (2) the macroscopic failure behaviour is determined by two shear lines emerging from the right side, moving to the bottom and then growing upwards to the opposite edge. Midpoints of the broken beams marked in Figure 9.6 give further evidence on the cracking within the specimen and thus give a better insight of the developing failure planes. The corresponding pictures show the history of the failure evolution according to their appearance in the stress-strain diagrams in Figure 9.4 (b).

A comparison with other discrete simulation schemes shows clearly the advantages of this model regarding the determination of the failure evolution. Pure static lattice simulations of compressive loading scenarios, as presented in [32] or [31] cannot lead to convincing results concerning the macroscopic failure behaviour, due to the lack of complexity within the formulation of the compressive beam/truss failure behaviour. The dynamic combined beam-particle model, however, is able to represent this complexity by its inherent particle contact feature, realistically modelling the motion within a compressed material sample. At least from that point on when a beam breaks and an open crack surface appears the behaviour is completely controlled by the particle dynamics and so influences the general failure mechanism significantly. Further details of the model and additional numerical examples along with a comparison with other discrete models are given in [15].

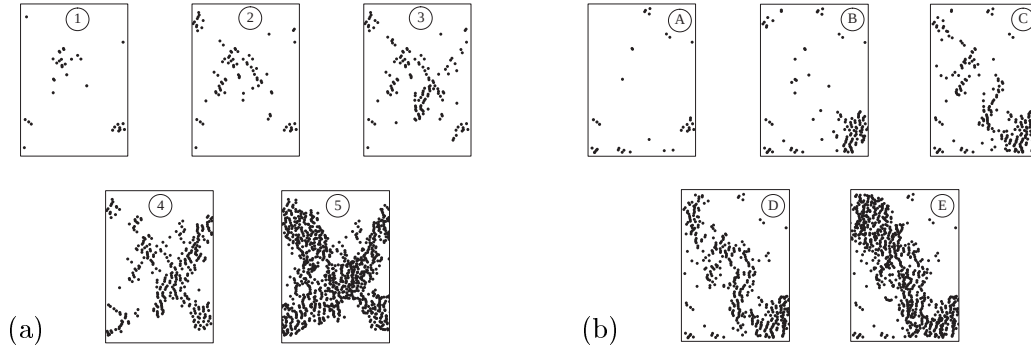


Figure 9.6: Failure evolution for cases (1) and (2).

9.3 Continuous model - microplane model

9.3.1 History of microplane modelling

An obvious drawback of discrete particle models is that their application is numerically bounded to a finite number of particles which limits the simulation to small specimens. However, the additional information provided by micromechanical models such as the combined beam-particle model can be used to formulate and verify macroscopically phenomenological material models. The microplane model in its general form with a directional dependent stiffness degradation on characteristic material planes can be considered as a typical representative of this class of models.

The basic ideas of the microplane concept were developed more than a century ago by *Mohr* [28] who proposed to characterize the response of a material point through the integral over the responses of all material planes through this point. *Mohr's* ideas were soon adopted to describe the material behaviour of crystallographic metals, compare [34]. Due to the crystalline microstructure, however, the potential failure planes of these materials could be identified in advance as the slip planes of densest atomic packing. This obvious micromechanical motivation is probably the reason why the theory of crystal plasticity has become well-accepted in material science nowadays. Although the slip theory of plasticity has been developed intensively during the past decades, it was only in the middle of the eighties that *Bazant* and coworkers applied the general ideas of *Mohr* to damaging materials as well, compare [4], [6], [8] and [9]. The name “microplane theory” was introduced in order to demonstrate the generalization of the original concept. In contrast to the models of crystal plasticity, which are generally based on a so-called static constraint, the microplane damage models are usually based on a kinematic constraint. This implies, that the constitutive equations on the microplane level are expressed in terms of the microplane strain components, which can be determined as projections of the overall strain tensor.

While the first attempts in microplane research were mainly dedicated to an experimental verification of the theory, the younger research rather focuses on providing a fundamental mechanical basis for the model, compare [10]. Within the past two years, the microplane theory has been embedded into a thermodynamically consistent framework. Therefore, a

free energy function Ψ^{mic} had to be introduced on each individual microplane

$$\Psi^{mic} = \Psi^{mic}(\varepsilon_N, \boldsymbol{\varepsilon}_T, \mathbf{q}) \quad \text{or} \quad \Psi^{mic} = \Psi^{mic}(\varepsilon_V, \varepsilon_D, \boldsymbol{\varepsilon}_T, \mathbf{q}) \quad (9.10)$$

being a function of the strain components ε_V , ε_D , ε_N and $\boldsymbol{\varepsilon}_T$ and the set of internal variables $\mathbf{q}$. Consequently, with a specification of this set of internal variables, all kinds of rheological behaviour could be described in a similar fashion. Not only microplane elasticity with $\mathbf{q} = \{-\}$ and microplane damage with $\mathbf{q} = \{d\}$, but also microplane plasticity with $\mathbf{q} = \{\varepsilon_N^{ep}, \boldsymbol{\varepsilon}_T^{ep}, \kappa\}$ or $\mathbf{q} = \{\varepsilon_V^{ep}, \varepsilon_D^{ep}, \boldsymbol{\varepsilon}_T^{ep}, \kappa\}$ and combinations thereof could be taken into account. Thereby, d can be understood as a damage variable acting on the microplane while ε_V^{ep} , ε_D^{ep} , ε_N^{ep} , $\boldsymbol{\varepsilon}_T^{ep}$ and κ denote the plastic microplane strains and the hardening variable, respectively. The most recent publication within our group [22] demonstrates that especially the combination of microplane damage and microplane plasticity is very promising. Following the basic ideas presented in [10], the macroscopic free energy Ψ^{mac} can be understood as the integral over all microplane energies Ψ^{mic} over the solid angle Ω with

$$\Psi^{mac} = \frac{3}{4\pi} \int_{\Omega} \Psi^{mic} d\Omega. \quad (9.11)$$

With the help of this definition of the macroscopic free energy, the *Clausius-Duhem* inequality can be evaluated yielding on the one hand the definition for the macroscopic stress tensor as energetically conjugate quantity to the macroscopic strain tensor

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{3}{4\pi} \int_{\Omega} \mathbf{N} \frac{\Psi^{mic}}{\varepsilon_N} + \mathbf{T}^T \cdot \frac{\Psi^{mic}}{\boldsymbol{\varepsilon}_T} d\Omega \quad \text{or} \quad (9.12)$$

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{3}{4\pi} \int_{\Omega} \mathbf{V} \frac{\Psi^{mic}}{\varepsilon_V} + \mathbf{D} \frac{\Psi^{mic}}{\varepsilon_D} + \mathbf{T}^T \cdot \frac{\Psi^{mic}}{\boldsymbol{\varepsilon}_T} d\Omega \quad (9.13)$$

and on the other hand restrictions for the evolution equations of the internal variables $\mathbf{q}$

$$\mathcal{D}^{mac} = \frac{3}{4\pi} \int_{\Omega} \mathcal{D}^{mic} d\Omega \geq 0 \quad \text{with} \quad \mathcal{D}^{mic} := -\frac{\partial \Psi^{mic}}{\partial \mathbf{q}} \star \dot{\mathbf{q}} \geq 0. \quad (9.14)$$

Here, the operator $\star$ symbolizes the scalar product of the order of $\mathbf{q}$. Similar to the classical derivation of macroscopic material models, the appropriate evolution equations for the internal variables can be motivated through the introduction of damage loading functions or plastic yield functions on the microplane level. Thereby, the damage loading function is normally formulated in the microplane strain space

$$\Phi^{mic} = \Phi^{mic}(\varepsilon_N, \boldsymbol{\varepsilon}_T) \quad \text{or} \quad \Phi^{mic} = \Phi^{mic}(\varepsilon_V, \varepsilon_D, \boldsymbol{\varepsilon}_T), \quad (9.15)$$

while the plastic yield function is generally expressed in a stress based fashion

$$\Phi^{mic} = \Phi^{mic}(\sigma_N, \boldsymbol{\sigma}_T) \quad \text{or} \quad \Phi^{mic} = \Phi^{mic}(\sigma_V, \sigma_D, \boldsymbol{\sigma}_T). \quad (9.16)$$

9.3.2 Microplane models with and without split

In microplane theory, the overall constitutive relation between macroscopic stresses and strains is replaced by a constitutive law on the microplane level. This law relates the microplane stresses to the corresponding strain components. The choice of the relevant strain components is a very crucial point in defining the appropriate microplane model. As pointed out in [8] and indicated already in equations (9.10), (9.13), (9.15) and (9.16), two different types of models can be distinguished. While simple microplane models are only based on the normal and the tangential strain components on the microplane level, with

$$\varepsilon_N = \mathbf{N} : \boldsymbol{\varepsilon} \quad \varepsilon_T = \mathbf{T} : \boldsymbol{\varepsilon}, \quad (9.17)$$

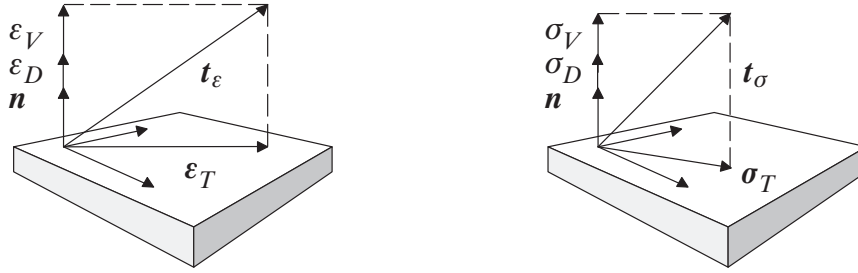


Figure 9.7: Model with normal and tangential microplane components.

more advanced models take into account a further decomposition of the normal component $\varepsilon_N = \varepsilon_V + \varepsilon_D$ into a normal volumetric and a normal deviatoric part with

$$\varepsilon_V = \mathbf{V} : \boldsymbol{\varepsilon} \quad \varepsilon_D = \mathbf{D} : \boldsymbol{\varepsilon} \quad \varepsilon_T = \mathbf{T} : \boldsymbol{\varepsilon}, \quad (9.18)$$

compare Figure 9.7. Note, that $\mathbf{V}$, $\mathbf{D}$, $\mathbf{N}$ and $\mathbf{T}$ denote the volumetric, the deviatoric, the normal and the tangential projection tensor, respectively. They can be expressed exclusively in terms of the microplane's normal $\mathbf{n}$ and the second and fourth order unit tensor $\mathbf{1}$ and $\mathcal{I}$ with

$$\begin{aligned} \mathbf{V} &= \frac{1}{3} \mathbf{1} \\ \mathbf{D} &= \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} - \frac{1}{3} \mathbf{1} \\ \mathbf{N} &= \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} \\ \mathbf{T} &= \mathbf{n} \cdot \mathcal{I}^{sym} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}. \end{aligned} \quad (9.19)$$

A detailed discussion on the advantages and disadvantages of the additional decomposition of the normal component can be found in [8] and has also recently been given in [22]. The decomposition into normal volumetric and normal deviatoric components had originally been proposed in order to be able to simulate materials with *Poisson's* ratio ranging from $-1 \leq \nu \leq 0.5$ which could not be covered by the model without split. Another advantage of the enhanced models is, that they clearly differentiate between volumetric and deviatoric contributions, as will be pointed out in section 9.3.4.

9.3.3 Microplane modelling in the postcritical regime

When simulating cohesive frictional materials with the microplane model, not only the material response in the hardening regime but also the prediction of the postcritical behaviour might be of interest. Since it is well-known, that classical continuum theories suffer from the loss of well-posedness of the governing equations in the postcritical and sometimes even in the prepeak regime, two different enhancement strategies of the original microplane model have been suggested. According to [7] a nonlocal enhancement is introduced into the constitutive formulation through an integral expression in terms of the nonlocal strains $\bar{\epsilon}$ as

$$\bar{\epsilon}(\mathbf{x}) = \frac{1}{V_g} \int_V g(\boldsymbol{\xi}) \epsilon(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}) dV. \quad (9.20)$$

Herein, g denotes a weighting function, for instance the *Gaussian* function, which characterizes the domain of nonlocal influence. In contrast to this integral enhancement, in [19] a gradient enhanced continuum approach was suggested, for which the nonlocal strains $\bar{\epsilon}$ are defined through the following gradient expression

$$\bar{\epsilon}(\mathbf{x}) = \epsilon(\mathbf{x}) + c \nabla^2 \epsilon(\mathbf{x}). \quad (9.21)$$

In this case, the size of the domain of influence is defined through the gradient parameter c . In both approaches, inelasticity is driven by the nonlocal microplane strain components $\bar{\epsilon}_V$, $\bar{\epsilon}_D$, $\bar{\epsilon}_N$ and $\bar{\epsilon}_T$ which again can be understood as projections of the overall nonlocal strain tensor $\bar{\epsilon}$ as

$$\bar{\epsilon}_V = \mathbf{V} : \bar{\epsilon} \quad \bar{\epsilon}_D = \mathbf{D} : \bar{\epsilon} \quad \bar{\epsilon}_N = \mathbf{N} : \bar{\epsilon} \quad \bar{\epsilon}_T = \mathbf{T} : \bar{\epsilon}. \quad (9.22)$$

In the case of microplane damage, the extension to a nonlocal model is straightforward and very promising. It only affects the damage loading function Φ^{mic} , which becomes a function of the nonlocal microplane strains as

$$\Phi^{mic} = \Phi^{mic}(\bar{\epsilon}_N, \bar{\epsilon}_T) \quad \text{or} \quad \Phi^{mic} = \Phi^{mic}(\bar{\epsilon}_V, \bar{\epsilon}_D, \bar{\epsilon}_T). \quad (9.23)$$

For microplane plasticity, however, the nonlocal enhancement is rather cumbersome, especially in the case of a gradient enhanced continuum approach.

9.3.4 Microplane models vs. macroscopic models

Up to now, the microplane model has mainly been validated through the comparison of numerical simulations with experimental data, compare [6] and [30], for example. In addition to this indubitably necessary verification, a comparison with other well-accepted material models seems very helpful. On the one hand, the microplane model could be compared with discrete particle models, as sketched in section 9.4 of this paper, compare also [20]. On the other hand, a comparison with existing macroscopic material models is possible. Besides an additional verification of the microplane model, this comparison could also provide additional information on how to express the microplane parameters in

terms of macroscopically measurable quantities, compare [21].

For example, for the well-known *Drucker-Prager* plasticity formulation with a macroscopic yield function Φ^{mac} expressed in terms of the first and second invariant I_1 and J_2 of the macroscopic stress tensor

$$\Phi^{mac} = \Phi^{mac}(I_1, J_2) = \sqrt{J_2} + \alpha^{mac} I_1 - \phi^{mac} \quad (9.24)$$

an equivalent analogue can be found on the microplane level. Therefore, the first and second invariant have to be replaced by the volumetric and the tangential stress components, respectively. The corresponding yield function on the microplane level Φ^{mic} could thus be expressed as follows

$$\Phi^{mic} = \Phi^{mic}(\sigma_V, \sigma_T) = \sqrt{\sigma_T} + \alpha^{mic} \sigma_V - \phi^{mic}. \quad (9.25)$$

Note, that herein, α^{mac} and α^{mic} denote the macroscopic and the microscopic friction coefficient while ϕ^{mac} and ϕ^{mic} are the corresponding yield stresses. The two macroscopic *Drucker-Prager* parameters α^{mac} and ϕ^{mac} can be determined uniquely from a uniaxial tension and compression test and can thus be expressed in terms of the uniaxial tensile and compressive strength f_t and f_c . By performing a comparison of the macroscopic and the microscopic model in an integral sense, the microplane parameters α^{mic} and ϕ^{mic} can be related to the macroscopically measurable quantities as well. Thus, the following relations can be obtained

$$\begin{aligned} \alpha^{mac} &= \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{f_c - f_t}{f_c + f_t} & \text{and } \phi^{mac} &= \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{f_c f_t}{f_c + f_t} \\ \alpha^{mic} &\approx \frac{\sqrt{5}}{3} \frac{f_c - f_t}{f_c + f_t} & \text{and } \phi^{mic} &\approx \frac{2\sqrt{5}}{9} \frac{f_c f_t}{f_c + f_t}. \end{aligned} \quad (9.26)$$

For a detailed derivation of these equations, the reader is referred to [22].

9.3.5 Example – Microplane plasticity vs. macroscopic plasticity

Finally, the microplane-based plasticity formulation and the invariant-based macroscopic plasticity model will be compared by means of the model problem of a plate with a hole as described in detail in [2]. The aluminium plate, for which a plane strain state is assumed, has a size of $200 \times 200 \text{ mm}^2$, while the radius of the hole is $r = 10 \text{ mm}$. The plate is loaded vertically under displacement control with $\lambda \bar{p}$, whereby $\bar{p} = 100 \text{ MPa}$. The material is characterized through a Young's modulus of $E = 206900 \text{ N/mm}^2$ and a Poisson's ratio of $\nu = 0.29$. Moreover, a perfectly plastic material behaviour is assumed with $f_c = f_t = 450 \text{ N/mm}^2$. Consequently, the microscopic and the macroscopic friction coefficient vanish identically as $\alpha^{mac} = 0$ and $\alpha^{mic} = 0$, while the macroscopic and the microplane-based yield strength take values of $\phi^{mac} = 259.81 \text{ N/mm}^2$ and $\phi^{mic} = 111.80 \text{ N/mm}^2$. For the spatial discretization, 256 eight-noded finite elements with a reduced 2×2 integration have been applied. Moreover, the spatial discretization of the solid angle has been performed with $n_{mp} = 42$ integration points as proposed in [5].

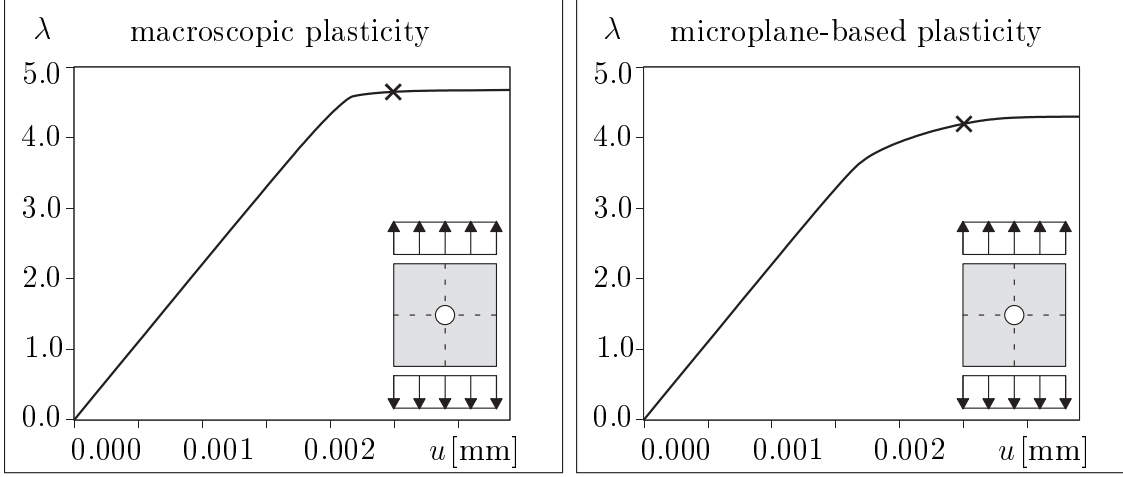


Figure 9.8: Macroscopic and microscopic model – Load displacement curves.

Figure 9.8 depicts the resulting load-deflection curves of both simulations. The critical load factor of the macroscopic model $\lambda_{crit}^{mac} = 4.66$ corresponds to the reference solution according to [2]. Remarkably, the critical load factor of the microplane plasticity model $\lambda_{crit}^{mic} = 4.30$ is slightly lower. This difference is caused by the fact, that on several microplanes, the yield condition is violated before the yield stress is reached macroscopically. Then, a successive onset of yielding can be observed on more and more microplanes until all planes of the corresponding integration point have finally entered the plastic regime. Despite this slight difference, both models behave rather similarly.

The related strain distributions at a top displacement of $u = 0.0025$ mm shown in Figure 9.9 underline the similarity of the different formulations. In both cases, plastic yielding is initiated at the horizontal edges of the hole and a zone of localized deformation forms under an angle of 45° towards the loading axis. It should be mentioned, that for the sake of simplicity, this comparison has only been shown for a rather simple material formulation. At the moment, more complex studies involving pressure-sensitive materials are in progress.

9.4 Theoretical comparison of discrete and continuous models

It is apparent, that due to their complexity the combined beam-particle model and the enhanced general microplane formulation presented in the previous sections, are not quite suitable for a theoretical comparison in their present form.

Therefore, we will focus on more simple models in this section. We will compare in a schematic way linear elastic and elasto-plastic discrete sphere models representing some kind of granular material with linear elastic and elasto-plastic microplane models. First, the linear elastic form of the discrete sphere assembly approach is briefly sketched, followed by a comparison with the linear elastic microplane formulation by means of the basic constitutive equations. Afterwards the elasto-plastic enhancement of this basic discrete model

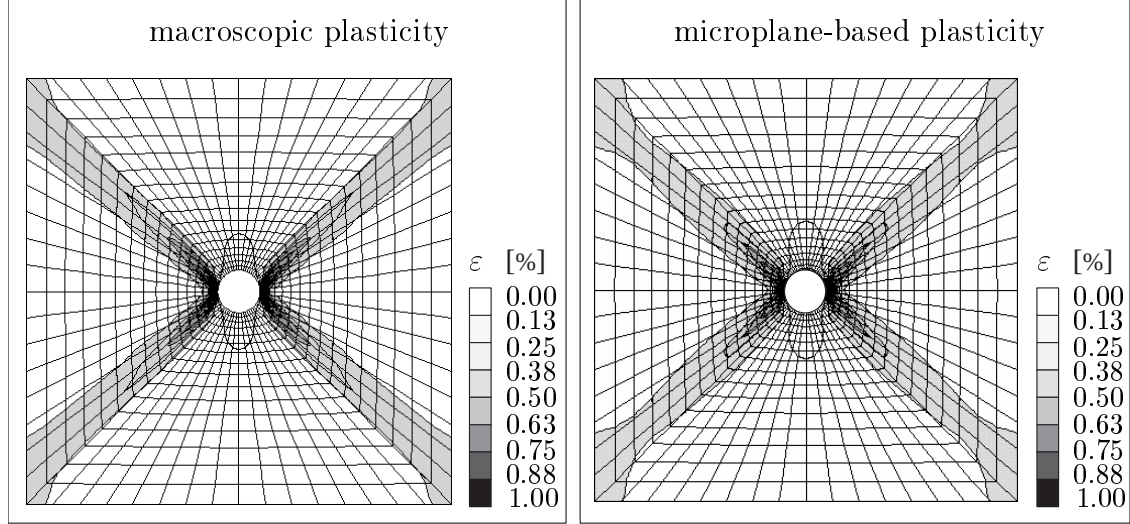


Figure 9.9: Macroscopic and microscopic model – Strains in loading direction.

is shortly commented and confronted with the elasto-plastic microplane formulation. The comparison by means of the most important quantities and calculation formulae expresses the good agreement among discrete and continuous models. In this context the microplane model will be applied in its original formulation in terms of normal and tangential components only, not taking into account the volumetric deviatoric split. In this contribution the basic equations of both simplified models are not derived. Instead a rather descriptive discussion is given; for details it is referred to a recent publication [20].

In contrast to the combined beam-particle model introduced in section 9.2, a three-dimensional formulation for each circular particle is applied here. We restricted ourselves to granular materials with an isotropic packing structure composed by equally sized particles with a constant radius r , where for the sake of simplicity the rotations are neglected. The previously discussed model in section 9.2 can be characterized as a special and enhanced form of this simple model. Every particle within the disk assembly displaces due to a uniform strain as the mean displacement field according to *Voigt's* hypothesis. Therefore, any vector $\mathbf{l}$ connecting two arbitrary points of the assembly is strained by the amount $\Delta \mathbf{l}$. In particular, this relation holds for the relative displacement $\Delta \mathbf{l}^c$ of the contact vector $\mathbf{l}^c$ which connects the centres of mass of the two corresponding particles in contact as shown in Figure 9.10.



Figure 9.10: Normal and tangential displacement of contact vector.

For the definition of the constitutive behaviour at the contact we use a linear *Hertz* contact law relating the normal and tangential contact forces f_N^c and f_T^c , depicted in Figure

9.10, right, to the normal and the tangential contact displacements by introducing corresponding contact stiffnesses k_N and k_T . Through the application of the principle of virtual work $\delta W^{mac} = \delta W^{mic}$ to the granular assembly the contact forces can be related to the macroscopic stress tensor $\boldsymbol{\sigma}$ within the considered representative volume V . The relation between the overall stress and strain tensor then leads to the discrete fourth order constitutive tensor of the material $\mathcal{C}$. The analytical solution for the response of the sphere assembly can be derived by transforming the “discrete” stress tensor and the discrete constitutive moduli into an integral form. Therefore an integral over the solid angle Ω , weighted by the number of contacts, is used. The corresponding contact stiffnesses can finally be formulated in terms of the macroscopic Lamé constants λ and μ . An overview of the derived formulations confronted with the corresponding formulations of a basic elastic microplane model are shown in Table 9.1 and express the apparent similarities between both models.

granular assembly	microplane model
$\Delta \mathbf{l}^c = \Delta l_N^c \mathbf{n} + \Delta \mathbf{l}_T^c$ $\Delta l_N^c = \ \mathbf{l}^c\ \mathbf{N} : \boldsymbol{\varepsilon}$ $\Delta \mathbf{l}_T^c = \ \mathbf{l}^c\ \mathbf{T} : \boldsymbol{\varepsilon}$	$\mathbf{t}_\varepsilon = \varepsilon_N \mathbf{n} + \boldsymbol{\varepsilon}_T$ $\varepsilon_N = \mathbf{N} : \boldsymbol{\varepsilon}$ $\boldsymbol{\varepsilon}_T = \mathbf{T} : \boldsymbol{\varepsilon}$
$\mathbf{f}^c = f_N^c \mathbf{n} + \mathbf{f}_T^c$ $f_N^c = k_N \Delta l_N^c$ $\mathbf{f}_T^c = k_T \Delta \mathbf{l}_T^c$ $\boldsymbol{\sigma} = \frac{Nr}{2V\pi} \int [\mathbf{f}^c \otimes \mathbf{n}]^{sym} d\Omega$	$\mathbf{t}_\sigma = \sigma_N \mathbf{n} + \boldsymbol{\sigma}_T$ $\sigma_N = C_N \varepsilon_N$ $\boldsymbol{\sigma}_T = C_T \boldsymbol{\varepsilon}_T$ $\boldsymbol{\sigma} = \frac{3}{4\pi} \int [\mathbf{t}_\sigma \otimes \mathbf{n}]^{sym} d\Omega$
$k_N = \frac{3V}{4Nr^2} [2\mu + 3\lambda]$ $k_T = \frac{3V}{4Nr^2} [2\mu - 2\lambda]$ $\mathcal{C} = \frac{Nr^2}{V\pi} \int [k_N \mathbf{N} \otimes \mathbf{N} + k_T \mathbf{T}^T \cdot \mathbf{T}] d\Omega$	$C_N = 2\mu + 3\lambda$ $C_T = 2\mu - 2\lambda$ $\mathcal{C} = \frac{3}{4\pi} \int [C_N \mathbf{N} \otimes \mathbf{N} + C_T \mathbf{T}^T \cdot \mathbf{T}] d\Omega$

Table 9.1: Comparison of linear elastic models.

While the microplane model is formulated in terms of strain and stress vectors, the sphere particle model is based on relative displacements and contact forces. Consequently, the material parameters of the particle model can be interpreted as normal and tangential contact stiffnesses, whereas the related microplane parameters can be understood as normal and tangential elastic moduli. In both cases the macroscopic stress tensor is derived through the principle of virtual work, applied for the particle model on a representative volume V of finite size and for the microplane model on the material point.

Also for frictional materials, both models applied in the sense of elasto-plasticity show a similar behaviour. The particle model is usually associated with *Coulomb's* friction law for cohesionless materials, whereas the yield function of the microplane model can be introduced in a more general *Drucker-Prager* based fashion. Therefore an additive split of the normal and tangential direction of the relative displacement of the contact vector $\Delta \mathbf{l}$ is applied in the case of the particle assembly. It includes not only the difference of the norm of the tangential stress and the normal stress weighted by the friction angle φ , but also a

granular assembly	microplane model
$\Delta \mathbf{l} = \Delta l_N \mathbf{n} + \Delta \mathbf{l}_T$ $\Delta l_N = \Delta l_N^{el} + \Delta l_N^{pl}$ $\Delta \mathbf{l}_T = \Delta \mathbf{l}_T^{el} + \Delta \mathbf{l}_T^{pl}$	$\mathbf{t}_\varepsilon = \varepsilon_N \mathbf{n} + \boldsymbol{\varepsilon}_T$ $\varepsilon_N = \varepsilon_N^{el} + \varepsilon_N^{pl}$ $\boldsymbol{\varepsilon}_T = \boldsymbol{\varepsilon}_T^{el} + \boldsymbol{\varepsilon}_T^{pl}$
$\mathbf{f} = f_N \mathbf{n} + \mathbf{f}_T$ $f_N = k_N \Delta l_N^{el}$ $\mathbf{f}_T = k_T \Delta \mathbf{l}_T^{el}$ $\boldsymbol{\sigma} = \frac{Nr}{2V\pi} \int [\mathbf{f} \otimes \mathbf{n}]^{sym} d\Omega$	$\mathbf{t}_\sigma = \sigma_N \mathbf{n} + \boldsymbol{\sigma}_T$ $\sigma_N = C_N \varepsilon_N^{el}$ $\boldsymbol{\sigma}_T = C_T \boldsymbol{\varepsilon}_T^{el}$ $\boldsymbol{\sigma} = \frac{3}{4\pi} \int [\mathbf{t}_\sigma \otimes \mathbf{n}]^{sym} d\Omega$
$\Phi = f^{eq} \leq 0$ $f^{eq} = \ \mathbf{f}_T\ - \tan \varphi f_N$	$\Phi = \sigma^{eq} - Y \leq 0$ $\sigma^{eq} = \ \boldsymbol{\sigma}_T\ - \tan \varphi \sigma_N$
$\Delta \dot{l}_N^{pl} = \dot{\gamma} \mu_N$ $\Delta \dot{\mathbf{l}}_T^{pl} = \dot{\gamma} \boldsymbol{\mu}_T$ $\dot{\gamma} = \ \mathbf{l}\ /h [\nu_N C_N \mathbf{N} + \nu_T C_T \mathbf{T}] : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}$	$\dot{\varepsilon}_N^{pl} = \dot{\gamma} \mu_N$ $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_T^{pl} = \dot{\gamma} \boldsymbol{\mu}_T$ $\dot{\gamma} = 1/h [\nu_N C_N \mathbf{N} + \nu_T C_T \mathbf{T}] : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}$

Table 9.2: Comparison of elasto-plastic models.

yield stress, which does usually not exist for the particle model. If both material models are written in a similar notation, the existing particle models for frictional sliding can be interpreted as a special case of a non-associated plasticity formulation with the yield function Φ . Based on the introduction of plastic multipliers γ , a homogenized tangent operator for the particle model can be derived in the same fashion as for the microplane plasticity model. The remarkable similarity of both formulations is documented in Table 9.2. For details of this derivation it is referred to [20].

9.5 Summary

We presented different numerical approaches for the mesoscopic simulation of geomaterials. While the discrete combined beam-particle model is thought as an abstraction of a class of cohesive materials, the discrete sphere model describes the behaviour of non-cohesive materials, like sand. In contrast to this and although similar with regard to the theoretical background, the application area of the continuous microplane model is the mesoscopic simulation of cohesive-frictional materials, like concrete or cohesive soils. In order to demonstrate the capabilities of discrete models we performed numerical simulations of basic loading scenarios and showed, that the combined beam-particle model is able to simulate the failure phenomena within the class of cohesive materials. A comparison of compressive simulations with experimental observations taken from the literature led to a reasonable qualitative agreement. Expected failure pattern could qualitatively be reproduced in a satisfactory manner in the examined cases.

Within this research project, we aim at closing the gap between mesostructural failure mechanisms and a homogenized macroscopic simulation. Simulations of large samples

with the discrete models are prohibitive at the moment due to the exhaustive computational time needs. This type of discrete models should rather serve to give a better understanding of microstructural failure phenomena in order to “feed” continuum-based material models with the appropriate information. For larger simulations, however, the application of finite element based continuum models seems to be inevitable even in the future. Nevertheless, the discrete combined beam-particle model can help to simulate mesostructural mechanisms, like the evolution of localization phenomena, compare [15], and to explain the macroscopic failure evolution.

A theoretical comparison of a simple discrete element model with the microplane model in the last section of the paper emphasized the remarkable similarity of both formulations. While this sphere particle model is formulated in terms of relative displacements and contact forces, the microplane model is based on strain and stress vectors. Consequently, the material parameters of the particle model can be interpreted as normal and tangential contact stiffnesses, whereas the related microplane parameters can be understood as normal and tangential elastic moduli. Of course, it should be remarked, that although there are numerous similarities between both formulations, each of them is extremely valuable for its own field of application. For more complex studies, a particle model consisting of particles of different size and shape similar to the one proposed in the first part could be applied to determine micromechanical quantities. For example, discrete values of a contact distribution function, which could be used as input parameter for a microplane-based finite element simulation could be calculated. After discussing a qualitative comparison in a recent work [14] and encouraged by the advances shown [20] and briefly described in the last part of this paper, we aim at comparing a simple polygonal particle model and the microplane model quantitatively in the future. However, for the more enhanced discrete model discussed in the first part of this paper, a comparison is far more complex. In order to push forward the idea to bridge the gap between this different class of models further studies are necessary in the future.

Acknowledgement

The authors are indebted for the financial support of the German Science Foundation (DFG) within the research group *Modellierung kohäsiver Reibungsmaterialien* under grant no. VE 163/4-1.4 and the project *Mikro-Makro Übergänge für kombinierte anisotrope Schädigung und Plastizität* under grant no. RA 218/18-1.

Bibliography

- [1] M. P. Allen and D. J. Tildesley. *Computer simulation of liquids*. Oxford University Press, 1987.
- [2] F. J. Barthold, M. Schmidt, and E. Stein. Error indicators and mesh refinements for finite element computations of elastoplastic deformations. *Comp. Mech.*, 22:225–238, 1998.
- [3] R. J. Bathurst and L. Rothenburg. Micromechanical aspects of isotropic granular assemblies with linear contact interactions. *J. Appl. Mech.*, 55:17–23, 1988.
- [4] Z. P. Bažant and P. G. Gambarova. Crack shear in concrete: Crack band microplane model. *J. Struct. Engng.*, 110:2015–2036, 1984.

- [5] Z. P. Bažant and B. H. Oh. Efficient numerical integration on the surface of a sphere. *ZAMM*, 66:37–49, 1986.
- [6] Z. P. Bažant and P. C. Prat. Microplane model for brittle plastic material. *J. Engng. Mech.*, 114:1672–1702, 1988.
- [7] Z. P. Bažant and J. Ožbolt. Nonlocal Microplane model for fracture, damage and size effect in structures. *J. Engng. Mech.*, 116:2485–2505, 1990.
- [8] I. Carol, P. C. Prat, and Z. P. Bažant. New explicit microplane model for concrete: Theoretical aspects and numerical implementation. *Int. J. Solids Structures*, 33:1173–1191, 1992.
- [9] I. Carol and Z. P. Bažant. Damage and plasticity in microplane theory. *Int. J. Solids Structures*, 34:3807–3835, 1997.
- [10] I. Carol, M. Jirasek, and Z. P. Bažant. A thermodynamically consistent approach to microplane theory. Part I: Free energy and consistent microplane stresses. *Int. J. Solids Structures*, accepted for publication, 2000.
- [11] C. S. Chang. Numerical and analytical modelling of granulates. In Yuan, editor, *Computer methods and advances in geomechanics*, pages 105–114. Balkema, Rotterdam, 1997.
- [12] J. Christoffersen, M. M. Mehrabadi, and S. Nemat-Nasser. A micromechanical description of granular material behaviour. *J. Appl. Mech.*, 48:339–344, 1981.
- [13] P. A. Cundall and O. D. L. Strack. A discrete numerical model for granular assemblages. *Géotechnique*, 29:47–65, 1979.
- [14] G. A. D’Addetta, E. Kuhl, F. Kun, and E. Ramm. Micromechanical modelling of “concrete” cracking. In W. Wunderlich, editor, *Solids, structures and coupled problems in engineering – Proceedings of ECCM I*. Munich, Germany, 1999.
- [15] G. A. D’Addetta, F. Kun and E. Ramm. Application of a discrete model to the fracture process of cohesive frictional materials. *Int. J. Fracture*, submitted for publication, 2000.
- [16] G. A. D’Addetta, F. Kun, and E. Ramm. From solids to granulates - Discrete element simulations of fracture and fragmentation processes in geomaterials. In P. A. Vermeer et al., editors, *Continuous and Discontinuous Modelling of Cohesive Frictional Materials, Lecture Notes in Physics 586*, pages 231–258, Springer Verlag, Berlin, 2001.
- [17] H. J. Herrmann, A. Hansen, and S. Roux. Fracture of disordered, elastic lattices in two dimensions. *Phys. Rev. B*, 39:1637–1648, 1989.
- [18] K.-I. Kanatani. Distribution of directional data and fabric tensors. *Int. J. Engng. Sci.*, 22:149–164, 1984.
- [19] E. Kuhl, E. Ramm, and R. de Borst. An anisotropic gradient damage model for quasi-brittle materials. *Comp. Meth. Appl. Mech. Engng.*, 183:87–103, 2000.
- [20] E. Kuhl, G. A. D’Addetta, H. J. Herrmann, and E. Ramm. A comparison of discrete granular material models with continuous microplane formulations. *Granular Matter*, in press, 2000.

- [21] E. Kuhl, E. Ramm, and K. J. Willam. Failure analysis for elasto-plastic material models on different levels of observation. *Int. J. Solids Structures*, accepted for publication, 2000.
- [22] E. Kuhl and E. Ramm. Microplane modelling of cohesive frictional materials. *European J. Mech. A*, accepted for publication, 2000.
- [23] F. Kun and H. J. Herrmann. Fragmentation of colliding discs. *Int. J. Mod. Phys. C*, 7:837–855, 1996.
- [24] F. Kun and H. J. Herrmann. A study of fragmentation processes using a discrete element method. *Comp. Meth. Appl. Mech. Engng.*, 138:3–18, 1996.
- [25] F. Kun, G. A. D’Addetta, H. J. Herrmann, and E. Ramm. Two-dimensional dynamic simulation of fracture and fragmentation of solids. *Comp. Ass. Mech. Engng. Sci.*, 6:385–402, 1999.
- [26] C.-L. Liao, T.-P. Chang, D.-H. Young, and C. S. Chang. Stress–strain relationship for granular materials based on the hypothesis of best fit. *Int. J. Solids Structures*, 34:4087–4100, 1997.
- [27] V. A. Lubarda and D. Krajcinovic. Damage tensors and the crack density distribution. *Int. J. Solids Structures*, 30:2859–2877, 1993.
- [28] O. Mohr. Welche Umstände bedingen die Elastizitätsgrenze und den Bruch eines Materiales? *Zeitschrift des Vereins Deutscher Ingenieure*, 46:1524–1530, 46:1572–1577, 1900.
- [29] C. Moukarzel and H. J. Herrmann. A vectorizable random lattice. *J. Stat. Phys.*, 68:911–923, 1992.
- [30] J. Özbolt. Microplane model for quasibrittle materials. *Report No. 96 I, Institute of Construction Materials, University of Stuttgart*, 1996.
- [31] E. Schlangen and J. G. M. van Mier. Experimental and numerical analysis of micromechanisms of fracture of cement-based composites. *Cem. Conc. Res.*, 14:105–118, 1992.
- [32] H. Schorn. Numerical simulation of composite materials as concrete. In F. Wittmann, editor, *Fracture toughness and fracture energy of concrete*, pages 177–188. Elsevier, Amsterdam, 1986.
- [33] P. Stroeven. *Some aspects of the micromechanics of concrete*. PhD Thesis, Delft University of Technology, 1974.
- [34] G. I. Taylor. Plastic strain in metals. *J. Inst. Metals*, 62:307–324, 1938.
- [35] H.-J. Tillemans and H. J. Herrmann. Simulating deformations of granular solids under shear. *Physica A*, 217:261–288, 1995.
- [36] J. G. M. van Mier. *Fracture processes of concrete*. CRC Press, Boca Raton, 1997.
- [37] R.A. Vonk. *Softening of concrete loaded in compression*. PhD Thesis, Technical University of Eindhoven, 1992.

10

On the micromechanical modelling of the multiplicative decomposition of the deformation gradient in finite viscoelasticity

S. Reese

AG Numerische Mechanik & Simulationstechnik

Institut für Mechanik

Ruhr-Universität Bochum

D-44780 Bochum

Abstract. *The material behaviour of rubber on micro level is usually described by means of statistical mechanics. In particular, the Neo-Hooke model has been derived in this fashion. We show that a similar concept can be applied in order to include also viscoelastic effects. This results in a continuum mechanical model of finite viscoelasticity which is based on the multiplicative decomposition of the deformation gradient. Due to the latter aspect, the implementation of the model into a finite element code is suitably carried out in a way analogous to finite elastoplasticity. For the integration of the material equations for instance, we use the exponential mapping algorithm which has been proven to be very efficient from the computational point of view. Test calculations show that the formulation is appropriate to model the physical behaviour in practical applications realistically. Also thermomechanical coupling effects are incorporated.*

10.1 Introduction

It is well-known that methods of statistical mechanics are appropriate to describe the thermo-elastic material behaviour of rubber-like polymers. See for example the derivation of the *Neo-Hooke* model (Kuhn [8], Treloar [24]). More complicated is such a procedure, if also inelastic effects, e. g. viscoelasticity, need to be included. An appropriate approach for this purpose is the transient network concept (Green & Tobolsky [5]) which is based on the assumption that chains are steadily breaking and reforming. The above authors have utilized this idea in order to formulate a model of *finite linear* viscoelasticity. The latter accounts for large deformations but only small deformation rates. Thus, only processes close to thermodynamic equilibrium can be considered.

In this contribution, we show how the transient network theory can be extended in order to obtain a more general concept of viscoelasticity. One important issue is that the new model is realistic also for states far away from thermodynamic equilibrium. In contrast to

earlier approaches (see e. g. *Simo* [22], *Holzapfel* [6]), it is based on deformation-like internal variables. Crucial to the method is the fact that the transient network concept includes the idea of a stress-free intermediate configuration. This leads in the continuum mechanical context directly to the multiplicative decomposition of the deformation gradient. Note that in previous works, the multiplicative split had the status of a purely continuum mechanical assumption (see *Sidoroff* [21], *Lubliner* [13], *Lion* [10, 11], *Reese & Govindjee* [17, 18] and *Keck & Miehe* [7]). Using the transient network theory, we are able to motivate this approach on micromechanical level. This reveals an important analogy to common models in finite elastoplasticity. The latter are micromechanically motivated by the observation that the deformation in single crystals can be decomposed into the (plastic) slip on the crystallographic slip planes and (elastic) lattice distortions and rigid rotations.

The present model has the additional advantage that it can be easily extended to include also fully-coupled thermomechanical effects. It should be emphasized that the usual thermomechanical split as proposed by *Lu & Pister* [12] is not appropriate. This is due to the fact that the energetic contribution to the stresses is over-estimated, whereas the entropic part turns out to be negligible. It is, however, known from very early literature (see e. g. *Kuhn & Gr  n* [9], *Treloar* [24]) that the stresses in rubber are mainly entropic. We propose in this work a procedure which is consistent with the previously discussed thermomechanical behaviour and is above that straightforward from the continuum mechanical point of view.

Concerning the implementation of the model into a finite element code, one has to take special care of the time integration of the evolution equation in every *Gauss* point and the time integration of the energy balance carried out on global level. The local integration is carried out using the exponential mapping algorithm derived originally in the context of elastoplastic problems (see *Weber & Anand* [26]). This algorithm has two main advantages. First of all, we can work with the spectral representation of the evolution equation which leads to high computational efficiency in particular for isotropic problems. Secondly, the algorithm preserves the symmetry of the material tangent. Note that this would not be the case for the standard backward *Euler* algorithm.

Concerning the element formulation, we prefer isoparametric low-order elements due to their robustness and simplicity. In order to avoid locking, a special element technology based on reduced integration plus hourglass stabilization has been developed (see *Reese et al.* [19, 20]).

The paper is structured as follows. In Section 10.2, we review the transient network theory. The transition to the continuum mechanical level follows in Section 10.3. Section 10.4 contains the general incorporation of thermomechanical effects. In Section 10.5, we state the weak form of the balance equation. The discussion of the numerical aspects follows in Section 10.6. In the final section, one example is presented in order to validate the presented approach.

10.2 Micromechanical considerations

10.2.1 Chain statistics

In contrast to the standard static network theory, the so-called transient network theory is based on the assumption that chains are steadily breaking and reforming. Thus, we have chains which are elastically active and inactive. In order to make the differences between the two theories more clear, let us consider a rheological model with several parallel springs (see Figure 10.1). In the static theory, these springs remain always intact. If the length is held constant, consequently, also the stress is constant. The situation is different in the transient case. It is a physically reasonable assumption that a chain reforms in the *stress-free* state. If we further assume that the total number of chains remains constant, we observe a steady decrease of the stress over time. This is the typical effect of stress relaxation.

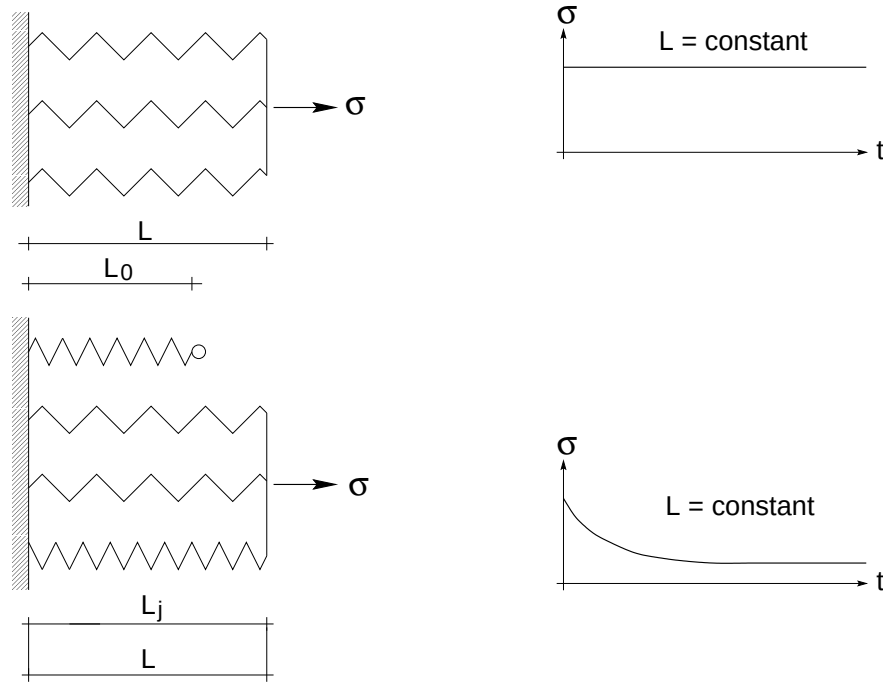


Figure 10.1: Relaxation test: (a) static theory, (b) transient theory.

To build up a statistical theory, one derives the probability for the end-to-end distance of an average chain lying between r and $r + dr$ (see Figure 10.2). The quantity l represents the mean length of a chain segment. The probability *density* based on the *Gaussian* distribution is given by

$$\hat{p}(r) = \left(\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2n} \sqrt{\pi} l} \right)^3 \exp \left[-\frac{3r^2}{2nl^2} \right]. \quad (10.1)$$

According to *Boltzmann's* law (k *Boltzmann's* constant), the entropy of a single chain reads

$$\eta_i = k \ln (\hat{p}(r) dV) = \tilde{C} - \frac{3}{2nl^2} r^2. \quad (10.2)$$

Neglecting the internal energy e_i in the relation $\Psi_i = e_i - \Theta \eta_i$ for the *Helmholtz* free energy (Θ absolute temperature), we come to

$$\Psi_i = \frac{3\Theta}{2nl^2} r^2 + C, \quad (10.3)$$

where C as well as $\tilde{C}$ denote constants and n is the number of chain segments.

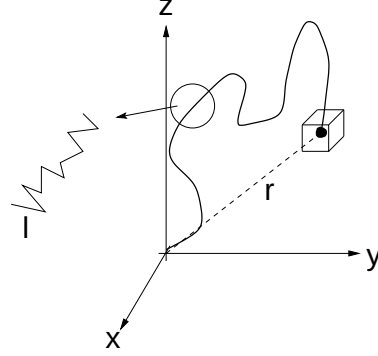


Figure 10.2: Average chain.

10.2.2 Static network theory

The next step is to derive the *Helmholtz* free energy for the whole network (for the whole ensemble of chains). We describe the undeformed state of a rubber test piece with the coordinates x_0, y_0 and z_0 . If any chain in the network deforms like the bulk rubber (affinity assumption, see Figure 10.3), we obtain the coordinates for the deformed configuration as

$$x = \lambda_1 x_0, \quad y = \lambda_2 y_0, \quad z = \lambda_3 z_0. \quad (10.4)$$

λ_A ($A = 1, 2, 3$) represent the stretches in the three principal directions. Thus, in the deformed configuration, we may state $r^2 = \lambda_1^2 x_0^2 + \lambda_2^2 y_0^2 + \lambda_3^2 z_0^2$, where λ_A ($A = 1, 2, 3$) represent principal stretches.

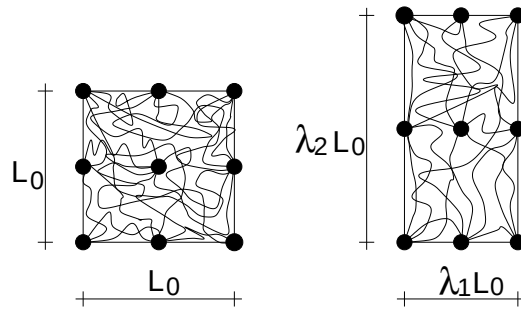


Figure 10.3: Undeformed and deformed configuration.

The free energy of the whole network is given by the relation $\Psi = \int \hat{\Psi}_i(r) dN$, where N is the number of chains per reference volume. Using (10.3) and carrying out the latter integration leads finally to the well-known *Neo-Hooke* model

$$\Psi = \frac{1}{2} N k \Theta (\lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \lambda_3^2). \quad (10.5)$$

If we exploit further the assumption of incompressibility $\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 = 1$ and investigate the special deformation state $\lambda_2 = \lambda_3 = \frac{1}{\sqrt{\lambda_1}}$ (uniaxial tension), we arrive at $\Psi = \frac{1}{2} N k \Theta (\lambda_1^2 + \frac{2}{\lambda_1} - 3)$. The *Cauchy* stress is then derived by

$$\sigma = \lambda_1 \frac{\partial \Psi}{\partial \lambda_1} = N k \Theta (\lambda_1^2 - \frac{1}{\lambda_1}) = N k \Theta (\frac{L^2}{L_0^2} - \frac{L_0}{L}), \quad (10.6)$$

where L is computed by $L = \lambda_1 L_0$.

10.2.3 Transient network theory (classical concept)

Consider now the *transient* network concept according to *Green & Tobolsky* [5]. The latter authors start from the formula

$$\sigma = k \Theta \sum_{(j)} N_j (\frac{L^2}{L_j^2} - \frac{L_j}{L}) := N k \Theta (\frac{L^2}{q^2} - \frac{m}{L}). \quad (10.7)$$

In the rheological model (Figure 10.1b), the quantity L_j represents the length, for which the chain type j has reformed. N_j is the number of chains (per reference volume) belonging to chain type j . The comparison with (10.6) shows, that in the transient network theory, q^2 and m take the place of L_0^2 and L_0 , respectively. Note that the “internal lengths” L_j represent additional unknowns which have to be determined by additional equations. For this purpose, *Green & Tobolsky* [5] state an evolution law for the breaking of chains:

$$\dot{M} = -\alpha M \Rightarrow M = M_0 \exp[-\alpha(t - t_0)]. \quad (10.8)$$

In the latter formula, α denotes the probability *per time increment* for the chain breakage, and M a certain number of chains. Interestingly, α can be interpreted as the inverse of the relaxation time τ . If the system relaxes immediately ($\tau \rightarrow 0$), the probability α goes to infinity ($\delta t \rightarrow 0 \Rightarrow \alpha \rightarrow \infty$). On the other hand, for very large relaxation times ($\tau \rightarrow \infty$), α tends to zero. *Green & Tobolsky* [5] finally end up with a stress relation which is similar to the common one-dimensional stress relation in linear viscoelasticity. In order to recognize this analogy, the term $\frac{L^2}{q^2} - \frac{m}{L}$ has to be identified with the elastic logarithmic strain $\varepsilon_e = \varepsilon - \varepsilon_i$ ($\varepsilon := \ln \lambda$). In linear viscoelasticity, the additive split of the *linearized* strain measure ε_L into elastic and inelastic parts is well accepted. Thus, interestingly, *Green & Tobolsky's* approach tacitly implies the additive split of $\varepsilon = \ln \lambda$. The latter results automatically into the multiplicative split of the stretch λ . But due to the fact that the evolution law for the chain breakage is *linear* their concept is only appropriate for applications in finite linear viscoelasticity, i. e. small perturbations away from thermodynamic equilibrium. Moreover, the approach has been achieved in the context of a one-dimensional consideration. For the purpose of developing a finite fully three-dimensional theory, several additional steps are necessary.

10.2.4 Transient network theory (new approach)

We consider now *three* deformation states, firstly again the undeformed configuration as in Section 10.2.2. Secondly, we define the coordinates of a so-called *intermediate* configuration by

$$x_j = \lambda_{1j} x_0, \quad y_j = \lambda_{2j} y_0, \quad z_j = \lambda_{3j} z_0. \quad (10.9)$$

The intermediate configuration for the chain type j represents the configuration, in which this chain type has reformed (stress-free state). The general deformed configuration is then given by the coordinates

$$x = (\lambda_1 \lambda_{1j}^{-1}) x_j, \quad y = (\lambda_2 \lambda_{2j}^{-1}) y_j, \quad z = (\lambda_3 \lambda_{3j}^{-1}) z_j. \quad (10.10)$$

If we carry out the same procedure as in Section 10.2.2, we obtain the free energy of the transient network with

$$\Psi = \sum_{(j)} \frac{N_j k \Theta}{2} \left((\lambda_1 \lambda_{1j}^{-1})^2 + (\lambda_2 \lambda_{2j}^{-1})^2 + (\lambda_3 \lambda_{3j}^{-1})^2 - 3 \right). \quad (10.11)$$

Unknown (for each chain type) are here still the number of chains N_j and the so-called “internal” stretches λ_{Aj} ($A = 1, 2, 3$). *Green & Tobolsky* [5] could have started also from this relation in order to derive (10.7). But at this point, we go beyond the work of the latter authors. The new idea is to replace the dependence on N_j and λ_{Aj} ($A = 1, 2, 3$) by means of a distribution function $f(\lambda_{Aj}, t)$. Then, we write for the free energy

$$\begin{aligned} \Psi &= \int_1^{\lambda_1} \frac{k \Theta}{2} \left((\lambda_1 \lambda_{1j}^{-1})^2 - 1 \right) \hat{f}(\lambda_{1j}, t) d\lambda_{1j} \\ &\quad + \int_1^{\lambda_2} \frac{k \Theta}{2} \left((\lambda_2 \lambda_{2j}^{-1})^2 - 1 \right) \hat{f}(\lambda_{2j}, t) d\lambda_{2j} \\ &\quad + \int_1^{\lambda_3} \frac{k \Theta}{2} \left((\lambda_3 \lambda_{3j}^{-1})^2 - 1 \right) \hat{f}(\lambda_{3j}, t) d\lambda_{3j}, \end{aligned} \quad (10.12)$$

where the distribution function fulfills

$$\int_1^{\lambda_A} f(\lambda_{Aj}, t) d\lambda_{Aj} = \hat{N}(t). \quad (10.13)$$

The integral gives the current number of chains per reference volume. Due to the fact that the stretches λ_{Aj} describe a certain real but past configuration, the internal stretches have to lie in the interval $[1, \lambda_A]$. The fact that we deal with *isotropic* material behaviour, is included by taking the same distribution function for each direction. The distribution, however, is time- as well as deformation-dependent.

In order to overcome the difficulty of finding an appropriate distribution function, we again consider first the one-dimensional case. In general, the distribution function in the undeformed configuration will be described by (see also Figure 10.4)

$$\hat{f}(\lambda_{1j}, t_0) = \begin{cases} N_0 & \text{for } \lambda_{1j} = 1 \\ 0 & \text{else} \end{cases} \quad (10.14)$$

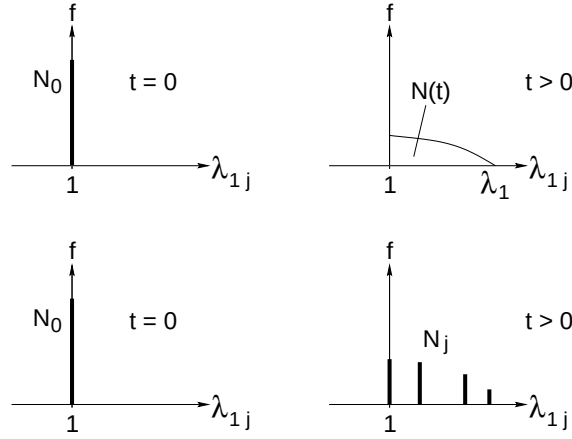


Figure 10.4: Continuous and discrete distribution.

Since it is not possible to make any statement about the continuous distribution in the deformed configuration, we study rather the discrete case. Physically, this means that we do not consider every chain type separately but include several chain types into a few “average” chain types. Consequently, the corresponding average intermediate configuration does not represent necessarily a *real* deformed state. The internal stretches of such a fictive intermediate configuration are denoted by $\lambda_{A\star} = \hat{\lambda}_{A\star}(t)$:

$$\hat{f}(\lambda_{1j}, t) = \begin{cases} N_\infty & \text{for } \lambda_{1j} = 1 \\ N_2 & \text{for } \lambda_{1j} = \lambda_1 \dots \\ N_\star & \text{for } \lambda_{1j} = \hat{\lambda}_{1\star}(t) \\ N_4 & \text{for } \lambda_{1j} = \lambda_1 \dots \\ 0 & \text{else} \end{cases} \quad (10.15)$$

Working with a two-type model yields the free energy

$$\begin{aligned} \Psi = & \frac{N_\infty k \Theta}{2} (\lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \lambda_3^2 - 3) \\ & + \frac{N_\star k \Theta}{2} ((\lambda_1 \lambda_{1\star}^{-1})^2 + (\lambda_2 \lambda_{2\star}^{-1})^2 + (\lambda_3 \lambda_{3\star}^{-1})^2 - 3), \end{aligned} \quad (10.16)$$

where N_∞ as well as $N_\star$ represent material parameters.

For the purpose of an easier understanding of (10.16), we look at the rheological model plotted in Figure 10.5. The first part of (10.16) represents the free energy (strain energy)

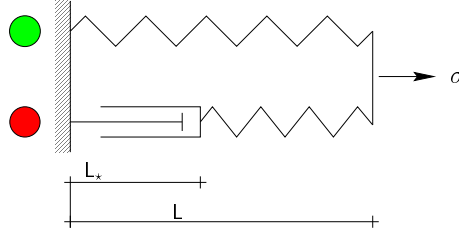


Figure 10.5: Rheological model for viscoelasticity.

in the upper spring. This term models the rate-independent part (equilibrium part) of the material behaviour. The second part denotes the strain energy of the second spring. The stress resulting from the latter contribution is usually termed over-stress. Note that the rheological model certainly allows only a one-dimensional investigation. The present theory, however, is fully three-dimensional.

10.3 Continuum mechanical modelling

The notion of a fictive *average* intermediate configuration brings us already to the continuum mechanical level. It is, however, still unclear for what kind of *continuum mechanical* model (10.16) stands for.

In order to gain a better understanding of this point, let us start again from the purely continuum mechanical point of view. Using the concept of elastic isomorphism (see in the context of elastoplasticity *Bertram* [1], *Svendsen* [23]), we arrive at the *Helmholtz* free energy

$$\Psi = \hat{\Psi}_{\infty}(\mathbf{C}, \Theta) + \hat{\Psi}_{\star}(\mathbf{F}_{\star}^{-T} \cdot \mathbf{C} \cdot \mathbf{F}_{\star}^{-1}, \Theta). \quad (10.17)$$

In the latter relation, $\mathbf{F}_{\star}$ takes the role of an internal variable. Physically, the tensor $\mathbf{F}_{\star}$ represents the *inelastic* part of the deformation. The *elastic* part can be easily defined by $\mathbf{F}_e := \mathbf{F} \cdot \mathbf{F}_{\star}^{-1}$.

In the case of isotropic material behaviour, Ψ_{∞} and $\Psi_{\star}$ represent isotropic functions of Θ , $\mathbf{C}$ and $\mathbf{C}_e := \mathbf{F}_e^T \cdot \mathbf{F}_e$, respectively. $\mathbf{F}_{\star}$ enters the formulation only via $\mathbf{C}_{\star} := \mathbf{F}_{\star}^T \cdot \mathbf{F}_{\star}$. Thus, in the isotropic case, $\mathbf{C}_{\star}$ is considered as internal variable. We end up with the functions

$$\Psi_{\infty} = \hat{\Psi}_{\infty}(\lambda_1^2, \lambda_2^2, \lambda_3^2, \Theta), \quad (10.18)$$

$$\Psi_{\star} = \hat{\Psi}_{\star}((\lambda_1 \lambda_{1\star}^{-1})^2, (\lambda_2 \lambda_{2\star}^{-1})^2, (\lambda_3 \lambda_{3\star}^{-1})^2, \Theta). \quad (10.19)$$

It is not difficult to see that (10.16) represents a special case of the continuum mechanical form in the isotropic case. To be more precise, (10.16) is based on the *Gaussian* distribution (10.1) and additionally on the assumption that the stresses are of purely entropic origin.

The last open point concerns the derivation of a physically reasonable evolution equation for the internal variable $\mathbf{C}_\star$. As usual, we have to choose a form which is thermodynamically consistent. This means, it has to fulfill the second law of thermodynamics. An appropriate evolution equation is for instance

$$\frac{1}{2} \overset{\Delta}{\mathbf{b}_e} \cdot \mathbf{b}_e^{-1} = \frac{1}{3 V_{\text{vol}}} \text{vol } \boldsymbol{\tau}_\star + \frac{1}{2 V_{\text{dev}}} \text{dev } \boldsymbol{\tau}_\star, \quad (10.20)$$

where the *Kirchhoff* stress tensor $\boldsymbol{\tau}_\star$ is derived from $(\mathbf{b}_e := \mathbf{F}_e \cdot \mathbf{F}_e^T)$

$$\boldsymbol{\tau}_\star = 2 \mathbf{b}_e \cdot \frac{\partial \Psi_\star}{\partial \mathbf{b}_e}. \quad (10.21)$$

and $\overset{\Delta}{\mathbf{b}_e}$ is given by

$$\overset{\Delta}{\mathbf{b}_e} := \mathbf{b}_e \cdot \mathbf{F}^{-T} \cdot \dot{\mathbf{C}}_i \cdot \mathbf{F}^{-1} \cdot \mathbf{b}_e. \quad (10.22)$$

V_{vol} and V_{dev} represent the deviatoric and the volumetric viscosity, respectively. In the special case of small deviations away from thermodynamic equilibrium, the evolution equation (10.20) reduces to

$$\dot{\mathbf{C}}_\star = \frac{1}{\tau} (\mathbf{C} - \mathbf{C}_\star). \quad (10.23)$$

But the main point is here that (10.16) implies on continuum mechanical level the multiplicative decomposition of the deformation gradient. The application of this split in the context of viscoelasticity leads to a new class of models which have been shown to be well suited for experimental validation as well as for numerical calculations (see *Lion* [10, 11], *Reese & Govindjee* [18, 17], *Keck & Miehe* [7]). For applications in the context of porous media, in particular polymer foams see the papers of *Ehlers & Markert* [3, 4].

10.4 Thermomechanical effects

10.4.1 Generalized approach

It has been shown in Section 10.2 that neglecting the internal energy leads to a linear dependence of (10.16) on the absolute temperature. This implies the statement that also the mechanical material parameters like the shear modulus or the bulk modulus depend only linearly on the temperature. Experimental observations, however, show that this assumption is not always realistic (*Treloar* [25], *Nowinski* [14]). *Chadwick* [2] has derived the relation

$$\Psi = \Psi_0 \frac{\Theta}{\Theta_0} + e_0 \left(1 - \frac{\Theta}{\Theta_0}\right) + \int_{\Theta_0}^{\Theta} c \left(1 - \frac{\Theta}{\Theta_0}\right) d\tilde{\Theta}, \quad (10.24)$$

where the index 0 characterizes quantities evaluated at an arbitrary reference temperature Θ_0 . $c = -\Theta \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \Theta^2}$ denotes the heat capacity which is usually assumed to be constant. Then, only a *linear* dependence of the stresses on the temperature can be considered. Thus, in order to include more general cases, the heat capacity must be deformation-dependent. Taking this into account, we arrive at

$$\Psi = \left(\frac{\Theta}{\Theta_0} + g_+\right) \Psi_0 + \left(1 - \frac{\Theta}{\Theta_0} + h_+\right) e_0 + t c_0, \quad (10.25)$$

where the short hand notations

$$\begin{aligned} \hat{g}_+(\Theta) &:= \hat{g}(\Theta) - \frac{\partial g}{\partial \Theta} \Big|_{\Theta_0} (\Theta - \Theta_0) \\ \hat{h}_+(\Theta) &:= \hat{h}(\Theta) - \frac{\partial h}{\partial \Theta} \Big|_{\Theta_0} (\Theta - \Theta_0) \\ \hat{t}(\Theta) &:= \Theta - \Theta_0 - \Theta \ln \frac{\Theta}{\Theta_0} \end{aligned} \quad (10.26)$$

have been used. Appropriate choices for the functions g_+ and h_+ are for instance

$$g_+ = a_1 \left(\left(\frac{\Theta}{\Theta_0} \right)^{a_2} - 1 \right) \quad (10.27)$$

and

$$h_+ = b_1 \left(\left(\frac{\Theta}{\Theta_0} \right)^{b_2} - 1 \right). \quad (10.28)$$

See for more details Reese & Govindjee (1998 b).

10.4.2 Thermomechanical split

In many papers about thermomechanical models, the so-called thermomechanical split according to *Lu & Pister* [12] is utilized. In the latter essay, the multiplicative split of

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_M \cdot \mathbf{F}_\Theta \quad (10.29)$$

into mechanical and thermal parts is carried out. The thermal part is defined by $\mathbf{F}_\Theta = (\det \mathbf{F}_\Theta)^{\frac{1}{3}} \mathbf{1}$. For simplicity, we restrict ourselves in the following to thermo-elastic problems. Many models are based on the assumption that Ψ depends only on the mechanical part of $\mathbf{F}$ through $\mathbf{b}_M := \mathbf{F}_M \cdot \mathbf{F}_M^T$. The entropy is then given by

$$\eta = \frac{2}{3} \alpha_T \Theta \operatorname{tr} \boldsymbol{\tau}. \quad (10.30)$$

The value of this expression is small in comparison with the contribution from the internal energy. Thus, we conclude that the thermomechanical split should be applied only in the context of metals, where the energetic contribution dominates the entropic part. For rubber, however, the opposite is the case, such that one should rather take the generalized approach.

10.5 Weak form of balance equations

In order to close the system of equations, we still need to state the balance equations. Since the balance of mass and the balance of angular momentum are locally fulfilled, we have to formulate only the balance of linear momentum and the balance of energy in weak form. The weak form of the balance of linear momentum reads

$$g_M = \int_{B_t} \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} : (\mathbf{F}^{-T} \cdot \delta \mathbf{C} \cdot \mathbf{F}^{-1}) dv - \int_{B_t} \rho \ddot{\mathbf{u}} \cdot \delta \mathbf{u} dv + g_M^{\text{ext}} = 0. \quad (10.31)$$

The quantity $\rho \ddot{\mathbf{u}}$ represents the inertia force per reference volume. Moreover, the short hand notation g_M^{ext} has been used to indicate the contribution of the external loading. The thermomechanical coupling, merely the influence of the temperature on the deformation, is visible in the temperature dependence of the *Cauchy* stress tensor $\boldsymbol{\sigma}$.

The weak form of the balance of energy is written as

$$\begin{aligned} g_T &= \int_{B_t} \mathbf{q} \cdot \text{grad } \delta \Theta dv \\ &+ \int_{B_t} (-w_{\text{int}} + w_{\text{ext}} - c \dot{\Theta}) \delta \Theta dv \\ &- \int_{\partial B_q} \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} \delta \Theta da = 0, \end{aligned} \quad (10.32)$$

where $\mathbf{q}$ represents the spatial heat flux and w_{int} and w_{ext} denote short hand notations for two energy dissipation terms which are not specified here further. The thermomechanical coupling, i. e. the influence of the temperature on the deformation, is here included in the deformation dependence of the dissipation terms and the heat capacity as well as the fact that the spatial heat flux depends on the *spatial* temperature gradient. Due to the deformation dependence of the dissipation terms we observe especially in the case of cyclic loading the typical thermomechanical heating.

10.6 Numerical aspects

The material modeling takes place exclusively on local level (*Gauss* point level). Note that for the integration of the evolution equation, we apply the exponential mapping algorithm according to *Weber & Anand* [26]. Concerning the finite element formulation, we have at every node displacement degrees-of-freedom as well as one temperature degree-of-freedom. Accordingly, on the boundary not only forces and displacements but also heat fluxes and temperatures are prescribed.

On global level we arrive at the semi-discrete coupled initial boundary-value-problem

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{R}}_M(\mathbf{V}_M, \mathbf{V}_T) + \mathbf{M} \ddot{\mathbf{V}}_M &= \hat{\mathbf{P}}_M(t) \\ \hat{\mathbf{R}}_T(\mathbf{V}_M, \mathbf{V}_T, \dot{\mathbf{V}}_M, \dot{\mathbf{V}}_T) &= \hat{\mathbf{P}}_T(t) \end{aligned} \quad (10.33)$$

where the vectors $\mathbf{R}_M$ and $\mathbf{R}_T$ contain the mechanical and thermal contribution to the vector of inner “forces”, respectively. Analogously, the mechanical and thermal degrees-of-freedom are written into the vectors $\mathbf{V}_M$ and $\mathbf{V}_T$, respectively. $\mathbf{P}_M$ and $\mathbf{P}_T$ are load vectors and $\mathbf{M}$ represents the mass matrix. The inertia terms can be neglected for the present applications such that (10.33) reduces to a coupled differential equation system of first order. After having carried out the time discretization by means of an appropriate method (here the backward *Euler* algorithm is used), we obtain a non-linear equation system for $\mathbf{V}_M$ and $\mathbf{V}_T$. We use the *Newton's* method to solve this system. Note, however, that due to the thermomechanical contributions, the tangential stiffness matrix is not symmetric.

10.7 Example

Rubber-like materials are often used for bearings. The stiffness of such constructions is commonly increased by steel layers. For both parts of the free energy, Ψ_∞ and $\Psi_\star$, we take the *Ogden* form (see e. g. *Ogden* [15]). The material parameters are given in *Reese* [16].

The first example is the 2D bearing plotted in Figure 10.6. The displacements are fully constrained at the bottom of the structure. At the top, we control the horizontal displacement (sinusoidal loading). The top plate is allowed to move in vertical direction.

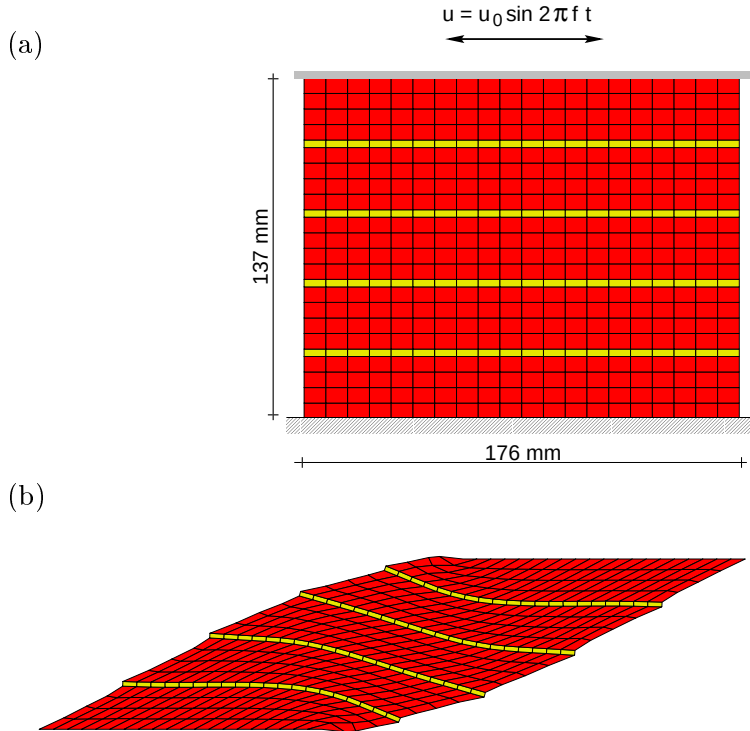


Figure 10.6: (a) Geometry and boundary conditions for 2D bearing, (b) deformed system.

We study the evolution of the temperature for two different loading frequencies. In the first calculation, we choose f such that 1 s for one cycle is needed. Thus, after approximately 20

cycles, we are in the range of the relaxation time ($\tau = 20.8\text{ s}$). This means, that in the 1., 3. and 7. cycle, the inelastic deformation in the rubber parts has not been fully developed

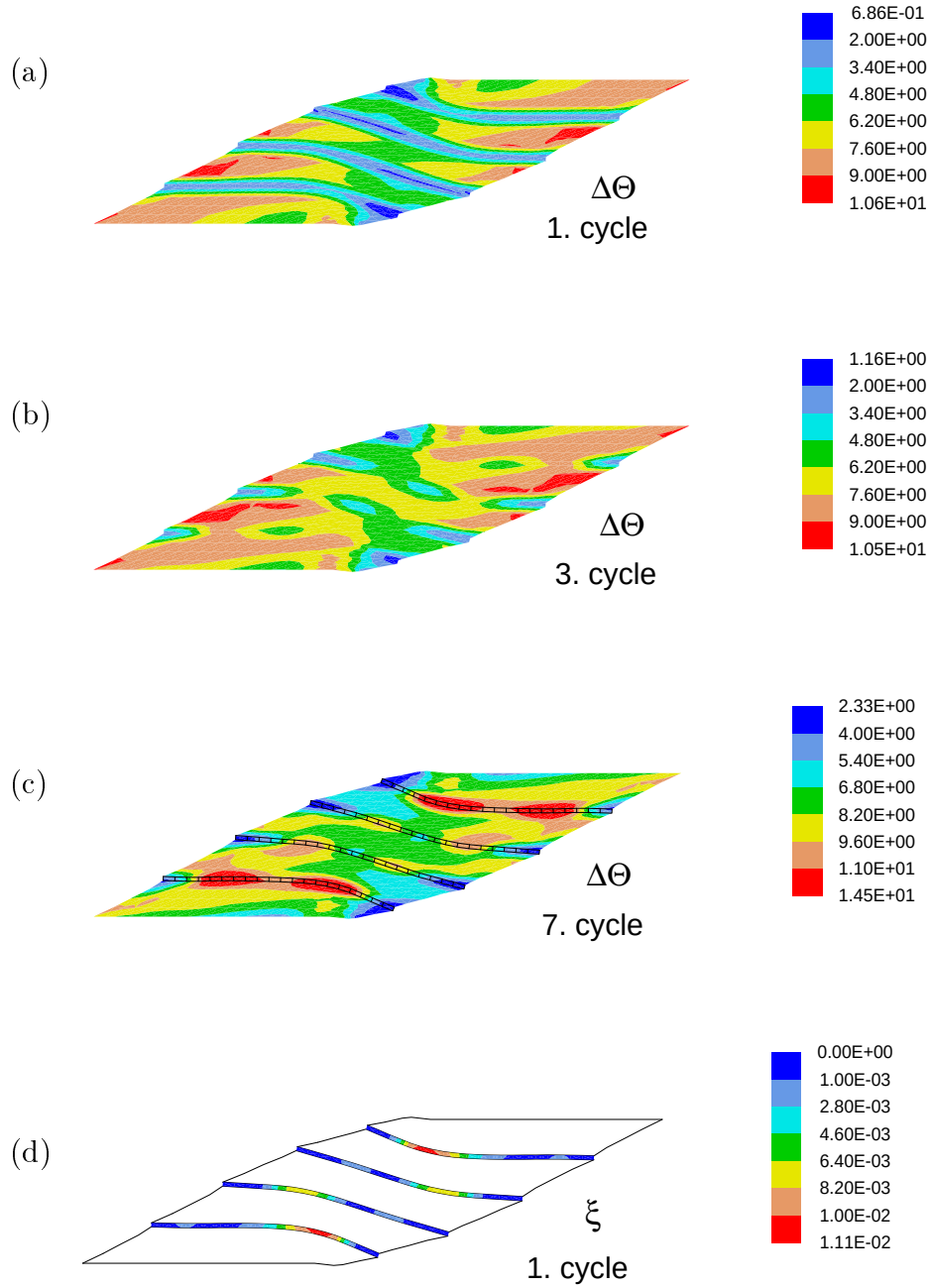


Figure 10.7: (a-c) Temperature evolution for $f = 1\text{ Hz}$, (d) accumulated plastic strain ξ in the steel layers.

(Figure 10.7). The temperature remains relatively low. The steel layers, however, show already noticeable plastic deformation. Therefore, the temperature increase concentrates on these parts of the construction.

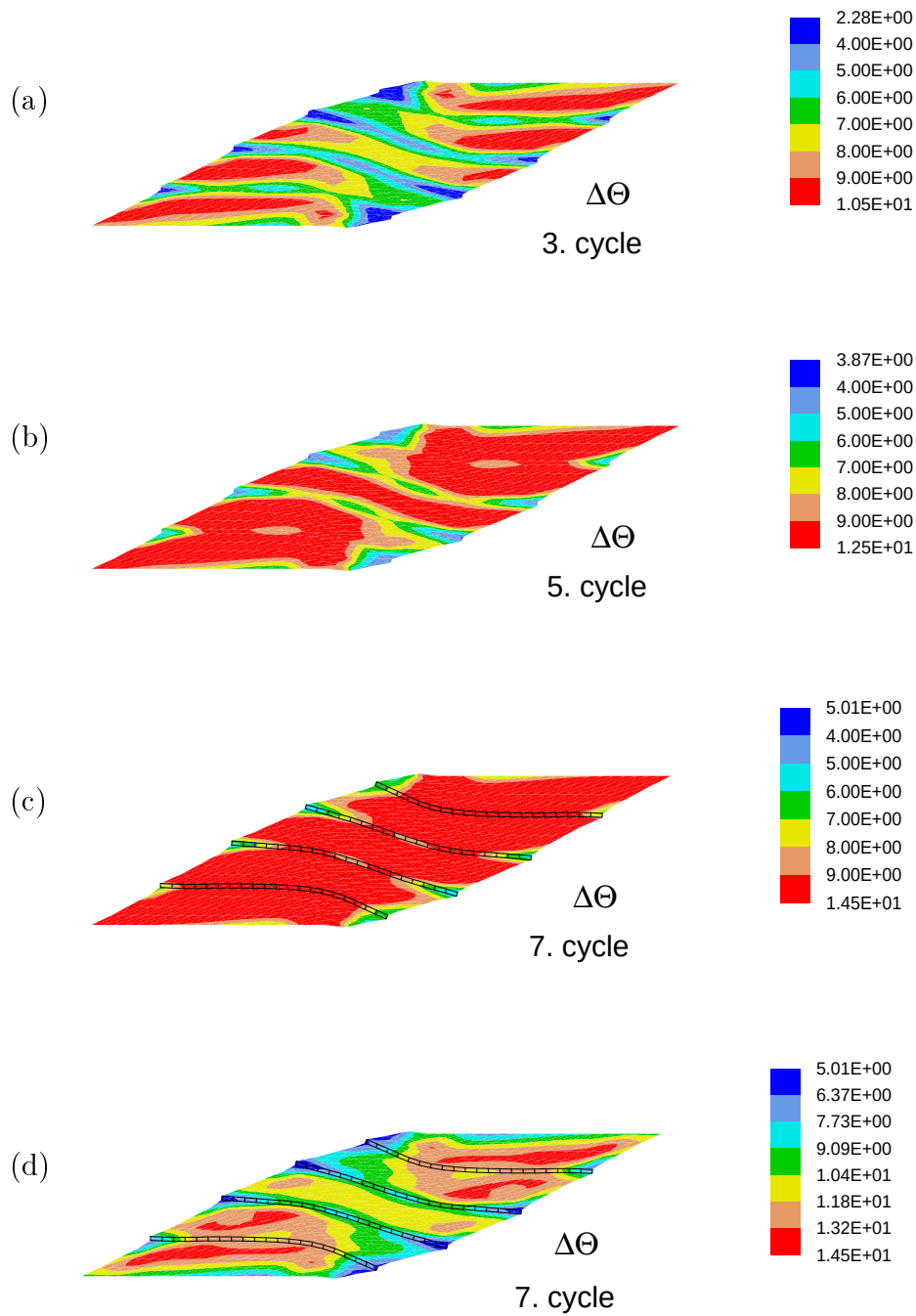


Figure 10.8: (a-d) Temperature evolution for $f = 0.2$ Hz.

If we choose a smaller frequency ($f = 0.2$ Hz), the range of the relaxation time is already reached after about four cycles. Then, the inelastic deformation in the rubber becomes relevant, and, consequently, the temperature in the rubber parts increases noticeably (Figure 10.8). In contrast to the first calculation, the heating in the rubber becomes dominant. The steel shows the same behaviour as before, which is certainly due to the fact that the latter material behaviour is rate-independent and thus independent of the loading rate.

10.8 Conclusions

In the present paper, we have shown that the transient network theory develops into a continuum mechanical theory of viscoelasticity based on the multiplicative decomposition of the deformation gradient. Thus, this kind of split, which had to be considered before as a purely constitutive assumption, can be motivated on micromechanical level. The resulting model accounts for large deformation as well as large deformation rates. It therefore represents a true *finite* model for viscoelastic material behaviour. Important is also, that thermomechanical coupling phenomena can be incorporated in a thermodynamically consistent way. Experimental validation of such a model has been carried out by *Lion* [10, 11]. Important issues concerning the numerical implementation are the choice of the time step and the finite element formulation. For the latter we use a recently developed stabilization technique which avoids locking completely.

Bibliography

- [1] A. Bertram. Description of finite inelastic deformations. In A. Benallal, R. Billardon, and D. Marquis, editors, *MECAMAT '92, Multiaxial Plasticity*, pages 821–835. 1993.
- [2] P. Chadwick. Thermomechanics of rubberlike materials. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London, Series A*, 276:371–403, 1974.
- [3] W. Ehlers and B. Markert. Modelling of viscoelastic foams at large deformations. In A. S. Khan, H. Zhang, and Y. Yuan, editors, *Plastic and viscoplastic response of materials and metal forming*, pages 128–130. Neat Press, Maryland, 2000. Proceedings of PLASTICITY 2000.
- [4] W. Ehlers and B. Markert. *Numerical calculation of polymeric foams under quasi-static and dynamic load*. Bericht aus dem Institut für Mechanik (Bauwesen), Nr. 00-II-10, Universität Stuttgart, 2000.
- [5] M. S. Green and A. V. Tobolsky. A new approach to the theory of relaxing polymeric media. *J. Chem. Phys.*, 14:80–92, 1946.
- [6] G. Holzapfel. On large strain viscoelasticity: continuum formulation and finite element applications to elastomeric structures. *Int. J. Numer. Methods Engng.*, 39:3903–3926, 1996.

- [7] J. Keck and C. Miehe. An eulerian over-stress type viscoplastic constitutive model in spectral form. formulation and numerical implementation. In D. R. J. Owen, E. Onate, and E. Hinton, editors, *Computational Plasticity, Fundamentals and Applications*. Barcelona, Spain, 1997.
- [8] W. Kuhn. Über die Gestalt fadenförmiger Moleküle in Lösungen. *Kolloidzeitschrift*, 68:2–15, 1934.
- [9] W. Kuhn and F. Grün. Beziehungen zwischen elastischen Konstanten und Dehnungsdoppelbrechung hochelastischer Stoffe. *Kolloidzeitschrift*, 101:248–271, 1942.
- [10] A. Lion. On the large deformation behaviour of reinforced rubber at different temperatures. *J. Mech. Phys. Solids*, 45:1805–1834, 1997.
- [11] A. Lion. A physically based method to represent the thermomechanical behaviour of elastomers. *Acta Mechanica*, 123:1–25, 1997.
- [12] S. C. Lu and K. S. Pister. Decomposition of deformation and representation of the free energy function for isotropic thermoelastic solids. *Int. J. Solids Structures*, 11:927–934, 1975.
- [13] J. Lubliner. A model of rubber viscoelasticity. *Mechanics Research Communications*, 12:93–99, 1985.
- [14] J. L. Nowinski. *Theory of Thermoelasticity with Applications*. Sijthoff and Noordhoff, Alphen aan den Rijn, 1978.
- [15] R. W. Ogden. *Nonlinear elastic deformations*. Ellis Horwood, Chichester, 1984.
- [16] S. Reese. *Thermomechanische Modellierung gummiartiger Polymerstrukturen*. Habilitationsschrift, Universität Hannover, 2001.
- [17] S. Reese and S. Govindjee. Theoretical and numerical aspects in the thermo-viscoelastic material behaviour of rubber-like polymers. *Mechanics of Time-dependent Materials*, 1:357–396, 1998.
- [18] S. Reese and S. Govindjee. A theory of finite viscoelasticity and numerical aspects. *Int. J. Solids Structures*, 35:3455–3482, 1998.
- [19] S. Reese, M. Küssner, and B. D. Reddy. A new stabilization technique for finite elements in non-linear elasticity. *Int. J. Numer. Methods Engng.*, 44:1617–1652, 1999.
- [20] S. Reese, P. Wriggers, and B. D. Reddy. A new locking-free brick element technique for large deformations in elasticity. *Computers & Structures*, 75:291–304, 2000.
- [21] F. Sidoroff. Un modèle viscoélastique non linéaire avec configuration intermédiaire. *Journal de Mécanique*, 13:679–713, 1974.
- [22] J. C. Simo. On a fully three-dimensional finite-strain viscoelastic damage model: formulation, numerical analysis and implementation. *Comp. Methods Appl. Mech. Eng.*, 60:153–173, 1987.

-
- [23] B. Svendsen. A thermodynamic formulation of finite-deformation elastoplasticity with hardening based on the concept of material isomorphism. *Int. J. Plasticity*, 14:473–488, 1998.
 - [24] L. R. G. Treloar. II: The elasticity of a network of long-chain-molecules. *Transactions of the Faraday Society*, 39:241–246, 1943.
 - [25] L. R. G. Treloar. *The Physics of Rubber Elasticity*. Clarendon Press, Oxford, 1975.
 - [26] G. Weber and L. Anand. Finite deformation constitutive equations and a time integration procedure for isotropic hyperelastic-viscoplastic solids. *Comp. Methods Appl. Mech. Eng.*, 79:173–202, 1990.

11

Mixed continuum-atomistic analysis of single crystals

R. Sunyk und P. Steinmann
Lehrstuhl für Technische Mechanik
Universität Kaiserslautern
D-67653 Kaiserslautern

Abstract. *Continuum-atomistic models combine atomistic features like pair potentials and lattice-structures with classical field approaches from continuum mechanics. Thus they may be considered as a mixed scale method, whereby the atomistic scale is typically in the order of nm, whereas the continuum scale is in the order of mm. In this contribution we investigate the influence of the atomistic features on the continuum response, especially with respect to the failure characteristics in terms of the localization tensor.*

11.1 Introduction

During recent years many publications related to computational material science highlight the same trend: the investigation of the macroscopic behaviour of solids using semi-empirical energy potential functions stemming directly from lattice statics or dynamics, see e.g. *Shenoy et al.* [11] or *Nakane et al.* [7]. Thereby, the continuum quantities such as the stress tensor or the tangent operator can be represented in terms of the derivatives of these potentials, see e.g. by *Tadmor* [14]. In this paper we study the material response during homogeneous deformations under consideration of the crystal structure by the mixed continuum-atomistic approach referred to above. Thereby, we investigate the appearance of strain localization during an incremental loading history which can be expressed in terms of the loss of ellipticity of the appropriate quasi-static field equations. In sections two and three we summarize the main features of classical lattice statics with a short remark on some well-known pair-potentials together with a review of the continuum mechanics framework. In section four we describe the mixed continuum-atomistic model employed in this study. Section five contains the derivation of the localization condition and completes the theoretical considerations. The computational examples are given in sections six. Section seven represents results of the computation of macroscopic failure surface based on the derived localization criterion. Conclusions in section eight close this paper.

11.2 Atomistic constitutive modelling

To set the stage we give a short review of the direct atomistic approach, whereby we restrict ourselves to classical lattice statics. For an overview on different approaches towards nanomechanics we refer to *Ortiz & Phillips* [8]. We consider a crystallite body consisting of N interacting atoms. The kinematics are then typically represented by the distance vectors between two atoms labelled i and j , i.e. $\mathbf{R}_{ij}$ and $\mathbf{r}_{ij}$ in the material and in the spatial configuration, respectively.

$$\mathbf{R}_{ij} = \mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j \quad \mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j \quad \text{with } r_{ij} = |\mathbf{r}_{ij}| \quad (11.1)$$

whereby $\varphi_i(\mathbf{R}_i)$ denotes a non-linear discrete map, see fig. 11.1 There are many well-known

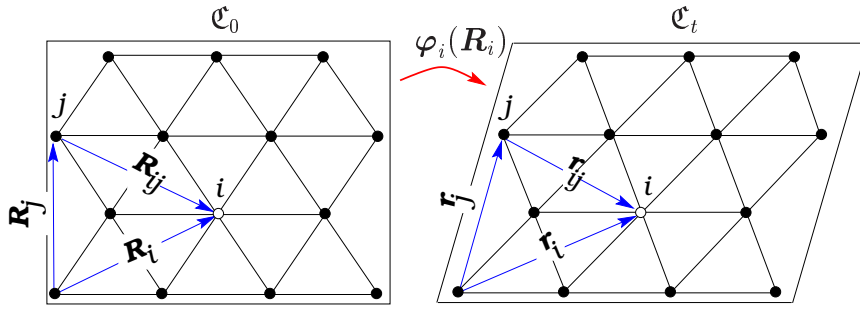


Figure 11.1: Reference $\mathfrak{C}_0$ and current $\mathfrak{C}_t$ crystal lattice

empirical energy functions describing the inter-atom interaction. In their simplest form these empirical potentials contain only pair-wise interactions Φ . Well-known examples for this type are e.g. Morse, Buckingham and Lennard-Jones potentials, which are functions of only relative distances $r = |\mathbf{r}|$ between two atoms. For instance, the celebrated Lennard-Jones potential has the format

$$\Phi(r) = 4\varepsilon \left[\left[\frac{\sigma}{r} \right]^{12} - \left[\frac{\sigma}{r} \right]^6 \right] \quad (11.2)$$

with ε and σ denoting parameters to be fitted. Thus, the energy contribution of the atom i can be represented as a sum over pair-wise interactions of this atom with all other atoms in the body

$$E_i = \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \Phi(r_{ij}) \equiv \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \Phi_{ij} \quad (11.3)$$

Clearly, more sophisticated models are conceivable and indeed necessary. For example many important properties of real solids are determined by their electronic structure. Therefore, it is very significant to include the dependence of the interaction energy on quantum mechanical effects. This problem has been treated e.g. in the work of *Daw & Baskes* [1], who developed the Embedded Atom Method (EAM). Here each atom in a solid is viewed as an impurity embedded in the host consisting of all other atoms. Thereby the energy E_i of the i -th atom consists of two different terms: 1) the embedding energy $\bar{E}_i(\rho_i)$ of atom i , see *Puska et al.* [9], i.e. the energy of the atom in a uniform electron gas

relative to the atom separated from the electron gas, and 2) the contributions $\Phi(r_{ij})$ of the inter-ion interactions. It can be represented as follows

$$E_i = \bar{E}_i(\rho_i) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \Phi(r_{ij}) \quad \text{with} \quad \rho_i = \sum_{j \neq i} \bar{\rho}_j(r_{ij}) \quad (11.4)$$

The embedding energy depends on the host electron density ρ_i at the position $\mathbf{r}_i$ before the atom i has been embedded and is an implicit function of the relativ distances r_{ij} , consequently E_i is a function of these distances, too. Nevertheless, for the purpose of transparency we restrict ourselves in this work to only pair-wise inter-atomic interactions, thus all subsequent formulae are given under this limitation. In particular, without loss of generality, we will use the simple Lennard-Jones potential for the sake of demonstration. Finally, the total energy E^{tot} can be represented as a sum over all atomic contributions

$$E^{tot} = \sum_i E_i \quad (11.5)$$

Then the derivative of the total energy E^{tot} with respect to the position vector $\mathbf{r}_i$ of the i -th atom yields the force $\mathbf{f}_i$ acting on this particular atom due to the interactions with all other atoms

$$\mathbf{f}_i = -E_{,\mathbf{r}_i}^{tot} = \sum_{j \neq i} \mathbf{f}_{ij} \quad \text{with} \quad \mathbf{f}_{ij} = -\frac{\Phi'_{ij}}{r_{ij}} \mathbf{r}_{ij}, \quad (11.6)$$

whereby the prime $(\bullet)'$ denotes the derivative of $(\bullet)$ with respect to r_{ij} . This relation represents the underlying constitutive law of classical lattice statics based on only pair-potential interactions. Please note that here the summation convention is not adopted to quantities related to atomistics. The principle of the minimum of the total energy representing the global equilibrium results locally in the equilibrium at each atom

$$E^{tot} + \Pi^{ext} \longrightarrow \min \quad \Longleftrightarrow \quad \sum_{j \neq i} \mathbf{f}_{ij} + \mathbf{f}_i^{ext} \doteq \mathbf{0} \quad (11.7)$$

with external force $\mathbf{f}_i^{ext}$ acting on the atom i . Within an iterative solution strategy, the second derivative of the total energy E^{tot} with respect to $\mathbf{r}_j$ is needed. This results in the atomic level stiffness $\mathbf{k}_{ij}$, whereby we obtain the particular result

$$\mathbf{k}_{ij} = -E_{,\mathbf{r}_i \mathbf{r}_j}^{tot} = \frac{\Phi'_{ij}}{r_{ij}} \mathbf{I} + \left[\frac{\Phi''_{ij}}{r_{ij}^2} - \frac{\Phi'_{ij}}{r_{ij}^3} \right] \mathbf{r}_{ij} \otimes \mathbf{r}_{ij} \quad (11.8)$$

It is remarkable that for the special case of pair-wise interactions the diagonal elements $\mathbf{k}_{ii}$ of the total stiffness matrix can be represented as a sum over corresponding off-diagonal elements $\mathbf{k}_{ij}$

$$\mathbf{k}_{ii} = -E_{,\mathbf{r}_i \mathbf{r}_i}^{tot} = -\sum_{j \neq i} \mathbf{k}_{ij}. \quad (11.9)$$

Thereby the bandwidth of the atomic level stiffness is related to the cut-off radius r_c that will be discussed in detail later.

11.3 Continuum constitutive modelling

In this section, we give a short description of the continuum mechanics framework. In this approach, the body is defined by a collection of material points. The non-linear deformation map $\varphi(\mathbf{X})$ relates the material placement $\mathbf{X}$ to the spatial placement $\mathbf{x} = \varphi(\mathbf{X})$, see upper part of the fig. 11.2. Thereby, the deformation gradient $\mathbf{F}$ defines a linear tangent map and is given by the two-point tensor

$$\mathbf{F} = \frac{\partial \varphi(\mathbf{X})}{\partial \mathbf{X}} \quad (11.10)$$

Then for hyperelastic material response, the strain energy W per unit volume in the material configuration is a function of the deformation gradient $\mathbf{F}$ and the position vector $\mathbf{X}$ in the material configuration, i.e.

$$W = W(\mathbf{F}; \mathbf{X}) \quad (11.11)$$

Note that the last dependence corresponds to the subscript i of the i -th atom's energy within the atomistic approach. The strain energy is usually defined phenomenologically based on an appropriate set of invariants of the right Cauchy-Green tensor $\mathbf{C} = \mathbf{F}^t \cdot \mathbf{F}$. Based on this classical set-up, the constitutive law results from the first derivative of the strain energy with respect to the deformation gradient and renders the first Piola-Kirchhoff stress tensor $\mathbf{II}^t$, which is again a two-point tensor

$$\mathbf{II}^t = \frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}} \quad (11.12)$$

We recall that the first Piola-Kirchhoff stress tensor enters the appropriate balance of momentum, which reads in the quasi-static case

$$\text{Div} \mathbf{II}^t = \mathbf{0}. \quad (11.13)$$

Finally, linearization of the stress tensor yields the fourth-order tangent operator $\mathbb{L}$, which relates the increment in $\mathbf{II}^t$ to the increment in $\mathbf{F}$

$$\mathbb{L} = \frac{\partial^2 W}{\partial \mathbf{F} \otimes \partial \mathbf{F}} \quad \text{with} \quad d\mathbf{II}^t = \mathbb{L} : d\mathbf{F} \quad (11.14)$$

11.4 Continuum-atomistic constitutive modelling

Next we pursue a description of a mixed continuum-atomistic approach which is e.g. employed among other, more sophisticated concepts by *Tadmor et al.* [14, 15, 11]. The key idea is to replace the phenomenological macroscopic energy W by appropriate atomistic potentials. This step allows in a natural way to consider a real crystal structure with the appropriate anisotropic energy density in the continuum mechanics setting. In the sequel, we will denote this model as continuum-atomistic model. The central idea is to consider homogeneous deformations of an infinite representative crystallite, whereby the kinematic relation is given by the so called Cauchy-Born rule, see *Milstein* [6], *Ericksen* [3], *Tadmor* [14], *Dluzewski & Traczykowski* [2]. Here it is assumed that the lattice vectors $\mathbf{r}_{ij}$ of the

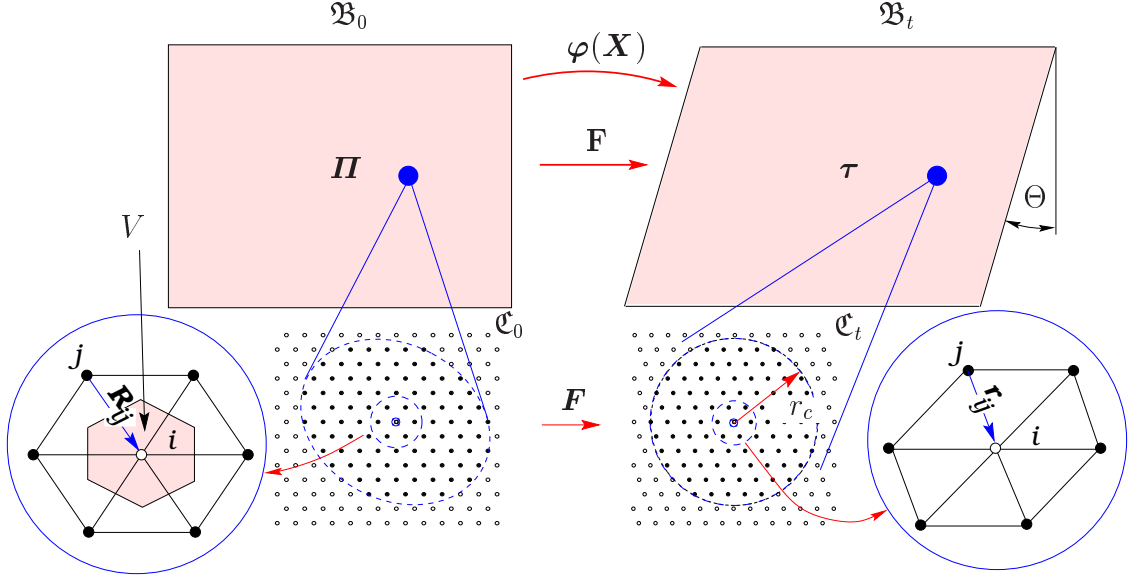


Figure 11.2: The Cauchy-Born rule for the case of homogeneous deformation

spatial configuration result from the corresponding $\mathbf{R}_{ij}$ in the material configuration by the application of the local deformation gradient, see fig. 11.2,

$$\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{F} \cdot \mathbf{R}_{ij} \quad (11.15)$$

Then, the energy contribution E_i of the atom i depends only on relative distances r_{ij} between this atom and all other atoms and can formally be represented as a function of the deformation gradient and the lattice vectors $\mathbf{R}_{ij}$ in the material configuration

$$E_i = \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \Phi(|\mathbf{r}_{ij}|) = \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \Phi(|\mathbf{F} \cdot \mathbf{R}_{ij}|) = \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \Phi_{ij}(\mathbf{F}) \quad (11.16)$$

Here the constant distance vectors $\mathbf{R}_{ij}$ are given and depend only on the underlying crystal structure. Thus, each point of the continuum is modelled by an infinite crystal, which deforms homogeneously. In practise the cut-off radius r_c limits the extension of the part of the crystal that has to be considered.

The next important step is to find a correspondence between an atomistic energy function E_i and a specific strain energy W . By the assumption that the individual atomic contributions to the total energy can be defined and that the energy of each atom i is uniformly distributed over the volume V of its Voronoi polyhedron, see *Tadmor* [14], both energies can be related as follows

$$W = W(\mathbf{F}; \mathbf{X}) = \frac{E_i}{V} = \frac{1}{2V} \sum_{j \neq i} \Phi_{ij}(\mathbf{F}) \quad (11.17)$$

As soon as this correspondence is established the remaining procedure is the same as for the continuum formulation. The constitutive law given by eq. (11.12) results in

$$\mathbf{\Pi}^t = \frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}} = \frac{1}{2V} \sum_{j \neq i} \mathbf{f}_{ji} \otimes \mathbf{R}_{ij} \quad (11.18)$$

with the consequent symmetry for the spatial Kirchhoff stress

$$\boldsymbol{\tau}^t = \boldsymbol{\Pi}^t \cdot \mathbf{F}^t = \frac{1}{2V} \sum_{j \neq i} \mathbf{f}_{ji} \otimes \mathbf{r}_{ij} \quad (11.19)$$

Likewise the fourth order tangent operator given by eq. (11.14) takes the format

$$\mathbb{L} = \frac{\partial^2 W}{\partial \mathbf{F} \otimes \partial \mathbf{F}} = \frac{1}{2V} \sum_{j \neq i} \mathbf{k}_{ij} \overline{\otimes} [\mathbf{R}_{ij} \otimes \mathbf{R}_{ij}] \quad (11.20)$$

Here $\mathbf{f}_{ji} = -\mathbf{f}_{ij}$ and $\mathbf{k}_{ij}$ are defined as in (11.6) and (11.8), respectively ¹. It is remarkable that the quantities which are defined for the underlying atomistic model show up in a simple format in the relations for $\boldsymbol{\Pi}^t$ and $\mathbb{L}$.

11.5 Localization analysis

Localization is essentially a transition from a spatially homogeneous to a spatially concentrated inhomogeneous deformation state. The appearance of narrow zones of accumulated inelastic deformations usually accompanies this process, whereby other parts of the body can simultaneously exhibit unloading. Concerning the hierarchy of failure we note that for diffuse failure both the velocity and velocity gradient remain continuous fields

$$[[\dot{\boldsymbol{\varphi}}]] = \mathbf{0} \quad \text{and} \quad [[\dot{\mathbf{F}}]] = \mathbf{0} \quad (11.21)$$

In contrast to this, for localized failure we may consider discontinuities of certain field values. Thereby, the appearance of a discontinuity of the velocity gradient (weak discontinuity, see e.g. *Rice* [10])

$$[[\dot{\boldsymbol{\varphi}}]] = [[\dot{\mathbf{F}}]] \neq \mathbf{0} \quad (11.22)$$

corresponds to the loss of ellipticity of the appropriate quasi-static field equations accor-

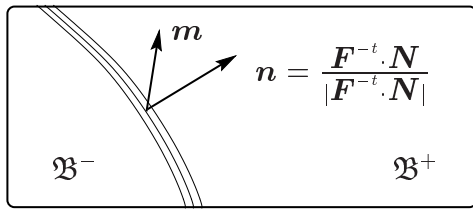


Figure 11.3: Zone of localized inelastic deformation in the spatial configuration; $\mathbf{m}$ and $\mathbf{n}$ denote the polarization vector and the normal to the localization surface, respectively

ding to the classification of partial differential equations. Here a jump of a field quantity $[[\bullet]] = (\bullet)^+ - (\bullet)^-$ is defined as a difference between the magnitudes of this value on the

¹The non-standard dyadic product $\overline{\otimes}$ emerging in eq. (11.20) is introduced for second order tensors $\mathbf{A}$, $\mathbf{B}$ and $\mathbf{C}$ as

$$[\mathbf{A} \overline{\otimes} \mathbf{B}] : \mathbf{C} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{C} \cdot \mathbf{B}^t \quad \text{and} \quad \mathbf{C} : [\mathbf{A} \overline{\otimes} \mathbf{B}] = \mathbf{A}^t \cdot \mathbf{C} \cdot \mathbf{B}$$

positive and negative side of the failure surface. The concept of strong discontinuity states a more general kinematic approach assuming the discontinuity of both the velocity and the velocity gradient fields

$$[[\dot{\boldsymbol{\varphi}}]] \neq \mathbf{0} \quad \text{and} \quad [[\dot{\boldsymbol{F}}]] \neq \mathbf{0}, \quad (11.23)$$

see e.g. *Steinmann et al.* [13]. The strong discontinuity case can be reduced to the weak discontinuity by introducing a regularization method, see *Steinmann* [12]. Therefore, we consider here only the case of the weak discontinuity.

A presence of a discontinuity in the velocity gradient tensor is then expressed kinematically according to Maxwell's consistency condition (*Maxwell* [5], *Truesdell et al.* [16]) as a rank one tensor weighted with a jump magnitude ξ

$$[[\dot{\boldsymbol{F}}]] = \xi \, \boldsymbol{m} \otimes \boldsymbol{N} \quad (11.24)$$

Here $\boldsymbol{m}$ denotes the jump or rather polarization vector in the spatial configuration and $\boldsymbol{N}$ represents the normal to the failure surface convected back to the material configuration, see fig. 11.3. The equilibrium condition across the failure surface requires continuity of the nominal traction vector $\boldsymbol{t}_0$. By application of the Cauchy theorem this condition results in

$$[[\dot{\boldsymbol{t}}_0]] = \dot{\boldsymbol{t}}_0^+ - \dot{\boldsymbol{t}}_0^- = \mathbf{0} \quad \implies \quad [[\dot{\boldsymbol{t}}_0]] = [[\boldsymbol{I}^t]] \cdot \boldsymbol{N} = [[\mathbb{L} : \dot{\boldsymbol{F}}]] \cdot \boldsymbol{N} = \mathbf{0} \quad (11.25)$$

with $\boldsymbol{I}^t$ and $\mathbb{L}$ as given in eq. (11.12) and (11.14), respectively. Under the assumption of a continuous tangent operator (so called linear comparison solid, see e.g. *Hill* [4], resulting in the so called continuous bifurcation) we obtain from eq. (11.24) and (11.25) the following localization condition in terms of an eigen-value problem for the localization tensor $\boldsymbol{q}$

$$[[\mathbb{L} : [\boldsymbol{m} \otimes \boldsymbol{N}]]] \cdot \boldsymbol{N} = \boldsymbol{q}(\boldsymbol{N}) \cdot \boldsymbol{m} = \mathbf{0} \quad \text{with} \quad q_{pr} = L_{pQrS} N_Q N_S \quad (11.26)$$

Thus, the appearance of non-zero solutions of eq. (11.26) indicates the possibility of strain localization. The homogeneous equation system renders non-trivial solutions if the determinant vanishes. Therefore the localization condition can be reduced to

$$\det \boldsymbol{q}(\boldsymbol{N}) = 0 \quad \iff \quad \text{loss of ellipticity, possible discontinuities in } [[\dot{\boldsymbol{F}}]] \quad (11.27)$$

The fact that $\det \boldsymbol{q}(\boldsymbol{N})$ becomes zero or negative thus corresponds to the possible occurrence of localization in the form of continuous bifurcation. Therefore the sign-change of $\det \boldsymbol{q}(\boldsymbol{N})$ must be checked during an incremental load history for all spatial directions $\boldsymbol{N}$. The corresponding stress is the critical stress and $\boldsymbol{N}^{crit}$ determines the failure direction corresponding to $\boldsymbol{N}^{crit} = \arg \min \{ \det \boldsymbol{q} \}$. Finally, the localization tensor $\boldsymbol{q}$ takes an especially simple and elegant form within the framework of the continuum-atomistic approach. By substitution of the tangent operator $\mathbb{L}$ in expression (11.20) into the definition of the localization tensor (11.26) we obtain

$$\boldsymbol{q} = \frac{1}{2V} \sum_{j \neq i} \boldsymbol{q}_{ij} \quad \text{with} \quad \boldsymbol{q}_{ij} = [\boldsymbol{R}_{ij} \cdot \boldsymbol{N}]^2 \boldsymbol{k}_{ij} \quad (11.28)$$

Thus, the localization tensor in this case consists of the weighted sum over atomistic level stiffnesses. This statement is supported by the fact that for the dynamic case on the one hand the localization tensor describes wave propagation in continuous media, whereas the atomistic level stiffness does the same for discrete media.

11.6 Examples

To illustrate the developments discussed above we apply two different homogeneous de-

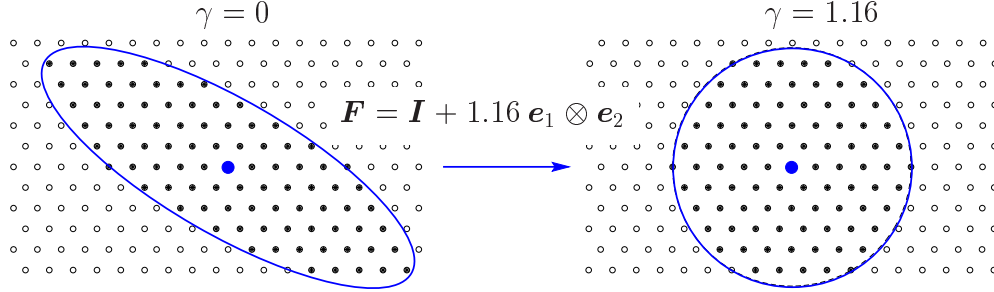


Figure 11.4: The undeformed crystallite (on the left side) with the ellipse containing atoms from the cut-off sphere of the deformed crystallite (on the right side); for both, the undeformed and deformed crystallite atoms have identical arrangements corresponding to the first and second minimum of the strain energy density W , see fig. 11.5

formations to the (111)–plane of *fcc*–type crystals and study the behaviour of the localization tensor as a function of crystal directions and applied deformation. In our computations, we use the sublimation energy and lattice constant of aluminium, $E_s = 3.58 \text{ eV} = 0.574 \text{ nN nm}$ and $r_0 = 0.286 \text{ nm}$ respectively to fit the parameters ε and σ of the Lennard-Jones potential. For a cut-off radius $r_c = 5r_0$ we obtain $\varepsilon = 0.17 \text{ nN nm}$ and $\sigma = 0.257 \text{ nm}$. The area of the Voronoi cell results from simple geometrical considerations in $V = 0.142 \text{ nm}^2$. In the plane we set $\mathbf{N} = \cos \phi \mathbf{e}_1 + \sin \phi \mathbf{e}_2$.

11.6.1 Simple shear

The simple shear deformation is characterized by the deformation gradient $\mathbf{F} = \mathbf{I} + \gamma [\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_2]$ with the unit tensor $\mathbf{I}$ and the shear number $\gamma = \tan \Theta$, see fig. 11.2, whereby $\mathbf{e}_i$ denote the cartesian unit vectors. During the deformation atomic planes (or atomic rows for the planar case) slip relatively to each other and the atomistic arrangement of the undeformed configuration repeats itself periodically, see fig. 11.4. Therefore we expect a periodical behaviour of the strain energy density and stress tensor components. Indeed, this periodicity can be obtained by computing the actual neighbours contained in the cut-off sphere after every load increment, see fig. 11.5. It is expected that the determinant of the localization tensor $\det \mathbf{q}$ has a periodical behaviour too. Two $\det \mathbf{q}$ vs. ϕ curves corresponding approximately to two minima of the strain energy density are compared with a third curve for an arbitrary value of the shear number γ in fig. 11.7. Whereas the first two curves are similar, the third curve shows an absolutely different behaviour. It is remarkable that all the curves have a local extremum for ϕ corresponding to the normals to the slip directions in the (111)–plane. For instance, $\mathbf{N} \hat{=} [\cos 150^\circ \ \sin 150^\circ]$ is the normal to the slip direction $[\bar{1}01]$, see fig. 11.8. The obtained results depend on the orientation of the representative crystallite. For example, crystallites rotated by 60° relatively to the original crystallite yield necessarily the identical results due to symmetry.

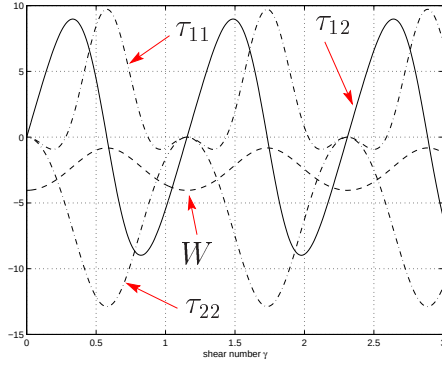


Figure 11.5: The periodicity of the strain energy density W and the components of the Kirchhoff stress tensor $\tau^t = \Pi^t \cdot \mathbf{F}^t$

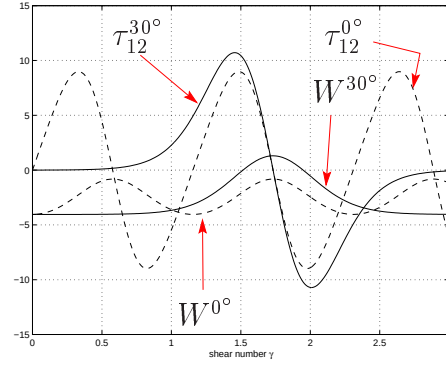


Figure 11.6: The strain energy density and shear stress computed for the originally orientated crystallite (W^{0° and $\tau_{12}^{0^\circ}$ respectively) and for the crystallite rotated by 30° (W^{30° and $\tau_{12}^{30^\circ}$ respectively)

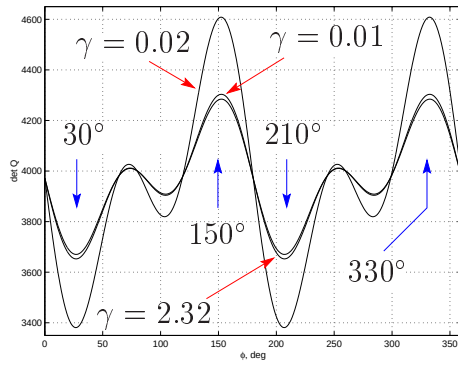


Figure 11.7: The comparison of two $\det \mathbf{q}$ vs. ϕ curves corresponding to the first ($\gamma = 0.01$) and third ($\gamma = 2.32$) minimum of the strain energy density with a curve for $\gamma = 0.02$

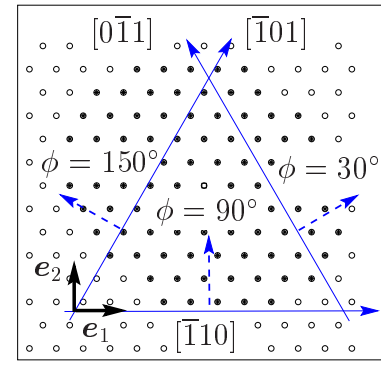


Figure 11.8: Slip system of *fcc*-type crystal in the (111)-plane

Fig. 11.6 compares strain energy densities and the shear stresses of the Kirchhoff stress tensor for unrotated crystallites and crystallites rotated by 30° .

11.6.2 Uniform extension without lateral contraction

We consider the deformation gradient $\mathbf{F} = \mathbf{I} + [\lambda - 1] \mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_2$ for uniform extension without lateral contraction with the unit tensor $\mathbf{I}$ and the stretch λ . This deformation is not as spectacular as the simple shear deformation since it yields no periodicity in the appropriate quantities. The strain energy and the components of the Cauchy stress tensor $\sigma = \tau / \det \mathbf{F}$ are displayed simultaneously with the values of $\min \{\det \mathbf{q}\}$ in fig. 11.10.

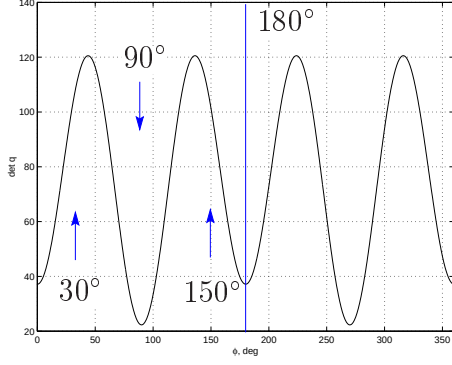


Figure 11.9: $\det \mathbf{q}$ vs. ϕ for $\lambda - 1 = 0.132$ close to the sign-change of $\det \{\mathbf{q}\}$; the position of $\min \{\det \mathbf{q}\}$ corresponds to $\phi = 90^\circ$; the four local maxima correspond to other two identical directions in the (111)-plane, namely $[\bar{1}01]$ and $[0\bar{1}1]$, see fig. 11.8

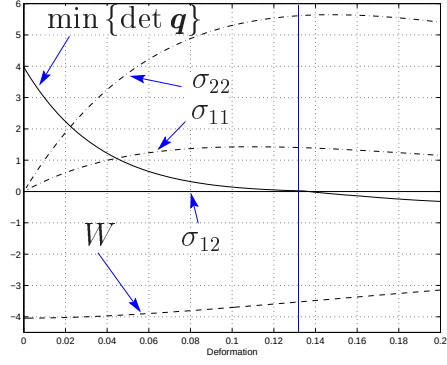


Figure 11.10: The strain energy density and the components of the Cauchy stress tensor σ are compared to $\min \{\det \mathbf{q}\}$

The fact that a sign-change of $\min \{\det \mathbf{q}\}$ corresponds approximately to the maximum tension stress σ_{22} is in a good agreement with theoretical expectations. Fig. 11.9 shows a $\det \mathbf{q}$ vs. ϕ curve for the value of the stretch λ close to the point of the sign-change of $\det \mathbf{q}$.

11.7 Computation of failure surface

We make use of the derived localization criterion (11.28) with the continuum-atomistic approach in order to obtain macroscopic failure surfaces for single crystals. The following flow chart can be proposed for the computation of a single point of the failure surface in the principal stress space.

1. Define Atomistic Arrangement (Structure, Rotation)
2. Define Polar Angle ψ in Principal Stress Space
3. Set $\tau^{pr} = n \Delta \rho \begin{bmatrix} \cos \psi & 0 \\ 0 & \sin \psi \end{bmatrix}$
4. Compute Deformation Gradient $\mathbf{F}$:

$$\frac{1}{2V} \sum_{j \neq i} \mathbf{f}_{ji}(\mathbf{F}) \otimes \mathbf{r}_{ij} - \tau^{pr} \longrightarrow \min$$

5. Compute Determinant of Localization Tensor

$$\det \mathbf{q}(\mathbf{N}) = \det \frac{1}{2V} \sum_{j \neq i} [\mathbf{R}_{ij} \cdot \mathbf{N}]^2 \mathbf{k}_{ij}(\mathbf{F})$$

6. Check Localization Condition

```

IF       $\det \mathbf{q}(\mathbf{N}) < 0$    $\Rightarrow$    $\boldsymbol{\tau}^{pr} = \boldsymbol{\tau}^{crit}$   AND   $\mathbf{N} = \mathbf{N}^{crit}$ 
ELSE
 $\Rightarrow$    $n = n + 1$  ; GOTO 3
ENDIF

```

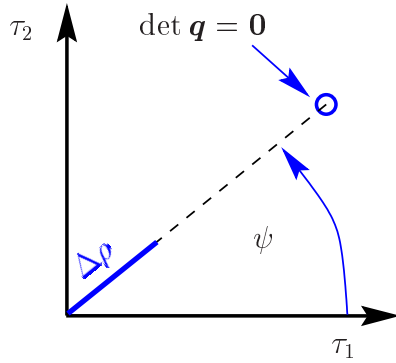


Figure 11.11: An illustration of the flow chart for the computation of a failure surface. $\Delta\rho$ is an increment in the length of the vector in the principal stress state with direction given by ψ .

Here $\boldsymbol{\tau}^{pr}$ and $\Delta\rho$ denote the prescribed Kirchhoff's stress tensor and an increment in the length of the vector in the principal stress space with direction given by the polar angle ψ , respectively. $n = 1, 2, \dots$ is the step number. Fig. 11.11 illustrates the flow chart given above. In this way a discrete number of points of a failure surface can be obtained for any desired ratio of principal stresses τ_1 and τ_2 . The results of this computational procedure are shown in the fig. 11.12. The failure surface is open in the third quadrant i.e. in the region of compression. This is associated with the absence of a compression limit within the used atomic potential. Due to the special form of the employed pair potential the strain energy can increase during compression without limit. The failure surface is pronounced antisymmetric because of the anisotropy 1) due to the underlying crystal structure and 2) due to the asymmetry of the used pair potential mentioned above. For instance, the difference between the critical stresses τ_1 during uniaxial tension and compression ($\tau_2 = 0$) could probably be related to the activation of several modes of instability during compression whereas for tension only one mode is available. This idea can be checked by comparison of the normal vector $\mathbf{N}$ and the polarization vector $\mathbf{m}$ corresponding to critical compression and tensile stresses. Indeed, the difference of the directions of the jumps in $[\![\dot{\mathbf{F}}]\!]$ or the normals to the localization surfaces for both critical stress states reflects an activation of different modes of instability during the deformation process.

The orientation of the underlying crystal structure with respect to the principal stress axes influences the results of the failure surface computation. Fig. 11.13 shows two such surfaces computed in the first quadrant of the principal plane stress space for two crystallites rotated by 30° relatively to each other. Due to the cubic symmetry of the employed atomic arrangement the rotation by 30° corresponds simultaneously to a rotation by 90° . For this reason both failure surfaces are symmetric with respect to the diagonal of the first quadrant.

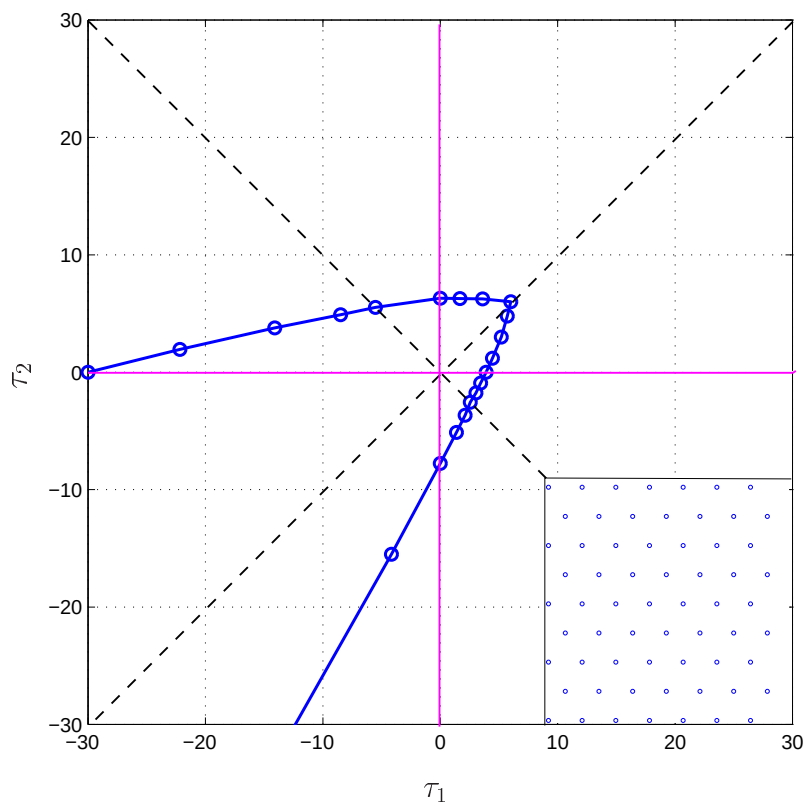


Figure 11.12: Computed failure surface. In the right lower corner the underlying crystal structure is depicted

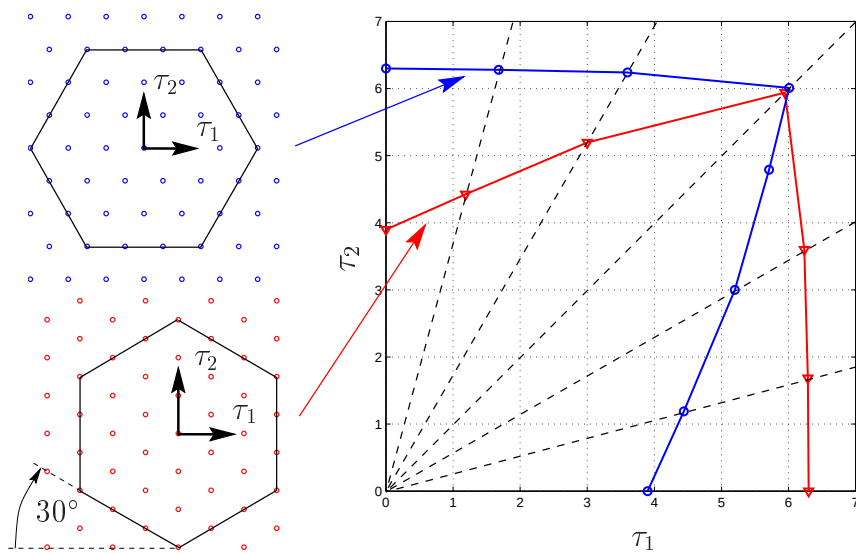


Figure 11.13: The influence of the crystallite orientation

11.8 Summary and conclusion

We have reviewed a formulation of the mixed continuum-atomistic approach based on the substitution of a phenomenological strain energy density by an atomistic energy function stemming from direct atomistic considerations. We have derived a localization condition in form of the vanishing determinant of the localization tensor and obtained the explicit format of this tensor for the continuum-atomistic approach. We have emphasized that within this mixed approach macroscopic field values such as the stress tensor, the fourth order tangent operator and the localization tensor are determined by discrete atomic level forces and stiffnesses. Moreover we have applied several plane homogeneous deformations such as simple shear and uniform extension to the (111)–plane of *fcc*–type crystals and investigated the corresponding localization criterion. The results we obtained are in a good agreement with theoretical expectations. For instance, the appearance of localization effects depends heavily on the orientation and thus on the anisotropy of the representative crystallite. In particular, failure directions coincide with expected slip directions of *fcc*–type lattice. Finally, the derived localization condition determined by the properties at the atomistic scale is applied to compute failure condition for single crystals at the continuum scale. The condition can simultaneously be viewed as a condition of first dislocation nucleation. Clearly, the obtained results shall not be seen as yet completed framework, but rather as an academical example which shows the direction and potential of our further research.

Bibliography

- [1] M. S. Daw and M. I. Baskes. Semiempirical, quantum mechanical calculation of hydrogen embrittlement in metals. *Phys. Rev. Lett.*, 50:1285, 1983.
- [2] P. Dłuzewski and P. Traczykowski. Interatomic potentials and finite element modelling of stress distribution in epitaxial layers. *Proceedings on the 5th European Mechanics of Materials Conference Delft*, 2001.
- [3] J. L. Ericksen. *Phase Transformations and Material Instabilities in Solids*. New York, Academic Press, 1984.
- [4] R. Hill. A general theory of uniqueness and stability in elastic-plastic solids. *J. Mech. Phys. Solids*, 6, 1958.
- [5] C. Maxwell. *Treatise of Electricity and Magnetism*. Oxford, Clarendon, 1873.
- [6] F. Milstein. *Mechanics of solids*. Oxford, Pergamon Press, 1982.
- [7] M. Nakane, K. Shizava, and K. Takahashi. Microscopic discussions of macroscopic balance equations for solids based on atomistic configurations. *Archive Appl. Mech.*, 70:533–549, 2000.
- [8] M. Ortiz and R. Phillips. Nanomechanics of defects in solids. *Adv. Appl. Mech.*, 36:1–71, 1999.
- [9] M. J. Puska, R. M. Nieminen, and M. Manninen. Atoms embedded in an electron gas: Immersion energies. *Phys. Rev.*, B 24:3037, 1981.

- [10] J. R. Rice. The localization of plastic deformation. *heoretical and Applied Mechanics*, North Holland, 1976.
- [11] V. B. Shenoy, R. Miller, E. B. Tadmor, D. Rodney, R. Phillips, and M. Ortiz. An adaptive finite element approach to atomic-scale mechanics - the quasicontinuum method. *J. Mech. Phys. Sol.*, 47:611–642, 1999.
- [12] P. Steinmann. *Modellierung und Numerik duktiler kristalliner Werkstoffe*. Habil. Thesis, University of Hannover, 1997.
- [13] P. Steinmann, R. Larsson, and K. Runesson. On the localization properties of multiplicative hyperelasto-plastic continua with strong discontinuities. *Int. J. Solid Structures*, 34:969–990, 1997.
- [14] E. B. Tadmor. *The quasicontinuum method*. PhD thesis, Brown University, 1996.
- [15] E. B. Tadmor, M. Ortiz, and R. Phillips. Quasicontinuum analysis of defects in solids. *Philosophical Magazine*, A 73:1529–1563, 1996.
- [16] C. Truesdell and R. A. Toupin. The classical field theories. In S. Flügge, editor, *Encyclopedia of physics*, volume III/1, pages 491–498. Springer-Verlag, Berlin, 1960.

12

Analogiebetrachtungen für mikropolare Kontinua mit Anwendung auf den Biaxialversuch

W. Volk¹, S. Diebels², M. Lätzel³ und S. Luding³

¹W. Volk, Voitstr. 4, D-80637 München

²Institut für Mechanik (Bauwesen), Universität Stuttgart, D-70569 Stuttgart

³Institut für Computeranwendungen 1, Universität Stuttgart, D-70569 Stuttgart

Zusammenfassung. *Die makroskopische Beschreibung von lokal diskontinuierlichen Systemen (z. B. Granulaten) erfordert die Erweiterung der klassischen Kontinuumstheorie, um makroskopische Phänomene zu erfassen, die durch die Mikrostruktur hervorgerufen werden. Im vorliegenden Artikel werden zusätzliche rotatorische Freiheitsgrade im Sinne einer Cosserat-Theorie eingeführt und die zugehörigen mikropolaren Materialparameter durch einfache Analogiebetrachtungen mit mikroskopischen Größen in Verbindung gebracht. Schließlich werden mit Hilfe der diskreten Elementmethode die Überlegungen anhand des Biaxialversuchs verifiziert.*

12.1 Einleitung

Die Berücksichtigung von Mikrostrukturen in der makroskopischen Beschreibung von verschiedensten Materialien, z. B. von Granulaten, Kristallen, Schäumen oder biologischen Geweben ist derzeit ein sehr wichtiges und populäres Forschungsgebiet der Materialtheorie.

Es gibt jedoch sehr unterschiedliche Möglichkeiten die heterogene Mikrostruktur für homogenisierte makroskopische Stoffgesetze in Betracht zu ziehen. Ein direkter Zugang ist der sogenannte „Mikro-Makro-Übergang“, der beispielsweise für kristalline Strukturen erfolgreich angewendet wurde, vgl. Schröder [20] und die darin zitierte Literatur. Diese Vorgehensweise bietet sich in erster Linie für periodisch wiederkehrende Mikrostrukturen an, die im Detail bekannt sind.

Bei stochastischen Mikrostrukturen (z. B. Granulate oder Schäume) ist es mit großen Schwierigkeiten verbunden, ein mikroskopisches Randwertproblem zu formulieren und zu lösen. Aus diesem Grund erscheint es vielversprechend, für diese Klassen von Materialien, den Übergang von der Mikro- zur Makroebene nicht explizit, sondern virtuell durch-

zuföhren und hierauf aufbauend erweiterte kontinuumsmechanische Modelle mit zusätzlichen Freiheitsgraden und Materialparametern zu erhalten. Exemplarisch sei an dieser Stelle die Arbeit von *Ehlers* [10] für gesättigte bzw. teilgesättigte poröse Materialien erwähnt.

Der nächste Schritt ist die Existenz mikroskopischer Rotationen, die eine Einführung zusätzlicher rotatorischer Freiheitsgrade auf der Makroebene motiviert, welche aber auch einfach durch die diskontinuierliche Mikrostruktur motiviert werden können. Diese Idee geht auf eine Arbeit der Gebrüder *Cosserat* [5] zu Beginn des 20. Jahrhunderts zurück. Hierauf aufbauend ist es erforderlich, die Kinematik sowie die Bilanzaxiome zu erweitern, vgl. z. B. *Besdo* [1], *Eringen & Kafadar* [14], *de Borst* [3, 4], *Steinmann* [21, 22], *Diebels & Ehlers* [9], *Ehlers & Volk* [12], *Volk* [25] und *Diebels* [7, 8].

In der vorliegenden Arbeit werden die vorgestellten Ansätze zur Berücksichtigung der Mikrostruktur in einer makroskopischen Beschreibung miteinander verknüpft. Anhand einfachster Ersatzmodelle werden durch Analogieschlüsse die makroskopischen Materialparameter der *Cosserat*-Theorie mit mikroskopischen Einflußgrößen in Verbindung gebracht und diese Zusammenhänge mit Hilfe des Biaxialversuchs verifiziert. Zudem können die Materialparameter durch die beschriebene Vorgehensweise neu interpretiert werden.

Der Biaxialversuch wird unter Anwendung des sogenannten diskreten Elementmodells (DEM) (*Cundell & Strack* [6] und *Lätzel et al.* [17, 18]) und Definition der kontinuumsmechanischen Größen durch Mittelung über die beschreibenden mikroskopischen Größen beschrieben. Eine detaillierte Beschreibung der Simulationsmethode und des hier verwendeten Biaxialversuchs kann dem Artikel von S. Luding und H. J. Herrmann im vorliegenden Buch entnommen werden.

12.2 Kinematik

Im folgenden Kapitel werden die kinematischen Grundlagen eines leeren, mikropolaren Festkörperskeletts in aller Kürze vorgestellt. Dabei erfolgt eine Beschränkung auf den geometrisch linearen Bereich. Die Darstellung folgt eng der Schreibweise und Argumentationskette von *Diebels* [7, 8], *Diebels & Ehlers* [9], *Ehlers & Volk* [12] und *Volk* [25].

Ein mikropolarer Festkörper hat im Sinne einer *Lagrangeschen* Beschreibung den Verschiebungsvektor $\mathbf{u}$ und den mikropolaren Rotationsvektor $\bar{\varphi}$ als kinematische Freiheitsgrade. Die Einführung eines zusätzlichen Rotationsfeldes ist insbesondere bei Granulaten mit Hilfe eines mittleren Spins der Partikel sehr leicht zu motivieren. Der Verschiebungsvektor $\mathbf{u}$ ist die Differenz zwischen dem Ortsvektor $\mathbf{x}$ der aktuellen Konfiguration und dem Ortsvektor $\mathbf{X}$ der Referenzkonfiguration:

$$\mathbf{u} = \mathbf{x} - \mathbf{X}. \quad (12.1)$$

Der lineare Verschiebungsgradient $\mathbf{H}$ wird durch die Ableitung von $\mathbf{u}$ nach $\mathbf{X}$ bzw. $\mathbf{x}$ gebildet:

$$\mathbf{H} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{X}} \approx \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}}. \quad (12.2)$$

Der mikropolare Rotationsvektor setzt sich aus der Kontinuumsrotation φ und der freien,

unabhängigen Rotation φ^* zusammen:

$$\bar{\varphi} = \varphi + \varphi^*, \quad \varphi = \frac{1}{2} \overset{3}{\mathbf{E}} (\mathbf{H} - \mathbf{H}^T). \quad (12.3)$$

Darin sind φ der axiale Vektor des schiefssymmetrischen Anteils von $\mathbf{H}$ und $\overset{3}{\mathbf{E}}$ der Ricci-Permutationstensor (voll antisymmetrischer Fundamentaltensor dritter Stufe). Der mikropolare Rotationsvektor $\bar{\varphi}$ kann eindeutig durch den Rotationswinkel $\bar{\varphi}$ und die Rotationsachse $\bar{\mathbf{e}}$ beschrieben werden:

$$\bar{\varphi} = \bar{\varphi} \bar{\mathbf{e}}. \quad (12.4)$$

Eine anschauliche Interpretation für die physikalische Bedeutung der drei verschiedenen Rotationen kann z. B. mit Hilfe eines *Timoshenko*-Balkens gegeben werden (vgl. *Günther* [15]), Bild 12.1. In Bild 12.1 sind Ξ und ξ die sogenannten Direktoren der Referenz- bzw.

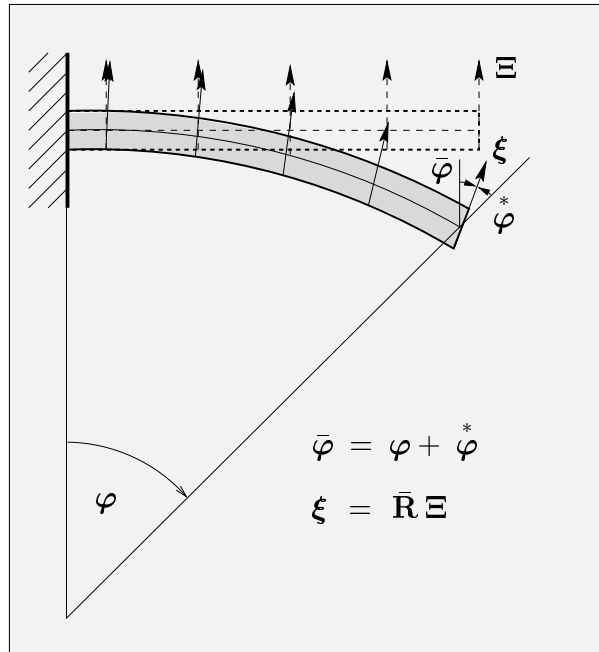


Abbildung 12.1: Rotationsvektoren bei einem *Timoshenko*-Balken.

der aktuellen Konfiguration und $\bar{\mathbf{R}}$ ist ein eigentlich-orthogonaler Tensor, der die beiden Direktoren ineinander abbildet, vgl. *Besdo* [1] oder *Diebels & Ehlers* [9]. Die Verdrehung der Mittelachse des Balkens ist abhängig von der Verschiebung des Balkens und entspricht somit der Kontinuumsrotation φ . Die Querschnitte, in deren Ebene die Direktoren Ξ und ξ liegen, können sich noch zusätzlich gegen die Mittelachse mit dem freien Rotationsvektor φ^* verdrehen, so daß ξ nicht mehr rechtwinklig zur Balkenmittelachse ist. Im Rahmen der geometrisch linearen Theorie können die Rotationsvektoren zur Gesamtrotation $\bar{\varphi}$ der Querschnitte summiert werden.

Das lineare mikropolare Verzerrungsmaß $\bar{\mathbf{e}}$ ist durch

$$\bar{\mathbf{e}} = \mathbf{H} + \overset{3}{\mathbf{E}} \bar{\varphi} \quad (12.5)$$

definiert. Die symmetrischen und schiefsymmetrischen Anteile von $\bar{\varepsilon}$ ergeben mit Hilfe von (12.3) und (12.5)

$$\begin{aligned}\bar{\varepsilon}_{\text{sym}} &= \frac{1}{2}(\mathbf{H} + \mathbf{H}^T) = \boldsymbol{\varepsilon}, \\ \bar{\varepsilon}_{\text{skw}} &= \frac{1}{2}(\mathbf{H} - \mathbf{H}^T) + \mathbf{E} \bar{\varphi} = \mathbf{E}(\bar{\varphi} - \varphi) = \mathbf{E} \varphi^*.\end{aligned}\quad (12.6)$$

Hieraus ist ersichtlich, daß der symmetrische Anteil von $\bar{\varepsilon}$ gleich dem linearen Verzerrungsmaß der nicht-polaren Theorie ist, während sich der schiefsymmetrische Anteil direkt aus dem freien Rotationsvektor φ^* ergibt. Somit ist bei verschwindendem freien Rotationsfeld φ^* die Abwärtskompatibilität zur nicht-polaren Theorie gewährleistet.

In der mikropolaren Beschreibung wird mit dem Krümmungstensor $\bar{\kappa}$ ein weiteres Deformationsmaß eingeführt:

$$\bar{\kappa} = \text{grad } \bar{\varphi}. \quad (12.7)$$

Mit Hilfe von (12.2) bis (12.7) und einigen algebraischen Umformungen kann die mikropolare Kompatibilitätsbedingung

$$\bar{\kappa} = \frac{1}{2} \mathbf{E} (\text{grad } \bar{\varepsilon} + \text{grad}^T \bar{\varepsilon} - \text{grad}^T \bar{\varepsilon})^2 \quad (12.8)$$

hergeleitet werden, vgl. *Ehlers & Volk* [12] oder *Volk* [25]. Aus dieser Gleichung ist ersichtlich, daß der Krümmungstensor $\bar{\kappa}$ eine reine Funktion des Verzerrungsgradienten $\text{grad } \bar{\varepsilon}$ ist. Auf eine elastisch-plastische Kinematik wird an dieser Stelle verzichtet und auf die Literatur verwiesen (z. B. *Diebels* [8], *Ehlers & Volk* [12], *Steinmann* [22] oder *Volk* [25]).

12.3 Bilanzrelationen

Das folgende Darstellung der Bilanzrelationen entstammt der Arbeit von *Volk* [25]. Das Aufstellen einer allgemeinen Bilanzrelation ist ein eleganter Weg, um die Aussagen der axiomatisch eingeführten Bilanzen für Masse, Impuls, Drall, Energie und Entropie zu finden (siehe z. B. *Diebels & Ehlers* [9] *Ehlers* [11] oder *Haupt* [16]):

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} \int_B \psi dv &= \int_S \boldsymbol{\phi} \cdot \mathbf{n} da + \int_B v dv + \int_B \hat{\psi} dv, \\ \frac{d}{dt} \int_B \boldsymbol{\psi} dv &= \int_S (\boldsymbol{\Phi} \mathbf{n}) da + \int_B \mathbf{v} dv + \int_B \hat{\boldsymbol{\psi}} dv.\end{aligned}\quad (12.9)$$

In (12.9) ist ψ bzw. $\boldsymbol{\psi}$ die skalare oder vektorwertige Dichte der zu bilanzierenden mechanischen Größe, $\boldsymbol{\phi} \cdot \mathbf{n}$ bzw. $\boldsymbol{\Phi} \mathbf{n}$ ist der Ausfluß der mechanischen Größe infolge äußerer Nahwirkung mit dem nach außen gerichteten Oberflächennormaleneinheitsvektor $\mathbf{n}$, v bzw. $\mathbf{v}$ sind die Zufuhrterme infolge äußerer Fernwirkung und $\hat{\psi}$ bzw. $\hat{\boldsymbol{\psi}}$ sind die Produktionsterme der mechanischen Größe. Mit dem *Gaußschen* Integralsatz können die Oberflächenintegrale

$\int_S(\cdot)da$ ebenfalls in Volumenintegrale $\int_B(\cdot)dv$ überführt werden. Unter der Voraussetzung stetiger Integranden können durch Differentiation die lokalen Bilanzrelationen gewonnen werden:

$$\begin{aligned}\dot{\psi} + \psi \operatorname{div} \dot{\mathbf{x}} &= \operatorname{div} \boldsymbol{\phi} + v + \hat{\psi}, \\ \dot{\boldsymbol{\psi}} + \boldsymbol{\psi} \operatorname{div} \dot{\mathbf{x}} &= \operatorname{div} \boldsymbol{\Phi} + \boldsymbol{v} + \hat{\boldsymbol{\psi}}.\end{aligned}\tag{12.10}$$

In Tabelle 12.1 sind die physikalischen Größen, ihr Fluß, ihre Zufuhr und ihre Produktion aufgeführt, so daß aus (12.10) die jeweiligen Bilanzen entstehen. In Tabelle 12.1 ist

	$\psi, \boldsymbol{\psi}$	$\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\Phi}$	$v, \boldsymbol{v}$	$\hat{\psi}, \hat{\boldsymbol{\psi}}$
Masse	ρ	$\mathbf{0}$	0	0
Impuls	$\rho \dot{\mathbf{x}}$	$\mathbf{T}$	$\rho \mathbf{b}$	$\mathbf{0}$
Drall (klassisch)	$\mathbf{x} \times (\rho \dot{\mathbf{x}})$	$\mathbf{x} \times \mathbf{T}$	$\mathbf{x} \times \rho \mathbf{b}$	$\mathbf{0}$
Drall (mikropolar)	$\mathbf{x} \times (\rho \dot{\mathbf{x}}) + \rho \bar{\boldsymbol{\Theta}} \bar{\boldsymbol{\omega}}$	$\mathbf{x} \times \mathbf{T} + \mathbf{M}$	$\mathbf{x} \times \rho \mathbf{b} + \rho \mathbf{c}$	$\mathbf{0}$

Table 12.1: Bilanzrelationen.

$\mathbf{T}$ der *Cauchy*sche Spannungstensor und $\mathbf{b}$ die spezifische Volumenkraft. Unter dem Tensor der Mikroträgheit $\bar{\boldsymbol{\Theta}}$ versteht man den über ein REV gemittelten Trägheitstensor der Mikropartikel, $\mathbf{M}$ ist der Momentenspannungstensor und $\mathbf{c}$ ist die spezifische Volumensmomentendichte. Auf die Bilanzrelationen für Energie und Entropie wird an dieser Stelle im Rahmen einer rein mechanischen Theorie verzichtet. Der interessierte Leser sei auf die Arbeiten von *Diebels* [7, 8] und *Eringen & Kafadar* [14] verwiesen.

Aus Tabelle 12.1 ergibt sich die Massenbilanz zu

$$\dot{\rho} + \rho \operatorname{div} \dot{\mathbf{x}} = 0.\tag{12.11}$$

Mit Einsetzen der Massenbilanz (12.11) folgt für die Impulsbilanz die bekannte Form:

$$\rho \ddot{\mathbf{x}} = \operatorname{div} \mathbf{T} + \rho \mathbf{b}.\tag{12.12}$$

Mit den „niedrigeren“ Bilanzen (12.11) und (12.12) folgt in der klassischen Kontinuumsmechanik aus der Drallbilanz lediglich die Symmetrie des Spannungstensors:

$$\mathbf{0} = \mathbf{I} \times \mathbf{T}.\tag{12.13}$$

Das äußere Vektorprodukt zweier Tensoren ist dabei folgendermaßen definiert (vgl. *de Boer* [2]):

$$\mathbf{A} \times \mathbf{B} = -\mathbf{B} \times \mathbf{A} = \overset{3}{\mathbf{E}} (\mathbf{A} \mathbf{B}^T).\tag{12.14}$$

In der mikropolaren Theorie erhält man die erweiterte Form der Drallbilanz

$$\rho(\bar{\Theta} \bar{\omega})^\cdot = \mathbf{I} \times \mathbf{T} + \operatorname{div} \mathbf{M} + \rho \mathbf{c}. \quad (12.15)$$

Aus (12.15) folgt, daß der Spannungstensor im Rahmen einer mikropolaren Theorie in der Regel unsymmetrisch ist.

Neben den in Tabelle 12.1 genannten Bilanzen ist für mikropolare Materialien die sogenannte Erhaltung der Mikroträgheit von Interesse (*Eringen* [13], *Eringen & Kafadar* [14]). Die Annahme starrer Mikropartikel führt zur Aussage, daß die mikropolare *Green-Naghdi*-Ableitung (Zeitableitung bezüglich eines mit der Mikrobewegung mitrotierten Basissystems) des Tensors der Mikroträgheit $\bar{\Theta}$ verschwinden muß:

$$\overset{\diamond}{\bar{\Theta}} = \dot{\bar{\Theta}} - \bar{\Omega} \bar{\Theta} - \bar{\Theta} \bar{\Omega}^T = \mathbf{0}. \quad (12.16)$$

Darin ist $\bar{\Omega}$ der mikropolare Kreiselstensor

$$\bar{\Omega} = \dot{\bar{\mathbf{R}}} \bar{\mathbf{R}}^T. \quad (12.17)$$

Aus (12.16) ergibt sich

$$\dot{\bar{\Theta}} = 2(\bar{\Omega} \bar{\Theta})_{\text{sym}}. \quad (12.18)$$

Diese Gleichung liefert in Verbindung mit der Massenbilanz (12.11) eine Beziehung, die die Form einer Erhaltungsgleichung für die Mikroträgheit besitzt:

$$(\rho \bar{\Theta})^\cdot + \rho \bar{\Theta} \operatorname{div} \dot{\mathbf{x}} = 2\rho(\bar{\Omega} \bar{\Theta})_{\text{sym}}. \quad (12.19)$$

Die Beziehung (12.19) ist jedoch keine Bilanzgleichung im üblichen Sinn, da sie auf kinematischen Überlegungen beruht und nicht axiomatisch eingeführt wird. Da (12.19) jedoch prinzipiell die Form der lokalen Bilanz (12.10) besitzt, spricht man auch gelegentlich von der Bilanz der Mikroträgheit (z. B. *Eringen* [13], *Eringen & Kafadar* [14]).

Mit (12.19) kann die mikropolare Drallbilanz (12.15) schließlich in die folgende Form gebracht werden:

$$\rho \bar{\Theta} \dot{\bar{\omega}} + 2\rho(\bar{\Omega} \bar{\Theta})_{\text{sym}} \bar{\omega} = \operatorname{div} \mathbf{M} + \mathbf{I} \times \mathbf{T} + \rho \mathbf{c}. \quad (12.20)$$

12.4 Konstitutivannahmen

Mit den Beziehungen aus den beiden vorhergehenden Kapiteln sind die beschreibenden Gleichungen des mikropolaren Kontinuums bis auf fehlende Konstitutivgleichungen bestimmt.

Zur Behandlung elastischen Materialverhaltens wird angenommen, daß der mikropolare Spannungstensor $\mathbf{T}$ lediglich von den Verzerrungen $\bar{\epsilon}$ gemäß (12.5) abhängt. Aus materialtheoretischer Sicht wäre es prinzipiell möglich, daß $\mathbf{T}$ auch eine Funktion der Krümmung

ist, doch soll dies konstitutiv ausgeschlossen werden. Neben der geometrischen Linearität wird im folgenden ebenfalls eine materielle Linearität für das Elastizitätsgesetz angenommen. Somit ergibt sich für isotropes Materialverhalten ein modifiziertes *Hookesches* Gesetz mit drei Elastizitätskonstanten (vgl. *de Borst* [4], *Ehlers & Volk* [12] und *Steinmann & Willam* [24]):

$$\begin{aligned}\mathbf{T} &= \overset{4}{\mathbf{C}} \bar{\mathbf{e}} = 2\mu \bar{\mathbf{e}}_{\text{sym}} + \lambda (\bar{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{I}) \mathbf{I} + 2\mu_c \bar{\mathbf{e}}_{\text{skw}}, \\ \mathbf{T}_{\text{sym}} &= \overset{4}{\mathbf{C}} \bar{\mathbf{e}}_{\text{sym}} = 2\mu \bar{\mathbf{e}}_{\text{sym}} + \lambda (\bar{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{I}) \mathbf{I}, \\ \mathbf{T}_{\text{skw}} &= \overset{4}{\mathbf{C}} \bar{\mathbf{e}}_{\text{skw}} = 2\mu_c \bar{\mathbf{e}}_{\text{skw}}.\end{aligned}\tag{12.21}$$

Darin ist $\overset{4}{\mathbf{C}}$ der 4-stufige Elastizitätstensor

$$\begin{aligned}\overset{4}{\mathbf{C}} &= 2\mu \overset{4}{\mathbf{I}}_{\text{sym}} + \lambda \mathbf{I} \otimes \mathbf{I} + 2\mu_c \overset{4}{\mathbf{I}}_{\text{skw}}, \\ \overset{4}{\mathbf{I}}_{\text{sym}} &= \frac{1}{2}[(\mathbf{I} \otimes \mathbf{I})^{\overset{23}{T}} + (\mathbf{I} \otimes \mathbf{I})^{\overset{13}{T}}], \\ \overset{4}{\mathbf{I}}_{\text{skw}} &= \frac{1}{2}[(\mathbf{I} \otimes \mathbf{I})^{\overset{23}{T}} - (\mathbf{I} \otimes \mathbf{I})^{\overset{13}{T}}].\end{aligned}\tag{12.22}$$

Die Materialparameter μ und λ entsprechen den *Laméschen* Konstanten der nicht-polaren Elastizitätstheorie, so daß der symmetrische Anteil des mikropolaren Spannungstensors mit dem nicht-polaren Spannungstensor äquivalent ist. Der zusätzliche Materialparameter μ_c ist der Proportionalitätsfaktor zwischen den schiefsymmetrischen Anteilen von $\mathbf{T}$ und $\bar{\mathbf{e}}$. Die 4-stufigen Fundamentaltensoren $\overset{4}{\mathbf{I}}_{\text{sym}}$ und $\overset{4}{\mathbf{I}}_{\text{skw}}$ bilden bei Anwendung auf einen 2-stufigen Tensor dessen symmetrischen bzw. schiefsymmetrischen Anteil.

In analoger Weise hängt die Momentenspannung $\mathbf{M}$ ausschließlich von der Krümmung $\bar{\boldsymbol{\kappa}}$ ab. Somit kann hier generell für $\mathbf{M}$ ein vergleichbarer Ansatz mit drei Materialparametern gewählt werden, jedoch wird vereinfachend ein direkt proportionaler Zusammenhang zwischen $\mathbf{M}$ und $\bar{\boldsymbol{\kappa}}$ angenommen, vgl. *de Borst* [3, 4]:

$$\mathbf{M} = 2\mu_c (l_c)^2 \bar{\boldsymbol{\kappa}}.\tag{12.23}$$

Aus Dimensionsgründen erscheint in (12.23) ein Materialparameter l_c mit der Einheit „Länge“. Man beachte, daß l_c nicht direkt mit materialspezifischen Größen wie z. B. der Korngröße identifiziert werden kann. Dies wird im folgenden Kapitel noch eingehend gezeigt.

12.5 Motivation der Materialgesetze und Materialparameter

In diesem Kapitel werden die verwendeten mikropolaren Elastizitätsgesetze anhand einfacher eindimensionaler Betrachtungen auf mikroskopischer Ebene motiviert. Ähnliche Überlegungen sind der Arbeit von *Mühlhaus & Vardoulakis* [19] zu entnehmen.

Ausgangspunkt sind zwei elliptische Scheiben, die durch eine seitliche Kraft f aneinandergedrückt werden. Nach einer Verdrehung der Scheiben gegeneinander um den Winkel $\Delta\varphi = \varphi_2 - \varphi_1$ wandert der Kontaktpunkt nach unten und es entsteht ein Rückstellmoment m_c , da neben der Kontakttangentialkraft auch die Kontaktnormalkraft einen Hebelarm besitzt, vgl. Bild 12.2. Die spezielle Wahl der elliptischen Ausgangsgeometrie soll nur

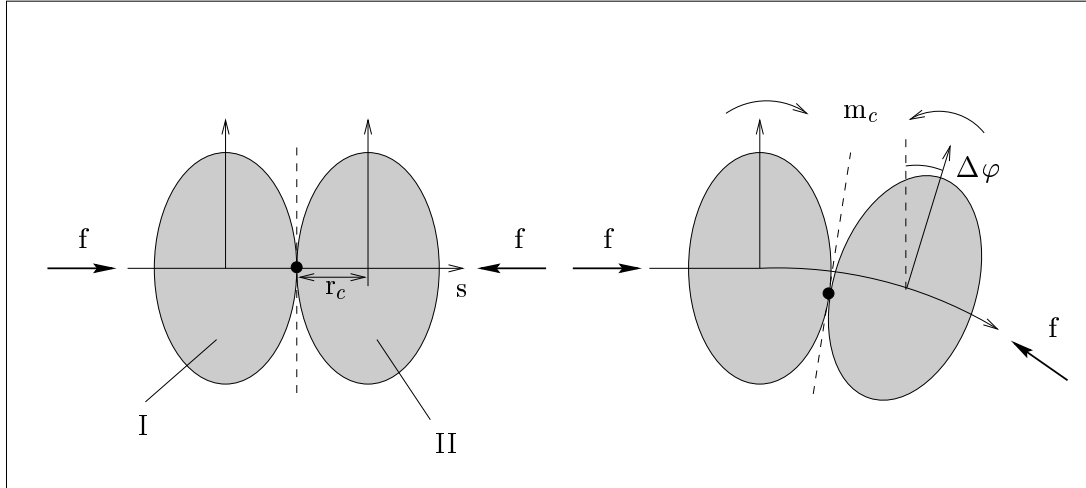


Abbildung 12.2: Rückstellmoment bei elliptischen Scheiben unter Seitendruck.

exemplarischen Charakter haben. Daher wird eine Transformation auf eine kreisförmige Geometrie durchgeführt, deren Radius r_c im vorliegenden Fall der kleineren Hauptachse der elliptischen Scheibe entsprechen soll, d. h. die Geometrie in der Nähe des Kontaktpunkts wird durch einen Kreis approximiert. Es wird angenommen, daß das Rückstellmoment m_c der Kontaktnormalkraft in der elliptischen Ausgangsgeometrie in erster Näherung proportional zum relativen Verdrehwinkel $\Delta\varphi$ ist, während bei einer kreisförmigen Geometrie die Kontaktnormalkraft immer zentrisch wirkt und kein Moment verursacht. Die Transformation auf die kreisförmige Ersatzgeometrie macht daraufhin die Einführung einer Drehfeder erforderlich, die ein zusätzliches Rückstellmoment bewirkt, das proportional zu $\Delta\varphi$ ist, siehe Bild 12.3. Die Drehfederkonstante ν_c beschreibt in dieser Argumentation die Zwangskräfte, die bei einer Drehung durch die nicht kreisförmige Ausgangsgeometrie entstehen. Es wird weiterhin angenommen, daß die tangentialen Kontaktkräfte, die durch Haftreibung hervorgerufen werden, durch eine Tangentialfeder mit der Steifigkeit ζ_c beschrieben werden können (Cundall & Strack [6]). Man beachte, daß durch die Tangentialfeder keine Dissipation durch Gleiten entsteht und der gesamte Deformationsprozeß reversibel ist, d. h. es liegt rein elastisches Materialverhalten vor.

Es wird zudem vernachlässigt, daß Reibung auch durch die Relativbewegung von Teilchen ohne Rotationen z. B. bei einfacher Scherung entstehen kann.

In Bild 12.4 sind die Kräfte und Momente für die ausgelenkte Ersatzstruktur eingezeichnet. Nach der Verdrehung ist die Drehfeder gespannt, während die Tangentialfeder noch unbelastet ist. Um das Momentengleichgewicht wiederherzustellen, verdrehen sich die beiden Körper gegeneinander, und die Tangentialfeder wird gespannt. Wenn das Moment infolge der Tangentialkraft das Moment der Drehfeder egalisiert, ist die statische Ruhelage

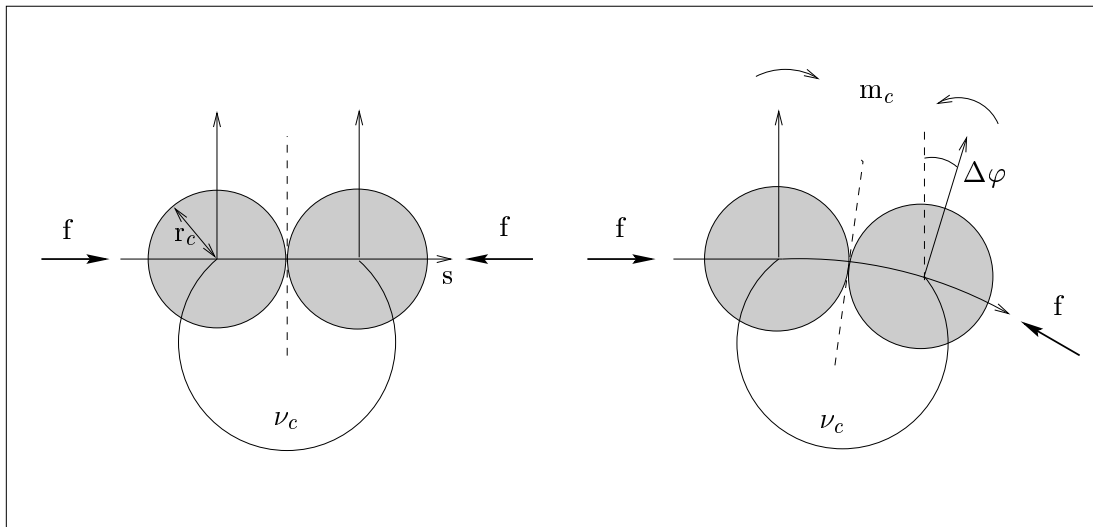


Abbildung 12.3: Einführung der Drehfeder auf kreisförmiger Geometrie.

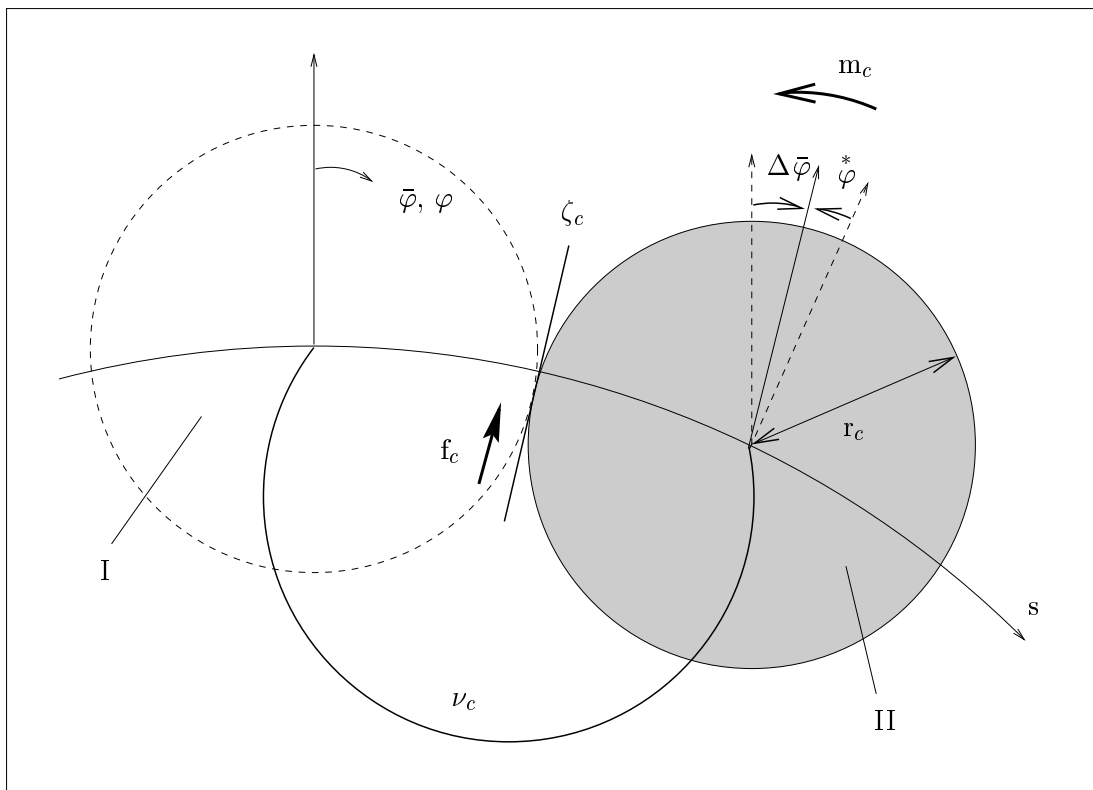


Abbildung 12.4: Kräfte und Momente auf Ersatzstruktur.

erreicht. Das Moment m_c hat dann den Wert

$$m_c = \nu_c (\bar{\varphi}_2 - \bar{\varphi}_1) = \Delta \bar{\varphi}. \quad (12.24)$$

Bei dieser Annahme wird vernachlässigt, daß auch eine Drehung in die gleiche Richtung ein Moment induzieren kann. Die Entwicklung des Winkelinkrements $\Delta \bar{\varphi}$ über dem Linienelementparameter s liefert:

$$\Delta \bar{\varphi} = \frac{\partial \bar{\varphi}}{\partial s} \Delta s, \quad \Delta s = 2 r_c. \quad (12.25)$$

Einsetzen der Beziehungen (12.25) in (12.24) ergibt für das Moment m_c

$$m_c = 2 \nu_c r_c \frac{\partial \bar{\varphi}}{\partial s}. \quad (12.26)$$

Die Tangentialkraft f_c genügt der folgenden Beziehung:

$$f_c = \zeta_c r_c \bar{\varphi}, \quad \bar{\varphi} = \varphi_2^* - \varphi_2. \quad (12.27)$$

Es wird nun vorausgesetzt, daß der Momentenspannungsvektor $\mathbf{m}$ den mittleren Momenten m_c auf einem Flächenelement $d\mathbf{a}$ mit der Flächennormalen $\mathbf{n}$ entspricht und daß der Momentenspannungstensor $\mathbf{M}$ durch ein *Cauchy*-Theorem mit dem Momentenspannungsvektor verknüpft ist:

$$\mathbf{m} = \mathbf{M} \mathbf{n}. \quad (12.28)$$

Im Rahmen einer quasistatischen Betrachtungsweise der Drallbilanz wird die Divergenz der Momentenspannungen durch den schiefsymmetrischen Anteil des Spannungszustands ins Momentengleichgewicht gebracht, vgl. (12.20). Im Beispiel aus Bild 12.4 sind die äußeren Ränder momentenspannungsfrei und das Moment m_c entspricht dem Momentenfluß und steht somit in Analogie zum kontinuumsmechanischen Divergenzterm. Nun wird m_c im vorliegenden Beispiel durch das Moment infolge der Tangentialkraft ins Gleichgewicht gebracht, so daß der Analogieschluß naheliegt, daß die mittlere Tangentialkraft f_c pro Flächenelement $d\mathbf{a}$ die gleiche Bedeutung wie der schiefsymmetrische Anteil des Spannungstensors $\mathbf{T}_{skw}$ in der kontinuumsmechanischen Beschreibung hat.

Ein Vergleich von (12.26) und (12.27) mit den elastischen Gesetzen der Momentenspannungen (12.23) bzw. der Spannungen (12.21) zeigt mit den genannten Überlegungen interessante Analogien. Die Verallgemeinerung der Linienableitung des Winkels $\bar{\varphi}$ ergibt den Gradienten, der im konstitutiven Ansatz der Momentenspannungen vorhanden ist. Der Proportionalitätsfaktor $2 \mu_c l_c^2$ beinhaltet nach dieser Argumentation Information sowohl über mittlere Partikelgröße als auch über die Partikelform. Die Tangentialfederkraft entspricht in diesem Zusammenhang dem schiefsymmetrischen Anteil des Spannungstensors und ist proportional zum freien Rotationsfeld, sofern elastisches Materialverhalten vorausgesetzt wird. Der Proportionalitätsfaktor μ_c wird demnach durch den mittleren Teilchenradius und das lokale mechanische Kontaktverhalten bestimmt. Durch die Kopplung der drei fundamental unterschiedlichen mikroskopischen Eigenschaften, Partikelgröße, Partikelform und Kontaktgesetz in den Materialparametern μ_c und l_c ist es prinzipiell unmöglich, in den etablierten Materialgesetzen die genannten Einflußgrößen zu separieren.

Zusammenfassend lassen sich die folgenden Aussagen gewinnen:

- Die mittlere Partikelform und Lagerungsdichte bestimmt die Drehfedersteifigkeit ν_c .

- Die mittlere Partikelgröße wird durch r_c bestimmt.
- Das lokale mikroskopische Kontaktverhalten wird durch die Steifigkeit ζ_c der Tangentialfeder wiedergegeben.
- Für den mikropolaren Materialparameter μ_c ergibt sich der Zusammenhang

$$\mu_c \sim \zeta_c r_c. \quad (12.29)$$

- Die interne Länge l_c repräsentiert das Verhältnis aus Drehfedersteifigkeit und Tangentialfedersteifigkeit:

$$l_c \sim \sqrt{\frac{\nu_c}{\zeta_c}}. \quad (12.30)$$

12.6 Sonderfall für kreisförmige Mikrobausteine

Es soll der Sonderfall von kreisförmigen Mikrobausteinen (Scheiben) behandelt werden, die sich in einer Ebene befinden. Anwendungsbeispiel ist der Biaxialversuch, auf den noch im Detail eingegangen wird. Weiterhin sollen keine Volumenmomente $\mathbf{c}$ vorhanden sein.

Mit den Untersuchungen des vorhergehenden Kapitels ergeben sich hierfür folgende Aussagen:

1. Die interne Länge l_c ist null, da für kreisförmige Partikel die Drehfedersteifigkeit verschwindet, und somit dürfen auch keine Momentenspannungen auftreten.
2. Der mikropolare Materialparameter μ_c kann ungleich null sein, da eine endliche Partikelgröße und eine Tangentialfedersteifigkeit vorhanden sind.

Mit diesen Aussagen und der offensichtlichen Annahme, daß für kreisförmige Partikel der Tensor der Mikroträchtigkeit $\bar{\Theta} = \bar{\Theta} \mathbf{I}$ Diagonalfom besitzt, reduziert sich die mikropolare Drallbilanz (12.20) zu

$$\rho \bar{\Theta} \dot{\bar{\omega}} = \mathbf{I} \times \mathbf{T}. \quad (12.31)$$

Somit muß der Spannungstensor $\mathbf{T}$ nur im quasistatischen Fall symmetrisch sein. Sofern der dynamische Term auf der linken Seite ungleich null ist, ergibt sich auch ein unsymmetrischer Spannungstensor und daraus folgend auch ein unsymmetrischer Verzerrungstensor.

Mit Hilfe von (12.6) und (12.21) kann der rechte Term von (12.31) folgendermaßen geschrieben werden:

$$\mathbf{I} \times \mathbf{T} = -2\mu_c \overset{*}{\varphi}. \quad (12.32)$$

Es wird nun ein stationärer makroskopischer Zustand des Scheibenmodells angenommen. Dies bedeutet, daß es eine konstante Kontinuumsrotationsgeschwindigkeit ω gibt und eine Fluktuation der einzelnen Partikel von der Kontinuumsrotation auftritt, die jedoch im

Mittel über alle Partikel verschwindet. Diese Fluktuation wird nun detaillierter untersucht und angenommen, daß ein periodischer Ansatz für φ^* gültig ist:

$$\varphi^* = \mathbf{a} \sin(\omega_f t + \varphi^i) \quad (12.33)$$

Darin ist $\mathbf{a}$ die Fluktuationsamplitude, ω_f die Fluktuationswinkelgeschwindigkeit und φ^i der individuelle Phasenwinkel jedes einzelnen Partikels. Hieraus ergibt sich für die mikropolare Rotationsgeschwindigkeit $\bar{\omega}$

$$\bar{\omega} = \omega + \dot{\varphi}^* = \omega + \mathbf{a} \omega_f \cos(\omega_f t + \varphi^i). \quad (12.34)$$

Durch eine weitere Zeitdifferentiation erhält man einen Zusammenhang für die mikropolare Winkelbeschleunigung $\dot{\bar{\omega}}$:

$$\dot{\bar{\omega}} = \dot{\omega} - \mathbf{a} \omega_f^2 \sin(\omega_f t + \varphi^i) = -\mathbf{a} \omega_f^2 \sin(\omega_f t + \varphi^i), \quad (12.35)$$

denn ω wurde als konstant (stationär) angenommen. Einsetzen von (12.32), (12.33) und (12.35) in (12.31) liefert das folgende interessante Ergebnis:

$$-\rho \omega_f^2 \bar{\Theta} \mathbf{a} = -2 \mu_c \mathbf{a}. \quad (12.36)$$

Als Folge ergibt sich einerseits eine Beziehung für μ_c

$$\mu_c = \frac{1}{2} \rho \bar{\Theta} \omega_f^2, \quad (12.37)$$

und andererseits wird auch deutlich, daß eine betragsmäßige Mittelung von (12.36) einen nichtsymmetrischen Anteil des Spannungstensors von

$$\mathbf{I} \times \mathbf{T} = -\mu_c |\mathbf{a}_{max}| \mathbf{e}_3 \quad (12.38)$$

erwarten läßt.

12.7 Untersuchung des Biaxialversuchs

Im folgenden Biaxial-Versuch ist die rechte, senkrechte Wand spannungs-, die obere, waagrechte Wand verschiebungsgesteuert. Die obere Wand bewegt sich nach unten, die linke Wand, sowie der Boden sind unbeweglich. Das System wird in einem isotropen Spannungszustand präpariert und anschließend relaxiert bis die kinetische Energie sowohl der translatorischen als auch der rotatorischen Freiheitsgrade dissipiert ist. Es existieren also weder rotatorische Größen noch schiefsymmetrische Spannungen in diesem relaxierten Anfangszustand. Dieser ist damit konsistent mit den Überlegungen des vorherigen Abschnitts. Die Deckenwand wird langsam nach unten bewegt. Dabei erreicht das Material nach einer Verschiebung von $\varepsilon_z \approx 0.02$ sein maximales Spannungsverhältnis $\sigma_{zz}/\sigma_{xx} \approx 2.8$. (Aus Konsistenz zu anderen Arbeiten wird der Spannungstensor, der mit Hilfe der DEM berechnet wurde, mit σ anstatt $\mathbf{T}$ bezeichnet.) Im weiteren Verlauf der Deformation findet,

wie in Bild 12.5 zu erkennen, eine Entfestigung statt. Das Maximum der Spannungskurve ist deutlicher als das Maximum des Fabric-Tensors (Strukturtensor), welcher ein Maß für die mittlere Kontaktanzahl ist. Die rotatorischen Freiheitsgrade werden im folgenden im kritischen Bereich bei einer Verschiebung von $\varepsilon_z \approx 0.12$ untersucht. Eine Momentaufnahme der Simulation ist in Bild 12.6 gezeigt, wobei die Winkelgeschwindigkeit von hell nach dunkel zunimmt.

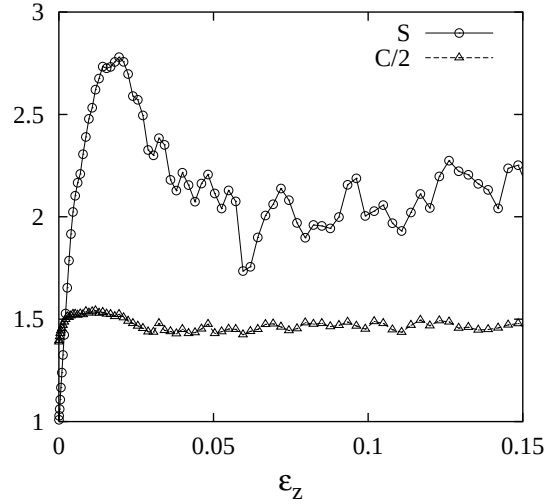


Abbildung 12.5: Spannungsverhältnis $S = \sigma_{zz}/\sigma_{xx}$ über der Vertikalverschiebung ε_z . Die zweite Kurve sind die Mittelwerte der Spur des Fabric-Tensors $C/2 = \text{tr}(\mathbf{F})$ [17].

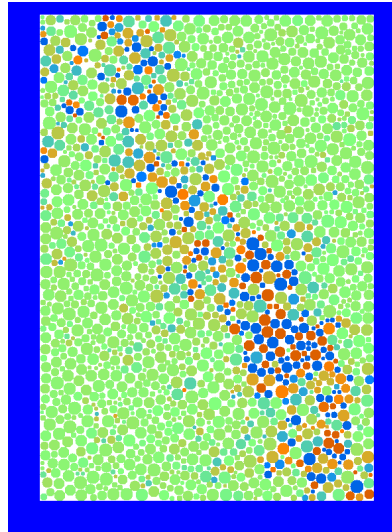


Abbildung 12.6: Momentaufnahme der Simulation zum Zeitpunkt $\varepsilon_z \approx 0.12$.

Im folgenden wollen wir unsere Betrachtungen auf die rotatorischen Freiheitsgrade und die damit verbundenen Größen beschränken. Diese Größen sind im einzelnen: der Winkel der Teilchenorientierung ϕ , die Winkelgeschwindigkeit ω und die Oberflächengeschwindigkeit $(a\omega)^2$. Außerdem tritt in der mikropolaren Theorie der schiefssymmetrische Anteil des

Spannungstensors $\sigma^A = \mathbf{T}_{\text{skw}}$ auf. Für die Mittelungen wird das System mit den Abmessungen $l_x \approx 0.075 \text{ m} \times l_z \approx 0.108 \text{ m}$ ($B \times H$) in 20×20 Zellen unterteilt, welche jeweils ca. $N/400 \approx 5$ Teilchen mit $N = 1950$ enthalten.

Die Teilchenorientierung ist in Bild 12.7 dargestellt. Die Isolinien zeigen, daß nur Teilchen in der Scherzone rotieren und die Rotationsrichtung bevorzugt positiv (im Uhrzeigersinn) ist. Die Winkelgeschwindigkeiten in Bild 12.8 unterstreichen die Ergebnisse für ϕ . Die

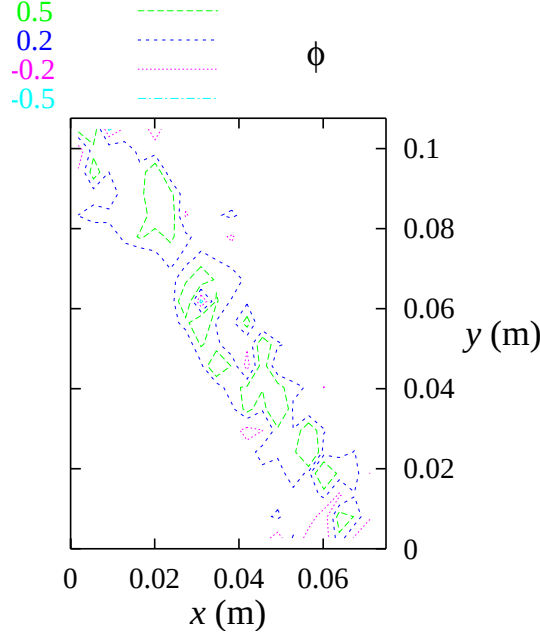


Abbildung 12.7: Gemittelter Winkel der Teilchenorientierung ϕ als Konturlinien. Die Werte der Isolinien sind in beliebigen Einheiten angegeben, um starke Abweichungen von Null hervorzuheben.

Mehrzahl der Teilchen rotiert in Übereinstimmung mit der Scherrichtung im Uhrzeigersinn. Die Oberflächengeschwindigkeit in Bild 12.9 führt zu keinen weiteren Erkenntnissen; allerdings stellt man starke Amplituden in den Ecken (rechts unten und links oben) fest. Im Gegensatz zur relaxierten Anfangsbedingung, in welcher die Spannung symmetrisch ist, findet sich in Bild 12.10 ein schief-symmetrischer Anteil des Spannungstensors. Dies steht somit im Einklang zu den vorherigen Ausführungen. Die Bildung eines Scherbandes ist in dieser Darstellung nicht deutlich zu erkennen. Es erscheint breiter und die schief-symmetrischen Anteile scheinen in „Inseln“ lokalisiert zu sein. Auch läßt sich die eindeutige Rotationsrichtung nicht aus den schief-symmetrischen Spannungen ablesen. Dies erklärt sich auch durch die These, daß bei kreisförmigen Partikeln die Fluktuationen um den Mittelwert den schief-symmetrischen Anteil induzieren, vgl. (12.35) bis (12.37). Um die Korrelation zwischen der Winkelgeschwindigkeit und den schief-symmetrischen Anteilen des Spannungstensors zu erhalten, sind in Abbildung 12.11 schließlich die zugehörigen Werte für alle Mittelungsvolumina gegeneinander aufgetragen.

Wir bedanken uns für die Unterstützung der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) und für hilfreiche Diskussionen bei C. Goldenberg und I. Goldhirsch.

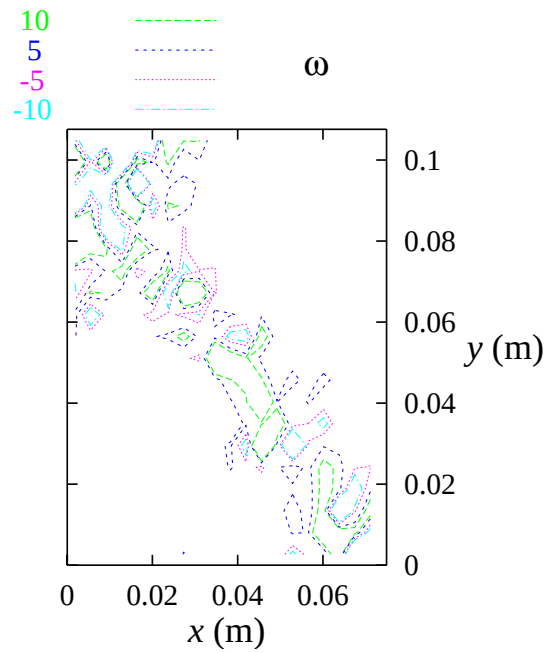


Abbildung 12.8: Gemittelte Teilchenwinkelgeschwindigkeit ω , dargestellt als Konturlinien.

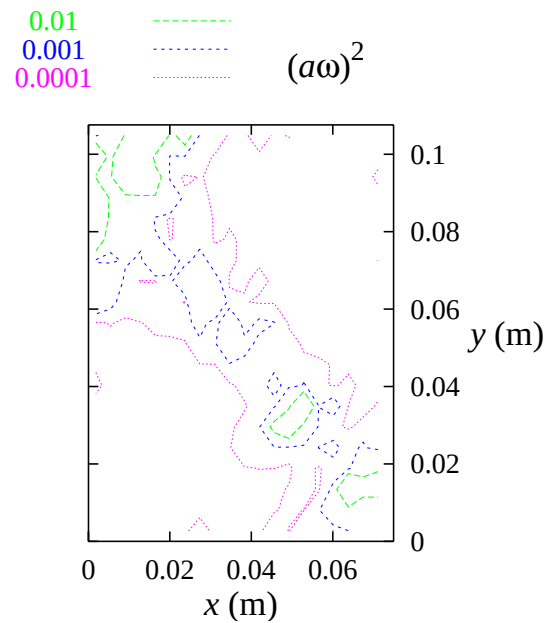


Abbildung 12.9: Gemittelte quadrierte Teilchenoberflächengeschwindigkeit $(a\omega)^2$ dargestellt als Konturlinien.

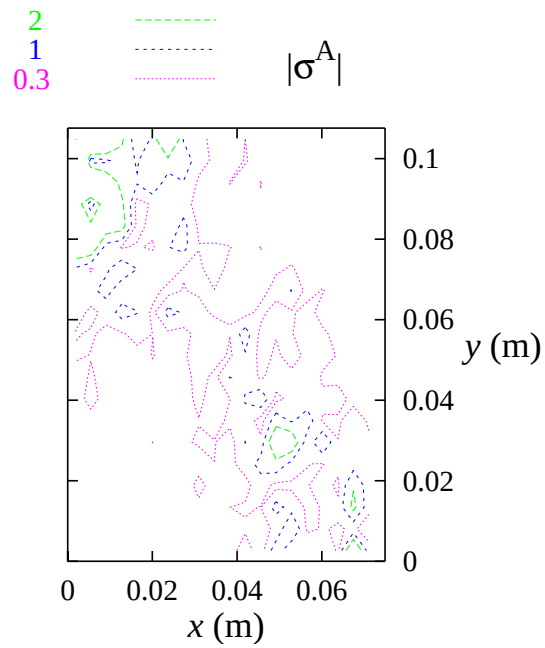


Abbildung 12.10: Absolutbetrag des schiefsymmetrischen Anteils der Spannungstensoren dargestellt als Konturlinien.

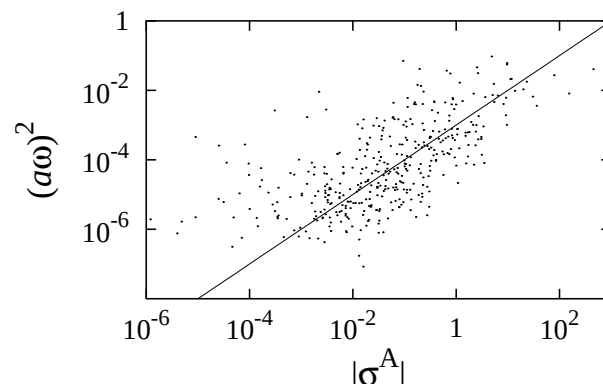


Abbildung 12.11: Quadrierte Teilchenoberflächengeschwindigkeit über den nicht symmetrischen Anteilen des Spannungstensors. Die Linie zeigt $(a\omega)^2 \approx 10^{-3} |\sigma^A|$ an.

Literaturverzeichnis

- [1] D. Besdo. Ein Beitrag zur nichtlinearen Theorie des Cosserat-Kontinuums. *Acta Mechanica*, 20:105–131, 1974.
- [2] R. de Boer. *Vektor- und Tensorrechnung für Ingenieure*. Springer-Verlag, Berlin, 1982.
- [3] R. de Borst. Numerical modelling of bifurcation and localisation in cohesive-frictional materials. *Pageoph.*, 137: 368–390, 1991.
- [4] R. de Borst. A generalisation of J_2 -flow theory for polar continua. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 103:347–362, 1993.
- [5] E. Cosserat und F. Cosserat. *Théorie des Corps Déformable*. A. Hermann et Fils, Paris, 1909.
- [6] P. A. Cundall und O. D. L. Strack. A discrete numerical model for granular assemblages. *Géotechnique*, 29:47–65, 1979.
- [7] S. Diebels. A Micropolar Theory of Porous Media: Constitutive Modelling. *Transport in Porous Media*, accepted for publication, 1998.
- [8] S. Diebels. *Mikropolare Zweiphasenmodelle: Formulierung auf der Basis der Theorie Poröser Medien*. Habilitationsschrift, Bericht Nr. II-4 aus dem Institut für Mechanik (Bauwesen), Universität Stuttgart, Stuttgart, 2000.
- [9] S. Diebels, W. Ehlers. On basic equations of multiphase micropolar materials. *Technische Mechanik*, 16:77–88, 1996.
- [10] W. Ehlers. *Poröse Medien – ein kontinuumsmechanisches Modell auf der Basis der Mischungstheorie*. Forschungsberichte aus dem Fachbereich Bauwesen, Heft 47, Universität-GH-Essen, Essen, 1989.
- [11] W. Ehlers. Grundlegende Konzepte in der Theorie Poröser Medien. *Technische Mechanik*, 16:63–76, 1996.
- [12] W. Ehlers und W. Volk. On theoretical and numerical methods in the theory of porous media based on polar and non-polar solid materials, *Int. J. Solids Structures*, 35:4597–4617, 1998.
- [13] A. C. Eringen. Simple Microfluids. *Int. J. Engng. Sci.*, 2:205–217, 1964.
- [14] A. C. Eringen und C. B. Kafadar. Polar field theories. In A. C. Eringen, editor, *Continuum Physics* Vol. IV, pages 1–73. Academic Press, New York, 1976.
- [15] W. Günther. *Zur Statik und Kinematik des Cosseratschen Kontinuums*. Abhandlungen der Braunschweigischen Wissenschaftlichen Gesellschaft, 10:195–213, 1958.
- [16] P. Haupt. Foundations of continuum mechanics. In K. Hutter, editor, *Continuum Mechanics in Environmental Sciences and Geophysics*, CISM Courses and Lecture Notes No. 337, pages 1–77. Springer-Verlag, Wien, 1993.

- [17] M. Lätzel, S. Luding und H. J. Herrmann. Macroscopic material properties from quasi-static, microscopic simulations of a two-dimensional shear cell. *Granular Matter*, 2:123, 2000.
- [18] M. Lätzel, S. Luding und H. J. Herrmann. From discontinuous models towards a continuum description. In P. A. Vermeer et al., editors, *Continuous and Discontinuous Modelling of Cohesive Frictional Materials*, pages 215–230. Springer-Verlag, Berlin, 2001.
- [19] H.-B. Mühlhaus und I. Vardoulakis. The thickness of shear bands in granular materials. *Géotechnique*, 37:271–283, 1987.
- [20] J. Schröder. *Homogenisierungsmethoden der nichtlinearen Kontinuumsmechanik unter Beachtung von Stabilitätsproblemen*. Habilitationsschrift, Bericht Nr. I-7 aus dem Institut für Mechanik (Bauwesen), Universität Stuttgart, Stuttgart, 2000.
- [21] P. Steinmann. *Lokalisierungsprobleme in der Plasto-Mechanik*. Dissertation, Universität Karlsruhe, Karlsruhe, 1992.
- [22] P. Steinmann. A micropolar theory of finite deformation and finite rotation multiplicative elastoplasticity. *Int. J. Solids Structures*, 31:1063–1084, 1994.
- [23] P. Steinmann und E. Stein. A unifying treatise of variational principles for two types of micropolar continua. *Acta Mechanica*, 121:215–232, 1997.
- [24] P. Steinmann und K. Willam. Localization within the framework of micropolar elasto-plasticity. In V. Mannl, J. Najjar, O. Brüller, editors, *Advances in Continuum Mechanics*, pages 296–313. Springer-Verlag, Berlin, 1991.
- [25] W. Volk. *Untersuchung des Lokalisierungsverhaltens mikropolarer poröser Medien mit Hilfe der Cosserat-Theorie*. Dissertation, Bericht Nr. II-2 aus dem Institut für Mechanik (Bauwesen), Universität Stuttgart, Stuttgart, 1999.

13

Konsistente Linearisierung im Rahmen der Theorie Poröser Medien

G. Eipper
Egerstr. 12
D-71111 Waldenbuch

13.1 Einleitung

Fluidgefüllte poröse Festkörper, wie z. B. Polymerschäume, gasgefüllte Metallschäume oder auch blutdurchströmtes biologisches Gewebe, können unter Belastung finite Deformationen erfahren. Diese Zweiphasenmaterialien bestehen aus einem fluidgefüllten Festkörperskelett. Das mechanische Verhalten dieser Werkstoffe lässt sich mit Hilfe der Theorie Poröser Medien (TPM) beschreiben. Die TPM wurde aus der Mischungstheorie von Mehrkomponentenkontinua unter Berücksichtigung des Konzepts der Volumenanteile entwickelt, siehe *Bowen* [1, 2], *de Boer & Ehlers* [4], *Ehlers* [6]. Insbesondere bei der Belastung von Elastomerschäumen können finite elastische Deformationen im Festkörperskelett auftreten. Hierzu muss ein geeignetes finites elastisches Materialgesetz für poröse Festkörperskelette verwendet werden. Die Beschreibung des gekoppelten Festkörper-Fluid-Problems geschieht mit Hilfe der Bilanzgleichungen bzw. deren schwachen Formulierungen. Aufgrund der möglichen Fluiddurchströmung des Festkörperskeletts erhält man selbst unter quasi-statischer Belastung ein zeitabhängiges Anfangs-Randwertproblem. Zur numerischen Umsetzung der beschreibenden Gleichungen in einem Berechnungsprogramm ist eine Diskretisierung der Gleichungen im Ort mit Hilfe der Finite-Elemente-Methode (FEM) sowie eine geeignete Zeitdiskretisierung notwendig. Zur effizienten numerischen Lösung des Problems spielt die konsistente Linearisierung der Gleichungen eine herausragende Rolle. Im Folgenden wird die konsistente Linearisierung der nichtlinearen Bilanzgleichungen für ein fluidgesättigtes Festkörperskelett unter finiter elastischer Deformation hergeleitet. Desweiteren wird auf die Einbindung der Linearisierung im Rahmen einer numerischen Behandlung des Problems mit Finiten Elementen eingegangen.

13.2 Grundlagen

Für das aus einem Festkörperskelett und einem Fluid bestehende Zweiphasenmodell wird im Weiteren von einem materiell inkompressiblen Matrixmaterial des Festkörperskeletts

sowie von Inkompressibilität des Porenfluids ausgegangen. Die materielle Inkompressibilität des Matrixmaterials bedingt dabei keinesfalls makroskopische Inkompressibilität. So kann das poröse Festkörperskelett unter Belastung durchaus große Volumendehnungen erfahren.

Die Sättigungsbedingung fordert für die Volumenanteile von Festkörper (Index S : Solid) und Fluid (Index F : Fluid)

$$n^S + n^F = 1 . \quad (13.1)$$

Die kinematische Beschreibung der Festkörperdeformation erfolgt zweckmäßigerweise im Rahmen einer *Lagrangeschen* Darstellung mit Hilfe der Festkörperverschiebung $\mathbf{u}_S$. Die Fluidbewegung wird in einer *Eulerschen* Darstellung mit der Sickergeschwindigkeit $\mathbf{w}_F$ beschrieben. Diese stellt die Fluidbewegung relativ zum sich deformierenden Festkörperskelett dar.

Der materielle Deformationsgradient des Festkörpers lässt sich durch

$$\mathbf{F}_S = \mathbf{I} + \text{Grad}_S \mathbf{u}_S \quad (13.2)$$

darstellen, wobei $\text{Grad}_S = \partial/\partial \mathbf{X}_S$ die partielle Ableitung nach dem Ortsvektor $\mathbf{X}_S$ der Festkörperphase in der Referenzkonfiguration ist. Als weiteres wichtiges Deformationsmaß wird die *Jacobische Determinante*

$$J_S = \det \mathbf{F}_S \quad (13.3)$$

eingeführt. Hierdurch lässt sich ein Zusammenhang zwischen dem Anfangsvolumenanteil n_{0S}^S des Festkörpers (bezüglich der Festkörperreferenzkonfiguration) und dem aktuellen Volumenanteil n^S herstellen:

$$n^S = \frac{1}{J_S} n_{0S}^S . \quad (13.4)$$

Grundlage für die Beschreibung des mechanischen Verhaltens eines fluidgesättigten Festkörperskeletts sind die Massen- und Impulsbilanz des Festkörpers und des Fluids, siehe *Ehlers* [7]. Aufgrund der materiellen Inkompressibilität von Festkörper und Fluid erhält man aus den Massenbilanzen und der Sättigungsbedingung die Volumenbilanz des Zweiphasenmodells

$$\text{div} (n^F \mathbf{w}_F + (\mathbf{u}_S)'_S) = 0 , \quad (13.5)$$

wobei $(\mathbf{u}_S)'_S$ die Festkörpergeschwindigkeit darstellt. Der Differentialoperator „div“ ist der zu $\text{grad} = \partial/\partial \mathbf{x}$ (partielle Ableitung nach dem Ortsvektor der Momentankonfiguration) korrespondierende Operator. Unter Annahme quasi-statischer Prozesse (Trägheitsterme entfallen) sowie bei Vernachlässigung von eingepprägten Volumenkräften (z. B. aufgrund der Erdbeschleunigung) erhält man die Impulsbilanzen für das Festkörperskelett und das Fluid zu

$$\text{div} \mathbf{T}^S + \hat{\mathbf{p}}^S = \mathbf{0} , \quad \text{div} \mathbf{T}^F + \hat{\mathbf{p}}^F = \mathbf{0} . \quad (13.6)$$

Hierbei sind $\mathbf{T}^S$ und $\mathbf{T}^F$ die jeweiligen partialen *Cauchy*-Spannungstensoren. Aus der Theorie Poröser Medien erhält man die Zwangsbedingung $\hat{\mathbf{p}}^S + \hat{\mathbf{p}}^F = \mathbf{0}$ für den Impulsaustausch zwischen Festkörper und Fluid. Die Partialspannungen $\mathbf{T}^S$ und $\mathbf{T}^F$ sowie der Impulsaustausch $\hat{\mathbf{p}}^F$ sind aufgrund der Forderung nach materieller Inkompressibilität nur bis auf einen gewissen Anteil konstitutiv bestimmbar. Dies führt zur Einführung sogenannter Extragößen (Index $_E$), die konstitutiv bestimmt werden müssen:

$$\mathbf{T}^S = -n^S p \mathbf{I} + \mathbf{T}_E^S, \quad (13.7)$$

$$\mathbf{T}^F = -n^F p \mathbf{I}, \quad (13.8)$$

$$\hat{\mathbf{p}}^F = p \operatorname{grad} n^F - \frac{(n^F)^2 \gamma^{FR}}{k^F} \mathbf{w}_F. \quad (13.9)$$

Hierbei lässt sich der auftretende *Lagrange*-Multiplikator p als effektiver Porenfluiddruck identifizieren. Eine Fluidextraspansung $\mathbf{T}_E^F$ wird in (13.8) *a priori* vernachlässigt. Auf die Bestimmung der Festkörperextraspansung $\mathbf{T}_E^S$ wird im Weiteren noch detaillierter eingegangen. Die reale Wichte des Porenfluids wird mit γ^{FR} bezeichnet. Der *Darcy*-Parameter k^F beschreibt die Permeabilität und hängt damit sowohl von der Größe und Struktur des Porenraums als auch von der Viskosität des Porenfluids ab. Durch Kombination der Impulsbilanz von Festkörper und Fluid unter Berücksichtigung der angegebenen konstitutiven Beziehungen erhält man die Impulsbilanz des Zweiphasenmodells zu

$$\operatorname{div}(\mathbf{T}_E^S - p \mathbf{I}) = \mathbf{0}. \quad (13.10)$$

Kombiniert man die Impulsbilanz des Fluids mit den konstitutiven Ansätzen für die Fluidspannung $\mathbf{T}^F$ und dem Interaktionsterm $\hat{\mathbf{p}}^F$, so erhält man mit $n^F \mathbf{w}_F = -\frac{k^F}{\gamma^{FR}} \operatorname{grad} p$ das sogenannte *Darcysche* Filtergesetz. Mit dieser Formulierung ist es möglich, die Sickergeschwindigkeit direkt aus den Bilanzgleichungen zu eliminieren. Man erhält dann für die Volumenbilanz der Mischung

$$\operatorname{div} \left(-\frac{k^F}{\gamma^{FR}} \operatorname{grad} p + (\mathbf{u}_S)_S' \right) = 0. \quad (13.11)$$

Die Beziehungen (13.10) und (13.11) stellen die grundlegenden Gleichungen zur numerischen Beschreibung eines fluidgesättigten Festkörperskeletts dar.

13.3 Ein finites Elastizitätsgesetz für das poröse Festkörperskelett

Da das Festkörperskelett aus materiell inkompressiblem Material besteht, können volumetrische Deformationen des Festkörperskeletts nur durch Porositätsänderungen, d. h. Deformationen der Porenstruktur, auftreten. Aufgrund der Inkompressibilität des Matrixmaterials kann das Festkörperskelett nur bis zum sogenannten **Kompressionspunkt** zusammengedrückt werden. Dieser Deformationszustand ist erreicht, wenn durch eine Volumenkompression alle Poren vollständig geschlossen sind (Volumendeformation $J_S \rightarrow n_{0S}^S$) und aufgrund der Inkompressibilität keine weitere Volumenkompression mehr möglich ist.

Der zum Kompressionspunkt gehörende Deformationszustand darf demzufolge nur mit einer unendlich großen hydrostatischen Druckspannung erreichbar sein.

Dieses mechanische Verhalten soll im Weiteren mit einem finiten Elastizitätsgesetz beschrieben werden. Auf der Grundlage eines *Neo-Hooke*-Modells für kompressible nicht-poröse Festkörper lässt sich ein finites hyperelastisches Elastizitätsgesetz für ein poröses Festkörperskelett aus materiell inkompressiblem Matrixmaterial konstruieren, vgl. *Ehlers & Eipper* [8], *Eipper* [9]. Der *Kirchhoff*-Extraspannungstensor $\boldsymbol{\tau}_E^S$ (gewichtete *Cauchy*-Spannung: $\boldsymbol{\tau}_E^S = J_S \mathbf{T}_E^S$) dieses finiten Elastizitätsgesetzes lautet:

$$\boldsymbol{\tau}_E^S = \mu^S (\mathbf{B}_S - \mathbf{I}) + \Lambda^S (1 - n_{0S}^S)^2 \left(\frac{J_S}{1 - n_{0S}^S} - \frac{J_S}{J_S - n_{0S}^S} \right) \mathbf{I}, \quad (13.12)$$

hierbei ist $\mathbf{B}_S = \mathbf{F}_S \mathbf{F}_S^T$ der rechte *Cauchy-Green* Deformationstensor. Die *Lameschen* Materialkonstanten μ^S und Λ^S beschreiben das Verhalten der porösen Festkörperstruktur (und nicht des Matrixmaterials selbst). Als zusätzlicher Parameter enthält das Elastizitätsgesetz zur Beschreibung des Kompressionspunktes den Anfangsvolumenanteil n_{0S}^S des Festkörpers. Dieses Materialgesetz erfüllt alle üblichen Anforderungen an finite Elastizitätsgesetze, wie Spannungsfreiheit im undeformierten Zustand, unendliche Volumenextension nur unter unendlichen volumetrischen Zugspannungen, Polykonvexität der Verzerrungsenergiefunktion sowie Übergang zu einem Elastizitätsgesetz vom *Hookeschen* Typ bei Linearisierung im Bereich kleiner Deformationen. Dieses Materialgesetz eignet sich sowohl zur Berechnung fluidgefüllter poröser Festkörper als auch zur Berechnung leerer Festkörperskelette.

Bei der numerischen Umsetzung von finiten Elastizitätsgesetzen im Rahmen von Finite-Elemente-Formulierungen spielt der vierstufige Elastizitätstensor der Momentankonfiguration eine wichtige Rolle. Dieser stellt einen Zusammenhang zwischen dem *Oldroydschen* Spannungsfluss (obere *Lie*-Ableitung von $\boldsymbol{\tau}_E^S$) und dem Deformationsgeschwindigkeitstensor $\mathbf{D}_S = \text{sym} [\text{grad} (\mathbf{u}_S)'_S]$ dar:

$$(\boldsymbol{\tau}_E^S)^\nabla = \overset{4}{\mathbf{C}} \mathbf{D}_S. \quad (13.13)$$

Für das vorgestellte *Neo-Hooke*-Modell für poröse Festkörper findet man den isotropen vierstufigen Elastizitätstensor zu

$$\overset{4}{\mathbf{C}} = 2 c_1 (\mathbf{I} \otimes \mathbf{I})^{\overset{23}{T}} + c_2 (\mathbf{I} \otimes \mathbf{I}). \quad (13.14)$$

Die Koeffizienten c_1 und c_2 sind deformationsabhängige Größen:

$$c_1(J_S) = \mu^S - \Lambda^S (1 - n_{0S}^S) J_S \frac{J_S - 1}{J_S - n_{0S}^S}, \quad (13.15)$$

$$c_2(J_S) = \Lambda^S (1 - n_{0S}^S) J_S \frac{J_S^2 - 2 n_{0S}^S J_S + n_{0S}^S}{(J_S - n_{0S}^S)^2}. \quad (13.16)$$

Der Elastizitätstensor des *Neo-Hooke*-Modells besitzt den Vorteil, dass er aus vierstufigen Fundamentaltensoren aufgebaut werden kann. Lediglich die Koeffizienten c_1 und c_2 sind

deformationsabhängig. Dies ermöglicht eine sehr effiziente Auswertung des Elastizitätstensors im Rahmen einer numerischen Berechnung.

13.4 Schwache Formulierung

Grundlage zur numerischen Umsetzung des gekoppelten Festkörper-Fluid-Problems sind die schwachen Formulierungen der Bilanzgleichungen. Die schwache Form der Impulsbilanz erhält man durch Anwendung des Divergenztheorems und des *Gaußschen* Integralsatzes aus (13.10) zu

$$g_1(\mathbf{u}_S, p) = \int_{\mathcal{B}} (\mathbf{T}_E^S - p \mathbf{I}) \cdot \text{grad } \delta \mathbf{u}_S \, dv - \int_{\partial \mathcal{B}} \mathbf{t} \cdot \delta \mathbf{u}_S \, da = 0, \quad (13.17)$$

wobei die Testfunktion $\delta \mathbf{u}_S$ als virtuelle Verschiebung aufgefasst werden kann; $\mathbf{t}$ ist der auf die Oberfläche von Festkörper und Fluid wirkende Spannungsvektor. Durch analoges Vorgehen erhält man mit der Testfunktion δp (virtuelles Druckfeld) und der Abkürzung $\mathbf{v}_S = (\mathbf{u}_S)'_S$ aus der Volumenbilanz (13.11) die schwache Form der Volumenbilanz der Mischung:

$$g_2(\mathbf{u}_S, p, \mathbf{v}_S) = \int_{\mathcal{B}} \text{div } \mathbf{v}_S \, \delta p \, dv + \int_{\mathcal{B}} \frac{k^F}{\gamma^{FR}} \text{grad } p \cdot \text{grad } \delta p \, dv + \int_{\partial \mathcal{B}} q \, \delta p \, da = 0, \quad (13.18)$$

hierbei ist q die Filtergeschwindigkeit ($n^F \mathbf{w}_F$) des durch einen Teil der Oberfläche austretenden Fluids.

Durch Einführen eines Prozessvektors $\mathbf{z}$ der beschreibenden Variablen sowie dessen zeitlicher Ableitung

$$\mathbf{z} = \begin{pmatrix} \mathbf{u}_S \\ p \end{pmatrix}, \quad \mathbf{z}' = \begin{pmatrix} (\mathbf{u}_S)'_S \\ p'_S \end{pmatrix} \quad (13.19)$$

lassen sich die schwachen Formen der Bilanzgleichungen formal in einem Funktionenvektor zusammenfassen:

$$\mathbf{G}(\mathbf{z}, \mathbf{z}') = \begin{pmatrix} g_1(\mathbf{z}) \\ g_2(\mathbf{z}, \mathbf{z}') \end{pmatrix} = \mathbf{0}. \quad (13.20)$$

Allerdings taucht die zeitliche Ableitung des Porenfluiddrucks in den Bilanzgleichungen nicht auf. Die Zeitableitung $\mathbf{z}'$ des Prozessvektors wird bei der numerischen Behandlung des Gesamtproblems durch ein geeignetes Integrationsverfahren in der Zeit diskretisiert.

13.5 Konsistente Linearisierung der schwachen Formulierungen der Bilanzgleichungen

Grundlage bei der Durchführung der konsistenten Linearisierung ist die Richtungsableitung (*Gateaux*-Ableitung) einer Funktion. Konsistente Linearisierung bedeutet, dass alle in das Problem eingehenden Gleichungen bis zur gleichen Ordnung bezüglich ihrer unbekannten Größen linearisiert werden. Die Richtungsableitung einer Funktion $f(\mathbf{z})$ eines Vektors $\mathbf{z}$ an der Entwicklungsstelle $\bar{\mathbf{z}}$ in Richtung von $\Delta\mathbf{z}$ ist definiert durch

$$Df(\bar{\mathbf{z}}) \cdot \Delta\mathbf{z} = \frac{d}{d\epsilon} \left[f(\bar{\mathbf{z}} + \epsilon \Delta\mathbf{z}) \right]_{\epsilon=0}, \quad (13.21)$$

wobei ϵ ein skalarer Parameter ist. Damit lässt sich der lineare Anteil von $f(\mathbf{z}) = 0$ in der Form

$$f_{lin}(\mathbf{z}) = f(\bar{\mathbf{z}}) + Df(\bar{\mathbf{z}}) \cdot \Delta\mathbf{z} = 0 \quad (13.22)$$

darstellen. Dieses Vorgehen dient als Grundlage zur iterativen Lösung von Gleichungssystemen mit Hilfe des *Newton*-Verfahrens.

Die Linearisierung des Funktionenvektors (13.20) der schwachen Formen der Bilanzgleichungen erhält man zu

$$\bar{\mathbf{G}} + D_z \mathbf{G} \cdot \Delta\mathbf{z} + D_{z'} \mathbf{G} \cdot \Delta\mathbf{z}' = \mathbf{0}, \quad (13.23)$$

wobei $\bar{\mathbf{G}}$ die Auswertung des Funktionenvektors an der bekannten Entwicklungsstelle ist. Der Index $_z$ bzw. $_{z'}$ im Operator der *Gateaux*-Ableitung kennzeichnet die Größe, bezüglich der linearisiert wird. Die Linearisierung erfolgt bei festgehaltener Zeit t . Die inkrementellen Größen $\Delta\mathbf{z} = \{\Delta\mathbf{u}_S, \Delta p\}$ stellen im Rahmen eines *Newton*-Verfahrens die Inkremente der Lösung dar.

Die Richtungsableitungen in der Linearisierung des Funktionenvektors $\mathbf{G}$ sind durch

$$D_z \mathbf{G} \cdot \Delta\mathbf{z} = \begin{pmatrix} D_u g_1 \cdot \Delta\mathbf{u}_S & + & D_p g_1 \cdot \Delta p \\ D_u g_2 \cdot \Delta\mathbf{u}_S & + & D_p g_2 \cdot \Delta p \end{pmatrix}, \quad D_{z'} \mathbf{G} \cdot \Delta\mathbf{z}' = \begin{pmatrix} 0 \\ D_v g_2 \cdot \Delta\mathbf{v}_S \end{pmatrix} \quad (13.24)$$

gegeben.

13.5.1 Bereitstellung wichtiger Linearisierungen

Zur Linearisierung der schwachen Formen der Bilanzgleichungen werden im Folgenden die Linearisierungen einiger wichtiger Größen bereitgestellt. Hierbei wird unter Linearisierung das Bilden der Richtungsableitung verstanden. Im Weiteren wird die Richtungsableitung jeweils an der Entwicklungsstelle ausgewertet, ohne dass dies explizit angegeben wird. Dies gilt auch für die auftretenden Differentialoperatoren und Transportmechanismen.

Deformationsgrößen

Die Linearisierung des Deformationsgradienten $\mathbf{F}_S$ bezüglich der Verschiebungsgröße $\mathbf{u}_S$ erhält man aus der Definition der Richtungsableitung zu

$$D_u \mathbf{F}_S \cdot \Delta \mathbf{u}_S = \frac{d}{d\epsilon} \left[\mathbf{I} + \text{Grad}_S (\mathbf{u}_S + \epsilon \Delta \mathbf{u}_S) \right]_{\epsilon=0} = \text{Grad}_S \Delta \mathbf{u}_S . \quad (13.25)$$

Entsprechend erhält man für die Linearisierung des inversen Deformationsgradienten

$$D_u^{-1} \mathbf{F}_S \cdot \Delta \mathbf{u}_S = -\mathbf{F}_S^{-1} \text{grad} \Delta \mathbf{u}_S . \quad (13.26)$$

Mit Hilfe der Rechenregeln zur Bildung von Determinanten, siehe z. B. *de Boer* [3], kann die Linearisierung der *Jacobischen* Determinanten $J_S = \det \mathbf{F}_S$ gebildet werden:

$$D_u J_S \cdot \Delta \mathbf{u}_S = J_S \text{div} \Delta \mathbf{u}_S . \quad (13.27)$$

Differentialoperatoren

Der räumliche Differentialoperator „grad“ ist deformationsabhängig, da er eine Größe der aktuellen (deformierten) Konfiguration ist. Zur Linearisierung der geometrischen Nicht-linearitäten wird der Differentialoperator mit Hilfe der Transformationsbeziehungen $\text{grad} \alpha = \mathbf{F}_S^{T-1} \text{Grad}_S \alpha$ für eine skalare Größe α bzw. $\text{grad} \mathbf{a} = (\text{Grad}_S \mathbf{a}) \mathbf{F}_S^{-1}$ für eine vektorielle Größe $\mathbf{a}$ in einen materiellen Differentialoperator Grad_S transformiert. Dieser Ausdruck wird dann bezüglich der Deformation linearisiert und das Ergebnis wieder mit Hilfe inverser Transformationsbeziehungen in die Momentankonfiguration zurücktransformiert. So liefert z. B. die Linearisierung des räumlichen Gradienten der Testfunktion $\delta \mathbf{u}_S$ das Ergebnis

$$D_u(\text{grad} \delta \mathbf{u}_S) \cdot \Delta \mathbf{u}_S = -\text{grad} \delta \mathbf{u}_S \text{grad} \Delta \mathbf{u}_S . \quad (13.28)$$

Linearisierung bezüglich des Porenfluiddrucks

Die Linearisierung des (in der Volumenbilanz der Mischung auftretenden) Gradienten des Porenfluiddrucks bezüglich des Porendrucks selbst erhält man aus der Definition der Richtungsableitung zu

$$D_p(\text{grad} p) \cdot \Delta p = \frac{d}{d\epsilon} \left[\text{grad} (p + \epsilon \Delta p) \right]_{\epsilon=0} = \text{grad} \Delta p . \quad (13.29)$$

Linearisierung bezüglich der Verschiebungsgeschwindigkeit

Die Linearisierung der Divergenz der Verschiebungsgeschwindigkeit bezüglich $\mathbf{v}_S$ selbst erfolgt auf analoge Weise. Hier erhält man

$$D_v(\text{div} \mathbf{v}_S) \cdot \Delta \mathbf{v}_S = \text{div} \Delta \mathbf{v}_S . \quad (13.30)$$

Die Geschwindigkeit $\mathbf{v}_S$ wird zunächst als eine von $\mathbf{u}_S$ unabhängige Feldgröße betrachtet. Die Deformationsabhängigkeit des Differentialoperators „div“ wird bei der Linearisierung bezüglich der Festkörperdeformation berücksichtigt.

Mit diesen grundlegenden Beziehungen lässt sich die konsistente Linearisierung der schwachen Formen der Bilanzgleichungen ausführen. Die Ergebnisse lassen sich dann in die vektorielle Darstellung (13.24) einordnen.

13.5.2 Linearisierung der schwachen Form der Impulsbilanz

Linearisierung bezüglich der Festkörperdeformation

Die in der schwachen Form der Bilanzgleichungen auftretenden Integrale sind deformationsabhängig, da eine Volumenintegration über ein Volumenelement der aktuellen (deformierten) Konfiguration durchgeführt wird. Dies muss bei der Linearisierung beachtet werden. Hierzu wird zunächst eine Integraltransformation in die Referenzkonfiguration durchgeführt, somit sind die Integrationsgrenzen nicht mehr deformationsabhängig. Für das Volumenintegral der schwachen Form der Impulsbilanz der Mischung erhält man dann

$$\int_{\mathcal{B}} (\mathbf{T}_E^S - p \mathbf{I}) \cdot \text{grad } \delta \mathbf{u}_S \, dv = \int_{\mathcal{B}_0} (\boldsymbol{\tau}_E^S - J_S p \mathbf{I}) \cdot \text{grad } \delta \mathbf{u}_S \, dV_S . \quad (13.31)$$

Für die Linearisierung des Extraspannungsanteils findet man die aus der klassischen Festkörpermechanik bekannte Form (siehe z. B. *Wriggers* [10])

$$\begin{aligned} D_u \left[\boldsymbol{\tau}_E^S \cdot \text{grad } \delta \mathbf{u}_S \right] \cdot \Delta \mathbf{u}_S \\ = \left[\mathbf{C} \frac{1}{2} (\text{grad } \Delta \mathbf{u}_S + \text{grad}^T \Delta \mathbf{u}_S) + \text{grad } \Delta \mathbf{u}_S \boldsymbol{\tau}_E^S \right] \cdot \text{grad } \delta \mathbf{u}_S . \end{aligned} \quad (13.32)$$

Dieser Ausdruck ist auch maßgebend bei der Berechnung eines leeren porösen Festkörperskeletts. Die Linearisierung des Porenfluiddruckterms in (13.31) kann mit den vorgestellten grundlegenden Beziehungen in analoger Weise ausgeführt werden. Da die Oberflächenkräfte als deformationsunabhängig angenommen werden, liefert das Oberflächenintegral in der Impulsbilanz der Mischung keinen Beitrag bei der Linearisierung.

Nach einer Rücktransformation des Volumenintegrals in die Momentankonfiguration erhält man für die Linearisierung der schwachen Form der Impulsbilanz der Mischung bezüglich der Festkörperverschiebung:

$$\begin{aligned} D_u g_1 \cdot \Delta \mathbf{u}_S = \int_{\mathcal{B}} \frac{1}{J_S} \left[\mathbf{C} \frac{1}{2} (\text{grad } \Delta \mathbf{u}_S + \text{grad}^T \Delta \mathbf{u}_S) + (\text{grad } \Delta \mathbf{u}_S) \boldsymbol{\tau}_E^S \right] \cdot \text{grad } \delta \mathbf{u}_S \, dv \\ + \int_{\mathcal{B}} p (\text{grad}^T \Delta \mathbf{u}_S - \text{div } \Delta \mathbf{u}_S \mathbf{I}) \cdot \text{grad } \delta \mathbf{u}_S \, dv . \end{aligned} \quad (13.33)$$

Die erste Zeile enthält die materielle und die geometrische Nichtlinearität des Extraspannungsterms. Die zweite Zeile beinhaltet die geometrische Nichtlinearität des Gradienten der Testfunktion sowie der Volumenintegration beim Druckterm.

Linearisierung bezüglich des Porenfluiddrucks

Aus der Linearisierung der Impulsbilanz der Mischung bezüglich des Porenfluiddrucks erhält man

$$\boxed{D_p g_1 \cdot \Delta p = - \int_{\mathcal{B}} \Delta p \operatorname{div} \delta \mathbf{u}_S \, dv} \quad (13.34)$$

Linearisierung bezüglich der Verschiebungsgeschwindigkeit

Da die Impulsbilanz keine von $\mathbf{v}_S$ abhängigen Terme enthält, verschwindet die Linearisierung der Impulsbilanz bezüglich der Verschiebungsgeschwindigkeit:

$$\boxed{D_v g_1 \cdot \Delta \mathbf{v}_S = \mathbf{0}} \quad (13.35)$$

13.5.3 Linearisierung der schwachen Form der Volumenbilanz

Linearisierung bezüglich der Festkörperdeformation

Zur Berücksichtigung der Deformationsabhängigkeit in der Volumenbilanz wird auch hier zunächst eine Transformation des Volumenintegrals in die Referenzkonfiguration durchgeführt. Damit ergeben sich deformationsunabhängige Integralgrenzen. Der Geschwindigkeitsdivergenzterm in g_2 kann dann in der Form

$$\int_{\mathcal{B}} \operatorname{div} \mathbf{v}_S \, \delta p \, dv = \int_{\mathcal{B}_0} J_S (\mathbf{I} \cdot \operatorname{grad} \mathbf{v}_S) \, \delta p \, dV_S$$

dargestellt werden. Eine analoge Integraltransformation kann auch für den Porenfluiddruckterm in der Volumenbilanz vorgenommen werden. Im Weiteren wird hier angenommen, dass die Permeabilität k^F deformationsunabhängig ist und damit keinen zusätzlichen Beitrag bei der Linearisierung liefert.

Zur konkreten Ausführung der Linearisierung der Integranden (nach der Integraltransformation) werden die räumlichen Gradientenoperatoren „grad“ mit den entsprechenden Transportbeziehungen in materielle Gradientenoperatoren „Grad_S“ überführt und der entstehende Ausdruck mit Hilfe der Kettenregel linearisiert. Anschließend wird das Ergebnis wieder in die Momentankonfiguration zurücktransformiert. Das Oberflächenintegral in der Volumenbilanz wird als deformationsunabhängig betrachtet. Deshalb liefert dieser Term keinen Beitrag bei der Linearisierung.

Als Ergebnis der Linearisierung der schwachen Form der Volumenbilanz der Mischung bezüglich der Festkörperdeformation erhält man:

$$\begin{aligned} D_u g_2 \cdot \Delta \mathbf{u}_S &= \int_{\mathcal{B}} \left(\operatorname{div} \Delta \mathbf{u}_S \operatorname{div} \mathbf{v}_S - \operatorname{grad}^T \Delta \mathbf{u}_S \cdot \operatorname{grad} \mathbf{v}_S \right) \delta p \, dv \\ &\quad - \int_{\mathcal{B}} \left[\frac{k^F}{\gamma^{FR}} \left(\operatorname{grad} \Delta \mathbf{u}_S + \operatorname{grad}^T \Delta \mathbf{u}_S - \operatorname{div} \Delta \mathbf{u}_S \mathbf{I} \right) \operatorname{grad} p \right] \cdot \operatorname{grad} \delta p \, dv. \end{aligned} \quad (13.36)$$

Die erste Zeile enthält die geometrische Nichtlinearität des Geschwindigkeitsdivergenzterms in der schwachen Form der Volumenbilanz. In der zweiten Zeile sind die geometrischen Nichtlinearitäten des Porenfluiddruckterms aufgrund der Volumenintegration und der Deformationsabhängigkeit der Gradientenoperatoren enthalten.

Linearisierung bezüglich des Porenfluiddrucks

Aus der Linearisierung der Volumenbilanz bezüglich des Porenfluiddrucks ergibt sich entsprechend (13.29)

$$D_p g_2 \cdot \Delta p = \int_{\mathcal{B}} \frac{k^F}{\gamma^{FR}} \operatorname{grad} \Delta p \cdot \operatorname{grad} \delta p \, dv. \quad (13.37)$$

Linearisierung bezüglich der Verschiebungsgeschwindigkeit

Die Linearisierung der Volumenbilanz der Mischung bezüglich der Verschiebungsgeschwindigkeit liefert mit (13.30) den Ausdruck

$$D_v g_2 \cdot \Delta \mathbf{v}_S = \int_{\mathcal{B}} \operatorname{div} \Delta \mathbf{v}_S \delta p \, dv. \quad (13.38)$$

13.6 Ortsdiskretisierung der Bilanzgleichungen

Zur numerischen Umsetzung der beschreibenden Gleichungen müssen die schwachen Formen der Bilanzgleichungen in Ort und Zeit diskretisiert werden. Selbst bei quasi-statischer Belastung erhält man aufgrund der möglichen Fluiddurchströmung des Festkörperskeletts ein zeitabhängiges Anfangs-Randwertproblem. Zunächst wird eine Ortsdiskretisierung der Gleichungen mit Hilfe der Finite-Elemente-Methode (FEM) durchgeführt. Hierbei wird eine Zerlegung des betrachteten Gebietes in n_e Elemente vorgenommen. Anschließend wird das entstehende Gleichungssystem mit Hilfe eines geeigneten Zeitintegrationsverfahrens in der Zeit diskretisiert.

Im Weiteren wird ein isoparametrisches Konzept zur Diskretisierung der Festkörperverschiebungsfreiheitsgrade verwendet, siehe z. B. *Zienkiewicz & Taylor* [11]. Damit erhält man für den Verschiebungsvektor in einem Element

$$\mathbf{u}_S \rightarrow \mathbf{u}^e = \sum_{j=1}^{k_u} N^j \mathbf{u}^j . \quad (13.39)$$

Hierbei stellen N^j die Ansatzfunktionen am Knoten j eines Elements e dar, welches k_u Verschiebungsknoten (Knoten, an denen Verschiebungsfreiheitsgrade vorliegen) besitzt. Die Ortsabhängigkeit des zu diskretisierenden Verschiebungsfeldes $\mathbf{u}_S$ ist in der Ansatzfunktion N^j enthalten, während die diskreten Knotenvariablen $\mathbf{u}^j$ die Zeitabhängigkeit des Verschiebungsvektors $\mathbf{u}_S$ enthalten. In analoger Weise wird die Verschiebungsgeschwindigkeit $\mathbf{v}_S$ mit den zeitlichen Ableitungen $\mathbf{v}^j$ der Knotenverschiebungen $\mathbf{u}^j$ diskretisiert. Die Ortsdiskretisierung der Inkremente der Festkörperverschiebung $\Delta \mathbf{u}_S$ und der Verschiebungsgeschwindigkeit $\Delta \mathbf{v}_S$ erfolgt in analoger Weise zur Diskretisierung der korrespondierenden Größen $\mathbf{u}_S$ bzw. $\mathbf{v}_S$.

Die Ortsdiskretisierung des Drucks p (sowie des Druckinkrements Δp) wird durch

$$p \rightarrow p^e = \sum_{j=1}^{k_p} M^j p^j \quad (13.40)$$

vorgenommen. Die Ordnung der Ansatzfunktion M^j kann sich von der Ordnung der Ansatzfunktion N^j für die Verschiebung unterscheiden.

Die Gesamtspannungen in der Impulsbilanz berechnen sich aus einem Extraspannungsanteil und einem Anteil aus dem Porenfluiddruck. Die Extraspannungen ergeben sich durch Gradientenbildung aus Deformationsgrößen der Festkörperverschiebung. Dadurch reduziert sich die Ordnung des resultierenden Ausdrucks um eins. Damit insgesamt gleiche Ordnungen im diskretisierten Gesamtspannungsausdruck vorliegen, wird die Ordnung der Ansatzfunktion M^j für den Druck um eins niedriger gewählt als die Ansatzfunktion N^j für die Verschiebung. Da die Volumenbilanz den Gradienten des Porenfluiddrucks enthält, muss die Ansatzfunktion für den Druck mindestens linear sein. Die Verschiebungen werden somit quadratisch angesetzt, siehe *Diebels & Ehlers* [5].

Bei Verwendung eines *Standard-Galerkin*-Verfahrens stimmen die Ansatz- und Testfunktionen zur Approximation korrespondierender Feldgrößen überein. Damit erhält man für die Ortsdiskretisierung des virtuellen Verschiebungs- und Druckfeldes:

$$\delta \mathbf{u}_S \rightarrow \delta \mathbf{u}^e = \sum_{i=1}^{k_u} N^i \delta \mathbf{u}^i , \quad \delta p \rightarrow \delta p^e = \sum_{i=1}^{k_p} M^i \delta p^i . \quad (13.41)$$

Durch die Ortsdiskretisierung des Gleichungssystems $\mathbf{G}$ (13.20) der schwachen Formen der Bilanzgleichungen (13.17), (13.18) ergibt sich nach Assemblierung der entstehenden lokalen Elementanteile ein globales FEM-Gleichungssystem. Fasst man die Verschiebungs- und Druckfreiheitsgrade aller Elementknoten im Vektor $\mathbf{y}$ der Unbekannten zusammen, so erhält man ein ortsdiskretes (jedoch zeitkontinuierliches) Gleichungssystem in der Form

$$\mathbf{F}(\mathbf{y}, \mathbf{y}', t) = \mathbf{M}(\mathbf{y}) \mathbf{y}' + \mathbf{k}(\mathbf{y}) - \mathbf{f}(t) = \mathbf{0} . \quad (13.42)$$

Hierbei bezeichnet $\mathbf{M}$ eine verallgemeinerte Massen- bzw. Systemmatrix, $\mathbf{k}$ einen verallgemeinerten Steifigkeitsvektor und $\mathbf{f}$ einen verallgemeinerten Kraftvektor. Der Vektor $\mathbf{y}' = d\mathbf{y}/dt$ enthält die totale Zeitableitung der Knotenfreiheitsgrade.

Da der Porenfluidruck eine algebraische Zwangsbedingung zur Erfüllung der Inkompressibilitätsforderung darstellt, tritt keine zeitliche Ableitung des Porenfluidrucks in den Gleichungen auf. Aus diesem Grund ist $\mathbf{M}$ singulär. Deshalb handelt es sich bei (13.42) um ein differential-algebraisches Gleichungssystem (DAE) erster Ordnung in der Zeit.

13.7 Zeitdiskretisierung

Eine Zeitdiskretisierung des FEM-Gleichungssystems (13.42) führt auf ein System nichtlinearer Gleichungen, das in jedem Zeitschritt eines Zeitintegrationsalgorithmus mittels eines *Newton*-Verfahrens iterativ gelöst werden muss.

Zur Lösung eines differential-algebraischen Gleichungssystems ist ein implizites Zeitintegrationsverfahren notwendig. Die einfachste implizite Zeitdiskretisierung lässt sich mit Hilfe des impliziten *Euler*-Verfahrens vornehmen. Hierbei wird die Geschwindigkeit am neu zu berechnenden Zeitpunkt t_{n+1} durch den Differenzenquotienten

$$\mathbf{y}'_{n+1} = \frac{\mathbf{y}_{n+1} - \mathbf{y}_n}{\Delta t} \quad (13.43)$$

approximiert, wobei $\Delta t = t_{n+1} - t_n$ das Zeitinkrement ist.

Die Zeitdiskretisierung des FEM-Gleichungssystems (13.42) mit dem impliziten *Euler*-Verfahren an einem Zeitpunkt t_{n+1} führt auf

$$\bar{\mathbf{F}}_{n+1}(\mathbf{y}_{n+1}, \mathbf{y}'_{n+1}(\mathbf{y}_{n+1}), t_{n+1}) = \mathbf{0} . \quad (13.44)$$

Hieraus lässt sich der Vektor $\mathbf{y}_{n+1}$ der unbekannten Freiheitsgrade zum Zeitpunkt t_{n+1} bestimmen. Die Lösung des nichtlinearen Gleichungssystems ist nur iterativ möglich. Die hierzu notwendige Tangente beim *Newton*-Verfahren in einem Iterationsschritt findet man mit (13.43) zu

$$D\bar{\mathbf{F}}_{n+1} := \frac{d\bar{\mathbf{F}}_{n+1}}{d\mathbf{y}_{n+1}} = \frac{\partial \bar{\mathbf{F}}_{n+1}}{\partial \mathbf{y}_{n+1}} + \frac{1}{\Delta t} \frac{\partial \bar{\mathbf{F}}_{n+1}}{\partial (\mathbf{y}')_{n+1}} . \quad (13.45)$$

Die in der Tangente auftretenden partiellen Ableitungen ergeben sich durch Ortdiskretisierung der in (13.24) zusammengefassten Linearisierungen (13.33) - (13.38) der kontinuierlichen schwachen Formen der Bilanzgleichungen. Die Tangente des Gleichungssystems kann mit der Darstellung (13.42) auch in der Form

$$D\bar{\mathbf{F}}_{n+1} = \left(\frac{\partial \mathbf{M}_{n+1}}{\partial \mathbf{y}_{n+1}} (\mathbf{y}')_{n+1} + \frac{\partial \mathbf{k}_{n+1}}{\partial \mathbf{y}_{n+1}} \right) + \frac{1}{\Delta t} \left(\mathbf{M}_{n+1} \right) \quad (13.46)$$

dargestellt werden. Das vorgestellte Vorgehen setzt die Vertauschbarkeit von Linearisierung und Assemblierung der globalen FEM-Tangente voraus. Dies ist beim hier betrachteten nichtlinear elastischen Zweiphasenmodell immer möglich, da die Linearisierung der

kontinuierlichen Bilanzgleichungen mit der Linearisierung der FEM-Gleichungen übereinstimmt. Bei Problemstellungen mit inneren Variablen (Plastizität, Viskoelastizität) ist eine Linearisierung eines auf Elementebene arbeitenden Algorithmus notwendig. Dies wird dann auch als „algorithmisch konsistente Linearisierung“ bezeichnet.

13.8 Globaler Lösungsalgorithmus

Die Lösung des nichtlinearen Gleichungssystems $\bar{\mathbf{F}}_{n+1} = \mathbf{0}$ wird mit einem *Newton*-Verfahren iterativ berechnet. In einem *Newton*-Iterationsschritt k zur Berechnung der Lösung zum Zeitpunkt t_{n+1} muss das Gleichungssystem

$$D\bar{\mathbf{F}}_{n+1}^k \Delta \mathbf{y}_{n+1}^k = -\bar{\mathbf{F}}_{n+1}^k \quad (13.47)$$

gelöst werden. Anschließend erfolgt eine Aufdatierung des Lösungsvektors

$$\mathbf{y}_{n+1}^{k+1} = \mathbf{y}_{n+1}^k + \Delta \mathbf{y}_{n+1}^k . \quad (13.48)$$

Diese Iteration wird solange wiederholt, bis die Residuumsnorm eine vorgegebene Toleranz unterschreitet. Dann wird der nächste Zeitschritt ausgeführt. Hierbei dient die Lösung im vorigen Zeitschritt als Startwert für die *Newton*-Iteration im neuen Zeitschritt. Die konsistente Linearisierung aller in das Gesamtproblem eingehenden Gleichungen garantiert quadratische Konvergenz der Lösung beim *Newton*-Verfahren.

13.9 Zusammenfassung

Auf der Basis der Theorie Poröser Medien wurden die beschreibenden Bilanzgleichungen für ein fluidgesättigtes Festkörperskelett aus materiell inkompressiblem Matrixmaterial angegeben. Zur Modellierung des mechanischen Verhaltens bei finiten elastischen Deformationen (insbesondere zur Berücksichtigung des sogenannten Kompressionspunkts poröser Materialien) wurde ein modifiziertes *Neo-Hooke*-Modell für poröse Festkörper verwendet. Die effiziente numerische Behandlung des gekoppelten Festkörper-Fluid-Problems erfordert eine konsistente Linearisierung der beschreibenden Gleichungen. Hierzu wurden die schwachen Formulierungen der Bilanzgleichungen bezüglich der unbekannten Feldgrößen linearisiert. Durch Diskretisierung dieser linearisierten Gleichungen lässt sich die globale Tangente des Berechnungsproblems ermitteln. Diese globale Tangente ist notwendig zur Formulierung eines effizienten Lösungsalgorithmus im Rahmen einer Finite-Elemente-Berechnung.

Literaturverzeichnis

- [1] R. M. Bowen. Toward a thermodynamics and mechanics of mixtures. *Arch. Rational Mech. Anal.*, 24:370–403, 1967.

- [2] R. M. Bowen. Incompressible porous media models by use of the theory of mixtures. *Int. J. Engng. Sci.*, 18:1129–1148, 1980.
- [3] R. de Boer. *Vektor- und Tensorrechnung für Ingenieure*. Springer-Verlag, Berlin, 1982.
- [4] R. de Boer and W. Ehlers. *Theorie der Mehrkomponentenkontinua mit Anwendung auf bodenmechanische Probleme, Teil I*. Band 40 aus Forschungsberichte aus dem Fachbereich Bauwesen. Universität-GH-Essen, Essen, 1986.
- [5] S. Diebels and W. Ehlers. Dynamic analysis of a fully saturated porous medium accounting for geometrical and material non-linearities. *Int. J. Numer. Methods Eng.*, 39:81–97, 1996.
- [6] W. Ehlers. *Poröse Medien – ein kontinuumsmechanisches Modell auf der Basis der Mischungstheorie*. Band 47 aus Forschungsberichte aus dem Fachbereich Bauwesen. Universität-GH-Essen, Essen, 1989.
- [7] W. Ehlers. Constitutive equations for granular materials in geomechanical context. In K. Hutter, editor, *Continuum Mechanics in Environmental Sciences and Geophysics*, volume 337 of *CISM Courses and Lectures*, pages 313 – 402. Springer-Verlag, Wien, 1993.
- [8] W. Ehlers and G. Eipper. Finite elastic deformations in liquid-saturated and empty porous solids. *Transport in Porous Media*, 34:179–191, 1999.
- [9] G. Eipper. *Theorie und Numerik finiter elastischer Deformationen in fluidgesättigten porösen Medien*. Dissertationen aus dem Institut für Mechanik im Bauwesen, Nr. II-1. Universität Stuttgart, 1998.
- [10] P. Wriggers. *Konsistente Linearisierung in der Kontinuumsmechanik und ihre Anwendung auf die Finite-Elemente-Methode*. Technischer Bericht F 88/4, Forschungs- und Seminarberichte aus dem Bereich Mechanik. Universität Hannover, 1988.
- [11] O. C. Zienkiewicz and R. L. Taylor. *The Finite Element Method – Basic Formulation and Linear Problems*. Band 1, McGraw-Hill, London, 1989.

14

Error-controlled Runge-Kutta time integration in elastoplasticity and viscoplasticity

P. Ellsiepen und S. Diebels
Institut für Mechanik (Bauwesen)
Universität Stuttgart
D-70550 Stuttgart

Abstract. *We first develop an abstract setting that allows us to handle a large class of plasticity models (with or without yield criterion, with or without hardening) in a single- or multi-phase context. Afterwards, we apply error-controlled Runge-Kutta time integration methods to the abstract plasticity formulation. Due to the abstract formulation, a change in the model is very easy to implement without the need to change the complete algorithm. The efficiency of the algorithms is demonstrated by means of two numerical examples, also giving comparisons in terms of accuracy and computational effort with respect to the Backward Euler scheme which is usually applied in computational plasticity.*

14.1 Introduction

The numerical simulation of continuum mechanical problems has become a widely accepted method to get insight into complex problems that arise in technical and engineering applications. The complexity of the overall task is usually split into three main aspects, namely experiments, theory and numerical methods. These aspects are strongly linked, e. g. the comparison of numerical results and experimental data may lead to changes in the theory. In this article, we concentrate on improved numerical methods in terms of accuracy and efficiency to simulate phenomena based on equations derived from a continuum mechanical setting, i. e. a phenomenological theory. Especially, we put the focus on adaptive time integration of models in computational plasticity.

In Section 14.2, we describe the continuum mechanical setting for two selected models with practical relevance in engineering applications. First, we consider a standard model for solid materials, e. g. metals or other crystalline materials. Second, we present a model for two-phase frictional materials, e. g. fluid-saturated geomaterials like sand or clay. Both models are then embedded into an abstract setting which is the basis for the finite element formulation presented in Section 14.4 and the adaptive time integration algorithms described in Section 14.5. The resulting non-linear systems with large sparse *Jacobians*

are solved by a two-stage *Newton* algorithm described in Section 14.6. On the element level (local *Newton* iteration), the efficiency of the algorithm is determined by the stress computation described in Section 14.7. Finally, in Section 14.8, we compare the error-controlled *Runge-Kutta* methods with the standard backward *Euler* method in terms of accuracy and computational effort on the basis of numerical examples.

14.2 Continuum mechanical setting

14.2.1 Solid materials

Solid materials – especially metals – play an important role in technical applications. Furthermore, in engineering problems, the elastic and plastic behaviour of solids is of interest. As an example, we use a standard material model for metals, i.e. a plasticity model with yield surface including isotropic and kinematic hardening. For simplicity, we assume all processes to proceed at a constant temperature and restrict ourselves to a small strain formulation. However, the algorithms discussed in Section 14.5 may also be applied in a large strain context (see e.g. *Hartmann* [22]).

With the displacement field $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$, the linearized *Green* strain tensor $\mathbf{E}$ is the symmetric part of the displacement gradient:

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2}(\text{grad } \mathbf{u} + \text{grad}^T \mathbf{u}) = \text{sym grad } \mathbf{u}. \quad (14.1)$$

The static equilibrium condition derived from the balance of momentum reads

$$\text{div } \mathbf{T} + \rho \mathbf{b} = \mathbf{0}, \quad (14.2)$$

where $\mathbf{T}$ is the *Cauchy* stress tensor determined by constitutive equations (see below), ρ is the mass density, $\mathbf{b}$ is the volume force (e.g. gravity), and the operator $\text{div}(\cdot)$ is the divergence related to $\text{grad}(\cdot)$.

The weak formulation needed for the finite element method (FEM) results from multiplying (14.2) by a test function $\delta \mathbf{u}$ and integrating over the two- or three-dimensional domain Ω occupied by the body. Integration by parts yields

$$\int_{\Omega} \text{grad } \delta \mathbf{u} \cdot \mathbf{T} \, dv = \int_{\Omega} \delta \mathbf{u} \cdot \rho \mathbf{b} \, dv + \int_{\Gamma_t} \delta \mathbf{u} \cdot \bar{\mathbf{t}} \, da. \quad (14.3)$$

The boundary $\Gamma = \Gamma_u \cup \Gamma_t$ of Ω is split into the displacement boundary Γ_u and the traction boundary Γ_t as usual. The traction boundary condition $\mathbf{T} \mathbf{n} = \bar{\mathbf{t}}$ on Γ_t is part of the weak formulation (natural or *Neumann* b.c.) while the displacement boundary condition $\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}}$ on Γ_u has to be fulfilled by the ansatz functions (essential or *Dirichlet* b.c.).

In the following we briefly state the constitutive model taken from *Hartmann, Lührs & Haupt* [23] featuring isotropic and kinematic hardening plasticity for metals with a rate-independent (elastoplastic) or rate-dependent (viscoplastic) flow rule. We slightly modified the model by only including one *Armstrong-Frederick* term in the kinematic hardening

law and by including isotropic linear hardening in addition to exponential hardening, cf. e. g. *Barthold, Schmidt & Stein* [2].

The strain tensor is split into elastic and plastic parts, $\mathbf{E} = \mathbf{E}_e + \mathbf{E}_p$, where the elastic part $\mathbf{E}_e$ is responsible for the stresses governed by *Hooke's* law (linear elasticity):

$$\mathbf{T} = \overset{4}{\mathbf{C}} (\mathbf{E} - \mathbf{E}_p) = 2 \mu \mathbf{E}_e + \lambda (\text{tr } \mathbf{E}_e) \mathbf{I} \quad \text{with} \quad \overset{4}{\mathbf{C}} = 2 \mu \overset{4}{\mathbf{I}} + \lambda \mathbf{I} \otimes \mathbf{I}. \quad (14.4)$$

The *von Mises* type yield criterion

$$F(\mathbf{T}, \mathbf{X}, k) = \|(\mathbf{T} - \mathbf{X})^D\| - \sqrt{\frac{2}{3}} k \quad (14.5)$$

determines whether the behaviour is elastic ($F < 0$ or $F = 0$ and $\dot{F} < 0$) or plastic¹ ($F \geq 0$). Therein, the deviator of a second order tensor $\mathbf{A}$ is denoted by $\mathbf{A}^D = \mathbf{A} - \frac{1}{3}(\text{tr } \mathbf{A}) \mathbf{I}$ and the norm by $\|\mathbf{A}\| = \sqrt{\mathbf{A} \cdot \mathbf{A}}$. The back-stress tensor $\mathbf{X}$ represents kinematic hardening whereas the stress-like scalar variable k describes isotropic hardening.

Remark: The *von Mises* yield criterion can equivalently be written as

$$\tilde{F}(\mathbf{T}, \mathbf{X}, k) = J_2 - \frac{1}{3} k^2, \quad (14.6)$$

where $J_2 = \frac{1}{2} \|(\mathbf{T} - \mathbf{X})^D\|^2$ is the second deviatoric invariant of the tensor $\mathbf{T} - \mathbf{X}$, giving rise for the notion of J_2 -plasticity. $\square$

In the case of elastic behaviour ($F < 0$) or unloading ($F = 0$ and $\dot{F} < 0$), the plastic strain $\mathbf{E}_p$ is kept constant and the stress tensor $\mathbf{T}$ is solely determined by the algebraic equation (14.4).

In the case of plastic behaviour ($F \geq 0$), a system of differential-algebraic equations has to be solved in order to determine the stress tensor $\mathbf{T}$ together with the internal variables $\mathbf{E}_p$, $\mathbf{X}$, s and Λ . An associated flow rule determines the rate of the plastic strain $\mathbf{E}_p$ and an *Armstrong-Frederick* type kinematic hardening law is used for the evolution of the back-stress tensor $\mathbf{X}$:

$$\dot{\mathbf{E}}_p = \Lambda \mathbf{N}, \quad \mathbf{N} = \frac{\partial F}{\partial \mathbf{T}} = \frac{(\mathbf{T} - \mathbf{X})^D}{\|(\mathbf{T} - \mathbf{X})^D\|}, \quad (14.7)$$

$$\dot{\mathbf{X}} = c \dot{\mathbf{E}}_p - b \dot{s} \mathbf{X}, \quad (14.8)$$

$$\dot{s} = \Lambda \sqrt{\frac{2}{3}}. \quad (14.9)$$

The plastic arclength s (equivalent plastic strain) drives the stress-like hardening variable k via an isotropic hardening law $\dot{k} = (h + a(k_\infty - k + h s)) \dot{s}$, including linear as well as

¹The case $F > 0$ is only valid in the viscoplastic case. In the elastoplastic case, the stress state is required to remain on the yield surface: $F = 0$.

exponential hardening. This can be integrated in closed form proceeding from $s(0) = 0$ and $k(0) = k_0$:

$$k(s) = \underbrace{h s}_{\text{linear}} + \underbrace{k_\infty + (k_0 - k_\infty) e^{-a s}}_{\text{exponential hardening}}. \quad (14.10)$$

The system is closed by an additional equation in order to determine the plastic multiplier Λ . In the elastoplastic case, the stress state is required to remain on the yield surface:

$$0 = F(\mathbf{T}, \mathbf{X}, k). \quad (14.11)$$

In the viscoplastic case, Λ is explicitly given by an overstress model (Perzyna [28])

$$0 = \Lambda - \frac{1}{\eta} \left\langle \frac{F(\mathbf{T}, \mathbf{X}, k)}{\sigma_0} \right\rangle^r, \quad (14.12)$$

where the *Föppel* symbol (Macauley brackets) is defined by $\langle x \rangle = (x + |x|)/2$. Following Hartmann, Lühns & Haupt [23], both the elastoplastic and the viscoplastic case can be included in the single equation

$$0 = \Lambda \eta \sigma_0^r - \langle F(\mathbf{T}, \mathbf{X}, k) \rangle^r, \quad (14.13)$$

which is the result of multiplying (14.12) by $\eta \sigma_0^r$. Therein, the elastoplastic limit (14.11) is represented by $\eta = 0$ whenever r is positive. This is rather natural due to the fact that elastoplasticity (also called rate-independent plasticity or inviscid plasticity) is the limiting case of viscoplasticity for vanishing viscosity, or, alternatively, for infinitely slow processes, cf. e. g. Lubliner [25], Haupt, Kamlah & Tsakmakis [24].

Summarising, the evolution in the plastic regime is described by the differential-algebraic system (14.4), (14.7)-(14.9) and (14.13) in the variables $\mathbf{T}$, $\mathbf{E}_p$, $\mathbf{X}$, s , and Λ with $k = k(s)$ given by (14.10).

14.2.2 Two-phase materials

Two-phase materials – e. g. fluid-saturated porous materials such as sand or clay – play an important role in geotechnical applications. Here, we briefly present a two-phase model based on the Theory of Porous Media (TPM). The TPM is a phenomenological continuum theory based on the classical mixture theory (Truesdell & Toupin [32], Bowen [3]) and the concept of volume fractions (Bowen [4], de Boer & Ehlers [7], Ehlers [11, 12, 14]). As before, we restrict ourselves to a purely mechanical model (constant temperature) and a geometrically linear theory. Furthermore, as slowly varying processes are a standard assumption in geotechnical applications, a quasi-static formulation is adopted. The material behaviour of the solid is governed by an ideal plasticity model for frictional materials with a non-associated flow rule (Ehlers [13], Diebels, Ellsiepen & Ehlers [9]).

Note, however, that the described algorithmic approach is neither limited to small deformations nor to ideal plasticity. For example, the finite strain case is discussed in Mahnkopf

[26], while a more complex material model for granular materials like sand – including strain hardening and strain softening – is handled successfully by Müllerschön [27].

The two-phase material consists of a solid skeleton (index S) which is saturated by a pore-fluid (index F). The primary variables describing the deformation of such materials are the solid displacement $\mathbf{u}_S$ and the pore pressure p . As before, the linearized *Green* strain tensor

$$\mathbf{E}_S = \frac{1}{2}(\text{grad } \mathbf{u}_S + \text{grad}^T \mathbf{u}_S) = \mathbf{E}_{Se} + \mathbf{E}_{Sp} \quad (14.14)$$

is split into elastic and plastic parts. A displacement-pressure formulation of the incompressible two-phase model can be derived (*Diebels, Ellsiepen & Ehlers* [10]):

$$\mathbf{0} = \text{div}(\mathbf{T}_E^S - p\mathbf{I}) + (n^S \rho^{SR} + n^F \rho^{FR}) \mathbf{b}, \quad (14.15)$$

$$\text{div}(\mathbf{u}_S)'_S = \text{div} \left[\frac{k^F}{\gamma^{FR}} (\text{grad } p - \rho^{FR} \mathbf{b}) \right]. \quad (14.16)$$

The first equation is the mixture balance of momentum (solid and fluid). The second equation is the volume balance together with the fluid balance of momentum (*Darcy's* law). Therein, $\mathbf{T}_E^S$ is the *Cauchy* extra stress tensor of the solid, n^S and n^F are the volume fractions of solid and fluid, respectively, ρ^{SR} and ρ^{FR} are the effective or real densities, $(\cdot)'_S$ denotes the material time derivative following the solid motion, k^F is the *Darcy* permeability parameter, γ^{FR} is the real weight of the fluid and $\mathbf{b}$ is the volume force acting on both constituents (e.g. gravity). Again, additional constitutive equations are needed for the extra stress $\mathbf{T}_E^S$ of the solid.

With the test function $\delta \mathbf{u}_S$, the weak formulation of the mixture balance of momentum reads

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \text{grad } \delta \mathbf{u}_S \cdot (\mathbf{T}_E^S - p\mathbf{I}) \, dv \\ = \int_{\Omega} \delta \mathbf{u}_S \cdot (n^S \rho^{SR} + n^F \rho^{FR}) \mathbf{b} \, dv + \int_{\Gamma_t} \delta \mathbf{u}_S \cdot \bar{\mathbf{t}} \, da. \end{aligned} \quad (14.17)$$

The boundary $\Gamma = \Gamma_u \cup \Gamma_t$ is split into the displacement boundary Γ_u and the traction boundary Γ_t as before. However, the surface traction $\bar{\mathbf{t}} = (\mathbf{T}_E^S - p\mathbf{I})\mathbf{n}$ now acts on both constituents, i.e. the solid and the fluid phase.

With the test function δp , the weak formulation of the volume balance reads

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \delta p \, \text{div}(\mathbf{u}_S)'_S \, dv + \int_{\Omega} \text{grad } \delta p \cdot \frac{k^F}{\gamma^{FR}} \text{grad } p \, dv \\ = \int_{\Omega} \text{grad } \delta p \cdot \frac{k^F}{\gamma^{FR}} \rho^{FR} \mathbf{b} \, dv - \int_{\Gamma_v} \delta p \, \bar{v} \, da. \end{aligned} \quad (14.18)$$

Similarly, the boundary $\Gamma = \Gamma_p \cup \Gamma_v$ is split into the pressure boundary Γ_p and the flux boundary Γ_v . The boundary term of the volume balance is the volume flux $\bar{v} = n^F \mathbf{w}_F \cdot \mathbf{n}$,

where $n^F \mathbf{w}_F$ is the so-called filter velocity. For a more detailed discussion of the weak formulation see *Diebels & Ehlers* [8].

The elastic behaviour of the solid is again governed by *Hooke's* law:

$$\mathbf{T}_E^S = \mathbf{C}^4 (\mathbf{E}_S - \mathbf{E}_{Sp}). \quad (14.19)$$

The plastic behaviour of frictional materials like sand, clay or rock shows plastic deformations even under hydrostatic stress conditions which is completely different from the behaviour of crystalline structures. Therefore, a yield surface suitable for these materials must possess a closed shape in the principal stress space. The single-surface yield criterion proposed by *Ehlers* [13]

$$F(\mathbf{T}_E^S) = \sqrt{\mathbb{I}_D \left(1 + \gamma \mathbb{III}_D / \mathbb{I}_D^{3/2} \right)^m + \frac{1}{2} \alpha \mathbb{I}^2 + \delta^2 \mathbb{I}^4 + \beta \mathbb{I} + \varepsilon \mathbb{I}^2 - \kappa} \quad (14.20)$$

depends on the first invariant $\mathbb{I}$ as well as on the second and third deviatoric invariants $\mathbb{I}_D$ and $\mathbb{III}_D$ of the stress tensor $\mathbf{T}_E^S$. The invariants of a tensor $\mathbf{A}$ are defined as follows:

$$\mathbb{I} = \text{tr } \mathbf{A}, \quad \mathbb{I}_D = \frac{1}{2} \mathbf{A}^D \cdot \mathbf{A}^D, \quad \mathbb{III}_D = \det \mathbf{A}^D. \quad (14.21)$$

The seven parameters $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \varepsilon, \kappa$ and m used in (14.20) allow to model the closed shape of the yield surface in the principal stress space as well as the typical triangular shape with rounded corners in the deviatoric plane (π -plane).

In the elastic regime ($F < 0$ or $F = 0$ and $\dot{F} < 0$), the stress tensor $\mathbf{T}_E^S$ is determined by the algebraic equation (14.19), while in the plastic regime² ($F \geq 0$) it must be determined together with the internal variables $\mathbf{E}_{Sp}$ and Λ through the solution of a system of differential-algebraic equations consisting of (14.19) and the flow rule

$$(\mathbf{E}_{Sp})'_S = \Lambda \frac{\partial G}{\partial \mathbf{T}_E^S}. \quad (14.22)$$

The (visco-)plastic potential proposed by *Diebels, Ellsiepen & Ehlers* [9]

$$G(\mathbf{T}_E^S) = \sqrt{\mathbb{I}_D + \frac{1}{2} \alpha \mathbb{I}^2 + \delta^2 \mathbb{I}^4 + \beta \mathbb{I} + \varepsilon \mathbb{I}^2 + g(\mathbb{I})} \quad (14.23)$$

is used to determine the plastic flow direction in (14.22). It assumes coaxial flow in the deviatoric plane while in the hydrostatic plane the function g allows to fit the dilatancy angle of the non-associated flow rule according to experiments.

The system is closed by an additional equation in order to determine the plastic multiplier Λ . As in (14.13) above, we use a single equation to represent both the elastoplastic ($\eta = 0$) and the viscoplastic ($\eta > 0$) case:

$$0 = \Lambda \eta \sigma_0^r - \langle F(\mathbf{T}_E^S) \rangle^r. \quad (14.24)$$

²The case $F > 0$ is only valid in the viscoplastic case. In the elastoplastic case, the stress state is required to remain on the yield surface: $F = 0$.

14.3 Abstract continuum setting

As we want to present the time integration algorithms independent of the special model under consideration, we first develop an abstract setting that allows to handle a large class of plasticity models (with or without yield criterion, with or without hardening) in a single- or multi-phase context.

Suppose the primary variables are collected into a vector $\mathbf{u}$ and the internal variables into a vector $\mathbf{q}$. Then, an abstract weak formulation for the primary variables $\mathbf{u}$ in some trial space $\mathcal{S}(t)$ with test functions $\delta\mathbf{u}$ from some test space $\mathcal{T}$ reads:

$$\text{Find } \mathbf{u} \in \mathcal{S}(t) \quad \text{s. t.} \quad \mathcal{G}(\delta\mathbf{u}, \mathbf{u}; \mathbf{q}) = 0 \quad \forall \delta\mathbf{u} \in \mathcal{T}, \quad t \in [0, T]. \quad (14.25)$$

The dependence of the non-linear functional $\mathcal{G}$ on $\mathbf{q}$ is noted after a semicolon since the internal variables enter the weak formulation only in an indirect way via the stress operator below. An abstract material model including plasticity can be stated as follows:

$$\begin{aligned} \text{Strain:} \quad \mathbf{E} &= \Phi_{\mathbf{E}}(\mathbf{u}), \\ \text{Stress:} \quad \mathbf{T} &= \Phi_{\mathbf{T}}(\mathbf{E}, \mathbf{q}), \\ \text{Evolution:} \quad \mathbf{A}\dot{\mathbf{q}} &= \Phi_{\mathbf{q}}(\mathbf{T}, \mathbf{q}). \end{aligned} \quad (14.26)$$

Therein, $\Phi_{\mathbf{E}}$ is the strain operator, $\Phi_{\mathbf{T}}$ is the stress operator, and $\Phi_{\mathbf{q}}$ is the operator describing the right hand side of all evolution equations. Since the evolution equations may include differential and algebraic equations, the matrix $\mathbf{A}$ is introduced. In the case of all evolution equations being ordinary differential equations, the matrix $\mathbf{A}$ is simply the identity matrix $\mathbf{I}$. Otherwise, $\mathbf{A}$ may be singular and thus takes into account algebraic equations constraining the evolution.

In case of a plasticity model based on a yield criterion $F(\mathbf{T}, \mathbf{q})$, the evolution equations are only active in the plastic regime ($F \geq 0$). The *Heaviside* function $H(x)$ may then be formally used as an indicator function ($H(x) = 0$ for $x < 0$ and $H(x) = 1$ for $x \geq 0$). Thus, the right hand side of (14.26)₃ reads

$$\Phi_{\mathbf{q}}(\mathbf{T}, \mathbf{q}) = H(F(\mathbf{T}, \mathbf{q})) \tilde{\Phi}_{\mathbf{q}}(\mathbf{T}, \mathbf{q}), \quad (14.27)$$

where $F(\mathbf{T}, \mathbf{q})$ is the yield function and $\tilde{\Phi}_{\mathbf{q}}$ describes the evolution in the plastic regime.

Identification for the solid material model

In the case of the plasticity model for solid materials discussed in Section 14.2.1, the primary and internal variables are:

$$\begin{aligned} \text{Primary variables:} \quad \mathbf{u} &= \mathbf{u}, \\ \text{Internal variables:} \quad \mathbf{q} &= (\mathbf{E}_p, \mathbf{X}, s, \Lambda). \end{aligned} \quad (14.28)$$

Thus, by comparison of (14.3) and (14.25), the abstract operator of the weak formulation reads:

$$\mathcal{G}(\delta \mathbf{u}, \mathbf{u}; \mathbf{q}) \equiv \int_{\Omega} \operatorname{grad} \delta \mathbf{u} \cdot \mathbf{T} \, dv - \int_{\Omega} \delta \mathbf{u} \cdot \rho \mathbf{b} \, dv - \int_{\Gamma_t} \delta \mathbf{u} \cdot \bar{\mathbf{t}} \, da, \quad (14.29)$$

where the only dependence on $\mathbf{q}$ is in the stress tensor $\mathbf{T}$. The abstract operators of the plasticity model can be identified as follows:

$$\begin{aligned} \text{Strain:} \quad \Phi_E(\mathbf{u}) &= \frac{1}{2}(\operatorname{grad} \mathbf{u} + \operatorname{grad}^T \mathbf{u}), \\ \text{Stress:} \quad \Phi_T(\mathbf{E}, \mathbf{q}) &= \mathbf{C}(\mathbf{E} - \mathbf{E}_p), \\ \text{Evolution:} \quad \mathbf{A} &= \operatorname{blockdiag}(\mathbf{I}, \mathbf{I}, 1, 0), \\ \tilde{\Phi}_q(\mathbf{T}, \mathbf{q}) &= \begin{bmatrix} \Lambda \mathbf{N} \\ \Lambda [c \mathbf{N} - \sqrt{\frac{2}{3}} b \mathbf{X}] \\ \Lambda \sqrt{\frac{2}{3}} \\ \Lambda \eta \sigma_0^r - F(\mathbf{T}, \mathbf{X}, k)^r \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (14.30)$$

Identification for the two-phase frictional material model

In the case of the plasticity model for two-phase frictional materials discussed in Section 14.2.2, the primary and internal variables are:

$$\begin{aligned} \text{Primary variables:} \quad \mathbf{u} &= (\mathbf{u}_S, p), \\ \text{Internal variables:} \quad \mathbf{q} &= (\mathbf{E}_{Sp}, \Lambda). \end{aligned} \quad (14.31)$$

For the sake of a uniform notation, the only time derivative $(\cdot)'_S$ in the two-phase model with respect to the motion of the solid skeleton is denoted by the superscript dot $(\cdot)'$ in the following. Thus, by comparison of (14.17), (14.18) and (14.25), the abstract operator of the weak formulation reads:

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(\delta \mathbf{u}, \mathbf{u}; \mathbf{q}) &\equiv \mathcal{G}([\delta \mathbf{u}_S, \delta p], [\mathbf{u}_S, p]; [\mathbf{E}_{Sp}, \Lambda]) \\ &\equiv \int_{\Omega} \operatorname{grad} \delta \mathbf{u}_S \cdot (\mathbf{T}_E^S - p \mathbf{I}) \, dv \\ &\quad - \int_{\Omega} \delta \mathbf{u}_S \cdot (n^S \rho^{SR} + n^F \rho^{FR}) \mathbf{b} \, dv - \int_{\Gamma_t} \delta \mathbf{u}_S \cdot \bar{\mathbf{t}} \, da \\ &\quad + \int_{\Omega} \delta p \operatorname{div} \dot{\mathbf{u}}_S \, dv + \int_{\Omega} \operatorname{grad} \delta p \cdot \frac{k^F}{\gamma^{FR}} \operatorname{grad} p \, dv \\ &\quad - \int_{\Omega} \operatorname{grad} \delta p \cdot \frac{k^F}{\gamma^{FR}} \rho^{FR} \mathbf{b} \, dv + \int_{\Gamma_v} \delta p \bar{v} \, da. \end{aligned} \quad (14.32)$$

Note that the above sum (14.32) of the weak formulations (14.17) and (14.18) is equivalent to the separate equations since the test functions $\delta \mathbf{u}_S$ and δp are linearly independent.

Omitting the sub- and superscripts at the strain tensor $\mathbf{E}_S$ and at the extra stress tensor $\mathbf{T}_E^S$, the abstract operators (14.26) in the case of the two-phase frictional material model read:

$$\begin{aligned} \text{Strain:} \quad \Phi_E(\mathbf{u}) &= \frac{1}{2}(\text{grad } \mathbf{u}_S + \text{grad}^T \mathbf{u}_S), \\ \text{Stress:} \quad \Phi_T(\mathbf{E}, \mathbf{q}) &= \overset{4}{\mathbf{C}}(\mathbf{E} - \mathbf{E}_{Sp}), \\ \text{Evolution:} \quad \mathbf{A} &= \text{blockdiag}(\mathbf{I}, 0), \\ \tilde{\Phi}_q(\mathbf{T}, \mathbf{q}) &= \begin{bmatrix} \Lambda \frac{\partial G}{\partial \mathbf{T}} \\ \Lambda \eta \sigma_0^r - F(\mathbf{T})^r \end{bmatrix}. \end{aligned} \tag{14.33}$$

14.4 Spatial discretization

For the spatial discretization, we apply the finite element method (FEM) in the sense of the method of lines (MOL), i. e. a fixed spatial mesh is used at all times $t \in [0, T]$. Space adaptive procedures in context of multi-phase materials are discussed elsewhere (see e. g. Ehlers & Ellsiepen [16], Ellsiepen [17]).

According to the FEM, the trial space $\mathcal{S}(t)$ and the test space $\mathcal{T}$ in the weak formulation (14.25) are approximated by their discrete counterparts $\mathcal{S}^h(t)$ and $\mathcal{T}^h$, respectively. Thus, on a mesh with n_u nodes, the discrete trial and test functions can be defined as follows:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}^h(\mathbf{x}, t) &= \bar{\mathbf{u}}^h(\mathbf{x}, t) + \sum_{j=1}^{n_u} \mathbf{N}_j(\mathbf{x}) \mathbf{u}_j(t) = \bar{\mathbf{u}}^h(\mathbf{x}, t) + \mathbf{N}(\mathbf{x}) \mathbf{u}(t), \\ \delta \mathbf{u}^h(\mathbf{x}) &= \sum_{i=1}^{n_u} \mathbf{N}_i(\mathbf{x}) \delta \mathbf{u}_i = \mathbf{N}(\mathbf{x}) \delta \mathbf{u}, \end{aligned} \tag{14.34}$$

where $\bar{\mathbf{u}}^h$ represents the approximated *Dirichlet* boundary conditions, and h is a discretization parameter, e. g. the largest element diameter in the mesh. Furthermore, let $n_d = \dim \mathbf{u}$ denote the number of primary variables of the continuous problem, i. e. the number of degrees of freedom at each node j . The matrix $\mathbf{N}_j = \text{diag}(\mathbf{N}_j^1, \dots, \mathbf{N}_j^{n_d})$ contains the global basis functions at node j depending on the spatial position $\mathbf{x}$ only. The nodal degrees of freedom $\mathbf{u}_j(t) \in \mathbb{R}^{n_d}$ are still continuous functions of the time t leading to the notion of a spatial semi-discretization. Taking it all together, $\mathbf{N}(\mathbf{x})$ represents the global matrix of all shape functions and $\mathbf{u}(t) \in \mathbb{R}^{n_u \cdot n_d}$ is the vector of all nodal displacements.

In the following, the time-dependence of all functions is silently assumed for simplicity of notation.

Remark: Certainly, in a FE program, the shape functions are implemented on the element level using local coordinates $\boldsymbol{\xi}$. The global basis functions $\mathbf{N}_j$ then result from a transfer to global coordinates $\mathbf{x}$ via the isoparametric mapping. However, as we have in

mind a global formulation of the resulting equations, we formally use the global nodal basis $\{\mathbf{N}_j\}$, skipping details of the FE implementation. $\square$

The abstract FE-*Galerkin* formulation of (14.25) reads:

$$\text{Find } \mathbf{u}^h \in \mathcal{S}^h(t) \quad \text{s. t.} \quad \mathcal{G}^h(\delta \mathbf{u}^h, \mathbf{u}^h; \mathbf{q}^h) = 0 \quad \forall \delta \mathbf{u}^h \in \mathcal{T}^h, \quad t \in [0, T], \quad (14.35)$$

where $\mathcal{S}^h = \bar{\mathbf{u}}^h + \mathcal{T}^h$ is the discrete trial space and $\mathcal{T}^h$ is the discrete test space. The replacement of $\mathcal{G}$ by $\mathcal{G}^h$ denotes the inexact evaluation of the integrals by numerical integration. Therefore, as usual in computational plasticity, the internal variables $\mathbf{q}$ are only computed at the n_q integration points $\mathbf{x}_k$ of the mesh in the sense of a collocation method which results in the replacement of $\mathbf{q}$ by its space-discrete counterpart:

$$\mathbf{q}^h(\mathbf{x}_k, t) \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{q}_k(t), \quad k = 1, \dots, n_q. \quad (14.36)$$

In the following, an abstract setting of the system of equations resulting from the FE-*Galerkin* method (14.35) is derived. To this end, all nodal variables $\mathbf{u}_j$ are collected into a vector $\mathbf{u}$ and all integration point variables $\mathbf{q}_k$ are collected into a vector $\mathbf{q}$ as follows:

$$\begin{aligned} \text{Primary variables (FE nodes):} \quad \mathbf{u} &= (\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_{n_u})^T, \\ \text{Internal variables (integration points):} \quad \mathbf{q} &= (\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_{n_q})^T. \end{aligned} \quad (14.37)$$

At each integration point k ($k = 1, \dots, n_q$) with global position $\mathbf{x}_k$ we obtain a system of $n_i = \dim \mathbf{q}$ differential-algebraic equations in time by inserting the stress and the strain operator of (14.26), Φ_T and Φ_E , into the evolution operator Φ_q :

$$\mathbf{l}_k(t, \mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}; \mathbf{u}) \equiv \left[\mathbf{A} \dot{\mathbf{q}}_k - \Phi_q(\Phi_T(\Phi_E(\mathbf{u}^h), \mathbf{q}_k), \mathbf{q}_k) \right] \Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_k} = \mathbf{0}. \quad (14.38)$$

Furthermore, let $\mathbf{N}_i^d$ denote the vector-valued test function for equation number d at node i ($d = 1, \dots, n_d$, $i = 1, \dots, n_u$). Then the semi-discrete (global) balance equations at node i read:

$$\mathbf{g}_i(t, \mathbf{u}, \dot{\mathbf{u}}; \mathbf{q}) \equiv \begin{bmatrix} \mathcal{G}^h(\mathbf{N}_i^1, \mathbf{u}^h; \mathbf{q}^h) \\ \vdots \\ \mathcal{G}^h(\mathbf{N}_i^{n_d}, \mathbf{u}^h; \mathbf{q}^h) \end{bmatrix} = \mathbf{0}. \quad (14.39)$$

Taking all semi-discrete equations (14.38) and (14.39) together, we are led to an initial-value problem of differential-algebraic equations in time (*Ehlers & Ellsiepen* [15, 16]):

$$\mathbf{F}(t, \mathbf{y}, \dot{\mathbf{y}}) \equiv \begin{bmatrix} \mathbf{g}(t, \mathbf{u}, \dot{\mathbf{u}}; \mathbf{q}) \\ \mathbf{l}(t, \mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}; \mathbf{u}) \end{bmatrix} = \mathbf{0}, \quad \mathbf{y}(0) = \mathbf{y}_0, \quad t \geq 0, \quad (14.40)$$

where $\mathbf{y} = (\mathbf{u}^T, \mathbf{q}^T)^T$ is the global vector of unknowns containing all FE degrees of freedom at the nodes as well as all internal variables at the integration points. The formulation (14.40) is the basis for the adaptive time integration presented in the next section.

14.5 Adaptive time integration

14.5.1 General setting

The numerical integration of stiff ordinary differential equations (ODE) and differential-algebraic equations (DAE) has been an important research topic in numerical analysis during the last decade, see e. g. *Hairer, Lubich & Roche* [20], *Brenan, Campbell & Petzold* [5], *Hairer & Wanner* [21], *Strehmel & Weiner* [31]. Thus, the large number of available methods requires that certain selection criteria be formulated.

- As we want to preserve as much of the structure of the well-known backward *Euler* method usually applied in computational plasticity, we put the focus on one-step implicit *Runge-Kutta* methods.
- In order to minimize the additional cost for time adaptivity, we apply embedded methods which provide an efficient error-control based on two solutions of different order without any additional non-linear system solutions (see Section 14.5.2).
- For large DAE systems of index 1, diagonally implicit methods (DIRK) are well suited, allowing to solve the stage equations in a decoupled way one after the other. Furthermore, the special structure of the non-linear systems in case of the above FE semi-discretization can be exploited during the solution (see Section 14.6).
- As the algebraic constraints – e.g. the static equilibrium equations and the yield surface in case of elastoplasticity – have to be fulfilled at the new time step, stiffly accurate methods are preferred.
- Certain stability criteria are essential in solving DAEs. For short, A-stability (absolute stability for all step sizes) is a must while L-stability is “nice to have”.

The coefficients of a general s -stage embedded DIRK are given in Table 14.1, the so-called *Butcher* array. Stiffly accurate methods are characterized by the additional conditions

c_1	a_{11}		
$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	
c_s	a_{s1}	$\cdots$	a_{ss}
	b_1	$\cdots$	b_s
	$\hat{b}_1$	$\cdots$	$\hat{b}_s$

Table 14.1: *Butcher* Array for Embedded DIRK Methods

$a_{si} = b_i$. The time step algorithm applied to a general DAE initial-value problem (cf. (14.40))

$$\mathbf{F}(t, \mathbf{y}(t), \dot{\mathbf{y}}(t)) = \mathbf{0}, \quad \mathbf{y}(0) = \mathbf{y}_0, \quad t \geq 0 \quad (14.41)$$

α	α
1	$1 - \alpha \quad \alpha$
	$1 - \alpha \quad \alpha$
	$1 - \hat{\alpha} \quad \hat{\alpha}$

$$\alpha = 1 - \frac{1}{2}\sqrt{2}, \quad \hat{\alpha} = 2 - \frac{5}{4}\sqrt{2}.$$
Table 14.2: Embedded SDIRK 2(1) method of *Alexander* (1977), *Ellsiepen* (1999)

starts from a known approximate solution $\mathbf{y}_n \approx \mathbf{y}(t_n)$ at time t_n and a given time step size Δt_n . For each stage $i = 1, \dots, s$, the following quantities are defined:

$$\begin{aligned} \text{Stage time:} \quad T_{ni} &:= t_n + c_i \Delta t_n, \\ \text{Stage solution and increment:} \quad \mathbf{Y}_{ni} &:= \mathbf{y}_n + \Delta \mathbf{Y}_{ni}, \\ \text{Stage derivative:} \quad \dot{\mathbf{Y}}_{ni} &:= \frac{1}{\Delta t_n a_{ii}} [\Delta \mathbf{Y}_{ni} - \bar{\mathbf{Y}}_{ni}], \end{aligned} \quad (14.42)$$

where $\bar{\mathbf{Y}}_{ni} := \Delta t_n \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \dot{\mathbf{Y}}_{nj}$ depends only on already computed quantities. The stage increments $\Delta \mathbf{Y}_{ni}$ are computed one after the other as solutions of the s non-linear systems that arise by inserting the discrete quantities (14.42) into the continuous DAE (14.41):

$$\mathbf{R}_{ni}(\Delta \mathbf{Y}_{ni}) \equiv \mathbf{F} \left(\underbrace{t_n + c_i \Delta t_n}_{T_{ni}}, \underbrace{\mathbf{y}_n + \Delta \mathbf{Y}_{ni}}_{\mathbf{Y}_{ni}}, \underbrace{\frac{1}{\Delta t_n a_{ii}} [\Delta \mathbf{Y}_{ni} - \bar{\mathbf{Y}}_{ni}]}_{\dot{\mathbf{Y}}_{ni}} \right) = \mathbf{0}. \quad (14.43)$$

Afterwards, two solutions of different order can be computed:

$$\begin{aligned} \text{Order } p: \quad \mathbf{y}_{n+1} &= \mathbf{y}_n + \Delta t_n \sum_{i=1}^s b_i \dot{\mathbf{Y}}_{ni}, \\ \text{Order } \hat{p} < p: \quad \hat{\mathbf{y}}_{n+1} &= \mathbf{y}_n + \Delta t_n \sum_{i=1}^s \hat{b}_i \dot{\mathbf{Y}}_{ni}. \end{aligned} \quad (14.44)$$

In the case of a stiffly accurate method the new solution at time $t_{n+1} = t_n + \Delta t_n = T_{ns}$ is given by $\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + \Delta \mathbf{Y}_{ns} = \mathbf{Y}_{ns}$ and need not be recomputed by (14.44)₁.

In the examples presented in Section 14.8 we use three different DIRK methods of orders one to three. First, the well-known backward *Euler* is applied for comparison purposes. As no lower order method can be embedded into a method of order one the implicit *Euler* method is used without step size control. Second, we apply the stiffly accurate and strongly S-stable (and therefore A- and L-stable) 2-stage method of *Alexander* [1] where we have added an S-stable (and therefore A-stable) embedded error estimation method of order one (*Ellsiepen* [17]). The coefficients of this new method are given in Table 14.2. Third, we use the stiffly accurate and strongly S-stable 3-stage method of *Alexander* [1] with an embedded 2-stage error estimator proposed by *Cash* [6]. The coefficients of this method are given in Table 14.3.

γ	γ	$\gamma = 0.43586652150845899947$
c_2	$a_{21} \quad \gamma$	$c_2 = (1 + \gamma)/2 \quad a_{21} = (1 - \gamma)/2$
1	$b_1 \quad b_2 \quad \gamma$	$b_1 = 1 - b_2 - \gamma \quad b_2 = (6\gamma^2 - 20\gamma + 5)/4$
	$b_1 \quad b_2 \quad \gamma$	
	$\hat{b}_1 \quad \hat{b}_2 \quad 0$	$\hat{b}_1 = \gamma/(1 - \gamma) \quad \hat{b}_2 = (2\gamma - 1)/(\gamma - 1)$

Table 14.3: Embedded SDIRK 3(2) method of *Cash* (1979)

14.5.2 Error-control

Once the two solutions (14.44) have been computed, an embedded error estimation can be computed (for details, see e. g. *Hairer & Wanner* [21]):

$$ERR \approx \|\mathbf{y}_{n+1} - \hat{\mathbf{y}}_{n+1}\| = \|\Delta t_n \sum_{j=1}^s (b_j - \hat{b}_j) \dot{\mathbf{Y}}_{ni}\| \quad (14.45)$$

Note that this error estimation is “cheap” in the sense that it does not require any additional non-linear system solution but only a weighted sum of the already computed quantities $\dot{\mathbf{Y}}_{ni}$. This makes *Runge-Kutta* methods with embedded error estimators well suited for large systems of equations.

In case of the system (14.40) under consideration, the norm in (14.45) has to be chosen with care. Due to the different nature of the quantities $\mathbf{u}$ (FE degrees of freedom in the L_2 sense) and $\mathbf{q}$ (collocation variables), the following error measures (“error/tolerance”) are defined (*Ehlers & Ellsiepen* [15, 16], *Ellsiepen* [17]):

$$e_u := \left(\frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \left[\frac{u_{n+1}^k - \hat{u}_{n+1}^k}{\epsilon_r \cdot |\mathbf{u}_n^k| + \epsilon_a} \right]^2 \right)^{1/2}, \quad e_q := \max_{k=1, \dots, Q} \left| \frac{q_{n+1}^k - \hat{q}_{n+1}^k}{\epsilon_r \cdot |\mathbf{q}_n^k| + \epsilon_a} \right|, \quad (14.46)$$

where the superscript index k denotes the vector component, $N = \dim \mathbf{u} = n_d \cdot n_u$ is the total number of FE degrees of freedom, $Q = \dim \mathbf{q} = n_i \cdot n_q$ is the total number of internal variables, and ϵ_r and ϵ_a are relative and absolute tolerances to be specified by the user. In practice, the absolute tolerance is specified component-wise as ϵ_a^k to take into account different orders of magnitude in the variables.

Remark: The above choice of e_q makes sure that the most critical point during the numerical simulation of plasticity problems, namely the onset of plastic deformation, is found reliably by the time-adaptive algorithm. Thus, the time step size is determined by the integration point that contributes most to the total error in the plastic equations. $\square$

A time step is accepted if both error measures e_u and e_q are less than or equal to one,

$$e_y := \max\{e_u, e_q\} \leq 1, \quad (14.47)$$

and rejected otherwise. In both cases a new step size is predicted from the error measures and the order $\hat{p}$ of the embedded method:

$$\Delta t_{\text{new}} := \Delta t_{\text{old}} \cdot \min \left\{ fac_{\text{max}}, \max \left\{ fac_{\text{min}}, fac_{\text{safety}} \cdot e_y^{-1/(\hat{p}+1)} \right\} \right\}. \quad (14.48)$$

Therein, $fac_{\text{safety}} < 1$ is a safety factor that prevents oscillations in the step size, and $fac_{\text{max}} > 1$ and $fac_{\text{min}} < 1$ bound the step size variation.

One crucial point, i. e. the solution of the non-linear systems (14.43), needs to be looked at in more detail since it determines the efficiency of the over-all algorithm. This topic is discussed in the following section.

14.6 Solution of non-linear systems

In order to solve (14.43) by *Newton's* method, the *Jacobian* matrix

$$\mathbf{J}_{ni} = \mathbf{R}'_{ni}(\Delta \mathbf{Y}_{ni}) = \frac{d\mathbf{R}_{ni}}{d\Delta \mathbf{Y}_{ni}} = \left. \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{y}} \right|_{\mathbf{z}} + \alpha_{ni} \left. \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \bar{\mathbf{y}}} \right|_{\mathbf{z}} \quad (14.49)$$

is needed, where $\mathbf{z} = (T_{ni}, \mathbf{Y}_{ni}, \dot{\mathbf{Y}}_{ni})$ represents the current set of arguments and $\alpha_{ni} = 1/(\Delta t_n a_{ii})$ is the stage factor due to the rule of chain. In case of the system (14.40) resulting from the FE semi-discretization of the plasticity problems at hand, the non-linear system (14.43) reads

$$\begin{bmatrix} \mathbf{G}(\mathbf{U}, \mathbf{Q}) \\ \mathbf{L}(\mathbf{U}, \mathbf{Q}) \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} \mathbf{g}(T_{ni}, \mathbf{u}_n + \mathbf{U}, \alpha_{ni}[\mathbf{U} - \bar{\mathbf{U}}_{ni}]; \mathbf{q}_n + \mathbf{Q}) \\ \mathbf{l}(T_{ni}, \mathbf{q}_n + \mathbf{Q}, \alpha_{ni}[\mathbf{Q} - \bar{\mathbf{Q}}_{ni}]; \mathbf{u}_n + \mathbf{U}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}, \quad (14.50)$$

where the abbreviations $\mathbf{U} := \Delta \mathbf{U}_{ni}$ and $\mathbf{Q} := \Delta \mathbf{Q}_{ni}$ have been introduced and the indices n and i at $\mathbf{G}$ and $\mathbf{L}$ have been dropped in order to simplify notation. The *Jacobian* of (14.50) reads:

$$\mathbf{J}_{ni} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{U}} & \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{Q}} \\ \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{U}} & \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{Q}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial \mathbf{u}} + \alpha_{ni} \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial \bar{\mathbf{u}}} & \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial \mathbf{q}} \\ \frac{\partial \mathbf{l}}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial \mathbf{l}}{\partial \mathbf{q}} + \alpha_{ni} \frac{\partial \mathbf{l}}{\partial \bar{\mathbf{q}}} \end{bmatrix}. \quad (14.51)$$

The upper left block matrix represents a usual sparse FEM matrix combining the generalized stiffness matrix $\mathbf{K} = \partial \mathbf{g} / \partial \mathbf{u}$ and the generalized mass matrix $\mathbf{M} = \partial \mathbf{g} / \partial \dot{\mathbf{u}}$ which result from the linearization of the time-discrete nodal *Galerkin* equations (14.39). Furthermore, the lower right block matrix is sub-structured into n_q diagonal blocks representing the linearization of the time-discrete systems of evolution equations (14.38) at the integration points $k = 1, \dots, n_q$. From these observations, it would be disastrous to solve the linear system with matrix (14.51) directly since the sparse structure would be completely destroyed. Therefore, a suitable block-wise solution is needed in order to retain the sparse

structure of the FE system and solve the integration point equations in a decoupled fashion.

The *Newton block Gauss Seidel* method (NBGS) is the block *Gauss Seidel* iterative method applied to the linear system with matrix (14.51) and right hand side (14.50) embedded into a *Newton* iteration applied to (14.50), cf. *Wittekind* [34], *Fritzen* [19]. Conversely, the block *Gauss Seidel Newton* method (BGSN) also reported there consists in first applying a non-linear block *Gauss Seidel* iteration to the system (14.50) and solving the non-linear block-equations $\mathbf{G}(\mathbf{U}, \mathbf{Q})$ with fixed $\mathbf{Q}$ and $\mathbf{L}(\mathbf{U}, \mathbf{Q})$ with fixed $\mathbf{U}$, respectively, by *Newton's* method. Thus, only the diagonal blocks of (14.51) are used in the linearization. Both methods converge when the step size Δt_n is “small enough” (*Fritzen* [19]). However, in the presence of strong non-linearities, e. g. in plastic localization problems, this step size restriction often rules out the advantage of being able to choose “large” time steps due to the absolute stability of the chosen diagonally implicit methods.

Another possibility is to apply a generalization of the BGSN method, where in the linearization of the global $\mathbf{G}$ -equations the dependence on the local $\mathbf{L}$ -equations is considered (*Ehlers & Ellsiepen* [16], *Diebels, Ellsiepen & Ehlers* [10]). In case of the backward *Euler* method applied to elastoplasticity this approach is known as the “algorithmically consistent linearization” (*Simo & Taylor* [30]). It can also be regarded as a two-stage *Newton* method (*Hartmann* [22], *Ellsiepen & Hartmann* [18]). One step of the iteration consists of the following substeps where the iteration index is dropped for the sake of clarity:

1. solve the local integration point systems $\mathbf{L}(\mathbf{U}, \mathbf{Q})$ for $\mathbf{Q}$ with fixed global variables $\mathbf{U}$,
2. compute the *Jacobian* of the global system $\mathbf{G}(\mathbf{U}, \mathbf{Q}(\mathbf{U}))$,
3. solve the global sparse linear FEM system for $\Delta \mathbf{U}$ and
4. update the global variables $\mathbf{U}$.

In the first substep of the iteration, the local equations at the integration points are solved for $\mathbf{Q}$ by *Newton's* method with given fixed $\mathbf{U}$:

$$\mathbf{L}(\mathbf{U}, \mathbf{Q}) = \mathbf{0} \quad \Longrightarrow \quad \mathbf{Q} = \mathbf{Q}(\mathbf{U}). \quad (14.52)$$

Certainly, this is done in a decoupled fashion at each integration point $k = 1, \dots, n_q$. From the implicit function theorem, $\mathbf{Q}$ is locally a function of $\mathbf{U}$ provided (14.52) is solved exactly. Then the differential of $\mathbf{L}(\mathbf{U}, \mathbf{Q}(\mathbf{U}))$ with respect to $\mathbf{U}$ is zero, too, and we get the differential of the implicit function $\mathbf{Q}(\mathbf{U})$ as a result:

$$\frac{d\mathbf{L}}{d\mathbf{U}} = \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{U}} + \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{Q}} \frac{d\mathbf{Q}}{d\mathbf{U}} = \mathbf{0} \quad \Longrightarrow \quad \frac{d\mathbf{Q}}{d\mathbf{U}} = - \left[\frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{Q}} \right]^{-1} \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{U}}. \quad (14.53)$$

Again, this is computed locally at each integration point by solving a small linear system with dimension $n_i = \dim \mathbf{q}$, i. e. the number of internal variables. The second substep consists in computing the total differential of the global equation $\mathbf{G}(\mathbf{U}, \mathbf{Q}(\mathbf{U}))$ with respect to $\mathbf{U}$, i. e. the “algorithmically consistent linearization”:

$$\mathbf{J}_{\mathbf{G}} := \frac{d\mathbf{G}}{d\mathbf{U}} = \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{U}} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{Q}} \frac{d\mathbf{Q}}{d\mathbf{U}} = \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{U}} - \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{Q}} \left[\frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{Q}} \right]^{-1} \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{U}}. \quad (14.54)$$

Remark: The first term in (14.54) represents the stiffness matrix resulting from the linearization of the elastic material law (plus the linearization of the volume balance in case of the two-phase model discussed in Section 14.2.2). The second term is only “active” in the plastic regime and takes into account the non-linearity that results from the plasticity model after spatial and temporal discretization. $\square$

In the third substep of the iteration, the sparse linear system

$$\mathbf{J}_{\mathbf{G}} \Delta \mathbf{U} = \mathbf{G}(\mathbf{U}, \mathbf{Q}(\mathbf{U})) \quad (14.55)$$

is solved for the global *Newton* increment $\Delta \mathbf{U}$. Finally, the global solution vector is updated:

$$\mathbf{U} \leftarrow \mathbf{U} - \Delta \mathbf{U}. \quad (14.56)$$

14.7 Stress computation

The principle of the overall algorithm has been described in the previous section based on the abstract setting developed before. However, in a finite element code, a stress computation algorithm is required that returns the stress tensor $\mathbf{T}$ as well as the algorithmically consistent stress tangent $d\mathbf{T}/d\mathbf{E}$ whenever the strain tensor $\mathbf{E}$ and preceding values of the internal variables are given. This algorithm is applied for every integration point $\mathbf{x}_k$ of the numerical integration and thus includes the solution of the local system (14.38) as well as the computation of the contribution to the global *Jacobian* that is made by the current integration point.

As usual, a trial stress state is computed from (14.26)₂ with the current strain tensor $\mathbf{E}$ but with the internal variables $\mathbf{q}$ taken from the last time step or *Runge Kutta* stage. In case of a plasticity model with yield surface, the next step is to check if the computation is elastic ($F(\mathbf{T}, \dots) < 0$). In this case, the stress algorithm is completed and the result is the trial stress together with the elastic tangent. The internal variables are kept constant due to the zero right hand side of the evolution equations (see (14.27)).

Otherwise, the material behaviour is plastic and the stress can only be determined together with the time-discrete evolution of the internal variables. To this end, we focus on the stress term in the weak formulation (14.29) or (14.32). Let e be a given element with n_q^e integration points and let $\mathbf{u}$ be the discrete displacement field inside the element (the superscript h is skipped at $\mathbf{u}^h$ and $\mathbf{q}^h$ for simplicity). Keeping in mind that – after the solution of the non-linear system at the integration point under consideration – the internal variables $\mathbf{q}$ can be expressed as functions of the displacement, cf. (14.52), the stress term can be written as follows:

$$\mathbf{G}(\mathbf{u}, \mathbf{q}(\mathbf{u})) \equiv \sum_{k=1}^{n_q^e} w_k \left[\text{grad } \delta \mathbf{u} \cdot \mathbf{T}(\mathbf{E}(\mathbf{u}), \mathbf{E}_p(\mathbf{E}(\mathbf{u}))) \right] \Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_k}. \quad (14.57)$$

For the global *Jacobian* (14.54), the total derivative of (14.57) with respect to the dis-

placement $\mathbf{u}$ is needed:

$$\frac{d\mathbf{G}}{d\mathbf{u}} = \sum_{k=1}^{n_q^e} w_k \left[\text{grad } \delta \mathbf{u} \cdot \frac{d\mathbf{T}}{d\mathbf{E}} \frac{d\mathbf{E}}{d\mathbf{u}} \right] \Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_k}. \quad (14.58)$$

Therein, the derivative of $\mathbf{E}$ with respect to $\mathbf{u}$ is the usual strain operator in the FEM context, also known as the “**B**-matrix”. Therefore, it remains to compute the derivative of $\mathbf{T}$ with respect to $\mathbf{E}$:

$$\frac{d\mathbf{T}}{d\mathbf{E}} = \frac{\partial \mathbf{T}}{\partial \mathbf{E}} + \frac{\partial \mathbf{T}}{\partial \mathbf{E}_p} \frac{d\mathbf{E}_p}{d\mathbf{E}}. \quad (14.59)$$

The first term represents the material tensor (see (14.30) or (14.33)) while the second term is determined by the local evolution equations. In order to compute this term, the system of local evolution equations has to be recast in terms of strain instead of displacement, giving rise for the notion of a strain-driven algorithm. Therefore, let

$$\mathbf{L}(\mathbf{E}, \mathbf{Q}) \equiv \mathbf{l} \left(T_{ni}, \mathbf{q}_n + \mathbf{Q}, \alpha_{ni}[\mathbf{Q} - \bar{\mathbf{Q}}_{ni}]; \mathbf{E}_n + \mathbf{E} \right) = \mathbf{0} \quad (14.60)$$

be the part of (14.50)₂ that belongs to the current integration point. Again, as this system is assumed to be solved exactly for $\mathbf{Q}$ for any given $\mathbf{E}$ (cf. (14.52)),

$$\mathbf{L}(\mathbf{E}, \mathbf{Q}) = \mathbf{0} \quad \implies \quad \mathbf{Q} = \mathbf{Q}(\mathbf{E}), \quad (14.61)$$

we may apply the method of implicit differentiation to yield:

$$\frac{d\mathbf{L}}{d\mathbf{E}} = \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{E}} + \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{Q}} \frac{d\mathbf{Q}}{d\mathbf{E}} = \mathbf{0} \quad \implies \quad \frac{d\mathbf{Q}}{d\mathbf{E}} = - \left[\frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{Q}} \right]^{-1} \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{E}}. \quad (14.62)$$

The result of this procedure is $d\mathbf{Q}/d\mathbf{E}$ which includes the term $d\mathbf{E}_p/d\mathbf{E}$ needed to complete the consistent stress tangent (14.59). Taking it all together, the global *Jacobian* (14.54) is obtained by the usual summation over all integration points together with the FE assembly of all element contributions.

14.8 Numerical examples

14.8.1 Benchmark problem in *Prandtl-Reuß* plasticity

As a first example we use a well-known benchmark problem that has been defined to test different space adaptive methods (see e. g. *Barthold et al.* [2], *Rannacher & Suttmeier* [29]). Although we use this example in the time integration context based on a fixed spatial discretization, the numerical results of *Wieners* [33] have been used as a reference to cross-check the results obtained with the time-adaptive methods. For details concerning the performed computations we refer the interested reader to *Ellsiepen* [17]. A quadratical disc with a circular hole is investigated under plane strain conditions based on a perfect

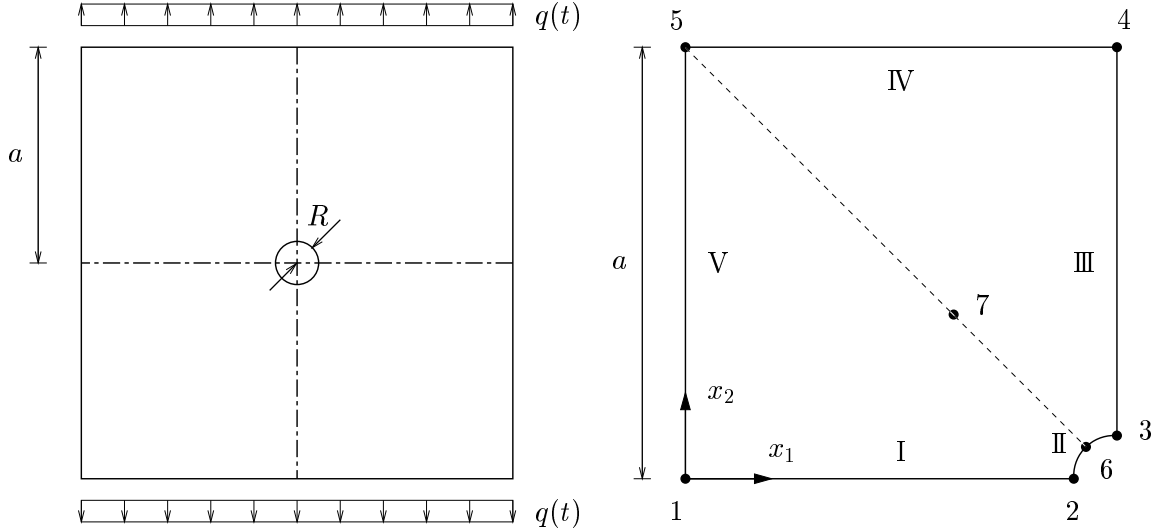


Figure 14.1: Quadratical disc with circular hole under tension; left: sketch of initial boundary-value problem, right: macro nodes and edges of FE discretization

plasticity model, see Figure 14.1. The material parameters are $K = 164206$ [MPa], $G = 80194$ [MPa] and $k = 450$ [MPa], $\eta = 0$, $c = b = 0$ and the geometrical data is defined by $a = 200$ [mm] and $R = 10$ [mm] as well as $p_7 = p_5/3 + 2/3p_6$. The problem is computed using a fixed finite element mesh in order to investigate the behaviour of the three time integration methods, namely the Backward *Euler* method, *Cash's* method and *Ellsiepen's* method. The load is applied linearly as $q(t) = 100$ [MPa/s] $\cdot t$ until the final time $t = 4.5$ [s] is reached. Due to the application of the increasing load a plastic zone evolves starting at the circular hole. Figure 14.2 shows the finite element mesh and the evolution of the plastic zone.

As a reference quantity we choose the value of the horizontal stress at point 7 ($\sigma_{11}(p_7)$, see Figure 14.1 right) which is one of the reference quantities defined in the benchmark. Since there is no analytical solution to this problem we first compute a numerical reference solution by refining the time step-size until we reach convergence in the time domain, i.e. until the reference quantity (here $\sigma_{11}(p_7)$ at $t = 4.5$ [s]) stays constant with respect to the numerical precision when the time step-size is further refined.

Based on the numerical reference solution σ_{11}^{ref} , the relative error at the final load can be computed by $\sigma_{11}^{\text{err}} = |\sigma_{11} - \sigma_{11}^{\text{ref}}|/|\sigma_{11}^{\text{ref}}|$. Figure 14.3 shows the work-precision diagram for the three tested methods. Each symbol in the diagram represents a complete computation with the respective method starting at $t = 0$ [s] and ending at $t = 4.5$ [s]. The results of the Backward *Euler* method have been obtained based on a hand-optimized time step series with 29 time steps (see *Wieners* [33]) which has been bisected three times (resulting in 57, 113 and 225 time steps) leading to a total of four calculations. The results of *Cash's* method and *Ellsiepen's* method are computed adaptively based on the four tolerance pairs $\epsilon_r = \epsilon_a = 10^{-2}, 10^{-3}, 10^{-4}, 10^{-5}$.

From the work-precision diagram (Figure 14.3) it can be clearly seen that the time-adaptive methods are much more efficient than the Backward *Euler* method. Furthermore, the Backward *Euler* results are based on a hand-optimized time step series that has to be constructed in a preprocessing step by various test calculations. In contrast to this, the

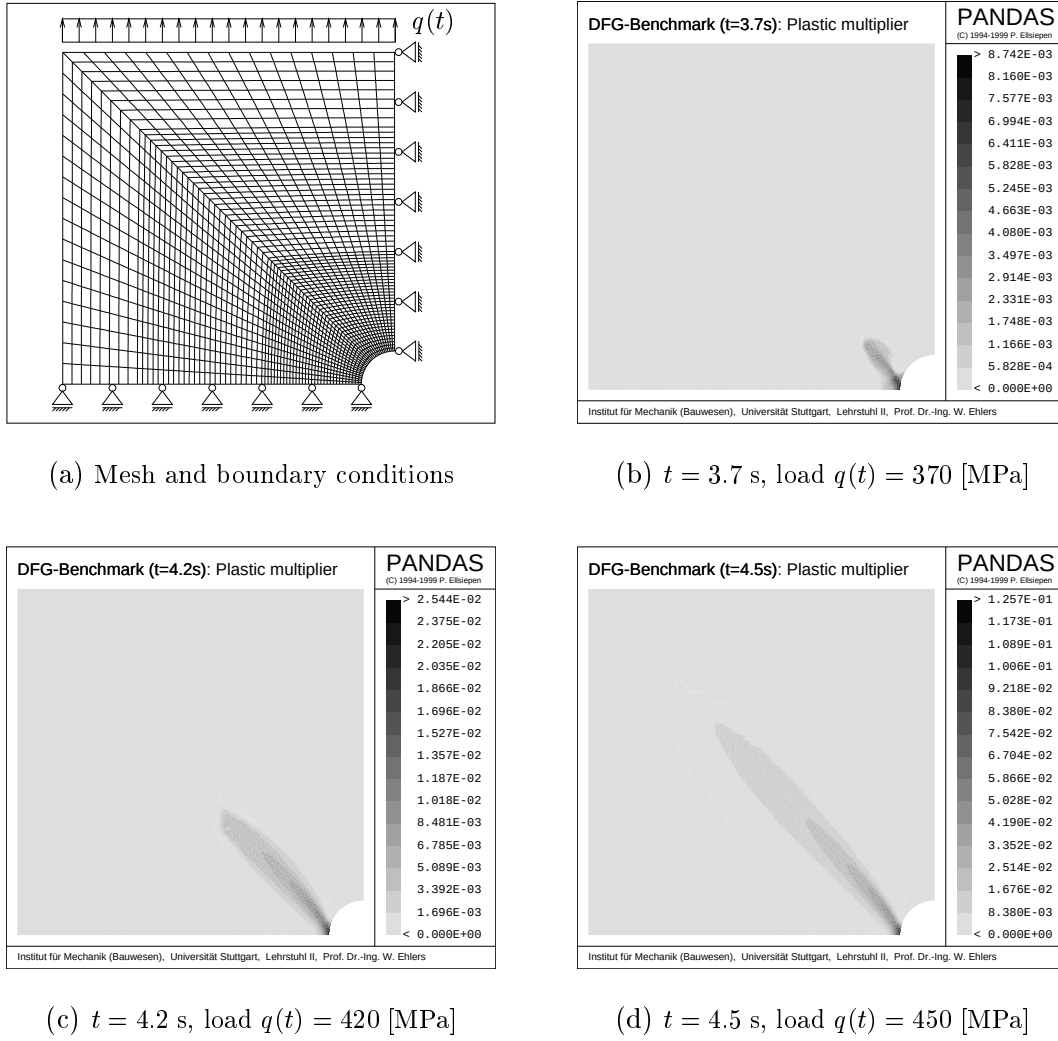


Figure 14.2: Disc with a hole: (a): Mesh of 8-noded quadrilaterals with quadratical shape functions (Q2), 4 *Gaussian* points per element, 6337 nodes, 2048 elements, 12674 degrees of freedom, 40960 internal variables; (b)-(d): evolution of plastic zone (represented by plastic multiplier λ)

adaptive methods can be run based on user-specified tolerances where the critical points during the solution process are automatically detected by the step-size controller. Note also that in this example *Cash*'s method of order three does not pay off, i.e. the same precision is gained with *Ellsiepen*'s method of order two. This is due to the fact that the required smoothness to achieve order three is not available in perfect plasticity problems. As a conclusion, we state that in “numerically hard” problems (i.e. problems with lack of smoothness in the time domain) such as perfect plasticity a lower order method (e.g. *Ellsiepen*'s method of order two with embedded error estimation of order one) is preferable.

A typical step-size behaviour for *Ellsiepen*'s method is depicted in Figure 14.4. At the beginning the material behaviour is elastic and, consequently, the step-size controller chooses the maximal allowed step-size (here $\Delta t_{\max} = 1.0$ [s]). At about $t = 1.7$ [s] the point of

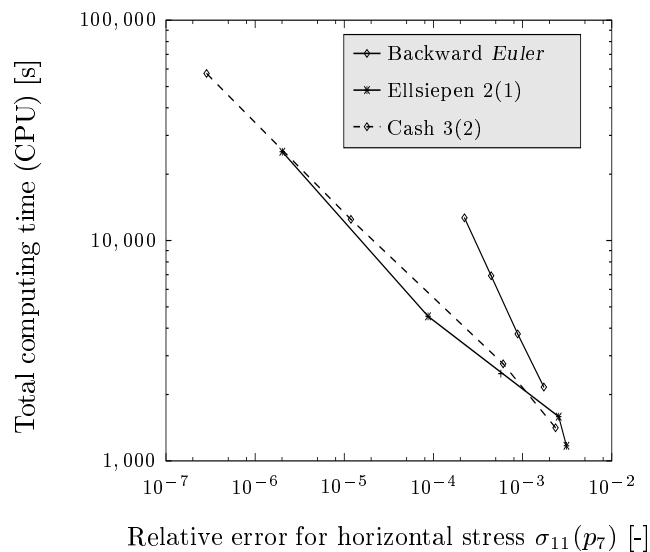
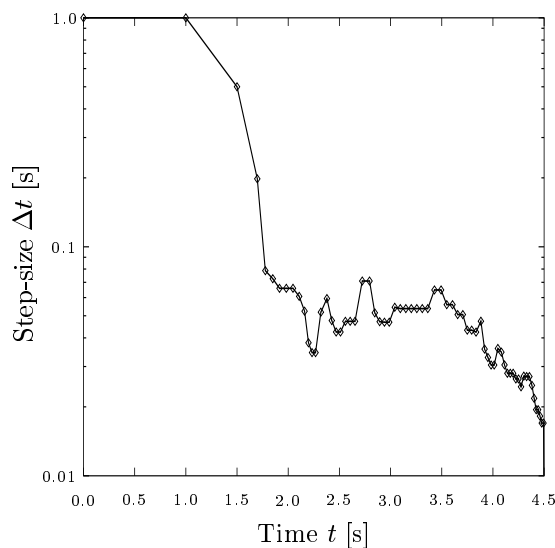


Figure 14.3: Disc with a hole: Work-precision diagram

Figure 14.4: Disc with a hole: Step-size behaviour of *Ellsiepen's* method, $\epsilon_r = \epsilon_a = 10^{-4}$

first yielding (start of plastic material behaviour) is reached which leads to a drastical reduction of the step-size. Then the step-size is nearly kept constant until $t \approx 3.5$ [s] when the plastic zone starts growing rapidly, compare Figure 14.2. As a result of this overall behaviour the time step-size is reduced appropriately by the automatic step-size controller.

14.8.2 Biaxial experiment

A simulation of a biaxial compression test is used as a second example. The lower boundary of the specimen is fixed while at the upper boundary the displacement u_2 is given as a

function of time. The horizontal stress t_1 is applied and then kept constant. From biaxial experiments it is known that, when a critical load is reached, the plastic strain localizes in narrow bands (shear bands). In general, the location and orientation of shear bands are not known. To overcome this difficulty in the numerical simulation, the stiffness of one element is reduced to initiate shear banding as indicated in Figure 14.5.

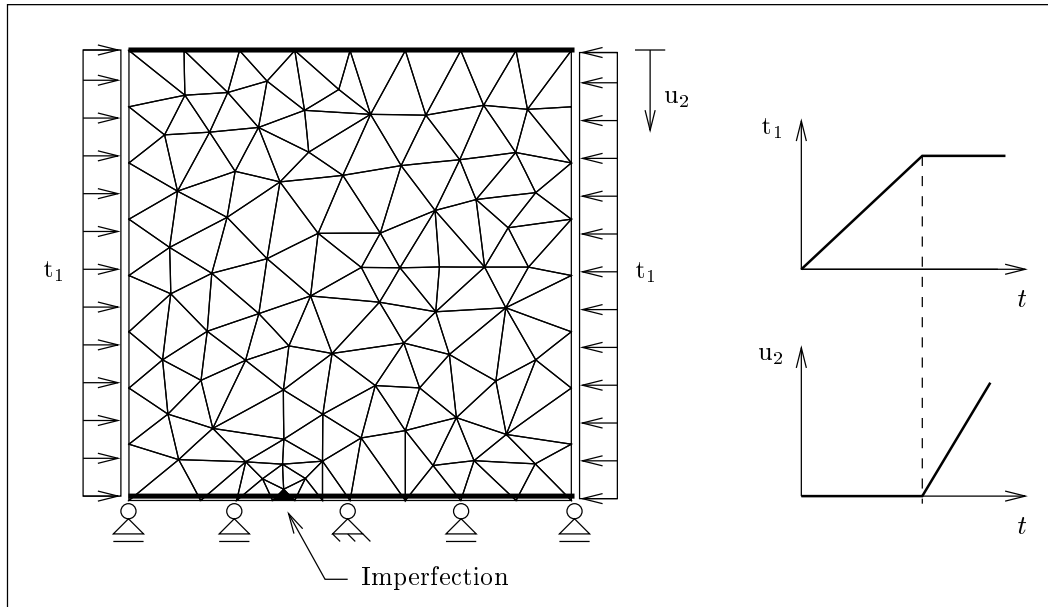


Figure 14.5: Mesh and boundary conditions for the biaxial experiment

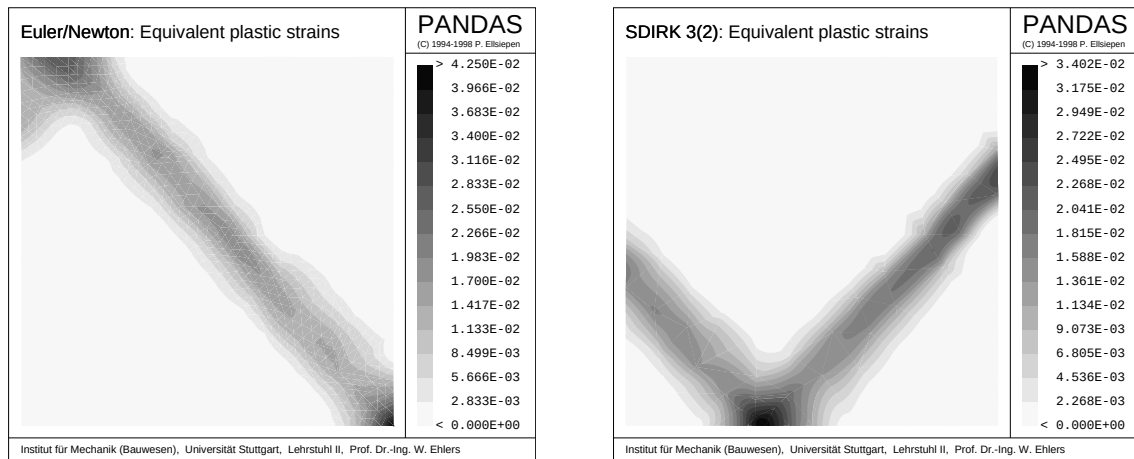


Figure 14.6: Equivalent Plastic Strains; left: Backward *Euler*, right: SDIRK 3(2).

Figure 14.6 shows the results obtained by the Backward *Euler* scheme (left) and by SDIRK 3(2) (*Cash* [6]) of third order with embedded error estimator of second order (right). The step size of the Backward *Euler* scheme is controlled by the number of *Newton* iterations, i. e. by the non-linearity of the problem, while in the *Runge-Kutta* scheme, the embedded error estimator is used for automatic step size control. Due to the imperfection on the lower boundary the shear band should start at the weakened element. Therefore,

the *Runge-Kutta* scheme predicts a physically meaningful result while the solution of the Backward *Euler* scheme is unphysical. The reason is that the non-linearity-control used with the Backward *Euler* scheme does not recognize when plastic yielding starts. Therefore, the time of first yielding is not predicted correctly and, as a consequence, the shear band starts from a wrong position. In contrast, the error-controlled *Runge-Kutta* scheme automatically reduces the step size when the first plastic yielding occurs, and again increases the step size once the shear band is established. The solution depicted in the right figure may also be achieved using the Backward *Euler* scheme when the maximum step size is kept small enough. However, the computational cost is then much higher than that of the error-controlled SDIRK 3(2) – in the present case about a factor of four.

In general, the correct solution as well as the required step sizes are not known in advance. Therefore, error-controlled schemes, e. g. the SDIRK 3(2) applied here, are necessary for reliable and efficient numerical time integration of complex initial boundary-value problems that arise in technical applications.

Bibliography

- [1] R. Alexander. Diagonally implicit Runge-Kutta methods for stiff O.D.E.'s. *SIAM J. Numer. Anal.*, 14:1006–1021, 1977.
- [2] F.-J. Barthold, M. Schmidt, and E. Stein. Error indicators and mesh refinements for finite-element-computations of elastoplastic deformations. *Comp. Mech.*, 22:225–238, 1998.
- [3] R. M. Bowen. Theory of mixtures. In C. Eringen, editor, *Continuum Physics*, volume III, pages 1–127. Academic Press, New York, 1976.
- [4] R. M. Bowen. Incompressible porous media models by use of the theory of mixtures. *Int. J. Engng. Sci.*, 18:1129–1148, 1980.
- [5] K. E. Brenan, S. L. Campbell, and L. R. Petzold. *Numerical Solution of Initial-Value Problems in Differential-Algebraic Equations*. North-Holland, New York, 1989.
- [6] J. R. Cash. Diagonally implicit Runge-Kutta formulae with error estimates. *J. Inst. Maths Applies*, 24:293–301, 1979.
- [7] R. de Boer and W. Ehlers. *Theorie der Mehrkomponentenkontinua mit Anwendung auf bodenmechanische Probleme*, volume 40 of *Forschungsberichte aus dem Fachbereich Bauwesen*. Universität-GH-Essen, Essen, 1986.
- [8] S. Diebels and W. Ehlers. Dynamic analysis of a fully saturated porous medium accounting for geometrical and material non-linearities. *Int. J. Numer. Methods Eng.*, 39:81–97, 1996.
- [9] S. Diebels, P. Ellsiepen, and W. Ehlers. A two-phase model for viscoplastic geomaterials. In D. Besdo and R. Bogaz, editors, *Dynamics of Continua (International Symposium, Physikzentrum Bad Honnef 1996)*, pages 103–112, Aachen, 1998. Shaker Verlag.

- [10] S. Diebels, P. Ellsiepen, and W. Ehlers. Error-controlled Runge-Kutta time integration of a viscoplastic hybrid two-phase model. *Technische Mechanik*, 19(1):19–27, 1999.
- [11] W. Ehlers. *Poröse Medien – ein kontinuumsmechanisches Modell auf der Basis der Mischungstheorie*, volume 47 of *Forschungsberichte aus dem Fachbereich Bauwesen*. Universität-GH-Essen, Essen, 1989.
- [12] W. Ehlers. Constitutive equations for granular materials in geomechanical context. In K. Hutter, editor, *Continuum Mechanics in Environmental Sciences and Geophysics*, volume 337 of *CISM Courses and Lectures*. Springer-Verlag, Wien, 1993.
- [13] W. Ehlers. A single-surface yield function for geomaterials. *Arch. Appl. Mech.*, 65:246–259, 1995.
- [14] W. Ehlers. Grundlegende Konzepte in der Theorie Poröser Medien. *Technische Mechanik*, 16:63–76, 1996.
- [15] W. Ehlers and P. Ellsiepen. Zeitschrittgesteuerte Verfahren bei stark gekoppelten Festkörper-Fluid-Problemen. *Z. angew. Math. Mech.*, 77:S 81–S 82, 1997.
- [16] W. Ehlers and P. Ellsiepen. Adaptive Zeitintegrations-Verfahren für ein elastisch-viskoplastisches Zweiphasenmodell. *Z. angew. Math. Mech.*, 78:S 361–S 362, 1998.
- [17] P. Ellsiepen. *Zeit- und ortsadaptive Verfahren angewandt auf Mehrphasenprobleme poröser Medien*. Dissertationen aus dem Institut für Mechanik im Bauwesen, Nr. II-3. Universität Stuttgart, 1999.
- [18] P. Ellsiepen and S. Hartmann. Remarks on the interpretation of current non-linear finite element analyses as differential-algebraic equations. *Int. J. Numer. Methods Eng.*, 2001. Accepted for publication.
- [19] P. Fritzen. *Numerische Behandlung nichtlinearer Probleme der Elastizitäts- und Plastizitätstheorie*. PhD thesis, Fachbereich Mathematik, Technische Hochschule Darmstadt, Darmstadt, 1997.
- [20] E. Hairer, C. Lubich, and M. Roche. *The Numerical Solution of Differential-Algebraic Equations by Runge-Kutta Methods*. Springer-Verlag, Berlin, 1989.
- [21] E. Hairer and G. Wanner. *Solving Ordinary Differential Equations – Stiff and Differential-Algebraic Problems*, volume 2. Springer-Verlag, Berlin, 1991.
- [22] S. Hartmann. Zur Berechnung inelastischer Festkörper mit der Methode der finiten Elemente. In S. Hartmann, P. Haupt, and V. Ulbricht, editors, *Modellierung und Identifikation*, pages 119–130. Gesamthochschul-Bibliothek Verlag, Kassel, 1998.
- [23] S. Hartmann, G. Lührs, and P. Haupt. An efficient stress algorithm with applications in viscoplasticity and plasticity. *Int. J. Numer. Methods Eng.*, 40:991–1013, 1997.
- [24] P. Haupt, M. Kamlah, and Ch. Tsakmakis. On the thermodynamics of rate-independent plasticity as an asymptotic limit of viscoplasticity for slow processes. In D. Besdo and E. Stein, editors, *Finite Inelastic Deformation – Theory and Applications (IUTAM-Symposium, Hannover 1991)*, pages 107–116, Heidelberg, 1992. Springer-Verlag.

- [25] J. Lubliner. *Plasticity Theory*. Macmillan Publishing Company, New York, 1990.
- [26] D. Mahnkopf. *Lokalisierung fluidgesättigter poröser Festkörper bei finiten elastoplastischen Deformationen*. Dissertationen aus dem Institut für Mechanik im Bauwesen, Nr. II-5. Universität Stuttgart, 2000.
- [27] H. Müllerschön. *Spannungs-Verformungsverhalten granularer Materialien am Beispiel von Berliner Sand*. Dissertationen aus dem Institut für Mechanik im Bauwesen, Nr. II-6. Universität Stuttgart, 2000.
- [28] P. Perzyna. Fundamental problems in viscoplasticity. *Adv. Appl. Mech.*, 9:243–377, 1966.
- [29] R. Rannacher and F.-T. Suttmeier. A posteriori error control in finite element methods via duality techniques: Application to perfect plasticity. *Comp. Mech.*, 21:123–133, 1998.
- [30] J. C. Simo and R. L. Taylor. Consistent tangent operators for rate-independent elastoplasticity. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 48:101–118, 1985.
- [31] K. Strehmel and R. Weiner. *Numerik gewöhnlicher Differentialgleichungen*. Teubner, Stuttgart, 1995.
- [32] C. Truesdell and R. A. Toupin. The classical field theories. In S. Flügge, editor, *Handbuch der Physik*, volume III/1. Springer-Verlag, Berlin, 1960.
- [33] C. Wieners. Multigrid methods for Prandtl-Reuß plasticity. *Numerical Linear Algebra with Applications*, 6:457–478, 1999.
- [34] J. Wittekindt. *Die numerische Lösung von Anfangs-Randwertproblemen zur Beschreibung inelastischen Werkstoffverhaltens*. PhD thesis, Fachbereich Mathematik, Technische Hochschule Darmstadt, Darmstadt, 1991.

15

Untersuchung der Bewegung von FE- und Starrkörperstrukturen in Zentralkraftfeldern mit der „Energy-Momentum“-Methode

B. Göttlicher und K. Schweizerhof
Institut für Mechanik
Universität Karlsruhe
D-76128 Karlsruhe

Zusammenfassung. *Mit der „Energy-Momentum“-Methode (nach Simo et al. [12, 13]) steht ein implizites Zeitintegrationsverfahren mit vollständiger Energie-, Impuls- und Drehimpulserhaltung zur Berechnung starrer und flexibler Strukturen mit transientser Belastung zur Verfügung. Das Verfahren ist auf Grund seiner hohen numerischen Stabilität für Langzeitsimulationen besonders geeignet. Im Beitrag wird speziell untersucht, wie sich das Zeitintegrationsverfahren auf den Algorithmus bei der Berechnung von Strukturen in Gravitationsfeldern auswirkt. Vereinfachend wird dabei von einem stationären, radialsymmetrischen Kraftfeld ausgegangen. Von besonderem Interesse ist hierbei der Nachweis der Energieerhaltung im Algorithmus bei z. B. einem sich im Kraftfeld bewegenden Satelliten. Es wird eine Formulierung vorgestellt, mit der die Gravitationskräfte energieerhaltend für starre und elastische Kontinua darstellbar sind. Die Funktionsfähigkeit der Formulierung, insbesondere die Erfordernis zur Erfassung der räumlichen Verteilung der Gravitationskräfte und Fragen zur Genauigkeit werden an numerischen Beispielen diskutiert.*

15.1 Einführung

Die numerische Analyse der transienten Bewegung von Strukturen in Gravitationsfeldern erfordert eine Zeitintegration über große Zeiträume. Daher erscheinen dissipative Verfahren wenig sinnvoll, insbesondere wenn Impuls- und Drehimpulserhaltung nicht gewährleistet werden können. Unter den aktuell diskutierten Zeitintegrationsverfahren (siehe z. B. Betsch & Steinmann [1, 2] sowie Kuhl & Ramm [10] und Kuhl & Crisfield [9]) soll der Fokus auf Einschritt-Verfahren gelegt werden. Aufgrund ihrer hohen numerischen Stabilität sind für Fragen der Strukturmechanik die implizite Mittelpunktsregel sowie die sogenannte „Energy-Momentum“-Methode [12] besonders geeignet. Mit der Mittelpunktsregel, einem symplektischen Verfahren, kann allerdings im allgemeinen die Energieerhaltung nicht

erfüllt werden. Daher wird die „Energy-Momentum“ Methode weiterverfolgt, die die Eigenschaft besitzt, Impuls, Drehimpuls und Energie exakt im Zeitschritt zu erhalten. Die Methode wurde in *Simo & Tarnow* [12] für flexible Körper vorgeschlagen und für starre Kontinua von *Simo & Wong* [13] erweitert. In Bezug auf Zentralkraftfelder ist zu erwähnen, daß ein Vergleich der „Energy-Momentum“ Methode und der Mittelpunktsregel hinsichtlich der Stabilität in *Gonzales & Simo* [5] für Punktmassen mit Potentialfeldern durchgeführt wurde. In *Greenspan* [6] wurde eine die Erhaltungssätze erfüllende Formulierung entsprechend der „Energy-Momentum“ Methode vorgeschlagen, mit der Punktmassensysteme mit den von ihnen ausgehenden Potentialfeldern berechnet werden können.

Der Fokus dieses Beitrages liegt auf der Formulierung der Anziehungskraft als äußere Kraft auf einen Satelliten in einem Zentralkraftfeld, daß von der Masse des Satelliten nicht beeinflußt wird. Insbesondere wird die Erfordernis und Durchführung der räumlichen Diskretisierung dieser Anziehungskräfte diskutiert.

Der Beitrag gliedert sich wie folgt. In Abschnitt 15.2 wird eine spezielle Definition von Gravitationsfeldern mit Bezug auf das gewählte Zeitintegrationsverfahren vorgestellt. In Abschnitt 15.3 folgt der Nachweis der Erfüllung der Erhaltungssätze. Die räumliche Diskretisierung und die Auswirkungen des Zeitintegrationsverfahrens auf die matrizielle Form werden in Abschnitt 15.4 diskutiert. In Abschnitt 15.5 werden an zwei numerischen Beispielen die Auswirkungen unterschiedlicher Parameter gezeigt und in Abschnitt 15.6 folgt eine Zusammenfassung.

15.2 Definition von Gravitationsfeldern

Ein Schwerfeld wird von einer Punktmasse erzeugt, deren Masse sehr viel größer ist als die des betrachteten Körpers. Daher kann das Zentrum Z des Schwerfeldes als ortsfest angesehen werden, d. h. seine Position wird von den Körpern in seinem Schwerfeld nicht beeinflußt. Bei Kenntnis der Gravitationsbeschleunigung g_{ref} in einer Referenzentfernung r_{ref} ergibt sich der Vektor der Gravitationsbeschleunigung eines Punktes i auf einem Körper zu

$$\mathbf{g}_i = g_{ref} \frac{r_{ref}^2}{r_i^2} \mathbf{e}_i^r \quad \text{mit} \quad \mathbf{e}_i^r = \frac{\mathbf{r}_i}{r_i} \quad (15.1)$$

$$\mathbf{r}_i = \mathbf{X}_Z - \mathbf{X}_i - \mathbf{u}_i = \mathbf{X}_Z - \mathbf{x}_i \quad (15.2)$$

Hierbei sei $\mathbf{X}$ der Ortsvektor in der Referenzkonfiguration und $\mathbf{x} = \mathbf{X} + \mathbf{u}$ der Ortsvektor in der aktuellen Konfiguration. $\mathbf{u}$ sei der Verschiebungsvektor und der Betrag der Referenzentfernung sei $r_i = |\mathbf{r}_i|$.

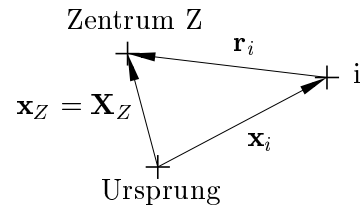


Abbildung 15.1: Definition der Vektoren

Die Gravitation führt mit der Dichte ϱ auf eine Volumenkraft der Form $\mathbf{p} = \varrho \mathbf{g}_{em}$, wobei mit $\mathbf{g}_{em}$ der im Zeitschritt als konstant angenommene Vektor der Gravitationsbeschleunigung bezeichnet wird. Für $\mathbf{g}_{em}$ muß im Zusammenhang mit der „Energy-Momentum“ Methode ein spezieller Ansatz eingeführt werden.

Die schwache Form für das zeitdiskretisierte System im Zeitschritt $t_{00} \rightarrow t_{10}$ für das unbelastete System im Schwerfeld ist

$$\delta \Pi = \delta \Pi^M + \delta \Pi^E - \int_V \varrho \mathbf{g}_{em} \cdot \delta \mathbf{u} \, dV = 0. \quad (15.3)$$

$\delta\Pi^M$ und $\delta\Pi^E$ stehen für die virtuellen Arbeiten infolge Massenträgheit und Verzerrungen von elastischen, starren und gekoppelten starr-elastischen Strukturbereichen. In der „Energy-Momentum“ Methode (wie auch in der impliziten Mittelpunktsregel) sind die Geschwindigkeiten und Verschiebungen der Zeitschrittgrenzen verknüpft über

$$\dot{\mathbf{u}}_{05} = \frac{1}{2} (\dot{\mathbf{u}}_{00} + \dot{\mathbf{u}}_{10}) = \frac{\mathbf{u}_{10} - \mathbf{u}_{00}}{\Delta t} \quad (15.4)$$

$\dot{\mathbf{u}}_{05}$ entspricht somit einer im Zeitschritt konstant angenommenen Geschwindigkeit.

Für die Gravitationsbeschleunigung $\mathbf{g}_{em}$ im Zeitschritt wird folgender spezieller Ansatz eingeführt

$$\mathbf{g}_{em} = g_{ref} \frac{r_{ref}^2}{r_{00} r_{10}} \frac{\mathbf{r}_{00} + \mathbf{r}_{10}}{r_{00} + r_{10}} \quad (15.5)$$

D. h. die Beschleunigung ist klar lage- und damit verschiebungsabhängig. Die Qualität und Sinnhaftigkeit des Ansatzes bezüglich der exakten Abbildung stationärer Zentralkraftfelder wird im folgenden bewiesen.

15.3 Betrachtung der Erhaltungssätze

Es wird davon ausgegangen, daß sich für die beiden ersten Anteile ($\delta\Pi^M$ und $\delta\Pi^E$) in (15.3) die Nachweise der Impuls-, Drehimpuls- und Energieerhaltung führen lassen. Dies wurde z. B. in *Simo & Tarnow* [12] für flexible Elemente und in *Simo & Wong* [13] für Starrkörperelemente nachgewiesen. Die Kopplung von Starrkörpern untereinander und von Starrkörpern mit elastischen Körpern mittels holonomer Zwangsbedingungen wurde in *Chen* [4], sowie *Ibrahimbegovic et al.* [8] und *Ibrahimbegovic & Mamouri* [7] diskutiert.

Für den Arbeitsanteil infolge der Gravitationskräfte müssen zum Nachweis der exakten Abbildung des stationären Zentralkraftfeldes folgende Nachweise erbracht werden:

a) Drehimpulserhaltung um das Gravitationszentrum

Mit der Annahme einer konstanten Geschwindigkeit im Zeitschritt kann die Drehimpulserhaltung formuliert werden zu

$$\int_V \mathbf{r}_{05} \times \varrho \mathbf{g}_{em} dV = \mathbf{0} \quad (15.6)$$

mit

$$\mathbf{r}_{05} = \frac{1}{2} (\mathbf{r}_{00} + \mathbf{r}_{10}) \quad (15.7)$$

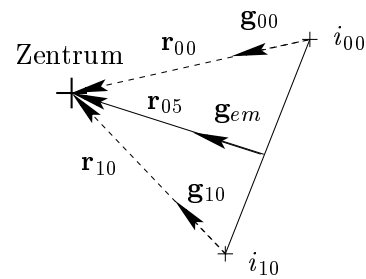


Abbildung 15.2: Vektoren im Schwerfeld

Diese Bedingung ist aufgrund der Parallelität von $\mathbf{g}_{em}$ (15.5) und $\mathbf{r}_{05}$ (15.7) offensichtlich erfüllt. Auch bei einer Formulierung mit der Mittelpunktsregel ist mit derselben Bedingung die Drehimpulserhaltung gegeben.

b) Energieerhaltung

Für die Arbeit der Gravitationskräfte im Zeitschritt gilt

$$W_{ext} = \Delta t \int_V \varrho \mathbf{g}_{em} \cdot \dot{\mathbf{u}}_{05} dV \quad (15.8)$$

Im vorgegebenen Zeitintegrationsverfahren gilt für die Geschwindigkeit $\dot{\mathbf{u}}_{05}$ mit (15.1) und (15.4)

$$\dot{\mathbf{u}}_{05} = \frac{\mathbf{u}_{10} - \mathbf{u}_{00}}{\Delta t} = \frac{\mathbf{r}_{00} - \mathbf{r}_{10}}{\Delta t} \quad (15.9)$$

Hiermit ergibt sich nach Einsetzen von (15.5):

$$\begin{aligned} \mathbf{g}_{em} \cdot \dot{\mathbf{u}}_{05} &= g_{ref} \frac{r_{ref}^2}{\Delta t} \frac{(\mathbf{r}_{00} + \mathbf{r}_{10}) \cdot (\mathbf{r}_{00} - \mathbf{r}_{10})}{(r_{00} + r_{10}) r_{00} r_{10}} \\ &= g_{ref} \frac{r_{ref}^2}{\Delta t} \frac{r_{00}^2 - r_{10}^2}{(r_{00} + r_{10}) r_{00} r_{10}} \\ &= g_{ref} \frac{r_{ref}^2}{\Delta t} \frac{r_{00} - r_{10}}{r_{00} r_{10}} \end{aligned} \quad (15.10)$$

Energieerhaltung im Zeitschritt kann für die schwache Form (15.3) nicht direkt gezeigt werden, da die Anziehungskraft als äußere Kraft auf die Struktur einwirkt. Es muß daher bewiesen werden, daß die Arbeit der Gravitationskräfte W_{ext} im Zeitschritt genauso groß ist wie der Potentialverlust W_a im Schwerefeld.

Mit (15.10) ergibt sich

$$W_{ext} = \int_V \varrho g_{ref} r_{ref}^2 \frac{r_{00} - r_{10}}{r_{00} r_{10}} dV \quad (15.11)$$

Die Potentialänderung im Schwerefeld im Zeitschritt ergibt sich aus der Differenz der Werte zwischen der Ausgangs- und Endlage zu

$$\begin{aligned} W_a &= \int_{B_0} \varrho (\mathbf{g}_{10} \cdot \mathbf{r}_{10} - \mathbf{g}_{00} \cdot \mathbf{r}_{00}) dV \\ &= g_{ref} r_{ref}^2 \int_{B_0} \varrho \left[\frac{\mathbf{e}_{10}^r}{r_{10}^2} \cdot (\mathbf{e}_{10}^r r_{10}) - \frac{\mathbf{e}_{00}^r}{r_{00}^2} \cdot (\mathbf{e}_{00}^r r_{00}) \right] dV \quad \text{mit (15.1)} \\ &= g_{ref} r_{ref}^2 \int_{B_0} \varrho \left(\frac{1}{r_{10}} - \frac{1}{r_{00}} \right) dV \\ &= g_{ref} r_{ref}^2 \int_V \varrho \frac{r_{00} - r_{10}}{r_{00} r_{10}} dV \\ \Rightarrow W_a &= W_{ext} ! \end{aligned} \quad (15.12)$$

Es sei abschließend festgestellt, daß dieser Nachweis nur mittels der vorgeschlagenen Annahme für die Beschleunigung $\mathbf{g}_{em}$ gelingt; für eine Formulierung mit der Mittelpunktsregel ist dies nicht möglich.

15.4 FE - Diskretisierung im Raum

Werden Verschiebungsansätze verwendet, so gilt mit den Formfunktionen im Element $\mathbf{N}_e = [\mathbf{I}_{3 \times 3} N_1, \dots, \mathbf{I}_{3 \times 3} N_{nen}]$ und den diskreten Verschiebungen der Elementknoten $\mathbf{d}_e$ für die Verschiebungen im Element

$$\delta \mathbf{u} = \mathbf{N}_e \delta \mathbf{d}_e \quad (15.13)$$

Hiermit ergibt sich aus der äußeren Arbeit das Residuum der Volumenkräfte $\mathbf{f}_e$ für ein Element mittels

$$\mathbf{f}_e \cdot \delta \mathbf{d}_e = \int_{V_e} \varrho \mathbf{N}_e^T \mathbf{g}_{em}(\mathbf{r}) dV \cdot \delta \mathbf{d}_e. \quad (15.14)$$

Da $\mathbf{g}_{em}$ verschiebungsabhängig ist, erzeugt die für eine iterative Lösung mittels eines Newton-Verfahrens erforderliche Linearisierung unsymmetrische sogenannte Lastanteile auf der effektiven Elementsteifigkeitsmatrix gemäß

$$\mathbf{K}_e = \int_{V_e} \varrho \mathbf{N}_e^T \mathbf{K}_l \mathbf{N}_e dV \quad (15.15)$$

mit

$$\mathbf{K}_l = g_{ref} r_{ref}^2 \left[\left(\frac{1}{r_{00} r_{10}^2} + C_r \right) \mathbf{e}_{em}^* \mathbf{e}_{10}^T - C_r \mathbf{I}_{3 \times 3} \right] \quad (15.16)$$

$$C_r = \frac{1}{r_{00} r_{10} (r_{00} + r_{10})}; \quad \mathbf{e}_{em}^* = \frac{\mathbf{r}_{00} + \mathbf{r}_{10}}{r_{00} + r_{10}}; \quad (15.17)$$

D. h. obgleich grundsätzlich ein konservatives Problem vorliegt, für das sich eine symmetrische Matrix ergeben müßte (siehe *Schweizerhof & Ramm* [11] und *Bufler* [3]), führt die spezielle Wahl der gemittelten Gravitationsbeschleunigung für das „Energy-Momentum“-Verfahren zu einer unsymmetrischen Laststeifigkeitsmatrix. Dies ist ein typischer Effekt des von *Simo et al.* [12, 13] vorgeschlagenen Verfahrens. Im Falle von physikalisch realistischen Gravitationsfeldern und im Verhältnis zur Umlaufzeit nicht zu großen Zeitschritten sind allerdings diese zusätzlichen Anteile sehr klein und können im allgemeinen vernachlässigt werden.

Starrkörper können zur Erfassung der Gravitation auch analog der FE-Methode räumlich über Einzelelemente diskretisiert werden. In einer Vorberechnung werden dann mit Nutzung dieser Diskretisierung die Gesamtmassenmatrix, der Massenmittelpunkt und der Trägheitstensor für die Referenzkonfiguration des Starrkörpers ermittelt. Es empfiehlt sich diesen Punkt auch als Bezugspunkt für die Verschiebungs- und Rotationsfreiheitsgrade des

Starrkörpers zu wählen.

Die Wirkungslinie der resultierenden Gravitationskraft geht durch den Schwerpunkt des Starrkörpers, der in einem inhomogenen Potentialfeld aber i.a. nicht identisch mit dem Massenmittelpunkt ist. Die Position des Schwerpunktes, sowie der Betrag der resultierenden Anziehungskraft hängen von der jeweiligen Lage des Starrkörpers im Gravitationsfeld ab, d. h. zur Erfassung des korrekten Einflusses der Gravitation muß eine Integration über das Volumen in der aktuellen Konfiguration durchgeführt werden.

Die aus der räumlichen Diskretisierung des Starrkörpers berechneten Knotenkräfte werden dann über Kopplungsbedingungen auf die 6 Freiheitsgrade im Massenmittelpunkt transformiert. Entsprechend sind die Lastanteile der effektiven Steifigkeitsmatrix auf die Starrkörperfreiheitsgrade zu transformieren.

Alternativ zur Auswertung an den Integrationspunkten könnte die Auswertung der Gravitationsbeschleunigung $\hat{\mathbf{g}}_{em}$ auch an den Elementknoten vorgenommen werden. Der Verlauf im Element wird dabei mittels der Ansatzfunktionen angenähert durch

$$\mathbf{g}_{em} = \mathbf{N}_e \hat{\mathbf{g}}_{em} \quad (15.18)$$

Einsetzen in (15.14) liefert

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_e \cdot \delta \mathbf{d}_e &= \left(\int_{V_e} \varrho \mathbf{N}_e^T \mathbf{N}_e dV \hat{\mathbf{g}}_{em} \right) \cdot \delta \mathbf{d}_e \\ &= (\mathbf{M}_e \hat{\mathbf{g}}_{em}) \cdot \delta \mathbf{d}_e \end{aligned} \quad (15.19)$$

mit der konsistenten Elementmassenmatrix $\mathbf{M}_e$.

Dieses Vorgehen stellt eine Näherung dar. Beispielsweise bei linearen Ansatzfunktionen kann hiermit der quadratische Verlauf der Gravitationskraft nicht korrekt abgebildet werden. Die Verwendung der diagonalisierten Massenmatrix anstelle der konsistenten Matrix entspricht der Annahme von konzentrierten Knotenmassen und führt zu einem etwas größeren Fehler. Da die Gradienten im Potentialfeld sehr klein sind, ist der Fehler infolge Verwendung von (15.19) sehr klein, jedoch ist hier eine Integralauswertung auf Elementebene nur einmal zur Bestimmung der konsistenten oder diagonalisierten Massenmatrix erforderlich und der Berechnungsaufwand daher entsprechend geringer.

15.5 Numerische Beispiele

15.5.1 Punktmasse auf elliptischer Bahn

Es wird eine Punktmasse (Masse m) betrachtet, die sich infolge ihrer Geschwindigkeit auf einer elliptischen Umlaufbahn um ein Gravitationszentrum Z gemäß Abbildung 15.3 befindet.

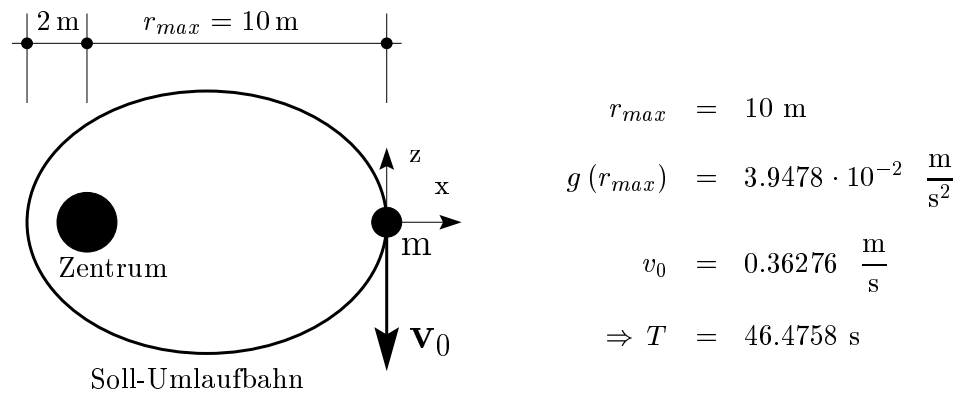


Abbildung 15.3: Vorgaben für die Umlaufbahn; Punktmasse auf elliptischer Bahn.

Zum Zeitpunkt $t = 0$ besitzt sie den maximalen Abstand r_{max} zum Gravitationszentrum. Aus diesen Vorgaben kann mit Hilfe der Kepler'schen Gesetze die Gravitationsbeschleunigung $g(r_{max})$, die tangentielle Geschwindigkeit $\mathbf{v}_0 = \mathbf{v}(t = 0)$ und die Zeit T für einen Umlauf berechnet werden.

Die numerische Berechnung dieses Systems mit dem vorgestellten „Energy-Momentum“-Zeitintegrationsverfahren zeigt, daß zwar unabhängig vom Zeitschritt Energieerhaltung vorhanden ist, aber zeitschrittweitenabhängig sowohl ein Phasenfehler (Approximationsfehler der Umlaufzeit) als auch ein Richtungsfehler auftritt. Für 2 unterschiedliche, relativ groß gewählte Zeitschrittweiten sind die jeweils ermittelten Bahnen exemplarisch in Abbildung 15.4 dargestellt. Es sind erhebliche Abweichungen von der in Abbildung 15.3 gezeigten korrekten Lösung zu bemerken. Die Energieerhaltung bleibt davon unberührt; sie führt allerdings dazu, daß der umschließende Kreis mit Radius $r = r_{max}$ um das Schwerzentrum in jedem Umlauf berührt wird. Die Erklärung hierfür ist, daß im vorliegenden

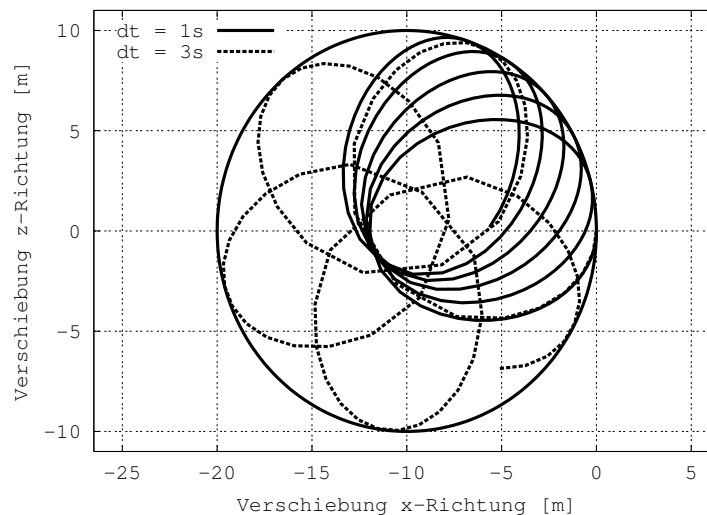


Abbildung 15.4: Berechnete Umlaufbahnen für zwei verschiedene Zeitschrittweiten für die Punktmasse auf elliptischer Bahn.

Zeitschrittverfahren die im Zeitschritt konstant angenommene Gravitationsbeschleunigung aus der jeweiligen Lage, d. h. aus den Werten an den Zeitschrittgrenzen ermittelt wird. Durch dieses Vorgehen entstehen naturgemäß in Bereichen starker Gradienten, d. h. in der

Nähe des Zentrums, Interpolationsfehler, die dadurch verstärkt werden, daß die Punktmasse gerade in diesen Bereichen eine besonders hohe Geschwindigkeit besitzt und daher je Zeitschritt einen großen Weg zurücklegt. Insbesondere wird durch die Interpolation mit Hilfe der Werte an den Zeitschrittgrenzen der jeweilige Extremalwert der Anziehungskraft in diesem Zeitbereich i.a. nicht exakt erfaßt. Dieser Fehler pflanzt sich fort.

Der wesentliche Vorteil des vorgestellten Verfahrens im Vergleich mit z. B. der impliziten

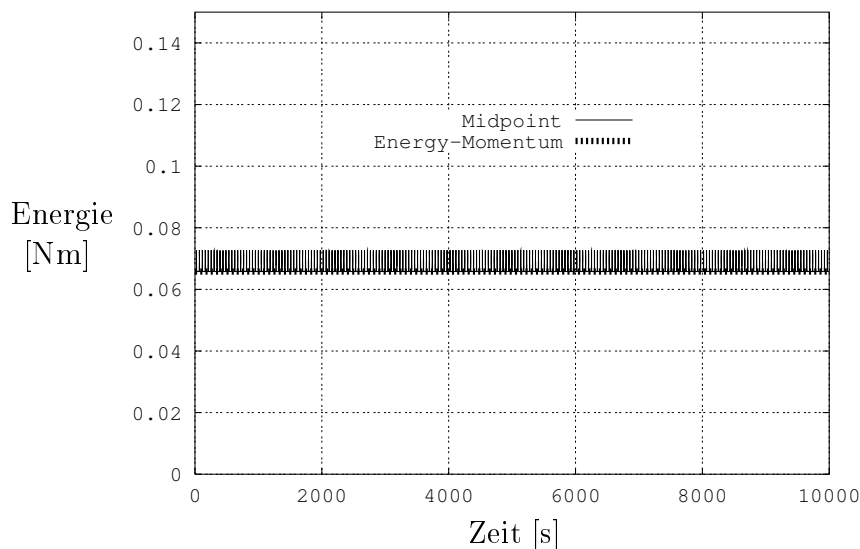


Abbildung 15.5: Gesamtenergie der Punktmasse für $\Delta t = 0.25$ s für die Bewegung auf einer elliptischen Bahn.

Mittelpunktsregel ist aber die Erfüllung der Energieerhaltung. Zum Vergleich wird daher auch der zeitliche Verlauf der Gesamtenergie für eine konstante Zeitschrittweite über einen längeren Zeitraum betrachtet. Hierbei muß auch die potentielle Energie der Punktmasse im Schwerfeld berücksichtigt werden.

In Abbildung 15.5 ist deutlich erkennbar, daß der Verlauf der Gesamtenergie bei Zeitintegration mit der Mittelpunktsregel Oszillationen aufweist. Bei Berechnung mit der „Energy-Momentum“ Methode dagegen ist die Energieerhaltung exakt erfüllt, und es ergibt sich eine Gerade mit konstantem Wert.

Erwartungsgemäß zeigen sich für den Vektor des Impulses und des Drehimpulses bei Nutzung beider Verfahren keine Verletzungen der Erhaltungssätze.

15.5.2 Starrkörper auf Kreisbahn

Die Umlaufbahn und die Bewegung eines Starrkörpers (Satelliten) mit homogener Dichteverteilung, der sich für $t = 0$ in Speichenstellung (das Gravitationszentrum liegt in der Verlängerung der Satellitenachse) gemäß Abbildung 15.6 befindet, soll im Schwerfeld der Erde untersucht werden. Das Erdschwerfeld wird vereinfachend als Zentralkraftfeld angenommen.

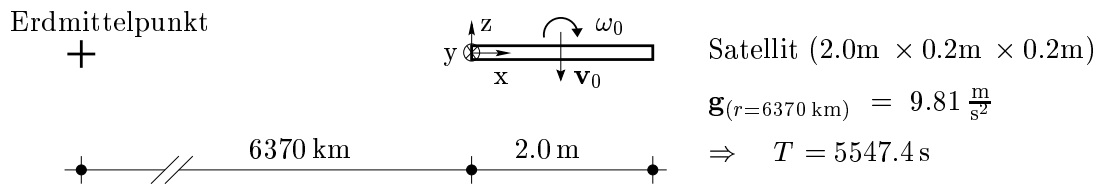


Abbildung 15.6: Vorgaben für den Starrkörper auf einer Kreisbahn

Da bei der Berechnung von Satelliten in Schwerfeldern deren Form und Ausrichtung bezüglich des Erdmittelpunktes von Bedeutung ist, dürfen die Anziehungskräfte jetzt nicht als im Massenmittelpunkt wirkende Kräfte betrachtet werden, sondern die Verteilung für das Kontinuum muß korrekt berücksichtigt werden.

Das Erdschwerfeld wird radialsymmetrisch angenommen. Im Abstand von $r_{ref} = 6370\text{ km}$ (Erdoberfläche) betrage die Gravitationsbeschleunigung $g_{ref} = 9.8100 \frac{\text{m}}{\text{s}^2}$. Der Satellit bewege sich in einer Kreisbahn in 400 km Höhe über der Erdoberfläche. Als Geometrie des Satelliten wird ein Quaderelement mit den Abmessungen $2.0\text{ m} \times 0.2\text{ m} \times 0.2\text{ m}$ zugrunde gelegt.

Die Gravitationskräfte für das diskretisierte Kontinuum wurden mittels Auswertung an den Integrationspunkten gemäß (15.3) gewonnen. Da die Steifigkeitsterme aus der Linearisierung der Anziehungskräfte wegen der großen Radien sehr klein sind, zeigt die Erfahrung, daß auf ihre Berechnung ohne merkliche Auswirkungen auf die Konvergenz verzichtet werden kann. Dies führt zu erheblicher Reduzierung des Aufwandes.

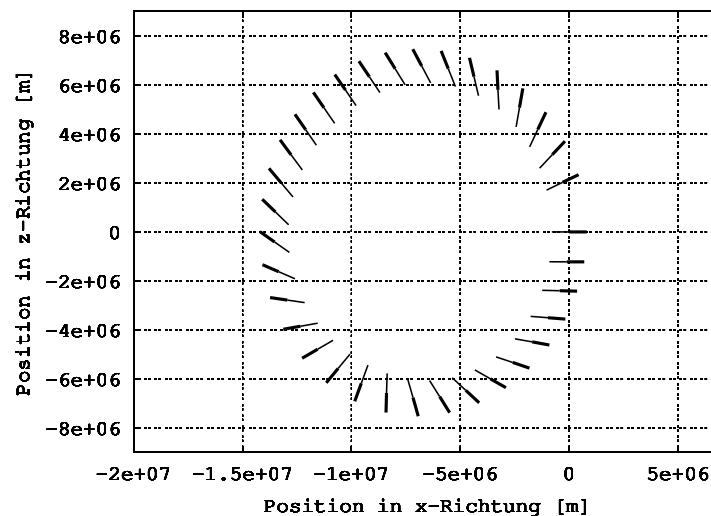


Abbildung 15.7: Orientierung des Satelliten im ersten Umlauf

Bei kleineren Störungen der Ausrichtung z. B. infolge äußerer Einwirkungen erzeugen die größeren Anziehungskräfte in Erdnähe ein Moment, das einer Störung immer entgegenwirkt. Dies gilt auch für künstliche Störungen infolge numerischer Fehler aus dem Berechnungsverfahren. Da Energieerhaltung gegeben ist, wird sich in der Folge einer kleinen Störung somit eine Pendelbewegung um die ursprüngliche Speichenstellung einstellen. Eine solche Störung ist z. B. mit folgender Startbedingung für die Starrkörpergeschwin-

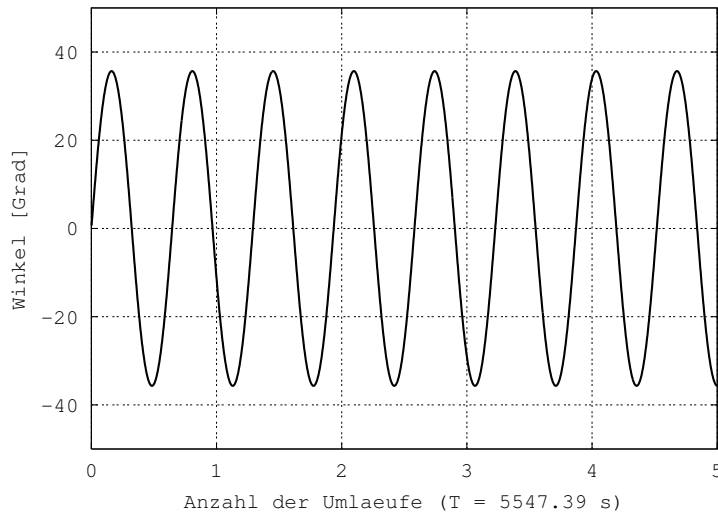


Abbildung 15.8: Zeitverlauf des Winkels zwischen Satellitenlängsachse und Richtung der Gravitation

digkeit (Translations- und Rotationsgeschwindigkeit) definiert, wenn als Ausgangslage die Lage bei $x = y = z = 0$ genommen wird.

$$\text{Startvorgabe} \quad \mathbf{v}_{t=0} = \left[0.0, 0.0, -\frac{2r_s \pi}{T} \right]^T \quad \omega_{t=0} = [0.0, 0.0, 0.0]^T$$

$$(\text{korrekt wäre } \omega_{t=0} = [0.0, \frac{2\pi}{T}, 0.0]^T)$$

Der Fehler in der Winkelgeschwindigkeit führt zuerst zu einem Ausweichen aus der Speichenstellung. Das dabei entstehende Moment aus der Wirkung des Zentralkraftfeldes erzeugt nun eine Rotationsbeschleunigung des Satelliten um die y-Achse jeweils in Richtung der Speichenstellung. Vorzeichen und Größe der Beschleunigung wechseln im Zuge eines Umlaufes. Die Positionen und Ausrichtungen des Satelliten für den ersten Umlauf sind in Abbildung 15.7 abgebildet. Der Zeitverlauf des Drehwinkels in Abbildung 15.8 zeigt die sich einstellende Pendelbewegung für die ersten 5 Umläufe. Mit diesem Beispiel wird verdeutlicht, daß zur genauen Erfassung der Bewegung von starren Körpern und deformierbaren Festkörpern die Form des Körpers beachtet werden muß. Dann ist auch die richtige Ermittlung der wirkenden Kräfte im Zentralkraftfeld von Bedeutung.

15.6 Zusammenfassung

Ziel des Beitrages ist die Vorstellung der korrekten algorithmischen Erfassung eines Zentralkraftfeldes mittels äußerer Kräfte auf eine Struktur in einem Zeitintegrationsverfahren, welches die mechanischen Erhaltungssätze im Zeitschritt exakt erfüllt. Zur Zeitintegration wird die „Energy-Momentum“ Methode genutzt und hierfür wird die korrekte Abbildung des Zentralkraftfeldes für aus starren und flexiblen Körpern aufgebaute Kontinua gezeigt. Es sei allerdings bemerkt, daß dabei trotz der Erfüllung der mechanischen Erhaltungssätze

im Zeitschritt – wie üblich – die Wahl zu großer Zeitschritte zu erheblichen Phasenfehlern und insbesondere auch zu Richtungsfehlern führen kann.

In den numerischen Beispielen wurden Starrkörper betrachtet, da eine wesentliche Auswirkung der Deformationen flexibler Körper auf die wirkenden Kräfte in einem Schwerfeld nur bei extrem großen Verzerrungen bzw. bei großer Nähe der Körper zum Schwerzentrum zu erwarten ist. Da außerdem die numerische Berechnung flexibler Strukturen die Verwendung relativ kleiner Zeitschrittweiten erfordert und damit hohen numerischen Aufwand zur Folge hat, erscheint es oft empfehlenswert, bei Systemen mit schwacher Interaktion den Einfluß des Schwerfeldes durch Betrachtung der Systeme als Starrkörper zu ermitteln.

Das vorgestellte Verfahren wird wegen der unsymmetrischen Systemmatrizen bei hohen Freiheitsgradzahlen numerisch aufwendig. Daher empfiehlt es sich, die Zahl der Freiheitsgrade mittels Beschreibung der Körper als starre Kontinua klein zu halten. Die Formulierung zeichnet sich aufgrund ihrer hohen numerischen Stabilität besonders für Langzeitsimulationen aus, wie sie bei Untersuchungen im Schwerfeld oft von Interesse sind.

Literaturverzeichnis

- [1] P. Betsch and P. Steinmann. Conservation properties of a time FE method. Part I: Time-stepping schemes for n-body problems. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 49:599–638, 2000.
- [2] P. Betsch and P. Steinmann. Inherently energy conserving time finite elements for classical mechanics. *Journal of Computational Physics*, 160:88–116, 2000.
- [3] H. Bufler. Pressure loaded structures under large deformations. *ZAMM, Zeitschrift für angewandte Mathematik und Mechanik*, 7:287 – 295, 1984.
- [4] A. J. Chen. *Energy-momentum conserving methods for three dimensional dynamic nonlinear multibody systems*. PhD thesis, Division of mechanics and computation, Stanford University, 1998.
- [5] O. Gonzales and J. C. Simo. On the stability of symplectic and energy-momentum algorithms for non-linear hamiltonian systems with symmetry. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 134:197–222, 1996.
- [6] D. Greenspan. Completely conservative, covariant numerical methodology. *Computers and Mathematics with Applications*, 4:37–43, 1995.
- [7] A. Ibrahimbegovic and S. Mamouri. On rigid components and joint constraints in nonlinear dynamics of flexible multibody systems employing 3d geometrically exact beam model. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 188:805–832, 2000.
- [8] A. Ibrahimbegovic, S. Mamouri, R. L. Taylor, and A. J. Chen. Finite element method in dynamics of flexible multibody systems: Modeling of holonomic constraints and energy conserving integration schemes. *Multibody System Dynamics*, 4:195–224, 2000.

- [9] D. Kuhl and M. A. Crisfield. Energy-conserving and decaying algorithms in non-linear structural dynamics. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 45:569–599, 1999.
- [10] D. Kuhl and E. Ramm. Constraint energy momentum algorithm and its application to non-linear dynamics of shells. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 136:293–315, 1996.
- [11] K. Schweizerhof and E. Ramm. Displacement dependent pressure loads in nonlinear finite element analysis. *Computer & Structures*, 18:1099 – 1114, 1984.
- [12] J. C. Simo and N. Tarnow. The discrete energy-momentum method. Conserving algorithms for nonlinear elastodynamics. *ZAMP, Zeitschrift für angewandte Mathematik und Physik*, 43:757–793, 1992.
- [13] J. C. Simo and K. K. Wong. Unconditionally stable algorithms for rigid body dynamics that exactly preserve energy and momentum. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 31:19–52, 1991.

16

Die Stabilität der Ortsbrust von Tunnels in homogenem Boden oder Fels

P. A. Vermeer und N. Ruse
Institut für Geotechnik
Universität Stuttgart
D-70550 Stuttgart

Zusammenfassung. *In der vorliegenden Veröffentlichung wird die Standsicherheit der Ortsbrust beim Auffahren eines Tunnels betrachtet. Das Rechenproblem wird idealisiert, indem der Ausbruch eines Kreisquerschnitts in einem homogenen Boden oder Fels ohne Grundwasser betrachtet wird. Ausgehend vom Durchmesser der Ausbruchsfläche und den gegebenen Bodenkennwerten, werden zur Ermittlung des benötigten minimalen Stützdrucks, nichtlineare dreidimensionale FE-Berechnungen durchgeführt. Auf Grundlage einer Vielzahl von FE-Ergebnissen lässt sich für den benötigten Stützdruck eine geschlossene Formel entwickeln. Ist der Stützdruck fest vorgegeben, ergibt sich eine einfache Formel für den Sicherheitsbeiwert. Die klassische Spritzbetonbauweise mit Stützdruck gleich null ist als Spezialfall einbegriffen. Neben der Entwicklung einer unmittelbaren analytischen Formel für den Sicherheitsbeiwert, läßt dieser Beitrag erkennen, dass die Standsicherheit der Ortsbrust fast unabhängig von der Tiefe des Tunnels ist.*

16.1 Einführung

Eines der Hauptprobleme beim Auffahren eines Tunnels, stellt die Standsicherheit der Ortsbrust des Tunnelbauwerkes dar. Die Stabilität der Tunnelröhre ist durch eine entsprechende Dimensionierung des Ausbaus zu gewährleisten, jedoch ist die Standsicherheit der Ortsbrust maßgeblich von der Kohäsion des Baugrundes abhängig. Bei gering kohäsiven Böden benötigt man deswegen einen Schildvortrieb, wobei die Ortsbruststabilität durch einen Stützdruck gewährleistet wird (Anagnostou & Kovári [4]). Bei Böden oder Fels mit mehr Kohäsion kann die Spritzbetonbauweise (NÖT) erfolgen, wobei die Stabilität durch eine Verkleinerung der Ausbruchsfläche sichergestellt werden kann (Kolymbas [12]). Da kleine Ausbruchsflächen unwirtschaftlich sind, erfolgt hier manchmal auch die Anwendung von Ortsbrustankern (Kovári & Lunardi [13], Leca, Leblais & Kuhnhenh [14]), mit denen wie beim Schildvortrieb ein Stützdruck erzeugt werden kann. Somit verschwindet einer der Unterschiede zwischen Schildvortrieb und Spritzbetonbauweise. Im vorliegenden Artikel wird vereinfachend von einem Stützdruck ausgegangen, wobei die klassische Spritzbetonbauweise ohne Stützdruck sich als Sonderfall ergibt.

Die Zahl der wissenschaftlichen Untersuchungen zum Thema Ortsbrust ist relativ gering. Nur für den Spezialfall des undrainierten Bodenverhaltens, in dem mit reibungslosem Materialverhalten gerechnet werden kann, gibt es mehrere Veröffentlichungen (*Atkinson & Mair* [5], *Davis et al.* [7], *Mair & Taylor* [15], *Schofield* [18]). Für den allgemeinen Fall eines kohäsiven Reibungsmaterials wurden bislang keine Entwurfsformeln erarbeitet. Beim Schildvortrieb ergibt sich also keine einfache Regel zur Ermittlung des benötigten Stützdrucks. Ebenfalls steht bei der Spritzbetonbauweise keine Formel zur Verfügung, mit der die Größe einer noch stabilen Ausbruchsfläche abgeschätzt werden kann. Nur bei vorgegebener Ortsbrustgeometrie kann eine Bruchkörperstatik nach der Grundidee von *Horn* [9] zur Berechnung eines Sicherheitsbeiwertes durchgeführt werden (siehe auch *Anagnostou & Kovári* [3, 4]).

Das Ziel des vorliegenden Beitrags ist nicht die Entwicklung eines computerorientierten Rechenmodells, sondern eine handhabbare Entwurfsformel zur Bestimmung des benötigten Stützdrucks bei gegebener Ausbruchsfläche, sowie die Berechnung der Größe des noch stabilen Teilquerschnitts sofern ein Tunnel ohne Stützdruck aufgefahren werden soll. Das Problem wird hauptsächlich dadurch vereinfacht, dass nur eine kreisförmige Ausbruchsfläche untersucht wird. Da die Stabilität der Kreisfläche in solchen Fällen durch eine komplexe Gewölbewirkung zustande kommt, ist eine analytische Herangehensweise ausgeschlossen. Als Alternativen bieten sich physikalische Modellversuche (*Kimura & Mair* [11], *Mair & Taylor* [15], *Schofield* [18]) und numerische Untersuchungen an (*Vermeer et al.* [21, 22, 23]). Da reproduzierbare Modellversuche nicht nur kostspielig, sondern auch nur eingeschränkt möglich sind, wird auf numerische Simulationen zurückgegriffen.

Zum Auftakt wird in Abschnitt 16.2 der heutige Stand der Ortsbruststatik, d.h. die Bruchkörperstatik vorgestellt. In Abschnitt 16.3 wird der Einsatz und die Vorgehensweise der dreidimensionalen, nichtlinearen FE-Methode zur Analyse der Ortsbruststatik beschrieben. In Abschnitt 16.4 wird gezeigt, dass die Stabilität der Ortsbrust nicht von der Größe des Erdruchdruckbeiwerts K_0 abhängig ist. Anschließend wird in Abschnitt 16.5 die Gewölbewirkung analysiert. Eine empirische Stützdruckformel für Böden mit $20^\circ < \varphi < 40^\circ$ wird auf der Grundlage dreidimensionaler FE-Berechnungen in Abschnitt 16.6 entwickelt. Abschließend werden in Abschnitt 16.7 die Ergebnisse der Studie erweitert und ausgewertet. Dies ist erstens eine Formel für den minimal möglichen Stützdruck, d.h. beim Verbruch der Ortsbrust. Zweitens eine Formel für die maximal mögliche Ausbruchsfläche ohne zusätzlichen Stützdruck. Drittens eine Formel für den Sicherheitsbeiwert bei vorgegebenem Stützdruck p (mit Sonderfall $p = 0$) und vorgegebener Tunnelgeometrie.

16.2 Stand der Wissenschaft

Ein gängiges Berechnungsverfahren zur Ermittlung der Standsicherheit der Ortsbrust wird von *Anagnostou & Kovári* [4] beschrieben. Dieses Berechnungsmodell basiert auf einer Annahme zur Überlagerungsspannung σ_z an der Firste eines Tunnels, wie sie von *Terzaghi & Jelinek* [19] auf Grundlage der Silotheorie von *Janssen* [10] vorgeschlagen wurde:

$$\sigma_z = \frac{\gamma D - 4c}{4K_0 \tan \varphi} (1 - \exp(-2K_0 \tan \varphi \frac{2H}{D})). \quad (16.1)$$

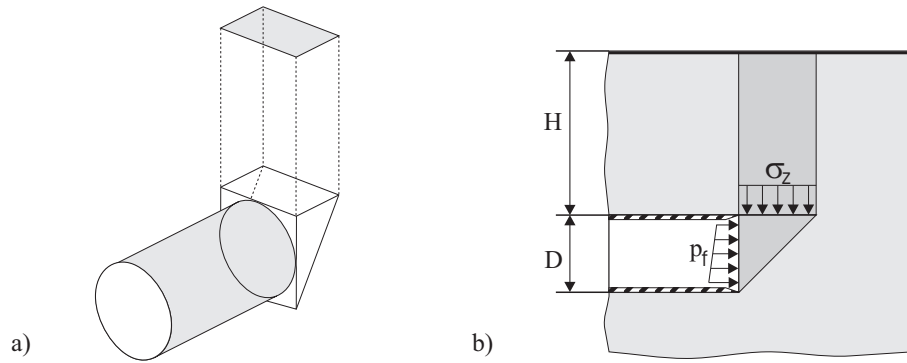


Abbildung 16.1: a) Räumliches Bruchkörpermodell zur Ermittlung des Stützdrucks auf die Ortsbrust; b) Längsschnitt entlang der Tunnelachse.

Die Vertikalspannung ist somit abhängig vom Tunneldurchmesser D , von der Kohäsion c , dem Reibungswinkel φ , dem Erdruhedruckbeiwert K_0 und der Tiefenlage H . Diese Formel besagt, dass von einer maßgebenden Zunahme der Vertikalspannung in der Tiefe nur bis zu einer bestimmten Tiefe auszugehen ist. Ab einer bestimmten Tiefe ist σ_z fast konstant. Es sei zu beachten, dass Druckspannungen in dieser Studie als positiv definiert sind. Im Unterschied zu dem Ausdruck nach *Terzaghi & Jelinek* [19] ergibt sich in Gleichung 16.1 nicht einfach c , sondern $2c$. Für die Herleitung wird auf die Referenzen (*Kolymbas* [12], *Vermeer & Ruse* [22]) hingewiesen. Da Zugspannungen in Böden und Fels nur eingeschränkt möglich sind, sollte die Gleichung auf den Fall $\sigma_z > 0$ beschränkt werden.

Zur Ermittlung des minimalen Stützdrucks p_f , können Berechnungen mit dem in Abbildung 16.1 dargestellten räumliche Bruchkörpermodell, welches bereits in seinen Grundzügen von *Horn* [9] vorgestellt wurde, durchgeführt werden. Der Bruchdruck p_f , welcher notwendig ist um eine standsichere Ortsbrust zu gewährleisten, wird aus einer Gleichgewichtsbeurteilung der am Gleitkeil wirkenden Kräfte gewonnen. Eine genaue Beschreibung des Bruchkörperverfahrens geben (*Anagnostou* [4], *Vermeer & Ruse* [22]). Ergebnisse aufgrund des Bruchkörpermodells werden später in Abbildung 16.7 und Abbildung 16.8 mit Resultaten dreidimensionaler FE-Berechnungen verglichen.

In der Geotechnik stellt sich häufig die Frage, ob man mit undrainiertem Materialverhalten rechnen muss. Beim undrainierten Materialverhalten sollte ja nicht mit den effektiven Scherparametern c und φ gerechnet werden, sondern mit der undrainierten Kohäsion c_u und dem undrainierten Reibungswinkel $\varphi_u \approx 0$. Zur Entscheidung welche Vorgehensweise am wirklichkeitsnächsten ist, sollte der Konsolidationsgrad der Ortsbrust beurteilt werden. Neben dem Durchlässigkeitsbeiwert des Materials wird somit die Vortriebsgeschwindigkeit eine entscheidende Rolle spielen. Nach Angaben von *Anagnostou* [1, 2], ergeben sich drainierte Randbedingungen für Durchlässigkeitsbeiwerte größer 10^{-7} bis 10^{-6} m/s und Vortriebsgeschwindigkeiten von 2,5 bis 25 m/Tag oder weniger. Für den Fall des undrainierten Materialverhaltens ergeben sich eine Vielzahl von empirischen Daten aufgrund Versuchen in Geozentrifugen (*Atkinson & Mair* [5]). Diese Ergebnisse werden nahezu exakt beschrieben durch die Formel:

$$p_f = \gamma(H + \frac{1}{2}D) - Nc_u \quad \text{mit} \quad N = 5,86(\frac{H}{D})^{0,42}. \quad (16.2)$$

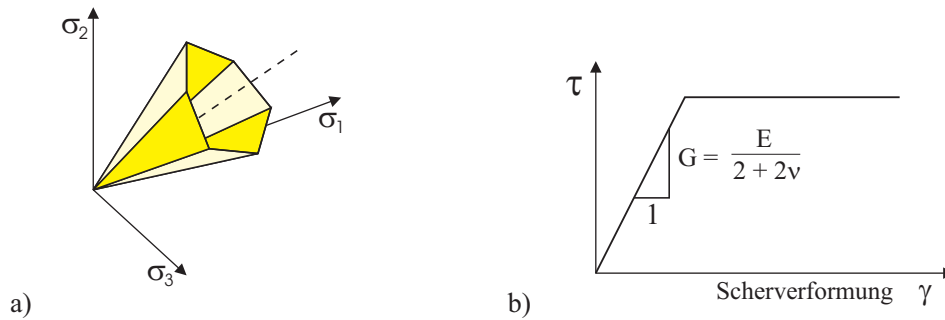


Abbildung 16.2: a) Die Fließfläche nach *Mohr-Coulomb* für $c = 0$;
b) Grundidee eines elastisch-perfekt-plastischen Stoffgesetzes.

Es soll gezeigt werden, dass diese Formel den FE-Ergebnissen genau entspricht (Abbildung 16.7).

16.3 Bestimmung des Bruchdrucks mit der FEM

Zur Ermittlung des Stützdruckes p_f auf die Ortsbrust im Bruchzustand werden dreidimensionale Finite Elemente Berechnungen durchgeführt. Die Berechnungen erfolgen mit der 3D Version des Programms *Plaxis* [6]. Als Stoffgesetz wird ein linear-elastisches perfekt-plastisches Stoffgesetz mit einem Bruchkriterium nach *Mohr-Coulomb* zugrunde gelegt (*Plaxis* [6]), dessen Charakteristika in Abbildung 16.2 dargestellt sind. Es ergibt sich der Fall, dass die Fließfläche nicht glatt ist, sondern Singularitäten aufweist, wie sie im dreidimensionalen Raum als Kanten oder Ecken bezeichnet werden. Es gibt dann Punkte auf ihr, in denen die partiellen Ableitungen nicht eindeutig gegeben sind oder sämtlich verschwinden. Für die Handhabung solcher singulären Fließflächen sei auf *Ziegler* [24] verwiesen.

Im Gegensatz zu Abbildung 16.2a werden Berechnungen mit einem kohäsiven Reibungsmaterial durchgeführt, wobei jedoch keine Zugspannungen zugelassen werden, d.h. es wird mit einem sogenannten *Tension Cut-Off* ein abgeschnittener Fließkegel beschrieben. Im linear-elastischen Bereich wird das Boden- und Felsverhalten mit einem Elastizitätsmodul E und einer Querdehnzahl ν beschrieben. Für den plastischen Bereich ergeben sich drei Materialparameter; die Kohäsion c , der Reibungswinkel φ und der Dilatanzwinkel ψ (*Vermeer* [20]).

Aus Symmetriegründen werden für die Berechnungen jeweils nur ein entlang der Längsachse halbmittiger Tunnel verwendet. Ein typisches FE-Netz, wie es für die Berechnungen verwendet wird, ist in Abbildung 16.3 dargestellt. Der Boden oder Fels wird durch 15-knotige prismatische Volumenelemente mit einer 6-Punkt-*Gauss*-Integrations-Regel dargestellt. Die dunkle Tunnelinnenfläche stellt eine Auskleidung mit einer Biegesteifigkeit EI und einer Dehnsteifigkeit EA dar, die für alle Analysen relativ hoch angesetzt wurden. Diese Tunnelschale wird aus linear-elastischen 8-knotigen Schalenelementen modelliert. Vor der Tunnelschale wird ein relative schmaler Ring mit einer relativen Breite von $d/D = 1/40$ ungestützt belassen. Dies erfolgt, um ein ausreichend flexibles FE-Netz zu erhalten, welches die Simulation des Bruchmechanismus erlaubt.

Die Randbedingungen der verwendeten FE-Modelle stellen sich wie folgt dar. Die Gelände-

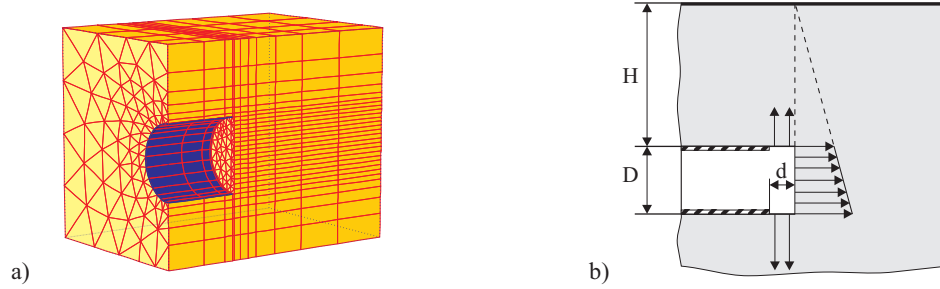


Abbildung 16.3: Typisches FE-Netz, wie es für die Berechnungen verwendet wird.

oberfläche ist frei, die seitlichen Begrenzungsflächen haben eine Rollenlagerung und die Grundfläche ist unverschieblich. Die frei verschiebliche Ortsbrust wird durch eine Flächenlast, wie angegeben in Abbildung 16.3b, unterstützt. In der Mitte der Ortsbrust hat sie die Größe p .

Die Initialbedingungen der durchzuführenden Analysen stellen sich wie folgt dar. Im Ausgangszustand der Berechnung existiert im Baugrund eine geostatische Spannungsverteilung mit $\sigma_{hor} = K_0 \sigma_{vert}$, wobei K_0 der sogenannte Erdruchdruckbeiwert ist. Der Einfluss dieses Beiwerts auf den Bruchdruck p_f wird in Abschnitt 16.4 analysiert.

Der erste Berechnungsschritt besteht darin, die Volumenelemente des Tunnels zu entfernen und die Schalenelemente im Tunnel zu aktivieren. Das Gleichgewicht wird hierbei nicht gestört, da ein äquivalenter Druck sowohl auf die Tunnelauskleidung als auch auf die Ortsbrust gegeben wird. Zur Bestimmung des minimal möglichen Stützdrucks wird bei der Berechnung der Druck auf die Ortsbrust schrittweise reduziert und die Verformung der Knotenpunkte berechnet. Bei abnehmendem Stützdruck p nehmen die Verformungen zu. Mit Erreichen des Stützdrucks p_f im Bruchzustand nähert sich der Kurvenverlauf einer horizontalen Gerade an; bei stetiger Zunahme der Verformungen kann der Stützdruck nicht weiter reduziert werden. Eine typische Druck-Verschiebungskurve ist in Abbildung 16.4a dargestellt. Neben der Druck-Verschiebungskurve ist in Abbildung 16.4 ein errechneter Bruchmechanismus dargestellt. Bei dem flach liegenden Tunnel in Abbildung 16.4b zeigt sich ein kaminartiger Bruch.

Die numerische Umsetzung führt zu einem inkrementellen Schema. Für jedes Dekrement des Stützdrucks werden Gleichgewichtssiterationen durchgeführt, wobei in den plastischen Gausspunkten ausserhalb der Bruchfläche liegende Spannungen reduziert werden (Radial-Return-Algorithmus). Für eine genaue Beschreibung dieser Methode im Rahmen der Mehrflächenplastizität wird auf *de Borst* [8] hingewiesen. Für die numerische Simulation eines lastgesteuerten Bruchproblems wird insbesondere die Stabilität des Verfahrens wichtig. Zur Handhabung der Stabilität im vollplastischen Bereich mit $p = p_f$ wurde die *arc-length* Methode nach *Riks* [16] angewendet.

16.4 Einfluss des Erdruchdruckbeiwerts K_0

Bei der Durchführung von numerischen Stabilitätsanalysen, wie oben beschrieben, stellt sich die Frage welcher K_0 -Wert für die Eingabe der geostatischen Ausgangsspannungen zu wählen sei. Nach der Theorie der assoziierten Plastizität wären die Ausgangsspannungen

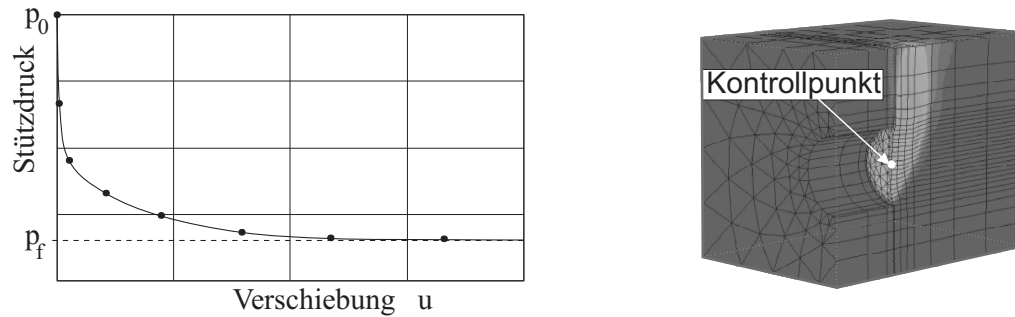


Abbildung 16.4: Errechnete Druck-Verschiebungskurve. Die Verschiebung u bezieht sich auf einen Kontrollpunkt in der Mitte der Ortsbrust.

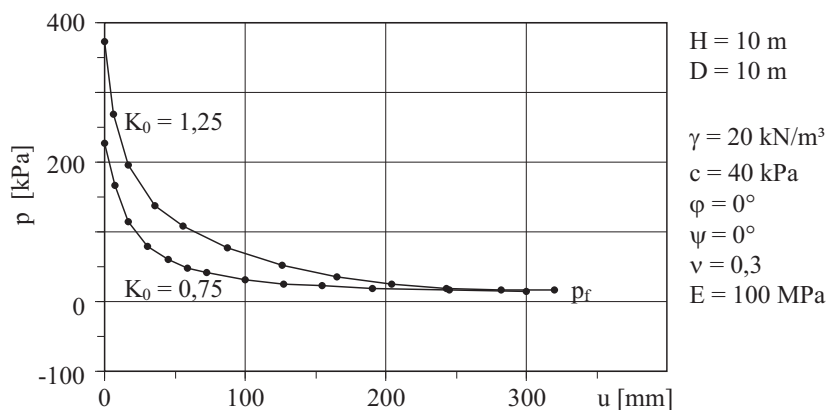


Abbildung 16.5: Errechnete Last-Verschiebungskurven für ein reibungsfreies Materialverhalten. Sowohl für die Berechnung mit $K_0 = 0,75$ als auch mit $K_0 = 1,25$ wird der gleiche Bruchdruck p_f ermittelt.

irrelevant für die Berechnung von Bruchlasten wie p_f . Um dies zu kontrollieren wurden Analysen mit dem assoziierten Tresca-Modell, d.h. dem *Mohr-Coulombschen* Sonderfall $\psi = \varphi = 0$, durchgeführt. Abbildung 16.5 zeigt Ergebnisse solcher Analysen für einen relativ flachen Tunnel. Trotz der unterschiedlichen Ausgangsspannungen wird hier der selbe Wert für den Bruchdruck p_f gefunden.

Bei Böden und Fels ist der Dilatanzwinkel ψ im allgemeinen viel kleiner als der Reibungswinkel φ und so ergibt sich ein nicht-assoziertes Materialverhalten (Vermeer [20]). Somit entfällt die theoretische Begründung, der zu Folge K_0 keinen Einfluss auf p_f hat. Aus diesem Grunde wurden numerische Untersuchungen mit $\psi = 0^\circ$ und $\varphi = 30^\circ$ durchgeführt, d.h. mit einem realistischen nicht-assozierten Materialverhalten. Berechnungen zur Ermittlung des Einflusses des Erdruchdruckbeiwerts K_0 auf den Bruchdruck erfolgten sowohl für flach- als auch für tiefliegende Tunnel. In allen Fällen konnte festgestellt werden, dass es keinen Einfluss von K_0 auf den Stützdruck p_f gibt. Berechnungsergebnisse sind in Abbildung 16.6 für einen sehr tiefen Tunnel exemplarisch dargestellt. Die Unabhängigkeit von K_0 ist wahrscheinlich mit der Gewölbewirkung an der Ortsbrust verbunden. Im nächsten Kapitel soll die Gewölbewirkung aufgezeigt werden.

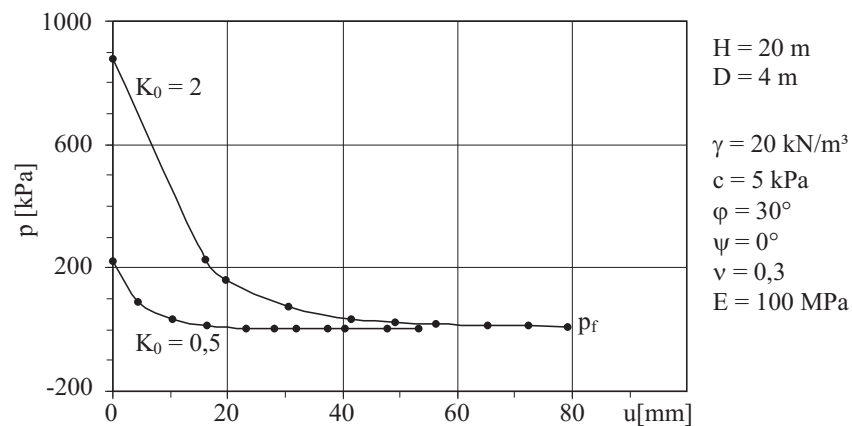


Abbildung 16.6: Errechnete Last-Verschiebungskurven für ein Reibungsmaterial. Sowohl für die Berechnung mit $K_0 = 0,5$ als auch mit $K_0 = 2$ wird der gleiche Bruchdruck p_f ermittelt.

16.5 Gewölbewirkung an der Ortsbrust

In diesem Kapitel soll gezeigt werden, dass die Stabilität der Ortsbrust maßgebend von der Gewölbewirkung geprägt wird, dies gilt zumindest für Böden oder Fels mit $\varphi > 20^\circ$. Durch diese Gewölbewirkung ergibt sich ein tiefenunabhängiger Bruchdruck p_f . Bei sehr geringen Reibungswinkeln ist dies jedoch nicht der Fall. Für ein reibungsloses Material ($\varphi = 0^\circ$) ist z.B. eine fast lineare Zunahme des Bruchdrucks p_f mit zunehmender Tunnelüberdeckung zu verzeichnen (Abbildung 16.7). Bereits bei geringen Reibungswinkel von $\varphi = 10^\circ$ kann festgestellt werden, dass dieser Einfluss der Tiefe sich reduziert.

Die Resultate der FE-Berechnungen aus Abbildung 16.7 zeigen eine exzellente Übereinstimmung mit der aus Versuchsergebnissen stammenden Kurve nach *Atkinson & Mair* [5]. Die Bruchkörperberechnungen nach *Anagnostou & Kovári* [4] ergeben für $\varphi = 0$ geringere Stützdrücke, aber auch hier gibt es nur geringe Unterschiede zu den FE-Ergebnissen. Bei einem Reibungswinkel von 10° ist eine sehr gute Übereinstimmung zwischen FE-Resultaten und Bruchkörperstatik zu beobachten.

Abbildung 16.8 zeigt die FE-Ergebnisse im Vergleich zu den Bruchkörperberechnungen nach *Anagnostou & Kovári* [4] für Böden oder Fels mit einem Reibungswinkel von 20° und 30° . Während die Lösung nach *Anagnostou & Kovári* [4] bis $H/D = 3$ einen signifikanten Anstieg des normierten Stützdrucks mit zunehmender relativen Tiefe aufweist, zeigen die Ergebnisse der FE-Berechnungen, dass es bei Reibungsböden keinen Einfluss der Tunnelüberdeckung auf den Stützdruck p_f im Bruchzustand gibt. Dies bedeutet, dass der Bruchdruck bei Böden und Fels mit einem Reibungswinkel $\varphi > 20^\circ$, entgegen bisheriger Vermutungen, völlig unabhängig von der Tiefenlage des Tunnels ist. In Abbildung 16.8 kann auch noch beobachtet werden, dass die ermittelten Drücke der Bruchkörperberechnungen wesentlich größer als die Resultate der FE-Berechnungen sein können, wie hier z.B. für $\varphi = 20^\circ$.

Einen visuellen Eindruck über den erheblichen Einfluss des Reibungswinkels gibt Abbildung 16.9; das Beispiel (a) wurde mit $\varphi = 0^\circ$, (b) mit $\varphi = 30^\circ$ ermittelt. In einem Längsschnitt durch den Tunnel ist der Verlauf der Hauptspannungen durch Spannungskreuz

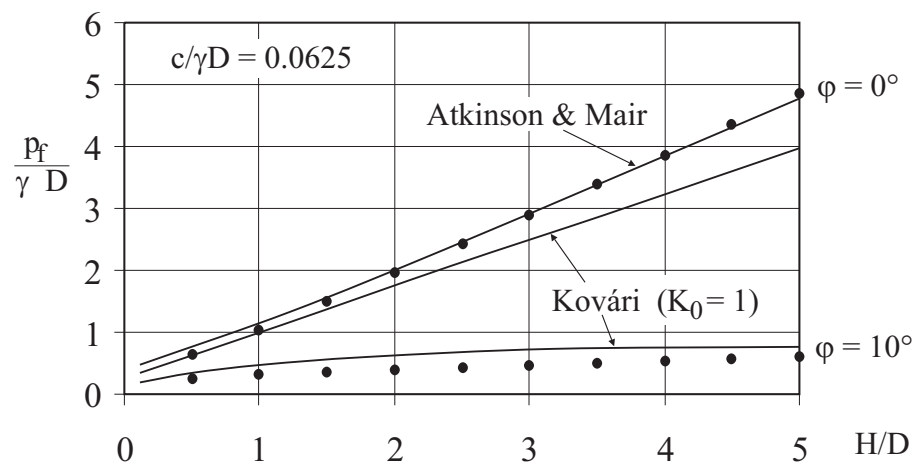


Abbildung 16.7: Normierte Bruchdrücke als Funktion der relativen Tiefenlage des Tunnels bei geringen Reibungswinkeln. FE-Resultate sind punktuell dargestellt. Vergleichend dazu sind Ergebnisse von anderen Untersuchungen aufgeführt. Die Berechnungen erfolgten für ein Material ohne Dilatanz ($\psi = 0$).

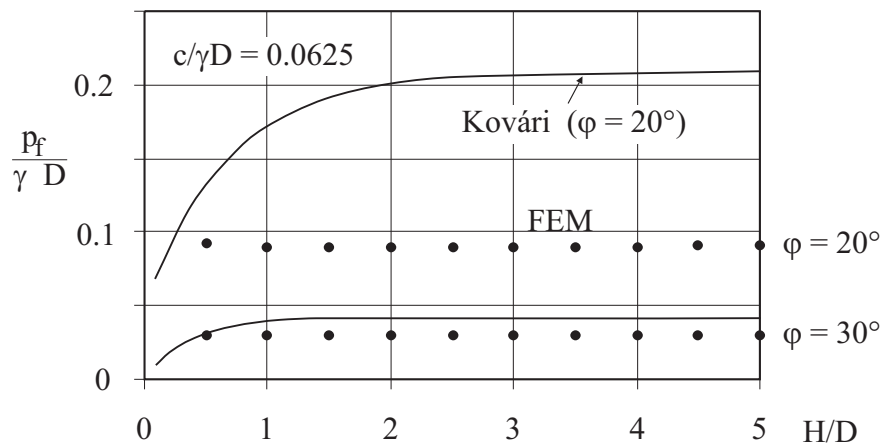


Abbildung 16.8: Normierte Bruchdrücke als Funktion der relativen Tiefenlage des Tunnels. FE-Resultate sind punktuell dargestellt. Vergleichend dazu sind Ergebnisse von anderen Untersuchungen aufgeführt. Die Berechnungen erfolgten für ein dilatanzloses Material $\psi = 0$.

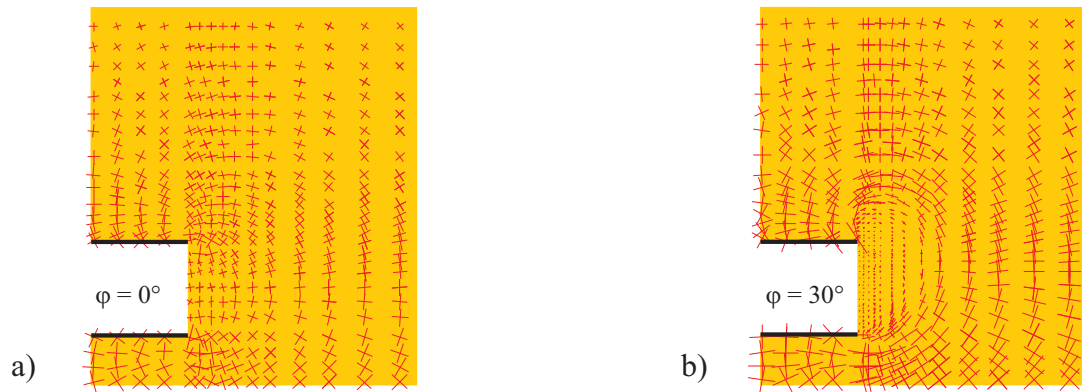


Abbildung 16.9: Errechnete Hauptspannungen beim Bruch sind als Kreuze in einem Längsschnitt durch den Tunnel mit $H/D = 5$ dargestellt. Richtung und Größe eines Kreuzes entsprechen der Hauptspannungsausrichtung und der Hauptspannungsgröße.

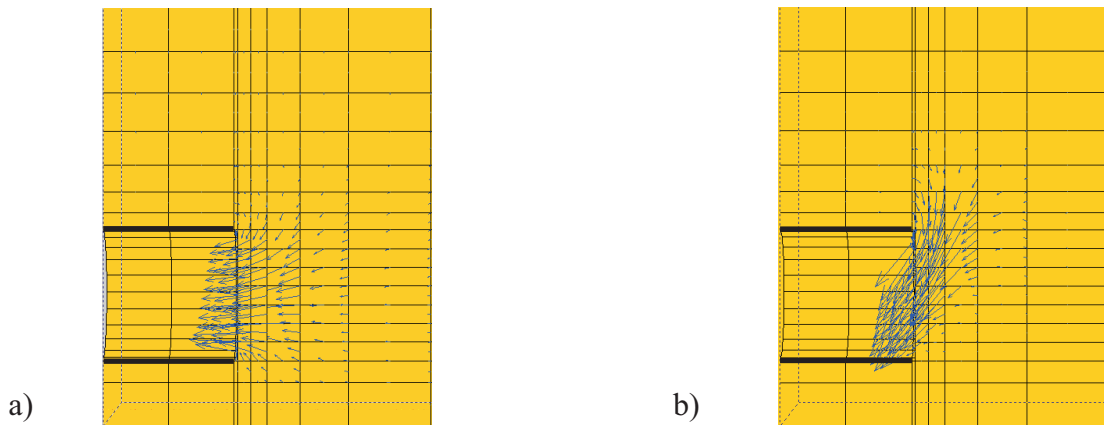


Abbildung 16.10: Inkrementelle Verschiebungen im Bruchzustand. In Bild a) ist der Versagensmechanismus für $\varphi = 0^\circ$, in Bild b) für $\varphi = 30^\circ$ dargestellt.

dargestellt. An der Ausrichtung und Größe der Spannungskreuze ist in Abbildung 16.9b deutlich zu erkennen, wie sich im Reibungsmaterial ein Gewölbe ausbildet, während sich dies im reibungslosen Material nicht erkennen lässt. Ausgehend vom initialen Spannungszustand reduzieren sich beim Reibungsmaterial die Spannungen im unmittelbaren Bereich vor der Ortsbrust fast auf 0. Dies bedeutet, dass sich hier der Baugrund zum großen Teil selbst tragen kann. Das reibungslose Material in Abbildung 16.9a weist zwar eine leichte Reduzierung der Spannungen auf, jedoch ist diese um ein Vielfaches geringer als bei Reibungsmaterial. Der Baugrund kann hier nur einen geringen Anteil zur Stabilisierung der Ortsbrust beitragen. Zum Ausdruck kommt der Einfluss des Reibungswinkels auch am Erscheinungsbild des Verbruchs (Abbildung 16.10). Während sich bei Reibungsmaterial ein keilförmiger Bruchkörper, ähnlich einem Gleitkeil ausbildet, führt der Verbruch im Falle von $\varphi = 0^\circ$ zu einer gleichmäßigen Intrusion des Baugrunds in die Tunnelröhre.

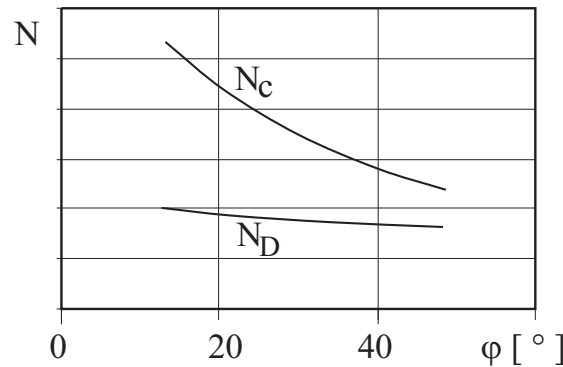


Abbildung 16.11: Erwarteter Verlauf der Koeffizienten N_c und N_D als Funktion des Reibungswinkels φ .

16.6 Bruchdruckformel für $20^\circ < \varphi < 40^\circ$

Die im vorigen Kapitel festgestellte Tatsache, nach welcher der Bruchdruckdruck p_f bei Reibungsmaterialien mit $\varphi > 20^\circ$ unabhängig von der Tiefenlage des Tunnels ist und der Erdruchdruckbeiwert K_0 ebenfalls keinen Einfluss auf das Ergebnis ausübt, lässt den Grund zur Annahme einer einfachen Formel für den Bruchdruck zu. Dabei hängt der Bruchdruck nur von den Scherparametern (c, φ) , der spezifischen Materialichte γ und dem Tunneldurchmesser ab. In Anlehnung an die Grundbruchformel eines Fundaments (*Schmidt* [17]) lässt sich der Bruchdruck nach folgender allgemeinen Formel beschreiben

$$p_f = -cN_c + \gamma DN_D \quad N_c = N_c(\varphi) \quad N_D = N_D(\varphi) \quad (16.3)$$

zumindest für einen nichtdilatanten Baugrund ($\psi = 0$). Die Koeffizienten N_c und N_D in der Formel sind Beiwerte, die abhängig vom Reibungswinkel φ des Bodens oder des Felses sind.

Zur Ermittlung der Koeffizienten N_c und N_D wurden ausführliche Rechenreihen durchgeführt, wobei die Bodenkennwerte γ und c systematisch variiert wurden. Für die Bestimmung von N_D wurden FE Berechnungen durchgeführt, bei denen der Reibungswinkel φ variiert und die Kohäsion $c = 0$ angenommen wurde. Zur Determinierung von N_c wurde φ konstant belassen und die Kohäsion variiert. Ziel ist eine einfache Abhängigkeit der Koeffizienten vom Reibungswinkel zu entwickeln, wie sie in Abbildung 16.11 dargestellt ist.

16.6.1 Ermittlung des Koeffizienten $N_D = \partial p_f / \partial \gamma D$

Die Ermittlung des Koeffizienten N_D , dem *Durchmesserbeiwert*, erfolgte durch FE-Berechnungen, wobei der Reibungswinkel φ systematisch variiert wurde, wie angegeben in Abbildung 16.12. Die Kohäsion wurde für diese Berechnungen mit $c = 0$ angesetzt, so dass $p_f = \gamma DN_D$ ist. Die Berechnungen erfolgten für relative Tunnelüberdeckungen von $H/D = 0.25$ bis $H/D = 8$, wobei sich das zuvor festgestellte Ergebnis, dass die Tiefenlage des Tunnels keinen Einfluss hat, bestätigte. Für die weitere Bearbeitung wurde der

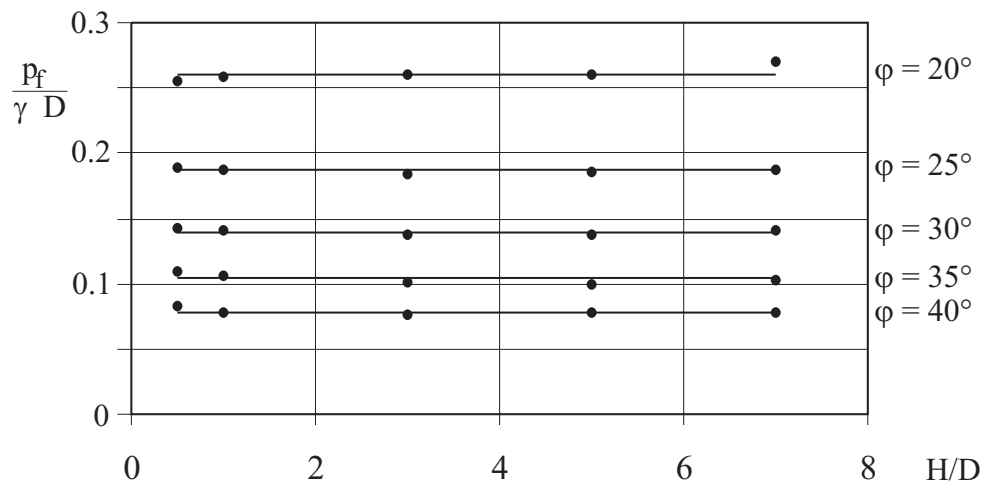


Abbildung 16.12: Errechnete Bruchdrücke für $c = 0$ und $\psi = 0$. Die Ergebnisse der FE-Berechnungen sind punktuell dargestellt, deren Mittelwerte sind als Linien verzeichnet.

Mittelwert der in Abbildung 16.12 punktuell dargestellten FE-Ergebnisse in Abbildung 16.13 aufgetragen. Der durch den Tunneldurchmesser D und die spezifische Materialwichte γ normierte Stützdruck wird in dieser Abbildung als Koeffizient $N_D = p_f / \gamma D$ in Abhängigkeit des Reibungswinkels aufgezeichnet. Die Punkte in Abbildung 16.13 stellen die Mittelwerte der FE-Berechnungen, die Kurve die berechnete Regression mit der im Diagramm dargestellten Formel für N_D . Die numerischen Resultate lassen sich mit einer besonders einfachen Funktion fassen.

16.6.2 Ermittlung des Koeffizienten $N_c = \partial p_f / \partial c$

Der Koeffizient N_c beeinflusst den Kohäsionsanteil am Bruchdruck p_f und wird im folgenden deswegen als Kohäsionsbeiwert bezeichnet. Aus der Tatsache, dass der Stützdruck im Bruchzustand p_f unabhängig von der relativen Tiefenlage des Tunnels H/D ist, ist bei der Ermittlung von N_c die Tiefenlage des Tunnels nicht zu berücksichtigen. In Abbildung 16.14 ist für Reibungswinkel von 20° bis 40° bei einer Variation der *normierten Kohäsion* $c/\gamma D$ der normierte Stützdruck $p_f/\gamma D$ aufgetragen. Es kann festgestellt werden, dass für einen bestimmten Reibungswinkel die normierten Bruchdrücke, aufgetragen über der *normierten Kohäsion* $c/\gamma D$, auf einer Geraden liegen. Dies bestätigt die Richtigkeit der Formel 16.3. Aus der Steigung dieser Geraden folgt, wie angegeben in Abbildung 16.14, der Kohäsionsbeiwert N_c . Werden die Kohäsionsbeiwerte in Abhängigkeit vom Reibungswinkel aufgetragen, wie dies in Abbildung 16.15 durch die Punkte dargestellt ist, so liegen diese Punkte auf einer Kurve, welche durch die elementare Funktion $N_c = \cot(\varphi)$ beschrieben werden kann.

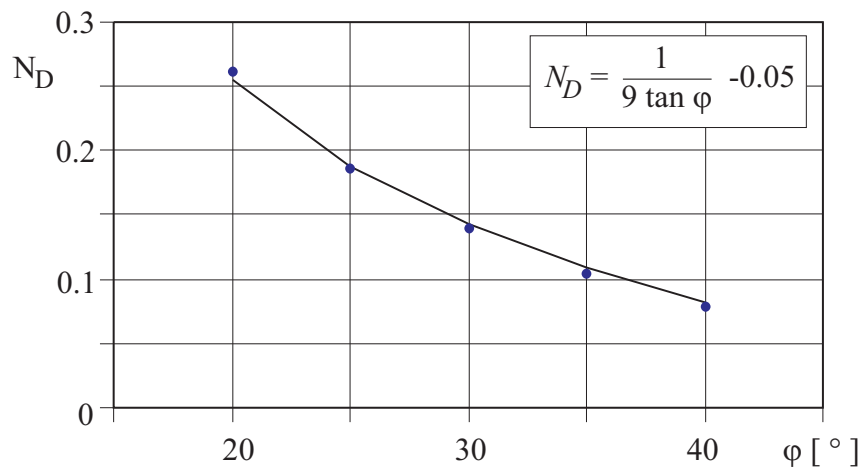


Abbildung 16.13: Der Koeffizient N_D als Funktion des Reibungswinkels, ermittelt aufgrund der Daten in Abbildung 16.12.

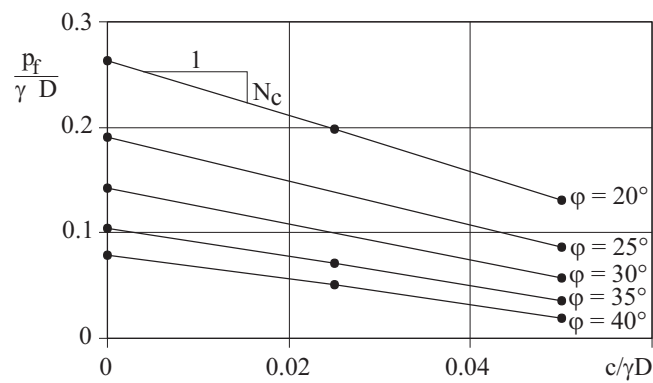


Abbildung 16.14: Abhängigkeit des normierten Bruchdrucks $p_f/\gamma D$ von der *normierten Kohäsion* $c/\gamma D$ bei unterschiedlichen Reibungswinkeln aufgrund einer Vielzahl an FE-Analysen.

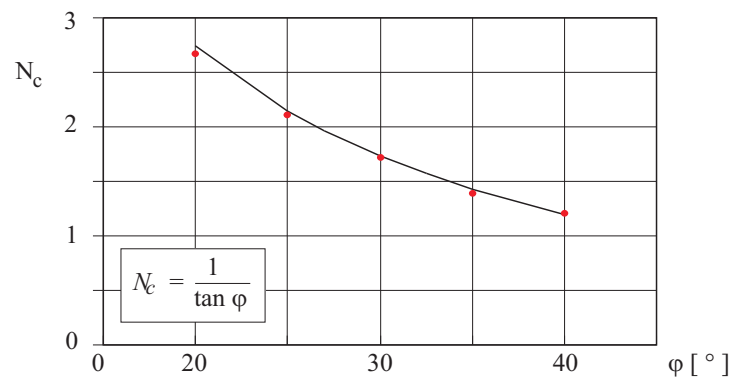


Abbildung 16.15: Der Kohäsionsbeiwert N_c als Funktion des Reibungswinkels.

16.7 Auswertung und Erweiterung der Ergebnisse

Durch die Berechnungen an dreidimensionalen Tunnelmodellen und einer systematischen Analyse konnte Folgendes festgestellt werden. Erstens, dass der Bruchdruck unabhängig vom angesetzten Erdruchdruckbeiwert K_0 ist, und zweitens, dass bei Böden und Fels mit Reibungswinkeln $\varphi > 20^\circ$ der Bruchdruck unabhängig von der Tiefenlage des Tunnels ist. Mit diesen Kenntnissen konnte eine sehr einfache Entwurfsformel definiert werden mit der es möglich ist, den Stützdruck auf die Ortsbrust im Bruchzustand für Tunnels zu bestimmen. Es ergibt sich die Formel:

$$p_f = -cN_c + \gamma D N_D \quad N_c = \frac{1}{\tan \varphi} \quad N_D = \frac{1}{9 \tan \varphi} - 0,05. \quad (16.4)$$

Für das Auffahren von Tunnels benötigt man in der Praxis Stützdrücke die etwas über dem Bruchdruck p_f liegen, da es schwankende Bodenparameter und Unsicherheiten im Bauablauf gibt. Es wäre hier nicht angebracht, den errechneten Bruchdruck einfach um einen Anteil von z.B. 20 % zu erhöhen, da dies im Sonderfall $p_f = 0$ überhaupt keine Sicherheit ergeben würde. Zur Ermittlung des sicheren Stützdrucks, d.h. einem erforderlichen Druck p_{erf} , wird in Gleichung 16.4 c durch c/η_{erf} ersetzt und $\tan \varphi$ durch $\tan \varphi/\eta_{erf}$. Für den Stützdruck p_{erf} ergibt sich damit folgende Formulierung:

$$p_{erf} = \gamma D \left(\frac{\eta_{erf}}{9 \tan \varphi} - 0,05 \right) - \frac{c}{\tan \varphi}, \quad (16.5)$$

wobei η_{erf} der erforderliche Sicherheitsbeiwert ist. Während des Baus werden im allgemeinen nur geringe Sicherheiten verlangt. Beim Tunnelbau ergeben sich hier keine genauen Vorschriften, aber man könnte z.B. $\eta_{erf} = 1,2$ in Betracht ziehen.

Anstelle der Ermittlung von p_{erf} und der Kontrolle $p \geq p_{erf}$, kann man auch bei gegebenem Stützdruck p die vorhandene Sicherheit η errechnen und anschließend kontrollieren, ob die Bedingung $\eta \geq \eta_{erf}$ erfüllt ist. Ersetzt man p_{erf} durch p und η_{erf} durch η , erhält man durch Umformulierung von Gleichung 16.5 folgende Formel:

$$\eta = \frac{9}{\gamma D} (c + p \tan \varphi) + 0,45 \tan \varphi. \quad (16.6)$$

In der Spritzbetonbauweise, auch Neue Österreichische Tunnelbauweise (NÖT) genannt, werden im allgemeinen Tunnels mit ungestützter Ortsbrust aufgefahren. In diesem Spezialfall $p = 0$ erhält man mit Gleichung 16.6 für die vorhandene Sicherheit:

$$\eta = \frac{9c}{\gamma D} + 0,45 \tan \varphi \quad (p = 0). \quad (16.7)$$

Diese Formel zeigt ganz deutlich die Bedeutung der Kohäsion, d.h. die klassische NÖT verlangt eindeutig einen kohäsiven Boden oder Fels. Ist diese Kohäsion nur in geringem Ausmass vorhanden, so bietet sich eine Verringerung des Tunneldurchmessers an, d.h. ein

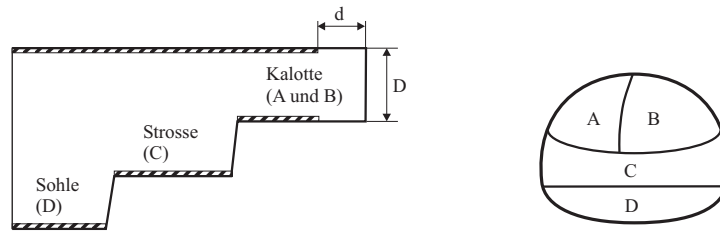


Abbildung 16.16: Tunnelvortrieb in Teilausbrüchen bei der Spritzbetonbauweise in einem Längs- und Querschnitt.

Auffahren des Tunnels mit Teilausbruch. Zum Entwurf eines Vortriebs in Teilausbrüchen, wie z.B. in Abbildung 16.16 angegeben, stellt sich nun die Frage nach dem maximal möglichen Durchmesser D_f . Die Kalottenausbrüche A und B in Abbildung 16.16 sind zwar nicht kreisrund, aber sie können gut von kreisrunden Querschnitten angenähert werden. Den maximal möglichen Durchmesser erhält man nun für $\eta = 1$ aus Gleichung 16.7. Es ergibt sich damit folgende Gleichung:

$$D_f = \frac{9c}{\gamma} \frac{1}{1 - 0,45 \tan \varphi} \approx 12 \frac{c}{\gamma} \quad (p = 0). \quad (16.8)$$

Die letzte Annäherung ist nahezu exakt für den Reibungswinkel $\varphi = 30^\circ$. Für Reibungswinkel von $20^\circ < \varphi < 35^\circ$ wie es in der Praxis häufig der Fall ist, ist die Annäherung auch sehr brauchbar. Bei $\varphi = 20^\circ$ ergibt sich $D_f = 10,8 c/\gamma$ und bei $\varphi = 35^\circ$ wird $D_f = 13,1 c/\gamma$ gefunden. Die Annäherung $12c/\gamma$ ist also ein sehr guter Ansatz.

Abbildung 16.16 zeigt, dass die vorliegende Analyse für einen kreisrunden Tunnel auch für den Kalottenausbruch (A und B) anwendbar ist, jedoch nicht für die Teilausbrüche C und D . Beim Vortrieb der sog. Strosse C und der sog. Sohle D stellt sich das quasi zweidimensionale Problem einer Steilböschung. Die Stabilität der Ortsbrust von Strosse und Sohle bilden also einen anderen Versagensmechanismus wie die der Kalotte und stellt für den Tunnelbau ein untergeordnetes Problem dar.

Im Falle eines Tunnels in der Spritzbetonbauweise kann durch die Kenntniss der maximalen Ausbruchsfläche der Tunnelvortrieb entsprechend ausgelegt werden. Einerseits kann bei einer ausreichend großen möglichen Ausbruchsfläche der Tunnel mit Vollausbau aufgeföhren werden, andererseits kann bei einem kleinen errechneten Durchmesser D_f entschieden werden, wie die Teilausbrüche erfolgen sollen.

16.8 Schlussfolgerungen und Schlussbemerkungen

Die in diesem Beitrag vorgestellten Untersuchungen und Erkenntnisse basieren auf einer Vielzahl von Ergebnissen aus dreidimensionalen FE-Berechnungen. Es wurde gezeigt, dass bei einem reibungslosen Materialien der Bruchdruck p_f fast linear mit der Tiefenlage des Tunnels zunimmt. Dieses Ergebniss zeigt eine exzellente Übereinstimmung mit den Resultaten von *Atkinson & Mair* [5], welche auf experimentellen Untersuchungen basieren.

Für Böden und Fels mit Reibungswinkeln zwischen $20^\circ < \varphi < 40^\circ$ wurde gezeigt, dass der Bruchdruck unabhängig von der Überdeckung des Tunnels ist. Weiterhin konnte nachge-

wiesen werden, dass der Bruchdruck unabhängig vom Erdruchdruckbeiwert K_0 ist. Mit den gewonnenen Erkenntnissen konnte eine geschlossene Formel, ähnlich der Grundbruchformel entwickelt werden, mit der es möglich ist den Bruchdruck zu ermitteln. Daraus wurden geschlossene Formeln abgeleitet, die es ermöglichen einen Sicherheitsbeiwert für die Stabilität der Ortsbrust sowie die maximale Ausbruchfläche eines Tunnels ohne zusätzliche Sicherungsmittel zu berechnen.

Mit Hilfe der vorgestellten Formeln ist es nun möglich, zumindest bei homogenen Baugrund- und einfachen Grundwasserverhältnissen, auf aufwendige computerorientierte Verfahren zu verzichten. Im allgemeinen Fall ergeben sich komplexere Situationen, in denen die hergeleiteten Formeln als Entwurfsformeln anwendbar sind. Die Verwendung der Formeln geben dann einen schnellen Einblick in die tunnelstatischen Probleme an der Ortsbrust und führen zu einem Bauschema.

Bei der Ermittlung des Bruchdrucks sind in dieser Studie nur Tunnels in nicht dilatantem Material untersucht worden, obwohl es vermutlich einen Einfluss des Dilatanzwinkels ψ geben wird. Bei oberflächennahen Fundamenten wurde zwar kein Einfluss festgestellt Vermeer [20], aber bei tiefliegenden zeigte sich ein erheblicher Einfluss, und so läßt sich dies auch an der Ortsbrust eines Tunnels vermuten. Diese Studie verlangt also eine Erweiterung indem mehrere FE-Analysen für einen realistischen Dilatanzwinkel, z.B. $\psi = 10^\circ$, wiederholt werden. Die bisherige Vernachlässigung des dilatanten Materialverhaltens liegt zwar auf der sicheren Seite, aber dies ist im Tunnelbau häufig nicht vertretbar. Eine wirtschaftliche Spritzbetonbauweise verlangt z.B. eine maximale Ausbeutung des Materials, wobei die Sicherheit über eine kontinuierliche Beobachtung gewährleistet wird. In solchen Situationen passt es nicht, die Dilatanz als Stille Materialreserve zu betrachten. Bei Anwendung der Resultate dieser Studie auf Tunnels die im Schildvortrieb aufgefahen werden, sollte man sich die Einschränkung auf nichtdilatantes Material realisieren. Darüberhinaus sollte man sich beim Schildvortrieb auch mit dem Problem des maximalen Stützdrucks (blow-out) befassen.

Von Anwendung der Formeln auf Tunnels, die in der Spritzbetonbauweise (NÖT) aufgefahen werden, sollte vorerst stark abgeraten werden. Diese Warnung geht aus den bisherigen geometrischen Idealisierungen hervor. Dies ist sicherlich nicht verbunden mit der Annahme eines kreisrunden Tunnels, sondern mit der Vernachlässigung der Abschlagslänge. Es wurde zwar eine kleine relative Abschlagslänge von $d/D = 1/40$ angenommen, aber diese geringe Länge wurde nur aus numerischen Gründen eingeführt. Da sich in der Praxis Abschlagslängen von bis zu zwei Metern ergeben, liegen die Formeln dieser Studie extrem auf der unsicheren Seite. Zur Herleitung von Formeln, die direkt auf die Spritzbetonbauweise anwendbar wären, sind neue FE-Analysen für relative Abschlagslängen bis $d/D = 1/5$ geplant. Es sollen sowohl FE-Analysen bei $d/D = 1/20$ als auch bei $1/10$ und $1/5$ durchgeführt werden. Damit sollen sowohl der Kohäsionsbeiwert N_c und der Durchmesserbeiwert N_D als Funktion sowohl des Reibungswinkels φ als auch der relativen Abschlagslänge d/D ermittelt werden.

Dem Titel nach ist diese Studie nicht direkt auf geklüfteten Fels anwendbar. Die Homogenisierung eines geklüfteten Materials wäre jedoch möglich im Falle, dass der Abstand zwischen den Klüften klein im Vergleich zum Tunneldurchmesser ist. Abschließend soll noch auf mögliche Einwirkungen des Grundwassers hingewiesen werden. Genau so wie die Bruchkörperstatik (Anagnostou & Kovári [3]) können auch die hergeleiteten Formeln zur Berücksichtigung des Grundwassers erweitert werden.

Literaturverzeichnis

- [1] G. Anagnostou. Modelling seepage flow during tunnel excavation. *Proc. ISRM International Symposium - EUROCK 93, Safety and Environmental Issues in Rock Engineering*, A.A. Balkema Verlag, Rotterdam, 1:3–10, 1993.
- [2] G. Anagnostou. Influence of tunnel excavation on hydraulic head. *International Journal of Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 19:725–764, 1995.
- [3] G. Anagnostou and K. Kovári. The face stability of slurry-shield-driven tunnels. *Tunneling and Underground Space Technology*, Elsevier Science Ltd, Amsterdam, 9(2):165–174, 1994.
- [4] G. Anagnostou and K. Kovári. Face stability conditions with earth-pressure-balanced shields. *Tunneling and Underground Space Technology*, Elsevier Science Ltd, Amsterdam, 11(2):165–173, 1996.
- [5] J.H. Atkinson and R.J. Mair. Soil mechanics aspects of soft ground tunneling. *Ground Engineering*, 14(5):20–38, 1981.
- [6] R. Brinkgreve and P. Vermeer. *Plaxis - Finite Element Code for Soil and Rock Analyses, Version 7*. A.A. Balkema Verlag, Rotterdam, 1998.
- [7] E. H. Davis, M. J. Gunn, R. J. Mair, and H. N. Seneviratne. The stability of shallow tunnels and underground openings in cohesive material. *Géotechnique*, 30(4):397–416, 1980.
- [8] R. de Borst. Integration of plasticity equations for singular yield function. *Computers and Structures*, 2:823–829, 1987.
- [9] M. Horn. Horizontaler Erddruck auf senkrechte Abschlussflächen von Tunnelröhren. *Landeskonferenz der Ungarischen Tiefbauindustrie, Budapest*, 1961. Translation into German by STUVA, Szöreyi, G.
- [10] H. A. Janssen. Versuche über Getreidedruck in Silozellen. *Zeitschrift des Vereins Deutscher Ingenieure*, Band XXXIX(35):1045–1049, 1895.
- [11] T. Kimura and R.J. Mair. Centrifugal testing of model tunnels in soft clay. *Proceedings of the 10th International Conference on Soil Mechanics and Foundation Engineering*, Stockholm, A.A. Balkema Verlag, Rotterdam, 1:319–322, 1981.
- [12] D. Kolymbas. *Geotechnik - Tunnelbau und Tunnelmechanik*. Springer-Verlag, Berlin, 1998.
- [13] K. Kovári and P. Lunardi. On the observational method in tunneling. *Proceedings of GeoEng 2000: An International Conference on Geotechnical & Geological Engineering*, Technomic Publishing Company Inc., Lancaster, 1:692–707, 2000.
- [14] E. Leca, Y. Leblais, and K. Kuhnhehn. Underground works in soils and soft rock tunneling. *Proceedings of GeoEng 2000: An International Conference on Geotechnical & Geological Engineering*, Technomic Publishing Company Inc., Lancaster, 1:220–268, 2000.

- [15] R.J. Mair and R.N. Taylor. Bored tunnelling in the urban environment. *Proceedings of the 14th International Conference on Soil Mechanics and Foundation Engineering, Hamburg, A.A. Balkema Verlag, Rotterdam*, 4:2353–2385, 1997.
- [16] E. Riks. An incremental approach to the solution of snapping and buckling problems. *International Journal for Solids and Structures*, 15:529–551, 1979.
- [17] H.-H. Schmidt. *Grundlagen der Geotechnik, Bodenmechanik - Grundbau - Erdbau*. B.G. Teubner Verlag, Stuttgart, 1996.
- [18] A. N. Schofield. Cambridge geotechnical centrifuge operations. *Géotechnique*, 30(3):227–268, 1980.
- [19] K. Terzaghi and R. Jelinek. *Theoretische Bodenmechanik*. Springer-Verlag, Berlin, 1954.
- [20] P. A. Vermeer. Non-associated plasticity for soils, concrete and rock. *Proceedings NATO Advanced Study Institute on Physics of Dry Granular Media, Kluwer Academic Publisher, Dordrecht*, Series E: Applied Sciences - Vol. 350:163–196, 1997.
- [21] P. A. Vermeer. Ortsbruststabilität von Tunnelbauwerken am Beispiel des Rennsteig Tunnels. 2. Kolloquium -Bauen in Boden und Fels-. *Technische Akademie Esslingen, Ostfildern*, 2000.
- [22] P. A. Vermeer and N. Ruse. Face stability when tunneling in soil and homogeneous rock. *Proceedings of the John Booker Memorial Symposium, Sydney. A.A. Balkema Verlag, Rotterdam*, pages 123–138, 2000.
- [23] P. A. Vermeer and N. Ruse. On the stability of the tunnel excavation front. *Proceedings of the First M.I.T. Conference on Computational Solid and Fluid Mechanics. Cambridge, MA, in press*, 2001.
- [24] H. Ziegler. Zum plastischen Potential in der Bodenmechanik. *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik (ZAMP)*, 20(5):659–675, 1969.

17

Änderung des Korngefüges durch Abrasion

R. Katzenbach und G. Festag
Institut und Versuchsanstalt für Geotechnik
Technische Universität Darmstadt
D-64287 Darmstadt

Zusammenfassung. *Der Beitrag befasst sich mit dem Deformationsverhalten von Sand unter zyklischer Belastung und mit dem Einfluss der Kornzertrümmerung auf das Deformationsverhalten eines Sandes. Bei Kornzertrümmerung lassen sich, je nach Größe der erzeugten Bruchstücke, zwei völlig verschiedene Vorgänge unterscheiden: Fragmentation und Abrasion. Fragmentation beschreibt die Zerlegung des Korns in annähernd gleich große Stücke, bei der Abrasion werden sehr kleine Stücke durch Abplatzen von der Kornoberfläche abgetragen. Zur Untersuchung des Einflusses der Abrasion auf das Deformationsverhalten von Sand wurden Triaxialversuche mit bis zu 5 Mio. Belastungszyklen durchgeführt. Insbesondere bei kantigem Ausgangsmaterial können Effekte der Abrasion beobachtet werden, so sind u.a. andauernde plastische Verformungszunahmen und plötzliche Änderungen des Deformationsverhalten zu beobachten. Durch die Untersuchung der Rundheit der Einzelkörner konnte festgestellt werden, dass gerade besonders kantiges Material unter wiederholter Belastung zunehmend runder wird. Die Rundheit der Körner kann damit als Maß für die Abrasion angesehen werden.*

17.1 Einleitung

Das Verformungsverhalten von Sand unter zyklischer Belastung ist von baupraktischer Bedeutung für die Gründung von Bauwerken mit häufig wechselnden Lastereignissen. Zu solchen Bauwerken zählen Kranbahnen, Öl- und Wassertanks, Maschinenfundamente, Off-Shore-Bauwerke und Verkehrswege. Im Rahmen der hier vorgestellten Forschungen werden Belastungen betrachtet, die im Verhältnis zur aufnehmbaren Belastung vergleichsweise gering sind. Bei den durchgeführten Untersuchungen zum Verformungsverhalten von Sand unter zyklischer Belastung wurden ein permanenter Zuwachs der plastischen Dehnungen und einige spontan auftretende Verformungen, die auf eine Umlagerung im Kornhaufwerk zurückzuführen sind, beobachtet. Maßgebend für die auftretenden Verformungen ist der am einzelnen Korn auftretende Abrieb (Abrasion). Unter Abrasion wird das Abplatzen kleiner Partikel von der Kornoberfläche verstanden. Diese Abplatzungen treten unter Belastung

insbesondere an den Kontaktstellen zwischen den Körnern durch lokale Überschreitung der Korn-/Mineralfestigkeit auf. Ein anderes Phänomen der Kornzertrümmerung ist die Fragmentation. Hierbei wird das Korn in annähernd gleich große Stücke aufgeteilt. Fragmentation tritt erst dann auf, wenn die Festigkeit des gesamten Korns überschritten wird, sie ist also nur bei einem relativ hohen Spannungsniveau zu beobachten, wohingegen Abasion unabhängig vom Spannungsniveau auftritt, was durch die durchgeführten Versuche bestätigt wird. Das Spannungsniveau wurde so gewählt, dass Fragmentation praktisch ausgeschlossen ist. Siebanalysen bestätigen dies. Das Verformungsverhalten von Sand unter zyklischer Beanspruchung wird an Sandproben im Triaxialversuch untersucht.

17.2 Verformungsverhalten von Sand

Für die Beschreibung des Materialverhaltens unter unterschiedlichen Belastungsbedingungen werden Stoffgesetze und Materialgleichungen unterschiedlicher Komplexität und Betrachtungsweise verwendet. Hierbei sind zwei verschiedene Betrachtungsweisen zu unterscheiden, zum Einen die mikroskopische Betrachtung und zum Anderen die makroskopische Betrachtung (phänomenologische Betrachtung). In der Geotechnik überwiegt derzeit die makroskopische Betrachtungsweise. Materialkennwerte, wie z.B. der Winkel der inneren Reibung und die Kohäsion, werden an einer Probe aus äußeren Messwerten im Labor bestimmt. Der Winkel der inneren Reibung als phänomenologische Größe umfasst pauschal und integrierend die Einflüsse aus der „Korn zu Korn Reibung“, aus der Kornform, aus der Lage der Einzelkörner im Kornhaufwerk, aus der Lagerungsdichte u.a. Die entsprechenden mikromechanischen Kennwerte sind zum Großteil nicht bekannt und nur schwer zu ermitteln. Hinzu kommt, dass eine Modellierung eines geotechnischen Problems mit der Modellierung aller Einzelkörner derzeit die verfügbaren Rechenkapazitäten bei weitem überschreiten würde. Dennoch werden erste Versuche in dieser Richtung mit der Distinct-Element Methode unternommen [3].

Die Verformungen nichtbindiger Böden setzen sich von Beginn der Belastung an aus reversiblen und irreversiblen Komponenten zusammen. Bei Erreichen eines höheren Spannungsniveaus führt eine Entlastung auch zu größeren Hystereseschleifen [8]. Auch rein hydrostatische Belastungen führen sowohl zu nichtlinearen elastischen als auch zu plastischen Verformungen. Dieses Verhalten kann näherungsweise mit elastoplastischen Stoffgesetzen mit isotroper und kinematischer Verfestigung [5, 10] und mit hypoplastischen Stoffgesetzen [9] beschrieben werden.

17.3 Triaxialversuche

Der Triaxialversuch ist ein axialsymmetrischer Druckversuch an homogenen zylindrischen Proben. Unter Vernachlässigung der Störungen, die durch die Endflächen bedingt sind, kann der Triaxialversuch als Elementversuch angesehen werden. Die Hauptspannung σ_1 ist betragsmäßig die größte Hauptspannung. Die Hauptspannungen σ_2 und σ_3 , die radial an der Probe angreifen, sind gleich. Der Probekörper befindet sich in einer Druckzelle. Die radiale Hauptspannung wird meist durch Flüssigkeitsdruck, die axiale Hauptspannung durch einen verschiebblichen Stempel aufgebracht. Man unterscheidet den hydrostatischen Versuch ($\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma_3$), den Triaxialkompressionsversuch ($\sigma_1 > \sigma_2 = \sigma_3$) und den Triaxia-

Abbildung 17.1: Photo und Übersichtsskizze des Versuchsstandes für zyklische Triaxialversuche

Die an der Probe auftretenden Verformungen werden an der Probe mit drei Hall-Effekt Sensoren gemessen, von denen zwei die axialen Verformungen und einer die Durchmesseränderung der Probe im mittleren Drittel der Probe bestimmen. Das Messprinzip basiert

auf der Bestimmung des durch einen Magneten induzierten Spannungsfeldes. Daher ist das System quasi Reibungsfrei und minimiert den Einfluss des Messsystems auf die Versuchssprobe. Mit den Hall-Effekt Sensoren ist eine Auflösung von $2\text{ }\mu\text{m}$ und eine Genauigkeit von ca. $10\text{ }\mu\text{m}$ erreichbar. Eine solch hohe Auflösung ist für die relativ kleinen Verformungszyklen notwendig. Die Messwerterfassung erfolgt computergesteuert über eine PC, der die Messwerte von allen Messgebern gleichzeitig mit bis zu 50 Hz erfassen kann. Um die Datenmenge beherrschbar zu machen wurde statt der permanenten Messwerterfassung eine Intervallerfassung gewählt, die bei den Langzeitversuchen (≥ 1 Woche) jede Stunde zehn Lastspiele erfasst und auswertet.

17.3.2 Versuchsmaterial

Für die zyklischen Triaxialversuche wurden zwei verschiedene Sande verwendet. Zum Einen wurde ein Quarzsand, dessen Körner nach ASTM D 2488 als gut gerundet klassifiziert werden, zum Anderen ein doppelt gebrochener Gabbro-Edelbrechsand, der nach ASTM D 2488 ein eckiges Material ist, verwendet. Der Quarzsand stammt aus der hessischen Rheinebene und hat seinen Rundungsgrad aus dem langen fluviatilen Transport erhalten. Er besteht zu 74% aus Quarz, zu 15% aus Feldspat und einigen untergeordneten Beimengungen. Der Gabbro-Edelbrechsand stammt aus einem Steinbruch im Odenwald und wurde dort maschinell gebrochen. Mineralogisch setzt er sich aus 45% Plagioklas, 18% Glimmer, 16% Hornblende, 12% Quarz und einigen untergeordneten Beimengungen zusammen. Vom Mineralaufbau ist er als deutlich weicher als der Quarzsand anzusehen [6, 7].

An beiden Sanden werden weg- und kraftgesteuerte Triaxialversuche mit monotoner Belastung zur Bestimmung der Materialparameter und zyklische, kraftgesteuerte Triaxialversuche mit bis zu fünf Millionen Lastspielen durchgeführt. Das Probenmaterial wurde vor dem Einbau im Trockenofen bei 105°C getrocknet.

17.3.3 Versuchsergebnisse der Triaxialversuche

Die Proben wurden in den Versuchsstand eingebaut und bei 150 kN/m^2 konsolidiert. Der Zelldruck wurde für die anschließende Versuchsphase auf diesem Wert konstant gehalten. Die Versuche wurden im Klimaraum bei konstanter Temperatur durchgeführt. Anschließend an die Konsolidierungsphase wurde eine zyklisch wechselnde Vertikallast aufgebracht. Die Belastung folgt einem Sinusverlauf mit einer Frequenz von 1 Hz und einer Belastungsamplitude von $\Delta\sigma_1 = 150\text{ kN/m}^2$. Die Vertikallast wechselte zwischen $\sigma_1 = 200\text{ kN/m}^2$ und $\sigma_1 = 350\text{ kN/m}^2$. Die Versuche wurden mit beiden Materialien und unterschiedlichen Einbaudichten durchgeführt. Exemplarisch werden im Folgenden ein Teil der Ergebnisse von zwei Versuchen dargestellt. Ein Versuch mit Quarzsand und einer mit Gabbro-Edelbrechsand, die mit der gleichen relativen Einbaudichte durchgeführt wurden.

Die aus den Lastspielen resultierenden Vertikalverformungen sind als Dehnungen über der Lastspielzahl in Abbildung 17.2 aufgetragen. Auf der Ordinate ist die Lastspielzahl aufgetragen und auf der Abszisse die gemessene Vertikaldehnung. Die obere Kurve zeigt die in jedem Versuch aufgetretene minimale Vertikaldehnung, also die Dehnung, die zu der

kleinsten Vertikalspannung im Belastungszyklus gehört, die untere Kurve zeigt die maximal aufgetretene Vertikaldehnung, die bei der maximalen Belastung in jedem Lastspiel auftritt. Wie in der Geotechnik üblich sind Stauchungen positiv und Zerrungen negativ aufgetragen. Der Abstand der beiden Kurven zeigt die in jedem Belastungszyklus auftretenden elastischen Vertikaldehnungen. Man erkennt die zu Beginn des Versuchs auftretenden plastischen Vertikaldehnungen, deren Inkremente mit zunehmender Lastspielzahl abnehmen, aber nicht ganz verschwinden. Es sind verschiedene Phasen zu beobachten. Teilweise verschwinden die plastischen Inkremente fast vollständig, darauf folgen Phasen mit plötzlich zunehmenden Dehnungsincrementen. Nach [1] kann das Verformungsverhalten eines elasto-plastischen Materials unter zyklischer Belastung in verschiedene Bereiche unterteilt werden. Wenn die Belastungsamplitude genügend klein ist treten fast ausschließlich elastische Verformungen auf. Wenn die Belastungsamplitude einen gewissen Betrag überschreitet können zwei typische Verhalten beobachtet werden. Zum Einen kann sich nach einer gewissen Anzahl von Lastspielen quasi ein Gleichgewichtszustand einstellen, so dass nur noch elastische Verformungen oder geschlossene plastische Verformungshysteresen zu beobachten sind. Dieser Zustand wird als „shakedown“ bezeichnet. Zum Anderen können sich bei größerer Belastung oder nach einer weiteren Anzahl von Lastspielen Verformungshysteresen ausbilden, die nach einem Lastspiel nicht mehr zur Ausgangskonfiguration zurückkehren. Wenn die Verformungshysteresen von Lastspiel zu Lastspiel um einen konstanten Betrag verschoben werden spricht man von „ratcheting“. Egal ob solche Hysteresen bei jedem Lastspiel um einen nahezu konstanten oder zunehmenden Betrag versetzt werden, führen sie doch früher oder später zum Versagen der Struktur. In Abbildung 17.2 können drei „shakedown“-Bereiche beobachtet werden, die aber nach einer bestimmten Anzahl von Lastspielen zu neuen Dehnungsincrementen führten. Diese plötzlichen Änderungen des Verformungsverhaltens werden mit auftretender Abrasion und dadurch ausgelöster Änderung der Struktur des Kornhaufwerks in Verbindung gebracht. Bemerkenswert ist, dass auch nach vier Millionen Lastspielen die plastischen Dehnungsinkremente nicht verschwunden sind, sondern weiterhin eine Zunahme der plastischen Vertikaldehnung zu beobachten ist („ratcheting“). Ein Versagen der Probe ist also unter den im Versuch vorliegenden Randbedingungen (wie übrigens in allen durchgeführten Versuchen) nicht auszuschließen. Auch die Auswertung der Spannungs-Verformungs-Verlaufs zeigt bis zum Ende des Versuchs offene Hystereseschleifen, was zeigt, dass weiterhin Energie dissipiert wird (Abbildung 17.3). Ein „shakedown“-Zustand, bei dem keine weiteren Verformungen auftreten, ist nicht nachweisbar. Nach Versuchsende wurde die Korngrößenverteilung des betesteten Materials ermittelt. Es konnte keine signifikante Änderung zum Ausgangsmaterial festgestellt werden.

Der im Folgenden dargestellte Versuch mit Quarzsand wurde entsprechend dem Vorgehen beim Gabbro-Edelbrechsand eingebaut und belastet. Allerdings wurde nach etwa drei Millionen Lastspielen die Belastungsamplitude in mehreren Schritten erhöht. Während der ersten 3,1 Millionen Lastspiele ist eine kontinuierliche, fast lineare Zunahme der plastischen Vertikaldehnungen zu beobachten. Dies deutet auf ein konstantes plastisches Dehnungsincrement und damit auf den typischen Fall des „ratcheting“ hin. Die Entwicklung der Vertikaldehnung ist in Abbildung 17.4 dargestellt. Ein ausgeprägter „shakedown“-Zustand konnte bei den Versuchen an Quarzsand nicht festgestellt werden. Anschließend an die erste Belastungsphase wurde die Belastungsamplitude in mehreren Stufen erhöht. In keiner der Laststufen waren die beim Gabbro-Edelbrechsand zu beobachtenden zunehmenden

Abbildung 17.3: Spannungs-Verformungs-Hysteresen - Gabbro-Edelbrechsand. Kurvenparameter: Lastspielzahl

Deutlich wird aber, dass die Vertikalverformungen zwischen einem linearen und asymptotischen Verhalten liegen, also zwischen einem „ratcheting“ und einem „shakedown“-Verhalten. In Abbildung 17.5 ist das Spannungs-Dehnungsverhalten des Quarzsandes dargestellt. Im Vergleich zu den Verformungshysteresen des Gabbro-Edelbrechsandes schließen sie eine kleinere Fläche (entspricht der dissipierten Energie) ein und sind steiler geneigt. Das zeigt, dass weniger Energie dissipiert wurde und damit auch weniger Energie für Abrasionsprozesse zur Verfügung steht. Dies mag ein Grund für das gleichmäßigere Verhalten des Quarzsandes sein.

Abbildung 17.5: Spannungs-Verformungs-Hysteresen - Quarzsand. Kurvenparameter: Lastspielzahl

17.4 Veränderung der Kornform

Im letzten Kapitel wurden die makroskopischen Beobachtungen an einer zyklisch belasteten Probe im Triaxialversuch dargestellt. Das Verformungsverhalten des Gabbro-Edelbrechsandes kann in verschiedene „shakedown“-Bereiche eingeteilt werden, die durch ein plötzlich auftretendes diskontinuierliches Verformungsverhalten von einander getrennt sind. Dieses Verhalten kann mit Abrasion in Verbindung gebracht werden. Im Gegensatz dazu konnte ein solch ausgeprägtes Verhalten beim Quarzsand nicht festgestellt werden. Um die Ursachen des Deformationsverhaltens zu untersuchen, wurden mikroskopische Untersuchungen an den Körnern der Versuchsproben durchgeführt.

17.4.1 Bestimmung des Rundungskoeffizienten

Abrasion ist das Abplatzen von kleinen Partikeln von der Kornoberfläche. An den Kontaktpunkten der Körner im Kornhaufwerk wird die lokale Festigkeit des Minerals oder Mineralgefüges überschritten und dabei platzen kleine Teile des Korns schollenartig ab. Um dieses Verhalten zu beobachten, wird die Kornform einer genügend großen Anzahl von Einzelkörnern am Ausgangsmaterial und am betesteten Material bestimmt. Die Kornform wird meistens über den Rundungskoeffizienten beschrieben. Der am häufigsten verwendete Rundungskoeffizient ist der nach [2]. Bei diesem Koeffizienten handelt es sich um ein normiertes Maß der Rundheit eines 2D-Abbilds eines Körpers. Der Rundungskoeffizient ist das Verhältnis der Fläche zum Umfang der ebenen Projektion eines Korns:

$$K = \frac{4 \cdot \pi \cdot A}{U^2} \quad (17.1)$$

K ist der Rundungskoeffizient, A ist die Fläche der ebenen Projektion des Körpers und U ist der Umfang des ebenen Abbilds. Der Rundungskoeffizient kann Werte zwischen null und eins annehmen, wobei null einer Linie entspricht und eins einem Kreis. Durch die Normierung auf einen Kreis ergibt der Rundungskoeffizient den prozentualen Anteil, den die Fläche des Korns im Verhältnis zu der Fläche eines Kreises hat, der den gleichen Umfang wie das Korn besitzt.

Die Bestimmung des Rundungskoeffizienten sollte mittels einer EDV-basierten Strategie möglich sein, um reproduzierbare Ergebnisse an einer größeren Anzahl von Körnern erhalten zu können. Dazu wurde folgendes Arbeitsschema entwickelt. Eine Anzahl von Körnern wird auf einen hochauflösenden Durchlichtscanner gelegt. Dabei dürfen die Sandkörner sich nicht berühren, damit die nachfolgend eingesetzte Software die einzelnen Körner einfach erkennen und segmentieren kann. Durch das Scannen erhält man ein pixelbasiertes Graustufenbild der ebenen Projektion der Sandkörner, das die Grundlage für die Bestimmung des Rundungskoeffizienten ist. Dieses Graustufenbild muss noch in einigen Schritten bearbeitet werden, um ein geeignetes Ergebnis zu erzielen. In einem ersten Schritt muss das Bild von Unsauberkeiten und Staub gereinigt werden, hierzu werden alle zusammenhängenden Flächen, die kleiner als ein bestimmter Wert sind aus dem Bild gelöscht. Da die Kornverteilung beim Einbau nur aus Körnern mit einem Durchmesser größer als 0,25 mm bestand können alle wesentlich kleineren Partikel auf dem Bild als Unreinheit gewertet und vernachlässigt werden. Um eine ausreichend genaue Bestimmung des Rundungskoeffizienten zu gewährleisten, sollten die einzelnen Körner mit jeweils mehr als 100 Pixeln abgebildet werden. Ist dies nicht der Fall, so müssen die Körner erneut mit einer höheren Auflösung gescannt werden. Als nächster Schritt wird das Bild in ein schwarz/weiß Bild konvertiert. Dazu wird die Grauwertverteilung des Bildes bestimmt. Beim Minimum der Grauwertverteilung wird die Unterscheidung zwischen schwarz und weiß angesetzt. Damit kann der Hintergrund des Bildes von den Sandkörnern abgetrennt werden. Nun besteht das digitale Bild der Sandkörner aus schwarzen Bereichen, die die Körner repräsentieren und einer zusammenhängenden weißen Fläche, die den Hintergrund repräsentiert. Im nächsten Schritt sucht die Software nach schwarzen Bereichen und gibt jedem zusammenhängenden Bereich eine digitale Signatur, über die dieser Bereich im Weiteren angesprochen werden kann. Nun zählt die Software für jeden Bereich die Anzahl Pixel der Fläche und des Umfangs. Unter Berücksichtigung der Auflösung kann dann die Fläche und der Umfang jedes Korns be-

Abbildung 17.7: Ablaufdiagramm zur Bestimmung des Rundungskoeffizienten

17.4.2 Ergebnisse der Bestimmung des Rundungskoeffizienten

In einem Vorversuch wurden 600 Sandkörner gescannt, um zu untersuchen, ob die statistische Verteilung des Rundungskoeffizienten einer Normalverteilung entspricht. Der durchgeführte χ^2 -Test zeigte, dass die Annahme einer Normalverteilung mit einem Signifikanzniveau von 0,05 sowohl für den Quarzsand, als auch für den Gabbro-Edelbrechsand

Abbildung 17.8: Rundungskoeffizienten

Die Zuordnung der einzelnen Versuche und die wichtigsten Versuchskennwerte zeigt Tabelle 17.1.

Versuch	Material	Einbaudichte	Lastspielzahl
G0	Gabbro-Edelbrechsand		0
G1	Gabbro-Edelbrechsand	dicht	$0,15 \cdot 10^6$
G2	Gabbro-Edelbrechsand	dicht	$2,0 \cdot 10^6$
G3	Gabbro-Edelbrechsand	dicht	$4,0 \cdot 10^6$
G4	Gabbro-Edelbrechsand	mitteldicht	$2,2 \cdot 10^6$
S0	Quarzsand		0
S1	Quarzsand	dicht	$5,2 \cdot 10^6$

Tabelle 17.1: Versuchskennwerte

Abbildung 17.8 zeigt deutlich die Unterschiede zwischen Gabbro Edelbrechsand und Quarzsand. Da es sich bei dem Gabbro-Edelbrechsand um einen maschinell gebrochenen Sand handelt, besitzt er viele scharfe Kanten und damit einen kleineren Rundungskoeffizienten.

In den beiden Materialien ist auch deutlich die Auswirkung der zyklischen Belastung auf das Einzelkorn zu beobachten. Eine direkte Abhängigkeit des Rundungskoeffizienten von der Lastspielzahl ist offensichtlich. Ebenso scheint es eine Abhängigkeit des Rundungskoeffizienten von der Lagerungsdichte zu geben. Dieser Zusammenhang ist aber nicht ganz so deutlich und muss noch näher untersucht werden.

17.5 Ausblick

Aus den durchgeführten Versuchen konnte der Beweis erbracht werden, dass Abrasion, also das Absplittern kleiner Partikel von der Kornoberfläche, auftritt. Die Langzeitversuche haben nachdrücklich gezeigt, dass Abrasion ein dauerhafter Effekt ist, der bei allen Spannungsniveaus auftritt und gerade im Bereich zyklischer Belastungen nicht vernachlässigt werden darf. Abrasion führt bei kantigem Ausgangsmaterial zu einer Abrundung der Einzelkörner und führt damit verbunden auch zu einer Änderung der bodenmechanischen Parameter, wie dem Winkel der inneren Reibung. Abrasion ist, wie die vorliegenden Versuchsergebnisse zeigen, ein langsamer und permanenter Prozess, der die Granulometrie ändert. Die hier vorgestellten Untersuchungen können nur ein erster Schritt zum besseren Verständnis von granularen Materialien unter wiederholter Belastung sein. Zukünftige experimentelle Untersuchungen werden sich zunächst auf den Zusammenhang zwischen Kornzusammensetzung bzw. Mineralzusammensetzung und Abrasionsneigung konzentrieren. Auf theoretischer Ebene muss ein thermodynamisch konsistentes Modell zur Beschreibung des Verformungsverhaltens von granularen Materialien unter Berücksichtigung der Abrasion entwickelt werden.

Literaturverzeichnis

- [1] I. F. Collins and M. Boulbibane. Geomechanical analysis of unbound pavements based on shakedown theory. *Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering*, 126 (1):50–59, 2000.
- [2] E. P. Cox. A method of assigning numerical and percentage values to the degree of roundness of sand grains. *Journal of Paleontology*, 1:179–183, 1927.
- [3] P. A. Cundall, H. Konietzky, and D. O. Potyondy. PFC Ein neues Werkzeug für numerische Modellierungen. *Bautechnik*, 73/(8):492–498, 1996.
- [4] J. D. Frost and D.-J. Jang. Evolution of the microstructure during shearing. *Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering*, 126 (2):116–130, 2000.
- [5] P. V. Lade and S. Boonyachut. Large stress reversals in triaxial tests on sand. In *Proc. 4th Int. Conf. on Numerical Methods in Geomechanics*, pages 171–182, Rotterdam, 1982. Edmonton, Balkema.
- [6] G. B. McDowel and M. D. Bolton. On the micromechanics of crushable aggregates. *Géotechnique*, 48 (5):667–679, 1998.
- [7] Y. Nakata, A. F. L. Hyde, M. Hyodo, and A. Murata. A probabilistic approach to sand particle crushing in the triaxial test. *Géotechnique*, 49 (5):567–583, 1998.

- [8] F. Tatsuoka, R. J. Jardine, D. Lo Presti, H. Di Benedetto, and T. Kodaka. Characterising the pre failure deformation properties of geomaterials. In *Proc. 14th Int. Conf. on Soil Mechanics and Foundation Engineering*, pages 2129–2164, Rotterdam, 1996. Balkema.
- [9] P.-A. von Wolffersdorff. A hypoplastic relation for granular materials with a pre-defined limit state surface. *Mechanics of Cohesive-Frictional Materials*, 1:251–271, 1996.
- [10] D. Winselmann. *Stoffgesetze mit isotroper und kinematischer Verfestigung sowie deren Anwendung auf Sand*. Dissertation. Technische Universität Carolo-Wilhelma zu Braunschweig, 1984.

18

Optimization of material parameters using the response surface method in LS-OPT

H. Müllerschön¹, U. Franz¹, T. Münz¹ und N. Stander²

¹CAD-FEM GmbH, Marktplatz 2, D-85567 Grafing

²Livermore Software Technology Corporation, Livermore, CA, USA

Abstract. *In the past years more and more complex materials, e. g. plastic and metallic foams, honey-comb materials, different types of glues, epoxy-glass materials etc., were incorporated in a wide range of products, particularly in the automotive industry. The modeling of such materials within nonlinear dynamic problems could be performed by the commercial Finite-Element code LS-DYNA. This code completes with an explicit time integration scheme (Forward Euler) and it is well suited for solving highly nonlinear dynamic problems. Numerous material models are available (Hallquist [2], Belytschko et al. [1]). However, the application of these material models require the knowledge of the material parameters describing the behavior of the specific material. The accuracy of the Finite-Element simulations depend authoritatively on the quality of the involved material parameters. In order to obtain these material parameters the calibration of the model is necessary through comparison with experimental data.*

The main objective of this paper is to demonstrate the calibration of a nonlinear material model by minimizing the difference of the model response and the experimental tests. As an example, a low density styrofoam is considered, which is described by a material model with strain rate effects (Fu-Chang Model). The minimization problem is solved via the Response Surface Method (Myers [3]) using the commercial optimization code LS-OPT (Stander [5]).

18.1 Introduction

Simple material models, e. g. linear isotropic elastic models or perfect elastoplastic models of v. Mises type, allow a direct physical interpretation of the involved material parameters. For example, in a one dimensional tension test, the slope of the stress-strain curve can be interpreted as the Youngs Modulus, presumed linear material behavior occurs. Assumptive in the test the material starts perfect yielding at a distinct point, the parameter κ of the v. Mises yield criterion can be determined directly.

In the case of more complex material models, it is generally not possible to assign a physical meaning to each single material parameter. In such cases the application of a so-called

inverse parameter identification procedure is useful. Therefore, various experimental tests have to be performed in order to stimulate a variety of different material responses. These tests should be then simulated with the chosen material formulation by considering the boundary conditions as accurately as possible. The response of the model is a function of a set of material parameters $\mathbf{p}$. The goal of the parameter identification procedure is to minimize the difference between the responses of the material model and the experimental observations for several boundary value problems (see Figure 18.1) by variation of a selected set of material parameters.

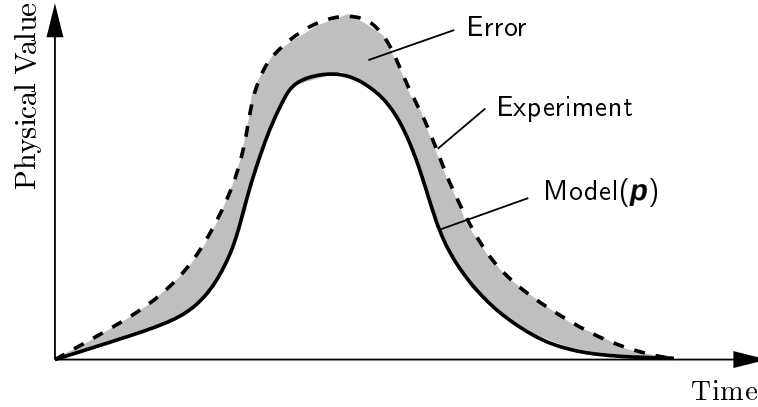


Figure 18.1: Difference between simulation and experiment

18.2 Approach

The Response Surface Method (RSM) is applied in order to solve the optimization problem of minimizing the distances of experimental points to results calculated with a specific material model. This method has become popular for optimization studies involving the simulation of nonlinear dynamical problems. A main advantage of the method is primarily to avoid the necessity for analytical or numerical gradient quantities as these are either too complex to formulate, discontinuous or sensitive to round-off errors. In addition, a major feature of the RSM is the capability to smooth the design response and to stabilize numerical sensitivities. This is important for highly nonlinear and oscillating problems. Local minima caused by noisy responses are avoided.

18.2.1 Optimization problem

As mentioned above the objective of the parameter identification problem is to minimize the difference between the computational and the experimental results. Therefore, an objective function based on the well-known Least-Squares-Method is introduced:

$$R(\mathbf{p}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{r}_m(\mathbf{p})\|_2 = (r_1(\mathbf{p})^2 + \cdots + r_m(\mathbf{p})^2)^{1/2} \rightarrow \min. \quad (18.1)$$

$$\mathbf{r}_m(\mathbf{p}) = \begin{bmatrix} y_{exp_1} - modelresponse(x_{exp_1}, \mathbf{p}) \\ \vdots \\ y_{exp_m} - modelresponse(x_{exp_m}, \mathbf{p}) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{p} = (p_1, \dots, p_n). \quad (18.2)$$

Here, m specifies the number of experimental observations of any desired physical response value resulting from one or more boundary value problems. The Least-Squares functional is a function of the vector $\mathbf{p} \in \Re$ which contains n material parameters. These parameters are acting as design variables in the optimization process. In addition, sets of functions g_i and h_j may define inequality and equality constraints in order to bound the variation of the parameters:

$$\begin{aligned} g_i(\mathbf{p}) &\leq 0 \quad ; \quad i = 1, \dots, k, \\ h_j(\mathbf{p}) &= 0 \quad ; \quad j = 1, \dots, l. \end{aligned} \quad (18.3)$$

18.2.2 The Response Surface Method

Among several methodologies available to address optimization in a design environment, the Response Surface Methodology (RSM) has achieved prominence in recent years. The RSM is a statistical method for constructing smooth approximations to the objective function in the multi-dimensional parameter space. So called experimental design points (parameter sets $\mathbf{p}_e$; $e = 1, \dots, E$; E = number of experimental points) are selected within a pre-defined design space (Figure 18.2). For these points the defined model responses and the respective residuals are calculated. In a subsequent step polynomial functions are fit to these experimental design points in order to substitute the original, possibly very noisy, response.

For illustration purposes: In the two-dimensional parameter space ($n = 2$) the polynomial functions represent surfaces, that are adapted to selected experimental points within the three-dimensional space, see Figure 18.3. The fit of the polynomial functions is done by using regression analysis. Least squares approximations are commonly used for this purpose.

Design of experiments

Experimental Design is the selection procedure for finding the points in the parameter design space. Many different methods are available, e. g. Koshal Design, Factorial Design, Central Composite Design, Box-Behnken Design, D-Optimal Design etc. An excellent review of the different design types can be found in Myers [3].

An advantage of the D-Optimal Design is, that design regions of irregular shape and any number of experimental points can be considered. The experimental points for the D-Optimal Design are usually selected from a full factorial design by using the D-optimality criterion. The number of experimental points is of course in correlation with the order of the approximation functions. Usually oversampling of approximately 50 % is recommended (Roux *et al.* [4]), i. e. 50 % more points are being analyzed than the minimum required.

compare Figure 18.4. The iteration is continued until the objective function or the design variables reach stationary values.

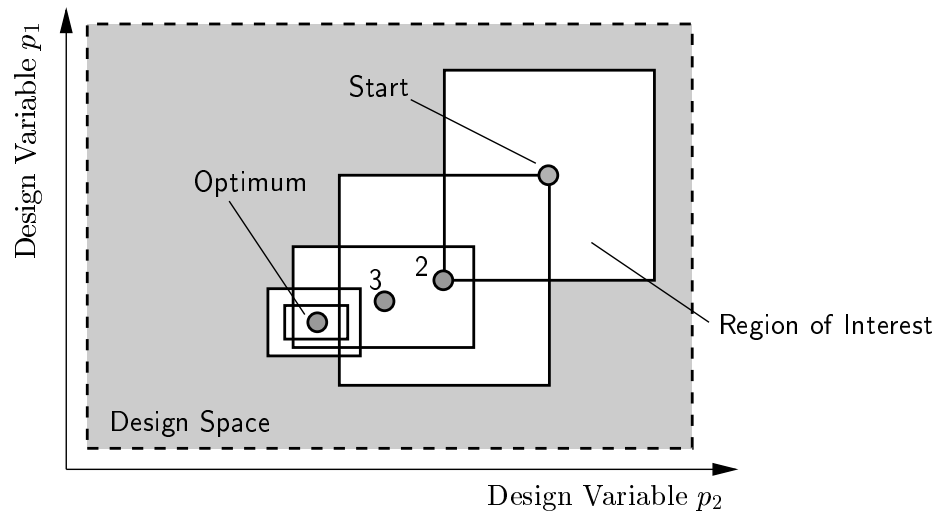


Figure 18.4: Successive Approximation Scheme

Main advantages of the method

GLOBAL OPTIMIZATION

The Response Surface Methodology has a tendency to capture globally optimal regions. Local minima caused by noisy response are avoided.

PARALLEL COMPUTATION

Successive Response Surface Schemes allow the simultaneous computation of all selected experimental points within the current region of interest.

FLEXIBLE DESIGN EXPLORATION

Design Exploration can be changed within the optimization process. Thus, control of the computational time and the quality of the response surface is possible.

TRADE-OFF STUDIES

Since the response surface is determined, easy examination of varying constraint bounds is possible.

Software: LS-OPT

The above mentioned methods have been incorporated in the program LS-OPT, a general optimization program which is closely interfaced with LS-DYNA (*Hallquist [2]*). Access to most quantities available in the LS-DYNA database has been provided and maximum, minimum, averaged and filtered quantities can be automatically extracted (*Stander [5]*).

18.3 Example: Parameter identification of low density foam

18.3.1 Goal

In general, the goal of material parameter identification is to find appropriate parameter values of a constitutive model in order to map the realistic (experimental) material behavior as accurately as possible. In the current example a low density foam of a motorcycle helmet is considered.

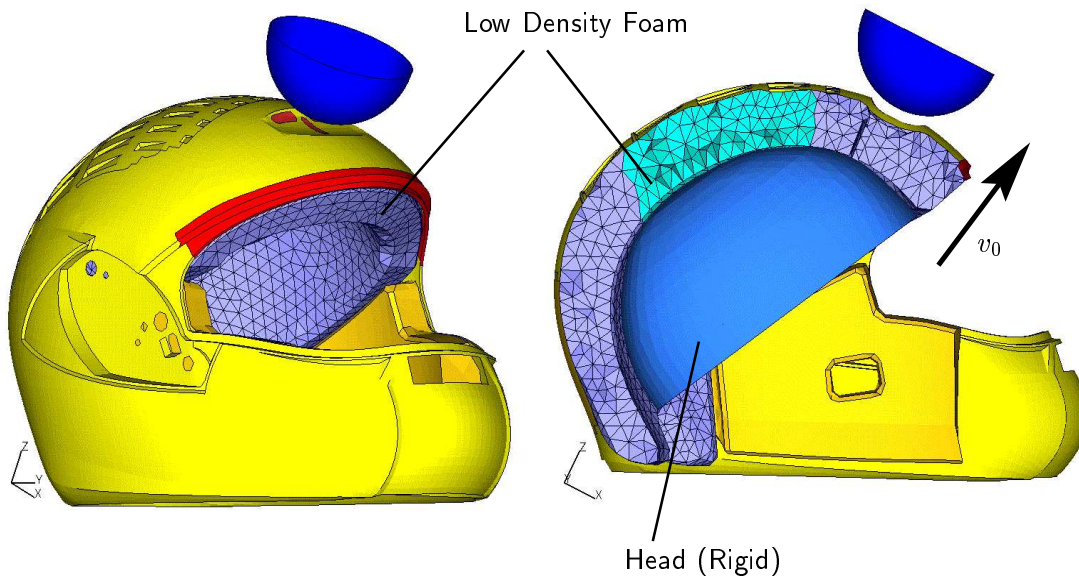


Figure 18.5: Impact of a helmet on a rigid hemisphere

The focus of the study is on the impact of the helmet on a rigid hemisphere with a predefined initial velocity. Experiments have been carried out for this case. Simulations of the problem have been performed with an intuitive choice of material parameters for the low density foam inside the helmet (Figure 18.5). The low density foam is modeled by a rate-dependent material law. Here the question arises: How to obtain better material parameters for the considered material model in order to improve the results of the simulation with regard to the experimental response?

18.3.2 Component drop tests

The idea is to perform simple experiments by dropping rigid spheres with an initial velocity on a foam block, compare Figure 18.6. Two different spheres with radii of 50mm and 130mm are used. In total, there are 5 different tests:

- Sphere with radius 50mm; falling height 2.0 m; $mass_1$
- Sphere with radius 130mm; falling heights 1.0/1.5/2.0/2.5 m; $mass_2$

In the experiments the acceleration of the spheres versus time is measured.

In addition to the dynamical drop tests, quasi-static uniaxial tension tests are performed.

18.3.3 Simulation of the component tests

The above mentioned drop tests are simulated with the FE-code LS-DYNA. The sphere and the base plate are assumed to be rigid. The foam block is modeled by a material law called `MAT_FU_CHANG` in LS-DYNA. This is a rate sensitive reversible model, where the material properties might be defined by stress-strain load curves, see Figure 18.8. This means, load curves of dynamic compression tests with different strain rates might be used directly as input. The load curves can be provided either by true strain rates or by engineering strain rates. For the one dimensional case the engineering strain rates are given by

$$\dot{\varepsilon} = \frac{v}{l_0} \quad (18.4)$$

As a consequence, by using engineering strain rates in the input load curves, the results of uniaxial experimental tests performed at constant velocity v could be used directly. The problem is, that for these tests, particularly for high strain rates and for large deformations, very large forces occur. The experimental set-up of such tests is rather difficult. Thus, quite simple drop tests with spheres on foam blocks (Figure 18.6) are performed and by inverse optimization for several strain rates the load curves are determined.

18.3.4 The optimization problem

Objective function

The aim of the optimization procedure is to adapt the model response to the results of the component tests by varying material parameters of the `FU_CHANG` material model. Thereby, it is focused on the maximum acceleration value of the spheres. The optimization problem is formulated in order to minimize the differences between the maxima of the model and the experimental responses (compare Figure 18.7):

$$R(\mathbf{p}) = (\Delta_{\max_1}(\mathbf{p})^2 + \cdots + \Delta_{\max_5}(\mathbf{p})^2)^{1/2} \rightarrow \min. \quad (18.5)$$

Here, $\Delta_{\max_1} \cdots \Delta_{\max_5}$ refer to the above mentioned tests with different falling heights and different radii and weights of the spheres.

Design variables

The material behavior of the foam is described by load curves for different strain rates in the compression as well as in the tension range. The averaged values of the quasi-static uniaxial compression tests are used as base load curve in the compression regime (dashed curve in Figure 18.8). In order to cover the strain rate effects in a wide range, three

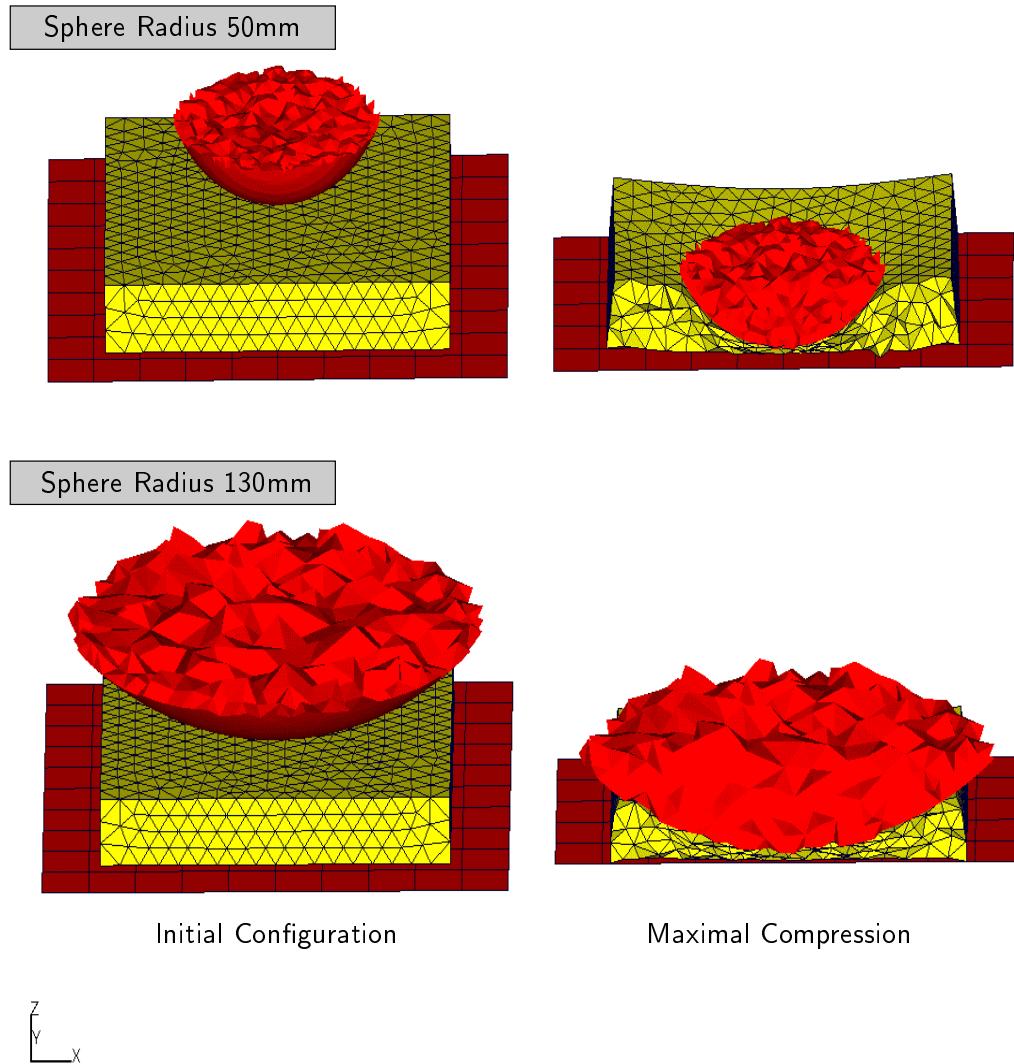


Figure 18.6: Simulation of the experimental drop tests

additional load curves are introduced. These load curves are generated by multiplying the ordinate values (stress values) with scale factors. For the optimization process these scale factors are defined as design variables. The static load curve is also provided with a scale factor in order to allow minor changes to the quasi-static values. There are no experimental results available in the tension range. Hence, a bilinear curve is assumed, fixed by two points at values of 5 % and 100 % tensile strain. The corresponding stress values are defined by two additional design variables (see Figure 18.8).

Constraints

It is intended to provide load curves for the Fu-Chang material model with a monotonic increase of the stress values for increasing strain rates. The intersection of the load curves has to be avoided. Consequently, a monotonic increase of the ordinate scale factors is

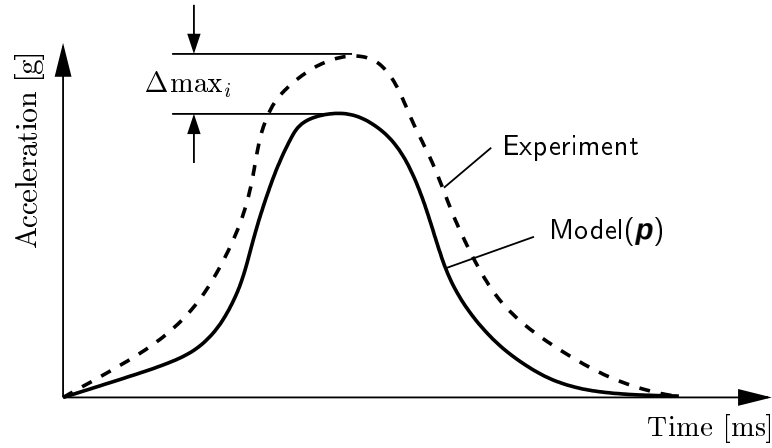


Figure 18.7: The target value to be minimized within the optimization

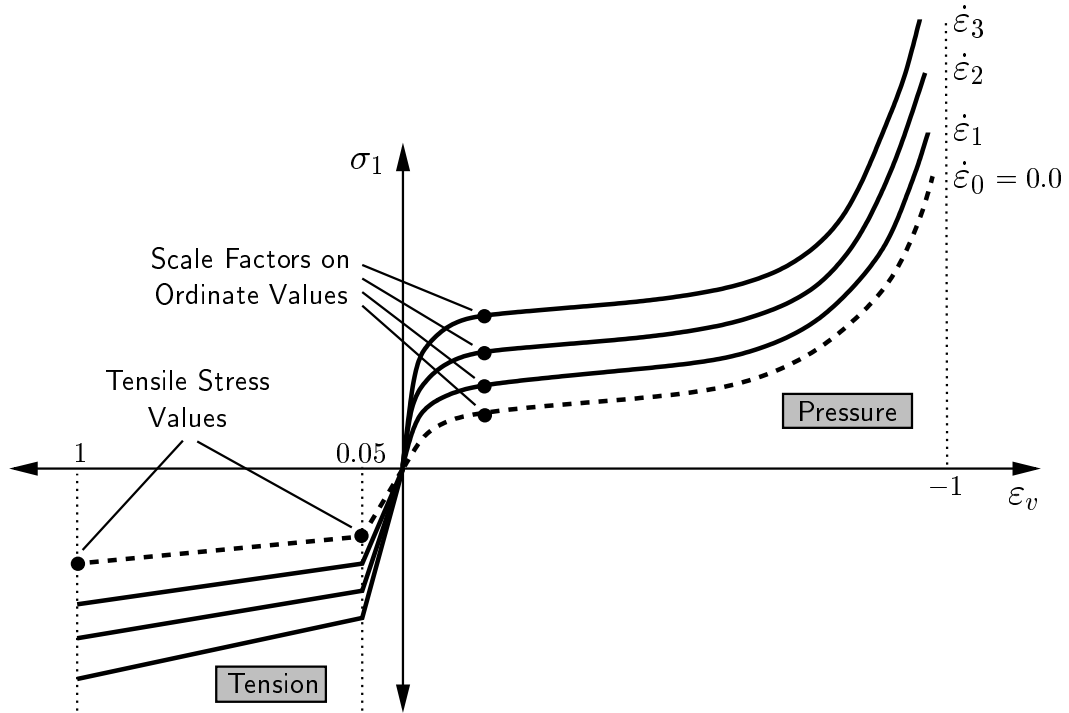


Figure 18.8: Definition of the design variables: Four ordinate scale factors plus two tensile stress values

necessary. The monotonicity is enforced by the constraints:

$$\text{scfac}_0 \leq \text{scfac}_1 \leq \text{scfac}_2 \leq \text{scfac}_3, \quad (18.6)$$

where $\text{scfac}_0 \dots \text{scfac}_3$ are the ordinate scale factors referred to the load curves in Figure 18.8. In the tension range it has to be guaranteed that the absolute stress value at 100 % is higher than at 5 % tensile strain, because softening should be avoided. This leads to

the following constraint:

$$|\sigma_{0.05}| \leq |\sigma_{1.0}| . \quad (18.7)$$

Settings for the RSM

The most successful and efficient approximation functions for the present problem are linear polynomials. For the linear approximation 11 iterations by the successive response method are sufficient to achieve a converged result. For each iteration 11 experimental points are selected by the D-Optimal criterion. This means, in total

$$\mathbf{11 \text{ experimental points} \cdot 11 \text{ iterations} \cdot 5 \text{ simulations (5 component tests)} = 605 \text{ runs}}$$

have to be calculated. In addition to the optimization run using linear approximation, elliptic and quadratic settings are tested for this problem. Elliptical approximations are based on full quadratic polynomials, but choosing the diagonal terms only. In Table 18.1 the main values with respect to a converged optimization result are summarized. The finally achieved optimum points are approximately the same for the different approximations.

Approximat.	DOE	Basis Design	Exp. Points	Iterations	Total Runs
Linear	D-Optimal	3^6	11	11	605
Elliptic	D-Optimal	5^6	20	9	900
Quadratic	D-Optimal	5^6	43	7	1505

Table 18.1: Comparison of different approximations schemes

Stander et al. [7] have shown in their examinations as well the successful application of linear approximations by using the successive approximation method.

18.3.5 Results

In Figure 18.9 the evolution of the objective function $R(\mathbf{p})$ for the linear approach is plotted. After 11 iterations the change of the design variables is less than a pre-set tolerance value. The squares display the results of $R(\mathbf{p})$ by computing the acceleration responses of the above described component tests (computed values). On the other hand the solid line represents the objective $R(\mathbf{p})$ by the evaluation of the approximated response surface (predicted values). The predicted values are very close to the computed values. This indicates a rather good approximation of the response surface and that the initial region of interest could probably have been chosen larger, thereby forcing convergence in a significantly lower number of iterations.

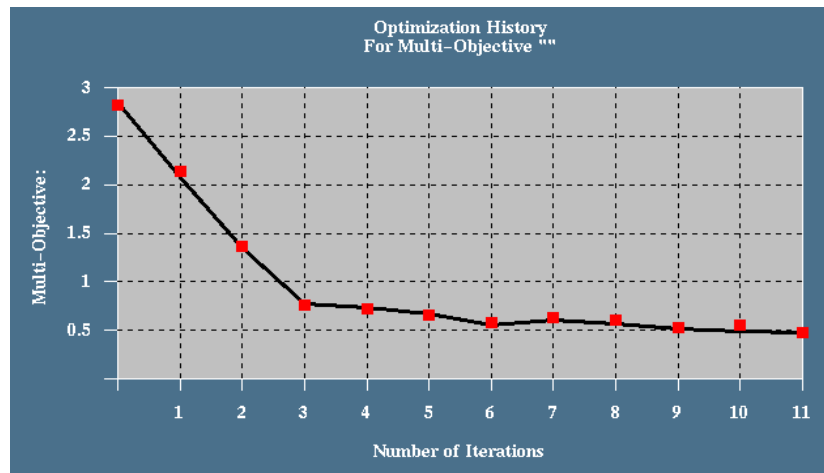


Figure 18.9: History of the objective function

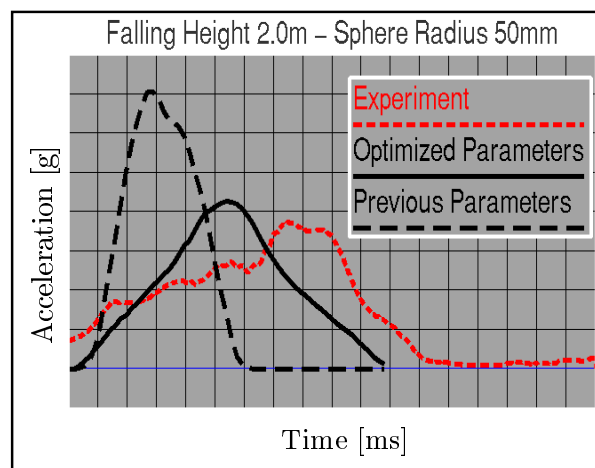


Figure 18.10: Results of the component tests (sphere radius 50mm)

The comparison between the results of the simulated component tests using the initial and the optimized parameters is shown in Figure 18.10 and Figure 18.11.

Using the optimized parameters for the simulation of the helmet problem, a significant improvement of the results with respect to the experimental observation is achieved, see Figure 18.12.

18.4 Acknowledgement

The authors gratefully acknowledge the permission of Schubert Helme GmbH, Germany to showcase an application of LS-OPT in the development process of a motorcycle helmet. In addition the authors would like to thank Mr. Salehi and Mr. Philipp from Schubert Helme GmbH for various fruitful discussions.

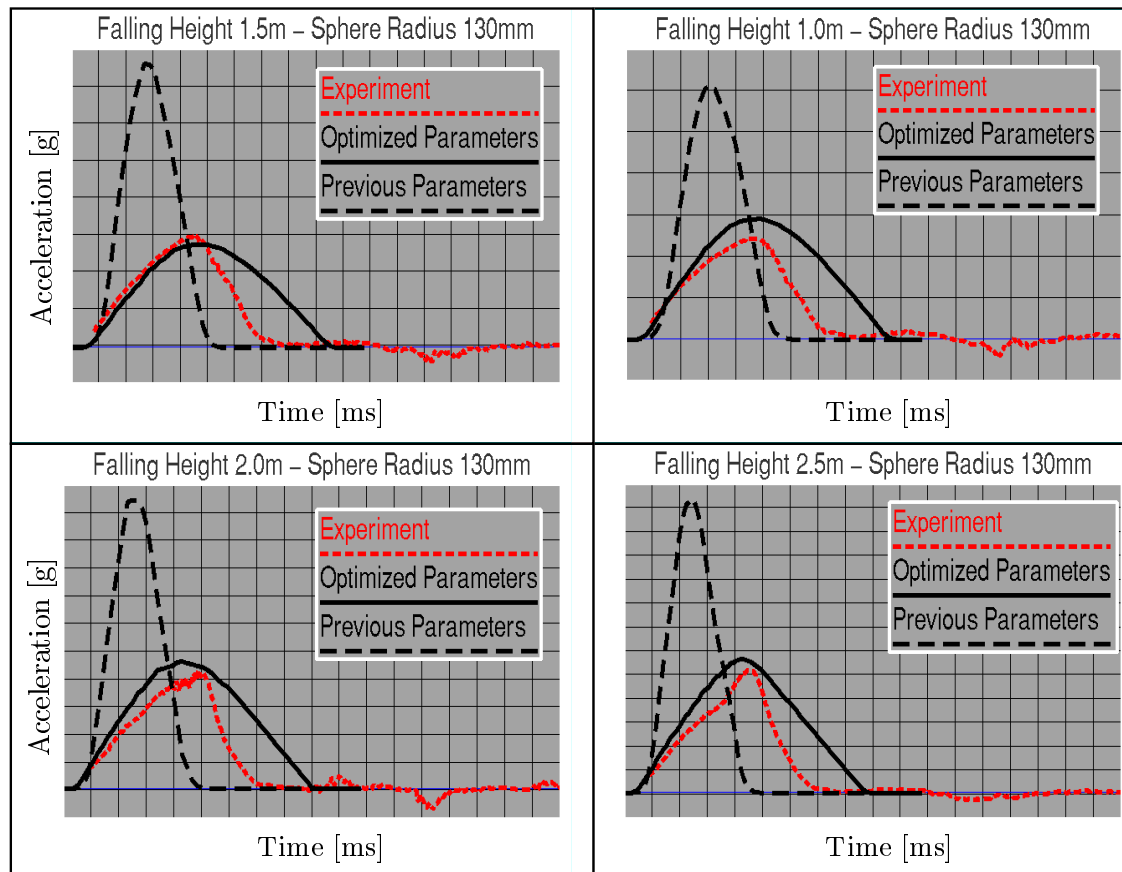


Figure 18.11: Results of the component tests (sphere radius 130mm)

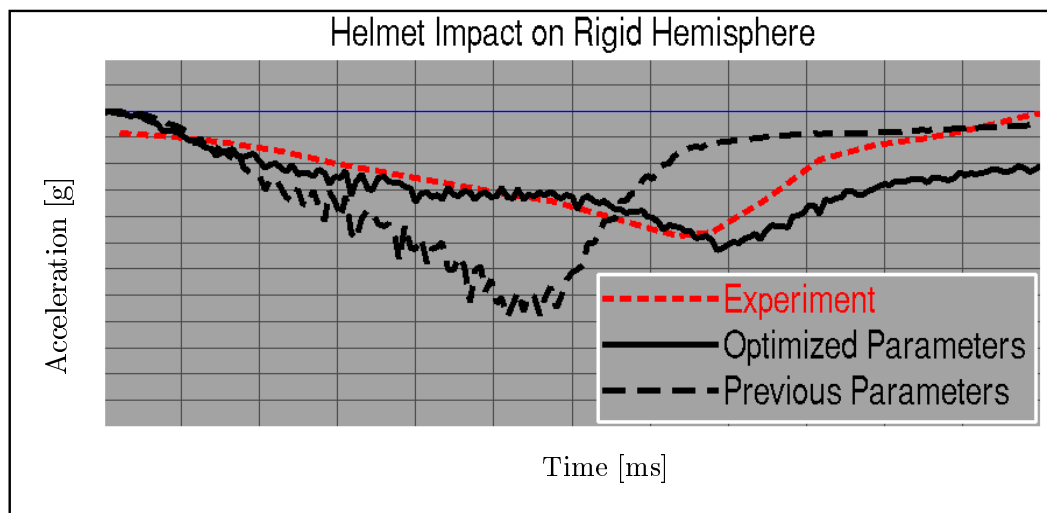


Figure 18.12: Simulation and experimental data of the helmet drop test

18.5 Conclusions

LS-OPT was used successfully to determine input parameters for a low density foam. The five load cases of simple drop tests were chosen such that the load is considerably

close to the load in an actual drop test of a complete motorcycle helmet. To simulate the reversible behavior of the foam, the LS-DYNA material model **FU_CHANG** was selected. Irreversible properties of the foam were not considered. The maximum decelerations of the impactors were used to define the objective function. For the design of experiments (DOE) the D-optimal criterion was applied by using linear polynomials as approximation for the response surface.

The optimized material parameters were used in the simulation of a motorcycle helmet test and showed a vastly improved behavior when compared to the initial set of parameters and a very good agreement with the experimental results.

It is concluded that the linear approximations are good enough for this type of material identification. Future studies could highlight whether the number of iterations can be reduced significantly by increasing the size of the initial region of interest and by using a coarser tolerance. In addition, it could be explored if the inclusion of additional discrete points or an integral criterion in the objective function has a significant effect on the results.

Bibliography

- [1] T. Belytschko, W. K. Liu, and B. Moran. *Nonlinear Finite Elements for Continua and Structures*. J. Wiley, Chichester, West Sussex, England, 2000.
- [2] J. Hallquist. *LS-DYNA Keyword User's Manual - Version 960*, volume I,II. Livermore Software Technology Corporation, Livermore, 2001.
- [3] R. H. Myers and D. C. Montgomery. *Response Surface Methodology - Process and Product Optimization Using Designed Experiments*. J. Wiley, New York, 1995.
- [4] W. J. Roux, N. Stander, and R. T. Haftka. Response Surface Approximation for Structural Optimization. *Int. J. Numer. Meth. Engng*, 42:517–534, 1998.
- [5] N. Stander. *LS-OPT User's Manual - Version 2*. Livermore Software Technology Corporation, Livermore, 2001.
- [6] N. Stander. The Successive Response Surface Method Applied to Sheet-Metal Forming. In *First MIT Conference on Computational Fluid and Solid Mechanics, June 12-15*, Cambridge, MA, USA, 2001.
- [7] N. Stander, R. Reichert, and T. Frank. Optimization of Nonlinear Dynamical Problems Using Successive Linear Approximations in LS-OPT. In *6th International LS-DYNA Users Conference, Detroit, USA*, 2000.

19

Approximated rank-1-convexification for the relaxation of non-convex elastoplastic materials

M. Lambrecht und C. Miehe
Institut für Mechanik (Bauwesen)
Universität Stuttgart
D-70550 Stuttgart

Abstract. *The paper discusses a relaxation technique of localization phenomena which appear within computational simulations of elastoplastic solids, e. g. in the form of shear bands. The inelastic response is governed by a general internal variable formulation for a generalized standard medium with a maximum dissipation property. For this class of constitutive response an incremental variational formulation of inelasticity is presented where a quasihyperelastic stress potential at discrete time steps results from a local minimization problem with respect to the internal variables. The existence of the potential allows for existence theorems of minimizers of the variational problem considered. Minimizing solutions exist if the incremental potential satisfies the quasiconvexity condition. Non-convex finite element formulations yield the characteristic mesh-dependent results. The proposed finite element relaxation technique bases on an approximated rank-1-convexification. In this context we consider a decomposition of the deformation state into two phases, each modelling a typical rank-1-bifurcation mode. The volume average of the potentials then leads to the homogenized convex stress potential. The method has been motivated by recently developed computational homogenization concepts of heterogeneous materials with micro-structures. The performance of the proposed relaxation technique is demonstrated by means of a representative numerical example.*

19.1 Introduction

The simulation of localized failure in rate-independent plasticity formulations for strain softening materials yields the typical mesh-dependent postcritical results within non-relaxed finite element formulations. The cause is the loss of ellipticity of the linearized boundary-value problem. The literature contains a broad spectrum of methods to overcome this problem, which may be subdivided into two classes: (i) higher order continuum-based models and (ii) approaches based on the modelling of discontinuities. This paper presents, in line with the second class of methods, a relaxation technique which mod-

els locally at a point of the continuum (regularized) discontinuities based on a two-scale homogenization technique. Starting point is an incremental variational formulation of inelasticity developed by Miehe [7] which focuses on a general internal variable formulation of inelasticity where the constituents represent generalized standard media. For this reason the evolution equations of the internal variables result from a principle of maximum internal dissipation. Miehe [7] develops for this type of constitutive response an incremental variational formulation of inelasticity where a quasi-hyperelastic stress potential at discrete time steps is obtained from a local minimization problem with respect to the internal variables. In nonlinear elasticity weak convexity properties of the stored energy function are necessary for the existence of solutions for the incremental boundary-value problem. The existence of a minimum is guaranteed if the functional is (i) coercive and (ii) sequentially lower semicontinuous, see Dacorogna [4], Šilhavý [14], and Nguyen [12]. A central role plays the quasiconvexity inequality introduced by Morrey [10] which is a necessary and sufficient condition for the sequentially lower semicontinuity of the affiliated variational problem. The theoretically well motivated concept of quasiconvexity bases on an integral condition which is hard to verify. This leads to the introduction of a weaker condition known as rank-1-convexity. In this paper, we apply these existence theorems to a general class of inelastic materials in terms of the derived incremental work potential. We perform an algorithmic check of the rank-1-convexity of the potential which is in line with the two-dimensional localization analysis outlined by Miehe & Schröder [9]. If the algorithmic localization analysis indicates the loss of rank-1-convexity, the incremental boundary-value problem is ill-posed and the existence of incremental minimizers is not ensured. One possibility to relax the problem is to substitute the non-convex potential by its quasiconvex hull, see the books Dacorogna [4], Šilhavý [14], for an overview. In this paper, we relax the not well-posed problem in terms of an approximated rank-1-convexification of two-dimensional problems. Key point is the assumption of a decomposition of the unstable homogeneous deformation state into two phases, each modelling a first-order laminate. The considered ansatz for the strains in the laminates consists of a homogeneous and a fluctuation part which describes a mode-II simple shear and a mode-I simple extension bifurcation. Within the framework of the proposed finite element relaxation technique we consider the intensity of the rank-1-bifurcation to be governed by two scalar degrees of freedom only, denoted as discrete fluctuations. The orientation of the bifurcation modes is given by the critical inclination angle which follows from the algorithmic check of rank-1-convexity. The volume fractions of the phases are related to a given internal length scale and the dimensions of a quadrilateral finite element. Thus, the fluctuations have the form of a regularized discontinuity with prescribed band width (length scale parameter) aligned to a critical direction. The approximated rank-1-convexification involves the minimization of the incremental work within the two phases in view of the discrete fluctuations which then uniquely determine the phase-splitting and the convexified potential.

The structure of the paper is as follows: In Section 2 an incremental variational formulation for a generalized standard medium is established defining a local quasi-hyperelastic stress potential. The potential serves as the starting point for the subsequent sections dealing with the non-convex analysis. In Section 3 existence theorems for incremental minimizers, in particular the notions of quasiconvexity and rank-1-convexity are introduced. If the potential is not rank-1-convex we develop in Section 4 a finite element relaxation technique which consists of an approximated rank-1-convexification. Section 5 shows a representative example underlining the performance of the proposed relaxation technique.

19.2 Incremental variational formulation of inelasticity

In this Section an incremental variational formulation of inelasticity is presented which has been developed by *Miehe* [7]. The formulation incorporates a reduced incremental potential function which results from the solution of a local minimization problem in view of the internal variables. Quasi-hyperelastic expressions for the algorithmic stresses and consistent tangent moduli are given. The incremental variational formulation allows for existence theorems of minimizers of the elastoplastic boundary-value problem considered.

19.2.1 An internal variable formulation of inelasticity

Let $\mathbf{u} : \mathcal{B} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^3$ denote the displacement field of a continuum $\mathcal{B} \subset \mathbb{R}^3$ at a material point $\mathbf{x} \in \mathcal{B}$ and time $t \in \mathbb{R}^+$. Furthermore let $\boldsymbol{\varepsilon} := \text{sym}[\nabla \mathbf{u}]$ be the strain tensor with coordinates $\varepsilon_{ab} := \frac{1}{2}(u_{a,b} + u_{b,a})$ based on the notation $u_{a,b} := \partial u_a / \partial x_b$. Focusing on mechanical problems the local constitutive response at $\mathbf{x} \in \mathcal{B}$ is assumed to be constrained by the *Clausius-Planck* inequality for the internal dissipation

$$\mathcal{D} := \mathcal{P} - \dot{\psi} \geq 0 \quad \text{with} \quad \mathcal{P} := \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}. \quad (19.1)$$

Here, $\boldsymbol{\sigma}$ denotes the stress tensor and $\mathcal{P}$ the local stress power per unit volume. The evolution in time of the strain energy density ψ with respect to the unit volume represents an energy storage mechanism local at a material point. We base the description of a path-dependent inelastic material response on an internal variable formulation as outlined in general by *Coleman & Gurtin* [3] and *Lubliner* [6], among others. To this end, we consider the local energy storage to be governed by a strain energy function $\hat{\psi} : \mathbb{R}^6 \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ which depends on the symmetric strain tensor $\boldsymbol{\varepsilon} \in \mathbb{R}^6$ and a generalized vector $\mathcal{I} \in \mathbb{R}^n$ of n internal variables. Taking the derivative of this function with respect to time and insertion into (19.1) yields, by a standard argument, the constitutive equation for the stresses

$$\boldsymbol{\sigma} = \partial_{\boldsymbol{\varepsilon}} \hat{\psi}(\boldsymbol{\varepsilon}, \mathcal{I}) \quad (19.2)$$

and the reduced representation of the internal dissipation inequality

$$\mathcal{D} = \mathcal{F} \cdot \dot{\mathcal{I}} \geq 0 \quad \text{with} \quad \mathcal{F} := -\partial_{\mathcal{I}} \hat{\psi}(\boldsymbol{\varepsilon}, \mathcal{I}). \quad (19.3)$$

In what follows, we denote $\mathcal{F}$ as the generalized internal forces conjugate to the internal variables $\mathcal{I}$. These forces are assumed to be bounded by a convex set $\mathbf{E} \in \mathbb{R}^n$ called the elastic domain. We define this convex domain by a level set function $\hat{\phi} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ via

$$\mathbf{E} := \{\mathcal{F} \in \mathbb{R}^n \mid \hat{\phi}(\mathcal{F}) \leq c\}, \quad (19.4)$$

where $c \in \mathbb{R}^+$ is a given constant threshold setting the level. The function $\hat{\phi}$ is assumed to be a gauge, i. e. it is (i) convex $\hat{\phi}(\zeta \mathcal{F}_2 + (1 - \zeta) \mathcal{F}_1) \leq \zeta \hat{\phi}(\mathcal{F}_2) + (1 - \zeta) \hat{\phi}(\mathcal{F}_1)$ for all

$\{\mathcal{F}_1, \mathcal{F}_2\} \in \mathbb{E}$ and $\zeta \in [0, 1]$, (ii) positively homogeneous of degree one $\hat{\phi}(\zeta \mathcal{F}) = \zeta \hat{\phi}(\mathcal{F})$ for $\zeta > 0$, (iii) zero at the origin $\hat{\phi}(\mathbf{0}) = 0$ and (iv) always positive $\hat{\mathcal{F}} \geq 0$. A canonical evolution of the internal variables is obtained from the extremum principle for the internal dissipation

$$\mathcal{D} = \hat{\mathcal{D}}(\mathcal{F}) = \sup_{\mathcal{F} \in \mathbb{E}} \{\mathcal{F} \cdot \dot{\mathcal{I}}\} , \quad (19.5)$$

in plasticity theory known as the principle of maximum dissipation. The solution of this constraint optimization problem yields the evolution equation

$$\dot{\mathcal{I}} = \dot{\gamma} \partial_{\mathcal{F}} \hat{\phi}(\mathcal{F}) \quad \text{with} \quad \dot{\gamma} \in \mathcal{K} \quad (19.6)$$

in terms of the *Lagrange* parameter $\dot{\gamma}$, in what follows denoted as the rate of the inelastic arc length. $\dot{\gamma}$ is constrained to lie within the cone $\mathcal{K} := \{\dot{\gamma} | \dot{\gamma} \geq 0; \hat{\phi}(\mathcal{F}) \leq c; \dot{\gamma}[\hat{\phi}(\mathcal{F}) - c] = 0\}$ representing the *Karush-Kuhn-Tucker* optimality conditions in (19.5). Insertion of the evolution equation (19.6) into (19.3)₁ and exploitation of the homogeneity of degree one lead to the simple representation

$$\mathcal{D} = c \dot{\gamma} \geq 0 \quad (19.7)$$

of the internal dissipation. Observe that the canonical assumption of the evolution equation is consistent with the dissipation demand (19.1). The set of constitutive equations is summarized in Table 19.1.

1. <i>free energy</i>	$\psi = \hat{\psi}(\boldsymbol{\varepsilon}, \mathcal{I})$
2. <i>stresses</i>	$\boldsymbol{\sigma} = \partial_{\boldsymbol{\varepsilon}} \hat{\psi}(\boldsymbol{\varepsilon}, \mathcal{I})$
3. <i>internal forces</i>	$\mathcal{F} = -\partial_{\mathcal{I}} \hat{\psi}(\boldsymbol{\varepsilon}, \mathcal{I})$
4. <i>level set function</i>	$\phi = \hat{\phi}(\mathcal{F})$
5. <i>evolution</i>	$\dot{\mathcal{I}} = \dot{\gamma} \partial_{\mathcal{F}} \hat{\phi}(\mathcal{F}) \text{ with } \dot{\gamma} \in \mathcal{K}$
6. <i>loading cone</i>	$\mathcal{K} := \{\dot{\gamma} \dot{\gamma} \geq 0, \hat{\phi}(\mathcal{F}) \leq 0, \dot{\gamma}[\hat{\phi}(\mathcal{F}) - c] = 0\}$
7. <i>dissipation</i>	$\mathcal{D} = c \dot{\gamma}$

Table 19.1: An internal variable formulation of inelasticity.

19.2.2 Integration algorithm for internal variables

Consider a time increment $[t_n, t_{n+1}]$ and assume all variables given at time t_n . To advance the problem solution we integrate the evolution system (19.6) for the internal variables

$$\mathcal{I}_{n+1} = \mathcal{I}_n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \dot{\gamma} \partial_{\mathcal{F}} \hat{\phi}(\mathcal{F}) \, dt . \quad (19.8)$$

This integral is solved numerically by considering the fully implicit update algorithm for the internal variables

$$\hat{\mathcal{I}}_{n+1}(\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}, \gamma_{n+1}) = \mathcal{I}_n + (\gamma_{n+1} - \gamma_n) \partial_{\mathcal{F}} \hat{\phi}(\mathcal{F}_{n+1}) \quad \text{with} \quad \gamma_{n+1} \in \mathcal{K}_{n+1}, \quad (19.9)$$

where the current value of the inelastic arc length is constrained by the cone $\mathcal{K}_{n+1} := \{\gamma_{n+1} | \gamma_{n+1} \geq \gamma_n; \hat{\phi}(\mathcal{F}_{n+1}) \leq c; (\gamma_{n+1} - \gamma_n)[\hat{\phi}(\mathcal{F}_{n+1}) - c] = 0\}$. Observe that the flow direction is treated implicitly by evaluating the gradient $\partial_{\mathcal{F}} \hat{\phi}$ in (19.9) in terms of the unknown force $\mathcal{F}_{n+1}$ at time t_{n+1} . As indicated in (19.9), the internal variables at a time t_{n+1} are regarded as a function $\hat{\mathcal{I}}$ of the current strains $\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}$ and the inelastic arc length γ_{n+1} .

19.2.3 Incremental variational formulation

Following *Miehe* [7] we discuss a variational formulation for the incremental initial boundary-value problem associated with the model of inelasticity outlined above. We restrict our considerations to the quasi-static case where inertial effects are neglected. Then the balance of kinetic energy degenerates to the statement

$$P_{int} = P_{ext}, \quad (19.10)$$

which we use as a starting point for the construction of an incremental variational formulation of inelasticity. Here,

$$P_{int} := \int_{\mathcal{B}} \mathcal{P} dV = \int_{\mathcal{B}} (\dot{\psi} + \mathcal{D}) dV \quad \text{and} \quad P_{ext} := \int_{\mathcal{B}} \dot{\mathbf{u}} \cdot \bar{\boldsymbol{\gamma}} dV + \int_{\partial \mathcal{B}_t} \dot{\mathbf{u}} \cdot \bar{\mathbf{t}} dA \quad (19.11)$$

denotes the internal and external power of the continuum, respectively. In (19.10) the internal power is balanced with the external power of the continuum consisting of the body force field $\bar{\boldsymbol{\gamma}}$ and the traction field $\bar{\mathbf{t}}$. The displacement field is constrained by the boundary condition $\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}}$ on $\partial \mathcal{B}_u$, where $\bar{\mathbf{u}}$ denotes a time-dependent displacement field. As usual, we consider a decomposition of the surface of the continuum into a part where the displacement is prescribed and a part where the tractions are given, i. e. $\partial \mathcal{B} = \partial \mathcal{B}_u \cup \mathcal{B}_t$ and $\partial \mathcal{B}_u \cap \mathcal{B}_t = \emptyset$. Now consider a time interval of interest $[t_n; t_{n+1}]$. Taking into account the above definitions, the integration of (19.10) in this interval motivates an incremental variational formulation: Minimize the functional

$$I(\mathbf{u}_{n+1}, \gamma_{n+1}) = \int_{\mathcal{B}} \hat{\Psi}(\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}, \gamma_{n+1}) dV - \hat{\Pi}(\mathbf{u}_{n+1}) \rightarrow \text{Min!} \quad (19.12)$$

subjected to the constraints $\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1} = \text{sym}[\nabla \mathbf{u}_{n+1}]$ in $\mathcal{B}$, $\gamma_{n+1} \in \mathcal{K}_{n+1}$ in $\mathcal{B}$ and $\mathbf{u}_{n+1} = \bar{\mathbf{u}}_{n+1}$ on $\partial \mathcal{B}_u$. In (19.12), we introduced the internal work Ψ per unit volume done by the local material model in the time increment. For the constitutive model under consideration the dissipation (19.7) can be integrated exactly yielding, along with the algorithmic representation (19.9) of the current internal variables, the form

$$\hat{\Psi}(\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}, \gamma_{n+1}) = \hat{\psi}(\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}, \hat{\mathcal{I}}(\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}, \gamma_{n+1})) - \psi_n + c(\gamma_{n+1} - \gamma_n) \quad (19.13)$$

with $\gamma_{n+1} \in \mathcal{K}_{n+1}$. This function determines the work with respect to the unit volume of the local inelastic response within the time interval. The integration of the power of the external loads assumes the algorithmic form

$$\hat{\Pi}(\mathbf{u}_{n+1}) := \int_{\mathcal{B}} (\mathbf{u}_{n+1} - \mathbf{u}_n) \cdot \bar{\boldsymbol{\gamma}}_{n+1} dV + \int_{\partial\mathcal{B}_t} (\mathbf{u}_{n+1} - \mathbf{u}_n) \cdot \bar{\mathbf{t}}_{n+1} dA \quad (19.14)$$

and is considered to be a function of the current displacements $\mathbf{u}_{n+1}$. Taking the variation of (19.12) and using the integral theorem we obtain the *Euler-Lagrange* equations

$$\left. \begin{aligned} \operatorname{div}[\partial_{\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}} \hat{\Psi}] + \bar{\boldsymbol{\gamma}}_{n+1} &= \mathbf{0} & \text{in } \mathcal{B} \\ \partial_{\gamma_{n+1}} \hat{\Psi} &= 0 & \text{in } \mathcal{B} \\ [\partial_{\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}} \hat{\Psi}] \bar{\mathbf{n}} &= \mathbf{t}_{n+1} & \text{on } \partial\mathcal{B}_t \end{aligned} \right\} \quad (19.15)$$

representing the local equilibrium condition, a consistency condition and the boundary conditions for the tractions. We understand $(19.15)_2$ as an energetic consistency condition that, in connection with $(19.9)_2$, determines the current inelastic arc length γ_{n+1} . As this *Euler-Lagrange* equation is local in nature, it can be solved for γ_{n+1} locally at a point of the continuum. This motivates a formal two-step solution of the variational problem (19.12): In a first step minimize the incremental work function $\hat{\Psi}$ locally with respect to the inelastic arc length γ_{n+1} and in a second step minimize the functional (19.12) globally with respect to the current displacement $\mathbf{u}_{n+1}$.

19.2.4 Reduced incremental variational formulation

The first step of the solution can be formulated as follows: Determine a reduced incremental work expression from the local minimization problem

$$\hat{\Psi}_{red}(\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}) = \inf_{\gamma_{n+1} \in \mathcal{K}_{n+1}} \{ \hat{\Psi}(\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}, \gamma_{n+1}) \}. \quad (19.16)$$

The necessary condition of this local minimization problem constitutes a quasi-consistency condition

$$\partial_{\gamma_{n+1}} \hat{\Psi} = 0. \quad (19.17)$$

The solution (19.16) for the current inelastic arc length γ_{n+1} is then obtained as follows: At first assume an incrementally active inelastic response and determine the inelastic arc length based on *Newton* updates

$$\gamma_{n+1} \Leftarrow \gamma_{n+1} - [\partial_{\gamma_{n+1} \gamma_{n+1}}^2 \hat{\Psi}]^{-1} [\partial_{\gamma_{n+1}} \hat{\Psi}] \quad (19.18)$$

which are repeated until a convergence is obtained in the sense $|\partial_{\gamma_{n+1}} \hat{\Psi}| < \text{tol}$. Then check the constraint $\gamma_{n+1} \in \mathcal{K}_{n+1}$ by definition of the incremental inelastic loading flag

$$\alpha = \begin{cases} 1 & \text{if } \gamma_{n+1} > \gamma_n \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (19.19)$$

and finally perform the active set update of the inelastic arc length

$$\gamma_{n+1} \Leftarrow \alpha\gamma_{n+1} + (1 - \alpha)\gamma_n . \quad (19.20)$$

Insertion of this result into the incremental work function $\hat{\Psi}$ defined in (19.13) then yields the reduced incremental work function $\hat{\Psi}_{red}$ defined in (19.16).

In a second step we define based on the reduced incremental work function $\hat{\Psi}_{red}$ a reduced incremental variational principle: Minimize the functional

$$I_{red}(\mathbf{u}_{n+1}) = \int_B \hat{\Psi}_{red}(\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}) - \hat{\Pi}(\mathbf{u}_{n+1}) \rightarrow \text{Min!} \quad (19.21)$$

subjected to the constraints $\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1} = \text{sym}[\nabla \mathbf{u}_{n+1}]$ in $\mathcal{B}$, $\mathbf{u}_{n+1} = \bar{\mathbf{u}}_{n+1}$ on $\partial\mathcal{B}_u$, i. e. the kinematic definition of the strains and the boundary condition for the displacements. Taking the first variation and using the integral theorem we get the *Euler-Lagrange* equations

$$\left. \begin{aligned} \text{div}[\partial_{\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}} \hat{\Psi}_{red}] + \bar{\boldsymbol{\gamma}}_{n+1} &= \mathbf{0} & \text{in } \mathcal{B} \\ [\partial_{\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}} \hat{\Psi}_{red}] \bar{\mathbf{n}} &= \mathbf{t}_{n+1} & \text{on } \partial\mathcal{B}_t \end{aligned} \right\} \quad (19.22)$$

representing the local equilibrium and the boundary condition for the tractions. Thus, we identify the algorithmic expression for the stresses and consistent tangent moduli

$$\boldsymbol{\sigma}_{n+1} := \partial_{\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}} \hat{\Psi}_{red}(\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}) \quad \text{and} \quad \mathbf{C}_{n+1} := \partial_{\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1} \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}}^2 \hat{\Psi}_{red}(\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}) \quad (19.23)$$

as derivatives of the function $\hat{\Psi}_{red}$ describing the internal incremental work minimized with respect to the inelastic parameters. Taking into account the definition (19.16) and the energetic consistency condition (19.17) we can represent the stresses and tangent moduli in the form via the implicit function theorem

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma}_{n+1} &= \partial_{\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}} \hat{\Psi} , \\ \mathbf{C}_{n+1} &= \partial_{\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1} \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}}^2 \hat{\Psi} - \alpha [\partial_{\gamma_{n+1} \gamma_{n+1}}^2 \hat{\Psi}]^{-1} \partial_{\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1} \gamma_{n+1}}^2 \hat{\Psi} \otimes \partial_{\gamma_{n+1} \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}}^2 \hat{\Psi} . \end{aligned} \quad (19.24)$$

19.3 Existence of incremental minimizers

The existence of solutions of the reduced incremental functional defined in (19.21) is ensured if I_{red} is sequentially lower semicontinuous, see for example *Dacorogna* [4] or *Šilhavý* [14] for general definitions. Weak convexity conditions of the reduced incremental integrand $\hat{\Psi}_{red}$ guarantee the sequential lower semicontinuity of I_{red} . Then solution points of infimizing sequences are minimizers and the minimum of I_{red} is attained.

19.3.1 Quasiconvexity

The decisive mathematical theorem in view of the existence of incremental minimizer is the quasiconvexity condition introduced by Morrey [10] that for the constitutive model under consideration reads

$$\hat{\Psi}_{red}(\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}) \leq \frac{1}{|\mathcal{V}|} \int_{\mathcal{V}} \hat{\Psi}_{red}(\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1} + \text{sym}[\nabla \tilde{\mathbf{w}}]) dV . \quad (19.25)$$

The quasiconvexity condition requires the isothermal stability of a homogeneous body $\mathcal{V}$ with support on its boundaries. For this reason the existence of microscopic fluctuation fields $\tilde{\mathbf{w}}$ is excluded.

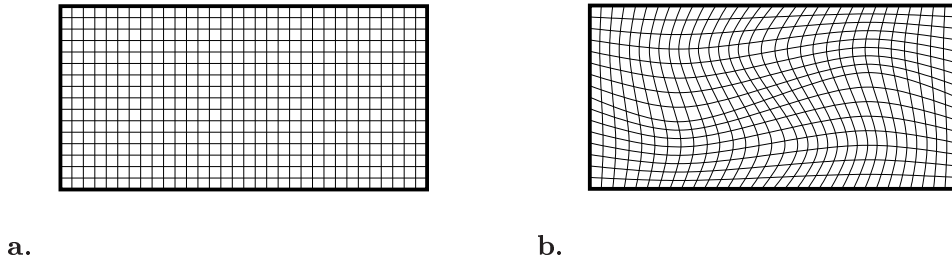


Figure 19.1: Mechanical interpretation of quasiconvexity. The quasiconvexity condition demands the stability of a.) a homogeneous body $\mathcal{V}$ with support on its boundaries ($\tilde{\mathbf{w}} = \mathbf{0}$) and b.) excludes a priori the development of fluctuation fields ($\tilde{\mathbf{w}} \neq \mathbf{0}$).

Among all admissible isothermal deformations the homogeneous state $\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}$ possesses the lowest energetic level. If the quasiconvexity condition is not fulfilled, fine-scale deformation patterns minimizing the total work may emerge. Figure 19.1 gives a mechanical interpretation of the quasiconvexity condition (19.25). In Figure 19.1b the formation of a fluctuation field is visualized which fulfils the constraint $\tilde{\mathbf{w}} = \mathbf{0}$ on $\partial\mathcal{V}$. The well motivated concept of quasiconvexity bases on an integral condition which is hard to verify in practice. This leads to the introduction of the slightly weaker condition of rank-1-convexity.

19.3.2 Rank-1-convexity

The rank-1-convexity condition traces back to the work of Corall and Graves, see Šilhavý [14]. For the reduced incremental potential $\hat{\Psi}_{red}$ considered it has the particular form

$$\hat{\Psi}_{red}(\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}) \leq (1 - \xi) \hat{\Psi}_{red}(\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^E) + \xi \hat{\Psi}_{red}(\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^P) . \quad (19.26)$$

Here, $\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^E$ and $\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^P$ denote two phases which have to fulfil the compatibility condition and the hypothesis H_2

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1} = (1 - \xi) \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^E + \xi \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^P \quad \text{and} \quad \text{rank}[\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^P - \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^E] \leq 1 \quad (19.27)$$

in terms of the volume fraction $0 < \xi < 1$. In contrast to the quasiconvexity condition (19.25) the rank-1-convexity condition describes the local stability at a material point $\mathbf{x} \in \mathcal{B}$ in view of the development of first-order laminates defined by the rank-1-strain tensor $\text{sym}[\mathbf{p} \otimes \mathbf{n}]$. The homogeneous state $\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}$ is stable as long as no combination of two phases exists that yields a lower energetic level. In Figure 19.2 a mechanical interpretation of the rank-1-convexity condition (19.25) is given. In Figure 19.2b the development of pattern of first-order laminates is depicted.

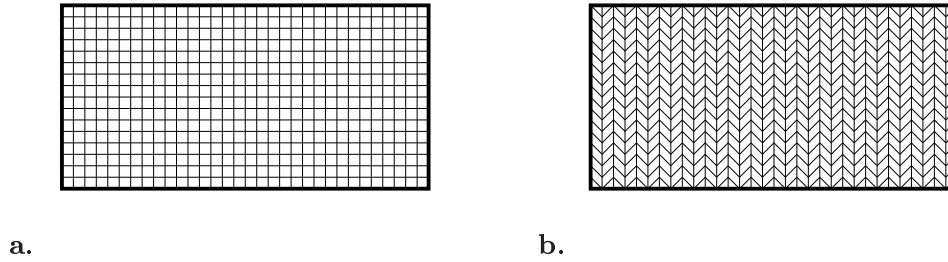


Figure 19.2: Mechanical interpretation of rank-1-convexity. The rank-1-convexity condition requires the stability of a.) a homogeneous body in view to b.) first-order laminates characterized by a rank-1-tensor $\text{sym}[\mathbf{p} \otimes \mathbf{n}]$.

As outlined in *Thomas* [15], *Hill* [5], and *Rice* [13], the vector $\mathbf{n}$ represents the orientation of a possible singular surface $\mathcal{S}$ and the vector $\mathbf{p}$ describes the jump in the strain field along $\mathcal{S}$. The loss of rank-1-convexity initializes a local bifurcation problem leading to a concentration of large inelastic deformations within a critical zone. This phenomenon is commonly referred to as localization and is observed in metals as well as in geomaterials, see for example *Nadai* [11] and *Vardoulakis* [17] for experimental investigations. If the reduced incremental potential $\hat{\Psi}_{red}$ is twice continuously differentiable an alternative formula for the rank-1-convexity condition (19.25) can be derived that reads

$$(\mathbf{p} \otimes \mathbf{n}) : \mathbb{C}_{n+1} : (\mathbf{p} \otimes \mathbf{n}) \geq 0 \quad (19.28)$$

in terms of the tangent moduli $\mathbb{C}_{n+1}$ defined in (19.23)₂. (19.28) is called *Hadamard* condition, see for example *Truesdell & Noll* [16]. Some algebraic manipulations of (19.28) lead to the condition

$$\mathbf{p} \cdot (\mathbf{Q}_{n+1} \cdot \mathbf{p}) \geq 0 \quad \text{with} \quad \mathbf{Q}_{n+1} := \mathbf{n} \cdot \mathbb{C}_{n+1} \cdot \mathbf{n}, \quad (19.29)$$

stating that the acoustic tensor $\mathbf{Q}_{n+1}$ has to be positively semidefinite. The inequations (19.28) and (19.29) equivalently guarantee the ellipticity of the differential equation (19.22)₁ and ensure a positive wave speed in the context of the general theory of acceleration waves.

19.3.3 Algorithmic check of rank-1-convexity

The algorithmic control of rank-1-convexity bases on the evaluation of the condition (19.29). In case of plane problems the orientation vector $\mathbf{n}$ of the singular surface $\mathcal{S}$ can

be parameterized by the in-plane-angle θ via $\hat{\mathbf{n}}(\theta) := [-\sin \theta \ \cos \theta]^T$. As a consequence, (19.29) can be recast into a nonlinear equation for the angle θ reading

$$\det[\hat{\mathbf{Q}}_{n+1}(\theta)] \geq 0 \quad \text{with} \quad \hat{\mathbf{Q}}_{n+1}(\theta) := \hat{\mathbf{n}}(\theta) \cdot \mathbf{C}_{n+1} \cdot \hat{\mathbf{n}}(\theta) . \quad (19.30)$$

The stability analysis needs the solution of the local nonlinear optimization problem

$$\min_{\theta} \{ \det[\hat{\mathbf{Q}}_{n+1}] \} \begin{cases} > 0 & : \quad \hat{\Psi}_{red} \text{ is rank-1-convex} \\ \leq 0 & : \quad \hat{\Psi}_{red} \text{ is not rank-1-convex} \end{cases} \quad (19.31)$$

for the inclination angle θ that minimizes the determinant of the acoustic tensor $\hat{\mathbf{Q}}_{n+1}$. For further details on this analysis we refer to *Miehe & Schröder* [9].

19.4 Relaxation of non-convex minimization problem

If the rank-1-convexity property of the reduced incremental work $\hat{\Psi}_{red}$ does not hold, the reduced incremental functional I_{red} is not sequentially lower semicontinuous and in general the minimum is not attained. Following *Dacorogna* [4] and *Acerbi & Fusco* [1] the relaxed functional denotes $I_{red}^*(\mathbf{u}_{n+1}) = \int_{\mathcal{B}} Q \hat{\Psi}_{red}(\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}) - \hat{\Pi}(\mathbf{u}_{n+1})$ where the non-convex integrand $\hat{\Psi}_{red}$ is replaced by its quasiconvex hull $Q \hat{\Psi}_{red}$. It is well-known that the loss of rank-1-convexity implies the lack of quasiconvexity. In order to relax the incremental functional we alternatively perform an approximated rank-1-convexification of the non-convex incremental potential:

$$I_{red}^*(\mathbf{u}_{n+1}) = \int_{\mathcal{B}} R^h \hat{\Psi}_{red}(\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}) - \hat{\Pi}(\mathbf{u}_{n+1}) \rightarrow \text{Min!} \quad (19.32)$$

Here, the key point is the computation of the approximated rank-1-convex hull $R^h \hat{\Psi}_{red}$. The subsequent sections concentrate on the convexification analysis of two-dimensional plane problems.

19.4.1 Concept of rank-1-convexification

The loss of rank-1-convexity indicates the instability of the homogeneous deformation state $\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}$ and the development of a pattern of first-order laminates. The two phases $\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^E$ and $\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^P$ have to fulfil the compatibility condition $(19.27)_1$ and the hypothesis H_2 given in $(19.27)_2$. The appropriate ansatz for the phases

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^E = \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1} - d \, \xi \text{sym}[\mathbf{m} \otimes \mathbf{n}] \quad \text{and} \quad \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^P = \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1} + d \, (1 - \xi) \text{sym}[\mathbf{m} \otimes \mathbf{n}] \quad (19.33)$$

models a so-called mode-II simple shear bifurcation in terms of the vector $\mathbf{m} \perp \mathbf{n}$. The two vectors can then be parameterized by an angle ϑ , i.e. $\mathbf{n} = [-\sin \vartheta \ \cos \vartheta]^T$ and

$\mathbf{m} = [\cos \vartheta \ \sin \vartheta]^T$. The scalar value d describes the intensity of the bifurcation and is denoted as discrete fluctuation. The volume fraction $0 < \xi < 1$ can be understood to play the role of a probability measure, see for example *Carstensen & Roubíček* [2] for a detailed discussion involving *Young* measures. The rank-1-convexification of the non-convex potential $\hat{\Psi}_{red}$ is performed by determining the phases $\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^E$ and $\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^P$ characterized by ξ , d and ϑ which minimize the energetic level. The rank-1-convexified incremental potential follows from the solution of a nonlinear optimization problem

$$R\hat{\Psi}_{red}(\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}) = \min_{\xi, d, \vartheta} \{ \xi \hat{\Psi}_{red}(\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^P) + (1 - \xi) \hat{\Psi}_{red}(\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^E) \}. \quad (19.34)$$

In analogy to the reduced incremental potential $\hat{\Psi}_{red}$ defined in (19.21) the rank-1-convexified potential $R\hat{\Psi}_{red}$ only depends on the current strains $\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}$. Thus, we identify the convexified stresses $\boldsymbol{\sigma}_{n+1}$ and the convexified tangent moduli $\mathbf{C}_{n+1}$ at time t_{n+1}

$$\boldsymbol{\sigma}_{n+1} := \partial_{\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}} R\hat{\Psi}_{red}(\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}) \quad \text{and} \quad \mathbf{C}_{n+1} := \partial_{\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}}^2 R\hat{\Psi}_{red}(\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}) \quad (19.35)$$

as derivatives of the rank-1-convexified function $R\hat{\Psi}_{red}$. Figure 19.3 shows the shape of a non-convex potential $\hat{\Psi}_{red}$.

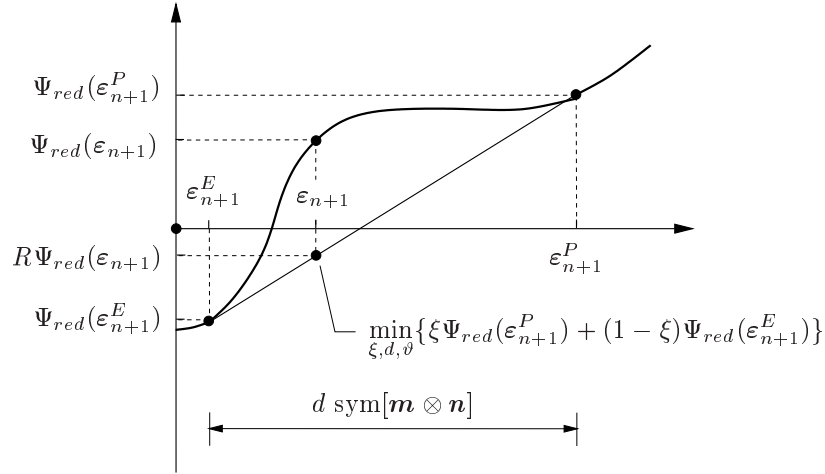


Figure 19.3: Concept of rank-1-convexification. At $\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}$ the reduced incremental potential is not convex. For this reason $\hat{\Psi}_{red}$ is replaced by its rank-1-convex hull $R\hat{\Psi}_{red}$ characterized by the minimizing sequence of the variables ξ , d and ϑ .

In every point of the curve the local energetic consistency condition (19.17) has been solved yielding the actual arc length γ_{n+1} . Obviously, the reduced potential $\hat{\Psi}_{red}$ of the actual strain is not rank-1-convex according to (19.26). As a consequence the homogeneous deformation state is not stable and decomposes into the phases $\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^E$ and $\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^P$. The solution of the minimization problem (19.34) yields the solution points ξ , d , ϑ which characterize the two stable phases.

19.4.2 Approximated rank-1-convexification

In this section we develop a finite element relaxation technique which incorporates an approximated rank-1-convexification of the not rank-1-convex reduced incremental potential $\hat{\Psi}_{red}$. Similar to (19.33) we introduce an ansatz for the phase decay of the homogeneous deformation state which now reads

$$\left. \begin{aligned} \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^E &= \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1} - d_{\parallel} \xi \text{sym}[\mathbf{m} \otimes \mathbf{n}] - d_{\perp} \xi \text{sym}[\mathbf{n} \otimes \mathbf{n}] \\ \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^P &= \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1} + d_{\parallel} (1 - \xi) \text{sym}[\mathbf{m} \otimes \mathbf{n}] + d_{\perp} (1 - \xi) \text{sym}[\mathbf{n} \otimes \mathbf{n}] \end{aligned} \right\} . \quad (19.36)$$

Here, the two discrete fluctuations $d_{\parallel}$ and $d_{\perp}$ separately describe the intensity of a mode-II simple shear and a mode-I simple extension bifurcation modelled by the rank-1-tensors $\text{sym}[\mathbf{m} \otimes \mathbf{n}]$ and $\text{sym}[\mathbf{n} \otimes \mathbf{n}]$, respectively. In contrast to the rank-1-convexification procedure discussed in Section 19.4.2 we relax the not sequentially lower semicontinuous functional I_{red} by a so-called approximated rank-1-convexification: We consider in (19.36) only the intensities $d_{\parallel}$ and $d_{\perp}$ as degrees of freedom and estimate the volume fraction ξ and the vectors $\mathbf{n}$, $\mathbf{m}$ as constant objects. Both vectors are formulated in terms of the critical inclination angle θ_{crit}

$$\mathbf{n} := [-\sin \theta_{crit} \ \cos \theta_{crit}]^T \quad \text{and} \quad \mathbf{m} := [\cos \theta_{crit} \ \sin \theta_{crit}]^T \quad (19.37)$$

which follows from the evaluation of the acoustic tensor $\mathbf{Q}_{n+1}$ as outlined in Section 19.3.3. The volume fraction ξ is assumed to be related to a given internal length scale δ and the dimensions of a quadrilateral finite element in terms of an equivalent height h :

$$\xi = \frac{\delta}{h} \quad \text{with} \quad h = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^4 l_i . \quad (19.38)$$

The lengths $\{l_i\}_{i=1..4}$ denote the distances between the four corner nodes of the quadrilateral element and a critical surface $\mathcal{S}$ with inclination θ_{crit} in the middle of the finite element.

If the incremental potential is not rank-1-convex we assume a decay of the homogeneous state into the phases $\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^P$ and $\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^E$ defined in (19.36). The incremental work then consists of the combination of the potentials in the phases:

$$\hat{\mathcal{R}}(\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}, d_{\parallel}, d_{\perp}) = \xi \hat{\Psi}_{red}(\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^P) + (1 - \xi) \hat{\Psi}_{red}(\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^E) . \quad (19.39)$$

The approximated rank-1-convexification involves the minimization of $\hat{\mathcal{R}}$ in view of the discrete fluctuations $d_{\parallel}$ and $d_{\perp}$ which uniquely determine the phase-splitting and defines the convexified potential

$$R^h \hat{\Psi}_{red}(\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}) = \min_{d_{\parallel}, d_{\perp}} \{ \hat{\mathcal{R}}(\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}, d_{\parallel}, d_{\perp}) \} . \quad (19.40)$$

The necessary conditions of this local nonlinear minimization problem are the quasi-consistency conditions

$$\partial_{d_{\parallel}} \hat{\mathcal{R}} = 0 \quad \text{and} \quad \partial_{d_{\perp}} \hat{\mathcal{R}} = 0 . \quad (19.41)$$

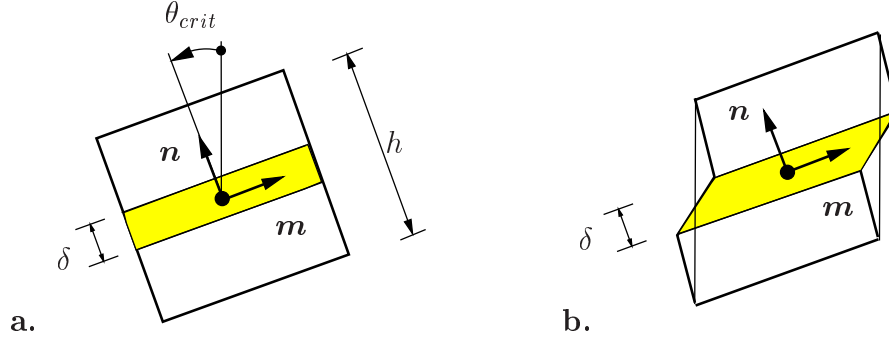


Figure 19.4: Deformation of a two-phase micro-structure. a.) The micro-structure is aligned to the critical localization angle θ_{crit} . b.) Due to the instability of the homogeneous state indicated by the loss of rank-1-convexity two stable phases ϵ_{n+1}^E and ϵ_{n+1}^P develop which model a mode-II simple shear bifurcation.

In order to solve (19.40) for the discrete fluctuations $d_{\parallel}$ and $d_{\perp}$ we apply an iterative *Newton* update scheme

$$\mathbf{d} \leftarrow \mathbf{d} - \mathbf{K}^{-1} \mathbf{r} \quad (19.42)$$

which is repeated until a convergence is obtained if $|\mathbf{r}| < tol$. For the sake of clarity we introduce the fluctuation vector $\mathbf{d}$, the residual vector $\mathbf{r}$, the fluctuation stiffness vector $\mathbf{L}$ and the fluctuation stiffness matrix $\mathbf{K}$ which assume the form

$$\mathbf{d} = \begin{bmatrix} d_{\parallel} \\ d_{\perp} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{r} = \begin{bmatrix} \partial_{d_{\parallel}} \hat{\mathcal{R}} \\ \partial_{d_{\perp}} \hat{\mathcal{R}} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{L} = \begin{bmatrix} \partial_{d_{\parallel} \epsilon_{n+1}}^2 \hat{\mathcal{R}} \\ \partial_{d_{\perp} \epsilon_{n+1}}^2 \hat{\mathcal{R}} \end{bmatrix}, \quad (19.43)$$

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} \partial_{d_{\parallel} d_{\parallel}}^2 \hat{\mathcal{R}} & \partial_{d_{\parallel} d_{\perp}}^2 \hat{\mathcal{R}} \\ \partial_{d_{\perp} d_{\parallel}}^2 \hat{\mathcal{R}} & \partial_{d_{\perp} d_{\perp}}^2 \hat{\mathcal{R}} \end{bmatrix}.$$

The convexified incremental potential $R^h \hat{\Psi}_{red}$ is only a function of the current strains ϵ_{n+1} . For this reason the convexified stresses and tangent moduli at time t_{n+1} simply coincide in the derivatives

$$\sigma_{n+1} = \partial_{\epsilon_{n+1}} R^h \hat{\Psi}_{red}(\epsilon_{n+1}) \quad \text{and} \quad \mathbf{C}_{n+1} = \partial_{\epsilon_{n+1} \epsilon_{n+1}}^2 R^h \hat{\Psi}_{red}(\epsilon_{n+1}). \quad (19.44)$$

Exploitation of the definition (19.40) and the consistency conditions (19.41) yield the alternative formulation

$$\sigma_{n+1} = \partial_{\epsilon_{n+1}} \hat{\mathcal{R}} \quad \text{and} \quad \mathbf{C}_{n+1} = \partial_{\epsilon_{n+1} \epsilon_{n+1}}^2 \hat{\mathcal{R}} - \mathbf{L}^T \mathbf{K}^{-1} \mathbf{L} \quad (19.45)$$

of the stresses and tangent moduli where we have used the formula $[\partial_{\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}} d_{\parallel} \partial_{\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}} d_{\perp}]^T = -\mathbf{K}^{-1} \mathbf{L}$ obtained from (19.41) via the implicit function theorem. The approximated rank-1-convexification can be interpreted as a two-scale homogenization analysis of a micro-structure aligned with the critical localization angle θ_{crit} . For a detailed discussion of computational homogenization concepts of heterogeneous materials with micro-structures we refer to Miehe, Schotte & Schröder [8]. Figure 19.4 visualizes the deformation of a cube-shaped micro-structure. The yellow colored part loads plastically while the rest unloads elastically modelled by the strains $\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^P$ and $\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^E$, respectively.

19.5 Numerical example

The numerical example deals with an indentation test under plane strain conditions. We focus on a simple constitutive response of an inelastic material which is assumed to be governed by a model of isotropic *von Mises*-type elastoplasticity with linear strain-softening. The internal variables and the dual internal forces have the specific form

$$\mathcal{I} := [\boldsymbol{\varepsilon}^p, A]^T \quad \text{and} \quad \mathcal{F} := [\boldsymbol{\sigma}^p, B]^T \quad (19.46)$$

where $\boldsymbol{\varepsilon}^p$ denotes the plastic strains and A a scalar internal variable for the description of the strain-softening. $\boldsymbol{\sigma}^p$ and B are the dual stress-like variables defined by (19.3)₂. The

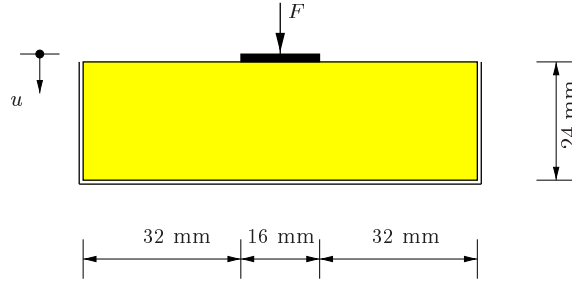


Figure 19.5: Indentation test at plane strain. System and load.

model problem is completed by the definition of the fundamental constitutive functions $\hat{\psi}$ and $\hat{\phi}$ for the strain energy and the level set of the elastic domain, respectively, as introduced in Table 19.1. The elastic response is assumed to be isotropic and governed by a quadratic form of the strain energy

$$\hat{\psi}(\boldsymbol{\varepsilon}, \mathcal{I}) = \frac{1}{2} \kappa \text{tr}^2[\boldsymbol{\varepsilon}] + \mu \|\text{dev}[\boldsymbol{\varepsilon}] - \boldsymbol{\varepsilon}^p\|^2 + \frac{1}{2} h A^2. \quad (19.47)$$

Here, $\kappa \in \mathbb{R}^+$ denotes the bulk modulus, $\mu \in \mathbb{R}^+$ the shear modulus and $h \in \mathbb{R}^-$ a softening modulus. The dual internal forces $\boldsymbol{\sigma}^p = 2\mu(\text{dev}[\boldsymbol{\varepsilon}] - \boldsymbol{\varepsilon}^p)$ and $B = -hA$ follow from an evaluation of (19.3)₂. The *von Mises* plasticity formulation is governed by the level set function

$$\hat{\phi}(\mathcal{F}) = \|\boldsymbol{\sigma}^p\| + B. \quad (19.48)$$

The constant threshold c introduced in (19.3) is related to the one-dimensional yield stress $y_0 \in \mathbb{R}^+$ via $c := \sqrt{\frac{2}{3}}y_0$. The material parameters denote $\kappa = 160000 \text{ N/mm}^2$, $\mu = 80000 \text{ N/mm}^2$, $h = -131 \text{ N/mm}^2$ and $y_0 = 500 \text{ N/mm}^2$. The initial geometry of

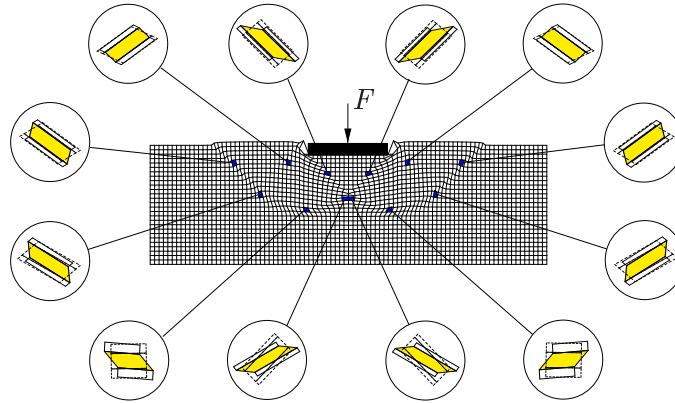


Figure 19.6: Indentation test at plane strain. Development of deformation-induced micro-structures.

the specimen is depicted in Figure 19.5. Due to the apparent symmetry, only one half has been discretized by 30×18 , 35×21 , 40×24 and 45×27 finite elements of the $Q1E5$ -type. We consider a deformation-controlled process where the rigid block indents into the specimen with increments $\Delta u = 0.001 \text{ mm}$ to the final displacement $u = 1.8 \text{ mm}$. For all following computations the internal length scale has been fixed to $\delta = 0.25 \text{ mm}$. In Figure 19.6 the deformed mesh of the 45×27 element mesh at $u = 1.8 \text{ mm}$ is plotted surrounded by the deformed micro-structures corresponding to the central Gaussian point of the marked elements. As the micro-structures considered lie within the localized zone of high plastic deformations, they have bifurcated considerably. Note that the critical localization orientation of the micro-structures coincides with the global formation of the shear band as depicted in Figure 19.6a. The performance of the proposed relaxation technique is controlled by comparison of the load-deflection curves of the non-relaxed formulation with the relaxation procedure presented. Figure 19.7a depicts the mesh-dependent load-displacement paths of the non-relaxed formulation, whereas Figure 19.7b shows the mesh-invariant curves resulting from the proposed relaxation technique.

19.6 Conclusion

A relaxation technique for the treatment of localization phenomena which appear within computational simulations of elastoplastic solids has been developed. The formulation is based on an incremental variational formulation of inelasticity, yielding a quasi-hyperelastic algorithmic stress response following from a local minimization problem. The formulation incorporates a potential function that allows for existence theorems of minimizers of the variational problem considered. We then went into the notions of quasiconvexity and rank-1-convexity being necessary conditions for the sequential lower semicontinuity of the affiliated functional. Focussing on the case where the rank-1-convexity condition is not fulfilled, we briefly considered the concept of rank-1-convexification and developed a

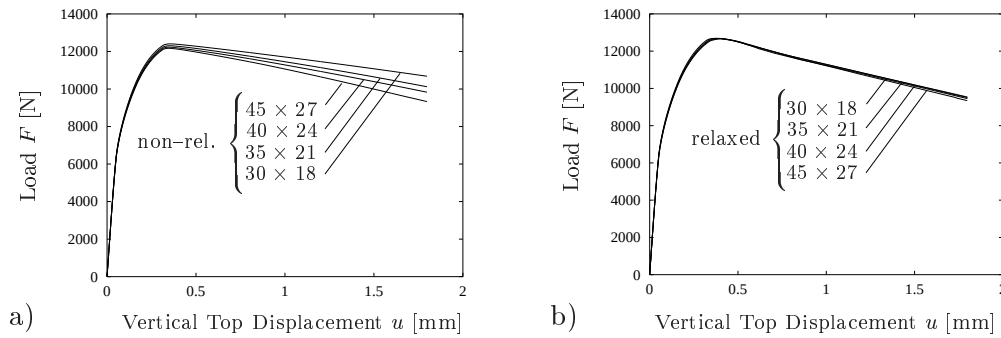


Figure 19.7: Indentation test at plane strain. Load displacement curves for different finite element meshes a) with non-relaxed formulation and b) proposed relaxation technique.

finite element relaxation technique in order to overcome the ill-posed boundary problem. Key point hereby is an approximated rank-1-convexification of the non-convex incremental potential. The performance of the proposed relaxation procedure has been underlined by means of a representative numerical example.

Bibliography

- [1] E. Acerbi and N. Fusco. Semicontinuity Problems in the Calculus of Variations. *Archive of Rational Mechanics and Analysis*, 83: 125–145, 1984.
- [2] C. Carstensen and T. Roubíček. Numerical Approximation of Young Measures in Non-Convex Variational Problems. *Numerische Mathematik*, 84:395–415, 2000.
- [3] B. D. Coleman and M. E. Gurtin. Thermodynamics with Internal State Variables. *The Journal of Chemical Physics*, 47:597–613, 1967.
- [4] B. Dacorogna. *Direct Methods in the Calculus of Variations*. Springer-Verlag, Berlin, 1989.
- [5] R. Hill. Acceleration Waves in Solids. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 6:1–16, 1962.
- [6] I. Lubliner. *Plasticity Theory*. Macmillan Publishing Company, New York, 1990.
- [7] C. Miehe. Strain-Driven Homogenization of Inelastic Microstructures and Composites Based on an Incremental Variational Formulation. Accepted by *International Journal of Numerical Methods in Engineering*, 2000.
- [8] C. Miehe, J. Schotte, and J. Schröder. Computational Micro-Macro Transitions and Overall Moduli in the Analysis of Polycrystals at Large Strains. *Computational Materials Science*, 16:372–382, 1999.
- [9] C. Miehe and J. Schröder. Post-critical Discontinuous Localization Analysis of Small-Strain Softening Elastoplastic Solids. *Archive of Applied Mechanics*, 64:267–285, 1994.

- [10] C. B. Morrey. Quasiconvexity and the Semicontinuity of Multiple Integrands. *Pacific Journal of Mathematics*, 2:25–53, 1952.
- [11] A. Nadai. *Theory of Flow and Fracture of Solids*. Vol. I, McGraw-Hill, New York, 1950.
- [12] A. Nguyen. *Stability and Nonlinear Solid Mechanics*. John Wiley & Sons, New York, 2000.
- [13] J. R. Rice. The Localization of Plastic Deformation. In W. T. Koiter, editor, *Theoretical and Applied Mechanics*, pages 207–220, North-Holland, Amsterdam.
- [14] M. Šilhavý. *The Mechanics and Thermodynamics of Continuous Media*. Springer-Verlag, Berlin, 1997.
- [15] T. Y. Thomas. *Plastic Flow and Fracture in Solids*. Academic Press, London, 1961.
- [16] C. Truesdell and W. Noll. *The Nonlinear Field Theories of Mechanics*. In S. Flügge, editor, *Handbuch der Physik Bd. III/3*, Springer-Verlag, Berlin, 1965.
- [17] I. Vardoulakis. Scherfugenbildung in Sandkörpern als Verzweigungsproblem. *Veröffentlichungen des Instituts für Bodenmechanik und Felsmechanik der Universität Karlsruhe*, Heft 70, Universität Karlsruhe.

A

Lebenslauf von Prof. Dr.-Ing. W. Ehlers

Prof. Dr.-Ing. Wolfgang Ehlers

01.08.1951	geboren in Bielefeld als Sohn des Architekten Walther Ehlers und seiner Ehefrau Ilse, geb. Baumeister	
1958–1962	Volksschule Heepen in Bielefeld	
1962–1970	Max-Planck-Gymnasium in Bielefeld	
1970–1972	Wehrdienst	
1972–1979	Studium der Fachrichtung Bauingenieurwesen an der Universität Hannover (Vertiefungsrichtung „Konstruktiver Ingenieurbau“)	
1979–1990	Wissenschaftlicher Mitarbeiter an der Universität-GH-Essen, Fachbereich 10 – Bauwesen, Fachgebiet Mechanik (Prof. Dr.-Ing. R. de Boer)	
1989–1991	Privatdozent für das Fach „Mechanik“ an der Universität-GH-Essen, Fachbereich 10 – Bauwesen	
1991–1995	Professor für das Fach „Mechanik“ an der Technischen Hochschule Darmstadt, Fachbereich 6 – Mechanik	
seit 1995	Ordinarius für das Fach „Technische Mechanik“ an der Universität Stuttgart, Fakultät 2: Bauingenieur- und Vermessungswesen	

B

Publikationsliste von Prof. Dr.-Ing. W. Ehlers

1. **R. de Boer, W. Ehlers:** Grundlagen der isothermen Plastizitäts- und Viskoplastizitätstheorie. Forschungsberichte aus dem Fachbereich 10 – Bauwesen der Universität-GH-Essen, Heft 14, Essen 1980.
2. **R. de Boer, W. Ehlers:** Die Form der konstitutiven Gleichungen elastisch-inelastischer Kontinua. Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik (ZAMM), Band 62 (1982), T106 – T109.
3. **W. Ehlers:** Zur inkrementellen Beschreibung elastisch-plastischer Körper innerhalb der Theorie kleiner Verzerrungen und großer Rotationen. Dissertation (Dr.-Ing.), Universität-GH-Essen, Essen 1983.
4. **W. Ehlers:** Die Grundlagen flüssigkeits- und gasgefüllter poröser Körper. Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik (ZAMM), Band 65 (1985), T134 – T136.
5. **R. de Boer, W. Ehlers:** On the problem of fluid- and gas-filled elasto-plastic porous solids. International Journal of Solids and Structures, Vol. 22 (1986), 1231 – 1242.
6. **W. Ehlers:** Wärme- und Feuchtekopplung in porösen Medien, Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik (ZAMM), Band 66 (1986), T203 – T204.
7. **W. Ehlers, K. Pausch:** Eindeutigkeit und Extremalaussagen im Rahmen einer geometrisch und physikalisch nichtlinearen Theorie. In O. T. Bruhns (Herausgeber): Große plastische Formänderungen – Bad Honnef 1985, Mitteilung Nr. 3 des Instituts für Mechanik der Gesamthochschule Kassel-Universität, Kassel 1986, pp. 117 – 121.
8. **R. de Boer, W. Ehlers:** Theorie der Mehrkomponentenkontinua mit Anwendung auf bodenmechanische Probleme, Teil I. Forschungsberichte aus dem Fachbereich 10 – Bauwesen der Universität-GH-Essen, Heft 40, Essen 1986.
9. **W. Ehlers:** Zur Entwicklung konstitutiver Gleichungen für poröse Medien. Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik (ZAMM), Band 68 (1988), T170 – T171.

10. **R. de Boer, W. Ehlers:** A historical review of the formulation of porous media theories. *Acta Mechanica*, Band 74 (1988), 1 – 8.
11. **R. de Boer, W. Ehlers:** Auftrieb und Reibung in flüssigkeitsgefüllten porösen Körpern – eine Klarstellung. *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik (ZAMM)*, Band 68 (1988), 567 – 572.
12. **W. Ehlers:** On thermodynamics of elasto-plastic porous media. *Archives of Mechanics (Archiwum Mechaniki Stosowanej)*, Vol. 41 (1989), 73 – 93.
13. **W. Ehlers:** Ein Elastizitätsgesetz für poröse Medien. *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik (ZAMM)*, Band 69 (1989), T472 – T474.
14. **J. Bluhm, W. Ehlers:** Zur endlichen Elastizität von Stäben – ein Vergleich verschiedener FE-Modelle. *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik (ZAMM)*, Band 69 (1989), T239 – T240.
15. **W. Ehlers:** Zur Thermodynamik flüssigkeitsgefüllter, elastisch-plastisch deformierbarer poröser Körper. In O. T. Bruhns (Herausgeber): *Große plastische Formänderungen – Bad Honnef 1988*, Mitteilungen aus dem Institut für Mechanik der Ruhr-Universität Bochum, Heft 63, Bochum 1989, pp. 76 – 78.
16. **W. Ehlers:** PORÖSE MEDIEN – ein kontinuumsmechanisches Modell auf der Basis der Mischungstheorie. Habilitationsschrift (1988), Forschungsberichte aus dem Fachbereich 10 – Bauwesen der Universität-GH-Essen, Heft 47, Essen 1989.
17. **W. Ehlers:** Finite elasto-plasticity for liquid-saturated porous solids. In J. Fan und S. Murakami (Herausgeber): *Advances in Constitutive Laws for Engineering Materials, Proceedings of ICCLEM (Asia) – International Conference on Constitutive Laws for Engineering Materials*, International Academic Publishers, Beijing 1989, pp. 439 – 444.
18. **W. Ehlers:** A general approach to porous media elasto-plasticity. In A. S. Khan und M. Tokuda (Herausgeber): *Advances in Plasticity, Proceedings of Plasticity '89 – the Second International Symposium on Plasticity and Its Current Applications*, Pergamon Press, Oxford 1989, pp. 19 – 22.
19. **R. de Boer, W. Ehlers:** Uplift, friction and capillarity – three fundamental effects for liquid-saturated porous media. *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 26 (1990), 43 – 57.
20. **W. Ehlers:** Eine neue thermodynamische Interpretation elastisch-plastischen Materialverhaltens. *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik (ZAMM)*, Band 70 (1990), T301 – T303.
21. **J. Bluhm, W. Ehlers:** Zur vollständig geometrisch nichtlinearen Berechnung elastisch-plastisch deformierbarer Strukturen. *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik (ZAMM)*, Band 70 (1990), T676 – T678.
22. **R. de Boer, W. Ehlers:** The development of the concept of effective stresses. *Acta Mechanica*, Band 83 (1990), 77 – 92.

23. **W. Ehlers:** Ein Stoffmodell für flüssigkeitsgesättigte, elastisch-plastisch deformierbare poröse Festkörper. Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik (ZAMM), Band 71 (1991), T325 – T327.
24. **J. Bluhm, W. Ehlers:** Praktische Methoden zur Berechnung geometrisch nichtlinearer Probleme der Elastoplastizität. Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik (ZAMM), Band 71 (1991), T586 – T589.
25. **W. Ehlers, J. Plischka:** Die Durchschnittsbildungstheorie und ihre Bedeutung in der phänomenologischen Kontinuumsmechanik. Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik (ZAMM), Band 71 (1991), T327 – T330.
26. **W. Ehlers:** On finite elastoplasticity models in porous media theories. In J.-P. Boehler und A. S. Khan (Herausgeber): Anisotropy and Localization of Plastic Deformation, Proceedings of Plasticity '91 – the Third International Symposium on Plasticity and Its Current Applications, Elsevier Applied Science, London 1991, pp. 205 – 208.
27. **R. de Boer, W. Ehlers, S. Kowalski, J. Plischka:** POROUS MEDIA – a survey of different approaches. Forschungsberichte aus dem Fachbereich 10 – Bauwesen der Universität-GH-Essen, Heft 54, Essen 1991.
28. **W. Ehlers:** Toward finite theories of liquid-saturated elasto-plastic porous media. International Journal of Plasticity, Vol. 7 (1991), 433 – 475.
29. **J. Bluhm, W. Ehlers:** Ein Beitrag zur Berechnung elastisch-plastisch deformierbarer Tragwerke im Rahmen der geometrisch nichtlinearen Theorie. In H. Bergander (Herausgeber): Vorträge zum Problemseminar Plastizitätstheorie IV, Schriftenreihe der Technischen Universität Dresden, Heft 1/91, Dresden 1991, pp. 121 – 130.
30. **J. Bluhm, W. Ehlers:** Neuere Überlegungen zur Berechnung nichtlinearer Prozesse kinematisch verfestigender Materialien. In O. T. Bruhns (Herausgeber): Große plastische Formänderungen – Bad Honnef 1991, Mitteilungen aus dem Institut für Mechanik der Ruhr-Universität Bochum, Heft 78, Bochum 1991, pp. 94 – 97.
31. **W. Ehlers:** An elastoplasticity model in porous media theories. Transport in Porous Media, Vol. 9 (1992), 49 – 59.
32. **R. de Boer, W. Ehlers, Z. Liu:** One-dimensional transient wave-propagation in fluid-saturated incompressible porous media. Archive of Applied Mechanics (Ingenieur-Archiv), Band 63 (1993), 59 – 72.
33. **W. Ehlers:** Ein thermodynamisches Konzept kompressibler poröser Medien. Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik (ZAMM), Band 73 (1993), T260 – T262.
34. **W. Ehlers:** Constitutive equations for granular materials in geomechanical context. In K. Hutter (Herausgeber): Continuum Mechanics in Environmental Sciences and Geophysics, CISM Courses and Lectures No. 337, Springer-Verlag, Wien 1993, pp. 313 – 402.

35. **W. Ehlers:** Compressible, incompressible and hybrid two-phase models in porous media theories. In Y. C. Angel (Herausgeber): Anisotropy and Inhomogeneity in Elasticity and Plasticity, ASME: AMD-Vol. 158 (1993), 25 – 38.
36. **W. Ehlers:** A single surface yield criterion in porous media plasticity. Proceedings of Plasticity '93 – the Fourth International Symposium on Plasticity and Its Current Applications, zur Veröffentlichung angenommen, 1993.
37. **W. Ehlers:** Eine Fließbedingung für spröde und granulare poröse Stoffe. Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik (ZAMM), Band 74 (1994), T239 – T241.
38. **W. Ehlers, J. Kubik:** On finite dynamic equations for fluid-saturated porous media. Acta Mechanica, Band 105 (1994), 101 – 117.
39. **S. Diebels, W. Ehlers:** Ein numerisches Modell zur Behandlung elastisch-plastischer Konsolidationsvorgänge. In O. T. Bruhns (Herausgeber): Große plastische Formänderungen – Bad Honnef 1994, Mitteilungen aus dem Institut für Mechanik der Ruhr-Universität Bochum, Heft 93, Bochum 1994, pp. 167 – 170.
40. **S. Diebels, W. Ehlers:** Dynamik poröser Medien. Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik (ZAMM), Band 75 (1995), S151 – S152.
41. **W. Ehlers:** A single-surface yield function for geomaterials. Archive of Applied Mechanics (Ingenieur-Archiv), Band 65 (1995), 246 – 259.
42. **W. Ehlers, S. Diebels:** Dynamic deformations in the theory of fluid-saturated porous solid materials. In D. F. Parker und A. H. England (Herausgeber): IUTAM Symposium on Anisotropy, Inhomogeneity and Nonlinearity in Solid Mechanics, Kluwer, Dordrecht 1995, pp. 241 – 246.
43. **W. Ehlers, S. Diebels, D. Mahnkopf:** Elasto-plastic consolidation of fluid-saturated soils. In D. R. J. Owen, E. Oñate und E. Hinton (Herausgeber): Computational Plasticity – Fundamentals and Applications, Pineridge Press, Swansea 1995, pp. 1689 – 1700.
44. **W. Ehlers, S. Diebels, D. Mahnkopf:** Elasto-plastic consolidation problems: Theoretical and computational aspects. In S. Tanimura und A. S. Khan (Herausgeber): Dynamic Plasticity and Structural Behaviors, Proceedings of Plasticity '95 – the Fifth International Symposium on Plasticity and Its Current Applications, Gordon and Breach Publishers, Luxembourg 1995, pp. 519 – 522.
45. **W. Ehlers, S. Diebels, D. Mahnkopf:** Theorie und Numerik der elastoplastischen Konsolidation. In H. Ulbrich (Herausgeber): Festschrift zum 70. Geburtstag von Herrn Prof. Dr.-Ing. Julius Siekmann, Universität-GH Essen 1995, pp. 263 – 274.
46. **W. Ehlers:** Theoretical and numerical aspects in the description of fluid-saturated elasto-plastic soils. In D. Hui und S. Michaelides (Herausgeber): Proceedings of the 32nd Annual Technical Meeting of the Society of Engineering Science, New Orleans 1995, pp. 5 – 6 (supplementary volume).

47. **W. Ehlers, S. Diebels, W. Volk:** Ein elastisch-plastisches Materialmodell für flüssigkeitsgesättigte poröse Festkörper unter Einbeziehung der Mikrorotation. In W. Walther (Redaktion): Beiträge zur Mechanik (Festschrift zum 60. Geburtstag von Herrn Prof. Dr.-Ing. R. de Boer), Forschungsberichte aus dem Fachbereich Bauwesen der Universität-GH Essen, Heft 66, Essen 1995, pp. 67 – 82.
48. **S. Diebels, W. Ehlers:** Dynamic analysis of a fully saturated porous medium accounting for geometrical and material non-linearities. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Band 39 (1996), 81 – 97.
49. **S. Diebels, W. Ehlers, D. Mahnkopf, W. Volk:** Elastoplastisches Stoffverhalten beim Konsolidationsproblem. *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik (ZAMM)*, Band 76, Supplement 5 (1996), 119 – 120.
50. **W. Ehlers:** Grundlegende Konzepte in der Theorie poröser Medien. *Technische Mechanik*, Band 16 (1996), 63 – 76.
51. **S. Diebels, W. Ehlers:** On basic equations of multiphase micropolar materials. *Technische Mechanik*, Band 16 (1996), 77 – 88.
52. **W. Ehlers, S. Diebels, D. Mahnkopf, P. Ellsiepen:** Theoretische und numerische Studien zur Lösung von Rand- und Anfangswertproblemen in der Theorie poröser Medien. Zwischenbericht zum DFG-Forschungsvorhaben Eh 107/6-1, Bericht aus dem Institut für Mechanik (Bauwesen), Nr. 96-II-1, Universität Stuttgart 1996.
53. **W. Ehlers, S. Diebels, D. Mahnkopf:** Theoretical and numerical aspects of elasto-plastic porous media models. In R. Helmig, W. Jäger, W. Kinzelbach, P. Knabner und G. Wittum (Herausgeber): *Modeling and Computation in Environmental Sciences, Notes on Numerical Fluid Dynamics*, Vol. 59, Vieweg, Braunschweig 1997, pp. 121 – 132.
54. **W. Ehlers, G. Eipper:** Finite Elastizität bei fluidgesättigten hochporösen Festkörpern. *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik (ZAMM)*, Band 77, Supplement 1 (1997), S79 – S80.
55. **W. Ehlers, P. Ellsiepen:** Zeitschrittgesteuerte Verfahren bei stark gekoppelten Festkörper-Fluid-Problemen. *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik (ZAMM)*, Band 77, Supplement 1 (1997), S81 – S82.
56. **W. Ehlers, W. Volk:** Cosserat-Theorie für gesättigte poröse Festkörper. *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik (ZAMM)*, Band 77, Supplement 1 (1997), S83 – S84.
57. **W. Ehlers:** Theoretical and numerical modelling of granular liquid-saturated elasto-plastic porous media. *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik (ZAMM)*, Band 77, Supplement 2 (1997), S401 – S404.
58. **W. Ehlers:** Shear band localization in fluid-saturated granular elasto-plastic porous media. In N. A. Fleck und A. C. F. Cocks (Herausgeber): *IUTAM Symposium on Mechanics of Granular and Porous Media*, Kluwer, Dordrecht 1997, pp. 377 – 388.

59. **W. Ehlers, W. Volk:** On shear band localization phenomena of liquid-saturated granular elasto-plastic porous solid materials accounting for fluid viscosity and micropolar solid rotations. *Mechanics of Cohesive-frictional Materials*, Band 2 (1997), 301 – 320.
60. **W. Ehlers, W. Volk:** On shear band localization phenomena induced by elasto-plastic consolidation of fluid-saturated soils. In D. R. J. Owen, E. Oñate und E. Hinton (Herausgeber): *Computational Plasticity – Fundamentals and Applications*, CIMNE, Barcelona 1997, pp. 1657 – 1664.
61. **W. Ehlers, S. Diebels, P. Ellsiepen, W. Volk:** Localization phenomena in liquid-saturated soils. *Proceedings of NAFEMS World Congress '97 on Design, Simulation and Optimisation, Reliability and Applicability of Computational Methods*, Stuttgart 1997, pp. 287 – 298.
62. **W. Ehlers, W. Volk:** Stoffverhalten und Lokalisierung in der Theorie Poröser Medien. Zwischenbericht zum gleichnamigen Forschungsvorhaben, Teilprojekt A 6 des SFB 404 – Mehrfeldprobleme in der Kontinuumsmechanik, Bericht aus dem Institut für Mechanik (Bauwesen), Nr. 97-II-4, Universität Stuttgart 1997.
63. **W. Ehlers, P. Blome, H. Müllerschön:** Baugrund-Modellierung auf der Basis der Theorie Poröser Medien. In R. Katzenbach und U. Arslan (Herausgeber): *Vorträge zum Workshop Baugrund-Tragwerk-Interaktion am 21. November 1997*, Mitteilungen des Instituts und der Versuchsanstalt für Geotechnik der Technischen Universität Darmstadt, Heft 38, Darmstadt 1997, pp. 65 – 90.
64. **S. Diebels, P. Ellsiepen, W. Ehlers:** A two-pase model for viscoplastic geomaterials. In D. Besdo und R. Bogacz (Herausgeber): *Proceedings of the International Symposium on Dynamics of Continua*, Shaker, Aachen 1998, pp. 103 – 112.
65. **W. Ehlers, G. Eipper:** The simple tension problem at large volumetric strains computed from finite hyperelastic material laws. *Acta Mechanica*, Band 130 (1998), 17 – 27.
66. **W. Ehlers, A. Droste:** Baugrund-Modellierung auf der Basis der Theorie Poröser Medien. *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik (ZAMM)*, Band 78 (1998), S357 – S358.
67. **W. Ehlers, G. Eipper:** Zur Beschreibung finiter elastischer Deformationen in fluid-gesättigten porösen Festkörpern. *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik (ZAMM)*, Band 78 (1998), S359 – S360.
68. **W. Ehlers, P. Ellsiepen:** Adaptive Zeitintegrations-Verfahren für ein elastisch-viskoplastisches Zweiphasenmodell. *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik (ZAMM)*, Band 78 (1998), S361 – S362.
69. **W. Ehlers, H. Müllerschön:** Zum Materialverhalten granularer Stoffe: Theorie und Experimente. *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik (ZAMM)*, Band 78 (1998), S363 – S364.
70. **W. Ehlers, W. Volk:** Lokalisierung in mikropolaren fluid-gesättigten Böden. *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik (ZAMM)*, Band 78 (1998), S365 – S366.

71. **W. Ehlers, W. Volk:** On theoretical and numerical methods in the theory of porous media based on polar and non-polar solid materials. *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 35 (1998), 4597 – 4616.
72. **W. Ehlers, S. Diebels, W. Volk:** Die Bedeutung der Kompatibilitätsbedingung für mikropolare, elastisch-plastische Reibungsmaterialien. In O. T. Bruhns (Herausgeber): *Große plastische Formänderungen – Bad Honnef 1997*, Mitteilungen aus dem Institut für Mechanik der Ruhr-Universität Bochum, Heft 114, Bochum 1998, pp. 23 – 26.
73. **S. Diebels, P. Ellsiepen, W. Ehlers:** Zeitintegration viskoplastischer Zweiphasenmodelle. In O. T. Bruhns (Herausgeber): *Große plastische Formänderungen – Bad Honnef 1997*, Mitteilungen aus dem Institut für Mechanik der Ruhr-Universität Bochum, Heft 114, Bochum 1998, pp. 145 – 148.
74. **W. Ehlers:** On liquid-saturated and empty granular elasto-plastic porous solid materials accounting for micropolar rotations. In O. T. Bruhns und E. Stein (Herausgeber): *IUTAM Symposium on Micro- and Macrostructural Aspects of Thermo-plasticity*, Kluwer, Dordrecht 1998, pp. 271 – 280.
75. **D. Gross, W. Schnell, W. Ehlers, P. Wriggers:** *Formeln und Aufgaben zur Technischen Mechanik 1: Statik. 5., neubearbeitete und erweiterte Auflage*, Springer-Verlag, Berlin 1998.
76. **W. Ehlers, W. Volk:** Fundamental considerations on the numerical investigation of shear band phenomena in saturated and non-saturated frictional porous materials. In S. R. Idelsohn, E. Oñate und E. N. Dvorkin (Herausgeber): *Computational Mechanics: New Trends and Applications*, CD-ROM Proceedings of the 4th World Congress on Computational Mechanics, Section 5 – Geomechanics, No. 12, CIMNE, Barcelona 1998.
77. **D. Gross, W. Schnell, W. Ehlers, P. Wriggers:** *Formeln und Aufgaben zur Technischen Mechanik 2: Elastostatik, Hydrostatik. 5., neubearbeitete und erweiterte Auflage*, Springer-Verlag, Berlin 1998.
78. **W. Ehlers, P. Ellsiepen:** PANDAS – Ein FE-System zur Simulation von Sonderproblemen der Bodenmechanik. In P. Wriggers, U. Meißner, E. Stein und W. Wunderlich (Herausgeber): *Finite Elemente in der Baupraxis – FEM '98*, Modellierung, Berechnung und Konstruktion, Ernst & Sohn, Berlin 1998, pp. 391 – 400.
79. **W. Ehlers, S. Diebels, W. Volk:** Deformation and compatibility for elasto-plastic micropolar materials with application to geomechanical problems. *Journal de Physique IV France*, Vol. 8 (1998), 127 – 134.
80. **S. Diebels, W. Ehlers, P. Ellsiepen, W. Volk:** On the regularization of shear band phenomena in liquid-saturated and empty soils. In A. Brillard und J. F. Ganghoffer (Herausgeber): *Nonlocal Aspects in Solid Mechanics*, Proceedings of the EUROMECH-Colloquium 378, Mulhouse 1998, pp. 58 – 63.
81. **W. Ehlers, P. Ellsiepen:** Zeit- und ortsadaptive Berechnung von Scherbändern in porösen Materialien. In R. Mahnen (Herausgeber): *Theoretische und Numerische*

Methoden in der Angewandten Mechanik mit Praxisbeispielen, Festschrift anlässlich der Emeritierung von Herrn Prof. Dr.-Ing. Dr.-Ing. E. h. E. Stein, Forschungs- und Seminarberichte aus dem Bereich der Mechanik der Universität Hannover, Bericht-Nr. F98/4, Hannover 1998, pp. 99 – 106.

82. **W. Ehlers, W. Volk:** Regularization of shear band phenomena in saturated and empty frictional granular porous solid materials. In J.-F. Thimus *et al.* (Herausgeber): Keynote Lectures of the Biot Conference on Poromechanics, Louvain-la-Neuve 1998, pp. 21 – 35.
83. **W. Ehlers, H. Müllerschön:** Stress-strain behaviour of cohesionless soils: Experiments, theory and numerical computations. In A. Cividini (Herausgeberin): Application of Numerical Methods to Geotechnical Problems, Proceedings of the 4th European Conference on Numerical Methods in Geotechnical Engineering – NUMGE 98, CISM Courses and Lectures No. 397, Springer-Verlag, Wien 1998, pp. 675 – 684.
84. **W. Ehlers, P. Blome:** Ein Mehrphasen-Stoffmodell für Böden mit Übergang auf Interface-Gesetze. Zwischenbericht zum Teilprojekt 1 im Rahmen der DFG-Forschergruppe „Baugrund-Tragwerk-Interaktion“ an der Technischen Universität Darmstadt, Bericht aus dem Institut für Mechanik (Bauwesen), Nr. 98-II-14, Universität Stuttgart 1998.
85. **W. Ehlers, W. Volk:** The shear band problem in soil-structure interaction. In R. Katzenbach und U. Arslan (Herausgeber): Darmstadt Geotechnics, No. 4, Volume 2, Proceedings of the International Conference on Soil-Structure Interaction in Urban Civil Engineering (COST C7), Institute and Laboratory of Geotechnics, Darmstadt 1998, pp. 397 – 409.
86. **W. Ehlers, B. Markert:** Modellierung fluidgesättigter, viskoelastischer Festkörper in der Biomechanik. In: Proceedings des Workshops 1998 über „Die Methode der Finiten Elemente in der Biomechanik, Biomedizin und angrenzenden Gebieten“, Universität Ulm 1998.
87. **W. Ehlers, H. Müllerschön:** On coupled solid-fluid problems for cohesionless soils. In N. Vitharana und R. Colman (Herausgeber): Proceedings of the 8th Australia New Zealand Conference on Geomechanics: Consolidating Knowledge, Vol. 2, Australian Geomechanics Society, New Generation Print & Copy, Victoria 1999, pp. 945 – 951.
88. **S. Diebels, P. Ellsiepen, W. Ehlers:** Error-controlled *Runge-Kutta* time integration of a viscoplastic hybrid two-phase model. Technische Mechanik, Band 19 (1999), 19 – 27.
89. **W. Ehlers, A. Droste:** Modellierung von Metallschäumen mit der Theorie Poröser Medien. Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik (ZAMM), Band 79 (1999), Supplement 2, S539 – S540.
90. **W. Ehlers, P. Ellsiepen:** Zeit- und ortsadaptive Verfahren für Mehrphasenprobleme poröser Medien. Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik (ZAMM), Band 79 (1999), Supplement 2, S541 – S542.

91. **W. Ehlers, D. Mahnkopf:** Elastoplastizität und Lokalisierung poröser Medien bei finiten Deformationen. Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik (ZAMM), Band 79 (1999), Supplement 2, S543 – S544.
92. **W. Ehlers, H. Müllerschön:** Parameteridentifikation für granulare Materialien. Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik (ZAMM), Band 79 (1999), Supplement 2, S597 – S598.
93. **W. Ehlers, G. Eipper:** Finite elastic deformations in liquid-saturated and empty porous solids. Transport in Porous Media, Vol. 34 (1999), 179 – 191.
94. **W. Ehlers, W. Volk:** Localization phenomena in liquid-saturated and empty porous solids. Transport in Porous Media, Vol. 34 (1999), 159 – 177.
95. **W. Ehlers, P. Ellsiepen, P. Blome, D. Mahnkopf, B. Markert:** Theoretische und numerische Studien zur Lösung von Rand- und Anfangswertproblemen in der Theorie Poröser Medien. Abschlußbericht zum DFG-Forschungsvorhaben Eh 107/6-2, Bericht aus dem Institut für Mechanik (Bauwesen), Nr. 99-II-1, Universität Stuttgart 1999.
96. **D. Gross, W. Schnell, W. Ehlers, P. Wriggers:** Formeln und Aufgaben zur Technischen Mechanik 3: Kinetik, Hydrodynamik. 5., neubearbeitete und erweiterte Auflage, Springer-Verlag, Berlin 1999.
97. **W. Ehlers, H. Müllerschön, O. Klar:** On the behaviour of aluminium foams under uniaxial and multiaxial loading. In J. Banhart, M. F. Ashby und N. A. Fleck: Metal Foams and Porous Metal Structures, Proceedings of METFOAM '99, MIT Verlag, Bremen 1999, pp. 255 – 262.
98. **W. Ehlers, A. Droste:** FE simulation of metal foams based on the macroscopic approach of the Theory of Porous Media. In J. Banhart, M. F. Ashby und N. A. Fleck: Metal Foams and Porous Metal Structures, Proceedings of METFOAM '99, MIT Verlag, Bremen 1999, pp. 299 – 302.
99. **W. Ehlers, A. Droste:** A continuum model for highly porous aluminium foam. Technische Mechanik, Band 19 (1999), 341 – 350.
100. **W. Ehlers, P. Ellsiepen, M. Ammann:** Localization phenomena in saturated and empty frictional porous materials computed by time- and space-adaptive methods. In W. Wunderlich (Herausgeber): Computational Mechanics: New Trends and Applications, CD-ROM Proceedings of the 1st European Congress on Computational Mechanics, Doc. No. 143, Lehrstuhl für Statik, München 1999.
101. **W. Ehlers, P. Ellsiepen, M. Ammann:** Remeshing techniques and data transfer in the adaptive FEM. Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik (ZAMM), Band 80 (2000), Supplement 2, S507 – S508.
102. **W. Ehlers, P. Blome:** On porous soil materials saturated with a compressible pore-fluid mixture. Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik (ZAMM), Band 80 (2000), Supplement 1, S141 – S144.

103. **W. Ehlers, A. Droste:** Modelling of light weight porous metal materials. Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik (ZAMM), Band 80 (2000), Supplement 1, S145 – S148.
104. **W. Ehlers, B. Markert:** A linear viscoelastic two-phase model for soft tissues: Application to articular cartilage. Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik (ZAMM), Band 80 (2000), Supplement 1, S149 – S152.
105. **W. Ehlers, S. Diebels** (Gasteditoren): Porous Media and Micro-Macro Approaches. Granular Matter, Vol. 2 (2000), 103 – 161.
106. **W. Ehlers, B. Markert:** On the viscoelastic behaviour of fluid-saturated porous materials. Granular Matter, Vol. 2 (2000), 153 – 161.
107. **W. Ehlers, H. Müllerschön:** Parameter identification of a macroscopic granular soil model applied to dense Berlin sand. Granular Matter, Vol. 2 (2000), 105 – 112.
108. **W. Ehlers, B. Markert:** Modelling of viscoelastic polymer foams at large deformations. In A. S. Khan, H. Zhang, Y. Yuan (Herausgeber): Plastic and Viscoplastic Response of Materials and Metal Forming, Proceedings of Plasticity'00 – the Eighth International Symposium on Plasticity and Its Current Applications, Neat Press, Maryland 2000, pp. 128 – 130.
109. **W. Ehlers, P. Ellsiepen:** On the adaptive computation of shear bands in frictional geomaterials. In A.-M. Sändig, W. Schiehlen und W. L. Wendland (Herausgeber): Multifield Problems – State of the Art, Springer-Verlag, Berlin 2000, pp. 135 – 142.
110. **W. Ehlers, B. Markert:** Intrinsic viscoelasticity of porous materials. In A.-M. Sändig, W. Schiehlen und W. L. Wendland (Herausgeber): Multifield Problems – State of the Art, Springer-Verlag, Berlin 2000, pp. 143 – 150.
111. **W. Ehlers** (Herausgeber): IUTAM Symposium on Theoretical and Numerical Methods in Continuum Mechanics of Porous Materials, Kluwer, Dordrecht 2001.
112. **W. Ehlers, P. Ellsiepen, M. Ammann:** h -adaptive strategies applied to multi-phase models. In W. Ehlers (Herausgeber): IUTAM Symposium on Theoretical and Numerical Methods in Continuum Mechanics of Porous Materials, Kluwer, Dordrecht 2001, pp. 81 – 86.
113. **W. Ehlers, B. Markert:** A visco-elastic two-phase model for articular cartilage tissues. In W. Ehlers (Herausgeber): IUTAM Symposium on Theoretical and Numerical Methods in Continuum Mechanics of Porous Materials, Kluwer, Dordrecht 2001, pp. 87 – 92.
114. **W. Ehlers, P. Blome:** Modelling of soils by use of the Theory of Porous Media. In W. Ehlers (Herausgeber): IUTAM Symposium on Theoretical and Numerical Methods in Continuum Mechanics of Porous Materials, Kluwer, Dordrecht 2001, pp. 209 – 214.
115. **W. Ehlers, P. Ellsiepen:** Shear Localization in Frictional Geomaterials: Basic Modelling and Adaptive Computations. In W. Ehlers (Herausgeber): IUTAM Symposium on Theoretical and Numerical Methods in Continuum Mechanics of Porous Materials, Kluwer, Dordrecht 2001, pp. 259 – 264.

116. **P. A. Vermeer, S. Diebels, W. Ehlers, H. J. Herrmann, S. Luding, E. Ramm** (Herausgeber): Continuous and Discontinuous Modelling of Cohesive-Frictional Materials, Springer-Verlag, Wien 2001.
117. **W. Ehlers, S. Diebels, T. Michelitsch**: Microscopic modelling of granular materials. In P. A. Vermeer, S. Diebels, W. Ehlers, H. J. Herrmann, S. Luding, E. Ramm (Herausgeber): Continuous and Discontinuous Modelling of Cohesive-Frictional Materials, Springer-Verlag, Wien 2001, pp. 259 – 274.
118. **W. Ehlers, P. Ellsiepen**: Theoretical and numerical methods in environmental continuum mechanics based on the Theory of Porous Media. In B. A. Schrefler (Herausgeber): Environmental Geomechanics, CISM Courses and Lectures No. 417, Springer-Verlag, in Druck, 2001.
119. **W. Ehlers, P. Ellsiepen, M. Ammann**: Time- and space-adaptive computations of localization phenomena in saturated and micropolar frictional materials. In H.-B. Mühlhaus (Herausgeber): Bifurcation and Localization in Soils and Rock, Balkema, Rotterdam, in Druck, 2001.
120. **W. Ehlers, B. Markert**: A linear viscoelastic biphasic model for soft tissues based on the Theory of Porous Media. ASME Journal of Biomechanical Engineering, zur Veröffentlichung angenommen, 2001.
121. **W. Ehlers, P. Blome**: A multi-phase soil model including a soil-foundation interface. Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik (ZAMM), Band 81 (2001), Supplement 3, S523 – S524.
122. **W. Ehlers, B. Markert**: Modelling of open and closed cellular foams. Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik (ZAMM), Band 81 (2001), Supplement 2, S285 – S286.
123. **W. Ehlers, S. Diebels, M. Ammann**: Gemischt-hybride Finite Elemente für mikropolare Kontinua. Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik (ZAMM), Band 81 (2001), Supplement 2, S387 – S388.
124. **W. Ehlers, S. Diebels, T. Michelitsch**: Microscopic investigation of Cosserat continua. Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik (ZAMM), Band 81 (2001), Supplement 2, S335 – S336.
125. **S. Diebels, W. Ehlers, B. Markert**: Neglect of fluid extra stresses in volumetrically coupled solid-fluid problems. Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik (ZAMM), Band 81 (2001), Supplement 3, S521 – S522.
126. **W. Ehlers, P. Ellsiepen, M. Ammann**: Time- and space-adaptive methods applied to localization phenomena in empty and saturated micropolar and standard porous materials. International Journal for Numerical Methods in Engineering, in Druck, 2001.
127. **W. Ehlers, P. Blome**: Consistent multiphase models for soils. In R. Katzenbach und U. Arslan (Herausgeber): Darmstadt Geotechnics, in Druck, 2001.

128. **W. Ehlers, P. Blome:** Konsistente Mehrphasen-Stoffmodelle für Böden (deutschsprachige Version von Nr. 127). In R. Katzenbach und U. Arslan (Herausgeber): Mitteilungen des Instituts für Geotechnik, in Druck, 2001.
129. **S. Diebels, W. Ehlers, T. Michelitsch:** Particle simulations as a microscopic approach to a *Cosserat* continuum. Journal de Physique IV France, zur Veröffentlichung angenommen, 2001.
130. **W. Ehlers, M. Ammann, S. Diebels:** *h*-adaptive FE methods applied to single- and multiphase problems. International Journal for Numerical Methods in Engineering, zur Veröffentlichung eingereicht, 2001.
131. **W. Ehlers, P. Blome:** A triphasic model for unsaturated soils based on the Theory of Porous Media. Mathematical and Computer Modelling, zur Veröffentlichung angenommen, 2001.
132. **S. Diebels, W. Ehlers:** Homogenization method for granular assemblies. In W. A. Wall, K.-U. Bletzinger, K. Schweizerhof (Herausgeber): Trends in Computational Structural Mechanics, CIMNE, Barcelona 2001, pp. 79 – 88.
133. **W. Ehlers, B. Markert:** Viscoelastic polyurethane foams at finite deformations. In W. A. Wall, K.-U. Bletzinger, K. Schweizerhof (Herausgeber): Trends in Computational Structural Mechanics, CIMNE, Barcelona 2001, pp. 89 – 98.
134. **S. Diebels, W. Ehlers, T. Michelitsch:** From discontinuous to continuous modelling of granular materials. In N. Bicanic (Herausgeber): Proceedings of the Fourth International Conference on Analysis of Discontinuous Deformation (ICADD-4), Glasgow 2001, pp. 251 – 260.
135. **W. Ehlers:** Continuum and numerical simulation of porous materials in science and technology. In G. Capriz und V. N. Ghionna (Herausgeber): Mathematical Models in Soil Mechanics, Birkhauser Boston, in Druck, 2001.
136. **B. Markert, W. Ehlers:** Large strain behaviour of solid foams. Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik (ZAMM), zur Veröffentlichung eingereicht, 2001.
137. **W. Ehlers, O. Klar, B. Markert:** Gradient-based optimization of a viscoelastic *Ogden*-type model for cellular polymers. Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik (ZAMM), zur Veröffentlichung eingereicht, 2001.
138. **W. Ehlers, P. Blome:** On two-phasic flow problems in elasto-plastic porous materials. Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik (ZAMM), zur Veröffentlichung eingereicht, 2001.
139. **B. Scholz, W. Ehlers:** Sensitivitätsanalyse zur Identifikation der Materialparameter eines *Cosserat*-Kontinuums. Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik (ZAMM), zur Veröffentlichung eingereicht, 2001.
140. **W. Ehlers, B. Markert:** A macroscopic finite strain model for cellular polymers. International Journal of Plasticity, zur Veröffentlichung eingereicht, 2001.

C

Doktoranden und Habilitanden

Von Professor Ehlers betreute Doktoranden

1990	Joachim Bluhm	Universität-GH-Essen (gemeinsam mit Prof. de Boer)
1992	Jörg Plischka	Universität-GH-Essen (gemeinsam mit Prof. de Boer)
1998	Gernot Eipper	Universität Stuttgart
1999	Wolfram Volk	Universität Stuttgart
1999	Peter Ellsiepen	Universität Stuttgart
2000	Dirk Mahnkopf	Universität Stuttgart
2000	Heiner Müllerschön	Universität Stuttgart

Von Professor Ehlers betreute Habilitanden

2000	Stefan Diebels	Universität Stuttgart

Von Professor Ehlers begutachtete Promotionen

1992	Roman Bonn	Universität GH Kassel
1992	Johannes Schwertel	Universität Karlsruhe
1993	Stefan Hartmann	Universität GH Kassel
1994	Markus Matthes	TH Darmstadt
1994	Stefanie Reese	TH Darmstadt
1994	Hak Huang	TH Darmstadt
1997	Martin Emmert	Universität Stuttgart
2000	Arjan Frijns	TU Eindhoven

Von Professor Ehlers begutachtete Habilitationen

1992	Bob Svendsen	TH Darmstadt
1996	Joachim Bluhm	Universität-GH-Essen
1996	Rainer Helmig	Universität Stuttgart
1998	Tom Schanz	Universität Stuttgart
2001	Martin Schanz	TU Braunschweig

Bisher in dieser Reihe erschienen:

- II-1 G. EIPPER: Theorie und Numerik finiter elastischer Deformationen in fluidgesättigten porösen Festkörpern, Juni 1998.
- II-2 W. VOLK: Untersuchung des Lokalisierungsverhaltens mikropolarer poröser Medien mit Hilfe der Cosserat-Theorie, Mai 1999.
- II-3 P. ELLSIEPEN: Zeit- und ortsadaptive Verfahren angewandt auf Mehrphasenprobleme poröser Medien, Juli 1999.
- II-4 S. DIEBELS: Mikropolare Zweiphasenmodelle: Formulierung auf der Basis der Theorie Poröser Medien, März 2000.
- II-5 D. MAHNKOPF: Lokalisierung fluidgesättigter poröser Festkörper bei finiten elastoplastischen Deformationen, März 2000.
- II-6 H. MÜLLERSCHÖN: Spannungs-Verformungsverhalten granularer Materialien am Beispiel von Berliner Sand, August 2000.
- II-7 S. DIEBELS (HRSG.): Zur Beschreibung komplexen Materialverhaltens: Beiträge anlässlich des 50. Geburtstags von Herrn Prof. Dr.-Ing. Wolfgang Ehlers, August 2001.