



Lehrstuhl für Konstruieren in Kunst- und Verbundstoffen

Masterarbeit



Effiziente Vorhersage der Rissinitiierung
in porösen Materialien mit einem
kombinierten Energie- und
Spannungskriterium

Matthias Rettl, BSc

Mai 2020

EIDESSTATTLICHE ERKLÄRUNG

Ich erkläre an Eides statt, dass ich diese Arbeit selbständig verfasst, andere als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel nicht benutzt, und mich auch sonst keiner unerlaubten Hilfsmittel bedient habe.

Ich erkläre, dass ich die Richtlinien des Senats der Montanuniversität Leoben zu "Gute wissenschaftliche Praxis" gelesen, verstanden und befolgt habe.

Weiters erkläre ich, dass die elektronische und gedruckte Version der eingereichten wissenschaftlichen Abschlussarbeit formal und inhaltlich identisch sind.

Datum 09.05.2020

Unterschrift Verfasser/in
Matthias, Rettl

Danksagung

An der Entstehung dieser Masterarbeit waren direkt und indirekt viele Menschen beteiligt, denen ich an dieser Stelle herzlich danke. Ein besonderer Dank gilt:

- Frau Univ.-Prof. Dipl. Ing. Dr. techn. Clara Schuecker und Herrn Dipl.-Ing. Dr. mont. Martin Pletz für das interessante Thema meiner Masterarbeit.
- Herrn Dipl.-Ing. Dr. mont. Martin Pletz für die Übernahme der Betreuung dieser Arbeit und die wertvollen Anregungen, Rückmeldungen und Diskussionen.
- Frau Univ.-Prof. Dipl. Ing. Dr. techn. Clara Schuecker für die Ermöglichung der flexiblen Arbeitsbedingungen sowie der Beschäftigung am Lehrstuhl Konstruieren in Kunst- und Verbundstoffen.
- Dem Team und meinen Arbeitskollegen vom Lehrstuhl Konstruieren in Kunst- und Verbundstoffen, die für die Beantwortung von Fragen jederzeit zur Verfügung standen und ausführlich mit mir behandelten.
- Meinen Eltern und meiner Schwester, die mich bei der Entstehung dieser Arbeit besonders unterstützt haben.

Kurzfassung

Die Rissinitiierung an Poren, die aus Computertomographie-Bildern (CT-Bilder) erstellt werden, soll mit dem kombinierten Kriterium effizient vorhergesagt werden. Das kombinierte Kriterium sagt, dass ein Riss initiiert, wenn sowohl das Spannungs-Kriterium als auch das Energie-Kriterium erfüllt sind. Laut dem Spannungs-Kriterium muss die Spannung bis zur Rissinitiierungslänge größer als eine kritische Spannung sein. Laut dem Energie-Kriterium muss die Energiefreisetzungsrate bei der Rissinitiierungslänge mindestens so groß wie die kritische Energiefreisetzungsrate des Materials sein. Für die Vorhersage der Rissinitiierung wird ein Mehrskalen-Ansatz verwendet, der aus einem Bauteilmodell, einem lokalen Modell mit einer Pore und einem Rissmodell besteht. Das Bauteilmodell ermittelt den Dehnungstensor, der mit periodischen Randbedingungen als Belastung auf das lokale Modell aufgebracht wird. Das lokale Modell enthält die Pore aus einem CT-Bild. Der „Marching Cubes“-Algorithmus extrahiert die Porenoberfläche aus dem CT-Bild und mit FEM wird das lokale Modell simuliert. Die Ergebnisse der FEM-Simulation und die Krümmungen der extrahierten Porenoberfläche werden an das Rissmodell übergeben, das die größten Hauptnormalspannungen und die Energiefreisetzungsraten ermittelt. Die größten Hauptnormalspannungen und die Energiefreisetzungsraten können mit FEM-Simulationen berechnet werden, was aber zu zeitaufwändig ist, wenn jede Position auf der Porenoberfläche bewertet werden soll. Deswegen sagt stattdessen ein statistisches Modell, das auf mehr als 98000 im Vorhinein durchgeführten FEM-Simulationen basiert, die größten Hauptnormalspannungen und die Energiefreisetzungsraten vorher. Daraus berechnet das kombinierte Kriterium mit den Materialparametern einen Versagensindex. Wenn der Versagensindex kleiner als Eins ist, wird keine Rissinitiierung vorhergesagt, ansonsten initiiert unter der aufgebrachten Last laut dem Kriterium ein Riss. Der vorhergesagte Versagensindex weicht in einem Beispiel um 15% von einem mit Submodellen berechneten Versagensindex ab.

Abstract

This thesis aims to efficiently predict crack initiation from pores using the combined criterion. The pores are created out of computed tomography (CT) images. The combined criterion states that a crack initiates when both the stress criterion and the energy criterion are fulfilled. According to the stress criterion, the stress up to the crack initiation length must be greater than a critical stress. According to the energy criterion, the energy release rate at the crack initiation length must be at least as high as the critical energy release rate of the material. A multi-scale approach is used to predict crack initiation and consists of a component model, a local model with one pore, and a crack model. The component model determines the strain tensor, which is applied as a load on the local model with periodic boundary conditions. The local model contains the pore from the CT image. The „Marching Cubes“ algorithm extracts the pore surface from the CT image. The local model is simulated with FEM. The results of the FEM simulation and the curvatures of the extracted pore surface are transferred to the crack model, which determines the largest principal stresses and the energy release rates. The largest principal stresses and the energy release rates can be obtained by FEM simulations, but this is too time-consuming. So instead of FEM simulations, a statistical model based on more than 98000 FEM computations simulated in advance predicts the highest principal stresses and the energy release rates. The combined criterion predicts a failure index from the material parameters, the predicted greatest principal stresses, and the predicted energy release rates. If the failure index is less than one, no crack initiation is predicted, otherwise a crack initiates under the applied load according to the criterion. In an example, the predicted failure index deviates by 15% from a failure index computed with submodels.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	7
2	Theorie	9
2.1	Spannungs-Kriterium	9
2.2	Energie-Kriterium	11
2.3	Kombiniertes Kriterium	14
2.4	Verallgemeinerung auf 3D Probleme	18
3	Methodik	19
3.1	Lokales Modell	22
3.2	Schnittstelle vom lokalen Modell zum Rissmodell	29
3.3	Rissmodell	34
3.3.1	Risszelligeometrie	35
3.3.2	FE-Modell der Risszelle	41
3.3.3	Statistisches Modell	54
3.4	Schnittstelle vom Rissmodell zum lokalen Modell	79
4	Ergebnisse	83
4.1	Ellipsoid	83
4.2	Pore aus einem realen CT-Bild	87
5	Diskussion	89
5.1	Einschränkungen der Methoden	89
5.2	Konfiguration durch den Benutzer	90
6	Zusammenfassung	91
A	Python-Code für eine Pore aus einem realen CT-Bild	93

Kapitel 1

Einleitung

Für den Festigkeitsnachweis von Bauteilen werden häufig Vergleichsspannungen verwendet. Beispielsweise kann für spröde Materialien die Tresca-Spannung für den in Abbildung 1.1 dargestellten Zugstab berechnet werden. Wenn die Spannung an einer Stelle die Festigkeit erreicht, versagt das Bauteil laut der Hypothese.

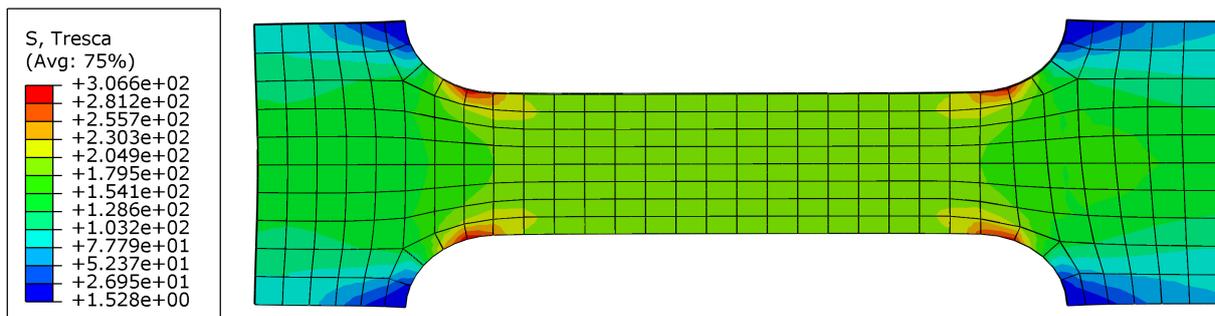


Abbildung 1.1: Zugstab

Eine Pore ist ein Hohlraum im Inneren des Materials, die durch die Herstellung oder durch relaxierende Eigenspannungen entstehen kann. Bis auf wenige Ausnahmen, wie beispielsweise Schaumstoffe, sind Poren im Bauteil nicht erwünscht. Wenn allerdings eine Pore vorhanden ist, kann der Festigkeitsnachweis mit den Vergleichsspannungen nur mehr in homogenisierter Form erbracht werden, da die Pore zu klein ist, um sie auf der Bauteilebene darstellen zu können. Eine homogenisierte Betrachtung ist für viele Fälle nicht hinreichend genau. Wenn das Material spröde ist, kann die Pore mit der linear elastischen Bruchmechanik bewertet werden. Dazu wird die Pore als Riss angenommen und es wird überprüft, ob dieser Riss wachsen kann. Die Pore als Riss anzunehmen ist aber zu konservativ.

In dieser Arbeit wird stattdessen versucht, mit dem kombinierten Kriterium [1] vorherzusagen, ob an der Pore ein Riss entsteht. Diese Rissinitiierung wird als Versagen gewertet. Die Hypothese ist, dass mit einem Mehrskalen-Ansatz die Rissinitiierung an der Pore effizient vorhergesagt werden kann.

Der Mehrskalen-Ansatz ist in Abbildung 1.2 illustriert. Der Spannungstensor wird im Bauteilmodell an der Stelle berechnet, an der sich eine Pore befindet. Das lokale Modell simuliert die Pore, wobei der Spannungstensor vom Bauteilmodell als Belastung aufgebracht wird. Um zu bewerten, ob ein Riss an der Porenoberfläche initiiert, werden Rissmodelle an

mehreren Positionen auf der Porenoberfläche ausgewertet. Mit den Ergebnissen der Rissmodelle soll die Rissinitiierung für sämtliche Positionen an der Porenoberfläche vorhergesagt werden.

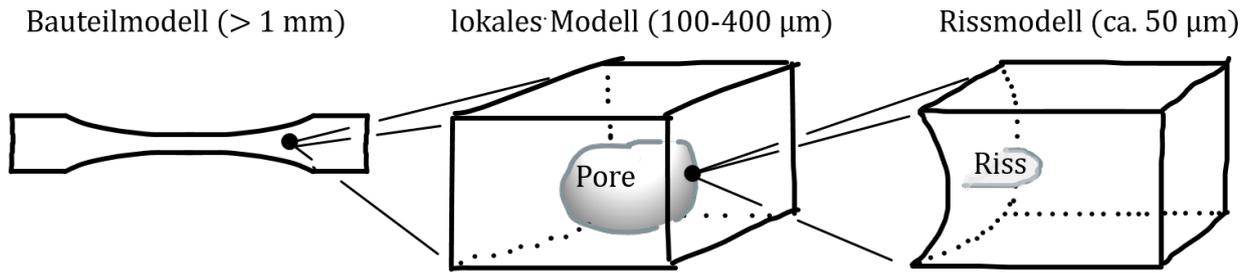


Abbildung 1.2: Mehrskalens-Ansatz

Die Porengeometrie im lokalen Modell wird aus einem Computertomographie-Bild (CT-Bild) extrahiert. Ein CT-Bild ist in Abbildung 1.3 mit der roten extrahierten Porenoberfläche dargestellt. Das CT-Bild besteht aus mehreren zweidimensionalen Graustufenbildern, die übereinandergestapelt sind. Die Porenoberfläche ist die Grenze zwischen den hellen Poren und dem dunklen Material.

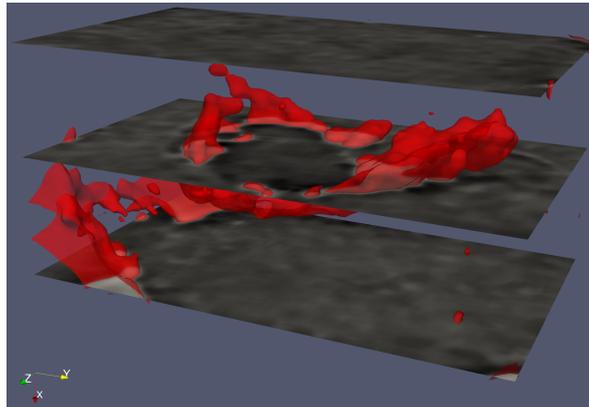


Abbildung 1.3: CT-Bild mit rot eingezeichneter Pore

Kapitel 2

Theorie

Die Bruchmechanik setzt voraus, dass bereits Risse im Material vorhanden sind und bewertet, ob sich Risse ausbreiten und wenn ja, wie schnell sie wachsen. Im Gegensatz dazu stellt diese Arbeit die Frage, ob Risse im Material an einer Porenoberfläche entstehen, also initiieren. Initiiert unter einer gewissen Belastung ein Riss, wird das als Versagen gewertet.

Die Rissinitiierung wird mit dem kombinierten Kriterium vorhergesagt. Das ist eine Kombination aus dem Spannungs-Kriterium (σ -Kriterium) und dem Energie-Kriterium (G-Kriterium). Um das kombinierte Kriterium für 3D Probleme einsetzen zu können, müssen Annahmen über den Spannungsverlauf und die Rissflächegeometrie getroffen werden.

Diese Arbeit beschränkt sich auf ein linear elastisches Materialmodell mit kleinen Deformationen und verzichtet auf die Simulation von Kontakt an den Rissflächen. Kontakt an den Rissflächen tritt auf, wenn eine Kraft den Riss zusammendrückt und somit die Rissinitiierung behindert. In dieser Arbeit wird nur die Rissinitiierung zufolge einer Mode I Belastung betrachtet. Bei einer Mode I Belastung öffnet sich der Riss und es tritt kein Kontakt an den Rissflächen auf. Eine Mode I Rissöffnung ist nicht möglich, wenn eine Kraft den Riss zusammendrückt.

2.1 Spannungs-Kriterium

Laut dem σ -Kriterium initiiert ein Riss mit der Länge a_{init} , wenn

$$\sigma|_{a \leq a_{init}} \geq \sigma_{krit} \text{ bzw. } \frac{\sigma|_{a \leq a_{init}}}{\sigma_{krit}} \geq 1 \quad (2.1)$$

erfüllt ist. Die Spannung $\sigma(a)$ als Funktion der Tiefe a muss mindestens so groß wie die kritische Spannung σ_{krit} sein. Letztere ist ein Materialparameter und kann als Festigkeit interpretiert werden, entspricht jedoch nicht der herkömmlichen Festigkeit des Materials, die im Materialdatenblatt steht. Die Festigkeit aus dem Materialdatenblatt bezieht sich auf ein homogenisiertes Material, das bereits Fehlstellen enthält. Im Gegensatz dazu wird mit der kritischen Spannung σ_{krit} die Festigkeit an einer Fehlstelle bewertet. Da diese Fehlstelle nun explizit behandelt wird, muss sie nicht mehr durch die Materialparameter homogenisiert werden. Die Spannung $\sigma(a)$ kann analytisch oder mit der Finite Elemente Methode berechnet werden.

Sind Poren in einem Material, führt die Kerbwirkung zu einer Spannungsüberhöhung. Der Einfluss der Kerbwirkung wird in Abbildung 2.1 deutlich. Proben mit verschiedenen Poren werden unter Zug belastet. Die Kraftflusslinien erinnern etwas an die Maserung von Holz. Sie sind näherungsweise die Isolinien bzw. die Stromlinien des Potentials Ψ , das mit der Stokesschen Gleichung

$$\Delta\Psi = \text{div}(\text{grad}(\Psi)) = 0 \quad (2.2)$$

berechnet werden kann. Die Ableitung des Potentials approximiert die Spannung $\sigma(a)$. Der Poisson-Effekt wird dabei vernachlässigt.

Die Spannung an der Porenoberfläche $\sigma(a = 0 \text{ mm})$ ist bei runden Poren mit $r_1/r_2 = 1$ (Abbildung 2.1a) niedriger als bei flachen Poren mit $r_1/r_2 = 5$ (Abbildung 2.1b). Damit ein Riss initiiert, reicht bei Abbildung 2.1b schon einer geringere Last p aus als bei Abbildung 2.1a.

Wenn das Verhältnis sehr groß ist $r_1 \gg r_2$ (Abbildung 2.1c), steigt die Spannung an der Oberfläche ins Unendliche $\sigma(a = 0) \rightarrow \infty$. Laut dem σ -Kriterium initiiert in diesem Fall sofort ein Riss.

Die Pore ist bei $r_1 \gg r_2$ im Endeffekt selbst schon ein Riss. Somit könnte der Spannungsverlauf am Riss mit Spannungsintensitätsfaktoren wie von Anderson [2] beschrieben berechnet werden. Das ist in dieser Arbeit jedoch nicht notwendig. Die Frage, ob Risse existieren, kann sofort mit ja beantwortet werden.

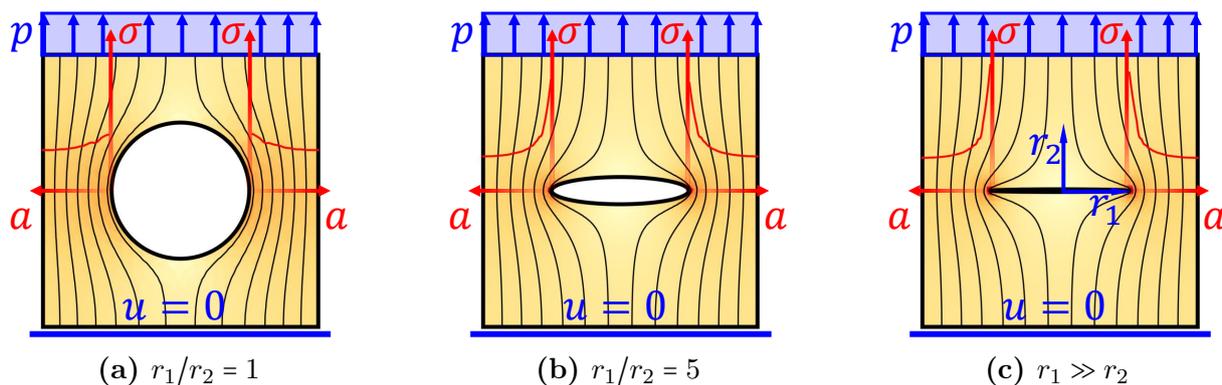


Abbildung 2.1: Kerbwirkung an verschiedenen elliptischen Poren mit den Halbachsen r_1 und r_2 . Die Spannungsüberhöhung σ ist als Funktion der Entfernung von der Porenoberfläche a eingezeichnet. Die Proben werden an der Unterseite festgehalten ($u = 0$). Auf der oberen Seite wird eine Last p aufgebracht.

In einem Bauteil gibt es an jeder Stelle nicht nur eine Spannung $\sigma(a)$, es gibt einen ganzen Spannungstensor σ_{ij} mit sechs unabhängigen Spannungen. Das σ -Kriterium kann jedoch nur einen Spannungswert betrachten. Die größte Hauptnormalspannung σ_1 wird für spröde Materialien verwendet, um aus dem Spannungstensor eine Spannung zu berechnen, auf die das σ -Kriterium angewandt wird.

Die Hauptnormalspannungen sind die Eigenwerte σ_k des Spannungstensors:

$$\begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{xy} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} & \sigma_{yz} & \sigma_{zz} \end{bmatrix} \cdot e_{jk} = \sigma_k \cdot e_{ik} \quad (2.3)$$

Es gibt drei Eigenwerte $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ mit einem jeweils zugehörigen Eigenvektor $e_k = [e_{1k}, e_{2k}, e_{3k}]$. Die Eigenwerte sind nach absteigenden Werten sortiert, sodass σ_1 der größte und σ_3 der kleinste Eigenwert sind.

Die Verwendung der größten Hauptnormalspannung σ_1 führt dazu, dass der Riss normal auf die Porenoberfläche ins Material wächst. An der Porenoberfläche herrscht ein ebener Spannungszustand. Das heißt alle Spannungskomponenten $\sigma_{nn}, \sigma_{xn}, \sigma_{yn}$, die normal auf die Porenoberfläche (n-Richtung) zeigen, müssen Null sein, um das Kräftegleichgewicht zu erfüllen. Dadurch liegt die größte Hauptnormalspannung σ_1 , sofern sie streng positiv ist, in der x-y-Tangentialebene der Porenoberfläche. Da die Rissfläche normal auf die Hauptnormalspannung σ_1 steht, wächst der Riss normal auf die Porenoberfläche ins Material hinein. Wenn die Hauptnormalspannung σ_1 Null ist, initiiert laut dem σ -Kriterium kein Riss.

Die größte Hauptnormalspannung σ_1 ist sozusagen die auf die Fläche bezogene Kraft, die die Rissflächen wie in Abbildung 2.2a auseinander zieht. Dabei steht die Hauptnormalspannung σ_1 normal auf die Rissflächen.

Die Mode II (Abbildung 2.2b) und Mode III (Abbildung 2.2c) Belastungen zeigen allerdings, dass ein Riss sich auf mehrere Arten öffnen kann und die Rissfläche dabei nicht notwendigerweise normal auf die Hauptnormalspannung σ_1 stehen muss. In technischen Anwendungen werden meistens keine kritischen Spannungswerte für Mode II und Mode III Belastungen ermittelt, weshalb diese Situationen vernachlässigt werden. In dieser Arbeit wird vorausgesetzt, dass der Riss egal unter welcher Belastung immer normal zur Hauptnormalspannung σ_1 initiiert.

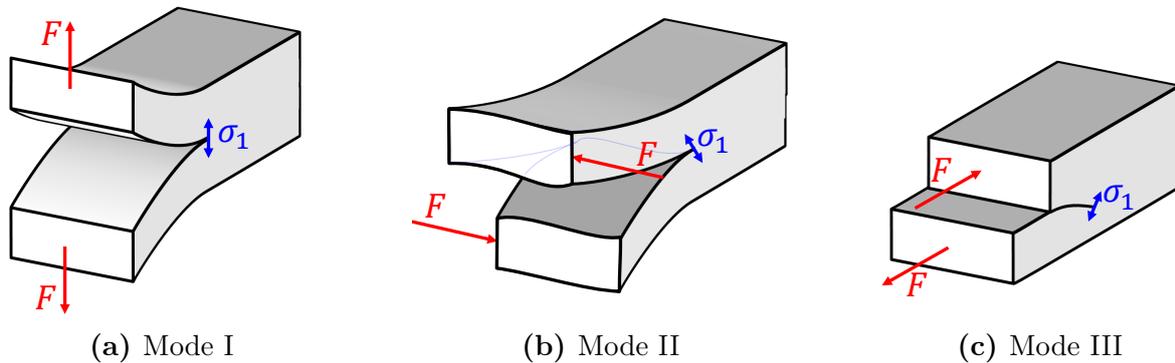


Abbildung 2.2: Rissöffnungsarten bei verschiedenen Belastungsarten

2.2 Energie-Kriterium

Analog zum σ -Kriterium initiiert beim Energie-Kriterium (G -Kriterium) ein Riss mit der Länge a_{init} , wenn

$$G(a_{init}) \geq G_{krit} \text{ bzw. } \frac{G(a_{init})}{G_{krit}} \geq 1 \quad (2.4)$$

erfüllt ist. Die Energiefreisetzungsrate G muss größer als eine kritische Energiefreisetzungsrate G_{krit} sein. Die kritische Energiefreisetzungsrate G_{krit} ist ein Materialparameter und kann als notwendige Energie zur Bildung der Rissflächen gesehen werden.

Die Energiefreisetzungsrates G ist in den Modellen aufwändiger zu berechnen als die Spannungen, weil mehrere Versuche bzw. Simulationen notwendig sind. Dazu werden, wie in Abbildung 2.3 dargestellt, in „compact-tension“-Proben (CT-Probe) verschieden lange Risse eingebracht. In Abbildung 2.3a beträgt die Risslänge $a_0 = 0$ mm. In Abbildung 2.3b wurde ein Riss mit einer Länge $a_1 > 0$ mm eingebracht.

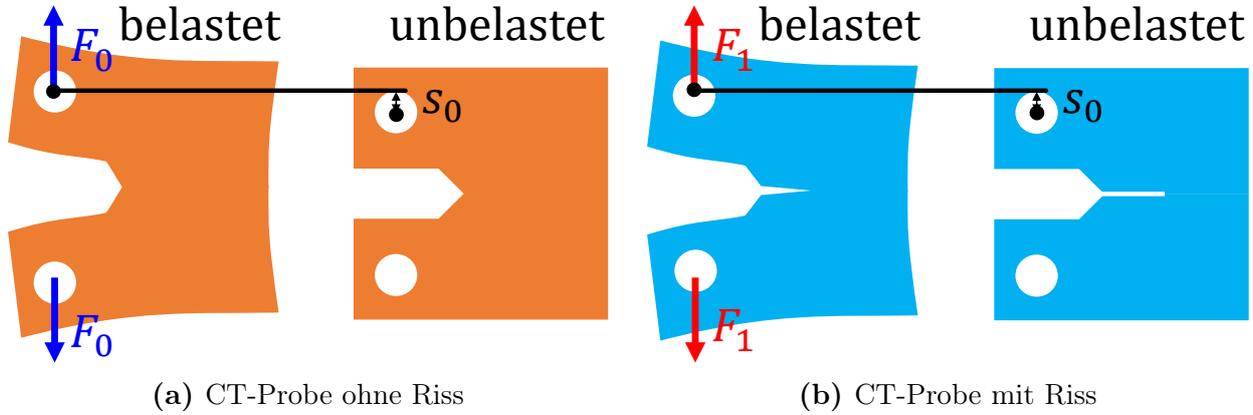


Abbildung 2.3: Bestimmung der Energiefreisetzung mit „compact-tension“-Proben (CT-Probe). Für die gleiche Verschiebung s_0 muss die Kraft F_0 bei Abbildung 2.3a größer sein als die Kraft F_1 bei Abbildung 2.3b.

Die Kraft F wird bei beiden Proben kontinuierlich erhöht. Dabei wird die Verschiebung s gemessen. Daraus ergibt sich ein Kraft-Weg-Diagramm wie in Abbildung 2.4a. Wenn die Kraft F sehr langsam aufgebracht wird, spricht man von einem quasi-statischen-Vorgang. Die Dehnungsenergie Π_{in} kann dann für jede CT-Probe mit

$$\Pi_{in} = \frac{1}{2} \int_V \sigma_{ij} \cdot d\varepsilon_{ij} = \int_{s=0}^{s=s_0} F(s) \cdot ds \quad (2.5)$$

ermittelt werden.

Anschließend wird die Energiefreisetzung wie in Abbildung 2.4b mit

$$\Delta\Pi_{in,j} = \Pi_{in,0} - \Pi_{in,j} \quad (2.6)$$

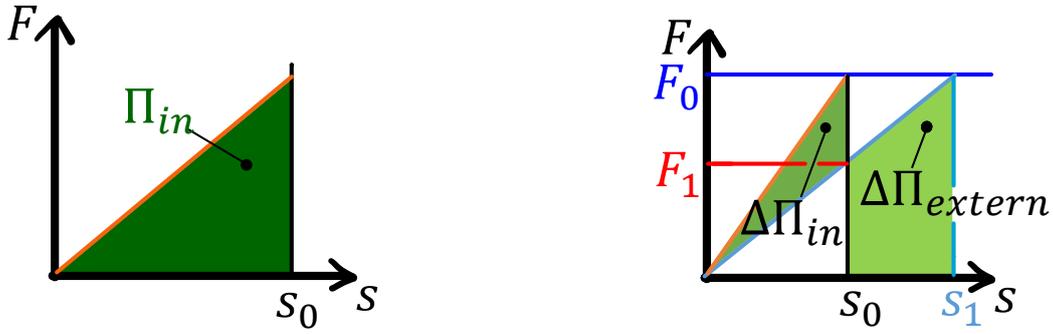
aus der Differenz der Dehnungsenergie $\Pi_{in,0}$ der Probe ohne Riss (Abbildung 2.3a) und der Dehnungsenergie $\Pi_{in,j}$ einer Probe mit Riss (Abbildung 2.3b) berechnet. Wichtig ist dabei, dass beide Proben bis zur gleichen Verschiebung s_0 belastet werden.

Werden die Proben hingegen bis zur gleichen Kraft F_0 belastet, ist die Verschiebung s_j der Pore mit Riss naturgemäß größer. In so einem weg-gesteuerten Versuch muss bei der Berechnung der Energiefreisetzung

$$\Delta\Pi_{in,j} = \Pi_{in,0} - \Pi_{in,j} - \underbrace{\int_{s=s_0}^{s=s_j} F_j(s) \cdot ds}_{\Delta\Pi_{extern}} \quad (2.7)$$

die zusätzlich eingebrachte externe Energie $\Delta\Pi_{extern}$ wieder abgezogen werden.

Anhand von Abbildung 2.4b kann die experimentelle Bestimmung der kritischen Energiefreisetzung $\Delta\Pi_{krit}$ verbildlicht werden. Eine Probe ohne Riss wird bis zur kritischen Kraft $F_0 = F_{krit}$ belastet. Die orange Kraft-Weg-Kurve wird dabei aufgezeichnet. Bei der kritischen



(a) Die Dehnungsenergie Π_{in} ist die Fläche unter der Kraft-Weg-Kurve.

(b) Weg-gesteuerte Belastung bis s_1 und kraft-gesteuerte Belastung bis F_0 zweier Proben

Abbildung 2.4: Berechnung der Dehnungsenergie Π_{in} und der Energiefreisetzung $\Delta\Pi_{in}$ aus dem Kraft-Weg-Diagramm

Kraft initiiert ein Riss mit der Länge a_{init} und wenn die Verschiebung s_0 konstant gehalten wird, fällt die Kraft von F_0 auf F_1 ab. Beim Entlasten kann die hellblaue Kraft-Weg-Kurve von s_0 bis zu $s = 0$ mm aufgenommen werden. Die kritischen Energiefreisetzung $\Delta\Pi_{krit}$ entspricht nun der eingezeichneten Energiefreisetzung $\Delta\Pi_{in}$.

Da die Verschiebung s_0 während der Rissinitiierung konstant gehalten wird, bleibt auch die Energie in der Probe erhalten. Die reversible Dehnungsenergie Π_{in} verringert sich jedoch auf das Niveau der Probe mit Riss. Die Frage ist also wohin die restliche Energie $\Delta\Pi_{in} = \Delta\Pi_{krit}$ verschwunden ist. Antwort: Die Rissbildung muss die Bindungskräfte der Moleküle überwinden und muss dafür Arbeit verrichten.

Die kritische Energiefreisetzung $\Delta\Pi_{krit}$ wird experimentell durch eine zerstörende Prüfung ermittelt. Mit der Fläche des initiierten Risses a_{init} kann die kritische Energiefreisetzungsrates

$$G_{krit} = \frac{\Delta\Pi_{krit}}{a_{init}} = \frac{\Delta\Pi_{in}(a_{init})}{A(a_{init})} \quad (2.8)$$

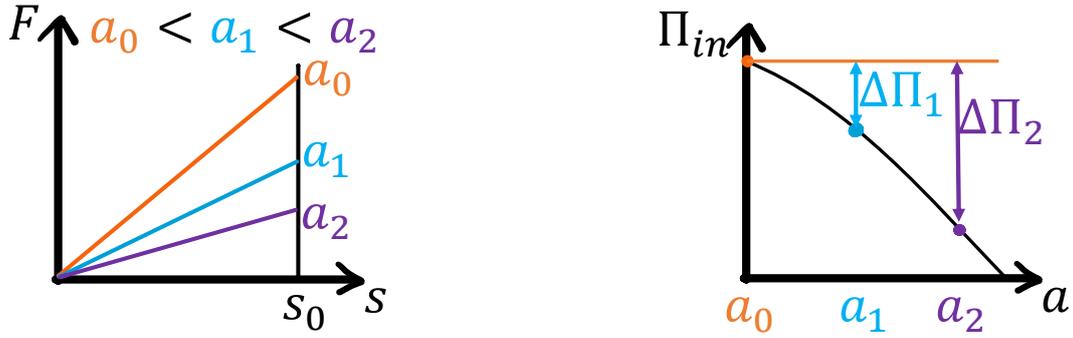
berechnet werden. Nun kann für jeden denkbaren Belastungszustand mit verschiedenen Kerbwirkungen die Energiefreisetzungsrates $G(a)$ mit der Finite-Elemente-Methode simuliert werden. Durch Einsetzen der simulierten Energiefreisetzungsrates $G(a)$ und der experimentell bestimmten kritischen Energiefreisetzungsrates G_{krit} in die Gleichung 2.4 kann die Rissinitiierung vorhergesagt werden.

Um die Energiefreisetzungsrates $G(a)$ zu bestimmen, werden zuerst, wie aus Abbildung 2.5a ersichtlich, für mehrere Proben mit unterschiedlichen Risslängen a_i die Kraft-Weg-Kurven berechnet. Je länger der eingebrachte Riss, desto weniger steif ist das Bauteil und desto kleiner ist auch die Fläche unter der Kurve $\Pi_{in,j}$. Abbildung 2.5b zeigt, wie die Dehnungsenergie $\Pi_{in,j}$ abnimmt und die Energiefreisetzung $\Delta\Pi_{in,j}$ größer wird. Die Messpunkte werden interpoliert, um eine stetige Funktion $\Delta\Pi_{in}(a)$ zu erhalten.

Die Energiefreisetzungsrates

$$G(a) = \frac{\Delta\Pi_{in}(a)}{A(a)} \quad (2.9)$$

bezieht die Energiefreisetzung $\Delta\Pi_{in}(a)$ auf die Rissfläche $A(a)$ bei einer Risslänge a . Wenn die Risslänge gegen Null geht $a \rightarrow 0$ mm, streben sowohl die Rissfläche $A(a) \rightarrow 0$ mm² als auch die Energiefreisetzung $\Delta\Pi_{in}(a) \rightarrow 0$ mJ gegen Null. Damit ergibt sich eine nicht



(a) Je größer die Risslänge a , desto weniger Kraft F wird für die Verschiebung s_0 benötigt und desto kleiner ist die Fläche unter der Kraft-Weg-Kurve.

(b) Je größer die Risslänge a , desto geringer ist die Dehnungsenergie Π_{in} bei konstanter Verschiebung. Entzweit der Riss die ganze Pore, ist $\Pi_{in} = 0$ mJ.

Abbildung 2.5: Interpolation der Energiefreisetzung $\Delta\Pi$: Bei einer Risslänge von $a_0 = 0$ mm beginnend werden für weitere Proben mit längeren Rissen a_1, a_2, \dots Kraft-Weg-Diagramme aufgezeichnet und daraus die Dehnungsenergie Π_{in} berechnet. Die Differenz zur ersten Dehnungsenergie ist die Energiefreisetzung $\Delta\Pi$.

definierte Division $0/0$. In dieser Arbeit wird angenommen, dass die Energiefreisetzungsrates

$$\lim_{a \rightarrow 0 \text{ mm}} G(a) = 0 \frac{\text{mJ}}{\text{mm}^2} \quad (2.10)$$

gegen Null strebt. Das ist mathematisch zwar nicht korrekt, aber ein pragmatischer Ansatz, da in den Simulationen beobachtet wurde, dass die Energiefreisetzungsrates gegen Null strebt. Außerdem vereinfacht diese Annahme die numerische Auswertung des kombinierten Kriteriums.

2.3 Kombiniertes Kriterium

Sowohl das σ - als auch das G -Kriterium gehen von einer definierten Last (z.B.: Verschiebung $s = 1$ mm) aus und sagen vorher, ob bei dieser Last ein Riss initiiert. Wie in Abbildung 2.6a gezeigt, ist das σ -Kriterium bei einer Tiefe von $a = 0$ mm beginnend über einen größeren Bereich $a_{init,\sigma}$ hinweg erfüllt. Dann sinkt die Spannung unter den kritischen Wert und es kann kein Riss mehr initiieren. Im Gegensatz dazu ist das G -Kriterium erst ab einer gewissen Rissinitiierungslänge $a_{init,G}$ erfüllt. Dafür ist das G -Kriterium solange erfüllt, bis die Energiefreisetzungsrates wieder unter die kritische Energiefreisetzungsrates sinkt. Möglicherweise ist das erst dann der Fall, wenn der Riss die ganze Probe teilt.

Es lässt sich also festhalten, dass das σ -Kriterium nur bis zu einer gewissen Tiefe erfüllt ist. Diese Tiefe ist eine obere Grenze. Ein längerer Riss kann zufolge des σ -Kriterium nicht initiieren. Das G -Kriterium hingegen ist erst ab einer gewissen Tiefe erfüllt. Ein kürzerer Riss kann zufolge des G -Kriterium nicht initiieren. Laut Leguillon [1] müssen beide Kriterien gleichzeitig erfüllt sein. Der Riss könnte also im eingezeichneten Bereich $a_{init,\sigma \wedge G}$ entstehen.

Was passiert wenn die Probe nicht mit der Verschiebung s , sondern mit einer etwas kleineren Verschiebung $\lambda \cdot s$ beaufschlagt wird, wobei der Lastfaktor λ größer Null ist? Die Spannung

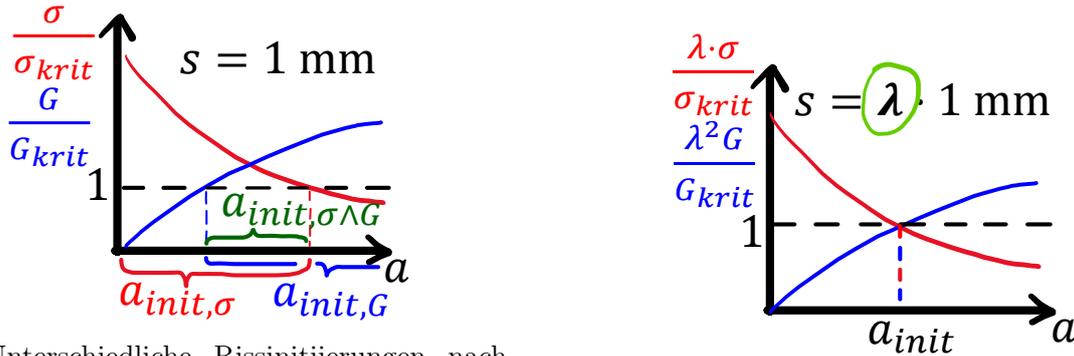
$$\sigma_{skaliert} = \lambda \cdot \sigma \quad (2.11)$$

ist direkt proportional zur Verschiebung und wird sich verringern. Die Energiefreisetzungsrate

$$G_{skaliert} = \lambda^2 \cdot G \quad (2.12)$$

skaliert quadratisch. In Abbildung 2.6a würden die Kurven etwas abflachen und der Bereich $a_{init, \sigma \wedge G}$, in dem ein Riss initiieren kann, würde kleiner werden.

Die aufgebrauchte Verschiebung $\lambda \cdot s$ kann solange verkleinert werden, bis das σ - und das G -Kriterium nur noch bei einer Rissinitiiierungslänge a_{init} gleichzeitig erfüllt sind. Bei dieser Verschiebung $\lambda \cdot s$ sagt das kombinierte Kriterium Rissinitiiierung vorher. Abbildung 2.6b zeigt diese Situation.



(a) Unterschiedliche Rissinitiiierungen nach dem σ - und G -Kriterium bei der Verschiebung s

(b) Rissinitiiierung nach dem Kombinierten Kriterium bei einer skalierten Verschiebung

Abbildung 2.6: Das Kombinierte Kriterium berechnet einen Lastfaktor λ , bei dem die Rissinitiiierungslänge a_{init} nach dem σ - und G -Kriterium gleich sind. Ein Riss initiiert für die Last s , wenn $0 < \lambda \leq 1$.

Formal ausgedrückt ist das kombinierte Kriterium bei linear elastischen Materialverhalten ein Gleichungssystem

$$\begin{cases} \lambda \cdot \sigma_{min}(a_{init}) \geq \sigma_{krit} \\ \lambda^2 \cdot G(a_{init}) \geq G_{krit} \end{cases} \quad \text{mit } \sigma_{min}(a) = \min\{\sigma(a') \mid 0 \leq a' \leq a\}, \quad (2.13)$$

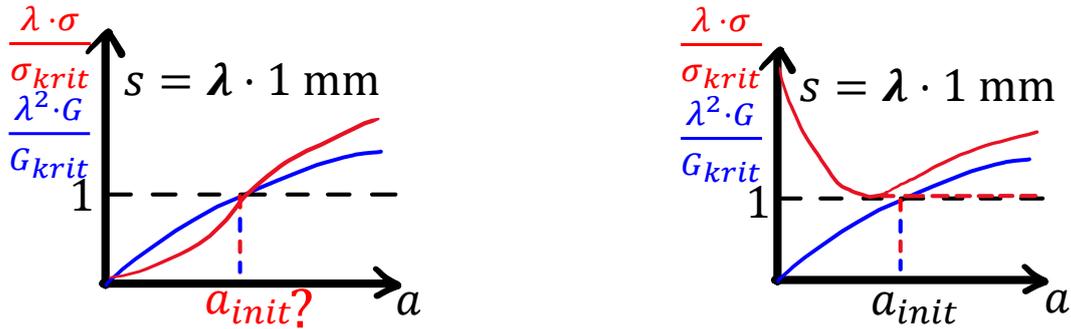
das nach der Rissinitiiierungslänge a_{init} und dem Lastfaktor λ aufgelöst wird. Anhand des Lastfaktors können drei Fälle unterschieden werden:

1. $\lambda \leq 0$: Keine Rissinitiiierung.
2. $0 < \lambda \leq 1$: Unter der aufgebrauchten Last initiiert ein Riss mit der Länge a_{init} .
3. $\lambda > 1$: Keine Rissinitiiierung. Wird die Last mit λ skaliert, also erhöht, entsteht ein Riss mit der Länge a_{init} .

Die Rissinitiiierungslänge a_{init} ist also unabhängig von der Höhe der Belastung. Das wird augenscheinlich, wenn man sich vorstellt, wie die Belastung in quasi-statischen-Versuchen aufgebracht wird. Um eine Verschiebung von $s = 10$ mm zu realisieren, muss die Verschiebung kontinuierlich von 0 mm auf 10 mm erhöht werden. Wenn bei einer Verschiebung von $s = 5$ mm schon ein Riss initiiert, ist die endgültige Verschiebung von $s = 10$ mm für die Rissinitiiierung irrelevant.

Allerdings sind auch beim kombinierten Kriterium einige Spezialfälle zu beachten, wenn $\sigma(a)$ nicht monoton fallend ist. In Abbildung 2.7a steigt die Spannung beginnend bei 0 MPa an. Das hätte zur Folge, dass ab der eingezeichneten Rissinitiierungslänge a_{init} das σ - und G -Kriterium gleichzeitig erfüllt sind und somit ein Riss initiieren könnte. In dieser Arbeit wird deswegen das zusätzliche Kriterium eingeführt, dass nur der bisher niedrigste Spannungswert $\sigma_{min}(a)$ relevant ist. Dieser beträgt 0 MPa und ist kleiner als die kritische Spannung. Es initiiert also kein Riss.

Auch in Abbildung 2.7b ist die Situation ähnlich. Es wird wiederum nur der niedrigste Spannungswert herangezogen. Im Gegensatz zu Abbildung 2.7a kann ein Riss ab der eingezeichneten Rissinitiierungslänge a_{init} initiieren. Die Rissinitiierungslänge ist also nicht eindeutig, was aber nicht weiter tragisch ist, da das Hauptinteresse dem Lastfaktor λ gilt, welcher eindeutig ist.



(a) Wenn $\sigma(a = 0 \text{ mm}) \leq 0$, kann kein Riss initiieren.

(b) Nur die bisher niedrigste Spannung σ_{min} ist relevant.

Abbildung 2.7: Spezielle Fälle beim kombinierten Kriterium

Eine andere Methode, um das kombinierte Kriterium auszuwerten, berechnet wie in Abbildung 2.8a zwei Lastfaktoren. Wenn der Spannungslastfaktor für das σ -Kriterium

$$\lambda_{\sigma} = \frac{\sigma_{krit}}{\sigma_{min}(a)} \quad (2.14)$$

gleich groß wie der Energielastfaktor für das G -Kriterium

$$\lambda_G = \sqrt{\frac{G_{krit}}{G(a)}} \quad (2.15)$$

ist, initiiert ein Riss.

Da die Energiefreisetzungsrate $G(0 \text{ mm})$ an der Porenoberfläche Null gesetzt wird, ist der Energielastfaktor λ_G an der Porenoberfläche unendlich groß. Die Energiefreisetzungsrate $G(a)$ ist das Verhältnis von der Energiefreisetzungsrate $\Delta\Pi(a)$ zu der Rissfläche $A(a)$. Sowohl die Energiefreisetzungsrate $\Delta\Pi(a)$ als auch die Rissfläche $A(a)$ steigen monoton und sind bei jeder Tiefe a nicht negativ (≥ 0). Das Verhältnis, also die Energiefreisetzungsrate $G(a)$, ist ebenfalls nicht negativ, kann jedoch steigen und fallen. Das heißt, dass auch der Energielastfaktor λ_G über die Tiefe a sowohl fallen als auch steigen kann. Er kann jedoch nie negativ werden.

Der für das kombinierte Kriterium relevante Spannungsverlauf $\sigma_{min}(a)$ kann im Gegensatz zur Energiefreisetzungsrate $G(a)$ nicht steigen, sondern nur fallen oder konstant bleiben. Es sind allerdings auch negative Werte möglich. Nach einem negativen Spannungswert kann

egal unter welcher Belastung kein Riss mehr initiieren. Folglich ist der Spannungslastfaktor λ_σ monoton steigend, aber nicht zwingend positiv. Auch hier gilt, dass nach einem negativen Wert kein Riss mehr initiieren kann.

Anhand des Spannungslastfaktors λ_σ und des Energielastfaktors λ_G kann besser diskutiert werden, wie sich der kritische Lastfaktor λ verändert. In Abbildung 2.8b wird die Energiefreisetzungsrates konstant gehalten und die Spannung von σ_1 auf σ_2 erhöht. Der Spannungslastfaktor λ_σ verringert sich um den mit Gleichung 2.14 berechenbaren Faktor. Der kritische Lastfaktor sinkt ebenfalls, aber nicht notwendigerweise um denselben Faktor. Es reicht also eine geringere Last aus, um eine Rissinitiierung zu bewirken.

Das ist eine rein theoretische Betrachtung, da es praktisch schwer möglich ist die Spannung und Energiefreisetzungsrates unabhängig voneinander zu verändern. Wenn beispielsweise ein Material mit einem höherem E-Modul gewählt wird, steigt bei der gleichen Verschiebung sowohl die Spannung als auch die Energiefreisetzungsrates proportional an. Praktischer ist es, wenn die kritische Spannung σ_{krit} verringert wird. Dann tritt derselbe Effekt auf wie bei einer Erhöhung der Spannung $\sigma(a)$: Eine halbierte kritische Spannung σ_{krit} oder eine doppelte Spannung $\sigma(a)$ führen zu einem halbierten Spannungslastfaktor λ_σ .

In Abbildung 2.8c verringert sich ebenfalls der kritische Lastfaktor von λ_1 auf λ_2 , wenn die Energiefreisetzungsrates $G(a)$ erhöht wird oder die kritische Energiefreisetzungsrates G_{krit} verringert wird und dabei die Spannung konstant gehalten wird. Für einen halb so großen Energielastfaktor λ_G muss die Energiefreisetzungsrates vervierfacht werden oder die kritische Energiefreisetzungsrates geviertelt werden. Der kritische Lastfaktor λ halbiert sich jedoch nicht notwendigerweise. Es kann nur gesagt werden, dass der kritische Lastfaktor λ zumindest nicht steigt. Ob er sich halbiert, viertelt oder gar nicht verändert, hängt auch vom Spannungsverlauf ab.

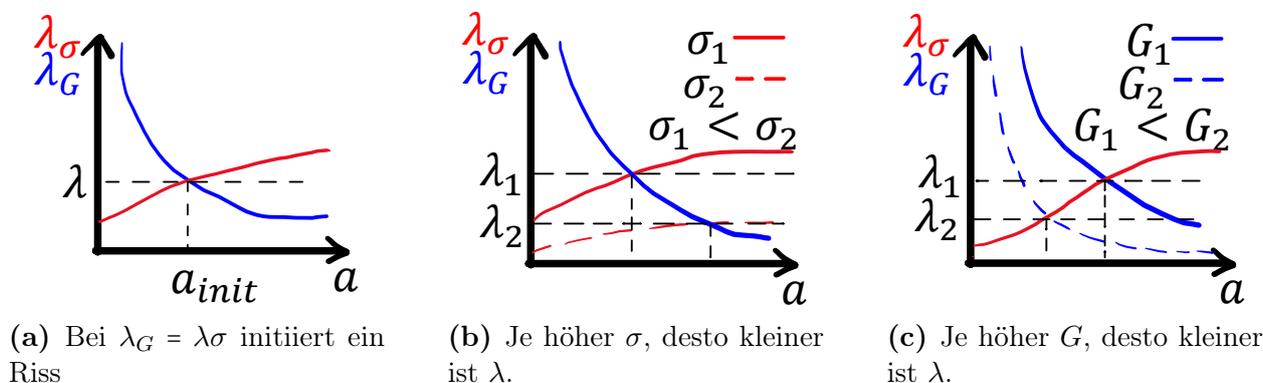


Abbildung 2.8: Einfluss der Spannung σ und Energiefreisetzungsrates G auf den kritischen Lastfaktor λ . Größere Spannungen σ , größere Energiefreisetzungsrates G sowie geringere kritische Spannungen σ_{krit} und geringere kritische Energiefreisetzungsrates G_{krit} haben einen geringeren kritischen Lastfaktor λ zur Folge. Führen also schon bei geringeren Lasten zu Versagen.

2.4 Verallgemeinerung auf 3D Probleme

Die bisher behandelten Kriterien sind für 2D Probleme konzipiert. Im 3D Fall muss zusätzlich eine Annahme über die Form der Rissfläche gemacht werden. Leguillon [3] verwendet dazu einen sehr ausgereiften halb-analytischen Ansatz.

In dieser Arbeit wird ein einfacherer Ansatz gewählt. Dazu werden, wie in Abbildung 2.9 dargestellt, verschiedene Rissformen verwendet. Für jede Rissform wird die Energiefreisetzungsrate $G(a)$ ermittelt. Dazu wird jede Rissform mit verschiedenen Risslängen a skaliert und ausgewertet. Anschließend wird die kritischste Rissform ausgewählt. Das ist jene mit der höchsten Energiefreisetzungsrate $G(a)$, denn dadurch ist der kritische Lastfaktor λ am kleinsten.

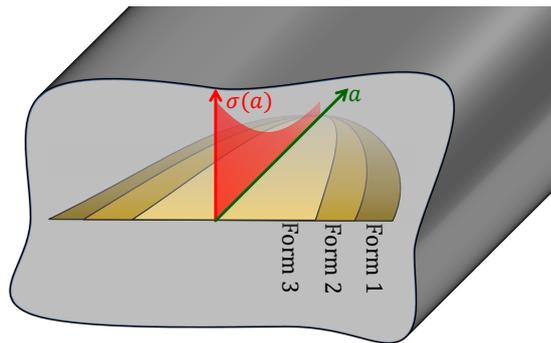


Abbildung 2.9: Verallgemeinerung des Kombinierten Kriteriums auf 3D Probleme

Laut dem Spannungskriterium initiiert ein Riss maximal soweit, bis die Spannung unter die kritische Spannung sinkt. In dieser Arbeit wird die Spannung jedoch nicht an jedem Punkt der Rissfläche ausgewertet, sondern, wie in Abbildung 2.9 dargestellt, nur in der Mitte des Risses. Die Rissform wird ausschließlich durch die Energiefreisetzungsrate $G(a)$ bestimmt. Wenn das Spannungskriterium an irgendeiner Stelle auf der vorhergesagten Rissform \mathcal{A} nicht erfüllt ist, dann ist die Rissform \mathcal{A} eigentlich nicht möglich, wird in dieser Arbeit aber dennoch als Ergebnis ausgegeben.

Das führt jedoch nur dazu, dass der kritische Lastfaktor λ unterschätzt wird und schon bei geringerer Last Versagen vorhergesagt wird. Würde nämlich die Rissform \mathcal{A} mit der größten Energiefreisetzungsrate $G(a)$ verworfen, müsste eine andere Rissform \mathcal{B} mit niedrigerer Energiefreisetzungsrate $G(a)$ gewählt werden, was unweigerlich zu einem höheren Lastfaktor λ und zu einer weniger konservativen Auslegung führen würde.

Idealerweise wird die Spannung an der Position ausgewertet, wo sie am geringsten ist, damit der Lastfaktor λ möglichst wenig unterschätzt wird. Die Rissmitte bietet sich dafür an, weil die Rissfront in der Mitte am weitesten von der Porenoberfläche entfernt ist. Eine mögliche Kerbwirkung hat dort am wenigsten Einfluss und die Spannung ist somit geringer.

Dass die Spannung nur in der Rissmitte ausgewertet wird, ist also nicht tragisch. Ein Problem ist hingegen, wenn die tatsächliche Rissform von den simulierten Rissformen abweicht und eine größere Energiefreisetzungsrate $G(a)$ hat. Im Beispiel von Leguillon [3] entstehen an den Ecken einer Platte Risse mit einer hyperbolischen Form. In dieser Arbeit werden hingegen nur elliptische Risse berücksichtigt.

Kapitel 3

Methodik

Abbildung 3.1 stellt die Vorgehensweise des entwickelten Programms dar. Das entwickelte Programm wird „Boris“ genannt. „Boris“ ist in Anaconda Python 3.7 [4] geschrieben. Die FE-Netze werden mit der offenen Software zur Netzerstellung Gmsh [5] generiert. Die FE-Simulationen werden mit Abaqus [6] durchgeführt.

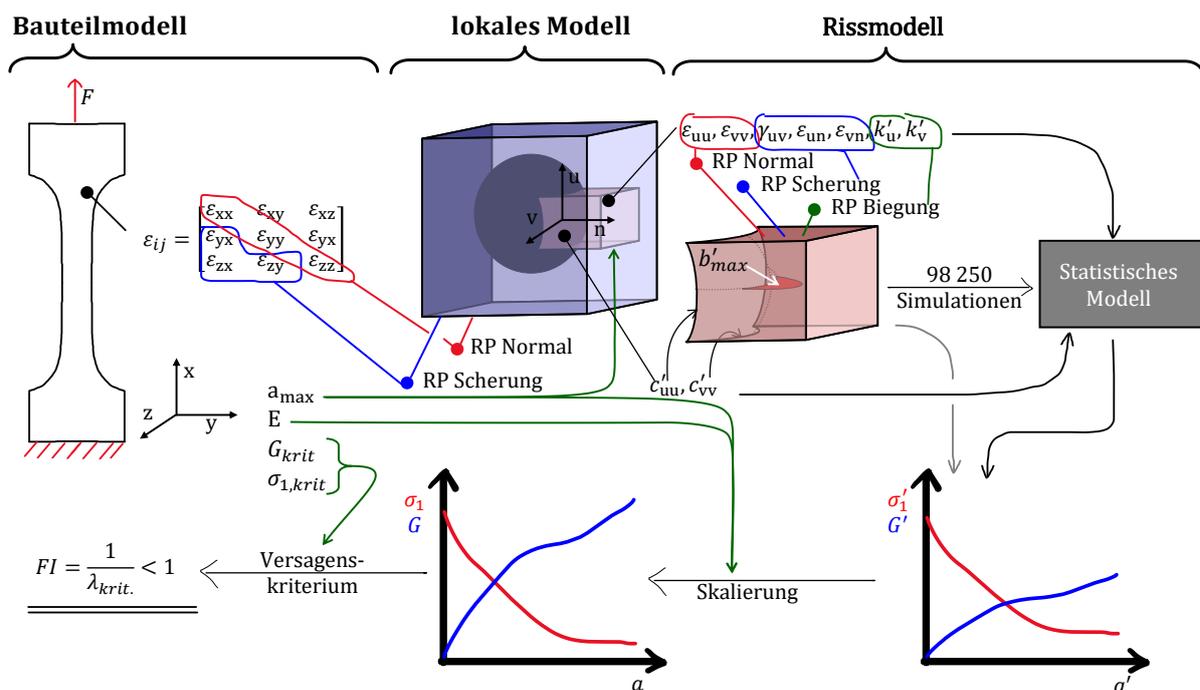


Abbildung 3.1: Vorgehensweise bei der Berechnung des Versagensindex, auch Failure Index (FI) genannt. Am Bauteil wird an einer bestimmten Position der Dehnungstensor bestimmt. Dieser wird für die Simulation des lokalen Modells als Randbedingung verwendet. An der Porenoberfläche im lokalen Modell werden die Dehnungen und Krümmungen der Porenoberfläche berechnet und über dimensionslose Kennzahlen an das Rissmodell übergeben. Die Ergebnisse des Rissmodells können durch FEM-Simulationen oder ein statistisches Modell, welches auf den Ergebnissen von 98250 FEM-Simulationen basiert, ermittelt werden. Die Ergebnisse werden auf das lokale Modell zurück skaliert. Das Versagenskriterium gibt den kritischen Lastfaktor λ_{krit} an, aus dem sich der Versagensindex FI ergibt.

Eine Pore ist typischerweise viel kleiner als 1 mm. Das Bauteil hingegen ist viel größer als 1 mm. Häufig sind sogar die FE-Elemente eines Bauteilmodelles größer als die Pore. Kerbwirkungen, die an der Porenoberfläche auftreten, können somit nicht abgebildet werden. Andererseits kann das FE-Netz nicht beliebig fein gemacht werden, da der Rechenaufwand und die notwendige Speicherkapazität im Verhältnis zur Element-Kantenlänge mit mehr als der dritten Potenz steigen. Ein zehnmal feineres Netz würde mindestens zu tausendmal mehr Rechenaufwand und notwendiger Speicherkapazität führen. Deshalb werden stattdessen ein Bauteilmodell und ein lokales Modell mit entkoppelten Längenskalen separat voneinander simuliert. Im lokalen Modell kann die Pore ausreichend fein vernetzt werden, damit Kerbwirkungen abgebildet werden können.

Die Belastungen werden an einer bestimmten Stelle im Bauteilmodell aus dem Dehnungstensor ε_{ij} ausgelesen und mittels sogenannter Referenzpunkte (RP) für Normal- und Scher-Belastungen als Randbedingungen auf das lokale Modell aufgebracht. Dafür werden sogenannte „periodische Randbedingungen“ [7] verwendet. Eine Voraussetzung ist, dass die Pore keinen Einfluss auf das globale Dehnungsfeld hat. Die Voraussetzung ist erfüllt, wenn die Pore im Vergleich zum Bauteil sehr klein ist.

„Boris“ simuliert das Bauteilmodell nicht selbst, sondern nimmt den Dehnungstensor ε_{ij} an einer Stelle des Bauteils als Eingabe. Somit ist es egal, ob der Dehnungstensor aus analytischen Überlegungen oder aus einer FEM-Simulation stammt. Neben dem Dehnungstensor benötigt das Programm noch vier weitere Eingabe-Parameter:

- a_{max} : Maximale Risslänge
- E : E-Modul des verwendeten Materials
- G_{krit} : Kritische Energiefreisetzungsrage
- $\sigma_{1,krit}$: Kritische größte Hauptnormalspannung.

Die Querkontraktionszahl wird auf einen typischen Wert für Kunststoffe von $\nu = 0.35$ festgelegt. „Boris“ könnte auch auf eine variable Querkontraktionszahl verallgemeinert werden, wenn andere Materialien verwendet werden sollen.

„Boris“ ist natürlich nur relevant, wenn eine Pore im Bauteil ist und die Geometrie der Pore bekannt ist. Idealerweise liegt vom realen Bauteil ein Computertomographie-Bild (CT-Bild) vor. In diesem CT-Bild ist eine Pore als heller Fleck erkennbar. Aus dem CT-Bild wird die Porenoberfläche für das lokale Modell extrahiert.

Als nächstes werden für alle Punkte auf der Porenoberfläche die Krümmungen c_{uu} und c_{vv} berechnet und ein u-v-n Koordinatensystem definiert. Dazu wird an der Porenoberfläche der Krümmungstensor bestimmt. Die Eigenwerte des Krümmungstensors sind die gesuchten Hauptkrümmungen c_{uu} und c_{vv} . Die Eigenvektoren des Krümmungstensors sind der u- und der v-Vektor. Der n-Vektor steht normal auf die Porenoberfläche in das Material hinein. Das u-v-n Koordinatensystem wird auch Hauptkrümmungssystem genannt.

Die Geometrie einer Pore ist sehr komplex und ein exaktes FE-Netz kann häufig nur manuell erzeugt werden. Ein Voxel-Netz hingegen approximiert die Geometrie der Pore durch ein strukturiertes Hexaeder-Gitter und ist sehr einfach zu erzeugen. Hexaeder, die innerhalb

der Pore liegen, haben einen E-Modul E_{Pore} , während der viel größere E-Modul des Materials E Hexaedern zugewiesen wird, die im Material liegen.

Auf der Porenoberfläche im lokalen Modell werden Zellen definiert und am u-v-n Hauptkrümmungssystem ausgerichtet. Eine solche Zelle ist in Abbildung 3.1 im lokalen Modell rosa eingezeichnet. Die Zelle repräsentiert das Rissmodell, befindet sich aber noch im Einheitensystem des lokalen Modelles. Mit dem Voxel-Netz und den Referenzpunktverschiebungen, die sich aus dem Bauteilmodell ergeben, kann mit FEM das Verschiebungsfeld im lokalen Modell simuliert werden. Das simulierte Verschiebungsfeld auf den seitlichen Flächen der rosa Zelle wird durch Lastparameter approximiert. Die Lastparameter sind die Dehnungen ε_{uu} , ε_{vv} , die Scherungen γ_{uv} , ε_{un} , ε_{vn} und die Biegungen k_u , k_v .

Mit dimensionslosen Kennzahlen werden die Lastparameter ε_{uu} , ε_{vv} , γ_{uv} , ε_{un} , ε_{vn} , k_u , k_v und die Geometrieparameter c_{uu} , c_{vv} vom lokalen Modell in das Rissmodell übertragen. Die Parameter werden dabei auf die maximale Risslänge a_{max} bezogen, um dimensionslose Kennzahlen zu bilden. Beispielsweise ist die dimensionslose Krümmung $c_{uu}^* = c_{uu} \cdot a_{max}$ das Produkt der Krümmung im lokalen Modell c_{uu} mit der Dimension $1/\text{Länge}$ und der maximalen Risslänge a_{max} mit der Dimension Länge. Dimensionslose Kennzahlen wie c_{uu}^* werden mit einem Stern gekennzeichnet. Die Dehnungen ε_{uu} , ε_{vv} und Scherungen γ_{uv} , ε_{un} , ε_{vn} sind bereits dimensionslos und müssen nicht umgerechnet werden.

Wenn zwei Risszellen dieselben dimensionslosen Kennzahlen haben, sind die beiden Risszellen „ähnlich“. „Ähnlich“ bedeutet also, dass die dimensionslosen Parameter ε_{uu} , ε_{vv} , γ_{uv} , ε_{un} , ε_{vn} , k_u^* , k_v^* , c_{uu}^* und c_{vv}^* sowie die dimensionslosen Zellenabmessungen gleich sind. Die Ergebnisse einer Risszelle können dann auf die andere Risszelle übertragen werden. Nun werden also mit den bekannten dimensionslosen Kennzahlen Risszellen im Rissmodell erstellt, die ähnlich zur originalen Risszelle sind. Die maximale Risslänge im Rissmodell a'_{max} wird durch die Parameterstudie in Kapitel 3.3.1 festgelegt. Somit können die Parameter für das Rissmodell aus den dimensionslosen Kennzahlen berechnet werden. Beispielsweise ist die Krümmung im Rissmodell $c'_{uu} = c_{uu}^*/a'_{max}$. Parameter, die sich auf das Rissmodell beziehen, werden mit einem Apostroph gekennzeichnet (c'_{uu} , c'_{vv} , k'_u , k'_v , ...).

Die neun Parameter c'_{uu} , c'_{vv} , ε_{uu} , ε_{vv} , γ_{uv} , ε_{un} , ε_{vn} , k'_u , k'_v werden an jeder Position der Pore bestimmt. Für jede Position wird ein neues Rissmodell erstellt und für jedes Rissmodell müssen mehrere Simulationen durchgeführt werden, um die Hauptnormalspannung $\sigma'_1(a')$ und die Energiefreisetzungsrates $G'(a')$ über die Tiefe a' zu ermitteln. Zusätzlich sollten noch verschiedene Seitenlängenverhältnisse des elliptischen Risses simuliert werden. Das Seitenlängenverhältnis ist das Verhältnis der maximale Rissbreite b_{max} und der maximalen Risslänge a_{max} .

Die Anzahl der notwendigen Simulationen vervielfacht sich mit der Anzahl der unterschiedlichen Seitenlängenverhältnisse. Das ist sehr zeitaufwändig. Anstatt jedes Mal ein neues Rissmodell zu erstellen, werden 16375 Rissmodelle mit unterschiedlichen Parametern (c'_{uu} , c'_{vv} , ε_{uu} , ε_{vv} , γ_{uv} , ε_{un} , ε_{vn} , k'_u , k'_v , b'_{max}) vorab in 98250 Simulationen berechnet. Mit diesen Daten wird ein statistisches Modell aufgebaut, welches die Hauptnormalspannung $\sigma'_1(a')$ und die Energiefreisetzungsrates $G'(a')$ viel schneller als FEM-Simulationen vorhersagen kann.

Die Hauptnormalspannung $\sigma'_1(a')$ und die Energiefreisetzungsrates $G'(a')$ werden anschließend wieder mit dimensionslosen Kennzahlen in das lokale Modell übertragen. Die dimensionslose Hauptnormalspannung $\sigma_1^* = \sigma'_1/E'$ dividiert die Hauptnormalspannung σ'_1 durch den E-Modul E' , der dem Material im Rissmodell zugewiesen wird. Die dimensionslosen

Kennzahlen werden wieder mit einem Stern gekennzeichnet. Die dimensionslose Energiefreisetzungsrates $G^* = G' / (E' \cdot a'_{max})$ bezieht die Energiefreisetzungsrates auf den E-Modul im Rissmodell E' und die maximale Risslänge im Rissmodell a'_{max} .

Die Ergebnisse können nun wieder auf eine ähnliche Zelle im lokalen Modell übertragen werden. Mit dem E-Modul des Materials im lokalen Modell E wird die Hauptnormalspannung $\sigma_1 = \sigma_1^* \cdot E$ aus der dimensionslosen Hauptnormalspannung berechnet. Die Energiefreisetzungsrates $G = G^* \cdot E \cdot a_{max}$ skaliert die dimensionslosen Energiefreisetzungsrates G^* mit dem E-Modul im lokalen Modell E und mit der maximalen Risslänge im lokalen Modell a_{max} . Somit ist es möglich, verschiedene Materialien mit unterschiedlichen E-Moduln zu überprüfen. Die Querkontraktion des Materials wird nicht skaliert und sollte ungefähr $\nu = 0.35$ betragen, da sie so angenommen wurde. Die Methode kann auf eine variable Querkontraktion erweitert werden, indem Rissmodelle mit unterschiedlichen Querkontraktionszahlen simuliert werden. Darauf wird in dieser Arbeit jedoch verzichtet.

Die skalierte Hauptnormalspannung $\sigma_1(a)$ und die skalierte Energiefreisetzungsrates $G(a)$ für jede Position auf der Porenoberfläche werden an das Initiierungskriterium übergeben. Dazu wird das kombinierte Kriterium verwendet, das zusätzlich zwei Materialparameter benötigt: Die kritische Hauptnormalspannung σ_{krit} und die kritische Energiefreisetzungsrates G_{krit} des Materials. Daraus wird der kritische Lastfaktor λ_{krit} für jede Position auf der Porenoberfläche berechnet. Mit dem niedrigsten nicht negativen kritischen Lastfaktor kann der Versagensindex

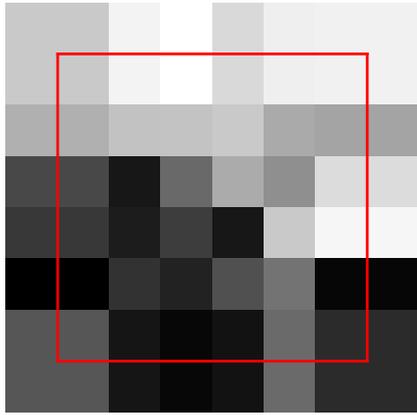
$$FI = \frac{1}{\lambda_{krit}}, \quad (3.1)$$

auch „Failure Index“ genannt, für das Bauteil ermittelt werden. Ein Versagensindex kleiner Eins bedeutet, dass keine Rissinitiierung vorhergesagt wird, wohingegen ein Versagensindex größer oder gleich Eins auf eine Rissinitiierung hindeutet.

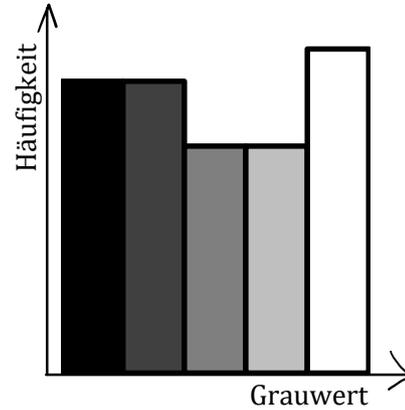
3.1 Lokales Modell

Das lokale Modell wird aus einem 3D-CT-Bild aufgebaut. Die Vorgehensweise, wie aus dem CT-Bild die Porenoberfläche erzeugt wird, ist anhand eines 2D-Bildes, wie es in Abbildung 3.2a dargestellt ist, leichter zu erklären. Das aufgenommene Bild ist rot umrahmt. Im Bild ist die Grenze zwischen der hellen Pore und dem dunklen Material durch das Bildrauschen schwer zu erkennen. Der Rand des Bildes wird über den Rahmen hinaus erweitert, um die nachfolgenden Filter-Operationen zu erleichtern. Abbildung 3.2b zeigt das Histogramm des verrauschten Bildes. Aus dem Histogramm ist kein Schwellwert erkennbar, der die helle Pore vom dunklen Material trennen würde.

Auf das verrauschte Bild in Abbildung 3.2a wird ein Median- und ein Gauß-Filter angewandt. Das führt zum gefilterten Bild in Abbildung 3.3a. Die Filter werden auf jeden Pixel im rot umrahmten Bild angewandt. Dabei berechnen sie die neuen Pixel-Werte aus der Umgebung um die Pixel herum. Beispielsweise berechnet der Medianfilter für den linken oberen blau umrahmten Pixel den Medianwert von der violett umrahmten Umgebung. Deshalb wird das Bild über den Rand hinaus erweitert, da so die Umgebung immer gleich groß ist und die Filter-Operation einfacher ist. Der Medianfilter eliminiert Ausreißer im Bild.



(a) Verrauschtes 2D-Bild innerhalb des roten Rahmens mit erweitertem Rand

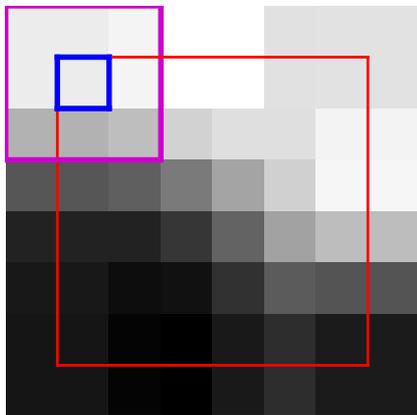


(b) Histogramm des verrauschten 2D-Bildes. Ein Schwellwert ist nicht erkennbar.

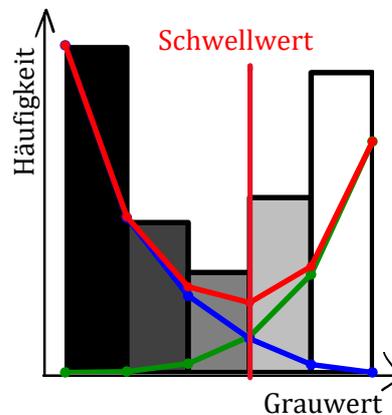
Abbildung 3.2: Verrauschtes 2D-Bild

Der Gauß-Filter ist ein Faltungs-Filter. Das heißt, ein neuer Pixelwert ist die Summe der gewichteten Pixel der violett umrahmten Umgebung. Beim Gauß-Filter ergeben sich die Gewichtungsfaktoren aus der Gauß-Verteilung. Der Gauß-Filter glättet die Kanten der Porenoberfläche. Dabei werden die Krümmungen der Porenoberfläche etwas verfälscht, weshalb ein minimaler Gauß-Filter mit der kleinstmöglichen Umgebung von $3 \times 3 \times 3$ Pixel verwendet wird.

Sowohl der Median- als auch der Gauß-Filter reduzieren das Rauschen im Bild. Ohne die verrauschten Pixel kann anhand des Histogramms in Abbildung 3.3b der Schwellwert t mit Otsu's Methode [8] berechnet werden.



(a) Das mit Median- und Gauß-Filter bearbeitete 2D-Bild aus Abbildung 3.2a zeigt einen glatten hell-dunkel-Übergang.



(b) Histogramm des bearbeiteten 2D-Bildes. Die gewichtete Varianz der dunklen Klasse $w_0(t) \cdot \text{Var}_0(t)$ und die gewichtete Varianz der hellen Klasse $w_1(t) \cdot \text{Var}_1(t)$ ergeben zusammen die Intra-Klassen-Varianz $\text{Var}_{intra}(t)$, aus deren Extremwert sich der Schwellwert ergibt.

Abbildung 3.3: Berechnung des Schwellwertes im 2D-Bild. Die Pore ist heller als der Schwellwert. Das Material ist dichter und somit dunkler.

Otsu's Methode ermittelt den Schwellwert anhand eines Histogramms (Abbildung 3.3b) mit n Balken. Der i -te Balken reicht vom Grauwerte g_i bis zum Grauwert g_{i+1} . Die Häufigkeit h_i gibt an wie viele Pixel im Grauwert-Bereich $[g_i, g_{i+1}]$ liegen und dem i -ten Balken zuge-

ordnet werden. Der Schwellwert t kann auf $n + 1$ Positionen zwischen den n Balken gesetzt werden.

Der Schwellwert teilt das Histogramm in zwei Klassen. Die dunkle Klasse „0“ steht für das Material, die helle Klasse „1“ für die Pore. Die Varianzen beider Klassen

$$\text{Var}_0(t) = \sum_{i=1}^t \frac{g_i^2}{t} - \left(\sum_{i=1}^t \frac{g_i}{t} \right)^2 \quad \text{bzw.} \quad \text{Var}_1(t) = \sum_{i=t}^{n+1} \frac{g_i^2}{n+2-t} - \left(\sum_{i=t}^{n+1} \frac{g_i}{n+2-t} \right)^2 \quad (3.2)$$

hängen vom gewählten Schwellwert t ab. Die Häufigkeit der beiden Klassen

$$w_0(t) = \sum_{i=1}^{t-1} h_i \quad \text{bzw.} \quad w_1(t) = \sum_{i=t}^n h_i \quad (3.3)$$

summieren die Häufigkeiten der Balken auf, die einer Klasse zugeordnet werden. Die Intra-Klassen-Varianz

$$\text{Var}_{intra}(t) = w_0(t) \cdot \text{Var}_0(t) + w_1(t) \cdot \text{Var}_1(t) \quad (3.4)$$

ist in Abbildung 3.3b rot eingezeichnet. Der Schwellwert t liegt am Minimum der Intra-Klassen-Varianz.

Mit dem berechneten Schwellwert wird Abbildung 3.2a binärisiert. Daraus ergibt sich das Bild in Abbildung 3.4a. Aus dem binärisierten Bild wird ein Voxel-Netz erzeugt. Das in Abbildung 3.4a blau eingezeichnete Voxel-Netz ist gröber als das binärisierte Bild. Das Voxel-Netz ist nie feiner als die binärisierten Pixel, da damit kein zusätzlicher Gewinn verbunden wäre. Die Kerbwirkung kann höchstens so gut abgebildet werden, wie sie im binärisierten Bild dargestellt ist. Meist ist das binärisierte Bild jedoch noch zu fein, sodass die Simulation eines Voxel-Netzes mit dieser Feinheit sehr viel Rechenaufwand erfordern würde. Deshalb wird das Voxel-Netz normalerweise gröber gewählt als das binärisierte Bild.

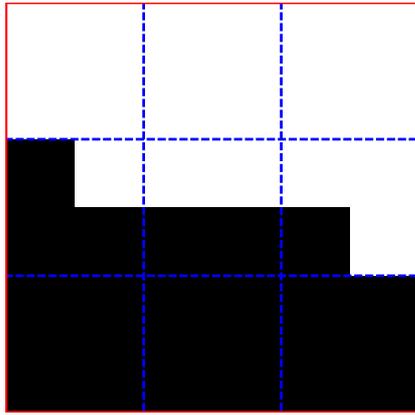
Voxel-Elemente, die komplett innerhalb der Pore liegen, haben einen kleinen E-Modul E_{Pore} (weiß), wohingegen Voxel-Elemente, die komplett innerhalb des Materials liegen, den E-Modul des Material E (schwarz) haben. Abbildung 3.4b zeigt, dass der E-Modul von Voxel-Elementen, die zum Teil sowohl im Material als auch in der Pore liegen, gemittelt wird. Der gemittelte E-Modul wird mit der „Rule of mixtures“ berechnet. Dabei wird der E-Modul durch die Flächenanteile der Voxel gewichtet.

Wie aus Tabelle 3.1 ersichtlich ist der E-Modul der Pore E_{Pore} 1/100 des E-Moduls des Materials E . Der E-Modul in der Pore kann nicht auf Null gesetzt werden, da sonst das FE-Problem nicht mehr lösbar wäre. Die Wahl des E-Moduls des Materials E beeinflusst das Verschiebungsfeld nicht, da als Randbedingungen nur Verschiebungen aufgebracht werden. Die gemittelten E-Moduln werden in 100 Bereiche unterteilt.

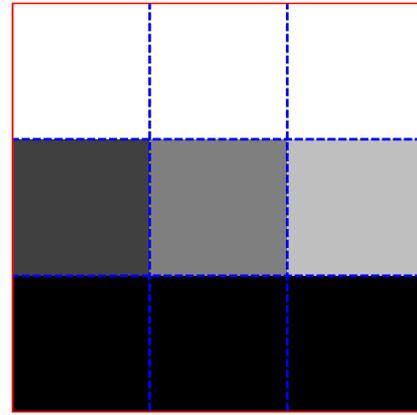
Tabelle 3.1: Parameter für das lokale Modell

E-Modul-Verhältnis Pore zu Material	$E_{\text{Pore}}/E = 0.01$
E-Modul Unterteilungen	100

Warum ist die Binärisierung notwendig? Der E-Modul könnte auch ohne Binärisierung anhand des gefilterten Bildes in Abbildung 3.3a gemittelt werden. Dabei würde der E-Modul allerdings sowohl im Material als auch in der Pore erheblich schwanken, weshalb zuerst die Binärisierung vorgenommen wird, um für jedes Pixel zu entscheiden, ob es zur Pore oder zum Material gehört. Das ist eine robustere Methode, bei der der E-Modul nur an der



(a) Binärisiertes Bild



(b) Farblich gekennzeichnete E-Modul

Abbildung 3.4: Aus dem mit dem Otsu-Schwelwert-Verfahren binärisierten Bild wird das blau eingezeichnete Voxel-Netz mit verschiedenen E-Moduln erzeugt.

Grenzfläche zwischen Material und Pore schwankt. Im Material und in der Pore treten keine Schwankungen auf.

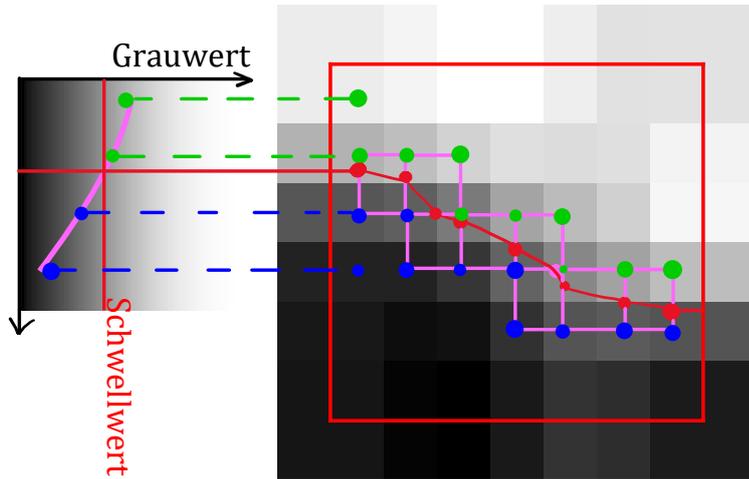
Das Voxel-Netz wird mit FEM simuliert, um das Verschiebungsfeld zu berechnen. Aus dem Voxel-Netz kann jedoch nicht die Krümmung der Porenoberfläche extrahiert werden. Dazu wird der „Marching Cubes“-Algorithmus [9] auf das gefilterte Voxelbild angewandt. Das 2D-Pendant zum „Marching Cubes“-Algorithmus ist der „Marching Squares“-Algorithmus, der auf das gefilterte Bild in Abbildung 3.3a angewandt wird. Anhand von Abbildung 3.5a wird erläutert, wie der „Marching Squares“-Algorithmus funktioniert. Das Ziel ist es, die rot eingezeichnete Linie zu finden, die den hellen Bereich vom dunklen Bereich trennt und die Porenoberfläche darstellt.

Der „Marching Squares“-Algorithmus benötigt zwei Schritte. Im ersten Schritt werden die Positionen der Fixpunkte (rote Punkte) ermittelt. Im zweiten Schritt werden die Fixpunkte, wie in der Lookup-Tabelle definiert, verbunden.

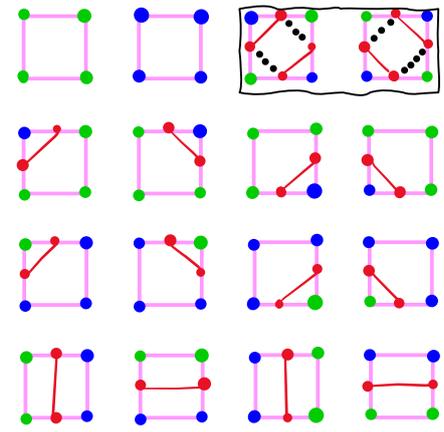
Erster Schritt: Zuerst wird für zwei benachbarte Pixel überprüft, ob ein Pixel hell und das andere Pixel dunkel ist. Die Pixel sind durch eine violette Kante verbunden. Ist ein Pixel hell und das andere Pixel dunkel, teilt die Porenoberfläche die beiden Pixel und der Schnittpunkt des Schwellwertes-Grauwertes g_t mit der violetten Kante muss gefunden werden. Die Schnittpunktberechnung ist in Abbildung 3.5a links verbildlicht. Um eine glattere Oberfläche zu erhalten, wird die violette Kante erweitert und je ein zusätzliches Pixel auf beiden Seiten hinzugefügt. Eine quadratische Funktion (Abbildung 3.5a links, violette Kurve) approximiert die Grauwerte dieser vier Pixel. Dabei muss die violette Funktion genau durch die mittleren beiden Pixel gehen, wohingegen die äußeren beiden Pixel nur möglichst gut angenähert werden. Der Schnittpunkt der Funktion mit dem Grauwert des Schwellwertes g_t teilt die violette Kante im Bild und ist ein Fixpunkt für die Porenoberfläche.

Im zweiten Schritt werden je vier Pixel zu einem violetten Quadrat zusammengefasst. Die hellen Pixel sind grün und die dunklen Pixel blau dargestellt. Jedes Quadrat wird anhand dieser grün-blau-Kodierung in der Lookup-Tabelle aus Abbildung 3.5b nachgeschlagen.

Im vorherigen ersten Schritt werden auf den violetten Kanten des Quadrates bereits die Positionen der Fixpunkte für die Porenoberfläche (rote Punkte) bestimmt. Die Lookup-



(a) Mit „Marching Squares“ wird die Grenze (rot) zwischen der hellen Pore und dem dunklen Material gefunden. Die roten Schnittpunkte zwischen dem Schwellwert und jeder Kante (violett) werden verbunden.



(b) Lookup-Tabelle für den „Marching Squares“-Algorithmus: Für jedes mögliche Rechteck (Square) ist vorgegeben, wie die roten Schnittpunkte verbunden werden.

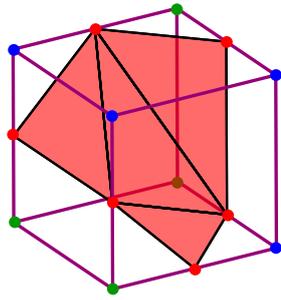
Abbildung 3.5: Der „Marching Squares“-Algorithmus erzeugt eine Linie im 2D-Bild entlang des berechneten Schwellwert-Grauwertes g_t . Für jede violette Kante wird die Position des Schnittpunktes (roter Punkt) mit dem Schwellwert-Grauwert g_t berechnet. Diese Schnittpunkte werden, wie in der Lookup-Tabelle angegeben, verbunden (rote Linien). Die Lookup-Tabelle gibt nur an, welche Punkte verbunden werden. Sie sagt nichts darüber aus, wo auf der Kante sich die Schnittpunkte befinden.

Tabelle definiert, wie diese Fixpunkte verbunden werden. Beispielsweise gibt es bei den zwei schwarz umrahmten Einträgen in der Lookup-Tabelle je zwei Möglichkeiten die Fixpunkte zu verbinden. Die schwarz gepunkteten Linien verbinden die Fixpunkte ebenso wie die roten Linien. Die Lookup-Tabelle legt fest, dass die Fixpunkte durch die roten Linien verbunden werden. Die Lookup-Tabelle sagt aber nichts darüber aus, wo die Fixpunkte auf der Kante liegen. Ein Fixpunkt kann in der Mitte einer violetten Kante liegen, ebenso wie er ganz nah beim grünen oder beim blauen Punkt liegen kann. Wo der Fixpunkt genau liegt, wurde im ersten Schritt durch die Schnittpunktberechnung mit dem Otsu-Schwellwert ermittelt. Durch das Verbinden der Fixpunkte ergibt sich die Porenoberfläche.

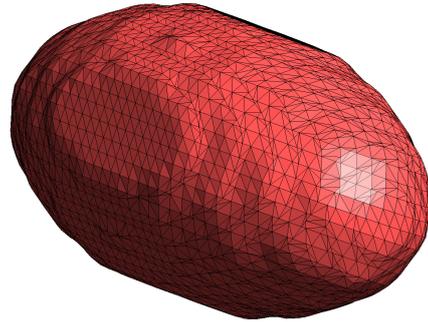
Im 3D-Fall werden anstatt von Quadraten Hexaeder in der Lookup-Tabelle nachgeschlagen. Anstelle der Linien verbinden im 3D-Fall Dreiecke die berechneten Schnittpunkte. Abbildung 3.6a zeigt einen von 256 Einträgen aus der 3D-Lookup-Tabelle. Eine mit dem „Marching Cubes“ erstellte Porenoberfläche ist in Abbildung 3.6b dargestellt.

In Abbildung 3.7 ist ein Voxel-Netz dargestellt, in dem sich eine elliptische Pore befindet. Die elliptische Pore im Voxel-Netz ist stark verpixelt und hat einen sehr geringen E-Modul zugewiesen. Der „Marching Cubes“-Algorithmus erzeugt die elliptische rote Pore mit der glatten Oberfläche. Die Ergebnisse können nun schon kombiniert werden. Beispielsweise kann das Verschiebungsfeld der verpixelten Pore auf die glatte Pore interpoliert werden. Die Frage ist nur noch, welche Belastungen auf das Voxel-Netz aufgebracht werden.

Dazu wird am Bauteilmodell an einer bestimmten Stelle der Dehnungstensor ε_{ij} ausgewertet. Dieser Dehnungstensor wird über Referenzpunkte für Normal- und Scherbelastungen als Randbedingung auf das Voxel-Netz des lokalen Modells aufgebracht. Die beiden Refe-



(a) Eine tabellierte Zelle vom „Marching Cubes“-Algorithmus definiert wie die Schnittpunkte durch Dreiecke verbunden werden.



(b) Mit „Marching Cubes“ aus einem 3D-Bild erzeugte Oberfläche einer Pore.

Abbildung 3.6: Analog zum „Marching Squares“-Algorithmus für 2D-Bilder kann der „Marching Cubes“-Algorithmus für 3D-Bilder verwendet werden.

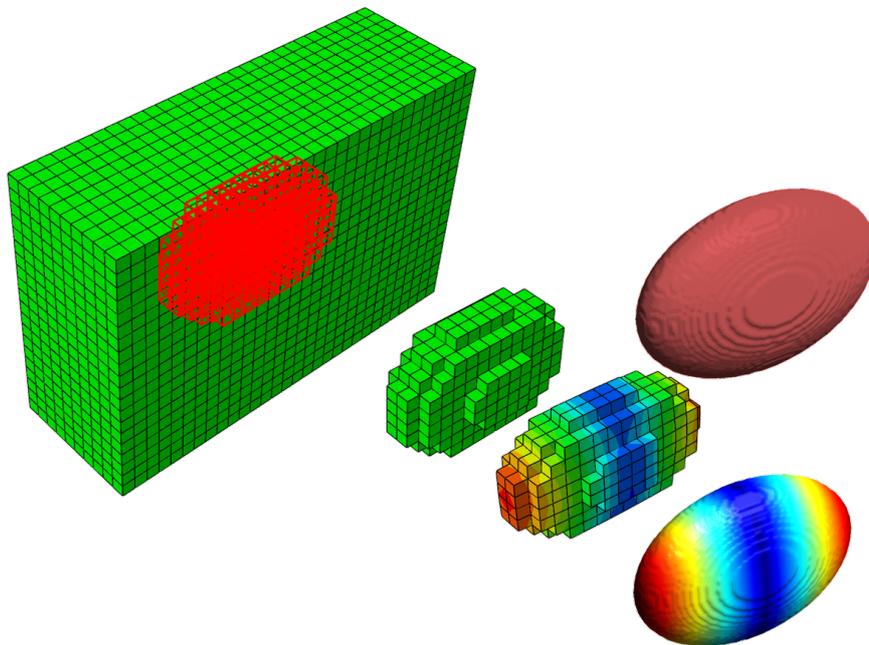


Abbildung 3.7: Mit dem Voxelnetz wird die Verformung der Pore berechnet. Die Pore hat im Voxelnetz eine geringere Steifigkeit. Mit dem Marching Cubes Algorithmus wird die Oberfläche der Pore erstellt. Die verpixelte Verformung vom Voxelnetz kann auf die glatte Porenoberfläche projiziert werden.

renzpunkte mit je drei Verschiebungsfreiheitsgraden ermöglichen sechs linear unabhängige Belastungen, die in Abbildung 3.8 dargestellt sind. Alle Dehnungstensoren können durch eine Linearkombination dieser sechs Belastungen beschrieben werden. Das Voxelnetz ist mit periodischen Randbedingungen an die Referenzpunktverschiebungen gekoppelt. Periodische Randbedingungen werden später im Kapitel 3.3.2 genauer erklärt und werden mit dem „Micromechanics plugin“ [10] in Abaqus erzeugt.

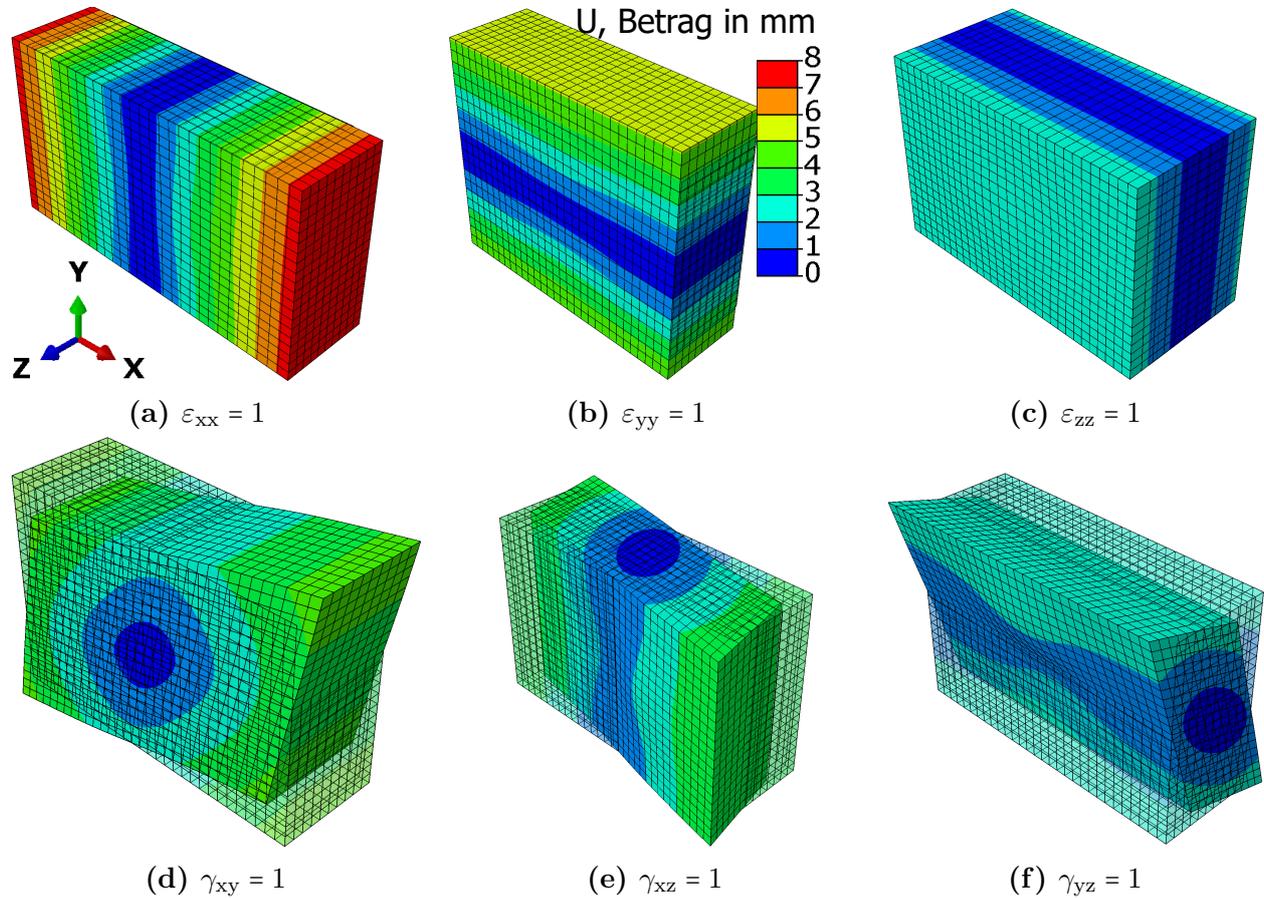


Abbildung 3.8: Elementare Verformungen mit farblich dargestelltem Betrag der Verschiebungen im lokalen Modell.

Die Deformationen in den Abbildungen 3.8a, 3.8b, 3.8c in der ersten Zeile werden durch den Referenzpunkt für Normalbelastungen beschrieben, wohingegen der Referenzpunkt für Scherbelastungen die Deformationen in den Abbildungen 3.8d, 3.8e, 3.8f in der zweiten Zeile definiert.

Bei einer linearen FEM-Simulation kann die Simulationsdauer mit „linear perturbation“ deutlich verringert werden. Dabei werden alle sechs linear unabhängigen Belastungen gleichzeitig simuliert. Das dauert nicht viel länger als eine einzige Simulation, weil Eigenschaften von linearen Gleichungssystemen ausgenutzt werden können. Alle anderen Belastungen ergeben sich durch eine schnelle Linearkombination dieser sechs Simulationen.

Bei einer FEM-Simulation spielt auch der Element-Typ eine wichtige Rolle. Abbildung 3.9 zeigt die Dehnung ε_{xx} in einem Voxelnetz mit einer kugelförmigen Pore für unterschiedliche Element-Typen. 20-Knoten Hexaeder mit reduzierter Integration C3D20R (links) beschreiben die Dehnung am besten und werden als Referenz verwendet. 8-Knoten Hexaeder mit reduzierter Integration C3D8R (mitte) und 8-Knoten Hexaeder mit voller Integration C3D8 (rechts) zeigen einen ähnlichen Dehnungsverlauf wie C3D20R Elemente. An den Grenzen

zwischen der Pore und dem Material ist der Unterschied zwischen 8-Knoten und 20-Knoten Elementen sichtbar. 8-Knoten Elemente interpolieren die Dehnungen mit einer linearen Funktion, wohingegen die 20-Knoten-Elemente höher gradige Funktionen verwenden.

C3D8R Elemente sind weniger steif als das Pendant mit voller Integration C3D8 und approximieren die Verschiebung dadurch etwas besser. C3D8R Elemente zeigen wegen der reduzierten Integration bei großen Sprüngen des E-Moduls häufig „Hourglassing“. Die Ergebnisse sind dann unbrauchbar. Obwohl „Hourglassing“ in diesem Beispiel nicht auftritt, werden vorsichtshalber dennoch C3D8 Elemente verwendet. Der Vorteil von 8-Knoten Hexaedern gegenüber 20-Knoten Hexaedern ist, dass mit gleich vielen Freiheitsgraden das Voxelnetz feiner sein kann und dadurch die Porengeometrie besser approximiert wird.

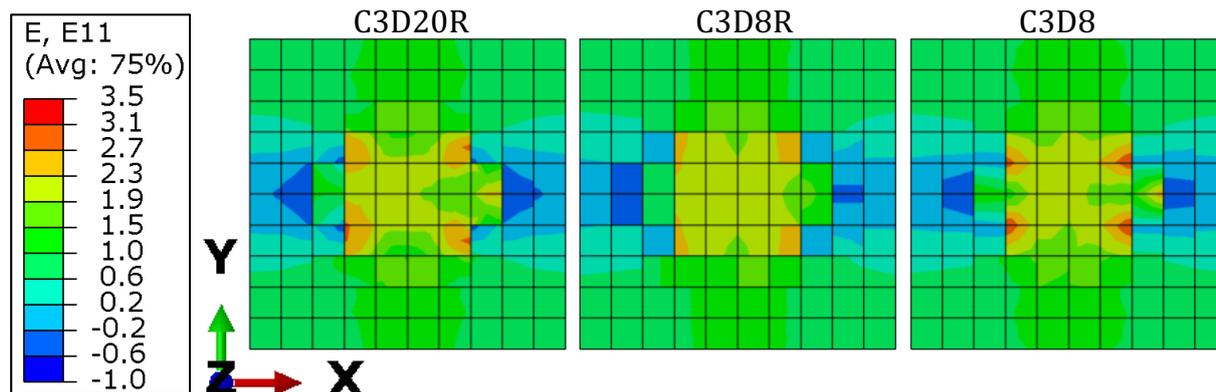


Abbildung 3.9: Vergleich von 20-Knoten Hexaedern mit reduzierter Integration (links), 8-Knoten Hexaedern mit reduzierter Integration (mitte) und 8-Knoten Hexaedern mit voller Integration (rechts) anhand eines Voxelnetzes mit einer kugelförmigen Pore. Die Dehnung ε_{xx} unter einer Zugbelastung ist farblich dargestellt.

3.2 Schnittstelle vom lokalen Modell zum Rissmodell

Im lokalen Modell wird mit dem Voxel-Netz ein Verschiebungsfeld berechnet und mit dem „Marching Cubes“-Algorithmus die Porenoberfläche generiert. Daraus müssen nun neun Parameter (c'_{uu} , c'_{vv} , ε_{uu} , ε_{vv} , γ_{uv} , ε_{un} , ε_{vn} , k'_u , k'_v) für das Rissmodell abgeleitet werden.

Zuerst werden die Krümmungen der Porenoberfläche c_{uu} , c_{vv} berechnet. Für jedes Dreieckselement der Porenoberfläche wird eine Näherungsfläche angeschmiegt und daraus werden die Krümmungen ermittelt. Dazu wird für jedes Dreieckselement auf der Porenoberfläche zuerst ein neues Koordinatensystem ζ - ξ - n definiert. Abbildung 3.10 zeigt einen Ausschnitt der Pore mit dem ζ - ξ - n Koordinatensystem für ein Dreieckselement \mathcal{A} . Der Ursprung des ζ - ξ - n Koordinatensystems liegt in der Mitte des Elementes \mathcal{A} . Um das Element \mathcal{A} herum werden weitere rot eingezeichnete Elemente \mathcal{S} ausgewählt. Jedes Element $\zeta_i \in \mathcal{S}$ muss die drei Kriterien

$$\begin{cases} \|\text{Position}(\mathcal{A}) - \text{Position}(\zeta_i)\|_2 \leq \rho \\ -90^\circ < \angle(\text{Normalvektor}(\mathcal{A}), \text{Normalvektor}(\zeta_i)) < 90^\circ \\ \zeta_i \in \{\mathcal{A}\} \cup (\text{Nachbarn}\{\mathcal{A}\} \cap \mathcal{S}) \cup (\text{Nachbarn}\{(\text{Nachbarn}\{\mathcal{A}\} \cap \mathcal{S})\} \cap \mathcal{S}) \cup \dots \end{cases} \quad (3.5)$$

erfüllen. Der Abstand zwischen einem Element ζ_i und dem Element \mathcal{A} darf nicht größer als der Auswahlradius ρ sein. Der Auswahlradius ρ muss wie in Kapitel 5.2 beschrieben vom

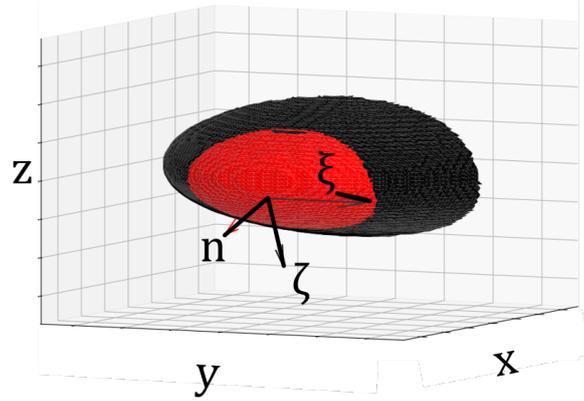


Abbildung 3.10: Der Ursprung für das neue Koordinatensystem ζ - ξ - n wird auf ein Element \mathcal{A} an der Porenoberfläche gelegt. Der Normalvektor n steht senkrecht auf die Oberfläche. Der ζ - und der ξ -Vektor sind beliebig. Um den Ursprung werden weitere Elemente \mathcal{S} (rot) ausgewählt.

Benutzer sinnvoll gewählt werden. Der Flächennormalvektor eines Elementes ς_i darf vom Flächennormalvektor des Elementes \mathcal{A} nicht um 90° oder mehr abweichen. \mathcal{S} enthält neben dem Ursprungs-Element \mathcal{A} auch alle Nachbarn von \mathcal{A} , die diese drei Kriterien erfüllen. Die Nachbar-Elemente dieser Nachbarn sind ebenfalls in \mathcal{S} , wenn sie die drei Kriterien erfüllen und für die Nachbarn dieser Nachbar-Elemente gilt das wiederum und so weiter. Es gibt also einen Weg zwischen einem Element $\varsigma_i \in \mathcal{S}$ und dem Element \mathcal{A} und dieser Weg enthält nur Elemente, die alle drei Kriterien erfüllen.

Die Gewichtungsfaktoren

$$w_i = \text{Fläche}(\varsigma_i) \cdot (1 - \|\text{Position}(\mathcal{A}) - \text{Position}(\varsigma_i)\|_2 / \delta) \quad (3.6)$$

für die ausgewählten Dreieckselemente ς_i berücksichtigen die Flächen der Dreiecke und die Distanzen zum Ursprungs-Element \mathcal{A} . Der in Abbildung 3.10 eingezeichnete Normalvektor

$$n = \frac{\sum_i \text{Normalvektor}(\varsigma_i) \cdot w_i}{\sum_i w_i} \quad (3.7)$$

ist der gewichtete Mittelwert der Normalvektoren der ausgewählten Elementen ς_i . Die ζ - und ξ -Vektoren müssen nur rechtwinklig auf den n -Vektor stehen, sind ansonsten aber beliebig wählbar.

Nun ist das ζ - ξ - n Koordinatensystem bekannt und die Mittelpunkte der ausgewählten Elemente \mathcal{S}_i werden vom x - y - z Koordinatensystem in das neue System rotiert. Die n -Komponenten werden durch eine biquadratische Ausgleichsebene

$$n(\zeta, \xi) = \begin{bmatrix} \zeta & \xi \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_{\zeta\zeta} & c_{\zeta\xi}/2 \\ c_{\zeta\xi}/2 & c_{\xi\xi} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \zeta \\ \xi \end{bmatrix} = c_{\zeta\zeta} \cdot \zeta^2 + c_{\xi\xi} \cdot \xi^2 + c_{\zeta\xi} \cdot \zeta \cdot \xi \quad (3.8)$$

angenähert. Für die Regression wird die gewichtete Methode der kleinsten Quadrate

$$\min_{c_{\zeta\zeta}, c_{\xi\xi}, c_{\zeta\xi}} \|(n_i - n(u_i, v_i)) \cdot w_i\|_2 \quad (3.9)$$

mit denselben Gewichtungsfaktoren w_i wie bei der Berechnung des n -Vektors verwendet. Abbildung 3.11 zeigt die blaue Ausgleichsebene mit den roten Mittelpunktpositionen der Elemente ς_i .

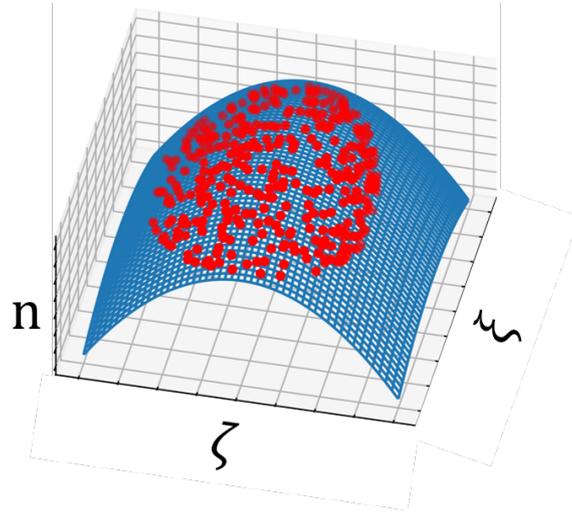


Abbildung 3.11: Ermittlung der Krümmungen $c_{\zeta\zeta}, c_{\xi\xi}, c_{\zeta\xi}$ an der Porenoberfläche: Die Funktion $n(\zeta, \xi) = c_{\zeta\zeta} \cdot \zeta^2 + c_{\xi\xi} \cdot \xi^2 + c_{\zeta\xi} \cdot \zeta \cdot \xi$ approximiert die ζ - ξ - n Mittelpunktpositionen der Oberflächenelemente.

Wie bereits erwähnt sind die ζ - und ξ -Vektoren beliebig wählbar. Eine Möglichkeit ist es den ζ - und ξ -Vektor so zu wählen, dass die Krümmung $c_{\zeta\xi}$ Null wird. Dieses Hauptkrümmungs-Koordinatensystem wird u-v-n System genannt. Dazu wird das Eigenwertproblem

$$\begin{bmatrix} c_{\zeta\zeta} & c_{\zeta\xi}/2 \\ c_{\zeta\xi}/2 & c_{\xi\xi} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e_{\zeta i} \\ e_{\xi i} \end{bmatrix} = c_{ii} \begin{bmatrix} e_{\zeta i} \\ e_{\xi i} \end{bmatrix} \quad \text{mit } i \in \{u, v\} \quad (3.10)$$

mit den zwei neuen Eigenvektoren $e_u = [e_{\zeta u}, e_{\xi u}]$ und $e_v = [e_{\zeta v}, e_{\xi v}]$ sowie den Eigenwerten c_{uu} und c_{vv} gelöst. Die Eigenvektoren e_u und e_v spannen mit dem n-Vektor das neue u-v-n Koordinatensystem auf. Die Eigenwerte c_{uu} und c_{vv} sind die Krümmungen im neuen u-v-n Koordinaten-System. Durch diese Koordinatentransformation vom ζ - ξ -n zum u-v-n System können die drei Parameter $c_{\zeta\zeta}, c_{\zeta\xi}, c_{\xi\xi}$ auf zwei Parameter c_{uu} und c_{vv} reduziert werden.

Die restlichen Parameter ($\varepsilon_{uu}, \varepsilon_{vv}, \gamma_{uv}, \varepsilon_{un}, \varepsilon_{vn}, k_u, k_v$) beziehen sich ebenfalls auf das u-v-n Koordinatensystem und beschreiben die Deformation des Rissmodells. In Abbildung 3.12 ist die undeformierte Risszelle als schwarzes Gitter eingezeichnet. Das Verschiebungsfeld vom lokalen Modell wird an insgesamt 24 Stützstellen auf die Risszelle interpoliert. Diese Stützstellen sind auf den vier seitlichen Flächen der Risszelle angebracht.

Die Risszelle hat eine Länge und Breite von $l_u = l_v = 5 \cdot a_{max}$. Wenn der Benutzer eine andere maximale Risslänge a_{max} eingibt, muss die Risszelle neu erstellt werden und die Deformationen werden neu berechnet. Das Verhältnis von $l_u/a_{max} = 5$ bzw. $l_v/a_{max} = 5$ ergibt sich aus dem Rissmodell, das im nächsten Kapitel beschrieben wird.

Die je 24 Verschiebungen $\Delta u_i, \Delta v_i, \Delta n_i$ der Stützpunkte werden durch die Funktionen

$$\begin{cases} \Delta u(u, v, n) = u \cdot \varepsilon_{uu} + 0.5 \cdot v \cdot \gamma_{uv} + n \cdot u \cdot k'_u + 1 \cdot C_u \\ \Delta v(u, v, n) = v \cdot \varepsilon_{vv} + 0.5 \cdot u \cdot \gamma_{uv} + n \cdot v \cdot k'_v + 1 \cdot C_v \\ \Delta n(u, v, n) = u \cdot \varepsilon_{un} + v \cdot \varepsilon_{vn} + 1 \cdot C_n \end{cases} \quad (3.11)$$

mit der Methode der kleinsten Quadrate angenähert. Aus dieser Regression ergeben sich die Konstanten C_u, C_v, C_n , die nicht weiter beachtet werden, die Dehnungen $\varepsilon_{uu}, \varepsilon_{vv}$, die Scherungen $\gamma_{uv}, \varepsilon_{un}, \varepsilon_{vn}$ und die Biegungen k_u, k_v . Abbildung 3.13 zeigt die möglichen

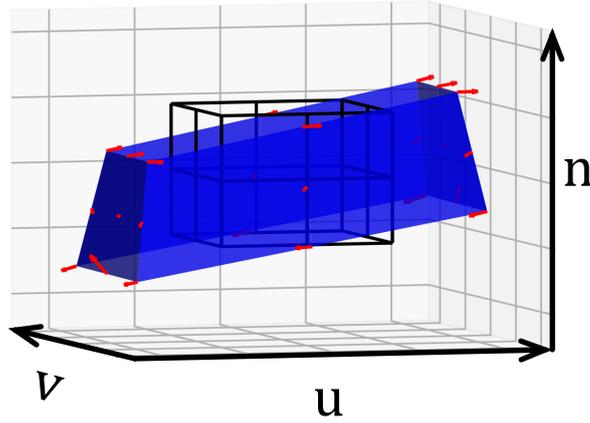


Abbildung 3.12: Ermittlung der Verschiebungen im u-v-n Koordinatensystem des Rissmodells. Der schwarze Quader stellt die undeformierte Risszelle dar. Der Riss wächst von unten entlang der n-Achse nach oben. An den seitlichen Flächen werden an jeweils 9 Stellen die Verschiebungen vom lokalen Modell auf die Risszelle interpoliert. Die blauen Flächen passen diese Verschiebungen an. Die roten Pfeile sind die Residuen der Anpassung.

Deformationen. Die Scherung γ_{uv} wird als „reine“ Scherung aufgebracht, wohingegen die Scherungen ε_{un} und ε_{vn} als „einfache“ Scherungen aufgebracht werden.

Ein Würfel hat acht Knoten mit jeweils drei Koordinaten. Um alle Deformationen eines Würfels abzubilden, wären ohne die drei Starrkörperverschiebungen $8 \cdot 3 - 3 = 21$ Parameter notwendig. Das Modell ist also eine Vereinfachung, die nur sieben anstatt 21 Parameter für die Deformationen verwendet. Dabei wird allerdings darauf geachtet, dass die sieben linear unabhängigen Deformationen für die Rissinitiierung relevant sind. In Kapitel 2.1 werden die Rissöffnungsarten diskutiert. Es fällt auf, dass die Deformationen zufolge ε_{uu} , ε_{vv} , k_u , k_v und γ_{uv} zu einer Mode I Belastung führen. Abbildung 3.14 zeigt einige Deformationen, die nicht durch die sieben Parameter beschrieben werden können.

Für das lokale Modell sind nun die Krümmungen c_{uu} , c_{vv} , die Dehnungen ε_{uu} , ε_{vv} , die Scherungen γ_{uv} , ε_{un} , ε_{vn} und die Biegungen k_u , k_v bekannt. Im nächsten Schritt werden diese Parameter in das Rissmodell übertragen. Dazu werden dimensionslose Kennzahlen verwendet. Die dimensionslose Tiefe a^* bzw. Länge l^*

$$a^* = \frac{a}{a_{max}} \text{ bzw. } l^* = \frac{l}{a_{max}} \quad (3.12)$$

sind die auf die maximale Risslänge a_{max} bezogene Tiefe a bzw. Länge l . Da die maximale Risslänge a_{max} und die Tiefe a bzw. die Länge l die Dimension Länge haben, ist der Quotient davon dimensionslos. Die Krümmungen der Porenoberfläche haben die Dimension 1/Länge. Die dimensionslosen Krümmungen

$$c_{uu}^* = c_{uu} \cdot a_{max} \text{ bzw. } c_{vv}^* = c_{vv} \cdot a_{max} \quad (3.13)$$

ergeben sich aus dem Produkt der Krümmungen c_{uu} bzw. c_{vv} in der Dimension 1/Länge mit der maximalen Risslänge a_{max} in der Dimension Länge. Analog dazu sind die dimensionslosen Biegungen

$$k_u^* = k_u \cdot a_{max} \text{ bzw. } k_v^* = k_v \cdot a_{max} \quad (3.14)$$

das Produkt der Biegungen k_u bzw. k_v in der Dimension 1/Länge mit der maximalen Risslänge a_{max} in der Dimension Länge. Die Dehnungen und Scherungen sind bereits dimensionslos

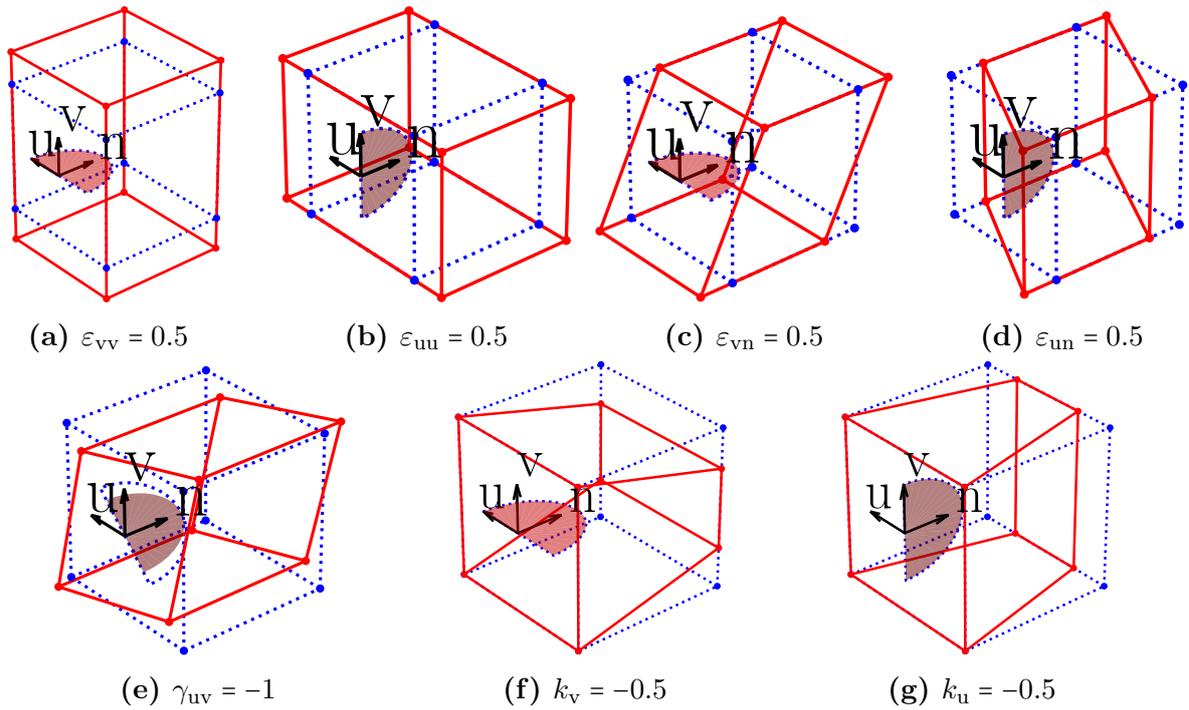


Abbildung 3.13: Linearisierte Deformationen, die dem Rissmodell als Randbedingungen übergeben werden, mit entsprechenden Rissorientierungen.

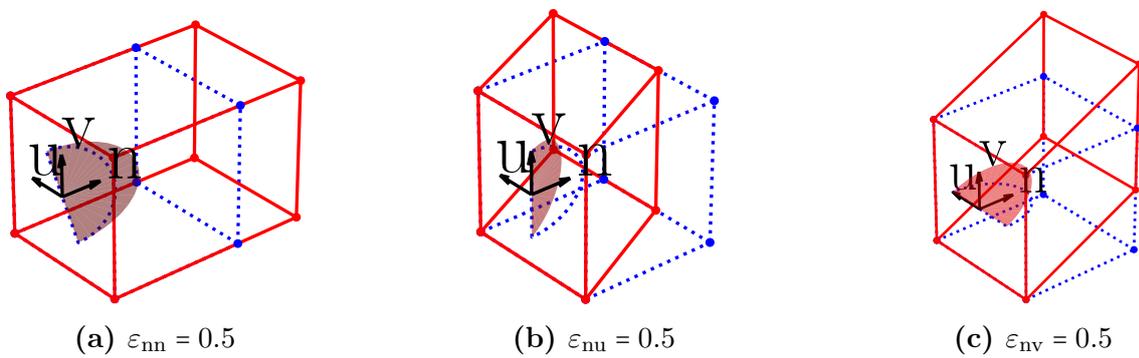


Abbildung 3.14: Beispiele von Deformationen, die nicht abgebildet werden können.

und müssen nicht umgerechnet werden:

$$\varepsilon_{uu}^* = \varepsilon_{uu} \text{ bzw. } \varepsilon_{vv}^* = \varepsilon_{vv} \text{ bzw. } \gamma_{uv}^* = \gamma_{uv} \text{ bzw. } \varepsilon_{un}^* = \varepsilon_{un} \text{ bzw. } \varepsilon_{vn}^* = \varepsilon_{vn} \quad (3.15)$$

Mit den eben ermittelten dimensionslosen Kennzahlen können Ähnlichkeitsbeziehungen zwischen den Risszellen im lokalen Modell und den Risszellen im Rissmodell angegeben werden. Zwei Risszellen sind einander ähnlich, wenn beide die gleichen dimensionslosen Kennzahlen haben. Wenn zwei Risszellen also die gleichen dimensionslosen Höhen l_u^* , Breiten l_v^* , Tiefen l_n^* und die gleichen dimensionslosen Parameter c_{uu}^* , c_{vv}^* , ε_{uu}^* , ε_{vv}^* , γ_{uv}^* , ε_{un}^* , ε_{vn}^* , k_u^* , k_v^* haben, dann sind die zwei Risszellen ähnlich.

Abbildung 3.15 zeigt wie an einer Pore zwei Risszellen in das Rissmodell übertragen werden. Die Risszelle 1 hat eine größere maximale Risslänge als die Risszelle 2. Im lokalen Modell wird das Voxel-Netz simuliert. Am Rand der Risszellen wird das Verschiebungsfeld aus dem Voxel-Netz durch die Lastparameter ε_{uu} , ε_{vv} , γ_{uv} , ε_{un} , ε_{vn} , k_u' , k_v' beschrieben. Für beide Risszellen müssen die Lastparameter also separat voneinander ermittelt werden. Im Gegensatz dazu muss die Krümmung der Porenoberfläche c_{uu} nur einmal gefittet werden.

Das Rissmodell wird einfachheitshalber im N-mm-s Einheitensystem definiert und die maximale Risslänge im Rissmodell a'_{max} wird durch Parameterstudien im nächsten Kapitel festgelegt. Damit kann aus den dimensionslosen Kennzahlen eine Zelle im Rissmodell erstellt werden, die ähnlich zur Zelle im lokalen Modell ist. Die auf das Rissmodell bezogenen Werte werden mit einem Apostroph gekennzeichnet. Beispielsweise kann die Tiefe im Rissmodell

$$a' = a^* \cdot a'_{max} \quad (3.16)$$

aus der dimensionslosen Tiefe a^* und der maximalen Risslänge im Rissmodell a'_{max} berechnet werden. Auf die gleiche Weise werden die Krümmungen bzw. Biegungen im Rissmodell

$$c'_{uu} = \frac{c_{uu}^*}{a'_{max}} \text{ bzw. } c'_{vv} = \frac{c_{vv}^*}{a'_{max}} \text{ bzw. } k'_u = \frac{k_u^*}{a'_{max}} \text{ bzw. } k'_v = \frac{k_v^*}{a'_{max}} \quad (3.17)$$

ermittelt. Die Dehnungen ε'_{uu} , ε'_{vv} und Scherungen γ'_{uv} , ε'_{un} , ε'_{vn} müssen wiederum nicht umgerechnet werden, sondern entsprechen genau ihrem jeweiligen Pendant im lokalen Modell.

3.3 Rissmodell

Das Rissmodell übernimmt die neun Parameter c'_{uu} , c'_{vv} , ε_{uu} , ε_{vv} , γ_{uv} , ε_{un} , ε_{vn} , k'_u , k'_v und gibt die Energiefreisetzungsraten $G'(a')$ und die Hauptnormalspannungen $\sigma'_1(a')$ als Funktion über die Tiefe a' zurück. Konstanten und Variablen wie beispielsweise c'_{uu} , die sich auf das Rissmodell beziehen, werden mit einem Apostroph gekennzeichnet.

Die Energiefreisetzungsraten $G'(a')$ sowie die Hauptnormalspannung $\sigma'_1(a')$ können entweder durch FEM-Modelle oder durch ein statistisches Modell ermittelt werden. Ein FEM-Modell ermittelt mit einer Simulation die Hauptnormalspannung $\sigma'_1(a')$ und mit sechs weiteren Simulationen die Energiefreisetzungsraten $G'(a')$. Für das statistische Modell werden 16375 FEM-Modelle mit insgesamt 98250 Simulationen berechnet. Zur Validierung und Verifizierung werden zusätzlich mehr als 2000 FEM-Modelle erzeugt.

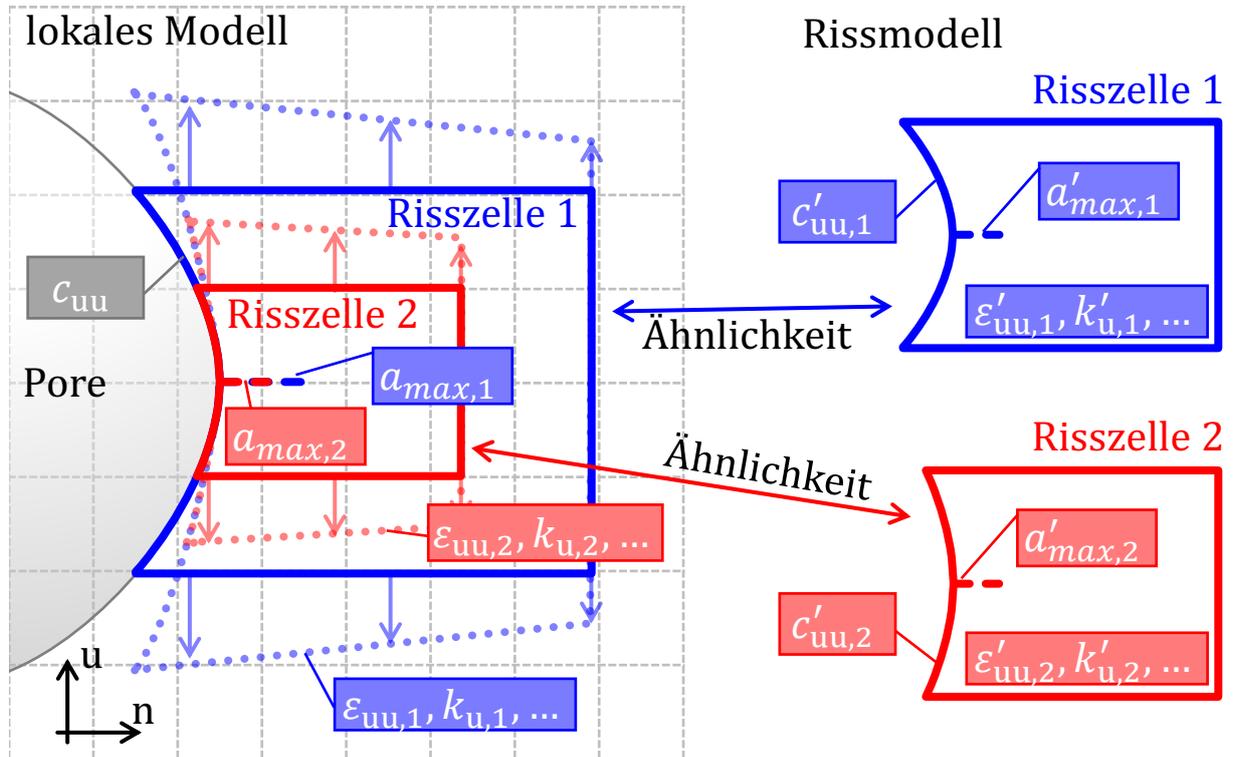


Abbildung 3.15: Ähnlichkeitsbeziehungen zwischen Risszellen im lokalen Modell und Risszellen im Rissmodell.

3.3.1 Risszellengeometrie

Für das FEM-Modell wird zuerst eine Risszelle erzeugt. Abbildung 3.16a zeigt eine Risszelle mit den eingezeichneten Geometrieparametern. Die Vorderseite der Zelle entspricht der Porenoberfläche. Wenn ein rein elliptischer Riss wie in Abbildung 3.16b eingebracht wird, würde sich der Riss bei hohen Krümmung zur Porenoberfläche hin wieder verzüngen. Dies wird als physikalisch wenig plausibel erachtet, weshalb die rechte Seite des elliptischen Risses abgeschnitten und durch ein Rechteck ersetzt wird.

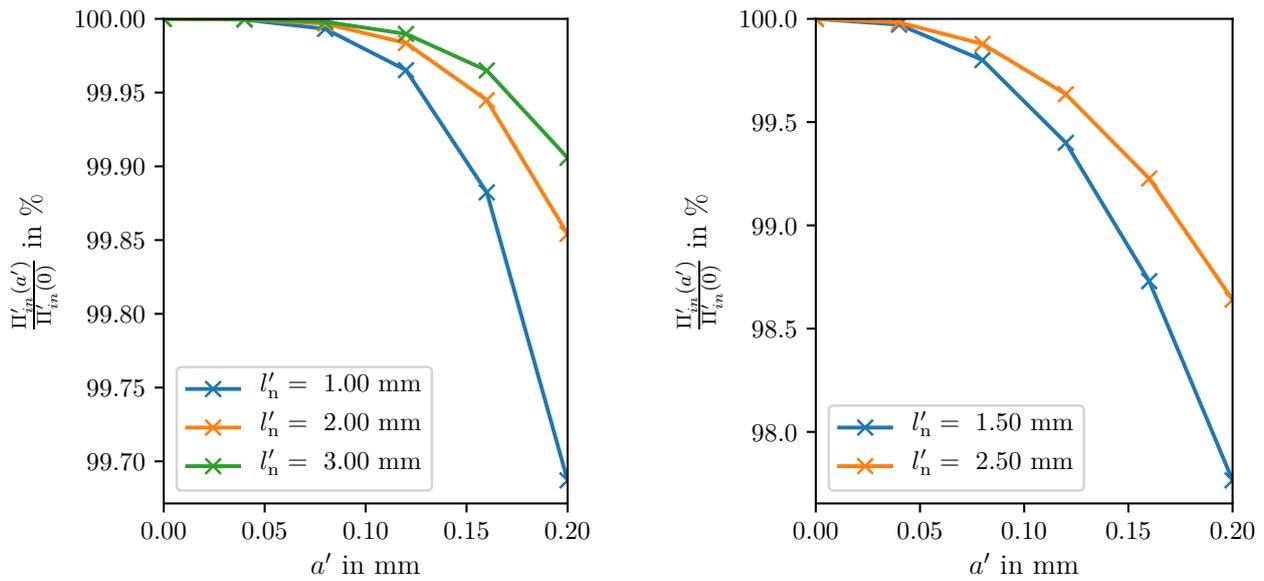
Der Ursprung des u-v-n Hauptkrümmungssystems liegt in der Mitte der Zellen-Vorderseite. Entlang des Risspfades bis zur maximalen Risslänge a'_{max} wird in der ersten Simulation die Hauptnormalspannung $\sigma'_1(a)$ bestimmt. Danach werden die Risspartitionen in die Zelle so eingebracht, dass sie normal auf die soeben bestimmte Hauptnormalspannung an der Zellenvorderseite $\sigma'_1(0 \text{ mm})$ liegen.

In Abbildung 3.16a ist die Krümmung c'_{uu} positiv und somit konvex, wohingegen die Krümmungen c'_{vv} , $c'_{uu,Rückseite}$, $c'_{vv,Rückseite}$ negativ und somit konkav sind.

Im weiteren Verlauf werden wie aus Tabelle 3.2 ersichtlich die Krümmungen an der Rückseite $c'_{uu,Rückseite}$, $c'_{vv,Rückseite}$ Null gesetzt, da sich während der Arbeit herausstellte, dass diese Krümmungen keinen Einfluss auf die Rissinitiierung haben. Die Krümmungen an der Vorderseite c'_{uu} , c'_{vv} können nur im Bereich von $-1/\text{mm}$ bis $1/\text{mm}$ gewählt werden, da größere Krümmungen Problemen mit dem FEM-Netz verursachen.

Wie in Kapitel 2.4 erwähnt sollten für das kombinierte Kriterium mehrere Rissformen simuliert werden. Die Form des Risses wird durch das Verhältnis von maximaler Risslän-

Dehnungsenergie $\Pi'_{in}(a')/\Pi'_{in}(0)$ dargestellt. Idealerweise liegt die relative Dehnungsenergie bei 100%. Das würde bedeuten, dass sich die Reaktionskräfte nicht verändern.



(a) Relative Dehnungsenergie über die Tiefe a' bei Belastung \mathcal{A}

(b) Relative Dehnungsenergie über die Tiefe a' bei Belastung \mathcal{B}

Abbildung 3.17: Auswirkung der Risszellentiefe l'_n . Je größer die Risszelle, desto weniger Einfluss hat ein Riss mit der Länge a' auf die Reaktionskräfte und desto näher ist die relative der Dehnungsenergie bei 100%.

Bei der Belastung \mathcal{A} (Abbildung 3.17a) ist die Zelle konvex gekrümmt $c'_{uu} = 1/\text{mm}$, während sie bei Belastung \mathcal{B} (Abbildung 3.17b) konkav gekrümmt $c'_{uu} = -1/\text{mm}$ ist. Bei beiden Belastungen beträgt die Dehnung $\varepsilon_{uu} = 1$. Die maximale relative Änderung der Dehnungsenergie ist für alle Tiefen a' kleiner als 3%.

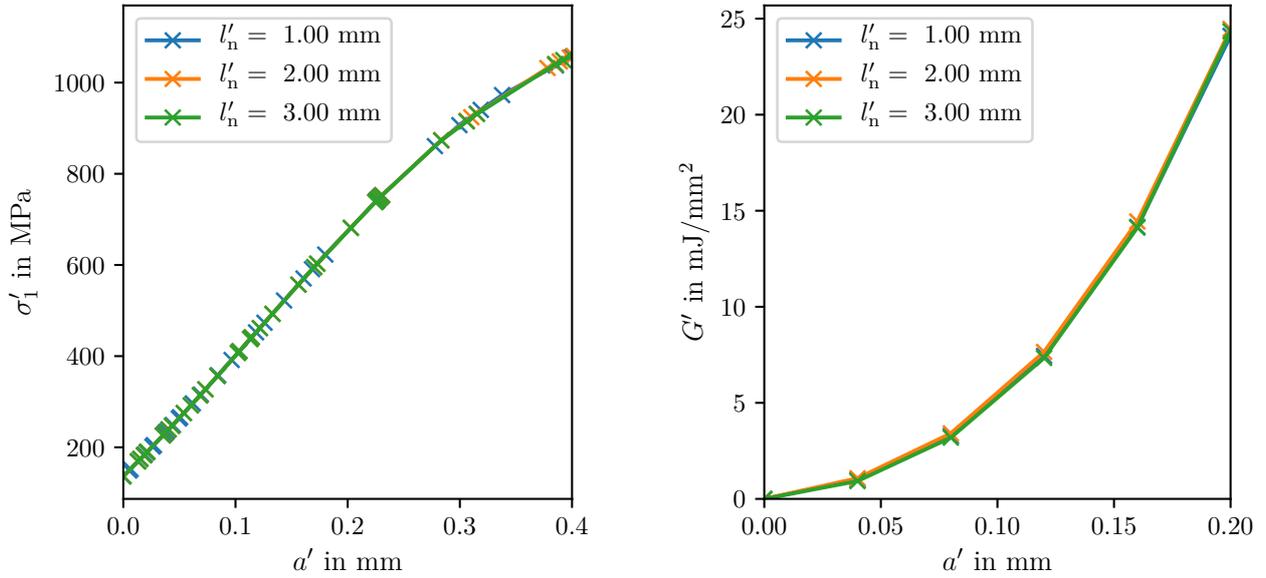
Abbildung 3.18a stellt den Verlauf der Hauptnormalspannungen $\sigma'_1(a')$ dar und Abbildung 3.18b zeigt den Verlauf der Energiefreisetzungsrate $G'(a')$. Die beiden Verläufe sind gegenüber der Risszellentiefe l'_n invariant. Es kann also eine möglichst kleine Risszellentiefe gewählt werden, um Rechenzeit zu sparen.

Bei der kleinsten Risszellentiefe $l'_n = 1$ mm überschneiden sich die Vorder- und Rückseite der Risszelle, wenn große konvexe Krümmungen an der Vorder- und Rückseite mit $c'_{uu} = 1/\text{mm}$ und $c'_{uu,\text{Rückseite}} = 1/\text{mm}$ gewählt werden. Dann kann kein FEM-Netz mehr erstellt werden. Deshalb wird eine etwas größere Risszellentiefe von $l'_n = 1.25$ mm verwendet.

Parameterstudie: Maximale Risslänge

An der Rissfront tritt eine Spannungsüberhöhung auf, die abflacht je weiter man sich von der Rissfront entfernt. Wenn der Riss zu groß ist, dann ist in der Risszelle kein Platz mehr, damit die Spannungsüberhöhung abflachen kann und das Ergebnis ist falsch.

Der Riss kann entweder zu lang sein und der Rückseite zu nahekommen oder er kann zu breit sein und den Seitenwänden zu nahekommen. Die Rissbreite b'_{max} muss also gemeinsam mit der Risslänge a'_{max} betrachtet werden, um zu garantieren, dass sowohl die Rückseite



(a) Hauptnormalspannung σ'_1 über die Tiefe a' bei Belastung \mathcal{A}

(b) Energiefreisetzungsrate G' über die Tiefe a' bei Belastung \mathcal{A}

Abbildung 3.18: Auswirkung der Risszellentiefe l'_n . Die Risszellentiefe hat keine wesentlichen Auswirkungen.

weit genug von der Rissfront entfernt ist, als auch dass der Abstand zu den Seitenwänden groß genug ist. Vorausgesetzt wird, dass valide Ergebnisse für Seitenlängenverhältnisse von $b'_{max}/a'_{max} = 0.5$ bis $b'_{max}/a'_{max} = 1.5$ möglich sein müssen.

Die Hauptnormalspannung wird bestimmt, bevor ein Riss in das Modell eingebracht wird und hängt nicht vom Spannungsverlauf an der Rissfront ab. Die Hauptnormalspannung ist für die Bestimmung der maximale Risslänge a'_{max} also nicht wichtig. Wenn die Spannungsüberhöhung am Zellenrand abgeschnitten wird, weil der Riss zu groß ist, dann ist das stattdessen anhand der Energiefreisetzungsrate $G'(a')$ zu erkennen. Abbildung 3.19a zeigt die normierte Energiefreisetzungsrate für ein Seitenlängenverhältnis von $b'_{max}/a'_{max} = 0.5$ und Abbildung 3.19a stellt die normierte Energiefreisetzungsrate für ein Seitenlängenverhältnis von $b'_{max}/a'_{max} = 1.5$ dar.

Um die maximale Risslänge a'_{max} festzulegen, werden alle Krümmungen und Biegungen Null gesetzt und die Zelle wird mit der Dehnung $\varepsilon_{uu} = 1$ beaufschlagt. Die Risszelle ist dann ein perfekter Hexaeder für den bekannt ist, dass die Energiefreisetzungsrate $G'(a')$ eine lineare Funktion

$$G'(a') = C \cdot a' \quad (3.18)$$

mit der Steigung C ist. Das folgt aus der dimensionslosen Energiefreisetzungsrate

$$G^*(a^*) = \frac{G'(a')}{E' \cdot a'_{max}}, \quad (3.19)$$

die in Kapitel 3.4 eingeführt wird. Die dimensionslose Energiefreisetzungsrate kann mit $a^* = a'/a'_{max}$ auf die Energiefreisetzungsrate

$$G^*(1) = \frac{G'(a'_{max})}{E' \cdot a'_{max}} \Rightarrow G'(a'_{max}) = G^*(1) \cdot E' \cdot a'_{max} \quad (3.20)$$

umgeformt werden. Wenn die Krümmungen und Biegungen Null gesetzt werden, bleibt die Ähnlichkeitsbeziehung zwischen den Zellen erhalten, wenn die maximale Risslänge a'_{max}

verändert wird. Statt a'_{max} kann dann einfach die Tiefe a' verwendet werden. Daraus folgt, dass die Energiefreisetzungsrate

$$G'(a') = \underbrace{G^*(1) \cdot E'}_C \cdot a' = C \cdot a' \quad (3.21)$$

eine lineare Funktion ist. Die Zellenabmessungen $l'_u = 5 \cdot a'_{max}$, $l'_v = 5 \cdot a'_{max}$, $l'_n = 6.25 \cdot a'_{max}$ werden zwar auch skaliert, wenn a'_{max} verändert wird, aber die Größe der Zelle hat keinen Einfluss auf die Energiefreisetzungsrate, solange der Riss klein genug ist. Wenn die Energiefreisetzungsrate also von einer linearen Funktion abweicht, ist das darauf zurückzuführen, dass die Größe der Zelle einen Einfluss hat und die maximale Risslänge verkleinert werden sollte. Die normierte Energiefreisetzungsrate

$$\frac{G'(a')}{a'_{max}} = C \cdot \frac{a'}{a'_{max}} \quad (3.22)$$

bezieht sich auf die maximale Risslänge a'_{max} .

In Abbildung 3.19a weicht nur eine maximale Risslänge von $a'_{max} = 0.5$ mm von dieser Gerade ab. Bei einem größerem Seitenlängenverhältnis von $b'_{max}/a'_{max} = 1.5$ in Abbildung 3.19b weicht bereits eine maximale Risslänge von $a'_{max} = 0.3$ mm deutlich von einer Geraden ab. Die maximale Risslänge von $a'_{max} = 0.2$ mm zeigt ebenfalls eine geringere Abweichung von 4.8%, was aber toleriert wird. Als maximale Risslänge wird also $a'_{max} = 0.2$ mm gewählt.

Da die Energiefreisetzungsrate unterschätzt wird und somit zu einer weniger konservativen Auslegung führt, kann der Fehler durch eine kleinere kritische Energiefreisetzungsrate G'_{krit} kompensiert werden. Die korrigierte kritische Energiefreisetzungsrate

$$G'_{krit,korrigiert} = \frac{G'_{krit}}{S_{a'_{max}}} = \frac{G'_{krit}}{1.05} \quad (3.23)$$

verwendet beispielsweise einen Sicherheitsfaktor von $S_{a'_{max}} = 1.05$.

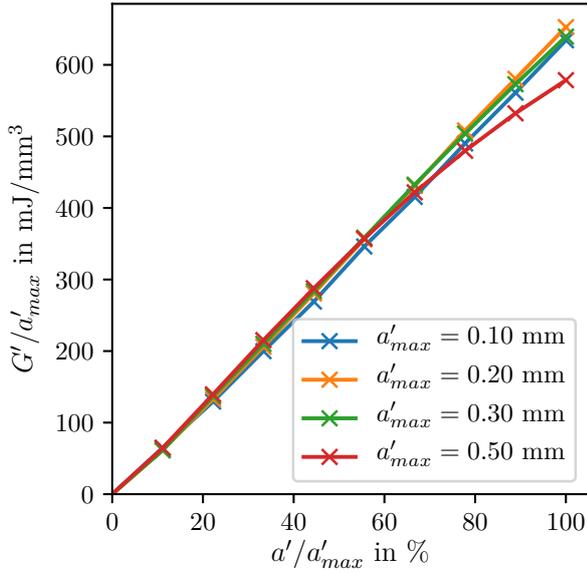
Parameterstudie: Anzahl der Risspartitionen

Für die Berechnung der Energiefreisetzungsrate $G'(a')$ sind mehrere Simulationen nötig, bei denen eine Risspartition nach der anderen geöffnet wird. Eine Risspartition entspricht einer gewissen Risslänge a' . Die Anzahl der Risspartitionen sollte möglichst gering sein, um den Rechenaufwand zu minimieren. Andererseits muss der Verlauf der Energiefreisetzungsrate $G'(a')$ möglichst genau abgebildet werden.

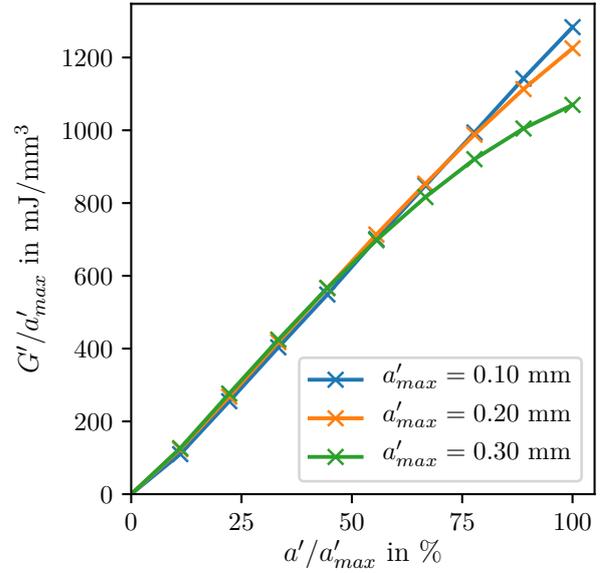
Für die Parameterstudie werden mehrere Rissmodelle mit unterschiedlichen Geometrien und Belastungen mit unterschiedlich vielen Risspartitionen simuliert. Abbildung 3.20 zeigt zwei Beispiele der Parameterstudie.

Die Energiefreisetzungsrate $G'_{19}(a')$ wird aus 19 Risspartitionen ermittelt. Die Risspartitionen sind äquidistant von 0 mm bis zu a'_{max} verteilt und in Abbildung 3.20 mit „×“-Zeichen markiert. Die Energiefreisetzungsraten $G'_1(a')$, $G'_2(a')$ und $G'_5(a')$ haben dagegen eine, zwei und fünf Risspartitionen.

Die Risspartitionen „×“ werden mit Lagrange-Polynomen [11] interpoliert. Wie aus den Abbildungen 3.20a und 3.20b ersichtlich, sind die interpolierten Energiefreisetzungsraten

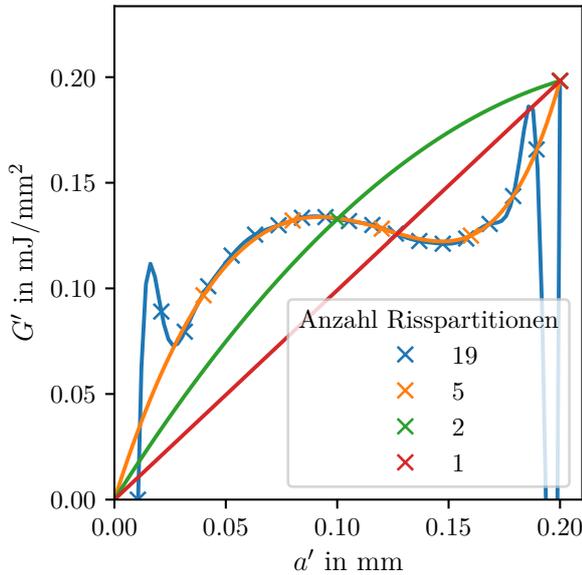


(a) $b'_{max}/a'_{max} = 0.5$: Eine maximale Risslänge a'_{max} von 0.50 mm ist mit einer maximalen Abweichung von 11.7% nicht mehr gültig.

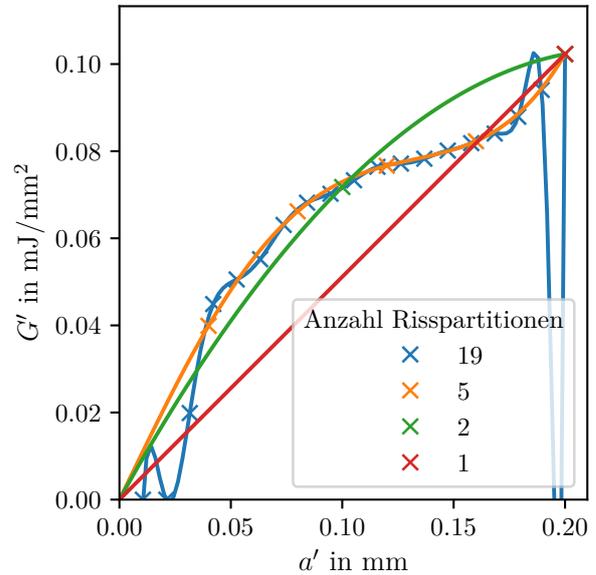


(b) $b'_{max}/a'_{max} = 1.5$: Eine maximale Risslänge a'_{max} von 0.20 mm weicht maximal um 4.8% ab. Dieser Fehler wird toleriert.

Abbildung 3.19: Einfluss des Seitenlängenverhältnisses b'_{max}/a'_{max} . Die Porenoberfläche ist nicht gekrümmt, sodass keine Kerbwirkung auftritt. Die Energiefreisetzungsrate $G'(a')$ ist theoretisch eine gerade Linie, die mit a'_{max} skaliert werden kann.



(a) Beispiel \mathcal{A}



(b) Beispiel \mathcal{B}

Abbildung 3.20: Auswirkung der Anzahl an Risspartitionen. Die simulierten Risspartitionen „ \times “ werden durch Lagrange-Polynome [11] interpoliert.

$G'_1(a')$ und $G'_2(a')$ mit einer und zwei Risspartitionen nicht in der Lage die simulierten Energiefreisetzungsrate „ \times “ korrekt abzubilden.

Andererseits ist die Energiefreisetzungsrate $G'_{19}(a')$, die als Referenz verwendet wird und am genauesten sein sollte, bei kleinen Risslängen mit einer Energiefreisetzungsrate von fast 0 mJ/mm² ebenfalls wenig plausibel. Das hängt damit zusammen, dass das FE-Netz nicht fein genug ist, um die Verformung um die Rissfront abzubilden, wodurch der Riss fast geschlossen bleibt. Es wird also eher die Netzabhängigkeit ermittelt als die Energiefreisetzungsrate. Außerdem sind 19 Risspartition nicht notwendig, weil ein Interpolationspolynom 19.-ten Grades sowieso überschwingt und ein geringerer Polynomgrad besser ist.

Deshalb werden 5 Risspartitionen verwendet, da sie die simulierten Energiefreisetzungsrate „ \times “ gut abbilden, ohne jedoch bei zu kleinen Risslängen Probleme mit der Netzabhängigkeit zu verursachen.

3.3.2 FE-Modell der Risszelle

Abbildung 3.21 zeigt die Vorgehensweise für die FEM Simulationen. Als Eingabe werden die zehn bereits bekannten Parameter c'_{uu} , c'_{vv} , ϵ_{uu} , ϵ_{vv} , γ_{uv} , ϵ_{un} , ϵ_{vn} , k'_u , k'_v , b'_{max} übergeben. Mit insgesamt sieben FE-Simulationen werden die Hauptnormalspannung $\sigma'_1(a')$ und die Energiefreisetzungsrate $G'(a')$ ermittelt.

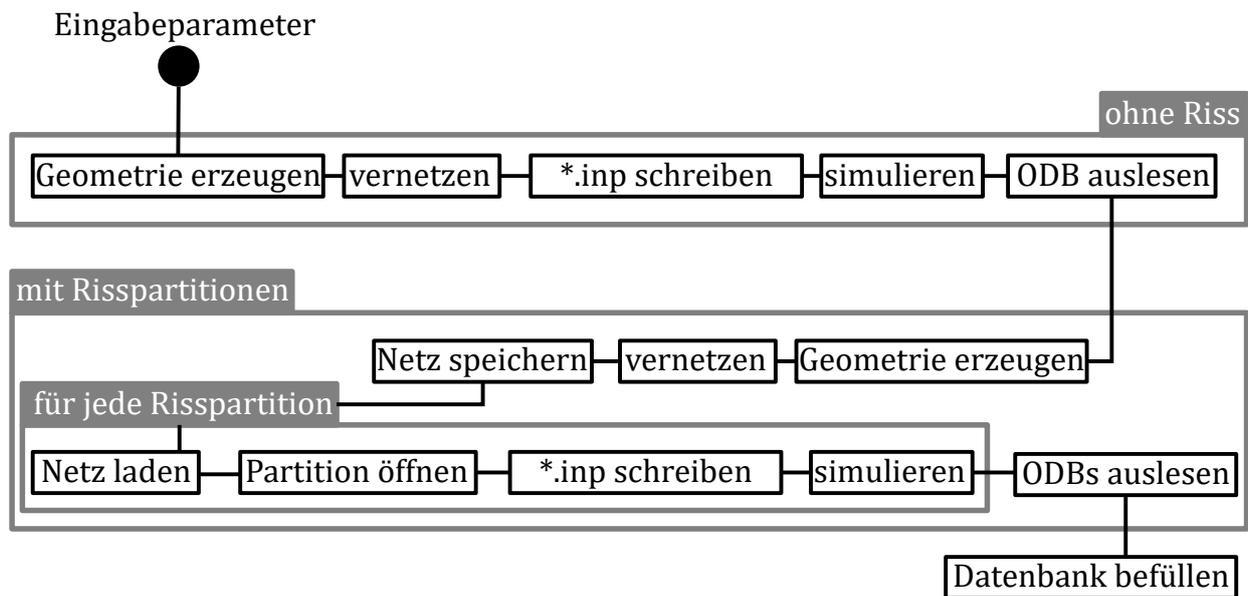


Abbildung 3.21: Vorgehensweise bei der Simulation des Rissmodells: Aus den Eingabeparametern wird die Risszelle erzeugt, vernetzt und gerechnet. Der Spannungstensor wird entlang der Rissrichtung ausgelesen. Daraus ergibt sich auch die Hauptnormalspannung an der Porenoberfläche $\sigma_1(a = 0 \text{ mm})$. Verschiedene Risslängen (Risspartitionen) werden in die Risszelle eingebracht. Der Normalvektor der Rissflächen zeigt in die Richtung der soeben ermittelten Hauptnormalspannung $\sigma_1(a = 0 \text{ mm})$. Die Risszelle wird neu vernetzt und die verschieden langen Risse werden der Reihe nach geöffnet und gerechnet. Dabei wird die Dehnungsenergie Π'_{in} ermittelt und daraus die Energiefreisetzungsrate $G'(a')$ berechnet. Die Ergebnisse werden in einer Datenbank gespeichert.

In der ersten Simulation wird noch kein Riss eingebracht, sondern nur die Hauptnormalspannung $\sigma'_1(a')$ entlang der Rissrichtung ausgelesen. Da noch kein Riss eingebracht wird, ist die maximale Rissbreite b'_{max} für diese Simulation noch nicht von Bedeutung.

Mit den folgenden sechs FE-Simulationen wird die Energiefreisetzungsrates $G'(a')$ ermittelt. Dafür werden fünf Risspartitionen mit steigenden Risslängen in ein FE-Netz so eingebracht, dass die Rissfläche normal auf die Hauptnormalspannung an der Porenoberfläche $\sigma'_1(a' = 0 \text{ mm})$ steht. Das Seitenlängenverhältnis dieser fünf Risse ist b'_{max}/a'_{max} , wobei die maximale Rissbreite b'_{max} ein Eingabeparameter ist. Es sind sechs FE-Simulationen, aber nur fünf Risspartitionen, weil bei einer Simulation kein Riss geöffnet wird und erst bei den fünf anderen Simulationen die fünf Risspartitionen der Reihe nach geöffnet werden. Die Ausgabe, darunter die Hauptnormalspannung $\sigma'_1(a')$ und die Energiefreisetzungsrates $G'(a')$, wird in eine Datenbank geschrieben.

Die Simulation eines Rissmodells startet bei der Übergabe der Eingabeparameter. Mit den übergebenen Krümmungen c'_{uu} , c'_{vv} wird die Geometrie für die Risszelle ohne Riss in Gmsh erzeugt und mit quadratischen Tetraedern vernetzt. Das Netz entlang der Rissrichtung ist dabei feiner als am Rand der Risszelle.

Anschließend werden die Solver-Input-Dateien („*.inp“-Dateien) geschrieben. Diese Dateien definieren neben dem Netz auch die Randbedingungen, das Material und die Belastungen. Die Belastungen ergeben sich durch die Eingabeparameter ε_{uu} , ε_{vv} , γ_{uv} , ε_{un} , ε_{vn} , k'_u und k'_v .

Nach der FE-Berechnung speichert Abaqus das Simulationsergebnis in einer Output-database-Datei („*.odb“-Datei). Aus dieser „*.odb“-Datei wird entlang des Risspfades a' der Spannungstensor ausgelesen und die größte Hauptnormalspannung $\sigma'_1(a')$ berechnet.

Die nun folgenden Schritte sind in Abbildung 3.21 in der Box „mit Risspartitionen“ aufgliedert. Risspartitionen sind Flächen, die normal auf die Hauptnormalspannung an der Porenoberfläche $\sigma'_1(0 \text{ mm})$ stehen. Mit Gmsh werden in die Geometrie der Risszelle nun alle fünf Risspartitionen eingebracht. Die Risslängen der Risspartitionen sind in Tabelle 3.2 aufgelistet. Die Rissbreiten b'_i ergeben sich aus der Multiplikation der Risslängen a'_i mit dem Seitenlängenverhältnis b'_{max}/a'_{max} . Die neue Geometrie wird wieder mit quadratischen Tetraedern vernetzt, aber nicht sofort simuliert, sondern zuvor gespeichert.

Für jede Risspartition wird das Netz wieder geladen und die entsprechende Risspartition durch Verdoppeln der Knoten im FE-Netz geöffnet. Diese Vorgehensweise garantiert, dass jede Risspartition dasselbe Netz verwendet. Wenn hingegen für jede Risspartition ein neues Netz erstellt werden würde, würden sich die Fehler zufolge der Netzabhängigkeit aufsummieren, während sich die Fehler zufolge der Netzabhängigkeit selbst eliminieren, wenn immer dasselbe Netz verwendet wird. Außerdem kann nur mit demselben Netz garantiert werden, dass die Energiefreisetzung $\Delta\Pi'$ nicht negativ sowie monoton steigend ist und somit auch die Energiefreisetzungsrates $G'(a')$ nicht negativ ist.

Nachdem die Risspartition geöffnet sind, können wiederum „*.inp“-Dateien geschrieben und simuliert werden. Eine weitere Simulation mit diesem Netz wird durchgeführt, jedoch ohne eine Risspartition zu öffnen. Die Dehnungsenergie dieser Simulation ohne geöffneten Riss ist die Dehnungsenergie $\Pi'_{in,0}$ bei einer Risslänge von $a' = 0 \text{ mm}$. Die Dehnungsenergie ohne Riss $\Pi'_{in,0}$ könnte auch aus der Simulation ausgelesen werden, aus der die Hauptnormalspannung errechnet wird. Allerdings unterscheiden sich die Netze und es könnte sein, dass Energiefreisetzungsrates $G'(a')$ an irgendeiner Stelle negativ wird.

Sobald für alle Risspartitionen die Ergebnisse vorliegen, werden die Dehnungsenergien $\Pi'_{in,j}$ ausgelesen und die Energiefreisetzungsrate $G'(a')$ berechnet. Die Ergebnisse werden in eine SQLite-Datenbank [12] geschrieben.

Randbedingungen

Die Parameter ε_{uu} , ε_{vv} , γ_{uv} , ε_{un} , ε_{vn} , k'_u und k'_v definieren die Belastung der Risszelle. Diese Parameter können allerdings nicht direkt in Abaqus als Randbedingungen aufgebracht werden, sondern werden zuerst Verschiebungen von Referenzpunkten zugewiesen. Diese Verschiebungen werden wiederum mit Gleichungen an das Netz gekoppelt. Die Verschiebungen werden mit einem vorgesetzten Δ gekennzeichnet. Beispielsweise sind u, v, n die Positionen und $\Delta u, \Delta v, \Delta n$ die jeweiligen Verschiebungen.

Abbildung 3.22 zeigt zwei Varianten, wie die Verschiebungen an das Netz gekoppelt werden können. In beiden Fällen gibt es einen Referenzpunkt für die Scherungen und einen Referenzpunkt für die Normaldehnungen. Jeder Referenzpunkt hat eine horizontale und eine vertikale Verschiebung und somit zwei Freiheitsgrade. Bei 3D-Problemen hat jeder Referenzpunkt drei Verschiebungen und drei Freiheitsgrade.



(a) Einheitsdehnungen: Die Verschiebungen am Rand werden vor der Simulation festgelegt. Dadurch sind keine weiteren Randbedingungen notwendig, um Starrkörperbewegungen zu verhindern. Die Seitenränder bleiben eben.

(b) Periodische Randbedingungen: Die Differenz der Verschiebungen zweier gegenüberliegender Knoten wird vor der Simulation festgelegt. Weitere Randbedingungen sind nötig, um Starrkörperbewegungen zu verhindern.

Abbildung 3.22: Randbedingungen für 2D-Probleme. Die verformten Zellen können beliebig oft aneinandergereiht werden.

Bei den Einheitsdehnungen in Abbildung 3.22a definiert ein Verschiebungsfeld

$$\begin{cases} \Delta u(u, v) = u \cdot \varepsilon_{uu} + v \cdot \varepsilon_{uv} \\ \Delta v(u, v) = v \cdot \varepsilon_{vv} + u \cdot \varepsilon_{vu} \end{cases} \quad (3.24)$$

die Verschiebungen Δu und Δv der Knoten am Rand der Zelle. Die deformierte Zelle bildet ein Parallelogramm mit ebenen Seitenrändern. In der Mitte der Zelle können sich die Elemente frei verformen. Einheitsdehnungen sind periodisch. Die verformte Zelle könnte also beliebig oft an sich selbst aneinandergereiht werden.

Die periodischen Randbedingungen in Abbildung 3.22b sind wie der Name schon sagt ebenfalls periodisch und die verformte Zelle lässt sich auch beliebig oft an sich selbst anfügen.

Im Gegensatz zu den Einheitsdehnungen definiert hier jedoch nicht ein Verschiebungsfeld die Verschiebung am Rand der Zelle. Stattdessen sind die Differenzen der Verschiebungen

$$\begin{cases} \Delta u(u_i, v_i) - \Delta u(u_j, v_j) = (u_i - u_j) \cdot \varepsilon_{uu} + (v_i - v_j) \cdot \varepsilon_{uv} \\ \Delta v(u_i, v_i) - \Delta v(u_j, v_j) = (v_i - v_j) \cdot \varepsilon_{vv} + (u_i - u_j) \cdot \varepsilon_{vu} \end{cases} \quad (3.25)$$

am Rand zwischen zwei gegenüberliegenden Knoten i und j vorgegeben. Die Freiheitsgrade der Knoten am linken und am unteren Rand werden nicht gesperrt. Nur die Freiheitsgrade der Knoten am rechten und am oberen Rand werden eliminiert, indem Gleichung 3.25 zu

$$\begin{cases} \Delta u(u_i, v_i) = (u_i - u_j) \cdot \varepsilon_{uu} + (v_i - v_j) \cdot \varepsilon_{uv} + \Delta u(u_j, v_j) \\ \Delta v(u_i, v_i) = (v_i - v_j) \cdot \varepsilon_{vv} + (u_i - u_j) \cdot \varepsilon_{vu} + \Delta v(u_j, v_j) \end{cases} \quad (3.26)$$

umgeformt wird und die Verschiebung der rechten bzw. oberen Knoten i als Funktionen der direkt gegenüberliegenden linken bzw. unteren Knoten j ausgedrückt werden. Die Dehnungen $\varepsilon_{uu}, \varepsilon_{uv}, \varepsilon_{vv}, \varepsilon_{vu}$ legen die Verschiebungen der Referenzpunkten fest. Die rechten Knoten müssen 1:1 einem linken Knoten und die oberen Knoten müssen 1:1 einen unteren Knoten zugeordnet werden. Das ist nur möglich, wenn das Netz an den Randflächen gleich ist.

Schneider [13] schlägt eine Methode vor, mit der periodische Randbedingungen auch verwendet werden können, wenn das Netz an den Randflächen nicht zusammenpasst. Abbildung 3.23 zeigt die Risszelle mit den seitlichen Flächen, auf die die Randbedingungen gekoppelt werden sollen. Nach Schneiders Methode wird das untere und das rechte Oberflächen-Netz auf die obere und die linke Seite kopiert. Dieser Vorgang heißt „Facecopy“. Die kopierten Oberflächen-Netze werden anschließend mit „Tie“-Bedingungen an das tatsächliche obere und linke Netz gekoppelt. Dabei werden die Freiheitsgrade des tatsächlichen nicht symmetrischen Netzes eliminiert und die Freiheitsgrade des kopierten Netzes bleiben erhalten. Nun kann jedem Knoten auf der rechten Seite direkt ein Knoten des kopierten Netzes auf der linken Seite zugeordnet werden und auch jeder Knoten auf der Unterseite hat sein kopiertes Gegenüber auf der Oberseite.

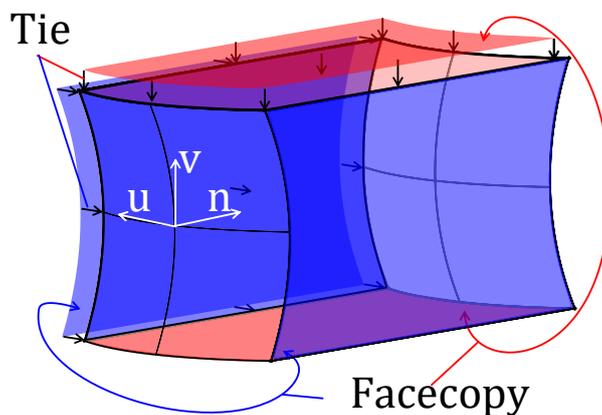


Abbildung 3.23: Bei periodischen Randbedingungen muss jedem Knoten auf einer Seite genau ein Knoten auf der gegenüberliegenden Seite zugeordnet werden. Sogenannte approximierte periodische Randbedingungen ermöglichen die 1:1 Zuordnung auch, wenn das Netz an den Randflächen nicht zusammenpasst. Dabei wird das Oberflächennetz einer Seite auf die gegenüberliegende Seite kopiert („Facecopy“). Das kopierte Netz wird mit „Ties“ an das eigentlich gegenüberliegende Oberflächennetz gekoppelt.

Bei periodische Randbedingungen sind Starrkörperbewegungen möglich, da nur die Differenzen der Verschiebungen festgelegt werden. Dabei bewegt sich die Zelle als Ganzes. Eine allfällige Starrkörperbewegung C eliminiert sich in den Differenzen der Verschiebungen

selbst $(\Delta u(u_i, v_i) + C) - (\Delta u(u_j, v_j) + C) = \Delta u(u_i, v_i) - \Delta u(u_j, v_j)$, wird also nicht durch die periodischen Randbedingungen verhindert. Eine zusätzliche Randbedingung setzt die Verschiebungen für einen Knoten Null, sodass keine Starrkörperbewegung mehr möglich ist.

Ein Vorteil der periodischen Randbedingungen gegenüber den Einheitsdehnungen ist, dass am Rand nur die Hälfte der Freiheitsgrade gesperrt wird. Dadurch ist die Zelle weniger steif. Für repräsentative Einheitszellen bilden die periodischen Randbedingungen das Verschiebungsfeld sogar exakt ab. Repräsentative Einheitszellen sind kleine Ausschnitte aus einem großen periodischen Modell, die endlos oft aneinandergereiht werden können. Zum Beispiel ist die hexagonal dichteste Kugelpackung eine repräsentative Einheitszelle für das Metallgitter von Magnesium. Leider ist die Risszelle keine repräsentative Einheitszelle und die periodischen Randbedingungen sind nur eine Näherung der Einspannungssituation, wenn auch eine genauere als die Einheitsdehnungen.

Im Gegensatz zum Rissmodell wird im lokalen Modell aus Kapitel 3.1 die Belastung nur mit periodischen Randbedingungen auf das Voxel-Netz aufgebracht. Das lokale Modell ist im x-y-z Koordinatensystem definiert. Mit den sechs Komponenten des Dehnungstensors ε_{xx} , ε_{yy} , ε_{zz} , γ_{xy} , γ_{xz} , γ_{yz} werden die Verschiebungen

$$\begin{cases} \Delta x(x_i, y_i, z_i) = (x_i - x_j) \cdot \varepsilon_{xx} + (y_i - y_j) \cdot \gamma_{xy} + (z_i - z_j) \cdot \gamma_{xz} + \Delta x(x_j, y_j, z_j) \\ \Delta y(x_i, y_i, z_i) = (y_i - y_j) \cdot \varepsilon_{yy} + (x_i - x_j) \cdot \gamma_{xy} + (z_i - z_j) \cdot \gamma_{yz} + \Delta y(x_j, y_j, z_j) \\ \Delta z(x_i, y_i, z_i) = (z_i - z_j) \cdot \varepsilon_{zz} + (x_i - x_j) \cdot \gamma_{xz} + (y_i - y_j) \cdot \gamma_{yz} + \Delta z(x_j, y_j, z_j) \end{cases} \quad (3.27)$$

eliminiert. Die Scherung wird als reine Scherung aufgebracht. Das bedeutet, dass die Scherung $\varepsilon_{xy} = \partial \Delta x(x_i, y_i, z_i) / \partial y$ gleich groß wie die Scherung $\varepsilon_{yx} = \partial \Delta y(x_i, y_i, z_i) / \partial x$ ist. Im Dehnungstensor sind die Scherungen ε_{xy} und ε_{yx} zur Scherung

$$\gamma_{xy} = \frac{1}{2}(\varepsilon_{xy} + \varepsilon_{yx}) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \Delta x(x_i, y_i, z_i)}{\partial y} + \frac{\partial \Delta y(x_i, y_i, z_i)}{\partial x} \right) \quad (3.28)$$

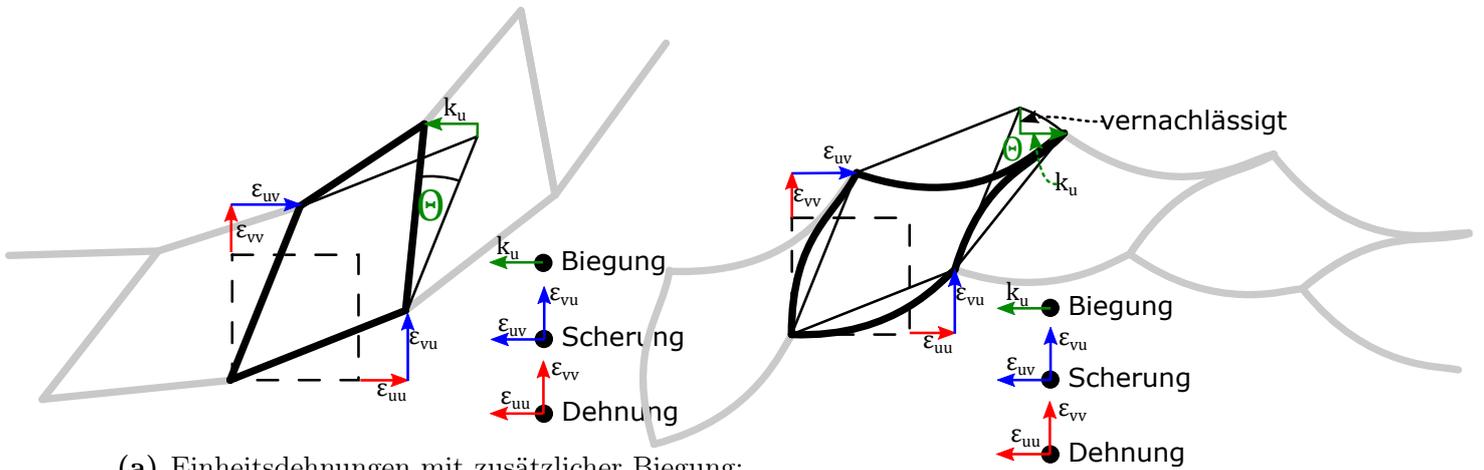
zusammengefasst. Im Gegensatz zur reinen Scherung ist bei der einfachen Scherung $\varepsilon_{xy} = 0$ und $\varepsilon_{yx} = 2 \cdot \gamma_{xy}$. Die Einträge des Dehnungstensors bleiben jedoch gleich.

Im Rissmodell werden andere Belastungen aufgebracht als im lokalen Modell, die nicht mit den bisher beschriebenen Randbedingungen definiert werden können. Die einfachen periodischen Randbedingungen und die Einheitsdehnungen können zwar die Parameter ε_{uu} , ε_{vv} , γ_{uv} , ε_{un} , ε_{vn} aufbringen. Die Parameter für die Biegungen k'_u und k'_v sind durch diese Randbedingungen allerdings nicht direkt abbildbar. Dafür werden die Randbedingungen um einen zusätzlichen Referenzpunkt mit einem Freiheitsgrade für die Biegung erweitert, wie er in Abbildung 3.24 verwendet wird.

Die Referenzebene für die Biegung wird auf die Unterseite gelegt. Dadurch wird die Zelle bei Biegung zusätzlich gestaucht oder gedehnt. Auf der Referenzebene wird die rechte Seitenwand um Θ gedreht. Da die Geometrie linearisiert ist, wird der eingezeichnete vertikale Anteil der Biegung $1 - \cos \Theta$ vernachlässigt und nur der horizontale Anteil $\sin \Theta \approx \Theta = l \cdot k'_u$ mit der Zellenlänge l und der Biegung k'_u berücksichtigt.

Die Einheitsdehnungen mit Biegung sind nur noch in eine Richtung periodisch und bei linearer Geometrie auch nur, wenn die Biegung sehr klein ist. Das Verschiebungsfeld

$$\begin{cases} \Delta u(u, v) = u \cdot \varepsilon_{uu} + v \cdot \varepsilon_{uv} + u \cdot v \cdot k'_u \\ \Delta v(u, v) = v \cdot \varepsilon_{vv} + u \cdot \varepsilon_{vu} \end{cases} \quad (3.29)$$



(a) Einheitsdehnungen mit zusätzlicher Biegung: In der linearen Analyse wird die Biegung linearisiert, sodass die kleine hier eingezeichnete vertikale Verschiebung vernachlässigt wird.

(b) Periodische Randbedingungen mit zusätzlicher Biegung: Die Biegung wird analog zu Abbildung 3.24a linearisiert.

Abbildung 3.24: Randbedingungen für 2D-Probleme. Mit zusätzlicher Biegung können die verformten Zellen nur noch horizontal beliebig oft aneinandergereiht werden. In einer linearen Analyse ist das Aneinanderreihen nur bei sehr kleinen Biegungen möglich, da die Biegung linearisiert wird und der vertikale Anteil $1 - \cos \Theta$ der Biegung Null gesetzt wird.

berücksichtigt nur die horizontale u-Komponenten der Biegung.

Analog zu den Einheitsdehnungen mit Biegung verwenden auch die periodischen Randbedingungen mit Biegung einen zusätzlichen Referenzpunkt. Die Verschiebungen der rechten und oberen Knoten i

$$\begin{cases} \Delta u(u_i, v_i) = (u_i - u_j) \cdot \varepsilon_{uu} + (v_i - v_j) \cdot \varepsilon_{uv} + (u_i - u_j) \cdot (v_i - v_j) \cdot k'_u + \Delta u(u_j, v_j) \\ \Delta v(u_i, v_i) = (v_i - v_j) \cdot \varepsilon_{vv} + (u_i - u_j) \cdot \varepsilon_{vu} + \Delta v(u_j, v_j) \end{cases} \quad (3.30)$$

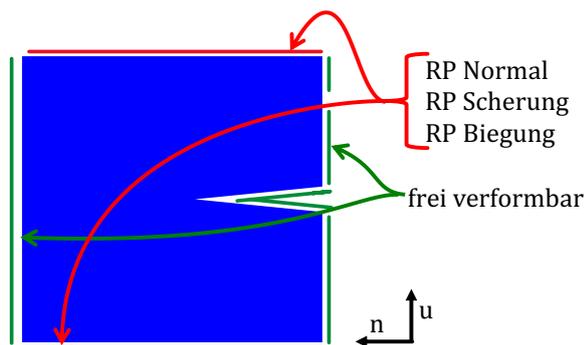
sind wiederum Funktionen der freien Verschiebungen der linken und unteren Knoten j . Ein zusätzlicher Term bildet die Biegung k'_u ab, wobei ebenfalls nur die horizontale u-Komponente berücksichtigt wird und die vertikale v-Komponente vernachlässigt und Null gesetzt wird.

Für die Risszelle eignen sich weder Einheitsdehnungen mit Biegung noch periodische Randbedingungen mit Biegung. Wie in Abbildung 3.25a dargestellt ist die Seite, auf der ein Riss in die Zelle wächst, frei verformbar und die Referenzpunktverschiebungen können nur auf die obere und untere Seite sowie im 3D-Fall noch auf die vordere und hintere Seite gekoppelt werden.

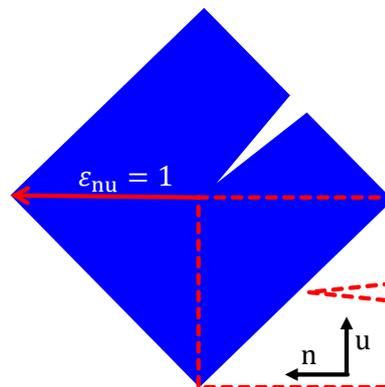
Periodische Randbedingungen können die Scherung ε_{nu} nicht abbilden, wenn die linke und rechte Seite frei verformbar sind. Abbildung 3.25b zeigt, dass die Scherung ε_{un} nur zu einer Rotation führt. Dank der linearisierten Geometrie treten bei der Rotation keine Spannungen auf und die Dehnungsenergie Π_{in} ist 0 mJ.

Die Einheitsdehnungen können zwar die Scherung ε_{nu} abbilden, jedoch ist das Verschiebungsfeld fest vorgegeben, sodass sich die eingespannten oberen und unteren Ränder, wie in Abbildung 3.25c dargestellt, bei einer Dehnung ε_{uu} nicht verformen können. Der Poisson-Effekt zieht dafür die Mitte der Risszelle zusammen, weil die linke und die rechte Seite nicht eingespannt sind. An den oberen und unteren Ecken treten außerdem noch Spannungssingularitäten auf. Die Dehnungsenergie Π_{in} wird bei diesem Versuch deutlich überschätzt.

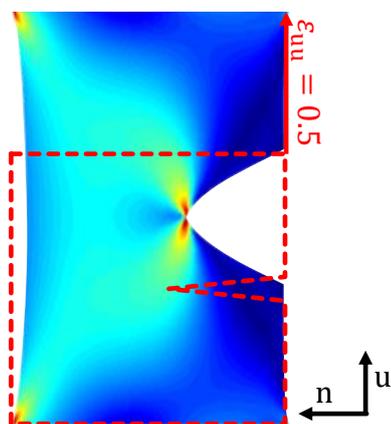
Abbildung 3.25d stellt eine mögliche Lösung dar, die periodische Randbedingungen verwendet und durch eine zusätzliche Bedingung verhindert, dass die Risszelle rotiert. Allerdings schlug die Implementierung mit „constraint equations“ in Abaqus fehl.



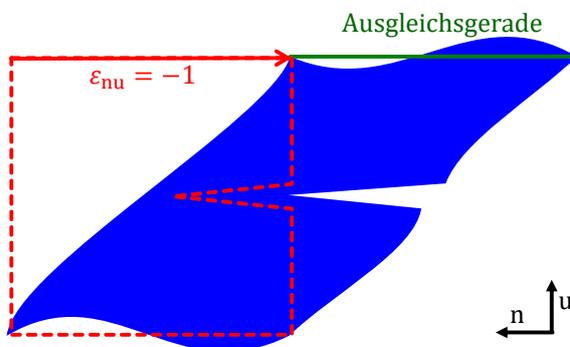
(a) Für plausible Ergebnisse muss sich der Riss frei verformen können. Auf der Rissseite können also keine Randbedingungen aufgebracht werden. Die Referenzpunktverschiebungen sind nur an die seitlichen Flächen gekoppelt.



(b) Die Scherung $\varepsilon_{nu} = 1$ führt bei periodischen Randbedingungen zu einer nicht zweckmäßigen Rotation.



(c) Die Einheitsdehnungen bei der Normaldehnung $\varepsilon_{uu} = 0.5$ verhindern die Querkontraktion an der oberen und unteren Seite. Das führt zu einer Spannungsüberhöhung an den Ecken.



(d) Die periodischen Randbedingungen brauchen eine zusätzliche Bedingung, um eine Rotation wie in Abbildung 3.25b zu verhindern. Eine Ausgleichsgerade, bei der die Steigung Null gesetzt wird, würde die Rotation verhindern ohne die Querkontraktion wie in Abbildung 3.25c zu beeinträchtigen.

Abbildung 3.25: Probleme bei verschiedenen Randbedingungen

Dabei würde eine Ausgleichsgerade $\Delta u(n) = \beta_0 + n \cdot k'_u$ mit der Methode der kleinsten Quadrate die Knoten-Verschiebungen Δu_ζ am oberen Rand approximieren. Die Methode der kleinsten Quadrate löst dazu das lineare Gleichungssystem

$$\begin{bmatrix} \sum_\zeta 1 & \sum_\zeta n_\zeta \\ \sum_\zeta n_\zeta & \sum_\zeta n_\zeta^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_0 \\ k'_u \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \sum_\xi \Delta u_\xi \\ \sum_\xi n_\xi \cdot \Delta u_\xi \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (3.31)$$

wobei ξ, ζ, ς die Indizes der Freiheitsgrade am oberen Rand sind, die die Δu -Verschiebung beschreiben. Die Positionen der Knoten n_ζ sind im Vorhinein bekannt, die Verschiebungen Δu_ξ ergeben sich aus der FEM-Simulation. Die Finite Element Methode löst dafür das lineare Gleichungssystem $KU = F$. Die globale Steifigkeitsmatrix K multipliziert mit dem gesuchten globalen Verschiebungsvektor $U = [\Delta u, \Delta v, \dots]$ ergibt den globalen Lastvektor F . Um die beiden linearen Gleichungssysteme zu kombinieren, werden im Gleichungssystem der

$$\left[\begin{array}{c|c} K_{ij} & K_{i\xi} \\ \hline K_{\zeta j} & K_{\zeta\xi} \end{array} \right] \left[\begin{array}{c} U_j \\ \Delta u_\xi \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} F_i \\ F_\zeta \end{array} \right] \quad (3.32)$$

die Freiheitsgrade ξ, ζ, ς , die am oberen Rand die Δu -Verschiebung beschreiben und durch die Ausgleichsgerade approximiert werden, von den restlichen Freiheitsgraden i, j getrennt angeschrieben. Das zusammengefügte Gleichungssystem

$$\left[\begin{array}{cc|cc} K_{ij} & K_{i\xi} & 0 & 0 \\ K_{\zeta j} & K_{\zeta\xi} & 0 & 0 \\ \hline 0 & -1 & \sum_\varsigma 1 & \sum_\varsigma n_\varsigma \\ 0 & -n_\xi & \sum_\varsigma n_\varsigma & \sum_\varsigma n_\varsigma^2 \end{array} \right] \left[\begin{array}{c} U_j \\ \Delta u_\xi \\ \beta_0 \\ k'_u \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} F_i \\ F_\zeta \\ 0 \\ 0 \end{array} \right] \quad (3.33)$$

ist nicht mehr symmetrisch. Wenn die Biegung k'_u Null gesetzt wird, kann nun eine Scherung ε_{nu} aufgebracht werden, ohne dass die Zelle rotiert.

Die Lösung mit der Ausgleichsgerade wäre zwar elegant, aber da sie nicht funktioniert, werden stattdessen gemischte Randbedingungen verwendet, um die in den Abbildungen 3.25b und 3.25c dargestellten Probleme zu umgehen. In der 3D-Risszelle werden die Δu - und Δv -Verschiebungen durch Einheitsdehnungen mit Biegung definiert. Damit wird die Rotation bei Scherungen verhindert. Periodische Randbedingungen beschreiben die Δn -Verschiebungen und erlauben eine Querkontraktion in n -Richtung. Bei einem Knoten wird zusätzlich die Δn -Verschiebung Null gesetzt, um eine Starrkörperverschiebung zu unterbinden. An den seitlichen Flächen der Risszelle werden die Verschiebungen

$$\begin{cases} \Delta u(u_i, v_i, n_i) = u_i \cdot \varepsilon_{uu} + v_i \cdot 0.5 \cdot \gamma_{uv} + u_i \cdot n_i \cdot k'_u \\ \Delta v(u_i, v_i, n_i) = v_i \cdot \varepsilon_{vv} + u_i \cdot 0.5 \cdot \gamma_{uv} + v_i \cdot n_i \cdot k'_v \\ \Delta n(u_i, v_i, n_i) = (u_i - u_j) \cdot \varepsilon_{un} + (v_i - v_j) \cdot \varepsilon_{vn} + \Delta n(u_j, v_j, n_i) \end{cases} \quad (3.34)$$

vorgegeben. Diese Gleichungen bilden dieselben Verformungen ab wie die Gleichungen 3.11, mit denen in Kapitel 3.2 die Verformungen vom lokalen Modell gefittet werden. Somit ist es egal, dass die Biegungen zu einer zusätzlichen Stauchung bzw. Dehnung führen. Die Biegungen und Dehnungen werden nämlich bereits so gefittet, dass die Dehnung der Risszelle in Summe wieder stimmt.

Das Netz der Risszelle passt an den Seitenflächen nicht so zusammen, wie es für die klassischen periodischen Randbedingungen notwendig wäre. Deshalb wird, wie zuvor anhand Abbildung 3.23 beschrieben, Schneiders Methode angewandt, um mit „Facecopy“ und „Tie“-Bedingungen die jeweiligen Seiten zu koppeln.

In Abbildung 3.26 werden die gemischten Randbedingungen mit periodischen Randbedingungen inklusive Biegung verglichen. Für den Vergleich werden je 1024 Rissmodelle mit unterschiedlichen Krümmungen, Biegungen, Dehnungen, Scherungen und maximalen Rissbreiten simuliert. Bei 262 Simulationen ist die Hauptnormalspannung an der Porenoberfläche $\sigma'_1(0 \text{ mm})$ kleiner oder gleich Null. In diesen Fällen kann kein Riss initiieren, da das Spanningskriterium nicht erfüllt ist. Außerdem können auch keine Risse eingebracht werden, weil die größte Hauptnormalspannung in die Risszelle hinein zeigt. Abbildung 3.26 stellt also nur die restlichen 762 Simulations-Ergebnisse dar.

Es konnte nur die Scherung γ_{uv} berücksichtigt werden, da die beiden anderen Scherungen ε_{un} und ε_{vn} bei periodischen Randbedingungen zu einer Rotation führen. Die periodischen

Randbedingungen bilden die Einspannungssituation besser ab als die gemischten Randbedingungen, und die Ergebnisse der periodischen Randbedingungen sollten näher an den wahren Werten liegen.

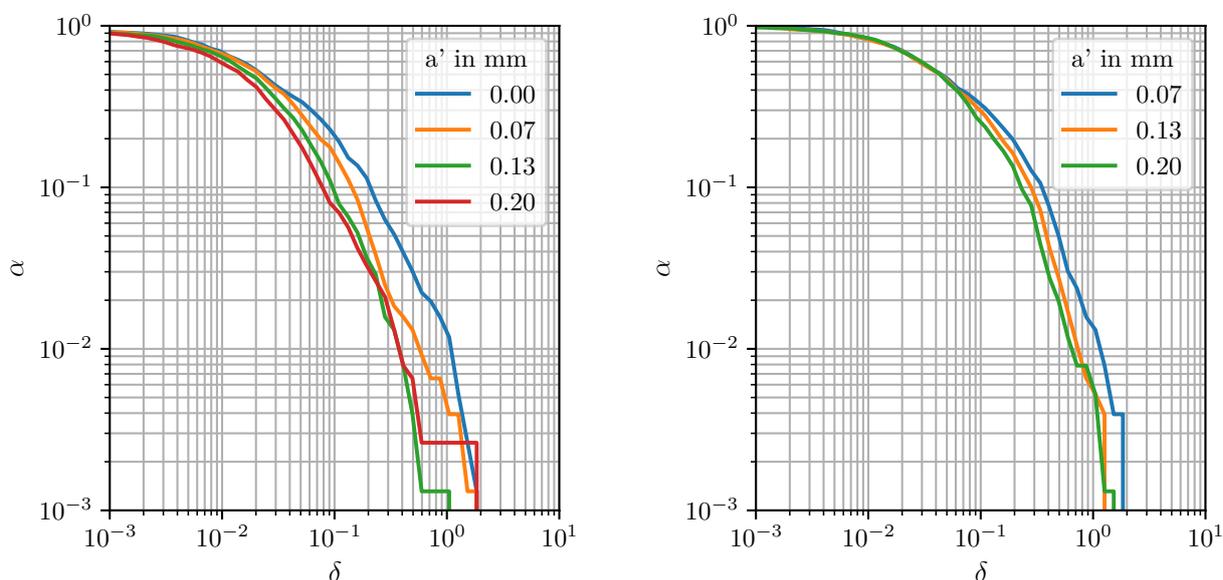
Das Quantil α ist die Wahrscheinlichkeit

$$P\left(\delta \leq \frac{|\sigma'_{1,gemischt}(a') - \sigma'_{1,periodisch}(a')|}{(|\sigma'_{1,gemischt}(a')| + |\sigma'_{1,periodisch}(a')|)/2}\right) = \alpha \quad (3.35)$$

bzw.

$$P\left(\delta \leq \frac{|G'_{gemischt}(a') - G'_{periodisch}(a')|}{(G'_{gemischt}(a') + G'_{periodisch}(a'))/2}\right) = \alpha, \quad (3.36)$$

dass die relative Abweichung zwischen den gemischten und den periodischen Randbedingungen größer als δ ist (Irrtumswahrscheinlichkeit). In Abbildung 3.26a sind die Abweichungen der Hauptnormalspannungen bei verschiedenen Tiefen a' aufgetragen und Abbildung 3.26b zeigt die Abweichungen für die Energiefreisetzungsrate.



$$(a) P\left(\delta \leq \frac{|\sigma'_{1,gemischt}(a') - \sigma'_{1,periodisch}(a')|}{(|\sigma'_{1,gemischt}(a')| + |\sigma'_{1,periodisch}(a')|)/2}\right) = \alpha \quad (b) P\left(\delta \leq \frac{|G'_{gemischt}(a') - G'_{periodisch}(a')|}{(G'_{gemischt}(a') + G'_{periodisch}(a'))/2}\right) = \alpha$$

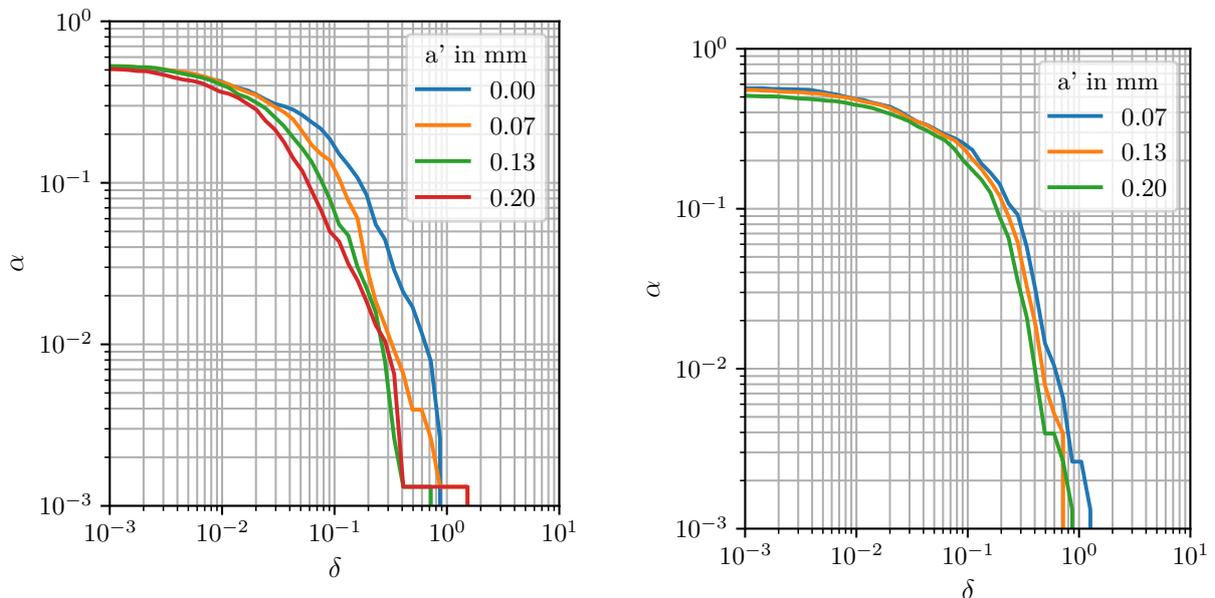
Abbildung 3.26: Vergleich von periodischen Randbedingungen und gemischten Randbedingungen. Das Quantil α ist die Wahrscheinlichkeit, dass die relative Abweichung zwischen periodischen und gemischten Randbedingungen größer als δ ist. Deformationen, die bei periodischen Randbedingungen zu einer Rotation wie in Abbildung 3.25b führen, werden Null gesetzt.

Bei einem Quantil von $\alpha = 0.5$ beträgt in Abbildung 3.26a die relative Abweichung $\delta \approx 0.02$. In 50% der Fälle weichen die Hauptnormalspannungen also um mehr als 2% voneinander ab und in den anderen 50% der Fälle ist die Abweichung kleiner als 2%. Bei einem Quantil von $\alpha = 0.05$ weichen in 5% der Fälle die Hauptnormalspannungen um mehr als 20% ($\delta \approx 0.2$) voneinander ab und bei einer Tiefe von $a' = 0$ mm weichen in 5% der Fälle die Hauptnormalspannungen sogar um mehr als 35% voneinander ab. Die unterschiedlichen Randbedingungen wirken sich also insbesondere bei geringen Tiefen in großen relativen Abweichungen aus.

Die Energiefreisetzungsrates bei einer Tiefe von $a' = 0$ mm ist bei beiden Randbedingungen Null. Allerdings sind auch bei der Energiefreisetzungsrates die relativen Abweichungen größer, je kleiner der Riss ist. In Abbildung 3.26b beträgt bei einem Quantil von $\alpha = 0.05$ und einer Tiefe von $a' = 0.07$ mm die relative Abweichung $\delta = 0.5$, während bei einer größeren Tiefe von $a' = 0.20$ mm die relative Abweichung mit $\delta = 0.31$ geringer ist. Das bedeutet, dass in 95% der Fälle die relative Abweichung zwischen den gemischten und den periodischen Randbedingungen bei einer Tiefe von $a' = 0.07$ mm kleiner als 50% ist, während die Ergebnisse bei einer Tiefe von $a' = 0.20$ mm in 95% der Fälle um weniger als 31% voneinander abweichen.

Diese Vergleiche zeigen, dass die Randbedingungen einen erheblichen Einfluss auf die Hauptnormalspannung und auf die Energiefreisetzungsrates haben. Um zu verhindern, dass eine zu geringe Spannung oder Energiefreisetzungsrates und dadurch eine zu späte Rissinitiierung vorhergesagt wird, werden Sicherheitsfaktoren für die kritische Hauptnormalspannung $\sigma'_{1,krit}$ und die kritische Energiefreisetzungsrates G'_{krit} berechnet.

Abbildung 3.27 gibt die Irrtumswahrscheinlichkeit α an. Ein Irrtum liegt vor, wenn die Hauptnormalspannung bzw. die Energiefreisetzungsrates bei den gemischten Randbedingungen plus einer Sicherheit kleiner als bei den periodischen Randbedingungen ist.



$$(a) P\left(\delta < \frac{\sigma'_{1,periodisch}(a') - \sigma'_{1,gemischt}(a')}{|\sigma'_{1,gemischt}(a')|}\right) = \alpha$$

$$(b) P(G'_{gemischt}(a')(1 + \delta) < G'_{periodisch}(a')) = \alpha$$

Abbildung 3.27: Irrtumswahrscheinlichkeit α , dass die gemischten Randbedingungen weniger kritische Ergebnisse vorhersagen als die periodischen Randbedingungen. Der Sicherheitsfaktor $S = 1 + \delta$ ist Eins plus der relativen Abweichung δ .

Mit einem Sicherheitsfaktor kann die Unsicherheit der Berechnungsmethode kompensiert werden, indem die rechnerische erlaubte Last verringert wird. Wenn beispielsweise verlangt wird, dass ein Irrtum ($\sigma'_{1,periodisch} > \sigma'_{1,gemischt}$ bzw. $G'_{periodisch} > G'_{gemischt}$) nur in 5% ($\alpha=0.05$) der Fälle vorliegen darf, kann anhand von Abbildung 3.27a für die Hauptnormalspannung eine relative Abweichung von $\delta = 0.25$ abgelesen werden und ein Sicherheitsfaktor von $S_{BC,0.05}^{\sigma} = 1 + \delta = 1 + 0.25 = 1.25$ berechnet werden. Die korrigierte kritische Hauptnormalspannung ist

$$\sigma'_{1,krit,korrigiert} = \frac{\sigma'_{1,krit}}{S_{BC,0.05}^{\sigma}} = \frac{\sigma'_{1,krit}}{1.25}. \quad (3.37)$$

Analog zur Hauptnormalspannung wird der Sicherheitsfaktor $S_{BC,0.05}^G = 1 + 0.35 = 1.35$ für die Energiefreisetzungsrates anhand von Abbildung 3.27b bei einer Irrtumswahrscheinlichkeit von 5% ermittelt. Die korrigierte kritische Energiefreisetzungsrates

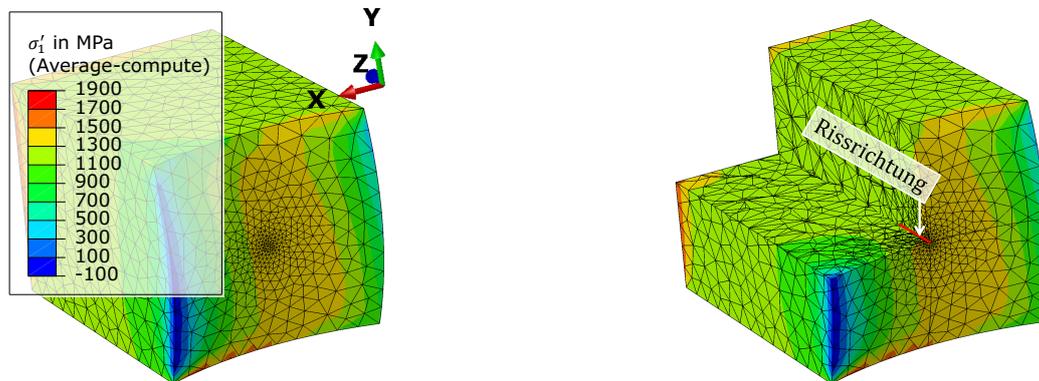
$$G_{krit,korrigiert} = \frac{G_{krit}}{S_{a'_{max}} \cdot S_{BC,0.05}^G} = \frac{G_{krit}}{1.05 \cdot 1.35} \quad (3.38)$$

berücksichtigt nun schon die zwei Sicherheitsfaktoren $S_{a'_{max}}$ und $S_{BC,0.05}^G$.

Netzstudie

In der ersten Simulation wird die Hauptnormalspannung $\sigma'_1(a')$ entlang der Rissrichtung bestimmt. Die Rissrichtung beginnt in der Mitte der Porenoberfläche und geht normal zur Oberfläche in die Zelle hinein. Abbildung 3.28 zeigt das Ergebnis einer Simulation für die Bestimmung der Hauptnormalspannung. Aus Abbildung 3.28a ist ersichtlich, dass das Netz in der Mitte der Porenoberfläche, wo die Rissrichtung beginnt, besonders fein ist.

In Abbildung 3.28b ist die Risszelle entlang der Rissrichtung aufgeschnitten. Das Netz ist nur an der Oberfläche sehr fein, um Kerbwirkungen besser abbilden zu können. Je weiter der Riss in die Zelle geht, desto weniger Einfluss haben Kerbwirkungen und desto gleichmäßiger ist der Spannungsverlauf. Ein weiterer Grund für ein besonders feines Netz an der Oberfläche ist, dass mit der hier ermittelten Hauptnormalspannung $\sigma'_1(0 \text{ mm})$ die Orientierung der Rissfläche festgelegt wird und dieser Vorgang möglichst genau sein sollte.



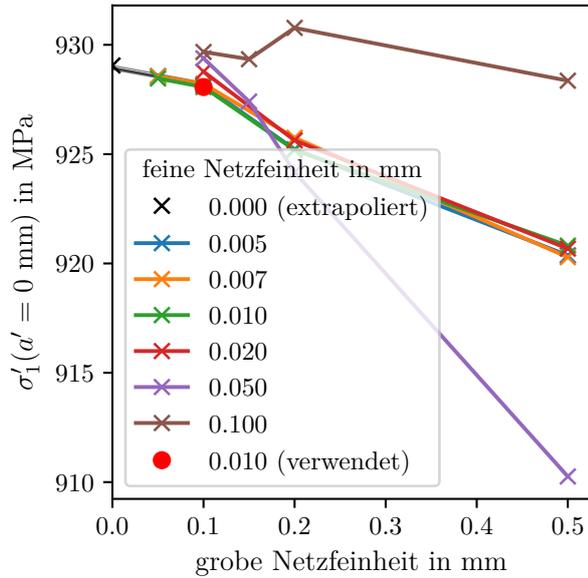
(a) Rissmodell ohne Riss-Partitionen mit feiner Netzfeinheit in der Mitte und grober Netzfeinheit am Rand.

(b) Rissmodell ohne Riss-Partitionen entlang der rot eingezeichneten Rissrichtung aufgeschnitten.

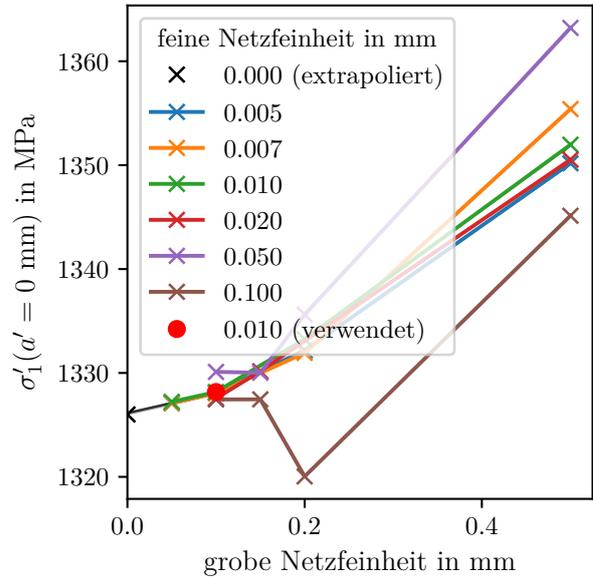
Abbildung 3.28: Beispiel einer Risszelle aus der Simulationsserie für die Ermittlung der größten Hauptnormalspannung $\sigma'_1(a')$.

Die feine Netzfeinheit beschreibt die Elementgröße in der Mitte der Porenoberfläche. Am Rand wird das Netz durch die grobe Netzfeinheit definiert. Die beiden Netzfeinheiten werden anhand von Netzstudien ermittelt. Die Abbildungen 3.29a und 3.29b zeigen die Ergebnisse der Netzstudie für zwei unterschiedliche Belastungen \mathcal{A} und \mathcal{B} .

Beide Belastungen finden unter reinem Zug $\varepsilon_{uu} = 1$ statt. Die Geometrie ist bei allen Simulationen linearisiert. Bei der Belastung \mathcal{A} ist die Krümmung an der Porenoberfläche konkav $c'_{uu} = -0.2/\text{mm}$, wohingegen bei der Belastung \mathcal{B} die Krümmung konvex $c'_{uu} = 0.2/\text{mm}$ ist. Bei verschiedenen Netzfeinheiten weichen die Spannungen an der Porenoberfläche am



(a) Belastung \mathcal{A} : Konkave Krümmung unter Zug. Die verwendete Konfiguration weicht um 0.11% vom extrapolierten Wert ab.



(b) Belastung \mathcal{B} : Konvexe Krümmung unter Zug. Die verwendete Konfiguration weicht um 0.15% vom extrapolierten Wert ab.

Abbildung 3.29: Netzstudie für die Hauptnormalspannung an der Porenoberfläche $\sigma'_1(a = 0 \text{ mm})$. Ausgehend von den sechs feinsten Konfigurationen wird mit einer bilinearen Regression die Hauptnormalspannung auf eine Netzfeinheit von Null extrapoliert.

stärksten voneinander ab. Deshalb wird dort die Hauptnormalspannung für die Netzstudie ausgewertet. Mit einer bilinearen Regression werden die Ergebnisse ausgehend von den sechs feinsten Konfigurationen auf eine Netzfeinheit von 0 mm extrapoliert.

In der Mitte der Porenoberfläche wird eine feine Netzfeinheit von 0.01 mm und am Rand der Risszelle wird eine grobe Netzfeinheit von 0.1 mm verwendet. Unter der Belastung \mathcal{A} weicht die Hauptnormalspannung um 0.11% vom extrapolierten Wert ab. Unter der Belastung \mathcal{B} ist die Abweichung mit 0.15% ebenfalls sehr gering.

Nachdem durch die erste Simulation die Hauptnormalspannung an der Porenoberfläche bestimmt ist und die Risspartitionen normal auf diese Hauptnormalspannungen in die Risszelle eingebracht sind, kann die Energiefreisetzungsrate $G'(a')$ bestimmt werden.

Eine geöffnete Risspartition ist in Abbildung 3.30a dargestellt. Das Netz ist an den seitlichen Flächen sehr grob und wird erst in der Nähe des Risses feiner. Abbildung 3.30b zeigt die Spannungssituation auf der Rissfläche. Die Spannung an der Rissfront ist sehr hoch, weshalb nur hier ein feines Netz notwendig ist. Die Farbskala der Mises-Spannung ist logarithmisch aufgetragen, um die Spannungsüberhöhung abbilden zu können.

Für die Energiefreisetzungsrate $G'(a')$ müssen mehrere Risslängen simuliert werden. Dazu werden Risspartitionen in das Netz eingebracht, die eine nach der anderen geöffnet werden. Die Risspartitionen sind in Abbildung 3.30c rot umrahmt. Wichtig ist, dass alle Risspartitionen im selben Netz eingebracht werden und nicht für jede Risspartition ein neues Netz generiert wird.

Für die Netzstudie wird die Energiefreisetzungsrate bei der maximalen Risslänge a'_{max} ausgewertet, da hier die absoluten Abweichungen am größten sind

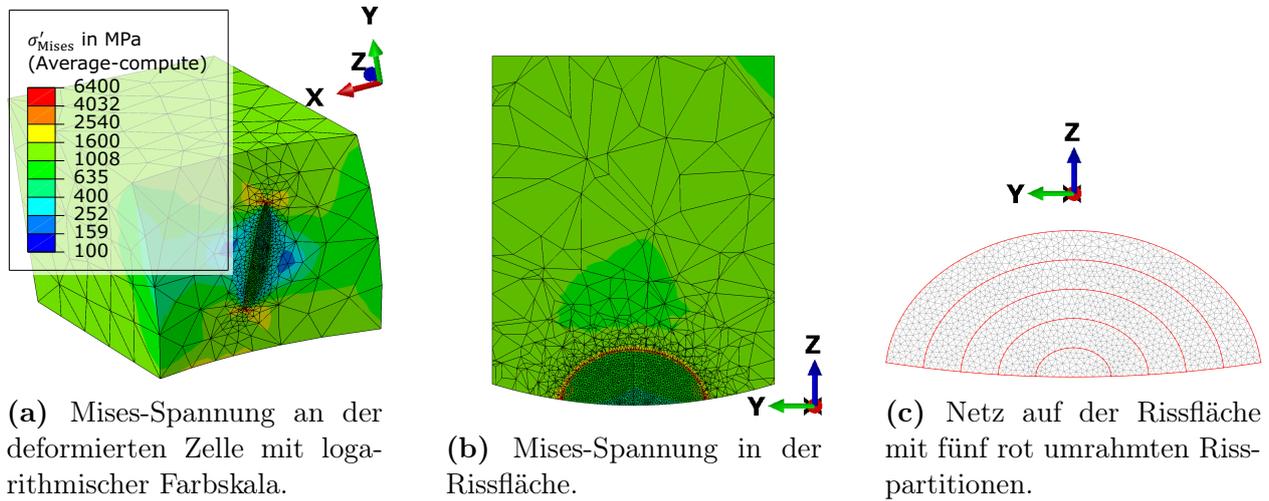


Abbildung 3.30: Beispiel einer Risszelle aus der Simulationsserie für die Ermittlung der Energiefreisetzungsrate $G'(a')$. Die größte Risspartition ist geöffnet.

Eine feine Netzfeinheit wird allen Risspartitionen zugewiesen, wohingegen die grobe Netzfeinheit das Netz am Rand der Risszelle beschreibt. Die Netzfeinheiten für diese Simulationen unterscheiden sich von den Netzfeinheiten der ersten Simulation für die Ermittlung der Hauptnormalspannung.

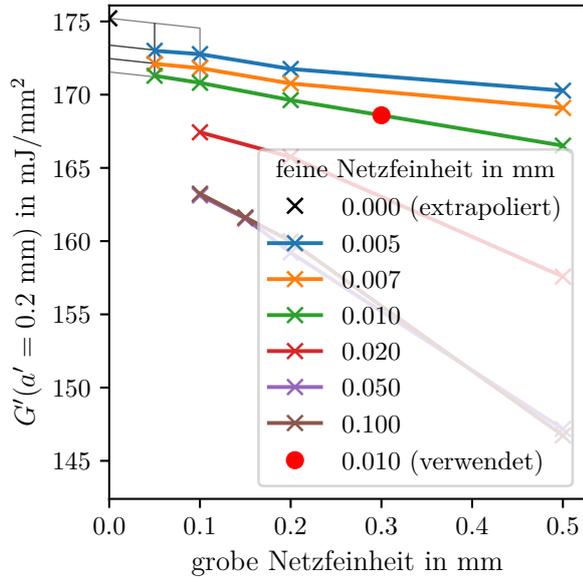
Die Abbildungen 3.31a und 3.31b stellen die Ergebnisse der Netzstudie für die Energiefreisetzungsrate unter der Belastung \mathcal{A} sowie unter der Belastung \mathcal{B} dar. Die Energiefreisetzungsrate bei dem größtmöglichen Riss $G'(0.2 \text{ mm})$ wird mit einer bilinearen Regression basierend auf den sechs genauesten Konfigurationen auf eine Netzfeinheit von 0 mm extrapoliert.

Die verwendete feine Netzfeinheit an den Risspartitionen von 0.01 mm und die grobe Netzfeinheit am Rand der Risszelle von 0.3 mm führen zu einer Abweichung von 3.8% unter der Belastung \mathcal{A} und 2.6% unter der Belastung \mathcal{B} . Die grobe Netzfeinheit hat einen eher geringen Einfluss und kann daher sehr grob gewählt werden. Die feine Netzfeinheit muss die Verschiebungen an der Rissfront akkurat abbilden und sollte so fein wie möglich sein.

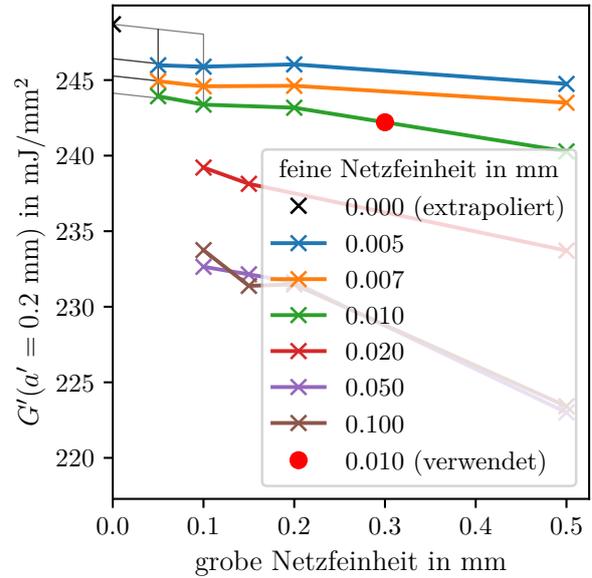
Für die Auslegung werden Sicherheitsfaktoren abgeschätzt, die sich aus Vereinfachungen des Modells ergeben. Je höher die Energiefreisetzungsrate ist, desto geringer muss laut dem kombinierten Kriterium die Last sein, bei der Rissinitiiierung auftritt. Da die Energiefreisetzungsrate im Vergleich zum extrapolierten Wert unterschätzt wird und somit zu einer weniger konservativen Auslegung führt, kann der Fehler durch eine kleinere kritische Energiefreisetzungsrate G_{krit} korrigiert werden. Die korrigierte kritische Energiefreisetzungsrate

$$G_{krit,korrigiert} = \frac{G_{krit}}{S_{a'_{max}} \cdot S_{BC,0.05}^G \cdot S_{Netz}} = \frac{G_{krit}}{1.05 \cdot 1.35 \cdot 1.04} \quad (3.39)$$

verwendet neben den bereits bekannten Sicherheitsfaktoren $S_{a'_{max}} = 1.05$ und $S_{BC,0.05}^G = 1.35$ zusätzlich einen Sicherheitsfaktor für das Netz von beispielsweise $S_{Netz} = 1.04$.



(a) Belastung \mathcal{A} : Konkave Krümmung unter Zug. Die verwendete Konfiguration weicht um 3.8% vom extrapolierten Wert ab.



(b) Belastung \mathcal{B} : Konvexe Krümmung unter Zug. Die verwendete Konfiguration weicht um 2.6% vom extrapolierten Wert ab.

Abbildung 3.31: Netzstudie für die Energiefreisetzungsrate bei der maximalen Risslänge $G'(a'_{max})$. Ausgehend von den sechs feinsten Konfigurationen wird die Energiefreisetzungsrate auf eine Netzfeinheit von Null mit einer bilineare Regression extrapoliert.

3.3.3 Statistisches Modell

Das statistische Modell nimmt analog zum FE-Modell die zehn Parameter c'_{uu} , c'_{vv} , ε_{uu} , ε_{vv} , γ_{uv} , ε_{un} , ε_{vn} , k'_u , k'_v , b'_{max} als Eingabe und berechnet die Hauptnormalspannung $\sigma'_1(a')$ und die Energiefreisetzungsrate $G'(a')$.

Abbildung 3.32 stellt die Vorgehensweise zur Erstellung des statistischen Modells dar. In einer Versuchsreihe werden mit FE-Simulationen die Spannungen $\sigma'_{ij}(a')$ und die Energiefreisetzungsrate $G'(a')$ für verschiedene Parameter ermittelt und in eine Datenbank (DB) geschrieben. Aufgrund von Symmetrien müssen nur für vier Spannungen und für die Energiefreisetzungsrate Vorhersagemodelle entwickelt werden. Jedes Modell besteht aus zwei Funktionen. Die erste Funktion sagt die Varianz (Var) und die zweite Funktion den Erwartungswert (EW) voraus. Aus dem vorhergesagten Spannungstensor σ'_{ij} wird die Hauptnormalspannung σ'_1 und die Richtung des ξ - ζ -n Hauptspannungssystems ermittelt. Der Erwartungswert der Energiefreisetzungsrate ergibt sich unter anderem aus den Krümmungen $c'_{\xi\xi}$, $c'_{\zeta\zeta}$, $c'_{\xi\zeta}$, die in das ξ - ζ -n Hauptspannungssystem rotiert worden sind, und der größten Hauptnormalspannung, die an vier Positionen entlang dem Risspfad ausgewertet wird.

Zuerst wird für die Versuchsreihe ein Versuchsplan, auch „design of experiment“ (DOE) genannt, entworfen. In Abbildung 3.32 hat dieser Versuchsplan drei Dimensionen und acht Punkte. Jeder Punkt steht für einen Versuch. Die Koordinate des Punktes definiert die drei Parameter. Der tatsächlich verwendete Versuchsplan hat zehn Parameter und definiert mehr als 16000 Versuche. Zur besseren Übersicht werden repräsentativ für die zehn Parameter c'_{uu} , c'_{vv} , ε_{uu} , ε_{vv} , γ_{uv} , ε_{un} , ε_{vn} , k'_u , k'_v , b'_{max} nur die drei Parameter ε_{uu} , c'_{uu} und b'_{max} dargestellt. Beispielsweise hat der orange Punkt im Versuchsplan die Koordinate $\varepsilon_{uu} = 1$, $c'_{uu} = -1/\text{mm}$ und $b'_{max} = 0.2 \text{ mm}$.

Zusätzlich wird auch ein Vorhersageintervall berechnet, das angibt wie groß die Abweichung δ zwischen dem geschätzten Wert $\hat{y}(x_{i,j})$ und dem Ergebnis einer neuen FE-Simulation y_i mit der Irrtumswahrscheinlichkeit

$$P(|\hat{y}(x_{i,j}) - y_i| \leq \delta) = \alpha \quad (3.41)$$

ist.

Die größte Hauptnormalspannung kann nicht direkt mit einem linearen Gleichungssystem vorhergesagt werden. Stattdessen werden sechs Spannungen im symmetrischen Spannungstensor σ'_{ij} vorhergesagt und daraus wird die größte Hauptnormalspannung durch Lösen des Eigenwertproblems berechnet. Es ist jedoch nicht notwendig, für alle sechs Spannungen ein eigenes Vorhersagemodell zu entwickeln, da eine Symmetrie ausgenutzt werden kann. Wenn die Zelle um 90° um die n-Achse gedreht wird, steht die v-Richtung dort, wo zuvor die u-Richtung war. Aus dieser Rotation ergeben sich die transformierten Werte.

$$\text{Eingabe: } \begin{cases} c'_{uu} \rightsquigarrow c'_{vv} & c'_{vv} \rightsquigarrow c'_{uu} \\ \varepsilon_{uu} \rightsquigarrow \varepsilon_{vv} & \varepsilon_{vv} \rightsquigarrow \varepsilon_{uu} \\ \varepsilon_{un} \rightsquigarrow \varepsilon_{vn} & \varepsilon_{vn} \rightsquigarrow \varepsilon_{un} \\ k'_u \rightsquigarrow k'_v & k'_v \rightsquigarrow k'_u \\ \gamma_{uv} \rightsquigarrow -\gamma_{uv} \end{cases} \quad \text{Ausgabe: } \begin{cases} \sigma'_{uu} \rightsquigarrow \sigma'_{vv} & \sigma'_{vv} \rightsquigarrow \sigma'_{uu} \\ \sigma'_{un} \rightsquigarrow \sigma'_{vn} & \sigma'_{vn} \rightsquigarrow \sigma'_{un} \\ \sigma'_{uv} \rightsquigarrow -\sigma'_{uv} \end{cases} \quad (3.42)$$

Die Spannung σ'_{vv} bzw. σ'_{un} kann mit dem Vorhersagemodell für σ'_{uu} bzw. σ'_{vn} berechnet werden, indem die transformierten Eingabeparameter

$$\begin{cases} \sigma'_{vv}(c'_{uu}, c'_{vv}, \varepsilon_{uu}, \varepsilon_{vv}, \varepsilon_{un}, \varepsilon_{vn}, k'_u, k'_v, \gamma_{uv}) = \sigma'_{uu}(c'_{vv}, c'_{uu}, \varepsilon_{vv}, \varepsilon_{uu}, \varepsilon_{vn}, \varepsilon_{un}, k'_v, k'_u, -\gamma_{uv}) \\ \sigma'_{un}(c'_{uu}, c'_{vv}, \varepsilon_{uu}, \varepsilon_{vv}, \varepsilon_{un}, \varepsilon_{vn}, k'_u, k'_v, \gamma_{uv}) = \sigma'_{vn}(c'_{vv}, c'_{uu}, \varepsilon_{vv}, \varepsilon_{uu}, \varepsilon_{vn}, \varepsilon_{un}, k'_v, k'_u, -\gamma_{uv}) \end{cases} \quad (3.43)$$

eingesetzt werden. Die vier Vorhersagemodelle für die Spannungen σ'_{uv} , σ'_{nn} , σ'_{vn} , σ'_{uu} reichen aus, um den kompletten Spannungstensor σ'_{ij} vorherzusagen.

Jedes Vorhersagemodell besteht aus zwei Funktionen, die mit Regressionen an die Ergebnisse angepasst werden. Die erste Funktion sagt die Varianz (Var) und die zweite Funktion sagt den Erwartungswert (EW) vorher.

In Abbildung 3.32 ist beim Vorhersagemodell für die Spannung σ'_{uu} dargestellt, wie die Varianz-Funktion erzeugt wird. Für die Spannung gilt das Superpositionsprinzip $\sigma(\lambda \cdot \varepsilon) = \lambda \cdot \sigma(\varepsilon)$. Die FE-Simulationen weichen aufgrund von unterschiedlichen Netzen oder numerischen Fehler etwas voneinander ab. Auch für diese Fehler e_σ gilt analog zu den Spannungen das Superpositionsprinzip $e_\sigma(\lambda \cdot \varepsilon) = \lambda \cdot e_\sigma(\varepsilon)$. Daraus folgt, dass die blauen Beobachtungspunkte umso stärker streuen, je größer die Last ε'_{uu} ist. Dieser Effekt wird Heteroskedastizität genannt.

Heteroskedastizität tritt bei den Lastparametern ε_{uu} , ε_{vv} , γ_{uv} , ε_{un} , ε_{vn} , k'_u , k'_v und bei der Tiefe a' auf. Die Streuung ist bei einer Tiefe von $a' = 0$ mm an der Porenoberfläche meist größer als in der Zelle bei größeren Tiefen. Im Gegensatz zu den superpositionierbaren Lastparametern gibt es aber keinen linearen Zusammenhang zwischen der Streuung und der Tiefe. Für die Geometrie-Parameter c'_{uu} , c'_{vv} wird die Varianz als konstant angenommen. Die Beobachtungen sollten beispielsweise bei einer Krümmung von $c'_{uu} = 0/$ mm gleich viel streuen wie bei einer Krümmung von $c'_{uu} = 1/$ mm. Die Varianz-Funktion ignoriert die Geometrie-Parameter.

Wenn Heteroskedastizität auftritt, ist ein Vorhersageintervall ungültig. Die Varianz-Funktion kann die Heteroskedastizität jedoch eliminieren, wodurch das Vorhersageintervall seine

Gültigkeit behält. In Abbildung 3.32 fittet dazu zuerst die blaue Linie die Beobachtungen aus den FE-Simulationen. Die quadrierten Abweichungen von der blauen Linie werden durch die quadratische Varianz-Funktion angepasst. Nun kann die Varianz an jeder Stelle vorhergesagt werden. Wenn die Varianz größer wird, wird auch das Vorhersageintervall breiter und wenn die Varianz kleiner wird, gilt das wiederum auch für das Vorhersageintervall.

Mit der Varianz-Funktion wird auch die Erwartungswert-Funktion verbessert. Bei Heteroskedastizität liefert eine Regression zwar erwartungstreue Schätzwerte, die aber mit großen Unsicherheiten behaftet sind. Wenn mit der Varianz-Funktion die Heteroskedastizität eliminiert wird, ergeben sich bessere Schätzwerte mit geringeren Unsicherheiten. Die Regression für den Erwartungswert nimmt alle neun Parameter c'_{uu} , c'_{vv} , ε_{uu} , ε_{vv} , γ_{uv} , ε_{un} , ε_{vn} , k'_u , k'_v sowie die Tiefe a' und gibt einen Schätzwert für die Spannung zurück. In Abbildung 3.32 ist der Erwartungswert nun beispielsweise auch eine Funktion des Geometrie-Parameters c'_{uu} .

Nachdem die Varianz- und Erwartungswert-Funktionen der vier Spannungen bekannt sind, kann die Varianz und der Erwartungswert für den Spannungstensor vorhergesagt werden. Die größte Hauptnormalspannung σ'_1 ist der größte Eigenwert des geschätzten Spannungstensors. Die Varianz der größten Hauptnormalspannung wird mit der gaußschen Fehlerfortpflanzung aus den Varianzen der Spannungskomponenten berechnet.

Das Vorhersagemodell für die Energiefreisetzungsrates G' unterscheidet sich von den Vorhersagemodellen für die Spannungen. Beispielsweise kann kein Riss in die Zelle eingebracht werden, wenn die größte Hauptnormalspannung an der Oberfläche kleiner oder gleich Null ist. Diese Beobachtungen müssen also von der Modellanpassungen für die Energiefreisetzungsrates ausgeschlossen werden.

Außerdem gilt für die Energiefreisetzungsrates G' , die sich aus der Dehnungsenergie $\Pi_{in} \propto \sigma \cdot \varepsilon = E \cdot \varepsilon^2$ ergibt, das quadratische Superpositionsprinzip:

$$G'(\lambda \cdot \varepsilon) = \frac{\Pi_{in,0}(\lambda \cdot \varepsilon) - \Pi_{in}(\lambda \cdot \varepsilon)}{A} = \lambda^2 \cdot \frac{\Pi_{in,0}(\varepsilon) - \Pi_{in}(\varepsilon)}{A} = \lambda^2 \cdot G'(\varepsilon) \quad (3.44)$$

Analog zur Energiefreisetzungsrates G' nimmt auch der Fehler der Energiefreisetzungsrates e_G quadratisch mit der Last zu:

$$e_G(\lambda \cdot \varepsilon) = \lambda^2 \cdot e_G(\varepsilon) \quad (3.45)$$

Für die Varianz-Funktion fittet zuerst eine quadratische Funktion die blauen Beobachtungen in Abbildung 3.32. Anschließend bildet eine Funktion vierten Grades die Varianz-Funktion, die die quadrierten Fehler e_G^2 anpasst.

Den Erwartungswert der Energiefreisetzungsrates vorherzusagen ist nicht trivial. Die Rissfläche wird so in die Risszelle eingebracht, dass sie normal auf die größte Hauptnormalspannung an der Porenoberfläche steht. Die größte Hauptnormalspannung ergibt sich aus einem Eigenwertproblem. Dadurch ist die größte Hauptnormalspannung nichtlinear und hat eine unstetige erste Ableitung. Während der Arbeit stellte sich heraus, dass eine Vorhersage mit einem linearen Gleichungssystem, das direkt die Lastparameter ε_{uu} , ε_{vv} , γ_{uv} , ε_{un} , ε_{vn} , k'_u , k'_v verwendet, sehr ungenau ist, weil nicht berücksichtigt werden kann, wie die Rissfläche in der Zelle liegt.

Wie in Abbildung 3.32 dargestellt, wird stattdessen zuerst der Spannungstensor σ_{ij} vorhergesagt. Die Eigenvektoren ξ - ζ -n des Spannungstensors bilden ein neues Koordinatensystem. Die Krümmungen c'_{uu} , c'_{vv} und die Spannungen werden in diesem Koordinatensystem

betrachtet. Aus den zwei Krümmungen c'_{uu} , c'_{vv} werden somit drei Krümmungen $c'_{\xi\xi}$, $c'_{\zeta\zeta}$, $c'_{\xi\zeta}$. Die Lastparameter werden zu den drei Hauptnormalspannungen zusammengefasst. Dabei stellt sich heraus, dass nur die größte Hauptnormalspannung $\sigma'_1(a')$ für die Vorhersage der Energiefreisetzungsrate notwendig ist und die beiden anderen Hauptnormalspannung $\sigma'_2(a')$, $\sigma'_3(a')$ vernachlässigbar sind. Die größte Hauptnormalspannung $\sigma'_1(a')$ wird dafür bei vier Tiefen $a'_i \in \{0 \text{ mm}, 0.07 \text{ mm}, 0.13 \text{ mm}, 0.2 \text{ mm}\}$ vorhergesagt und alle vier Werte werden an das Vorhersagemodell übergeben. Neben diesen vier Hauptnormalspannungs-Werten und den rotierten Krümmungen, bilden die maximale Rissbreite b'_{max} und die Tiefe a' die Eingabeparameter für das Vorhersagemodell des Erwartungswertes.

Bisher wurde die Vorgehensweise bei der Erstellung und Optimierung der Vorhersagemodelle beschrieben. Die Vorgehensweise von Vorhersagen ist in Abbildung 3.33 dargestellt und weist viele Parallelen zur Erstellung und Optimierung auf. Für eine bestimmte Tiefe a' und bestimmte Parameter c'_{uu} , c'_{vv} , ε_{uu} , ε_{vv} , γ_{uv} , ε_{un} , ε_{vn} , k'_u , k'_v , b'_{max} soll die Hauptnormalspannung $\sigma'_1(a')$ und die Energiefreisetzungsrate $G'(a')$ vorhergesagt werden. Mit allen Parametern außer der maximalen Rissbreite b'_{max} , wird der Spannungstensor σ'_{ij} durch vier Vorhersagemodelle berechnet. Die größte Hauptnormalspannung σ'_1 ergibt sich direkt aus dem Spannungstensor σ'_{ij} .

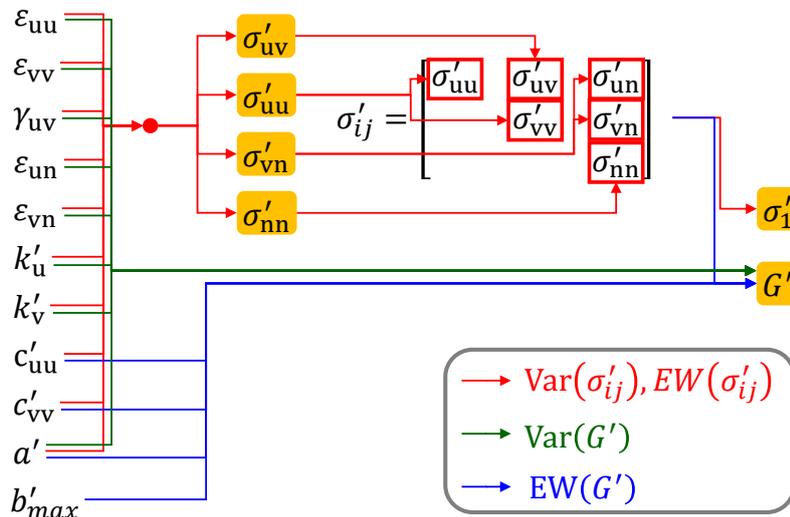


Abbildung 3.33: Vorgehensweise bei der Vorhersage. Die roten Wege werden bei der Vorhersage der Varianz und des Erwartungswertes für die größte Hauptnormalspannung σ'_1 beschrieben. Der Informationsfluss bei der Berechnung der Varianz für die Energiefreisetzungsrate ist grün eingezeichnet. Der Erwartungswert der Energiefreisetzungsrate basiert auf den blauen Pfaden, wobei zuvor der gesamte Spannungstensor σ_{ij} bei vier Tiefen ausgewertet werden muss.

Wenn ein Vorhersageintervall nachgefragt wird, wird für jede Vorhersage zusätzlich mit der Varianz-Funktion die Streuung geschätzt und mit der gaußschen Fehlerfortpflanzung die Streuung der Hauptnormalspannung σ'_1 berechnet. Die Breite des Vorhersageintervalls wird mit der geschätzten Streuung $\sqrt{\text{Var}}$ skaliert.

Um die Energiefreisetzungsrate G' vorherzusagen, muss zuerst der Spannungstensor σ_{ij} bei vier Tiefen $a'_i \in \{0 \text{ mm}, 0.07 \text{ mm}, 0.13 \text{ mm}, 0.2 \text{ mm}\}$ berechnet werden. Aus dem Spannungstensor wird die Hauptnormalspannung σ'_1 bei den vier Tiefen ermittelt. Außerdem spannen die Eigenvektoren des Spannungstensor an der Porenoberfläche das ξ - ζ -n Hauptspannungssystem auf. Die Rissfläche liegt in der ζ -n Ebene und die größte Hauptnormalspan-

nung $\sigma'_1(0 \text{ mm})$ zeigt in ξ -Richtung. Die Krümmungen c'_{uu} , c'_{vv} werden in das ξ - ζ -n Hauptspannungssystem rotiert. Mit diesen rotierten Krümmungen, den Hauptnormalspannung σ'_1 bei den vier Tiefen, der maximalen Rissbreite b'_{max} und der Tiefe a' kann die Energiefreisetzungsrates G' bei der Tiefe a' vorhergesagt werden.

Die Varianz-Funktion für die Energiefreisetzungsrates nimmt hingegen nicht die Hauptnormalspannung σ'_1 , sondern die Lastparameter ε_{uu} , ε_{vv} , γ_{uv} , ε_{un} , ε_{vn} , k'_u , k'_v sowie die Tiefe a' als Eingabeparameter. Diese Parameter sind in Abbildung 3.33 grün eingezeichnet. Mit der Varianz-Funktion kann wiederum das Vorhersageintervall skaliert und die Heteroskedastizität eliminiert werden.

In der Tabelle 3.3 sind die fünf Vorhersage-Modelle aufgelistet. Die „Lasso-Methode“ wird später erklärt und reduziert die Anzahl der Parameter. Die tabellierte Anzahl der Parameter bezieht sich auf die Erwartungswert-Funktion. Die Varianz-Funktion hat in der Regel weniger Parameter. Das Bestimmtheitsmaß R^2 liegt zwischen Null und Eins und gibt an, wie gut eine Regression die Beobachtungswerte approximiert, wobei Eins der beste Wert ist. Das Bestimmtheitsmaß wird einmal für die Daten berechnet mit denen die Regression berechnet wird (R^2) und einmal für Validierungsdaten ($R^2_{\text{Validierung}}$) angegeben.

Tabelle 3.3: Eigenschaften der Regressionsmodelle

Modellname	Parameteranzahl	R^2	$R^2_{\text{Validierung}}$
σ'_{uu}	167	0.999	0.999
σ'_{uv}	29	0.999	0.999
σ'_{un}	42	0.997	0.999
σ'_{nn}	70	0.935	0.940
G'	60	0.999	0.999

Alle Modelle nähern die Beobachtungen sehr gut an. Am schlechtesten scheidet die Spannung σ'_{nn} ab, wobei diese Spannung meistens sehr klein ist und sehr stark durch das FE-Netz beeinflusst wird. Für die Mode I Rissöffnung ist die Spannung σ'_{nn} nicht relevant. Das Bestimmtheitsmaß für die Validierungsdaten ist entgegen der Erwartung meistens etwas höher. Für die Validierungsdaten wird ein zufälliger Versuchsplan verwendet, der nicht so extreme Einstellungen trifft wie der faktorielle Versuchsplan, der zur Berechnung der Regression verwendet wird. Sowohl für den faktoriellen Versuchsplan als auch für den zufälligen Versuchsplan wird für jeden Eingabeparameter ein Wertebereich definiert. Der faktoriellen Versuchsplan legt viele Eingabeparameter auf den höchsten oder niedrigsten Wert im definierten Wertebereich fest, wohingegen der zufällige Versuchsplan die Eingabeparameter irgendwo in der Mitte festlegt. Wie die Versuchspläne genau aufgebaut sind, ist im nächsten Kapitel beschrieben.

Versuchsplan

Im Rahmen eines Experiments soll der Einfluss von kontrollierbaren Eingabeparametern auf einen Ausgabewert ermittelt werden. Der Ausgabewert kann jedoch nicht direkt beobachtet werden. Stattdessen wird ein fehlerbehafteter Ausgabewert beobachtet, der sich aus dem wahren Ausgabewert sowie aus zusätzlichen Fehlern wie beispielsweise unterschiedlichen FE-Netzen oder numerischen Fehlern zusammensetzt. Um den Einfluss zu ermitteln, werden mehrere Versuche geplant. Anschließend wird die Versuchsreihe durchgeführt, ausgewertet und der Einfluss durch eine Regression geschätzt. Die Aufgabe eines Versuchsplans ist es

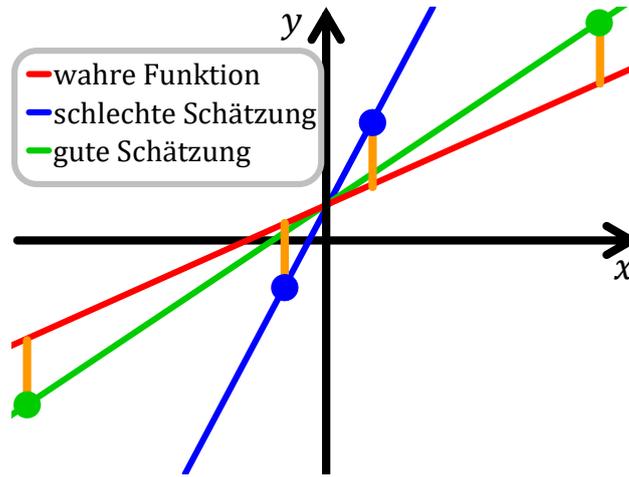


Abbildung 3.34: Die zwei Schätzungen basieren auf je zwei Beobachtungen mit denselben orangen Streuungen. Je weiter die Beobachtungen voneinander entfernt sind, desto geringer ist der Einfluss der orangen Streuungen auf die Schätzungen.

die Versuchsreihe so zu planen, dass mit möglichst wenigen Versuchen der Einfluss möglichst genau geschätzt werden kann. Dazu legt der Versuchsplan vor der Durchführung der Versuche fest, mit welchen Eingabeparametern die Versuche durchgeführt werden.

Beispielsweise könnte die Fragestellung lauten: Wie wirkt sich der Eingabeparameter x auf den Ausgabewert y aus? Mit der linearen Regression

$$\bar{y}(x) = \beta_0 \cdot 1 + \beta_x \cdot x \quad (3.46)$$

können die Gewichtungparameter β_0 und β_x berechnet werden. β_x ist der Einfluss des Eingabeparameters x auf den Ausgabewert y . Wenn unendlich viele Versuche durchgeführt werden, entsprechen die Gewichtungparameter β_0 und β_x tatsächlich den wahren Gewichtungsparemtern und der gemittelte Ausgabewert \bar{y} entspricht dem wahren gemittelten Ausgabewert. Die lineare Regression wird allerdings nicht mit unendlich vielen Eingabeparametern durchgeführt, sondern nur mit einer Stichprobe und ist somit nur eine Schätzung. Die Schätzwerte werden durch ein Dach gekennzeichnet. Die Gewichtungparameter sind also nur Schätzwerte $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_x$ und auch \hat{y} ist nur ein geschätzter Ausgabewert.

Wie aus Abbildung 3.34 ersichtlich, kann der geschätzte Ausgabewert deutlich von der wahren Funktion abweichen, wenn die Eingabeparameter x schlecht gewählt werden. Die wahre Funktion ist die Regression mit allen möglichen Eingabeparametern. Die orangen eingezeichneten Streuungen bei der schlechten Schätzung und der guten Schätzung sind gleich groß, aber bei der guten Schätzung haben die Streuungen einen geringeren Einfluss auf das Ergebnis.

Gute Versuchspläne legen die Eingabeparameter so fest, dass die zufällige Streuung einen möglichst kleinen Einfluss auf die Schätzwerte haben. Abbildung 3.35 stellt einige gebräuchliche Versuchspläne dar [14], die für jeden Versuch (scharzer Punkt) die drei Eingabeparameter x_1 , x_2 und x_3 festlegen.

Das „Change One Setting at a Time“-Design mit drei Eingabeparametern in Abbildung 3.35a (COST) hat den Vorteil, dass nur so viele Versuche notwendig sind, wie Unbekannte bestimmt werden sollen. Schätzungen, die auf diesem Design beruhen, sind allerdings relativ ungenau.

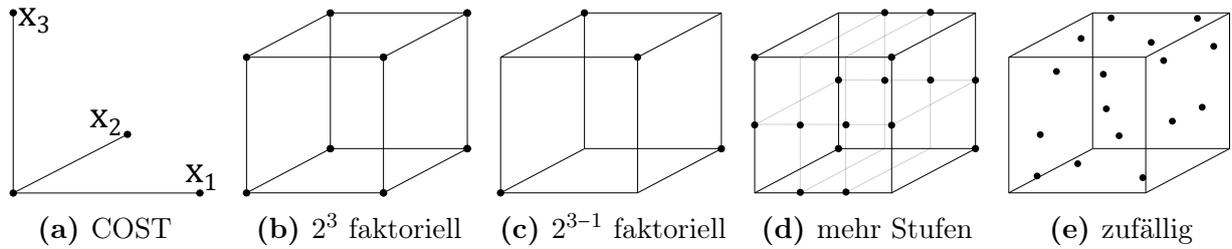


Abbildung 3.35: Verschiedene Typen von Versuchsplänen mit drei Dimensionen. Der „Change one setting at a time“ (COST), der 2^3 faktorielle und der zufällige Versuchsplan sind sehr einfach aufzubauen.

Der 2^3 vollfaktorielle Versuchsplan mit drei Eingabeparametern in Abbildung 3.35b liefert bessere Schätzwerte als das COST-Design, benötigt allerdings mehr Versuche. In Tabelle 3.4a ist das Aufbauschema eines vollfaktoriellen 2^2 Versuchsplans mit zwei Eingabeparametern x_1, x_2 aufgeführt. Mit den vier aufgeführten Versuchen können mit der Regression

$$\hat{y}(x_1, x_2) = 1 \cdot \hat{\beta}_0 + x_1 \cdot \hat{\beta}_1 + x_2 \cdot \hat{\beta}_2 + x_1 \cdot x_2 \cdot \hat{\beta}_3 \quad (3.47)$$

die vier Parameter $\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2$ und $\hat{\beta}_3$ geschätzt werden. Das Aufbauschema des 2^2 Versuchsplans entspricht dem Zählen von 0 bis exklusive 2^2 in einem binären Zahlensystem (00, 01, 10, 11), nur das „0“ durch „-1“ ersetzt wird ((-1,-1), (-1, 1), (1, -1), (1 1)). Die erste Stelle (-1, -1, 1, 1) wird x_1 zugewiesen und die zweite Stelle (-1, 1, -1, 1) definiert die Einstellungen von x_2 . Mit vier Versuchen können also Gewichtungparameter für die Konstante I ($\hat{\beta}_0$) sowie für die Faktoren x_1 ($\hat{\beta}_1$), x_2 ($\hat{\beta}_2$) und für die zweifach-Wechselwirkung $x_1 \cdot x_2$ ($\hat{\beta}_3$) berechnet werden.

Beim 2^{3-1} fraktionellen faktoriellen Versuchsplan in Abbildung 3.35c wird die Anzahl der Versuche im Vergleich zum vollfaktoriellen 2^3 Versuchsplan halbiert. Dieser Versuchsplan ist immer noch besser als das COST-Design und benötigt dabei gleich viele Versuche. In Tabelle 3.4a wird ein solcher 2^{3-1} Versuchsplan von einem vollfaktoriellen 2^2 Versuchsplan abgeleitet, indem ein neuer Faktor x_3 eingeführt wird. Der Wert von x_3 wird auf $x_1 \cdot x_2$ festgelegt. Der Faktor x_3 wird also mit der Wechselwirkung $x_1 \cdot x_2$ vermengt und für alle Versuche gilt $x_3 = x_1 \cdot x_2$. Bei 2^{k-m} fraktionellen faktoriellen Versuchsplänen ist das Produkt eines Faktors mit sich selbst die Konstante ($x_i \cdot x_i = I$). Die Vermengung $x_3 = x_1 \cdot x_2$ kann also auch als $I = x_1 \cdot x_2 \cdot x_3$ angeschrieben werden. $I = x_1 \cdot x_2 \cdot x_3$ wird Generator genannt.

Da die Bedingung $x_3 = x_1 \cdot x_2$ gilt, kann der Faktor x_3 nun nicht mehr von der zweifachen Wechselwirkung $x_1 \cdot x_2$ unterschieden werden und es ist nur noch möglich, entweder einen Gewichtungsfaktor für x_3 oder für $x_1 \cdot x_2$ zu berechnen. Meistens wird die höhere Wechselwirkung $x_1 \cdot x_2$ vernachlässigt. Das gilt auch für alle anderen möglichen Schreibweisen des Generators wie zum Beispiel $x_2 = x_1 \cdot x_3$ oder $x_3 = x_1 \cdot x_2$ oder $I = x_1 \cdot x_2 \cdot x_3$. Ein Gewichtungsfaktor kann entweder für x_2 oder für $x_1 \cdot x_3$ bzw. entweder für x_3 oder für $x_1 \cdot x_2$ bzw. entweder für die Konstante I oder für die dreifach-Wechselwirkung $x_1 \cdot x_2 \cdot x_3$ berechnet werden. Es kann aber garantiert werden, dass die Gewichtungsfaktoren für die Konstante I und die Faktoren x_i gleichzeitig berechnet werden können, weil es mit dem Generator nicht möglich ist, einen Faktor durch einen anderen Faktor zu formulieren. Beispielsweise kann $x_1 = x_2$ oder $I = x_1$ oder $x_3 = x_2$ usw. nicht auf den Generator $I = x_1 \cdot x_2 \cdot x_3$ umgeformt werden. Somit können x_1 und x_2 voneinander unterschieden werden, ebenso wie I und x_1 bzw. x_3 und x_2 usw.

Wenn nicht eine lineare Funktion den beobachteten Werten zugrunde liegt, sondern eine quadratische oder kubische Funktion, dann ist es sinnvoll, mehrere Einstellungen pro

Eingabeparameter zu verwenden. Beispielsweise eignet sich der gemischte Versuchsplan in Abbildung 3.35d, wenn die beobachteten Werte linear mit x_2 , quadratisch mit x_3 und kubisch mit x_1 korrelieren.

Beim 2^{3-1} faktoriellen Versuchsplan werden aus zwei Faktoren x_1, x_2 drei Faktoren x_1, x_2, x_3 abgeleitet. Es ist aber auch umgekehrt möglich aus zwei Faktoren z_1, z_2 einen Faktor x_1 mit mehr als zwei Einstellungen zu erzeugen. Für den Versuchsplan in Abbildung 3.35d wird zuerst ein 2^5 vollfaktorieller Versuchsplan mit fünf Faktoren z_1, z_2, \dots, z_5 aufgebaut. Aus den fünf Faktoren werden die neuen Faktoren $x_2 = z_1, x_3 = f_{quad}(z_2, z_3)$ und $x_1 = f_{kub}(z_4, z_5)$ berechnet. Jeder Faktor z_i darf dabei natürlich nur für die Berechnung von einem einzigen neuen Faktor x_j verwendet werden. Die Funktionen f_{quad} und f_{kub} sind in Tabelle 3.4c aufgelistet.

Eine quadratische Regression muss drei Gewichtungparameter berechnen und benötigt für drei Einstellungen Beobachtungen. Die mittlere Einstellung „0“ kommt dabei doppelt so oft vor, weil der Versuchsplan so balanciert bleibt. Das heißt, dass gleich viele hohe Einstellungen „1“ wie niedrige Einstellungen „-1“ vorkommen. Im Gegensatz zur quadratischen Regression benötigt eine kubische Regression für vier Einstellungen Beobachtungen.

Die Faktoren x_1, x_2 und x_3 sind nun bekannt. Da der Versuchsplan auf einem 2^5 Versuchsplan basiert, werden $2^5 = 32$ Versuche definiert. Die Anzahl der Versuche kann halbiert werden, wenn der Generator $I = z_1 z_2 z_3 z_4 z_5$ verwendet wird. Dann werden alle Versuche, für die $z_1 z_2 z_3 z_4 z_5 = -1$ gilt, ausgelassen. Die restlichen 16 Versuche sind in Abbildung 3.35d dargestellt. Eine Konsequenz ist, dass ein Gewichtungsfaktor nur noch entweder für die Konstante I oder für die fünffach-Wechselwirkung $z_1 z_2 z_3 z_4 z_5$ bzw. entweder für die zweifach-Wechselwirkung $z_1 z_2$ oder für dreifach-Wechselwirkung $z_3 z_4 z_5$ usw. berechnet werden könnte. Andererseits kann garantiert werden, dass für die Konstante I , für alle Faktoren z_i und für alle zweifach-Wechselwirkungen $z_i z_j$ die Gewichtungsfaktoren gleichzeitig berechnet werden können. Auch für die neuen Faktoren x_1, x_2, x_3 gilt, dass für die Konstante I , für alle Faktoren x_i und für alle zweifach-Wechselwirkungen $x_i x_j$ die Gewichtungsfaktoren gleichzeitig berechnet werden können.

Die gemischten Versuchspläne mit mehr Stufen verteilen die Versuche außerdem gleichmäßig über den ganzen Wertebereich und sorgen dafür, dass für jeden Faktor die hohen Einstellungen gleich oft wie die niedrigen Einstellungen vorkommen.

In Abbildung 3.35e werden zufällige Einstellungen gewählt. Dieser zufällige Versuchsplan benötigt für eine gleich gute Vorhersagequalität in der Regel mehr Versuche. Er eignet sich aber sehr gut für Validierungen und Verifizierungen. Beispielsweise kann überprüft werden, ob die beobachteten Werte wirklich einer linearen Funktion folgen.

Tabelle 3.4: Aufbauschema: faktorielle Versuchspläne mit zwei (3.4a), drei (3.4b) und einem (3.4c) Eingabeparameter.

(a) 2^2 faktoriell				(b) 2^{3-1} faktoriell				(c) höhergradige Faktoren			
I	x_1	x_2	$x_1 \cdot x_2$	I	x_1	x_2	x_3	z_1	z_2	$f_{kub}(z_1, z_2)$	$f_{quad}(z_1, z_2)$
+1	-1	-1	+1	+1	-1	-1	+1	-1	-1	-1	-1
+1	-1	+1	-1	+1	-1	+1	-1	-1	+1	-1/3	0
+1	+1	-1	-1	+1	+1	-1	-1	+1	-1	+1/3	0
+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1

Wie bereits erwähnt werden mehr als 16000 FE-Modelle ausgewertet, um das statistische Modell aufzubauen. Der Versuchsplan legt genau genommen die Einstellungen von 16384 Versuchen fest. Neun FE-Modelle (0.05%) werden nicht simuliert, weil die Vernetzung der Zellen mit eingebrachten Risspartitionen fehlschlug. Das kann vorkommen, wenn die Porenoberfläche fast den Übergang von der elliptischen Risshälfte in die rechteckige Risshälfte schneidet. Gmsh platziert an diesem Übergang fix einen Knoten. Wenn die Porenoberfläche sehr nahe an diesem Knoten ist, müsste ein sehr kleines Element verwendet werden. Das funktioniert in neun Fällen aber nicht.

Um diesen Versuchsplan aufzubauen, werden zuerst die möglichen Einstellungen für die Eingabeparameter festgelegt. Aus Tabelle 3.5 ist ersichtlich, dass für alle Eingabeparameter außer der maximalen Rissbreite b'_{max} ein Wertebereich zwischen -1 und 1 gewählt wird. Da die sieben Lastparameter ε_{uu} , ε_{vv} , γ_{uv} , ε_{un} , ε_{vn} , k'_u , k'_v superpositionierbar sind, könnte der Wertebereich für sie genauso gut zwischen -0.1 und 0.1 definiert werden. Hier kommt es nur auf die Verhältnisse zueinander an. Die Krümmungen c'_u , c'_v werden zwischen -1/mm und 1/mm gewählt, da größere oder kleinere Krümmungen Probleme mit dem FE-Netz verursachen. Die maximale Rissbreite b'_{max} wird so festgelegt, dass das Seitenlängenverhältnis der Rissflächen b/a zwischen 0.5 und 1.5 liegt. Die mittlere Einstellung „0“ bzw. „0.2“ ist bei jedem Eingabeparameter doppelt vertreten, da somit auch Fälle abgedeckt werden, bei denen eine Belastung oder Krümmung Null ist bzw. wo der Riss gleich breit wie lang ist und außerdem wird so garantiert, dass gleich viele hohe Einstellungen wie niedrige Einstellungen vorkommen.

Tabelle 3.5: Mögliche Einstellungen für jeden Eingabeparameter.

x	$\frac{\varepsilon_{uu}}{1}$	$\frac{\varepsilon_{vv}}{1}$	$\frac{\varepsilon_{un}}{1}$	$\frac{\varepsilon_{vn}}{1}$	$\frac{\gamma_{uv}}{1}$	$\frac{k'_u}{1/mm}$	$\frac{k'_v}{1/mm}$	$\frac{c'_u}{1/mm}$	$\frac{c'_v}{1/mm}$	$\frac{b'_{max}}{mm}$
(-1, -1, -1)	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	0.1
(-1, -1, 1)	-2/3	-2/3	-2/3	-2/3	-2/3	-2/3	-2/3	-2/3	-2/3	4/30
(-1, 1, -1)	-1/3	-1/3	-1/3	-1/3	-1/3	-1/3	-1/3	-1/3	-1/3	5/30
(-1, 1, 1)	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.2
(1, -1, -1)	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.2
(1, -1, 1)	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	7/30
(1, 1, -1)	2/3	2/3	2/3	2/3	2/3	2/3	2/3	2/3	2/3	8/30
(1, 1, 1)	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0.3

Die Tabelle 3.5 bildet drei binäre Faktoren x auf die Einstellungen wie zum Beispiel $x \mapsto \varepsilon_{uu}$ ab. Für jeden Eingabeparameter werden andere binäre Faktoren $x = (x_i, x_j, x_k)$ gewählt. Für die Dehnung ε_{uu} ist $x = (x_0, x_1, x_2)$, für die nächste Dehnung ε_{vv} ist $x = (x_3, x_4, x_5)$ usw. Für die zehn Eingabeparameter mit je drei binäre Faktoren werden insgesamt 30 binäre Faktoren x_0, \dots, x_{29} benötigt. Die 30 Faktoren x_0, \dots, x_{29} können nicht mit einem vollfaktoriellen 2^{30} Versuchsplan berechnet werden, da das mit $2^{30} = 1\,073\,741\,824$ Versuchen zu aufwändig wäre.

Machbar ist höchstens ein 2^{14} Versuchsplan mit $2^{14} = 16\,384$ Versuchen, die in etwa fünf Tagen durchgeführt werden können. Also werden 14 Faktoren x_0, \dots, x_{13} mit einem

vollfaktoriellen 2^{14} Versuchsplan erzeugt. Dann wird der Generator

$$\begin{aligned}
 I = & x_0x_1x_2x_3x_4x_{14} = x_0x_1x_2x_5x_6x_{15} = x_0x_1x_2x_7x_8x_{16} = x_0x_1x_2x_9x_{10}x_{17} = x_0x_1x_2x_{11}x_{12}x_{18} = \\
 & x_0x_1x_3x_5x_7x_{19} = x_0x_1x_3x_6x_9x_{20} = x_0x_1x_3x_8x_{10}x_{21} = x_0x_1x_3x_{11}x_{13}x_{22} = x_0x_1x_4x_5x_{10}x_{23} = \\
 & x_0x_1x_4x_6x_8x_{24} = x_0x_1x_4x_7x_9x_{25} = x_0x_1x_5x_8x_9x_{26} = x_0x_1x_5x_{12}x_{13}x_{27} = x_0x_1x_6x_7x_{10}x_{28} = \\
 & x_0x_1x_2x_3x_4x_5x_6x_7x_8x_9x_{10}x_{11}x_{12}x_{13}x_{29}
 \end{aligned} \tag{3.48}$$

berechnet. Mit dem Generator können aus den 14 Faktoren 30 Faktoren berechnet werden. Durch Umformen des Generators ergibt sich beispielsweise $x_{14} = x_0x_1x_2x_3x_4$ oder $x_{15} = x_0x_1x_2x_5x_6$.

Die Berechnung des Generators ist nicht trivial. Es wird vorgegeben, dass der Generator mindestens eine Auflösung von VI haben soll. Das heißt, dass keine zweifachen Wechselwirkungen mit anderen zweifachen Wechselwirkungen vermengt sind (Auflösung IV=2+2), sondern erst einige dreifache Wechselwirkungen mit anderen dreifachen Wechselwirkungen vermengt sind (Auflösung VI=3+3). Im Endeffekt werden alle Generatoren solange überprüft, bis ein Generator mit der Auflösung VI gefunden wird. Für einen 2^{n-k} Versuchsplan gibt es $\binom{2^{n-k}-1-n+k}{k}$ mögliche Generatoren. Daraus folgt, dass für den verwendeten 2^{30-16} Versuchsplan $\binom{16}{16}^{369} = 1\ 260\ 520\ 744\ 821\ 061\ 580\ 720\ 272\ 830\ 096\ 524\ 835\ 862\ 502\ 902\ 335\ 759\ 699$ Generatoren denkbar sind. Um den Generator zu finden, wird ein kleines JAVA-Programm entwickelt, das in wenigen Sekunden für 97% der Generatoren ausschließen kann, dass der Generator eine Auflösung von VII hat. Eine Auflösung größer als VI ist zwar möglich, aber wenn es sie gibt, ist sie extrem schwer zu finden und es wäre eine lange Rechenzeit notwendig um die restlichen 3% der Generatoren zu überprüfen. Der Generator mit der Auflösung VI wird innerhalb einer Minute gefunden, nachdem 77% der Generatoren überprüft sind.

Da nun also alle 30 Faktoren x_0, \dots, x_{29} bekannt sind, können sie auf die Eingabeparameter abgebildet werden ($x \mapsto \varepsilon_{uu}, \dots$). Somit sind die Einstellungen für alle Eingabeparameter und für alle 16384 Versuche vorgegeben.

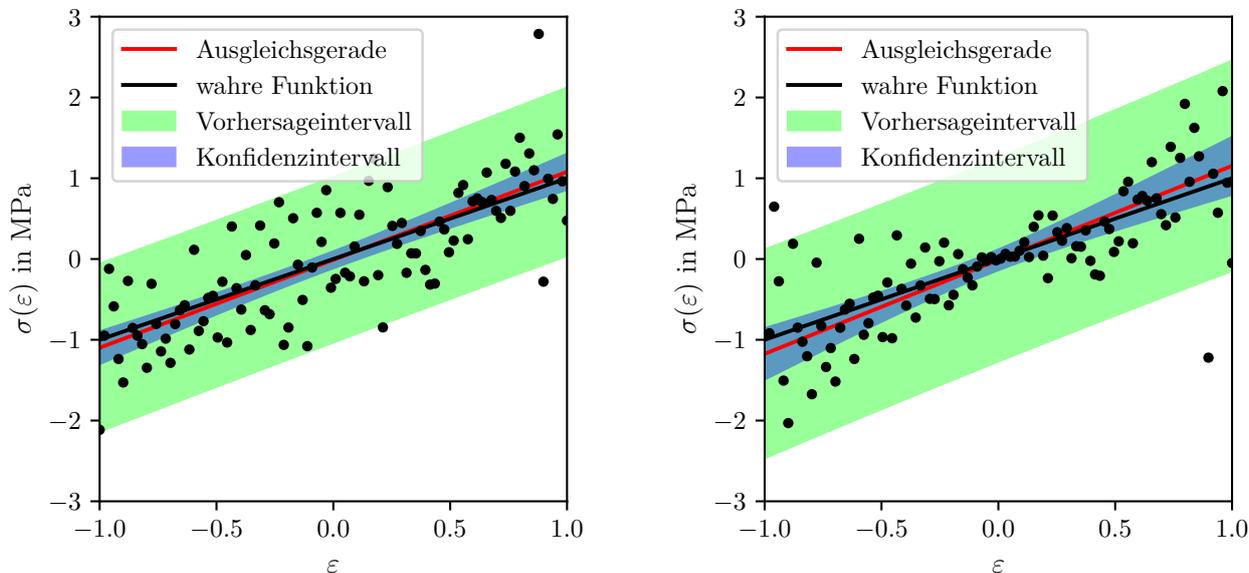
Auch für den Vergleich von periodischen und gemischten Randbedingungen in den Abbildungen 3.26b und 3.27b wird dieser Versuchsplan verwendet. Allerdings werden alle Versuche, bei denen die Scherung ε_{un} oder die Scherung ε_{vn} nicht Null sind, weggelassen, sodass nur 1024 Versuche übrig bleiben.

Außerdem definiert ein anderer zufälliger Versuchsplan die Eingabeparameter von zusätzlich 1024 FE-Modellen. 500 dieser FE-Modelle werden zur Validierung der Vorhersagemodelle herangezogen und mit den restlichen 524 FE-Modellen werden die Vorhersagen getestet und verifiziert. Der Unterschied zwischen Validierung und Verifizierung ist, dass die Verifizierung nur einmal ganz zum Schluss durchgeführt wird, um das Vorhersagemodell abschließend zu beurteilen. Danach werden keine Änderungen am Vorhersagemodell mehr vorgenommen. Wenn Modelle verglichen werden oder die Modelle noch geändert werden, wird der Validierungsdatensatz verwendet.

Heteroskedastizität

Wie bereits erwähnt wird für jedes Vorhersagemodell eine Varianz-Funktion und eine Erwartungswert-Funktion verwendet. Mit der Varianz-Funktion wird die Heteroskedastizität eliminiert. Heteroskedastizität bedeutet, dass die Beobachtungen bei unterschiedlichen Ein-

gabeparametern verschieden stark streuen. Abbildung 3.36a zeigt eine lineare Regression, bei der die Beobachtungen überall gleich streuen. Dieser Fall wird Homoskedastizität genannt. In Abbildung 3.36b hingegen streuen die Beobachtungen umso stärker, je höher der Betrag des Eingabeparameters ε ist.



(a) Homoskedastizität: Die Streuung der Beobachtungen ist für alle ε gleich.

(b) Heteroskedastizität: Die Streuung der Beobachtungen steigt linear mit $|\varepsilon|$.

Abbildung 3.36: Vergleich von Homo- und Heteroskedastizität: Bei Heteroskedastizität weicht die Ausgleichsgerade stärker von der wahren Funktion ab, das Vorhersageintervall ist nicht mehr gültig und das Konfidenzintervall wird größer, wenn robuste Standardfehler verwendet werden.

Die wahre Funktion $\sigma(\varepsilon)$ ergibt sich aus der Regression mit unendlich vielen Beobachtungen bzw. mit der Grundgesamtheit. Im Gegensatz zur wahren Funktion wird für die Ausgleichsgerade $\hat{\sigma}(\varepsilon)$ die Regression nur mit einer endlichen Anzahl an Beobachtungen bzw. mit einer Stichprobe durchgeführt.

Das Konfidenzintervall

$$\hat{\sigma}(\varepsilon) - \delta(\varepsilon) \leq \sigma(\varepsilon) \leq \hat{\sigma}(\varepsilon) + \delta(\varepsilon) \text{ mit} \quad (3.49)$$

$$\delta(\varepsilon) = t_{1-\frac{\alpha}{2}, n-2} \cdot \sqrt{\text{Var}(\hat{e}_{w,i}) \cdot \left(\frac{1}{n} + \frac{\varepsilon - \text{EW}(\varepsilon_i)}{(n-1) \cdot \text{Var}(\varepsilon_i)} \right)}$$

gibt den Bereich an, in dem die wahre Funktion $\sigma(\varepsilon)$ mit der Irrtumswahrscheinlichkeit $P(|\sigma(\varepsilon) - \hat{\sigma}(\varepsilon)| > \delta) \approx \alpha$ liegt. Der Wert für die „studentsche t-Verteilung“ [15] $t_{1-\alpha/2, n-2}$ kann mit der Irrtumswahrscheinlichkeit α und der Anzahl der Beobachtungen n nachgeschlagen werden. Die Residuen $e_{w,i}$ sind um den wahren Wert normalverteilt, jedoch ist der wahre Wert unbekannt und kann nur geschätzt werden. Die „studentsche t-Verteilung“ berücksichtigt im Gegensatz zur Normalverteilung, dass auch der wahre Wert nur geschätzt ist. $\text{Var}(\hat{e}_{w,i})$ bezeichnet die Varianz der gewichteten Residuen $\hat{e}_{w,i}$ und $\text{EW}(\varepsilon_i)$ ist der Mittelwert der Eingabeparameter ε_i . Die gewichteten Residuen $\hat{e}_{w,i}$ sind die Residuen \hat{e}_i , die mit einer Gewichtungsfunktion $\hat{w}(\varepsilon)$ skaliert werden. Bei Homoskedastizität ist die Gewichtungsfunktion konstant ($\hat{w}(\varepsilon) = 1$). Bei Heteroskedastizität ist die Gewichtungsfunktion nicht konstant, wird in

Abbildung 3.36b aber fälschlicherweise auch als konstant ($\hat{w}(\varepsilon) = 1$) angenommen. Das Konfidenzintervall muss nun mit robusten Standardfehlern berechnet werden, wie sie White [16] vorschlägt. Dadurch wird das Konfidenzintervall zwar größer, aber es ist noch gültig.

Die Breite des Vorhersageintervalls

$$\delta(\varepsilon) = t_{1-\frac{\alpha}{2}, n-2} \cdot \sqrt{\text{Var}(\hat{e}_{w,i}) \cdot \left(\frac{1}{\hat{w}^2(\varepsilon)} + \frac{1}{n} + \frac{\varepsilon - \text{EW}(\varepsilon_i)}{(n-1) \cdot \text{Var}(\varepsilon_i)} \right)} \quad (3.50)$$

verwendet im Vergleich zum Konfidenzintervall zusätzlich den Term $\frac{1}{\hat{w}^2(\varepsilon)}$. Jede Beobachtung streut etwas um den wahren Wert. Diese Streuung einer Beobachtung wird durch den Term $\frac{1}{\hat{w}^2(\varepsilon)}$ beschrieben. Das Vorhersageintervall gibt den Bereich an, in dem eine neue Beobachtung σ_i mit der Irrtumswahrscheinlichkeit $P(|\sigma_i - \hat{\sigma}(\varepsilon_i)| > \delta) \approx \alpha$ liegt.

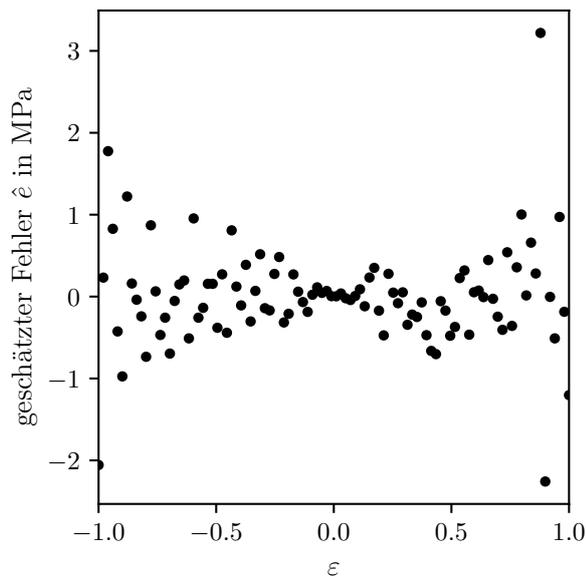
Das Vorhersageintervall ist immer breiter als das Konfidenzintervall. Die Frage, in welchem Bereich die Spannung σ_i einer neuen FEM-Simulation unter der Last ε_i liegt, wird durch das Vorhersageintervall beantwortet. In welchem Bereich liegt die Ausgleichsebene, wenn unendlich viele FEM-Simulationen durchgeführt werden? Diese Frage wird durch das Konfidenzintervall beantwortet.

Wenn wie in Abbildung 3.36b Heteroskedastizität vorliegt, führt das zu einer Reihe ungewollter Konsequenzen [17]. Beispielsweise benötigt die Ausgleichsgerade mit Heteroskedastizität mehr Beobachtungen, um die wahre Funktion gleich gut anzunähern wie ohne Heteroskedastizität. Die Wahrscheinlichkeit, dass das Konfidenzintervall die wahre Funktion $\sigma(\varepsilon)$ überdeckt, muss bei Heteroskedastizität mit robusten Standardfehlern korrigiert werden, wodurch das Konfidenzintervall bei gleicher Irrtumswahrscheinlichkeit größer wird. In Abbildung 3.36b werden die robusten Standardfehler HC1 verwendet, die von White [16] beschrieben werden und den Vorteil haben, dass sie wenig Ressourcen benötigen und erst nach der Regression berechnet werden. Für das Vorhersageintervall gibt es hingegen keine nachträgliche Korrekturmöglichkeit und das Vorhersageintervall in Abbildung 3.36b ist falsch.

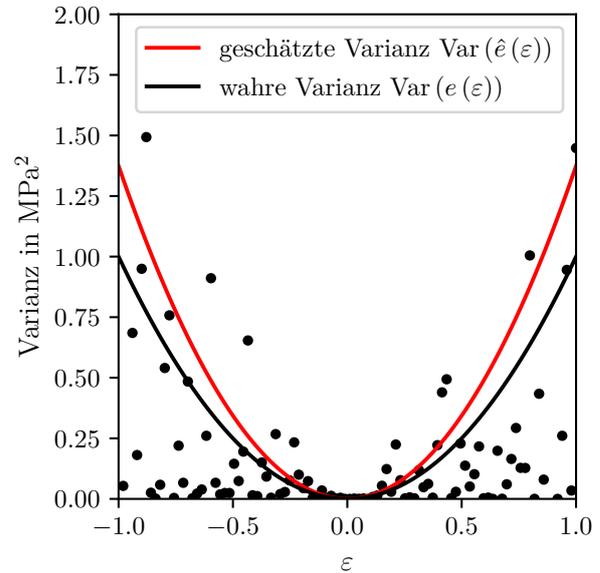
Um ein gültiges Vorhersageintervall zu berechnen, muss die Gewichtsfunktion $\hat{w}(\varepsilon)$ definiert werden. Die Gewichtsfunktion ergibt sich aus der Varianz-Funktion und um die Varianz-Funktion zu erstellen, müssen zuerst die Residuen \hat{e}_i der Regression in Abbildung 3.36b berechnet werden. Die Residuen sind Schätzungen für die Fehler zwischen den Beobachtungen und der wahren Funktion. Diese sind in Abbildung 3.37a dargestellt.

Im nächsten Schritt wird ein Modell für die Varianz erstellt. Entsprechend den Überlegungen aus Kapitel 3.3.3 ist bekannt, dass die Streuung $\sqrt{\text{Var}(\hat{e})}$ linear mit dem Eingabeparameter ε zunimmt. Die Varianz $\text{Var}(\hat{e})$ entspricht der quadrierten Streuung, also werden die quadrierten geschätzten Fehler \hat{e}^2 durch eine quadratische Funktion $\text{Var}(\hat{e}(\varepsilon)) = \beta_0 + \beta_1 \cdot \varepsilon^2$ approximiert. Dabei ist entscheidend, dass die Varianz-Funktion $\text{Var}(\hat{e})$ nie negativ werden darf. Dies wird zum einen durch die quadratische Funktion erreicht und zum anderen verhindert eine nicht-negative kleinste Quadrate Regression, dass die Parameter β_0 und β_1 negativ werden. Abbildung 3.37b zeigt die rote gefittete Varianz-Funktion $\text{Var}(\hat{e}(\varepsilon))$.

Nun können die geschätzten Gewichte $\hat{w} = 1/\sqrt{\text{Var}(\hat{e})}$, wie in Abbildung 3.38a dargestellt, berechnet werden. Aus Abbildung 3.38b ist ersichtlich, dass die gewichteten geschätzten Fehler $\hat{e}_w = \hat{w} \cdot \hat{e}$ überall gleich stark streuen. Die Heteroskedastizität ist somit eliminiert.



(a) Die Residuen streuen bei Heteroskedastizität über ε hinweg unterschiedlich stark.



(b) Die geschätzte Varianz passt die quadrierten Residuen durch eine quadratische Funktion an.

Abbildung 3.37: Die Varianz-Funktion approximiert die quadrierten geschätzten Fehler.

Außerdem sind die gewichteten geschätzten Fehler normalverteilt. Das ist eine Voraussetzung für ein gültiges Vorhersageintervall.

Anstatt die quadrierten Residuen zu minimieren, werden die gewichteten Residuen minimiert

$$\min_{\beta_j} \sum_i \hat{w}(\varepsilon_i) \cdot \underbrace{(\sigma_i - \hat{\sigma}(\varepsilon_i))^2}_{\hat{e}_{w,i}^2}. \quad (3.51)$$

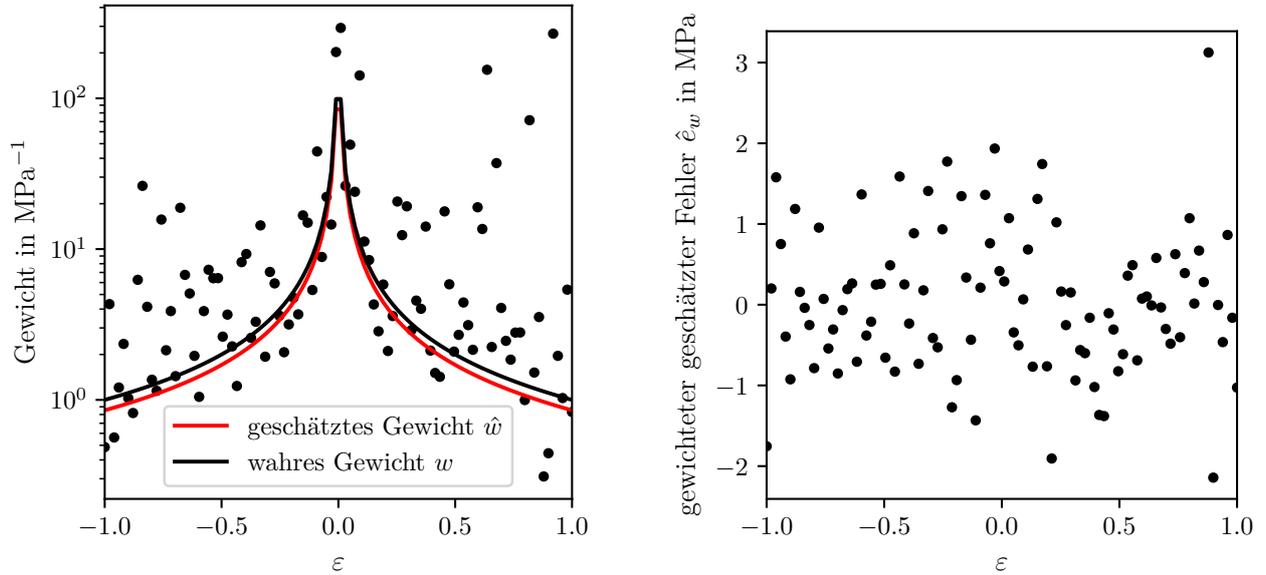
Wie aus Abbildung 3.39 ersichtlich, liegt die Ausgleichsgerade dadurch näher an der wahren Funktion und das Konfidenzintervall ist kleiner. Außerdem ist es nun möglich ein valides Vorhersageintervall anzugeben.

Modellaufbau

Die vorigen Kapitel beschreiben, wie ein Versuchsplan so aufgebaut wird, dass die Regression möglichst gut ist und wie die Varianz-Funktion die unterschiedlich starke Streuung der Residuen eliminiert, sodass gültige Vorhersageintervalle berechnet werden können.

Die Hauptproblematik bei einer guten Regression ist jedoch die richtige Wahl der Funktionen. Es ist möglich mit einer linearen Regression ein quadratisches Problem anzupassen und dabei ein sehr enges Konfidenzintervall zu erhalten. Für die Vorhersage eignet sich eine solche Regression jedoch nicht, weil das Problem fehlspezifiziert ist. Um eine Fehlspezifikation des Modells zu verhindern, werden so weit wie möglich Funktionen verwendet, die das zugrundeliegende FE-Problem beschreiben können.

Eine FE-Simulation löst das lineare Gleichungssystem $K_{ij}U_j = F_i$ mit der globalen Steifigkeitsmatrix K_{ij} , dem globalen Lastvektor F_i und den globalen Verschiebungsvektor U_j .



(a) Das Gewicht w ergibt sich aus der Varianz $w = \text{Var}^{-0.5}$.

(b) Die gewichteten Residuen streuen über ε hinweg gleich stark.

Abbildung 3.38: Aus der Varianz-Funktion wird die Gewichtungsfunktion berechnet, mit der die Residuen gewichtet werden. Die gewichteten Residuen sind homoskedastisch.

Mit der Guyan-Reduktion [18]

$$\begin{bmatrix} K_{ij} & K_{i\zeta} \\ K_{\varepsilon j} & K_{\varepsilon\zeta} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_j^{RP} \\ U_\zeta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} F_i^{RP} \\ 0 \end{bmatrix} \Rightarrow U_\zeta = -K_{\varepsilon\zeta}^{-1} K_{\varepsilon j} U_j^{RP} \Rightarrow U_\zeta = X_{\zeta,j}^{red} U_j^{RP} \quad (3.52)$$

ist es möglich, alle Verschiebungen in der Zelle U_ζ als eine lineare Funktion der Verschiebungen an den Referenzpunkten U_j^{RP} darzustellen. Die Lastparameter ε_{uu} , ε_{vv} , γ_{uv} , ε_{un} , ε_{vn} , k'_u , k'_v sind die Verschiebungen an den Referenzpunkten U_j^{RP} . Somit kann die Verschiebung an jeder Position in der Zelle als Matrix-Vektor-Produkt von einer konstanten reduzierten Matrix $X_{\zeta,j}^{red}$ und den Lastparametern dargestellt werden.

Eine Komponente aus dem Spannungstensor σ' ist eine lineare Funktion der Verschiebungen in der Zelle U_ζ und da diese Verschiebungen wiederum lineare Funktionen der Verschiebungen an den Referenzpunkten U_j^{RP} sind, ist auch die Spannungskomponente eine lineare Funktion

$$\sigma'(a') = \sum_i U_i^{RP} \cdot \theta_i(a') \quad (3.53)$$

der Verschiebungen an den Referenzpunkten U_j^{RP} . Je nachdem, bei welcher Tiefe a' die Spannung σ' ausgewertet wird, ändern sich die Werte der Gewichtungsfunktionen $\theta_i(a')$. Bei der FE-Methode beschreiben Ansatzfunktionen $f_j(a')$ den Verlauf der Spannungen über die Tiefe a' . Die Ansatzfunktionen für die Spannungen sind dabei die Ableitungen der Ansatzfunktionen für die Verschiebungen. Die Gewichtungsfunktionen

$$\theta_i(a') = \sum_j f_j(a') \beta_{i,j} \quad (3.54)$$

sind lineare Funktion der Ansatzfunktionen $f_j(a')$ an der Stelle a' mit den konstanten Gewichten $\beta_{i,j}$.

Wenn dieselben Ansatzfunktionen $f_j(a')$ verwendet werden, die auch die Spannungen innerhalb des FE-Netzes beschreiben, dann kann die Spannung fehlerfrei vorhergesagt werden.

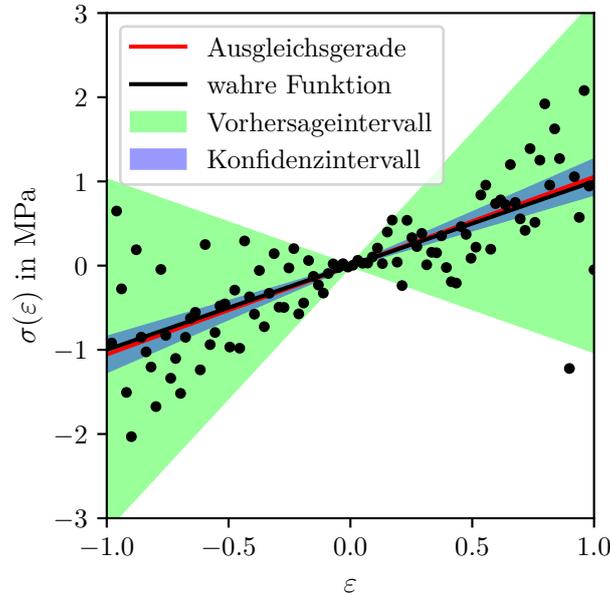


Abbildung 3.39: Eine gewichtete Regression korrigiert den Einfluss von Heteroskedastizität: Die Ausgleichsgerade weicht weniger stark von der wahren Funktion ab, als die ungewichtete Regression aus Abbildung 3.36b. Außerdem sind das Vorhersage- und das Konfidenzintervall gültig.

Die Ansatzfunktionen für Spannungen im FE-Netz haben jedoch an den Element-Grenzen Unstetigkeitsstellen. Deshalb werden andere stetige Funktionen verwendet. Abbildung 3.40 zeigt zwei verschiedene Arten von Ansatzfunktionen.

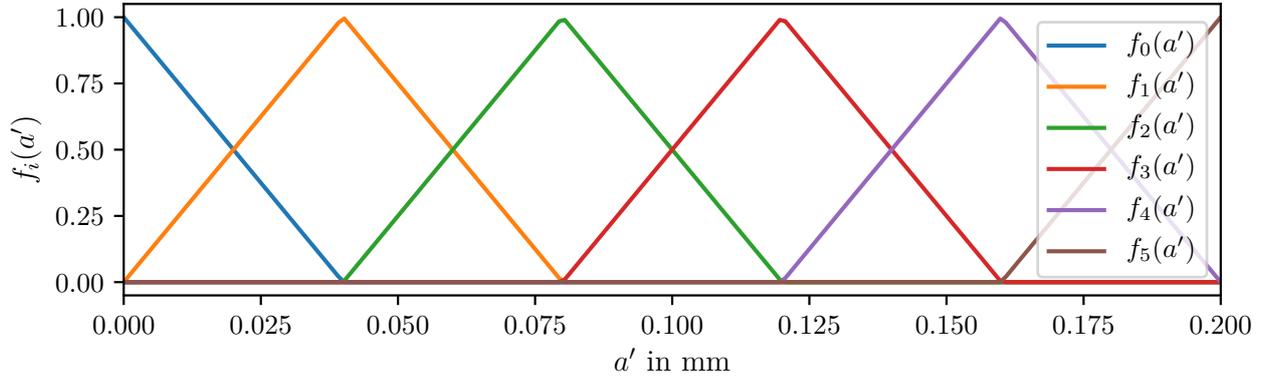
Die stückweise linearen Funktionen in Abbildung 3.40a sind \mathcal{C}^0 stetig. Die Interpolation ist also stetig, die Ableitung der Interpolation jedoch nicht. Diese Funktionen haben zwei große Vorteile. Zum einen ist an jeder Stelle die Summe der Funktionswerte immer gleich Eins und zum anderen wird kein Funktionswert je negativ. Dadurch kann die Varianz mit stückweise linearen Funktionen über die Tiefe a' interpoliert werden ohne dass möglicherweise an irgendeiner Stelle eine negative Varianz auftritt.

Die Hermiteinterpolation in Abbildung 3.40b ist \mathcal{C}^1 stetig. Sowohl die Interpolation als auch die erste Ableitung haben keine Unstetigkeitsstellen. Die Funktionen $f_i(a')$ sind kubisch und haben an den Element-Grenzen (0 mm, 0.1 mm, 0.2 mm) einen Funktionswert und eine Ableitung von Null, außer an einer Element-Grenze, wo der Funktionswert ($f_0(0 \text{ mm}) = 1$, $f_2(0.1 \text{ mm}) = 1$, $f_4(0.2 \text{ mm}) = 1$) oder die Ableitung ($df_1/da'|_{a'=0 \text{ mm}} = 1$, $df_3/da'|_{a'=0.1 \text{ mm}} = 1$, $df_5/da'|_{a'=0.2 \text{ mm}} = 1$) Eins ist. Im Vergleich zur stückweise linearen Funktion ist die Summe der Funktionswerte nicht immer gleich Eins und auch die Funktionswerte selbst können negativ sein. Die Hermiteinterpolation wird verwendet, um die Erwartungswerte über die Tiefe a' zu interpolieren.

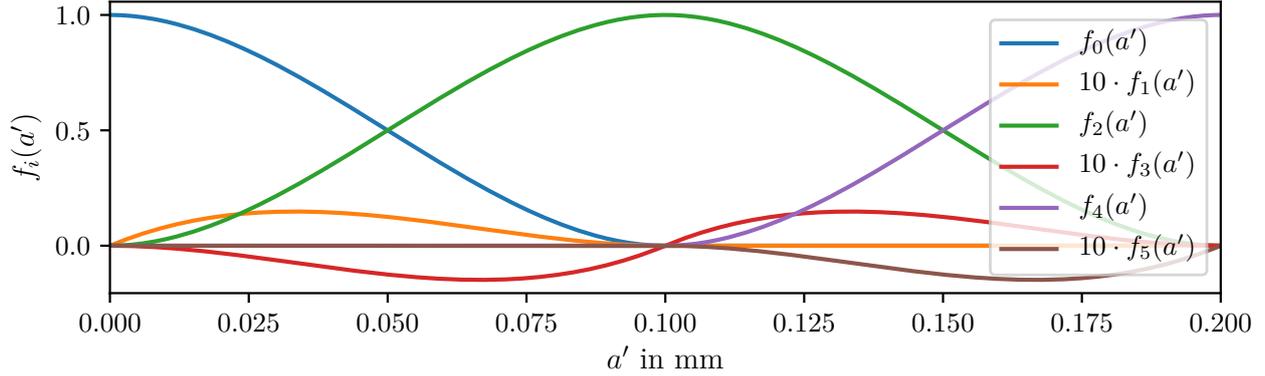
Durch die Verwendung von Ansatzfunktionen f_i können statt einer Gewichtungsfunktion $\theta_i(a')$ konstante Gewichts-Parameter $\beta_{i,j}$ verwendet werden, um die Spannung

$$\sigma'(a') = \sum_{i_1, i_2} U_{i_1}^{RP} \cdot f_{i_2}(a') \cdot \beta_{i_1 i_2} \quad (3.55)$$

über den Risspfad a' zu interpolieren. Da nicht die von den FE-Elementen vorgegebenen Ansatzfunktionen f_{i_2} verwendet werden, ist die Spannung $\sigma'(a')$ nicht mehr dieselbe wie sie von der FE-Simulation berechnet wird. Dafür ist die Spannung aber eine stetige Funktion.



(a) C^0 -stetige Ansatzfunktionen für eine stückweise lineare Interpolation



(b) C^1 -stetige Ansatzfunktionen für die Hermiteinterpolation [19]. Bei der Hermiteinterpolation hat jede Funktion an den Element-Grenzen entweder einen Funktionswert von Eins ($f_0(0 \text{ mm}) = 1$, $f_2(0.1 \text{ mm}) = 1$, $f_4(0.2 \text{ mm}) = 1$) oder eine Ableitung von Eins ($\partial f_1/\partial a'|_{0 \text{ mm}} = 1$, $\partial f_3/\partial a'|_{0.1 \text{ mm}} = 1$, $\partial f_5/\partial a'|_{0.2 \text{ mm}} = 1$). Das erste Element beginnt bei $a = 0 \text{ mm}$ und endet bei $a = 0.1 \text{ mm}$. Das zweite Element geht von $a = 0.1 \text{ mm}$ bis $a = 0.2 \text{ mm}$. Zur besseren Darstellung werden die Funktionen $f_1(a')$, $f_3(a')$ und $f_5(a')$ mit zehn multipliziert.

Abbildung 3.40: Verschiedene Ansatzfunktionen für Interpolationen

Anstatt die Guyan-Reduktion aus Gleichung 3.52 durchzuführen, können auch sieben FE-Simulation durchgeführt werden, bei denen jeweils einer der sieben Lastparameter ε_{uu} , ε_{vv} , γ_{uv} , ε_{un} , ε_{vn} , k'_u , k'_v auf Eins und die anderen auf Null gesetzt werden. Da die verwendeten Ansatzfunktionen, wie aus Abbildung 3.40 ersichtlich, aus sechs Funktionen bestehen, werden für jede der sieben Simulationen entlang des Risspfades sechs Spannungen

$$\sigma'_j = \underbrace{U_{j,i_1}^{RP} \cdot f_{i_2}(a'_j)}_{X_{ji}} \cdot \beta_i + \hat{e}_j \quad \text{mit } i = (i_1, i_2) \quad (3.56)$$

berechnet, sodass insgesamt $6 \times 7 = 42$ Beobachtungen vorliegen. Die Referenzpunktverschiebungen U_{j,i_1}^{RP} entsprechen den Lastparametern und sind bekannt. Auch die Tiefen a'_j und dadurch die Werte der Ansatzfunktionen $f_{i_2}(a'_j)$ können berechnet werden. Die Referenzpunktverschiebungen U_{j,i_1}^{RP} und die Werte der Ansatzfunktionen $f_{i_2}(a'_j)$ werden zur X_{ji} Matrix zusammengefasst. Beim Zusammenfügen wird das kartesische Produkt $i = (i_1, i_2)$ gebildet und da für jede Beobachtung sieben Referenzpunktverschiebungen und sechs Ansatzfunktionen vorliegen, hat die zusammengefügte X_{ji} Matrix für jede Beobachtung $7 \times 6 = 42$ Einträge.

Die einzigen Unbekannten sind noch der Parametervektor β_i und der Fehlervektor e_j . Die Fehler sollten natürlich möglichst gering sein, weshalb die Norm des Fehlervektors

$$\min_{\hat{\beta}_j} \|\hat{e}_j\|_2 = \min_{\hat{\beta}_j} \|\sigma'_j - X_{ji} \cdot \hat{\beta}_j\|_2 \quad (3.57)$$

minimiert wird, indem der Parametervektor $\hat{\beta}_j$ verändert wird. Diese Vorgehensweise wird Regression genannt. Die Guyan-Reduktion kann also durch eine Regression ersetzt werden, solange nur die Lastparameter betrachtet werden.

Um den Einfluss der Geometrie-Parameter c'_{uu} und c'_{vv} zu berücksichtigen, wird die Matrix

$$X_{ji} = U_{j,i_1}^{RP} \cdot f_{i_2}(a'_j) \cdot (c'_{uu,j})^{i_3} \cdot (c'_{vv,j})^{i_4} \text{ mit } i = (i_1, i_2, i_3, i_4) \text{ und } 0 \leq i_3, i_4 \leq 3 \quad (3.58)$$

erweitert. Für die Geometrie-Parameter werden die Funktionen $(c'_{uu,j})^{i_3} \in \{1, c'_{uu,j}, c'^2_{uu,j}, c'^3_{uu,j}\}$ bzw. $(c'_{vv,j})^{i_4} \in \{1, c'_{vv,j}, c'^2_{vv,j}, c'^3_{vv,j}\}$ verwendet. Da die X_{ji} -Matrix mit dem kartesischen Produkt zusammengefügt wird, steigt mit sieben Lastparameter, sechs Funktionen für die Interpolation über die Tiefe a' und je vier Funktionen für die Geometrie-Parameter die Anzahl der Unbekannten auf $7 \times 6 \times 4 \times 4 = 672$.

Es wird angenommen, dass die Wechselwirkung von Krümmungen mit geringer Potenz, wie beispielsweise $c'^0_{uu,j} \cdot c'^1_{vv,j}$, das Problem gut genug beschreiben und dass Wechselwirkung von Krümmungen mit großen Potenzen, wie beispielsweise $c'^3_{uu,j} \cdot c'^3_{vv,j}$, vernachlässigbar sind. Mit der Forderung $i_3 + i_4 \leq 3$ werden diese Wechselwirkungen vernachlässigt und es müssen nur noch $7 \times 6 \times (4 + 3 + 2 + 1) = 7 \times 6 \times 10 = 420$ Unbekannte bestimmt werden.

Um 420 Unbekannte zu bestimmen, sind zum einem viele FE-Simulationen nötig und zum anderen besteht die Gefahr, dass die Beobachtungen überangepasst werden. Die Regression approximiert die Beobachtungen also beinahe perfekt, aber ansonsten Überschwingen die Funktionen $f_i(\dots)$ und eine Vorhersage ist nicht möglich. Die Überanpassung wird durch eine Regularisierung mit der Lasso-Methode [20]

$$\min_{\hat{\beta}_j} \left(\left\| (\sigma'_j - X_{ji} \cdot \hat{\beta}_j) \cdot \sqrt{\hat{w}_j} \right\|_2 + \|\hat{\beta}_j \eta_j\|_1 \right) \quad (3.59)$$

verhindert. Die Gewichte \hat{w}_j ergeben sich aus der Varianz-Funktion, die im vorigen Kapitel beschrieben ist und die Parameter $\hat{\beta}_j$ werden mit $\eta_j = \eta / \sum_i |X_{ji}|$ auf den Bestrafungsfaktor η normiert. Je größer der Bestrafungsfaktor η ist, desto mehr Parameter werden Null gesetzt, weil es günstiger wird, die 1-Norm $\|\hat{\beta}_j \eta_j\|_1$ zu minimieren, als die Beobachtungen besser anzupassen. Das Ziel der Lasso-Methode ist es, nur so viele Parameter $\hat{\beta}_j$ wie nötig zu verwenden. Alle anderen Parameter werden Null gesetzt.

Abbildung 3.41 verbildlicht wie die Lasso-Methode funktioniert. Die gefüllten Konturen stellen die 2-Norm $\left\| (\sigma'_j - X_{ji} \cdot \hat{\beta}_j) \cdot \sqrt{\hat{w}_j} \right\|_2$ dar. Offensichtlich gibt es entlang der roten Linie mehrere Einstellungen von (β_0, β_1) , wo die 2-Norm minimal ist. Die Gleichung ist also unterbestimmt. Dennoch kann die Lasso-Methode die Gleichung lösen, indem zusätzlich die als Quadrate dargestellte 1-Norm $\|\hat{\beta}_j \eta_j\|_1$ minimiert wird. Das grüne Quadrat ist kleiner und hat somit eine kleinere Norm als das blaue Quadrat. Deshalb wird β_1 Null gesetzt.

Die Lasso-Methode eliminiert also Parameter, wenn das Gleichungssystem unterbestimmt ist. Je nachdem wie groß der Bestrafungsfaktor η gewählt wird, werden auch Parameter Null gesetzt, die einen Effekt haben. Je größer der Bestrafungsfaktor η ist, desto wichtigere Parameter werden Null gesetzt.

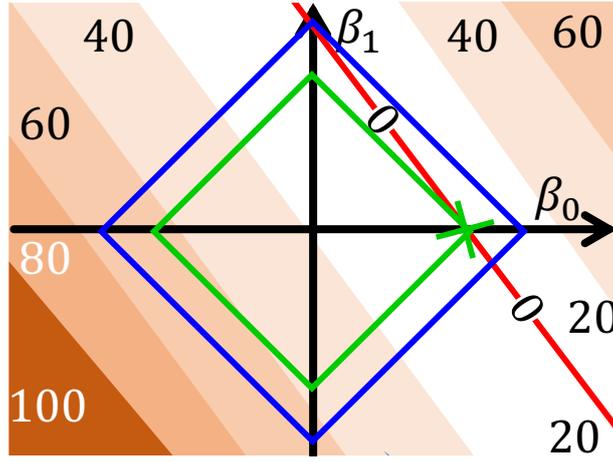


Abbildung 3.41: Visualisierung der Lasso-Regression: Die gefüllte Kontur verbildlicht die zu minimierende Funktion, die entlang der roten Linie minimal ist. Die beiden Parameter β_0 und β_1 können verändert werden. Die Kontur eines Quadrates hat dieselbe 1-Norm $\|[\beta_0, \beta_1]\|_1$. Das grüne Quadrat hat eine kleinere 1-Norm als das größere blaue Quadrat. Die Lasso-Regression minimiert die Funktion plus die 1-Norm und wählt die mit \times markierte Parameterkombination, bei der β_1 Null ist.

Mit 500 Validierungs-Simulationen wird die Wahl des richtigen Bestrafungsfaktors η festgelegt. Die Lasso-Methode erstellt mehrere Modelle mit verschiedenen Bestrafungsfaktoren η . Jedes Modell sagt die 500 FE-Simulationen des Validierungsdatensatzes vorher. Das Bayesche Informationskriterium [21] (BIC) wägt die Fehler der 500 Vorhersagen und die Anzahl der Parameter gegeneinander ab. Je weniger Fehler gemacht werden und je weniger Parameter benötigt werden, desto kleiner und besser ist das Informationskriterium. Das Modell mit dem kleinsten Informationskriterium auf dem Validierungsdatensatz wird anschließend gewählt. Nachdem mit der Lasso-Methode die Parameter eliminiert sind, wird mit den verbleibenden Parametern die Methode der gewichteten kleinsten Quadrate durchgeführt, um das finale Vorhersagemodell für den Erwartungswert zu erstellen.

Die Energiefreisetzungsrate $G'(a')$ kann nicht mit der Guyan-Reduktion berechnet werden. Wenn sich die Lastparameter ändern, ändert sich auch die Richtung der ersten Hauptnormalspannung und die Rissfläche liegt anders in der Risszelle. Wenn alle Lastparameter U^{RP} mit dem gleichen positiven Skalierfaktor λ multipliziert werden, wird die Dehnungsenergie $\Pi_{in} = U_{i_1}^{RP} \cdot K_{i_1, i_2} \cdot U_{i_2}^{RP}$ mit der Steifigkeitsmatrix K quadratisch auf $\lambda^2 \cdot \Pi_{in} = (\lambda \cdot U_{i_1}^{RP}) \cdot K_{i_1, i_2} \cdot (\lambda \cdot U_{i_2}^{RP})$ skaliert. Da die Energiefreisetzungsrate auf der Dehnungsenergie basiert, kann auch die Energiefreisetzungsrate

$$\lambda^2 \cdot G'(a') = (\lambda \cdot U_{i_2}^{RP}) \cdot f_{i_1}(a'_j) \cdot (\lambda \cdot U_{i_3}^{RP}) \cdot \beta_{i_1, i_2, i_3} = \lambda^2 \cdot U_{i_2}^{RP} \cdot f_{i_1}(a'_j) \cdot U_{i_3}^{RP} \cdot \beta_{i_1, i_2, i_3} \quad \text{mit } \lambda \geq 0 \quad (3.60)$$

fehlerfrei mit λ^2 skaliert werden, jedoch nur solange der Skalierfaktor nicht negativ ist, weil sich ansonsten die Richtung der Hauptnormalspannung verschiebt. Analog zu den Spannungen interpolieren die Ansatzfunktionen $f_{i_1}(a'_j)$ die Energiefreisetzungsrate über die Tiefe a' und mit β_{i_1, i_2, i_3} werden die Funktionen gewichtet.

Auch die Energiefreisetzungsrate wird mit einem linearen Gleichungssystem $G'_j = X_{ji} \beta_i$ vorhergesagt. Die Matrix

$$X_{ji} = f_{i_1}(a'_j) \cdot \hat{\sigma}'_{1,j}(a'_{i_2}) \cdot (c'_{\xi\xi,j})^{i_3} \cdot (c'_{\zeta\zeta,j})^{i_4} \cdot (c'_{\xi\zeta,j})^{i_5} \cdot (b'_{\max,j})^{i_6} \quad (3.61)$$

mit $i = (i_1, i_2, \dots, i_6)$ und $0 \leq i_2 \leq 3$ und $0 \leq i_3, i_4, i_5, i_6 \leq 3$

besteht aus den sechs Ansatzfunktionen $f_{i_1}(a'_j)$ sowie weiteren Funktionen der geschätzten Hauptnormalspannungen bei vier Tiefen oder der ins Hauptspannungssystem gedrehten Krümmungen. Außerdem hängt die Energiefreisetzungsrates im Gegensatz zu den Spannungen von der maximalen Rissbreite b'_{max} ab. Das Kapitel „Regressionsmodell für die Energiefreisetzung G' “ beschreibt die Regression für die Energiefreisetzungsrates genauer.

Regressionsmodell für σ'_{uu} und σ'_{vv}

Mit dem im folgenden beschriebenen Regressionsmodell kann die Spannung σ'_{uu} und die Spannung σ'_{vv} vorhergesagt werden. In einer FEM-Simulation werden beide Spannungen bei sechs Tiefen berechnet. Die Regression kann für jede FEM-Simulation also auf $2 \times 6 = 12$ Beobachtungen bauen und da 16384 FEM-Simulationen vorliegen, fließen in die Regression 196 608 Beobachtungen ein.

Das Regressionsmodell besteht aus einer Varianz- und einer Erwartungswert-Funktion. Für die Varianz-Funktion muss zuerst eine einfache lineare Regression

$$\hat{\sigma}'_{uu,linear} = \beta_i \cdot U_{i_1}^{RP} \cdot f_{i_2}(a') \text{ mit } i = (i_1, i_2) \quad (3.62)$$

mit den sieben Lastparametern $U_{i_1}^{RP} = [\varepsilon_{uu}, \varepsilon_{vv}, \varepsilon_{un}, \varepsilon_{vn}, k'_u, k'_v, \gamma_{uv}]$ und den sechs Ansatzfunktionen $f_{i_2}(a')$ berechnet werden. Dabei werden $7 \times 6 = 42$ Parameter β_i bestimmt. Die Varianz-Funktion

$$\text{Var}(\sigma'_{uu}) = \beta_i \cdot (U_{i_1}^{RP})^2 \cdot f_{i_2}(a') + \beta_j \cdot f_j(a') \text{ mit } i = (i_1, i_2) \quad (3.63)$$

approximiert die quadrierten Residuen von der einfachen linearen Regression. Die Varianz-Funktion unterscheidet sich von der einfachen linearen Regression in dem, dass die sieben Lastparametern $U_{i_1}^{RP}$ quadriert werden und sechs zusätzliche Parameter β_j verwendet werden, die die minimale Varianz entlang dem Risspfad definieren. Als Ansatzfunktionen $f_{i_2}(a')$ bzw. $f_j(a')$ werden stückweise lineare Funktionen verwendet und die 48 Parameter werden mit der „nicht negativen kleinste Quadrate“-Methode bestimmt, um zu verhindern, dass die Varianz negativ wird.

Die Erwartungswert-Funktion

$$\hat{\sigma}'_{uu} = \beta_i \cdot U_{i_1}^{RP} \cdot f_{i_2}(a') \cdot (c'_{uu})^{i_3} \cdot (c'_{vv})^{i_4} \text{ mit } i = (i_1, i_2, i_3, i_4) \text{ und } 0 \leq i_3 + i_4 \leq 3 \quad (3.64)$$

basiert auf allen sieben Lastparameter $U_{i_1}^{RP}$, allen sechs Ansatzfunktionen $f_{i_2}(a')$ und je vier Funktionen für die Geometrie-Parameter $(c'_{uu})^{i_3} \in \{1, c'_{uu}, c'^2_{uu}, c'^3_{uu}\}$ bzw. $(c'_{vv})^{i_4} \in \{1, c'_{vv}, c'^2_{vv}, c'^3_{vv}\}$. Durch die Forderung $0 \leq i_3 + i_4 \leq 3$ werden statt $4 \times 4 = 16$ Geometrie-Funktionen $(c'_{uu})^{i_3} \cdot (c'_{vv})^{i_4}$ nur noch zehn Geometrie-Funktionen ($1 \cdot 1, 1 \cdot c'_{vv}, 1 \cdot c'^2_{vv}, 1 \cdot c'^3_{vv}, c'_{uu} \cdot 1, c'_{uu} \cdot c'_{vv}, c'_{uu} \cdot c'^2_{vv}, c'^2_{uu} \cdot 1, c'^2_{uu} \cdot c'_{vv}, c'^3_{uu} \cdot 1$) verwendet. Die Regression bestimmt also $7 \times 6 \times 10 = 420$ Parameter β_i , allerdings werden mit der Lasso-Methode unwichtige Parameter aussortiert.

Abbildung 3.42a zeigt, dass das Bayessche Informationskriterium [21] bei einem Bestrafungsfaktor von $\eta = 0.1$ am kleinsten ist. Das Bayessche Informationskriterium wird für einen separaten Validierungsdatensatz berechnet und wiegt die Anzahl der Variablen und die Summe der quadrierten Residuen gegeneinander ab. Je weniger Variablen und je kleiner die Summe der quadrierten Residuen, desto kleiner ist das Bayessche Informationskriterium. Das gewählte Modell benötigt statt 420 Parameter nur 167 Parameter. Obwohl die Mehrzahl der

Parameter verworfen wird, ist die Vorhersage in Abbildung 3.42b relativ nahe an der FEM-Simulation. Jedoch liegt die FEM-Simulation nicht innerhalb des 95%-Vorhersageintervalls. Das Vorhersageintervall sagt nur, dass in etwa 95% der Fälle bei einer bestimmten Tiefe a' eine neue Beobachtung innerhalb des Vorhersageintervalls liegt. Es werden aber mehrere Tiefen von $a' = 0$ mm bis zu a'_{max} beobachtet. Dementsprechend ist die Wahrscheinlichkeit, dass die Vorhersage über die ganze Länge innerhalb des Vorhersageintervalls liegt, kleiner als 95% und einer der Fälle ist eingetreten, in denen nicht die ganze Länge überdeckt wird. Die Ausnahme bestätigt somit die Regel.

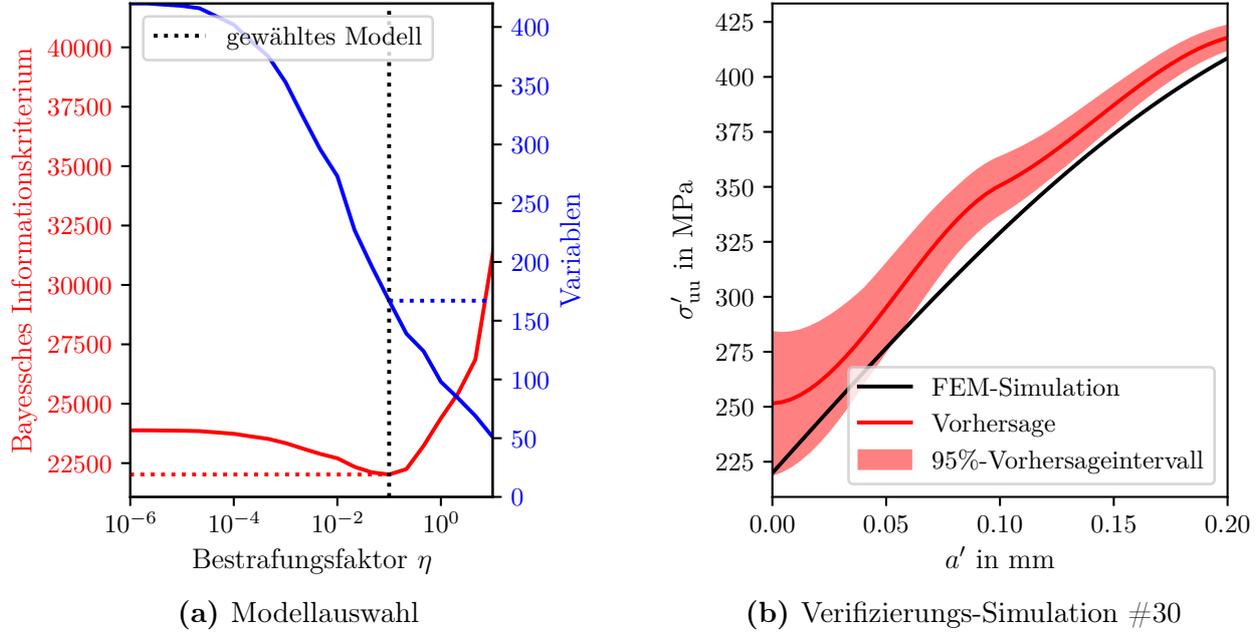


Abbildung 3.42: Regressionsmodell für σ'_{uu} und σ'_{vv}

Regressionsmodell für σ'_{nn}

Im Vergleich zum vorherigen Regressionsmodell für σ'_{uu} und σ'_{vv} fließen in diese Regression nur halb so viele Beobachtungen ein, weil in jeder FE-Simulation nur die Spannung σ'_{nn} bei sechs Tiefen beobachtet wird, anstelle der zwei Spannungen σ'_{uu} und σ'_{vv} . Dafür kann eine Symmetrie

$$U^{RP,u} = [\varepsilon_{uu}, \varepsilon_{un}, k'_{uu}] \rightsquigarrow U^{RP,v} = [\varepsilon_{vv}, \varepsilon_{vn}, k'_{vv}] \quad (3.65)$$

ausgenutzt werden, wenn die Zelle um 90° rotiert wird. Dadurch halbiert sich die Anzahl der Lastparameter, weil bei den zwei Termen

$$\beta_i \cdot U_i^{RP,u} + \beta_j \cdot U_j^{RP,v} \quad (3.66)$$

durch die Symmetrie die Parameter-Vektoren gleich sind ($\beta_i = \beta_j$) und zu

$$\beta_i \cdot (U_i^{RP,u} + U_i^{RP,v}) \quad (3.67)$$

zusammengefasst werden. Die Scherung $\gamma_{uv} \rightsquigarrow -\gamma_{uv}$ kürzt sich selbst $\beta \cdot (\gamma_{uv} - \gamma_{uv}) = 0$ und hat keinen Einfluss.

Die Spannung $\sigma'_{nn}(0 \text{ mm}) = 0$ MPa ist an der Porenoberfläche Null. Bei den Ansatzfunktionen aus Abbildung 3.40 hat nur die Funktion $f_0(0 \text{ mm})$ an der Porenoberfläche einen

Wert ungleich Null. Alle anderen Ansatzfunktionen $f_{i_2}(0 \text{ mm}) = 0$ sind an der Porenoberfläche Null. Die Ansatzfunktion f_0 wird nicht in die Regression mit aufgenommen und dadurch wird garantiert, dass die Spannung an der Porenoberfläche Null ist.

Die lineare Regression

$$\hat{\sigma}'_{\text{nn,linear}} = \beta_i \cdot (U_{i_1}^{RP,u} \cdot f_{i_2}(a') + U_{i_1}^{RP,v} \cdot f_{i_2}(a')) \text{ mit } i = (i_1, i_2) \text{ und } 1 \leq i_2 \leq 5 \quad (3.68)$$

verwendet also anstatt sechs Ansatzfunktionen nur fünf Ansatzfunktionen $f_{i_2}(a')$, weil die Ansatzfunktion $f_0(a')$ aus Abbildung 3.40 nicht verwendet wird. Somit müssen nur $3 \times 5 = 15$ Parameter β_i bestimmt werden.

Die Varianz-Funktion

$$\text{Var}(\sigma'_{\text{nn}}) = \beta_i \cdot ((U_{i_1}^{RP,u})^2 \cdot f_{i_2}(a') + (U_{i_1}^{RP,v})^2 \cdot f_{i_2}(a')) + \beta_j \cdot f_j(a') \quad (3.69)$$

mit $i = (i_1, i_2)$ und $1 \leq i_2, j \leq 5$

quadriert die symmetrischen Lastparameter $(U_{i_1}^{RP,u})^2$ bzw. $(U_{i_1}^{RP,v})^2$ und verwendet fünf zusätzliche Parameter β_j , die die minimale Varianz entlang des Risspfades definieren. Die Funktion $f_0(a')$ bei den stückweise linearen Funktionen aus Abbildung 3.40a wird nicht verwendet, sodass auch die Varianz an der Porenoberfläche Null ist. Die Varianz-Funktion benötigt $3 \times 5 + 5 = 20$ Parameter.

Auch bei der Erwartungswert-Funktion

$$\hat{\sigma}'_{\text{nn}} = \beta_i \cdot (U_{i_1}^{RP,u} \cdot f_{i_2}(a') \cdot (c'_{\text{uu}})^{i_3} \cdot (c'_{\text{vv}})^{i_4} + U_{i_1}^{RP,v} \cdot f_{i_2}(a') \cdot (c'_{\text{vv}})^{i_3} \cdot (c'_{\text{uu}})^{i_4}) \quad (3.70)$$

mit $i = (i_1, i_2, i_3, i_4)$ und $0 \leq i_3 + i_4 \leq 3$ und $i_3 \geq i_4$ und $1 \leq i_2 \leq 5$

wird die Ansatzfunktion $f_0(a')$ bei der Hermiteinterpolation aus Abbildung 3.40b nicht verwendet, sodass die Spannung an der Porenoberfläche Null wird. Wie bei allen Erwartungswert-Funktionen werden mit der Lasso-Methode nicht benötigte Parameter auf Null gesetzt.

Regressionsmodell für σ'_{un} und σ'_{vn}

Wie schon beim Regressionsmodell für σ'_{un} und σ'_{vn} können aus jeder FEM-Simulation doppelt so viele Beobachtungen ausgelesen werden wie beim Regressionsmodell für σ'_{nn} . Einmal wird die Spannung σ'_{un} und noch einmal wird bei der gedrehten Zellen die Spannung σ'_{vn} beobachtet. Die lineare Regression

$$\hat{\sigma}'_{\text{un,linear}} = \beta_i \cdot \varepsilon_{\text{un}} \cdot f_i(a') \text{ mit } 1 \leq i \leq 5 \quad (3.71)$$

basiert nur auf einem Lastparameter ε_{un} und fünf Ansatzfunktionen $f_i(a')$. An der Porenoberfläche ist diese Spannung Null, also wird die Ansatzfunktionen $f_0(a')$ nicht verwendet. Somit müssen nur $1 \times 5 = 5$ Parameter β_i bestimmt werden.

Die Varianz-Funktion

$$\text{Var}(\sigma'_{\text{un}}) = \beta_i \cdot \varepsilon_{\text{un}}^2 \cdot f_i(a') + \beta_j \cdot f_j(a') \text{ mit } 1 \leq i, j \leq 5 \quad (3.72)$$

quadriert den Lastparameter ε_{un} und verwendet fünf zusätzliche Parameter β_j . Die Varianz ist an der Porenoberfläche Null, weil die Ansatzfunktionen $f_0(a')$ nicht verwendet wird. $1 \times 5 + 5 = 10$ Parameter müssen bestimmt werden.

Auch bei der Erwartungswert-Funktion

$$\hat{\sigma}'_{\text{un}} = \beta_i \cdot \varepsilon_{\text{un}} \cdot f_{i_1}(a') \cdot (c'_{\text{uu}})^{i_2} \cdot (c'_{\text{vv}})^{i_3} \quad (3.73)$$

mit $i = (i_1, i_2, i_3)$ und $1 \leq i_1 \leq 5$ und $0 \leq i_2 + i_3 \leq 3$

wird die Ansatzfunktion $f_0(a')$ nicht verwendet, sodass die Spannung an der Porenoberfläche Null ist. Mit den fünf verbleibenden Ansatzfunktionen und den zehn Krümmungsfunktionen $(c'_{\text{uu}})^{i_2} \cdot (c'_{\text{vv}})^{i_3}$ gibt es 50 unbekannte Parameter.

Regressionsmodell für σ'_{uv}

Auch bei diesem Regressionsmodell können doppelt so viele Beobachtungen aus einer FEM-Simulation abgeleitet werden wie beim Regressionsmodell für σ'_{un} . Einmal wird die Spannung σ'_{uv} beobachtet, dann wird die Zelle gedreht und die negierte Spannung $-\sigma'_{\text{uv}}$ beobachtet. Die lineare Regression

$$\hat{\sigma}'_{\text{uv,linear}} = \beta_i \cdot \gamma_{\text{uv}} \cdot f_i(a') \quad (3.74)$$

basiert nur auf einem Lastparameter γ_{uv} und sechs Ansatzfunktionen $f_i(a')$. Die Spannung ist an der Porenoberfläche nicht Null, also wird die Ansatzfunktionen $f_0(a')$ verwendet und die Regression hat $1 \times 6 = 6$ Parameter.

Die Varianz-Funktion

$$\text{Var}(\sigma'_{\text{uv}}) = \beta_i \cdot \gamma_{\text{uv}}^2 \cdot f_i(a') + \beta_j \cdot f_j(a') \quad (3.75)$$

quadriert den Lastparameter γ_{uv} und verwendet sechs zusätzliche Parameter β_j . Die Erwartungswert-Funktion

$$\hat{\sigma}'_{\text{uv}} = \beta_i \cdot \gamma_{\text{uv}} \cdot f_{i_1}(a') \cdot \left((c'_{\text{uu}})^{i_2} \cdot (c'_{\text{vv}})^{i_3} + (c'_{\text{vv}})^{i_2} \cdot (c'_{\text{uu}})^{i_3} \right) \quad (3.76)$$

mit $i = (i_1, i_2, i_3)$ und $0 \leq i_2 + i_3 \leq 3$ und $i_2 \geq i_3$

nützt die Symmetrie $c'_{\text{vv}} \rightsquigarrow c'_{\text{uu}}$ aus, um die Anzahl der Variablen zu reduzieren.

Modell für die Hauptnormalspannung σ'_1

Die Regressionsmodelle für die Spannungen sagen den kompletten Spannungstensor σ'_{ij} vorher. Die Hauptnormalspannung σ'_1 ist der größte Eigenwert des Spannungstensors. Mit dem Eigenvektor e_i für die größte Hauptnormalspannung und der Matrix $\text{Var}(\sigma'_{ij})$, die die Varianzen der Spannungskomponenten enthält, wird die Varianz für die größte Hauptnormalspannung

$$\text{Var}(\sigma'_1) = e_i^2 \cdot \text{Var}(\sigma'_{ij}) \cdot e_j^2 \quad (3.77)$$

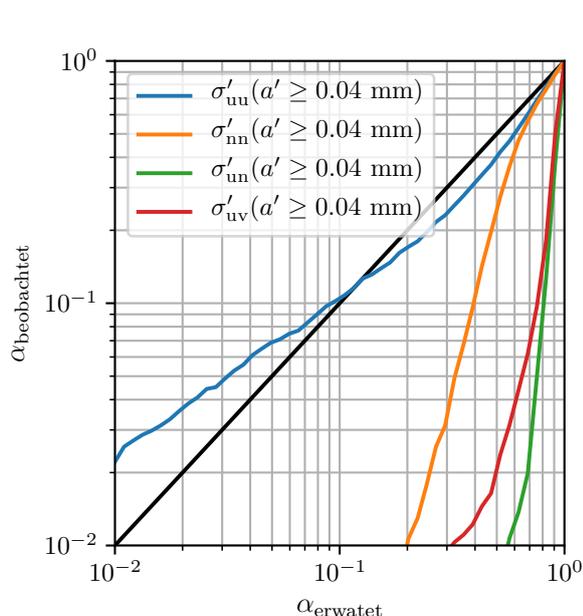
berechnet. Diese Berechnungsmethode ist nur eine Näherung, da sie die Unsicherheit des Eigenvektors e_i nicht berücksichtigt.

In Abbildung 3.43 werden die Vorhersageintervalle anhand von 524 Verifizierungs-Simulationen überprüft. Die Spannungen werden dabei erst ab einer Tiefe von $a' = 0.04$ mm verglichen, da viele Spannungen an der Porenoberfläche in der Theorie und im statistischen Modell Null sind. In den Ergebnissen der FE-Simulationen ist das meistens nicht der Fall,

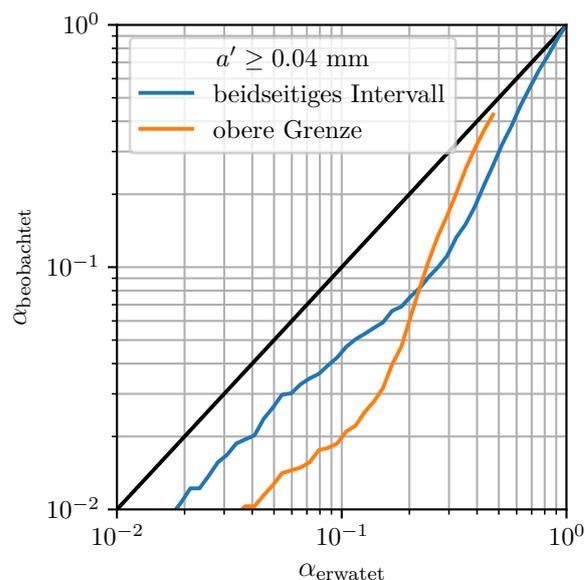
weshalb bei einer kleinen Tiefe viele Beobachtungen außerhalb des Vorhersageintervalls liegen.

Aus Abbildung 3.43a ist ersichtlich, dass die meisten Vorhersageintervalle zu konservativ sind. Bei einem beobachteten Fehler von $\alpha_{\text{beobachtet}} = 0.05$ wird für die Spannung σ'_{uu} ein Fehler von $\alpha_{\text{erwartet}} = 0.03$ erwartet. Es wird also erwartet, dass 3% der Beobachtungen außerhalb des Vorhersageintervalls liegen (Fehler). Tatsächlich liegen jedoch 5% der Beobachtungen außerhalb. Das Vorhersageintervall ist in diesem Fall also zu klein. Für die Spannung σ'_{nn} liegen bei einem erwarteten Fehler von 0.2 (20%) hingegen 0.01 (1%) Beobachtungen außerhalb des Vorhersageintervalls. Das Vorhersageintervall ist also zu breit.

Dass die Vorhersageintervalle für die Spannungen nicht sonderlich gut funktionieren liegt daran, dass die gewichteten Residuen nicht normalverteilt sind. Für die Hauptnormalspannung σ'_1 muss die Annahme, dass die gewichteten Residuen normalverteilt sind, zwar ebenfalls verworfen werden, aber die Vorhersageintervalle in Abbildung 3.43b funktionieren etwas besser. Bei einem erwarteten Fehler von $\alpha_{\text{erwartet}} = 0.05$ wird für das beidseitige Intervall ein Fehler von $\alpha_{\text{beobachtet}} = 0.03$ und für die obere Grenze ein Fehler von $\alpha_{\text{beobachtet}} = 0.013$ beobachtet. Es wird also erwartet, dass 5% der Beobachtungen außerhalb des Vorhersageintervalls bzw. oberhalb der oberen Grenze liegen (Fehler). Tatsächlich liegen jedoch nur 3% der Beobachtungen außerhalb des Intervalls und 1.3% über der oberen Grenze. Die Vorhersageintervalle sind also etwas zu konservativ.



(a) Beobachteter Fehler $\alpha_{\text{beobachtet}}$ über den erwarteten Fehler α_{erwartet} für die Spannungsmodelle.



(b) Beobachteter Fehler $\alpha_{\text{beobachtet}}$ über den erwarteten Fehler α_{erwartet} für ein beidseitiges Vorhersageintervall und eine obere Grenze für die Hauptnormalspannung.

Abbildung 3.43: Verifizierung des Vertrauensbereichs mit einem zufälligen Versuchsplan ($n=524$): Der Fehler α gibt an, wie viele Beobachtungen außerhalb des Vertrauensbereichs liegen.

Regressionsmodell für die Energiefreisetzung G'

Da die Energiefreisetzung G' an der Porenoberfläche Null ist, verwendet die quadratische Regression

$$\hat{G}'_{\text{quad}} = \beta_i \cdot \left((U_{i_1}^{RP,u})^2 \cdot f_{i_2}(a') + (U_{i_1}^{RP,v})^2 \cdot f_{i_2}(a') \right) \text{ mit } i = (i_1, i_2) \text{ und } 1 \leq i_2 \leq 5 \quad (3.78)$$

anstatt sechs Ansatzfunktionen nur fünf Ansatzfunktionen $f_{i_2}(a')$ von der Hermiteinterpolation. Die bereits von den Regressionsmodellen für die Spannungen bekannte Symmetrie hilft wieder die Anzahl der Variablen zu reduzieren. Im Gegensatz zu den Spannungen werden die Last-Faktoren quadriert, sodass die symmetrischen Lastparameter

$$U^{RP,u} = [\varepsilon_{uu}, \varepsilon_{un}, k'_{uu}, \gamma_{uv}] \rightsquigarrow U^{RP,v} = [\varepsilon_{vv}, \varepsilon_{vn}, k'_{vv}, -\gamma_{uv}] \quad (3.79)$$

auch die Scherung γ_{uv} beachten müssen, die sich zuvor herausgekürzt hat.

Die Varianz-Funktion

$$\text{Var}(G') = \beta_i \cdot \left((U_{i_1}^{RP,u})^4 \cdot f_{i_2}(a') + (U_{i_1}^{RP,v})^4 \cdot f_{i_2}(a') \right) + \beta_j \cdot f_j(a') \quad (3.80)$$

mit $i = (i_1, i_2)$ und $1 \leq i_2, j \leq 5$

ist eine quartische Funktion der symmetrischen Lastparameter $(U_{i_1}^{RP,u})^4$ bzw. $(U_{i_1}^{RP,v})^4$ und verwendet wieder fünf zusätzliche Parameter β_j . Die Funktion $f_0(a')$ bei den stückweise linearen Funktionen aus Abbildung 3.40a wird nicht verwendet, sodass auch die Varianz an der Porenoberfläche Null ist.

Die Erwartungswert-Funktion

$$\hat{G}' = \beta_i \cdot \hat{\sigma}_1(a_{i_1}) \cdot f_{i_2}(a') \cdot (c'_{\xi\xi})^{i_3} \cdot (c'_{\zeta\zeta})^{i_4} \cdot (c'_{\xi\zeta})^{i_5} \cdot (b'_{max})^{i_6} \quad (3.81)$$

mit $i = (i_1, \dots, i_6)$ und $1 \leq i_2 \leq 5$ und $0 \leq i_3 + i_4 + i_5 + i_6 \leq 3$

nimmt als Eingabe die vorhergesagte Hauptnormalspannung $\hat{\sigma}_1(a_{i_1})$ bei vier Tiefen $a_{i_1} = [0 \text{ mm}, 0.07 \text{ mm}, 0.13 \text{ mm}, 0.2 \text{ mm}]$, fünf Ansatzfunktionen der Hermiteinterpolation $f_{i_2}(a')$ sowie mehrere Funktionen für die Geometrie-Parameter. Die Krümmungen $c'_{\xi\xi}$, $c'_{\zeta\zeta}$, $c'_{\xi\zeta}$ sind die Krümmungen der Porenoberfläche, die in das Hauptspannungssystem rotiert werden. Außerdem ist diese Erwartungswert-Funktion die einzige Funktion, auf die die maximale Rissbreite b'_{max} einen Einfluss hat. Insgesamt müssen für die Funktion 420 Parameter bestimmt werden, wobei natürlich wieder die Lasso-Methode angewandt wird, um unwichtige Parameter Null zu setzen.

Für die Interpolation der Energiefreisetzungsrates wird die Hermiteinterpolation verwendet. Da einige Ansatzfunktionen teilweise negative Werte haben, kann nicht ausgeschlossen werden, dass die Energiefreisetzungsrates negativ wird.

Abbildung 3.44 zeigt die Vorhersage der Hauptnormalspannung σ'_1 (3.44a) und der Energiefreisetzungsrates G' (3.44b) anhand eines Beispiels aus dem zufälligen Versuchsplan.

Die Verifizierungs-Simulation #30 wird mit einer Belastung $\varepsilon_{uu} = 0.342$, $\varepsilon_{un} = 0.853$, $\gamma_{uv} = -0.0276$, $\varepsilon_{vn} = -0.471$, $\gamma_{vn} = -0.757$, $k'_{u_1} = -0.587 \text{ 1/mm}$, $k'_{v_1} = 0.0888 \text{ 1/mm}$ beaufschlagt. Die Krümmungen betragen $c'_{uu} = 0.521 \text{ 1/mm}$ und $c'_{vv} = 0.530 \text{ 1/mm}$. Die maximale Rissbreite ist $b'_{max} = 0.239 \text{ mm}$.

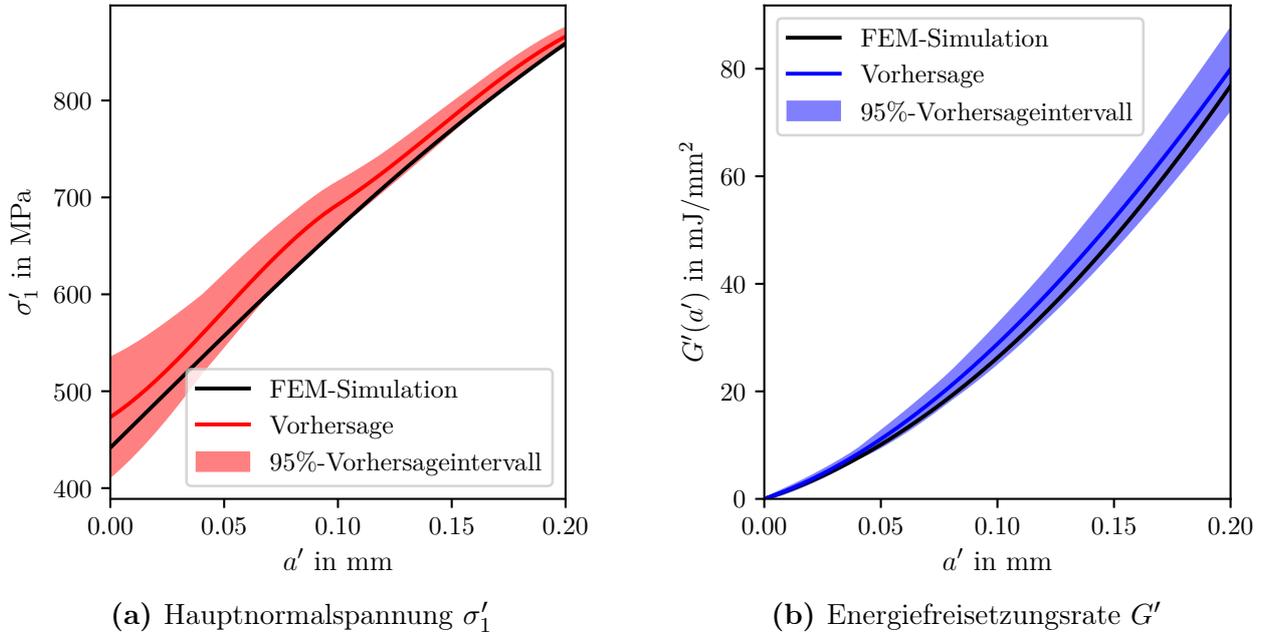


Abbildung 3.44: Verifizierungs-Simulation #30

3.4 Schnittstelle vom Rissmodell zum lokalen Modell

Mit dem FE-Modell oder mit dem statistischen Modell werden die Energiefreisetzungsrate $G'(a')$ und die größte Hauptnormalspannung $\sigma'_1(a')$ im Rissmodell berechnet. Die Ergebnisse müssen nun wieder in das lokale Modell übertragen werden. Wie in Kapitel 3.2 werden dafür zuerst dimensionslose Kennzahlen definiert. Die dimensionslose Hauptnormalspannung

$$\sigma_1^* = \frac{\sigma'_1}{E'} = \frac{\sigma'_1}{1000 \text{ MPa}} \quad (3.82)$$

dividiert die Hauptnormalspannung σ'_1 durch den E-Modul E' . Die dimensionslose Energiefreisetzungsrate

$$G^* = \frac{G'}{E' \cdot a'_{max}} = \frac{G'}{200 \text{ mJ/m}^3} \quad (3.83)$$

bezieht die Energiefreisetzungsrate auf das Produkt des E-Moduls E' und der maximalen Risslänge a'_{max} . Der E-Modul im Rissmodell E' und die maximale Risslänge im Rissmodell a'_{max} sind in Tabelle 3.2 aufgelistet.

Abbildung 3.45 zeigt die dimensionslosen Verläufe der Hauptnormalspannung und der Energiefreisetzungsrate bei verschiedenen stark gekrümmten Risszellen.

Aus den dimensionslosen Kennzahlen können mit dem Ähnlichkeitsprinzip die Werte für das lokale Modell ermittelt werden. Mit dem E-Modul des Materials E ergibt sich die Hauptnormalspannung im lokalen Modell

$$\sigma_1 = \sigma_1^* \cdot E \quad (3.84)$$

aus der dimensionslosen Hauptnormalspannung σ_1^* . Die Energiefreisetzungsrate im lokalen Modell

$$G = G^* \cdot E \cdot a_{max} \quad (3.85)$$

skaliert die dimensionslose Energiefreisetzungsrate mit dem E-Modul E und der maximalen Risslänge a_{max} .

Abbildung 3.46 zeigt, dass für zwei Risszellen die Hauptnormalspannung σ'_1 im Rissmodell ermittelt wird. Die Risszelle 1 ist im Rissmodell stärker gekrümmt und es tritt eine höhere Kerbwirkung auf als bei der Risszelle 2. Dafür wirkt sich die Kerbwirkung bei der Risszelle 2 stärker in der Berechnung der Lastparameter aus. Die Risszelle 2 wird also mit einer höheren Dehnung beaufschlagt. Wenn die Spannungsverläufe vom Rissmodell in das lokale Modell übertragen werden, überdecken sie sich idealerweise.

Das kombinierte Kriterium sagt die Rissinitiierung vorher. Dafür benötigt das kombinierte Kriterium neben dem Verlauf der Hauptnormalspannung $\sigma_1(a)$ und dem Verlauf der Energiefreisetzungsrate $G(a)$ auch die kritische Hauptnormalspannung $\sigma_{1,krit}$ und die kritische Energiefreisetzungsrate G_{krit} . Wie in den vorherigen Kapiteln erwähnt ist es bei der Auslegung sinnvoll, Sicherheitsfaktoren anzuwenden. Statt der kritischen Hauptnormalspannung wird eine korrigierte kritische Hauptnormalspannung

$$\sigma_{1,krit,korrigiert} = \frac{\sigma_{1,krit}}{S_{BC,0.05}^\sigma} = \frac{\sigma_{1,krit}}{1.25} \quad (3.86)$$

und statt der kritischen Energiefreisetzungsrate wird eine korrigierte kritische Energiefreisetzungsrate

$$G_{krit,korrigiert} = \frac{G_{krit}}{S_{a'_{max}} \cdot S_{BC,0.05}^G \cdot S_{Netz}} = \frac{G_{krit}}{1.05 \cdot 1.35 \cdot 1.04} \quad (3.87)$$

verwendet. Das statistische Modell bietet zudem die Möglichkeit, statt des Erwartungswertes der Energiefreisetzungsrate und der Hauptnormalspannung eine obere Grenze zu verwenden, um auch den Vorhersage-Fehler zu berücksichtigen. Dabei ist mit einer Irrtumswahrscheinlichkeit α die Energiefreisetzungsrate bzw. die Hauptnormalspannung kleiner als die vorhergesagte obere Grenze.

Das kombinierte Kriterium ist im Kapitel 2.3 beschrieben. Das kombinierte Kriterium gibt einen kritischen Lastfaktor λ_{krit} und eine Rissinitiierungslänge a_{init} an, bei der der Riss laut dem Kriterium initiiert. Der kritische Lastfaktor λ_{krit} ist der niedrigste Faktor, mit dem die aktuelle Last skaliert werden muss, um eine Rissinitiierung vorherzusagen. Wenn die Rissinitiierungslänge a_{init} größer als die maximale Risslänge a_{max} ist, kann die Rissinitiierung nicht mehr vorhergesagt werden, aber es kann eine untere Grenze für den kritischen Lastfaktor

$$\lambda_{krit} \geq \lambda_\sigma(a_{max}) = \frac{\sigma_{1,krit,korrigiert}}{\sigma_{1,min}(a_{max})} \text{ mit } \sigma_{1,min}(a) = \min\{\sigma_1(x) \mid 0 \leq x \leq a\} \quad (3.88)$$

angegeben werden. Das kombinierte Kriterium verwendet den bisher niedrigsten Wert der Hauptnormalspannung bis zur Tiefe a . Dadurch ist die Hauptnormalspannung im kombinierten Kriterium $\sigma_{1,min}(a)$ monoton fallend. Bei allen Rissinitiierungslängen a_{init} , die größer als die maximale Risslänge a_{max} sind, ist die bisher niedrigste Hauptnormalspannung $\sigma_{1,min}(a_{init})$ maximal so groß wie $\sigma_{1,min}(a_{max})$. Dadurch kann der kritische Lastfaktor λ_{krit} nicht kleiner sein als die angegebene untere Grenze.

Das kombinierte Kriterium hat drei mögliche Aussagen:

1. Eine Rissinitiierung wird ausgeschlossen, weil die Hauptnormalspannung negativ ist und das Spanningskriterium nie erfüllt ist.

2. Die Rissinitiierung wird bei der Rissinitiierungslänge $a_{init} \leq a_{max}$ und dem kritischen Lastfaktor λ_{krit} vorhergesagt.
3. Eine Rissinitiierung kann weder ausgeschlossen noch bestätigt werden, aber wenn ein Riss initiiert, dann muss er länger sein als die maximale Risslänge $a_{init} > a_{max}$ und der kritische Lastfaktor darf nicht kleiner als der Spannungslastfaktor bei der maximalen Risslänge sein ($\lambda_{krit} \geq \lambda_{\sigma}(a_{max})$).

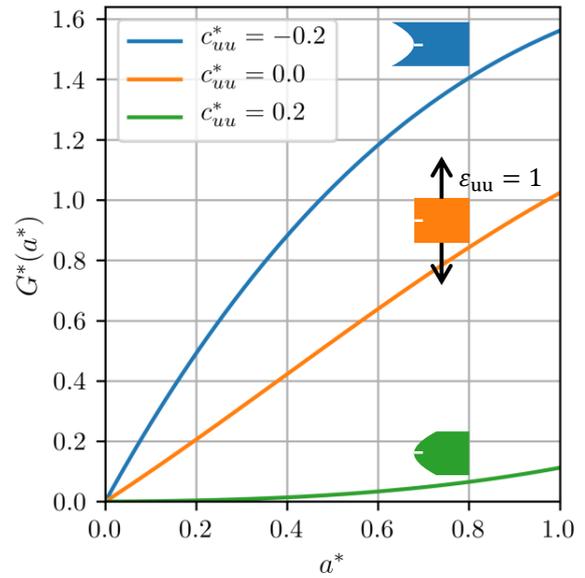
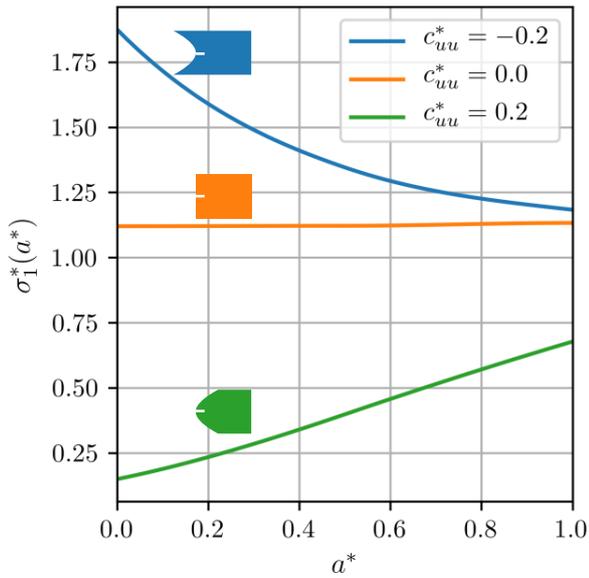
Der Benutzer kann im lokalen Modell mehrere verschiedene maximale Risslängen $a_{max,i}$ verwenden, um für möglichst jede Stelle an der Pore die Rissinitiierung entweder ausschließen oder den kritischen Lastfaktor λ_{krit} vorhersagen zu können. Das kombinierte Kriterium trifft für jede eingegebene maximale Risslänge eine der drei Aussagen. Aus den vielen Aussagen für die verschiedenen maximalen Risslängen muss eine einzige Aussage abgeleitet werden. Dazu werden die folgenden Regeln in der angegebenen Reihenfolge angewandt.

1. Gib den kleinsten und kritischsten Lastfaktor λ_{krit} zurück, bei dem eine Rissinitiierung vorhergesagt wird (Aussage 2).
2. Wenn bei keiner maximale Risslänge die Aussage 2 getroffen wird, aber bei mindestens einer maximalen Risslänge die Aussage 1 (keine Rissinitiierung), dann ist die finale Aussage, dass keine Rissinitiierung möglich ist.
3. Wenn bei den verschiedenen maximalen Risslängen weder eine Rissinitiierung ausgeschlossen (Aussage 1) noch bestätigt (Aussage 2) wird, wird die größte untere Grenze $\lambda_{krit} \geq \max\{\lambda_{\sigma}(a_{max,i})\}$ für den kritischen Lastfaktor zurückgegeben.

Dieser Vorgang wird für jede Stelle auf der Porenoberfläche wiederholt. Mit dem kleinsten nicht negativen Lastfaktor λ_{krit} wird der Versagensindex

$$FI = \frac{1}{\lambda_{krit}} \quad (3.89)$$

berechnet. Für eine Pore in einem Bauteil unter Last bedeutet ein Versagensindex kleiner Eins, dass an dieser Position bei der verwendeten Belastung keine Rissinitiierung vorhergesagt wird. Bei einem Versagensindex gleich Eins initiiert an dieser Position laut dem Kriterium ein Riss. Wenn der Versagensindex größer Eins ist, ist laut dem Kriterium an dieser Position schon bei einer geringeren Last ein Riss initiiert. Unter der Annahme von linearen Deformationen und Materialverhalten initiiert beispielsweise bei einem Versagensindex von $FI = 10$ schon bei $1/10$ der aufgebrachten Last ein Riss.



(a) dimensionslose Hauptnormalspannung σ_1^*

(b) dimensionslose Energiefreisetzungsrate G^*

Abbildung 3.45: Dimensionslose Hauptnormalspannung σ_1^* und Energiefreisetzungsrate G^* über die dimensionslose Tiefe a^* bei verschiedenen dimensionslosen Krümmungen c_{uu}^* . Die Proben werden mit einer Dehnung $\varepsilon_{uu} = 1$ beaufschlagt. Alle anderen Dehnungen, Scherungen, Biegungen und Krümmungen werden Null gesetzt.

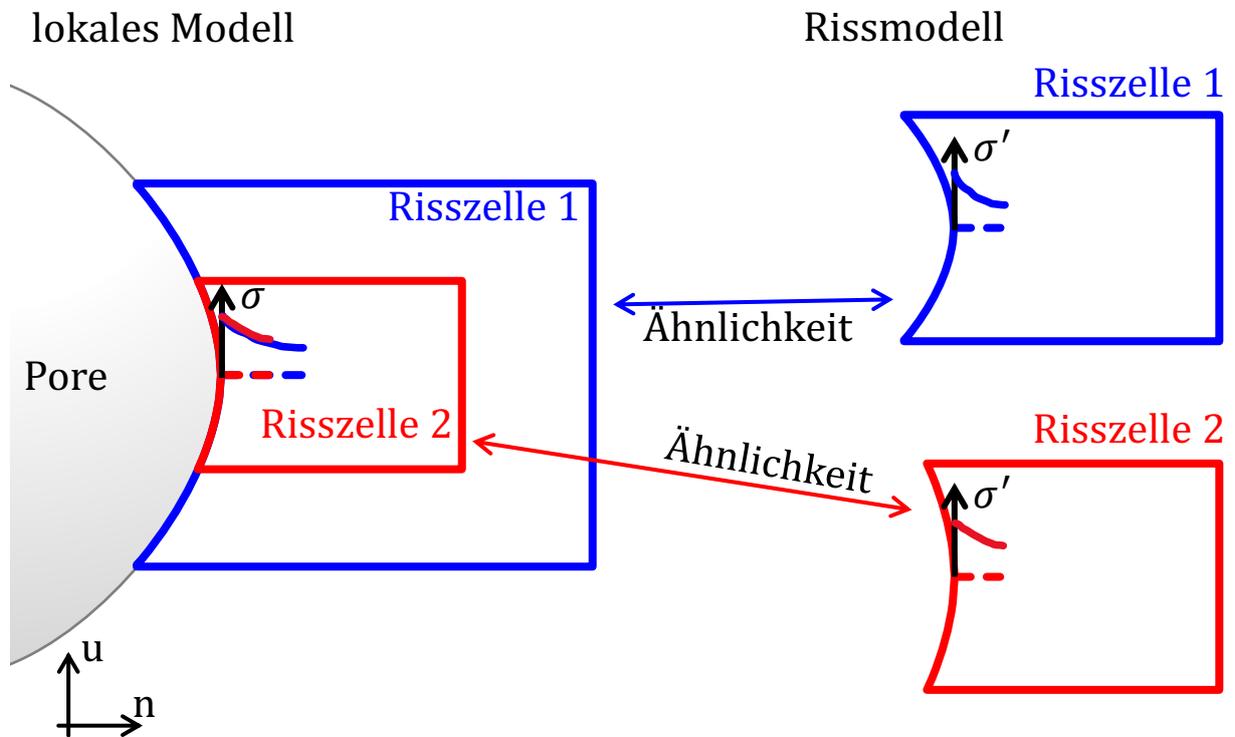


Abbildung 3.46: Übertragung des Spannungsverlaufes vom Rissmodell in das lokale Modell.

Kapitel 4

Ergebnisse

Anhand von zwei Porenformen und uniaxialer globaler Belastung wird das entwickelte Programm „Boris“ angewandt und die Ergebnisse werden dargestellt. Die erste Porenform ist eine computergenerierte ellipsoide Pore, für die der Versagensindex einmal mit „Boris“ und einmal mit Submodellen berechnet wird. Die zweite Pore stammt aus einem realen CT-Bild und wird in Kapitel 4.2 ausgewertet.

4.1 Ellipsoid

Das lokale Modell enthält eine elliptische Pore. Das lokale Modell wird mit dem Dehnungstensor

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} & \gamma_{xy} & \gamma_{xz} \\ \gamma_{xy} & \varepsilon_{yy} & \gamma_{yz} \\ \gamma_{xz} & \gamma_{yz} & \varepsilon_{zz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.1)$$

belastet. Die Geometrie der Pore ist vorgegeben und muss nicht aus einem CT-Bild extrahiert werden. Um „Boris“ auf die vorgesehene Weise verwenden zu können, wird dennoch ein CT-Bild computergeneriert. Abbildung 4.1 stellt die Porenoberfläche dar, die aus dem computergenerierten CT-Bild extrahiert wird. Die Belastung aus Gleichung 4.1 führt zur farblich dargestellten Verschiebungen in x-Richtung an der Porenoberfläche.

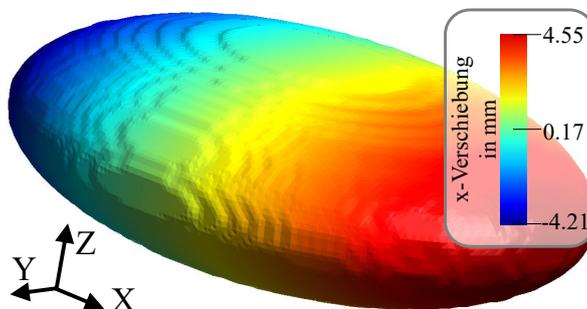


Abbildung 4.1: Verschiebungen in x-Richtung an der Porenoberfläche bei einer aufgebrachten Dehnung von $\varepsilon_{xx} = 1$. Die Porenoberfläche wird mit dem „Marching Cubes“-Algorithmus aus einem computergenerierten CT-Bild der Pore extrahiert.

Das lokale Modell ist eine quaderförmige Zelle, in deren Mitte die Pore liegt. Tabelle 4.1 listet die Abmessungen der Pore sowie der Zelle auf.

Tabelle 4.1: Abmessungen der Pore und der Zelle

Dimension	Pore	Zelle
x	$l_{x,\text{Pore}} = 6 \text{ mm}$	$l_{x,\text{Zelle}} = 15 \text{ mm}$
y	$l_{y,\text{Pore}} = 4 \text{ mm}$	$l_{y,\text{Zelle}} = 10 \text{ mm}$
z	$l_{z,\text{Pore}} = 2 \text{ mm}$	$l_{z,\text{Zelle}} = 5 \text{ mm}$

Wie aus Tabelle 4.2 ersichtlich werden die kritische Hauptnormalspannung σ_{krit} , die kritische Energiefreisetzungsrate G_{krit} sowie der E-Modul E so gewählt, dass an jeder Stelle der Porenoberfläche das kombinierte Kriterium erfüllt ist. Die Querkontraktionszahl $\nu = 0.35$ ist fix vorgegeben und kann nicht verändert werden. Die gewählten Materialparameter stammen nicht von einem realen Material.

Tabelle 4.2: Materialparameter

E-Modul	$E = 1000 \text{ MPa}$
kritische Hauptnormalspannung	$\sigma_{1,\text{krit}} = 250 \text{ MPa}$
kritische Energiefreisetzungsrate	$G_{krit} = 1 \text{ mJ/mm}^2$

Außerdem werden die in Tabelle 4.3 aufgelisteten Parameter für die Auswertung verwendet. Das Ziel der Auswertung ist ein möglichst erwartungstreu Ergebnis, weshalb die Irrtumswahrscheinlichkeit auf $\alpha = 0.5$ gesetzt wird, sodass der erwartete Mittelwert für die Hauptnormalspannung und die Energiefreisetzungsrate berechnet wird. Die Sicherheitsfaktoren werden aus demselben Grund auf Eins festgelegt.

Tabelle 4.3: Auswerteparameter für „Boris“

Auflösung des CT-Bildes	$300 \times 200 \times 100 \text{ px}$
Elementanzahl im Voxelnetz	$77 \times 52 \times 26 \text{ Elemente}$
Auswahlradius	$\rho = 2 \text{ mm}$
maximale Risslänge	$a_{\text{max},i} \in \{0.1, 0.2\} \text{ mm}$
erwartete Irrtumswahrscheinlichkeit	$\alpha = 0.5$
Sicherheitsfaktoren	$S^\sigma = S^G = 1$

Bei einer aufgebrauchten Dehnung von $\varepsilon_{xx} = 1$ und einer Porenlänge von $l_x = 6 \text{ mm}$ würde eine Verschiebung von etwa 3 mm auf beiden Seiten der Pore erwartet werden. Tatsächlich ist die Verschiebung in Abbildung 4.1 mit gemittelten 4.35 mm erheblich größer und entspricht einer Dehnung von $4.35/3 = 1.42$. Die 15 mm lange Zelle wird auf beiden Seiten um 7.5 mm verschoben. Die 3 mm lange Porenhälfte übernimmt von der Verschiebung um 7.5 mm bereits 4.35 mm, sodass das steifere Material auf der verbleibenden Länge von 4.5 mm nur um ca. 3.15 mm verschoben wird, was einer Dehnung des Materials von $3.15/4.5 = 0.7$ entspricht. Das liegt daran, dass sich die Pore stärker verformt als das Material um sie herum.

Für die Rechnung mit den Submodellen wird in gmsb das lokale Modell mit der exakten Porengeometrie durch quadratische Tetraeder vernetzt. Anschließend wird das Modell in Abaqus simuliert. Die Porenoberfläche dieses Tetraeder-Netzes ist in Abbildung 4.2a dargestellt. An verschiedenen Stellen auf der Porenoberfläche werden Risszellen definiert und als FEM-Submodelle gerechnet. Analog zu den Rissmodellen in Kapitel 3.3 wird mit einer Simulation ohne eingebrachten Riss der Verlauf der Hauptnormalspannung ausgewertet. Anschließend werden in die Submodelle verschieden lange Risse eingebracht und simuliert, um

den Verlauf der Energiefreisetzungsrates zu bestimmen. Im Gegensatz zu den Rissmodellen ist jedoch zum einen die Porenoberfläche beim Submodell nicht approximiert, sondern exakt mit der Porengeometrie verschnitten und zum anderen verwendet das Submodell auch nicht Lastparameter oder gemischte Randbedingungen für die Lastaufbringung. Stattdessen mappt das FE-Programm Abaqus das Verschiebungsfeld des lokalen Modells auf die Seitenwände des Submodells. Die Lastaufbringung beim Submodell ist dadurch genauer als beim Rissmodell.

In Abbildung 4.2a wird an den Mittelpunktpositionen jedes dargestellten Dreiecks ein Submodell erstellt. Jedes Submodell besteht wiederum aus einer FE-Simulation zur Bestimmung des Hauptnormalspannungs-Verlaufs und weiteren sechs FE-Simulationen mit eingebrachten Risspartitionen zur Bestimmung des Energiefreisetzungsrates-Verlaufs. Aus diesen Verläufen wird mit dem kombinierten Kriterium der Versagensindex FI berechnet. Das Seitenlängenverhältnis der Risse wird auf $b/a = 1$ festgelegt. Die Rechendauer für alle 473 Submodelle mit je sieben FE-Simulationen beträgt ungefähr einen Tag. Der größte und kritischste Versagensindex beträgt $FI = 8.4$.

Im Gegensatz zu der Auswertung mit den Submodellen verwendet „Boris“ das computergenerierte CT-Bild der Pore. Daraus extrahiert „Boris“ die Pore in Abbildung 4.2b und simuliert das Verschiebungsfeld mit einem Voxel-Netz. Die Vorhersage benötigt ungefähr zwei Stunden. Der größte und kritischste Versagensindex beträgt $FI = 9.64$ und ist damit um 15% höher als der Versagensindex $FI = 8.4$ der genaueren Rechnung mit Submodellen. Die Abweichung von 15% könnte darauf zurückzuführen sein, dass das Submodell nicht so fein aufgelöst wird. Grundsätzlich stimmt der Verlauf des Versagensindex überein.

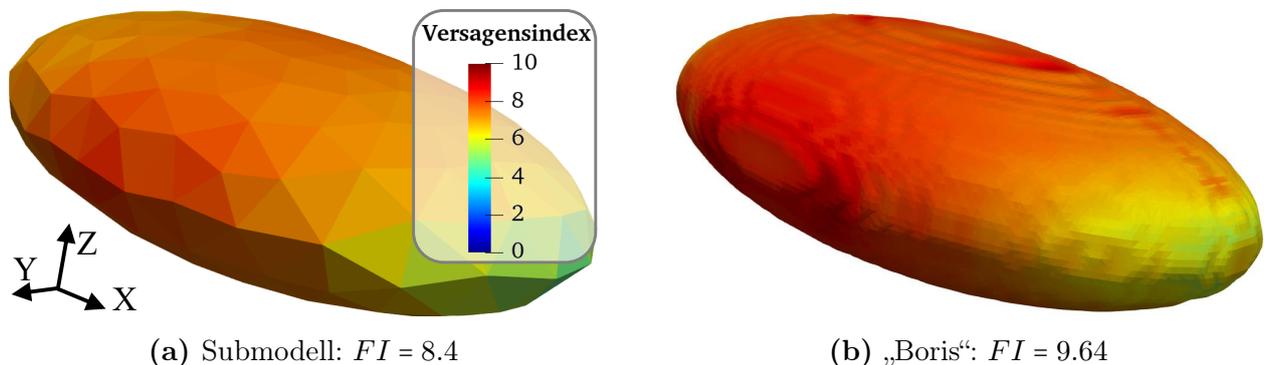


Abbildung 4.2: Vergleich mit genaueren Submodellen: Die Submodelle (a) benötigen einen Tag Rechenzeit. „Boris“ (b) liefert in zwei Stunden Ergebnisse, wobei der Versagensindex um 15% zu hoch und somit zu konservativ ist.

„Boris“ kann auch unterschiedliche Seitenlängenverhältnisse der Rissflächen b/a betrachten. Dabei stellt sich heraus, dass ein Seitenlängenverhältnis von $b/a = 1.5$ kritischer ist. Der Versagensindex beim einem Seitenlängenverhältnis von $b/a = 1.5$ wird von „Boris“ mit $FI = 9.9$ vorhergesagt.

„Boris“ setzt das in Abbildung 4.2b dargestellte Ergebnis aus zwei Berechnungen mit unterschiedlichen maximalen Risslängen $a_{max,i}$ zusammen. Die Strategie beim Kombinieren der Ergebnisse ist am Ende des Kapitels 3.4 beschrieben.

Das Produkt von maximaler Risslänge und Krümmung $a_{max} \cdot c_{uu}$ bzw. $a_{max} \cdot c_{vv}$ muss zwischen -0.2 und 0.2 liegen. Außerhalb dieses Bereichs müsste extrapoliert werden. Um diese Extrapolation zu vermeiden, werden keine Ergebnisse für Oberflächenelemente angezeigt, bei

denen eine dimensionslose Krümmung $c^* = c \cdot a_{max}$ außerhalb des Bereichs von -0.2 bis 0.2 liegt.

Wie aus Abbildung 4.3 ersichtlich ist die kleinste Krümmung -1.88 mm. Bei der maximalen Risslängen $a_{max} = 0.2$ mm ist die Bedingung $-0.2 \leq a_{max} \cdot c_{uu} = 0.2 \text{ mm} \cdot -1.88/\text{mm} = -0.376 \leq 0.2$ nicht erfüllt und in Abbildung 4.4a werden einige Ergebnisse bei zu starken Krümmungen nicht angezeigt. Bei einer kleineren maximalen Risslängen $a_{max} = 0.1$ mm ist die Bedingung $-0.2 \leq a_{max} \cdot c_{uu} = 0.1 \text{ mm} \cdot -1.88 = -0.188 \leq 0.2$ auch bei der stärksten Krümmung erfüllt und alle Ergebnisse werden berechnet. Da alle Krümmungen negativ sind, wirkt in diesem Fall nur die kleinste Hauptkrümmung c_{uu} in Abbildung 4.3a einschränkend. Die größte Hauptkrümmungen c_{vv} in Abbildung 4.3b könnte eine Einschränkung sein, wenn eine Pore positive Krümmungen hat, sodass die Bedingung $a_{max} \cdot c_{vv} \leq 0.2$ verletzt wird.

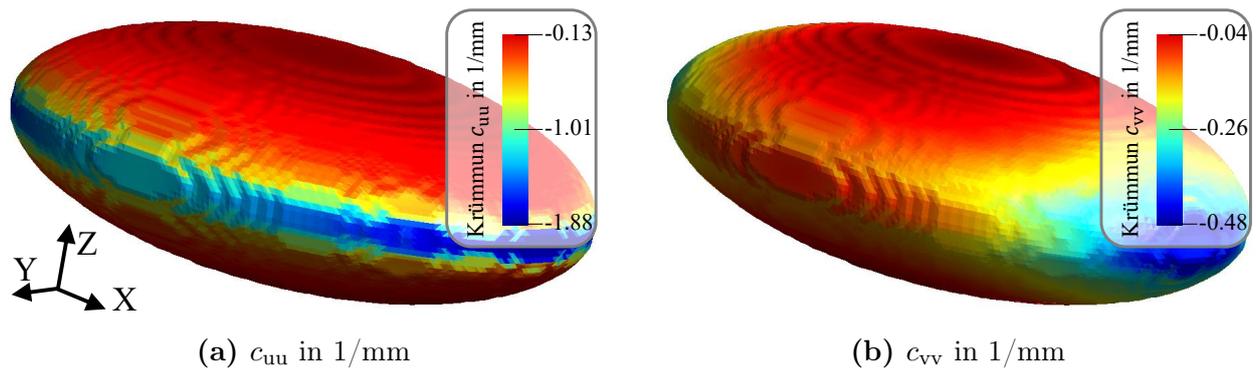


Abbildung 4.3: Krümmungen der Porenoberfläche. Die Hauptkrümmung c_{uu} ist immer kleiner als die Hauptkrümmung c_{vv} . Der Betrag der Hauptkrümmung c_{uu} ist jedoch größer, als der Betrag der Hauptkrümmung c_{vv} , weshalb entlang der u-Richtung die Risszellen stärker gekrümmt sind.

Die Krümmung wird nur einmal für die Pore berechnet und kann dann einfach mit der maximalen Risslänge skaliert werden. Die Lastparameter müssen hingegen für jede maximale Risslänge neu ermittelt werden. Dazu werden Risszellen erstellt, die von der Porenoberfläche in das Material hinein ragen und auf deren Seitenwände die Verschiebungen vom lokalen Modell gemappt werden. Die Zellen sind fünfmal so lang wie die maximale Risslänge. Wenn die maximale Risslänge kleiner wird, dann werden auch die Zellen kleiner und berücksichtigen damit die Verschiebungen von immer weniger Voxel-Elementen. In Abbildung 4.4b sind die Zellen so klein, dass sie durchschnittlich nur zwei Voxel-Elemente berücksichtigen und dadurch die Lastparameter nur ungenau berechnen. Das führt an der Porenoberseite in Abbildung 4.4b zu einem hellen Fleck, der bei der größeren maximalen Risslänge von $a_{max} = 0.2$ mm nicht vorhanden ist.

In Abbildung 4.4a ist also die maximale Risslänge zu groß, sodass bei starken Krümmungen keine Ergebnisse berechnet werden. In Abbildung 4.4b ist die maximale Risslänge so klein, dass an einigen Stellen die Berechnung der Lastparameter ungenau wird und ein feineres Voxel-Netz nötig wäre. Wenn die beiden Ergebnisse allerdings kombiniert werden (siehe Abbildung 4.2b), heben sich die Effekte gegenseitig auf und ein plausibles Ergebnis wird erreicht.

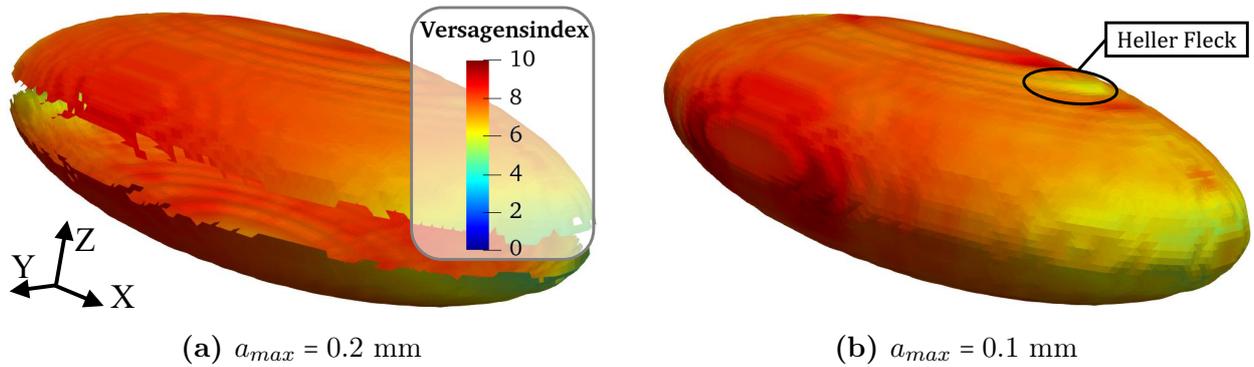


Abbildung 4.4: Versagensindex für verschiedene maximale Risslängen: Mit einer maximalen Risslänge von $a_{max} = 0.2$ mm wird bei betragsmäßig großen Krümmungen der Porenoberfläche kein Versagensindex vorhergesagt.

4.2 Pore aus einem realen CT-Bild

„Boris“ kann auch eine reale Pore, wie sie in Abbildung 4.5 dargestellt ist, vorhergesagen. Der Python-Code, mit dem die Ergebnisse berechnet werden, kann in Anhang A nachgeschlagen werden.

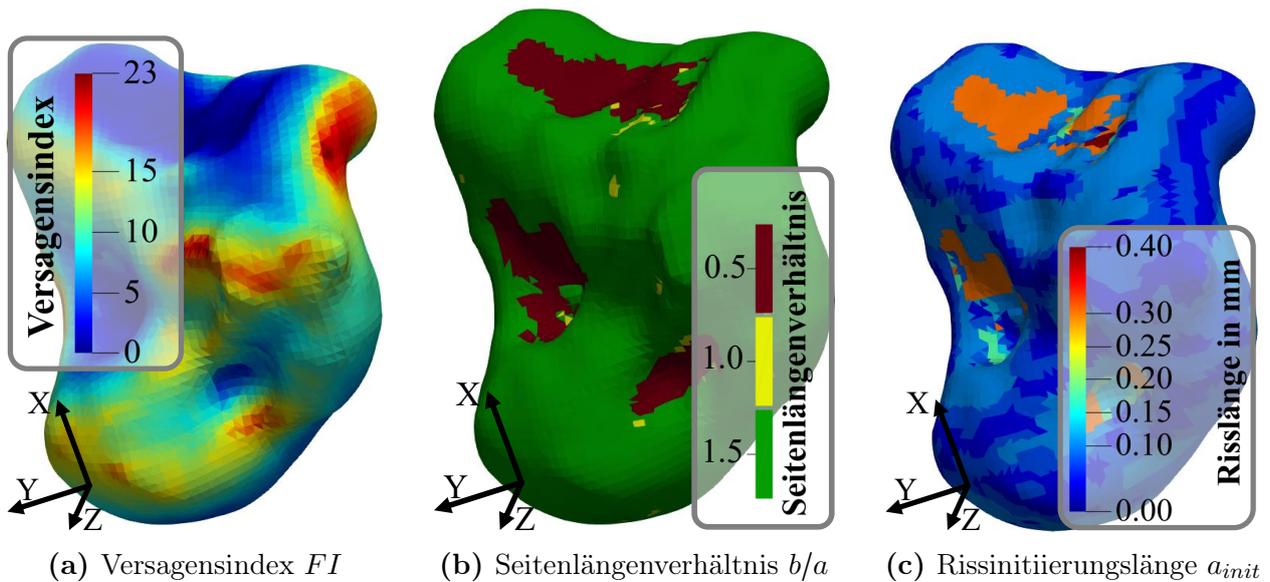


Abbildung 4.5: Mit der Dehnung $\varepsilon_{xx} = 1$ beaufschlagte Pore aus einem realen CT-Bild.

Das lokale Modell wird mit derselben Belastung aus Gleichung 4.1 beaufschlagt wie das lokale Modell im Kapitel zuvor. Auch die Materialparameter sind die gleichen und können aus Tabelle 4.2 entnommen werden. Tabelle 4.4 listet die Abmessungen der Pore sowie der Zelle auf.

Tabelle 4.4: Abmessungen der Pore und der Zelle

Dimension	Pore	Zelle
x	$l_{x,Pore} = 72$ mm	$l_{x,Zelle} = 100$ mm
y	$l_{y,Pore} = 47$ mm	$l_{y,Zelle} = 120$ mm
z	$l_{z,Pore} = 54$ mm	$l_{z,Zelle} = 60$ mm

In Tabelle 4.5 sind für die Auswertung benötigte Parameter aufgelistet. Die Kantenlänge der Voxel-Elemente beträgt 1 mm. Die Ergebnisse setzen sich aus der Vorhersage von drei verschiedenen maximalen Risslängen $a_{max,i}$ zusammen. Bei der kleinsten maximalen Risslänge werden die Lastparameter im Schnitt nur anhand eines Voxel-Elementes bestimmt. Bei der größten maximalen Risslänge können nicht alle Ergebnisse berechnet werden. Durch die Kombination der Vorhersagen ergibt sich trotzdem ein plausibles Bild für den Versagensindex in Abbildung 4.5a.

Tabelle 4.5: Auswerteparameter für „Boris“

Auflösung des CT-Bildes	$100 \times 120 \times 60$ px
Elementanzahl im Voxelnetz	$50 \times 60 \times 30$ Elemente
Auswahlradius	$\rho = 10$ mm
maximale Risslänge	$a_{max,i} \in \{0.5, 1, 2\}$ mm
erwartete Irrtumswahrscheinlichkeit	$\alpha = 0.5$ (50%)
Sicherheitsfaktoren	$S^\sigma = S^G = 1$

Mit dem maximalen Versagensindex $FI = 23$ kann die Last $\varepsilon_{xx,init} = \varepsilon_{xx}/FI = 1/23 = 0.043$ berechnet werden, bei der der Riss laut dem Kriterium initiiert. Unter der Annahme eines linear elastischen Materialverhaltens und linearer Geometrie initiiert also bereits bei der Dehnung $\varepsilon_{xx,init} = 4.3\%$ ein Riss.

In Abbildung 4.5b ist das kritischste Seitenlängenverhältnis dargestellt. Es werden nur drei Einstellungen $b/a \in \{0.5, 1.0, 1.5\}$ vorhergesagt. Bei konvexen Krümmungen sind die Risse eher breiter ($b/a = 1.5$), während bei konkaven Krümmungen eher schmale ($b/a = 0.5$) dafür aber lange Risse initiiieren.

Die Rissinitiiierungslänge a_{init} ist in Abbildung 4.5c ersichtlich. Die numerische Umsetzung des kombinierten Kriteriums teilt die Rissinitiiierungslängen in 100 Teilstücke, weswegen kein weicher kontinuierlicher Farbverlauf entsteht. Die Materialparameter sind so gewählt, dass fast überall Risse initiiieren, die allerdings im Vergleich zu einer maximalen Risslänge von $a_{max} = 2$ mm sehr kurz sind und sich nur in einem Bruchteil der 100 Teilstücke für die Rissinitiiierungslängen bewegen. Es besteht die Möglichkeit, anstatt 100 beispielsweise 1000 Teilstücke zu verwenden und so einen weicheren Farbverlauf zu erzeugen. Allerdings erhöht sich dadurch die Rechenzeit.

Kapitel 5

Diskussion

Diese Arbeit zeigt, dass es möglich ist, mit dem kombinierten Kriterium die Rissinitiierung an Porenoberflächen effizient vorherzusagen. Für die Überprüfung der Ergebnisse wären reale Experimente notwendig, die allerdings nicht Teil dieser Arbeit sind.

5.1 Einschränkungen der Methoden

Es gelten ähnliche Einschränkungen wie bei dem K-Konzept aus der linear elastischen Bruchmechanik. Die Simulationen werden mit linearisierter Geometrie, linear elastischen Materialverhalten und ohne Simulation von Kontakt zwischen den Rissflächen durchgeführt. Gültige Vorhersagen sind dementsprechend nur möglich, wenn das Material spröde ist und nur eine geringe plastische Verformung zeigt. Außerdem muss das Material homogen und isotrop sein, also an jeder Position und in jede Richtung gleiche Eigenschaften aufweisen.

Der Kontakt zwischen Rissflächen wird nicht simuliert. Wenn sich in einer Simulation die Rissflächen überlappen, dann ist die größte Hauptnormalspannung, die senkrecht auf die Rissflächen steht, kleiner oder gleich Null. Bei Kontakt zwischen den Rissflächen findet also keine Mode I Rissöffnung statt. In dieser Arbeit wird vorausgesetzt, dass die Risse ausschließlich zufolge einer Mode I Belastung initiieren. Wenn also Kontakt auftritt, kann anhand der größten Hauptnormalspannung ausgeschlossen werden, dass ein Riss initiiert und somit kann auf die Kontaktsimulation verzichtet werden. In der Regel ist die Mode I Belastung auch tatsächlich am kritischsten.

Die Ergebnisse der Risszelle weichen deutlich voneinander ab, wenn statt gemischten Randbedingungen die genaueren periodischen Randbedingungen verwendet werden. Außerdem stellt sich die Frage, ob sieben Lastparameter, die die Belastung über die Randbedingungen auf die Risszelle aufbringen, genügen oder ob auch andere Strukturverformungen der Zelle einen Einfluss auf die Rissinitiierung haben. Zukünftige Arbeiten sollten sich also intensiver mit den Randbedingungen beschäftigen und eventuell versuchen die in Abbildung 3.25d dargestellte Methode mit der Ausgleichsgerade zu implementieren.

Während die Abmessungen des lokalen Modells und der E-Modul des Materials keine Einschränkungen für die Vorhersage darstellen, ist die Querkontraktionszahl auf $\nu = 0.35$ fixiert. Ein Material mit einer anderen Querkontraktionszahl kann nicht vorhergesagt werden.

Die Methode könnte auf eine variable Querkontraktionszahl erweitert werden, was aber nicht wichtig erschien.

Schlussendlich ist auch das kombinierte Kriterium für die Rissinitiierung noch jung und es fehlen Experimente, um zu beurteilen für welche Materialien, unter welchen Lasten und für welche Geometrien die Rissinitiierung vorhergesagt werden kann.

5.2 Konfiguration durch den Benutzer

Eine Voraussetzung für valide und reproduzierbare Ergebnisse ist zum einen, dass die Porengeometrie im CT-Bild gut abgebildet ist und zum anderen, dass der Benutzer für die Netzfeinheit des lokalen Modells, für die maximale Risslänge und für den Auswahlradius bei der Krümmungs-Berechnung selbst sinnvolle Werte vorgibt. Da das lokale Modell das Verschiebungsfeld mit einem Voxel-Netz simuliert, ist es beispielsweise die Aufgabe des Benutzers eine Netz-Studie für das Voxel-Netz durchzuführen und eine sinnvolle Netzfeinheit einzustellen.

Die Krümmungen der Porenoberfläche werden in einem bestimmten Auswahlradien ρ gefittet. Der Benutzer sollte den Radius ungefähr fünf bis zwanzig Mal größer als die Kantenlänge eines Pixels im CT-Bild wählen. Zu große Auswahlradien ρ erhöhen die Rechenzeit drastisch und können die Krümmungen verfälschen. Bei zu kleinen Auswahlradien ρ können die Krümmungen ebenfalls ungenau sein.

Außerdem sollten mehrere verschiedene maximale Risslängen vorhergesagt und kombiniert werden. Die maximalen Risslängen sollten größer als $1/5$ der Kantenlänge eines Voxel-Elementes sein, da ansonsten nur ein Voxel-Element für die Berechnung der Lastparameter herangezogen wird. Wenn die maximale Risslänge zu groß gewählt wird, werden einige Ergebnisse nicht berechnet. Das ist aber weniger tragisch als eine zu kleine maximale Risslänge.

Soll die Methode zur Auslegung verwendet werden, empfiehlt sich wegen der Netzabhängigkeit, dem Einfluss der Randbedingungen usw. ein Sicherheitsfaktor für die kritische Hauptnormalspannung von $S^\sigma \approx 1.25$ und für die kritische Energiefreisetzungsrate von $S^G \approx 1.5$. In Kapitel 4 werden die Ergebnisse jedoch ohne Sicherheitsfaktoren berechnet, weil eine möglichst erwartungstreue Vorhersage und nicht eine konservative Vorhersage das Ziel ist.

Die Sicherheit für das statistische Modell kann mit der Irrtumswahrscheinlichkeit α eingestellt werden. Bei einer Irrtumswahrscheinlichkeit von $\alpha = 0.5$ werden in ungefähr 50% der Fälle die Hauptnormalspannungen oder die Energiefreisetzungsraten unterschätzt und in den anderen 50% der Fälle überschätzt. Die Ergebnisse sind dann erwartungstreu. Bei einer Irrtumswahrscheinlichkeit von $\alpha = 0.05$ sind die Hauptnormalspannungen oder die Energiefreisetzungsraten nur noch in etwa 5% der Fälle zu klein, dafür sind die Ergebnisse etwas zu konservativ und nicht mehr erwartungstreu. In Kapitel 4 werden die Ergebnisse mit einer Irrtumswahrscheinlichkeit von $\alpha = 0.5$ berechnet.

Kapitel 6

Zusammenfassung

Das Ziel dieser Arbeit ist es, die Rissinitiierung an Porenoberflächen mit dem kombinierten Kriterium effizient vorherzusagen. Das kombinierte Kriterium ist eine Kombination aus dem Spannungs-Kriterium, laut dem die Spannung bis zur Rissinitiierungslänge größer als eine kritische Spannung sein muss, und dem Energie-Kriterium, laut dem ein Riss nicht initiieren kann, wenn die Energiefreisetzungsrate bei der Rissinitiierungslänge kleiner als eine kritische Energiefreisetzungsrate ist. Für das kombinierte Kriterium muss sowohl das Spannungs-Kriterium als auch das Energie-Kriterium erfüllt sein.

Für die Vorhersage der Rissinitiierung wird ein Mehr-Skalen-Modell verwendet, das aus einem Bauteilmodell, einem lokalen Modell mit der Pore und einem Rissmodell mit eingebrachtem Riss besteht. Das Bauteilmodell wird vom Benutzer erstellt und ermittelt den Dehnungstensor in dem Bereich, wo die Pore im Material liegt.

Dieser Dehnungstensor wird mit periodischen Randbedingungen als Belastung auf das lokale Modell aufgebracht. Außerdem wird ein CT-Bild der Pore an das lokale Modell übergeben. Der „Marching Cubes“-Algorithmus extrahiert die Porenoberfläche aus dem CT-Bild. Die Krümmungen werden an der extrahierten Porenoberfläche gefittet. Das Verschiebungsfeld wird mit einem Voxel-Netz mit der Finite Elemente Methode simuliert, wobei Elemente, die in der Pore liegen, eine geringere Steifigkeit haben als Elemente, die im Material liegen. Die Dehnungen, Scherungen und Biegungen einer Risszelle werden mit dem simulierten Verschiebungsfeld berechnet. Eine Risszelle ist ein quaderförmiger Ausschnitt, der von der Porenoberfläche in das Material hinein reicht.

Die Dehnungen, Scherungen und Biegungen sowie die Krümmungen werden an das Rissmodell übergeben, das den Verlauf der größten Hauptnormalspannung und der Energiefreisetzungsrate ermittelt. Die Verläufe können mit FEM-Simulationen berechnet werden, wobei mit einer Simulation mit geschlossenem Riss der Verlauf der größten Hauptnormalspannung ausgelesen wird und mit weiteren Simulationen, bei denen immer längere Risse geöffnet werden, der Verlauf der Energiefreisetzungsrate bestimmt wird.

Da FEM-Simulationen zu zeitaufwändig sind, um sie für jede Position auf der Porenoberfläche anzuwenden, wird alternativ auch ein statistisches Modell für die Vorhersage des Verlaufes der größten Hauptnormalspannung und der Energiefreisetzungsrate entwickelt. Das statistische Modell basiert auf mehr als 16000 im Vorhinein durchgeführten Simulationsserien mit je sieben FEM-Simulationen.

Das kombinierte Kriterium berechnet unter Angabe der kritischen Hauptnormalspannung und der kritischen Energiefreisetzungsrate aus dem Verlauf der größten Hauptnormalspannung und der Energiefreisetzungsrate einen Versagensindex. Wenn der Versagensindex mindestens Eins ist, initiiert unter der aufgetragenen Last laut dem Kriterium ein Riss. Ansonsten wird keine Rissinitiierung vorhergesagt.

Mit dem entwickelten Programm „Boris“ werden zwei Beispiele berechnet. Beim ersten wird der größte Versagensindex für eine elliptische Pore mit Submodellen und mit dem entwickelten Programm berechnet und verglichen. Der Versagensindex von „Boris“ ist um 15% größer und damit konservativer als der mit Submodellen ermittelte Versagensindex. Die Ergebnisse der Submodelle sind genauer, rechnen dafür aber statt 24 Stunden nur 2 Stunden. Im zweiten Beispiel wird aus einem realen CT-Bild eine Pore extrahiert und der Versagensindex vorhergesagt. Für die reale Pore ergibt sich eine Verteilung von Versagensindexwerten an der Oberfläche, die kritische Punkte aufzeigt.

„Boris“ kann also die Rissinitiierung an Porenoberflächen effizient in Minuten oder in wenigen Stunden vorhersagen. Die Belastung der Pore und der E-Modul des Materials können beliebig skaliert werden. Im nächsten Schritt sollte die entwickelte Methode mit Experimenten abgeglichen werden.

Anhang A

Python-Code für eine Pore aus einem realen CT-Bild

Mit dem folgenden Python-Code werden die Ergebnisse in Kapitel 4.2 berechnet. Für die Berechnung wird neben der Anaconda Individual Edition (Python 3.7, Conda 4.8.2) noch das FE-Programm Abaqus (Version 2017) und gmsh (Version 4.4.1) verwendet.

Befehle, die mit `analysis.view_...` beginnen, stellen Ergebnisse in gmsh dar. Mit dem Befehl `gmsh.fltk.run()` wird das gmsh-Fenster geöffnet. Befehle, die mit `analysis.plot_...` beginnen, zeichnen die Ergebnisse in ein Fenster, das beim nächsten Aufruf von `plt.plot()` geöffnet wird.

```
1 import gmsh
2 import matplotlib.pyplot as plt
3 from src.api.analysis import Analysis
4 from src.api import plot_failure_check
5
6 # Einheiten
7 px = 1.
8 mm = 1.
9 MPa = 1.
10
11 if __name__ == '__main__':
12     dehnungstensor = {
13         'uxx': 1., 'uyy': 0., 'uzz': 0.,
14         'uxy': 0., 'uxz': 0., 'uyz': 0.
15     }
16
17     e_modul = 1000 * MPa
18     kritische_energiefreisetzungsrage = 1 * MPa * mm
19     kritische_hauptnormalspannung = 250 * MPa
20     maximale_risslaengen = [0.5 * mm, 1. * mm, 2. * mm]
21
22     ergebnis_ordner = "Rechnungen/analysis/ct_bild"
23     pfad_zum_statistischen_modell = "Auswertung/model_assembly.dat"
24     pfad_zum_ct_bild = r"CT_Daten/ct_bild.raw"
25     ct_bild_ist_big_endian = False
26     ct_bild_pixel = [100 * px, 120 * px, 60 * px]
27     ct_bild_dimensionen = [100 * mm, 120 * mm, 60 * mm]
28     umgebungsradius_kruemmungen = 10 * mm
29     voxel_netz_elementanzahl = [50, 60, 30]
```

```

30
31 # initialisiere den Ergebnis-Ordner
32 analysis = Analysis(ergebnis_ordner)
33
34 # lade das statistische Modell fuer die Vorhersage
35 model = analysis.add_model('model', pfad_zum_statistischen_modell)
36
37 # erstelle eine Materialdefinition
38 material = analysis.add_material(
39     'material', e_modul, kritische_hauptnormalspannung,
40     kritische_energiefreisetzungsrage)
41
42 # erstelle einen Last-Fall
43 load_case_uxx = analysis.add_load_case('load_uxx', **dehnungstensor)
44
45 # lese das CT-Bild ein
46 ct_image = analysis.add_ct_image(
47     'image', pfad_zum_ct_bild, *ct_bild_pixel,
48     big_endian=ct_bild_ist_big_endian)
49
50 # lege die Abmessungen des CT-Bildes fest
51 config = analysis.add_ct_image_configuration(
52     'config', *ct_bild_dimensionen)
53
54 # berechne den Schwellwert und extrahiere die Porenoberflaeche
55 isosurface = analysis.add_isosurface('isosurface', ct_image, config)
56
57 # approximiere die Krueimmungen der Porenoberflaeche
58 fitted_planes = analysis.add_fitted_plane(
59     'fitted_planes', isosurface.name, umgebungsradius_krueimmungen)
60
61 # stelle die Krueimmungen in gmsh dar
62 analysis.view_fitted_planes(fitted_planes)

```

Wenn gmsh mit dem Befehl `gmsh.fltk.run()` geöffnet wird, können unter anderem die Bilder in Abbildung A.1 dargestellt werden.

```

63 # ueberpruefe bei einem Element, ob die Krueimmungen richtig gefittet
64 # werden und aendere gegebenenfalls den Umgebungsradius
65 analysis.plot_fitted_planes(fitted_planes, el_id=2737)

```

Nach der obigen Zeile wird beim nächsten Aufruf von `plt.plot()` Abbildung A.1d dargestellt und es kann überprüft werden, ob der Radius für die Regression der Krümmungen richtig eingestellt ist. Die roten Elemente befinden sich innerhalb des Radius um das Element #2737.

```

66 # erstelle ein Voxel-Netz und berechne mit FEM das Verschiebungsfeld
67 local_simulation = analysis.add_local_simulations(
68     'sim', isosurface, *voxel_netz_elementanzahl)
69
70 # stelle das Verschiebungsfeld in gmsh dar
71 analysis.view_displacements(local_simulation)

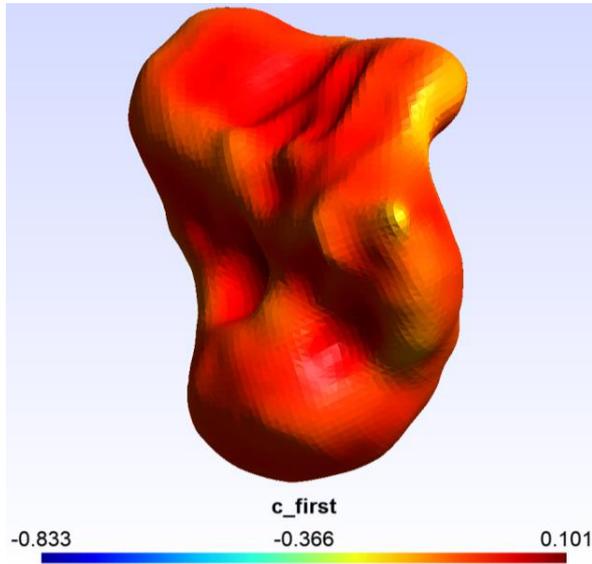
```

Gmsh stellt die auf die Porenoberfläche projizierten Verschiebungen wie in Abbildung A.2a dar.

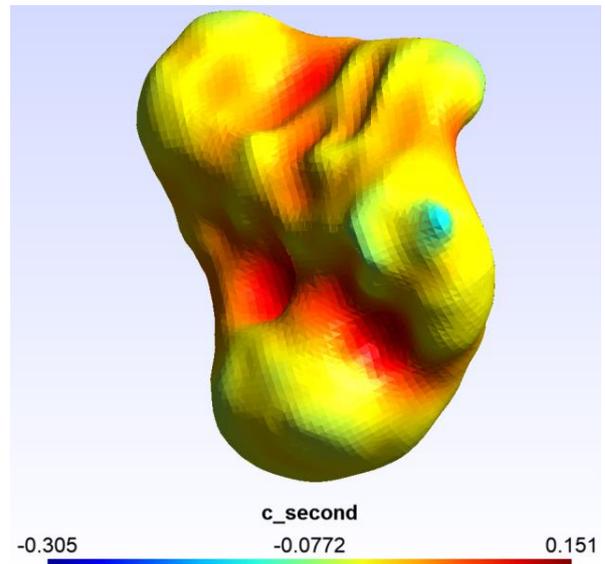
```

72 # erstelle einen Zeichenbereich fuer die Energiefreisetzungsrage
73 err_plot = plot_failure_check.PlotERR()
74
75 # erstelle einen Zeichenbereich fuer die Hauptnormalspannung

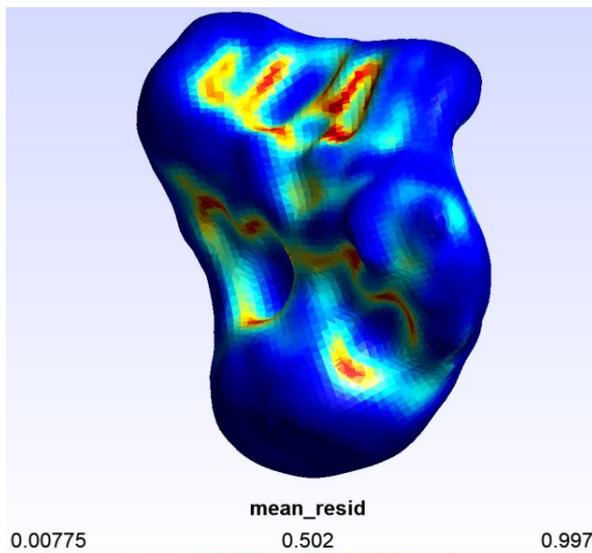
```



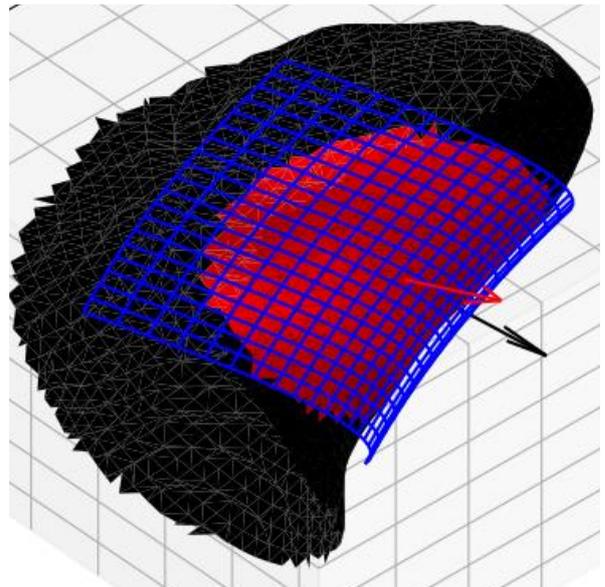
(a) Die erste Hauptkrümmung `c_first` wird auch c_{uu} genannt.



(b) Die zweite Hauptkrümmung `c_second` wird auch c_{vv} genannt.



(c) Durchschnittliche Residuen bei der Regression für die Krümmungen.



(d) `analysis.plot_fitted_planes(...)`: Ausschnitt der Pore mit eingezeichneter Regression für die Krümmungen.

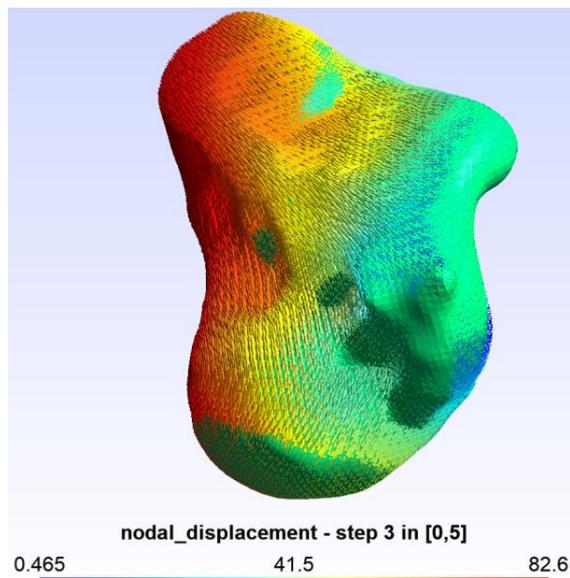
Abbildung A.1: Der Befehl `analysis.view_fitted_planes(...)` stellt die Krümmungen an der Porenoberfläche oder die durchschnittlichen Residuen der Regression dar, mit der die Krümmungen berechnet werden. Der Befehl `analysis.plot_fitted_planes(...)` stellt für ein Element die Berechnung der Krümmungen dar.

```

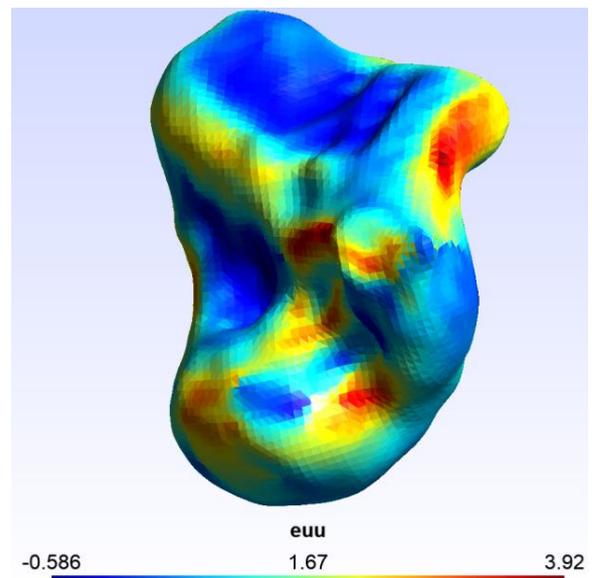
76 s1_plot = plot_failure_check.PlotS1()
77
78 # fuer jede maximale Risslaenge wird das Versagenskriterium
79 # ueberprueft
80 failure_checks = list()
81 for max_crack_length in maximale_risslaengen:
82
83     # interpoliere das Verschiebungsfeld auf die Flaechen der
84     # Risszellen
85     propagated = analysis.add_propagation_to_crack_cell(
86         f'propagated_{max_crack_length}', local_simulation,
87         fitted_planes, max_crack_length)
88
89     # approximiere das Verschiebungsfeld durch die sieben
90     # Last-Parametern
91     rp_displs = analysis.add_crack_cell_rp_displacement(
92         [load_case_uxx], propagated)
93
94     # stelle die sieben Last-Parameter in gmsh dar
95     analysis.view_rp_displacements(rp_displs.iloc[0])

```

Wenn gmsh geöffnet wird, kann nun die Abbildung A.2b angezeigt werden.



(a) `analysis.view_displacements(...)`: Vektordarstellung der Verschiebungen für den Lastfall 3 ($\epsilon_{zz} = 1$).



(b) `analysis.view_rp_displacements(...)`: Der gefittete Lastparameter ϵ_{uu} steht für die Dehnung ϵ_{uu} .

Abbildung A.2: Vom Voxel-Netz auf die Porenoberfläche projizierte Verschiebungen im linken Bild und ein gefitteter Lastparameter ϵ_{uu} im rechten Bild.

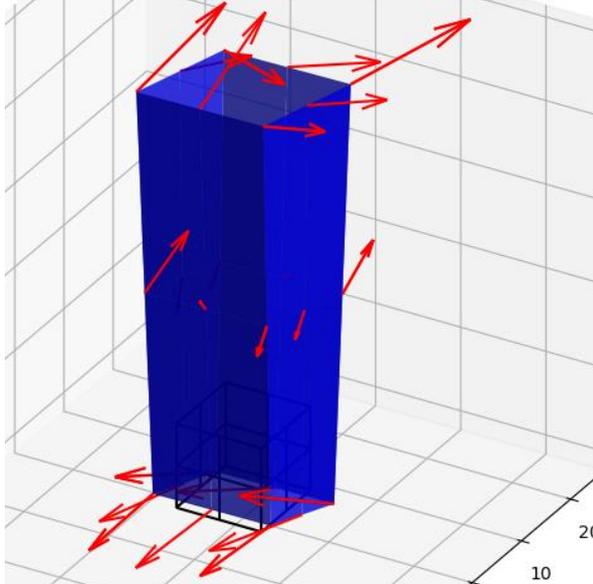
```

96     # ueberpruefe anhand eines Elements ,
97     # ob das Verschiebungsfeld richtig gefittet wird.
98     analysis.plot_crack_cell_rp_displacement(rp_displs.iloc[0])

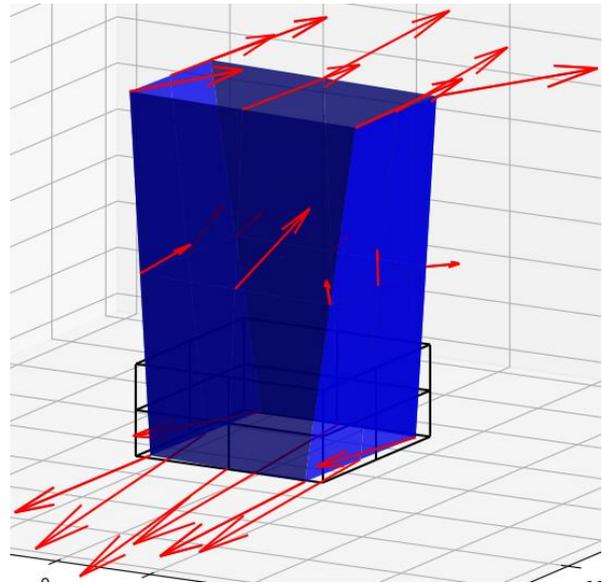
```

Nach der obigen Zeile wird beim nächsten Aufruf von `plt.plot()` Abbildung A.3a oder Abbildung A.3b geöffnet. Der Befehl `analysis.plot_crack_cell_rp_displacement(...)` stellt standardmäßig die deformierte Zelle mit den größten Abweichungen dar, bei der die Lastparameter also am ungenauesten berechnet werden. Anhand dieser Zelle ist in Abbildung A.3a erkennbar, dass die verwendete maximale Risslänge $a_{max} = 0.5$ mm zu klein ge-

wählt ist. Die roten Residuen sind zum Einen nämlich sehr groß und zum anderen hat die Zelle eine unerwartet hohe Dehnung $\varepsilon_{nn} = 6.2$. So eine hohe Dehnung normal auf die Porenoberfläche kann vorkommen, wenn die Zelle die Verschiebungen eines Voxel-Elementes, das die geringe Steifigkeit der Pore hat, approximiert. Bei der größten maximalen Risslängen $a_{max} = 2$ mm in Abbildung A.3b hat das Voxel-Element, das die geringe Steifigkeit der Pore hat, einen geringeren Einfluss und die Dehnung normal auf die Porenoberfläche sinkt auf $\varepsilon_{nn} = 2.8$. Die Dehnung ε_{nn} hat keinen Einfluss auf die weitere Berechnung, weil sie sehr fehleranfällig ist und nicht als Lastparameter für die gemischten Randbedingungen definiert werden kann.



(a) `analysis.\`
`plot_crack_cell_rp_displacement(...)`:
 Stellt bei $a_{max} = 0.5$ mm die gefittete Zelle blau und die Residuen rot dar.



(b) `analysis.\`
`plot_crack_cell_rp_displacement(...)`:
 Stellt bei $a_{max} = 2$ mm die gefittete Zelle blau und die Residuen rot dar.

Abbildung A.3: Approximation der Verschiebungen durch Lastparameter. Für ein Element ist die deformierte Zelle bei zwei verschiedenen maximalen Risslängen $a_{max} = 0.5$ mm dargestellt.

```

99 # sage die Ergebnisse fuer jeden Last-Fall vorher
100 for (load_name, prop_name), rp_displ in rp_displs.iterrows():
101
102     # sage die Energiefreisetzungsrage, den Spannungstensor
103     # und die Hauptnormalspannung vorher
104     prediction = analysis.add_prediction(
105         f'prediction_{max_crack_length}_{load_name}',
106         rp_displ, model)
107
108     # stelle die Vorhersageergebnisse in gmsh dar.
109     analysis.view_prediction(prediction)

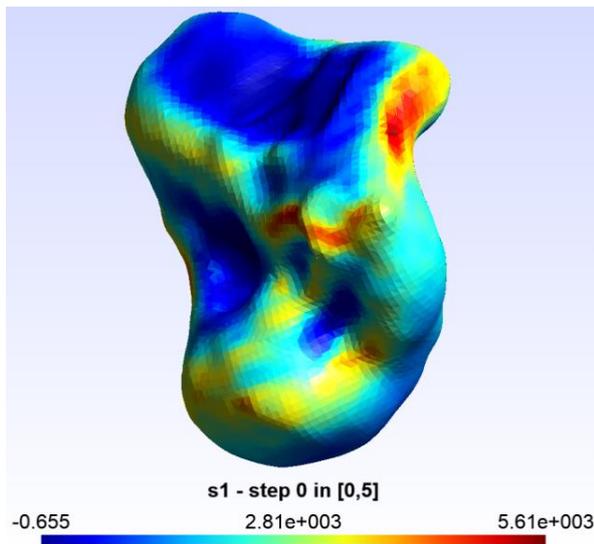
```

Wenn gmsh geöffnet wird, kann unter anderem die größte Hauptnormalspannung an der Porenoberfläche wie in Abbildung A.4a oder die Energiefreisetzungsrage bei der maximalen Risslänge wie in Abbildung A.4b angezeigt werden.

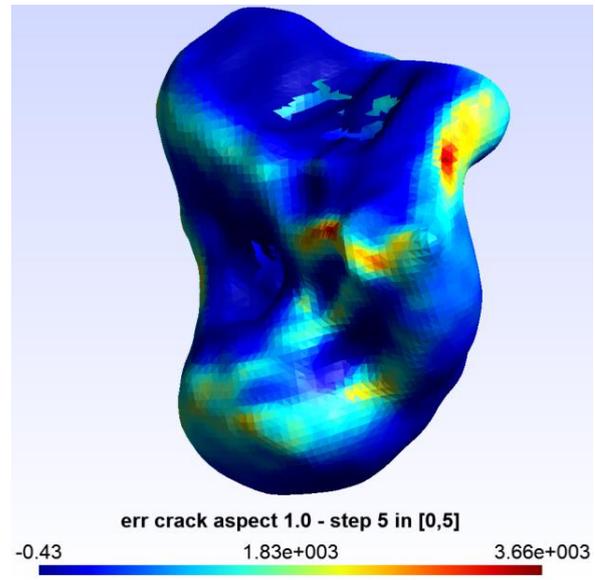
```

110 # skaliere die Vorhersagen und wende das Versagenskriterium an
111 failure_check = analysis.add_failure_check(
112     f'failure_{max_crack_length}_{load_name}',

```



(a) Größte Hauptnormalspannung σ_1 an der Porenoberfläche



(b) Energiefreisetzungsrate bei der maximalen Risslänge

Abbildung A.4: `analysis.view_prediction(...)` stellt die Vorhersageergebnisse wie etwa den Spannungstensor oder die Energiefreisetzungsrate dar.

```

113         material, prediction)
114
115         # speichere den Link zum Ergebnis des Versagenskriteriums,
116         # um die Ergebnisse spaeter zu kombinieren.
117         failure_checks.append(failure_check)
118
119         # stelle das Ergebnis des Versagenskriteriums in gmsh dar
120         analysis.view_failure_check(failure_check)

```

Gmsh stellt für die verschiedenen maximalen Risslängen die vorhergesagten Versagensindizes dar.

```

121         # zeichne das Ergebnis in die Zeichenbereiche
122         analysis.plot_failure_check(
123             failure_check, el_id=2737,
124             plot=[err_plot, s1_plot])

```

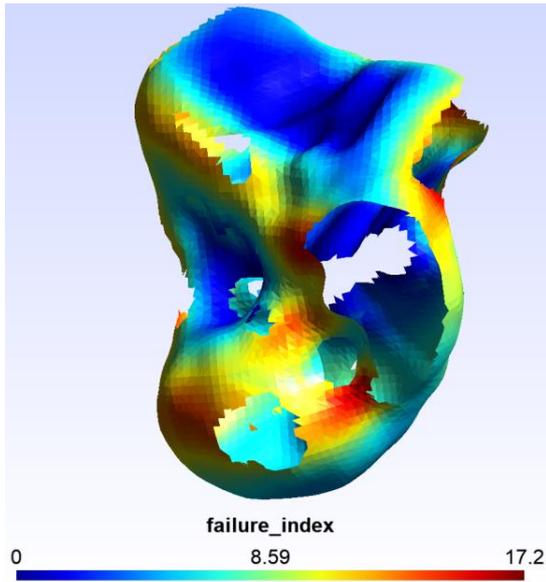
Mit dem Befehl `plt.plot()` können die Abbildungen A.6 geöffnet werden. Wie aus Abbildung A.6a ersichtlich ist die Spannung bei der kleinsten maximalen Risslänge (blau) zu niedrig, weil das Voxel-Netz nicht fein genug ist und damit die Lastparameter ungenau berechnet werden.

In Abbildung A.6b nimmt die Energiefreisetzungsrate scheinbar ab, je größer die relative Risslänge a/a_{max} ist. Das hängt damit zusammen, dass der Riss im Verhältnis zur Risszelle schon relativ groß ist und die Spannungsüberhöhung, die von der Rissspitze weg abflacht am Zellenrand abgeschnitten wird. Dieser Effekt kann mit dem Sicherheitsfaktor $S_{a_{max}} \approx 1.05$ für die kritische Energiefreisetzungsrate berücksichtigt werden. Außerdem hat dieser Effekt weniger Einfluss, wenn mehrere maximale Risslängen berechnet und kombiniert werden.

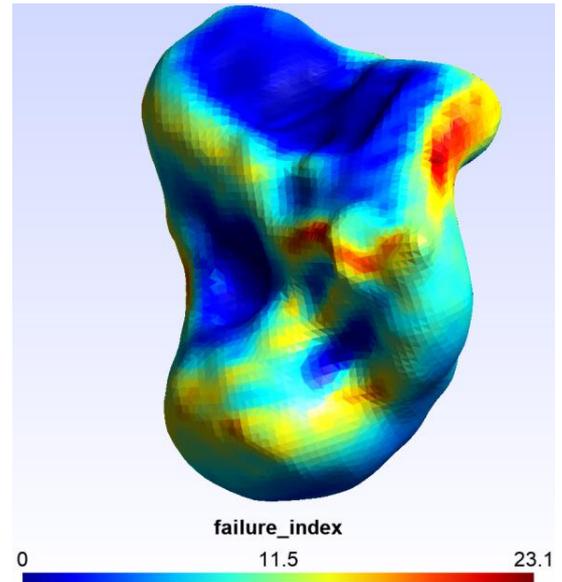
```

125         # kombiniere die Ergebnisse des Versagenskriteriums
126         # bei verschiedenen maximalen Risslaengen
127         combined_failure_checks = analysis.add_combined_failure_check(

```

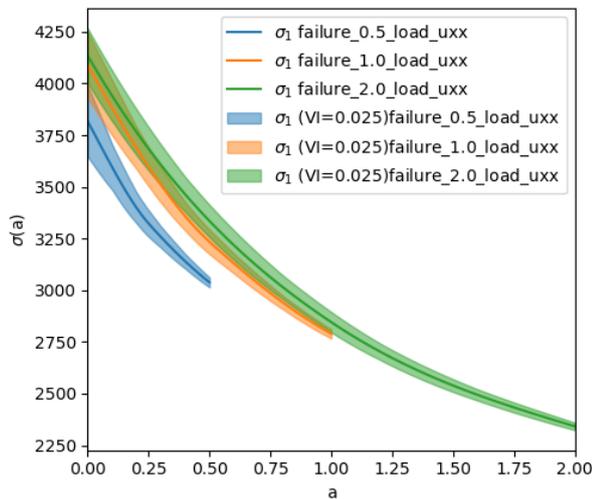


(a) $a_{max} = 2$ mm

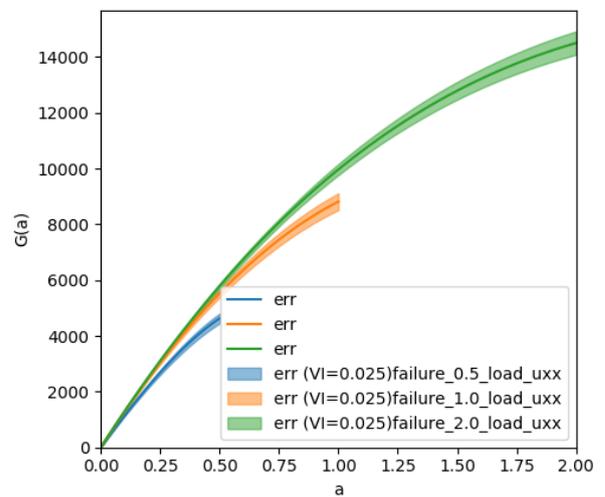


(b) $a_{max} = 0.5$ mm

Abbildung A.5: `analysis.view_failure_check(...)`: Versagensindizes für verschiedene maximale Risslängen.



(a) $\sigma_1(a)$: Für die kleinste maximale Risslänge (blau) ist das Voxel-Netz nicht fein genug.



(b) $G(a)$: Je größer die relative Risslänge a/a_{max} , desto geringer erscheint die Energiefreisetzungsrate.

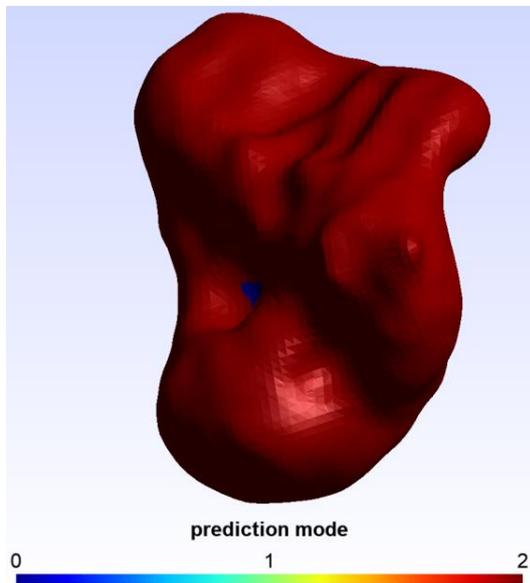
Abbildung A.6: `analysis.plot_failure_check(...)`: Verlauf der Hauptnormalspannung bzw. der Energiefreisetzungsrate für verschiedene maximale Risslängen.

```

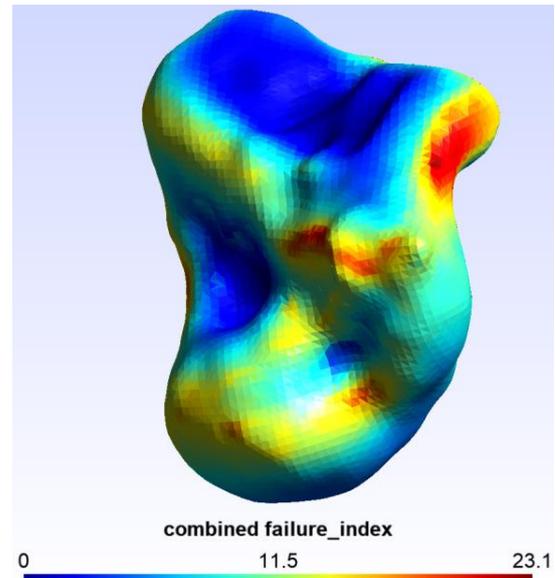
128     'combined_uxx', failure_checks)
129
130     # stelle das Endergebnis in gmsh dar
131     analysis.view_combined_failure_check(combined_failure_checks)

```

Die Ergebnisse der verschiedenen maximalen Risslängen werden kombiniert und als Endergebnis in Abbildung A.7 dargestellt.



(a) Vorhersage-Modus: 0=Rissinitiierung ausgeschlossen, 2=Rissinitiierung bei kritischer Last, 1=obere Grenze für Versagensindex



(b) Versagensindex *FI*

Abbildung A.7: `analysis.view_combined_failure_check(...)` stellt das Endergebnis in gmsh dar.

Der Vorhersage-Modus in Abbildung A.7a ist „0“, wenn eine Rissinitiierung an einer Position ausgeschlossen wird. „1“ bedeutet, dass eine obere Grenze für den Versagensindex angegeben wird und „2“ bedeutet, dass eine Rissinitiierung vorhergesagt wird, wenn die aufgebrachte Last mit dem kritischen Lastfaktor skaliert wird.

```

132     # zeige alle Grafiken und oeffne gmsh.
133     plt.show()
134     gmsh.fltk.run()

```

Literatur

- [1] Dominique Leguillon. „Strength or toughness? A criterion for crack onset at a notch“. In: *European Journal of Mechanics - A/Solids* 21.1 (Jan. 2002), S. 61–72. ISSN: 09977538. DOI: 10.1016/S0997-7538(01)01184-6. URL: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0997753801011846> (besucht am 16.09.2019).
- [2] T. L. Anderson. *Fracture mechanics: fundamentals and applications*. Boca Raton: CRC Press, 1991. 793 S. ISBN: 978-0-8493-4277-6.
- [3] D. Leguillon. „An attempt to extend the 2D coupled criterion for crack nucleation in brittle materials to the 3D case“. In: *Theoretical and Applied Fracture Mechanics* 74 (Dez. 2014), S. 7–17. ISSN: 01678442. DOI: 10.1016/j.tafmec.2014.05.004. URL: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0167844214000731> (besucht am 11.10.2019).
- [4] *Anaconda Individual Edition*. Version 4.8.2. URL: <https://www.anaconda.com/distribution/> (besucht am 30.09.2019).
- [5] Christophe Geuzaine und Jean-François Remacle. „Gmsh: A 3-D finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 79.11 (10. Sep. 2009), S. 1309–1331. ISSN: 00295981, 10970207. DOI: 10.1002/nme.2579. URL: <http://doi.wiley.com/10.1002/nme.2579> (besucht am 11.05.2020).
- [6] *Abaqus*. Version 2017. URL: <https://www.3ds.com/de/produkte-und-services/simulia/produkte/abaqus/>.
- [7] Helmut Böhm. „A short introduction to basic aspects of continuum micromechanics“. In: *ILSB report* (2015).
- [8] Nobuyuki Otsu. „A Threshold Selection Method from Gray-Level Histograms“. In: *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics* 9.1 (Jan. 1979), S. 62–66. ISSN: 0018-9472, 2168-2909. DOI: 10.1109/TSMC.1979.4310076. URL: <http://ieeexplore.ieee.org/document/4310076/> (besucht am 04.04.2020).
- [9] William E. Lorensen und Harvey E. Cline. „Marching cubes: A high resolution 3D surface construction algorithm“. In: *Proceedings of the 14th annual conference on Computer graphics and interactive techniques - SIGGRAPH '87*. the 14th annual conference. Not Known: ACM Press, 1987, S. 163–169. ISBN: 978-0-89791-227-3. DOI: 10.1145/37401.37422. URL: <http://portal.acm.org/citation.cfm?doid=37401.37422> (besucht am 05.04.2020).
- [10] *Micromechanics Plugin - For Abaqus/CAE*. Version 1.15. 12. Nov. 2017. URL: <https://info.simuleon.com/blog/multiscale-modelling-of-a-concrete-steel-composite-using-the-abaqus-rve-micromechanics-plugin>.

- [11] Edward Waring. „VII. Problems concerning interpolations“. In: *Philosophical Transactions of the Royal Society of London* 69 (31. Dez. 1779), S. 59–67. ISSN: 0261-0523, 2053-9223. DOI: 10.1098/rstl.1779.0008. URL: <https://royalsocietypublishing.org/doi/10.1098/rstl.1779.0008> (besucht am 27.05.2020).
- [12] *SQLite*. Version 3.31.1. URL: www.sqlite.org.
- [13] Konrad Schneider, Benjamin Klusemann und Swantje Bargmann. „Fully periodic RVEs for technological relevant composites: not worth the effort!“ In: *Journal of Mechanics of Materials and Structures* 12.4 (22. Mai 2017), S. 471–484. ISSN: 1559-3959, 1559-3959. DOI: 10.2140/jomms.2017.12.471. URL: <http://msp.org/jomms/2017/12-4/p08.xhtml> (besucht am 14.04.2020).
- [14] Douglas C. Montgomery und George C. Runger. *Applied statistics and probability for engineers*. 2nd ed. New York: John Wiley Sons, 1999. 1 S. ISBN: 978-0-471-17027-3.
- [15] Student. „The Probable Error of a Mean“. In: *Biometrika* 6.1 (März 1908), S. 1. ISSN: 00063444. DOI: 10.2307/2331554. URL: <https://www.jstor.org/stable/2331554?origin=crossref> (besucht am 09.05.2020).
- [16] Halbert White. „A Heteroskedasticity-Consistent Covariance Matrix Estimator and a Direct Test for Heteroskedasticity“. In: *Econometrica* 48.4 (Mai 1980), S. 817. ISSN: 00129682. DOI: 10.2307/1912934. URL: <https://www.jstor.org/stable/1912934?origin=crossref> (besucht am 03.11.2019).
- [17] R. Dennis Cook und Sanford Weisberg. *Residuals and influence in regression*. Monographs on statistics and applied probability. New York: Chapman und Hall, 1982. 230 S. ISBN: 978-0-412-24280-9.
- [18] Robert J. Guyan. „Reduction of stiffness and mass matrices“. In: *AIAA Journal* 3.2 (Feb. 1965), S. 380–380. ISSN: 0001-1452, 1533-385X. DOI: 10.2514/3.2874. URL: <https://arc.aiaa.org/doi/10.2514/3.2874> (besucht am 22.04.2020).
- [19] M. Ch. Hermite und M. Borchardt. „Sur la formule d’interpolation de Lagrange“. In: *Journal für die reine und angewandte Mathematik (Crelles Journal)* 1878.84 (1. Jan. 1878), S. 70–79. ISSN: 1435-5345, 0075-4102. DOI: 10.1515/crelle-1878-18788405. URL: <http://www.degruyter.com/view/j/crll.1878.1878.issue-84/crelle-1878-18788405/crelle-1878-18788405.xml> (besucht am 09.05.2020).
- [20] Alexandre Belloni, Victor Chernozhukov und Lie Wang. „Square-Root Lasso: Pivotal Recovery of Sparse Signals via Conic Programming“. In: *Biometrika* 98.4 (1. Dez. 2011), S. 791–806. ISSN: 0006-3444, 1464-3510. DOI: 10.1093/biomet/asr043. URL: <http://arxiv.org/abs/1009.5689> (besucht am 22.10.2019).
- [21] Gideon Schwarz. „Estimating the Dimension of a Model“. In: *The Annals of Statistics* 6.2 (März 1978), S. 461–464. ISSN: 0090-5364. DOI: 10.1214/aos/1176344136. URL: <http://projecteuclid.org/euclid.aos/1176344136> (besucht am 09.05.2020).