

Modellierung und Simulation von Mehrfeldproblemen der Strukturmechanik

Von der Fakultät für Bauingenieurwesen der
Ruhr-Universität Bochum zur
Erlangung der *venia legendi* für das Fach
Strukturmechanik
angenommene Habilitationsschrift

von
Dr.-Ing. Detlef Kuhl

Gutachter:
Prof. Dr. techn. Günther Meschke
Prof. Dr.-Ing. Otto T. Brühns
Prof. Dr.-Ing. Jörg Schröder

Tag der Einreichung: 4. Februar 2004
Vollzug des Habilitationsverfahrens: 7. Juli 2004

Schriftenreihe des Instituts für Konstruktiven Ingenieurbau

Herausgeber:
Geschäftsführender Direktor des
Instituts für Konstruktiven Ingenieurbau
Ruhr-Universität Bochum

Heft 2005-9

Detlef Kuhl

**Modellierung und Simulation von
Mehrfeldproblemen der Strukturmechanik**

Shaker Verlag
Aachen 2005

Bibliografische Information der Deutschen Bibliothek

Die Deutsche Bibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://dnb.ddb.de> abrufbar.

Zugl.: Bochum, Univ., Habil.-Schr., 2004

Copyright Shaker Verlag 2005

Alle Rechte, auch das des auszugsweisen Nachdruckes, der auszugsweisen oder vollständigen Wiedergabe, der Speicherung in Datenverarbeitungsanlagen und der Übersetzung, vorbehalten.

Printed in Germany.

ISBN 3-8322-4632-0

ISSN 1614-4384

Shaker Verlag GmbH • Postfach 101818 • 52018 Aachen

Telefon: 02407 / 95 96 - 0 • Telefax: 02407 / 95 96 - 9

Internet: www.shaker.de • eMail: info@shaker.de

Zusammenfassung

Der vorliegende Beitrag behandelt die Modellbildung und die numerische Simulation von Mehrfeldproblemen im erweiterten Gebiet der Strukturmechanik. Als repräsentative Beispiele werden die HU-WASHIZU-Elastodynamik von Schalentragwerken und die Thermo-Elasto-Plastizität von Raketenbrennkammern erläutert. Der Schwerpunkt der Mehrfeldmodellierung und -simulation liegt auf langzeitlichen chemomechanischen Deteriorationsmechanismen von Betontragwerken.

Als Grundlage der Modellbildung von Mehrfeldproblemen werden generalisierte Ein- und Mehrfeldprobleme vorgestellt. Diese werden von den Bilanzen, den treibenden Kräften und den konstitutiven Gesetzen als Funktion der Feld- und Geschichtsvariablen beschrieben. Interaktionen der Felder sind in den Bilanzen und den konstitutiven Gesetzen manifestiert. In Vorbereitung auf die numerische Lösung von Mehrfeldproblemen werden diese Bilanzen in eine räumlich schwache Form überführt sowie bezüglich der Feldvariablen linearisiert.

Die numerische Lösung von nichtlinearen und transienten Mehrfeld-Anfangsrandwertaufgaben basiert auf der räumlichen Finite-Elemente-Diskretisierung, der Zeitintegration und der NEWTON-RAPHSON-Iteration. Die Finite-Elemente-Diskretisierung in Tensornotation erlaubt die standardisierte Elementformulierung ein-, zwei- und dreidimensionaler Kontinua. Neben den im Rahmen der p -Version der Finite-Elemente-Methode üblichen hierarchischen Ansatzfunktionen, werden klassische LAGRANGE-Ansatzfunktionen zur effektiven Umsetzung beliebigdimensionaler p -Mehrfeldelemente reformuliert. Zur Zeitintegration werden NEWMARK- und GALERKIN-Verfahren für nichtlineare Anfangswertaufgaben erster und zweiter Ordnung entwickelt. Beide Verfahrensklassen werden durch numerisch aufwendige, jedoch ungemein zuverlässige Fehlerschätzer der h - und p -Methode und Algorithmen der adaptiven Zeitschrittanpassung ergänzt. Die Vorteile der Klasse der NEWMARK-Verfahren liegt im geringen numerischen Aufwand. Die GALERKIN-Verfahren überzeugen durch ihre hohe Genauigkeit und Robustheit. Die numerischen Verfahren werden derart entwickelt, dass ein modularer Aufbau von Algorithmen-, Element-, Modell- und Materialbibliotheken möglich ist.

Die Modellierung langzeitlicher chemomechanischer Deterioration von Betontragwerken durch das Kalziumauslaugen und die mechanisch induzierte Schädigung zeigt die Umsetzung des vorgeschlagenen abstrakten Mehrfeldproblems. Das Modell besteht im Wesentlichen aus einem Porenmodell und phänomenologischen Modellen der mechanischen Schädigung und der Betonkorrosion. Besonderheiten des Modells sind die chemischen Geschichtsparameter, die den irreversiblen Charakter des Kalziumauslaugens widerspiegeln, und der analoge Aufbau von mechanischem und chemischem Schädigungsmodell. Materialstudien zeigen, dass das Modell in der Lage ist sowohl die einzelnen Schädigungsmechanismen als auch deren Interaktion abzubilden. Die Simulation chemomechanischer

Schädigung von Betonstrukturen illustriert deren chemomechanische Deterioration sowie die Umsetzung des numerischen Konzepts. Insbesondere können die Interaktionen von Mechanik und Chemie sowie die Verminderung der Struktursteifigkeit und -festigkeit aufgrund des chemischen Angriffs gezeigt werden.

Untersuchungen im Rahmen der Elektrolytchemie der Dissoziationsprodukte von Calciumhydroxid als dem meistgelösten Bestandteil des Zementsteins zeigen, dass klassische Diffusionsmodelle nicht ausreichen um den Transport von interagierenden Ionen durch das Porengefüge adäquat abzubilden. Die NERNST-Kopplung von im Porenfluid wandernden Kat- und Anionen und die Konzentrationsabhängigkeit der Diffusivität liefern im Vergleich zur klassischen Kalziumionen-Diffusion drastisch veränderte Transporteigenschaften. Verschiedene Elektrolyt-Diffusionsmodelle werden anhand von experimentell ermittelten konzentrationsabhängigen Diffusionskoeffizienten verschiedener Elektrolyte verglichen. Letztlich werden auf dieser Basis das NERNST-HARTLEY- und das ONSAGER-FUOSS-Modell verifiziert. Die Unterschiede von klassischen Diffusionsmodellen und Elektrolyt-Diffusionsmodellen werden auf Material- und Systemebene im Kontext der Diffusion und der Reaktion-Diffusion untersucht. Insbesondere wird gezeigt, dass die klassische Modellierung des Diffusionsprozesses zu einer beträchtlichen Überschätzung der prognostizierten Lebensdauer von Betontragwerken führt.

Detaillierte Studien zur Numerik werden am Beispiel der Dissoziation-Elektrolyt-Diffusion durchgeführt, da sich diese Rechnungen im Zuge der Forschungsarbeiten als besonders kritisch erwiesen. Stabilitätsprobleme bei nicht glatten Änderungen der DIRICHLET-Randbedingungen oder des Produktionsterms der Dissoziationsprodukte können mithilfe adaptiv kontrollierter NEWMARK-Zeitintegrationsverfahren sowie mit diskontinuierlichen und kontinuierlichen GALERKIN-Zeitintegrationsverfahren behoben werden. Bezüglich der untersuchten numerischen Verfahren können die Fehlerschätzer der h - und p -Methode verifiziert und ein hochwertiger und günstiger Fehlerindikator identifiziert werden. Basierend auf den Fehlerschätzern werden die Funktionsweise der adaptiven Zeitschrittsteuerung demonstriert sowie die Genauigkeitsordnung der Zeitintegrationsverfahren im nichtlinearen Kontext ermittelt. Die NEWMARK-Verfahren sind von zweiter Ordnung genau. Die diskontinuierlichen und kontinuierlichen GALERKIN-Integratoren erreichen für das untersuchte Reaktions-Diffusions-Problem Genauigkeitsordnungen von p beziehungsweise $p+1$, wobei p dem beliebig wählbaren temporalen Ansatzpolynomgrad entspricht.

Insgesamt wird ein Modellierungs- und Simulationsrahmen zur Verfügung gestellt, der zur effektiven Umsetzung einer Vielzahl von Mehrfeldproblemen geeignet ist. Die modular aufgebauten numerischen Methoden sind robust, kontrollierbar und einfach an veränderte Gegebenheiten anzupassen.

Vorwort

Die Faszination für die Forschung auf dem Gebiet der numerischen Strukturmechanik entstand bereits während meiner Tätigkeit als Stipendiat bei Herrn Professor Ekkehard Ramm an der Universität Stuttgart. Auf dieser Basis entstand die vorliegende Arbeit in der Zeit von 1998 bis 2004 im Rahmen meiner Tätigkeit als Oberingenieur am Lehrstuhl für Statik und Dynamik der Ruhr-Universität Bochum.

Danken möchte ich dem Lehrstuhlinhaber Professor Günther Meschke für die Entwicklungsmöglichkeiten, die er mir in Lehre und Forschung bot und die Übernahme des Hauptreferats. Seine immerwährende Aktivität und seine Willenskraft sind außergewöhnlich.

Weiterhin gilt mein besonderer Dank Herrn Professor Otto T. Bruhns und Herrn Professor Jörg Schröder für die bereitwillige Übernahme der Koreferate. Die Diskussionen, die sie mit mir geführt haben sowie den Rückhalt und die Motivation, die sie mir geschenkt haben trugen entscheidend zum Gelingen der vorliegenden Arbeit bei.

Besonderen Dank möchte ich an meine studentischen Kollegen für ihre tatkräftige Unterstützung in Lehre und Forschung richten. Ich freue mich sehr, dass Monika Rotthaus, Julia Merghheim, Sandra Krimpmann, Janosch Stascheid und Sönke Carstens nach dem erfolgreichen Abschluss ihres Studiums der Wissenschaft erhalten geblieben sind. Ebenso möchte ich den Diplomanden danken, die ich bei ihren Abschlussarbeit begleiten durfte. Ohne die wissenschaftlichen Beiträge von Wiebke Breil, Stephan Müller, Falko Bangert, Christian Becker, Stephanie Armbrüster, Christian Rickelt, Julia Merghheim, Monika Rotthaus, Gordana Kljaić, Daniel Werner, Jens Drescher, Sandra Krimpmann, Sönke Carstens und Michael Johlitz wäre die vorliegende Arbeit vermutlich nicht entstanden.

Ein wesentlicher Aspekt einer Habilitation ist die Ausbildung von Nachwuchswissenschaftlern und -ingenieuren. Herr Professor Günther Meschke gab mir Gelegenheit im unvertieften Studium, der Vertiefungsrichtung 'Computermethoden der Tragwerksanalyse' und im Masterstudiengang 'Computational Engineering' zu lehren. Die Bochumer Studierenden waren immer sehr interessiert und engagiert sowie konstruktiv in Kritik und Tat. Die Freude, die ich in diesem Umfeld empfinde, war für mich Motivation und Ansporn den eingeschlagenen Weg zu gehen. Dafür möchte ich den Studierenden herzlich danken.

Schließlich danke ich auch allen KollegenInnen und MitarbeiternInnen der Fakultät für Bauingenieurwesen für die gute Zusammenarbeit und das fruchtbare Arbeitsklima. Insbesondere danke ich Jörn Mosler und Thomas Kasper für anregende Diskussionen, ihren Beistand und unsere Freundschaft.

Bochum, im Juli 2004

Detlef Kuhl

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Mehrfeldphänomene im Alltag	2
1.1.1	Schwindrisse in Böden	2
1.1.2	Entstehung von Eisschollen	4
1.1.3	Entstehung von grobporösem Kalkstein	4
1.2	Mehrfeldphänomene der Technik	5
1.2.1	Mechanische Schädigung von Stahlbetontragwerken	6
1.2.2	Umweltbedingte Schädigung von Beton	6
1.2.3	Chemomechanische Schädigung von Beton	8
1.2.4	Thermomechanik von Verbrennungsmaschinen	10
1.3	Modellbildung von Mehrfeldproblemen	11
1.4	Simulation von Mehrfeldproblemen	12
1.5	Ausgewählte Mehrfeldprobleme	13
1.6	Struktur der Arbeit	14
2	Modellbildung generalisierter Mehrfeldprobleme	15
2.1	Einfeldprobleme	16
2.1.1	Bilanz	16
2.1.2	Treibende Kraft	18
2.1.3	Konstitutive Gleichung	18
2.1.4	Rand- und Anfangsbedingungen	19
2.1.5	Zusammenfassende Darstellung von Einfeldproblemen	19
2.2	Ausgewählte Einfeldprobleme	19
2.2.1	Elastodynamik	19
2.2.2	Inelastische Deformation	20
2.2.3	Wärmeleitung	20
2.2.4	Reaktion-Diffusion	21
2.2.5	Bewertung	21

2.3	Mehrfeldprobleme	21
2.3.1	Bilanzgleichungen	21
2.3.2	Treibende Kräfte	22
2.3.3	Konstitutive Gleichungen	22
2.3.4	Rand- und Anfangsbedingungen	22
2.3.5	Zusammenfassende Darstellung von Mehrfeldproblemen	23
2.4	Ausgewählte Mehrfeldprobleme	23
2.4.1	HU-WASHIZU-Elastodynamik	24
2.4.2	Thermo-Elastodynamik	24
2.4.3	Thermo-Elasto-Plastizität	24
2.4.4	Chemo-Elasto-Schädigung	25
2.4.5	Bewertung	25
2.5	Klassifizierung von Ein- und Mehrfeldproblemen	25
2.6	Schwache Formulierung von Mehrfeldproblemen	26
2.6.1	Schwache Form individueller Bilanzen	26
2.6.2	Schwache Form gekoppelter Bilanzen	27
2.7	Linearisierung der schwachen Formulierung von Mehrfeldproblemen	27
2.7.1	GÂTEAUX-Ableitung	27
2.7.2	Linearisierung individueller schwacher Formen	28
2.7.3	Linearisierung der gekoppelten schwachen Form	29
2.8	Fazit	29
3	Numerische Lösung von Mehrfeldproblemen	31
3.1	Konzept der numerischen Lösung	32
3.2	Räumliche Finite-Elemente-Diskretisierung	33
3.2.1	Räumliche Diskretisierung	34
3.2.2	Finite-Elemente-Ansatzfunktionen	35
3.2.3	Approximation der Feldvariablen und ihrer Gradienten	39
3.2.4	JACOBI-Transformation	40
3.2.5	Diskretisierung der schwachen Form	41
3.2.6	Nichtlineare semidiskrete Bilanz	42
3.2.7	Diskretisierung der linearisierten schwachen Form	43
3.2.8	Linearisierte semidiskrete Bilanz	44
3.2.9	Generierung von Elementtensoren	45
3.3	Zeitintegrationsmethoden der NEWMARK-Klasse	49
3.3.1	Nichtlineares Anfangswertproblem zweiter Ordnung	50
3.3.2	Konzept der Zeitintegration	51

3.3.3	Zeitdiskretisierung	52
3.3.4	Approximation der Zustandsvariablen im Zeitschritt	52
3.3.5	Algorithmische semidiskrete Bilanz	53
3.3.6	Linearisierung	55
3.3.7	NEWTON-RAPHSON-Iteration	56
3.3.8	Varianten und Spezialisierungen	57
3.3.9	Adaptive Zeitschrittkontrolle	59
3.3.10	Algorithmische Umsetzung	64
3.3.11	Charakterisierung numerischer Eigenschaften	65
3.4	Diskontinuierliche und kontinuierliche GALERKIN-Zeitintegratoren	74
3.4.1	Nichtlineares Anfangswertproblem zweiter Ordnung	76
3.4.2	Zeitdiskretisierung	76
3.4.3	Kontinuitätsbedingung	77
3.4.4	Schwache Formulierung der Bilanz und der Kontinuitätsbedingung	78
3.4.5	Linearisierung der schwachen Form	78
3.4.6	Temporale Finite-Elemente-Diskretisierung	79
3.4.7	Algorithmische Umsetzung	87
3.4.8	Varianten und Spezialisierungen	89
3.4.9	Abschätzung der numerischen Effizienz	92
3.4.10	Indirekte Integration von Anfangswertproblemen zweiter Ordnung	94
3.5	Fazit	104
4	Modellierung phänomenologischer chemomechanischer Schädigung	105
4.1	Beschreibung und Modellierung des Phänomens	105
4.1.1	Experimente	106
4.1.2	Materialmodellierung	108
4.2	Modell der chemomechanischen Schädigung	110
4.2.1	Phänomenologie	110
4.2.2	Definition der totalen Porosität	112
4.2.3	Anfangsrandwertproblem	113
4.2.4	Konstitutive Gesetze	114
4.2.5	Symbiose und Relation zu existierenden Modellen	119
4.3	Modellstudien chemomechanischer Schädigung	122
4.3.1	Migration von Kalziumionen	123
4.3.2	Phänomenologische Chemie	125
4.3.3	Totale und scheinbare mechanische Porosität	126
4.3.4	Makroskopische Konduktivität	127

4.3.5	Makroskopische Steifigkeit und Festigkeit	129
4.3.6	Zyklische chemische und mechanische Belastung	130
4.3.7	Dimensionsanalyse der Ca^{2+} -Produktionsterme	131
4.4	Fazit	132
5	Simulation phänomenologischer chemomechanischer Schädigung	135
5.1	Vorbemerkungen	135
5.2	Numerische Methoden	137
5.2.1	Schwache Formulierung	137
5.2.2	Zeitintegration	138
5.2.3	Konsistente Linearisierung	139
5.2.4	p -Finite-Elemente-Diskretisierung	140
5.2.5	Details der Finite-Elemente-Diskretisierung	141
5.2.6	NEWTON-RAPHSON-Iteration	144
5.3	Eindimensionales Kalziumauslaugen	144
5.3.1	h - und p -Verfeinerung und Konvergenz	145
5.3.2	Kalzium-Dissoziation-Diffusion	146
5.3.3	Dimensionsanalyse des Ca^{2+} -Produktionsterms	150
5.3.4	Ausbreitung der Zersetzungsfronten	153
5.4	Deteriorationsanalyse eines Zementsteinbalkens	154
5.4.1	Diskussion chemomechanischer Schädigung	155
5.4.2	Interaktion der Deteriorationsmechanismen	157
5.4.3	Numerische Traglastversuche ausgelaugter Zementsteinproben	159
5.5	Fazit	161
6	Elektrolytchemie der chemomechanischen Schädigung	163
6.1	Dissoziations-Diffusions-Modell des Kalziumauslaugens	165
6.1.1	Dissoziation von individuellen Elektrolyten in Wasser	165
6.1.2	Thermodynamik der Ionendiffusion	166
6.1.3	Entwicklung von Elektrolyt-Diffusionsmodellen	169
6.1.4	Simplifizierungen von Elektrolyt-Diffusionsmodellen	172
6.1.5	Fünf-Parameter-Modell der Elektrolytdiffusion	177
6.2	Studien auf Materialpunktebene	177
6.2.1	Daten zu Elektrolytlösungen und Naturkonstanten	177
6.2.2	Konzentrationsabhängiger Diffusionskoeffizient	178
6.3	Elektrolytdiffusion in porösem Medium	181
6.4	Kalziumauslaugen eines Zementsteinstabs	189

6.4.1	Simulation mittelfristiger chemischer Deterioration	190
6.4.2	Simulation langzeitlicher chemischer Deterioration	195
6.4.3	Axialsymmetrische Analysen	197
6.4.4	Parameteridentifikation des KOHLRAUSCH-Modells	199
6.5	Kalziumauslaugen eines Zementsteinbalkens	203
6.5.1	ONSAGER-FUOSS-Elektrolyt-Diffusionsmodell	204
6.5.2	Propagation von Dissoziationsfronten	208
6.5.3	Vergleich von Diffusionsmodellen	209
6.5.4	Studie zum Einfluss von Rissen	209
6.6	Fazit	212
7	Detaillierte Analyse der Numerik	215
7.1	Kalziumauslaugen eines Zementsteinstabs	216
7.1.1	Räumlich lokaler Zeitintegrationsfehler	216
7.1.2	Zeitliche Fehlerästimation der h -Methode	217
7.1.3	Anfangsfehler der Zeitintegration	221
7.1.4	Zeitliche Fehlerindikation	223
7.1.5	Adaptive Zeitschrittsteuerung	224
7.1.6	Studien zur Stabilität der numerischen Verfahren	227
7.1.7	Zeitintegration mit GALERKIN-Methoden	231
7.1.8	Fehleranalyse von NEWMARK- und GALERKIN-Methoden	243
7.1.9	Vision der m -Adaptivität	248
7.2	Kalziumauslaugen eines Zementsteinbalkens	249
7.2.1	Fehler infolge der zeitlichen Diskretisierung	250
7.2.2	Ursache von Oszillationen der Dissoziationsrate	254
7.2.3	Integration mit kontinuierlichen GALERKIN-Methoden	254
7.3	Fazit	259
8	Zusammenfassung und Ausblick	261
8.1	Zusammenfassung	261
8.2	Ausblick	263
	Literaturverzeichnis	265