

Oliver Barfusz

Reduced integration-based continuum
finite elements for gradient-extended
damage

Reduced integration-based continuum finite elements for gradient-extended damage

Von der Fakultät für Bauingenieurwesen
der Rheinisch-Westfälischen Technischen Hochschule Aachen
zur Erlangung des akademischen Grades eines Doktors der Ingenieurwissenschaften
genehmigte Dissertation

vorgelegt von

Oliver Barfusz, M. Sc.

Berichter*innen: Prof. Dr.-Ing. habil. Stefanie Reese
Prof. Dr.-Ing. habil. Friedrich Gruttmann

Tag der mündlichen Prüfung: 25.03.2022

Diese Dissertation ist auf den Internetseiten der Universitätsbibliothek online verfügbar.

Applied Mechanics – RWTH Aachen University
Editor: Prof. Dr.-Ing. Stefanie Reese

Volume 11

Oliver Barfusz

**Reduced integration-based continuum finite elements
for gradient-extended damage**

Shaker Verlag
Düren 2022

Bibliographic information published by the Deutsche Nationalbibliothek

The Deutsche Nationalbibliothek lists this publication in the Deutsche Nationalbibliografie; detailed bibliographic data are available in the Internet at <http://dnb.d-nb.de>.

Zugl.: D 82 (Diss. RWTH Aachen University, 2022)

Copyright Shaker Verlag 2022

All rights reserved. No part of this publication may be reproduced, stored in a retrieval system, or transmitted, in any form or by any means, electronic, mechanical, photocopying, recording or otherwise, without the prior permission of the publishers.

Printed in Germany.

ISBN 978-3-8440-8604-1

ISSN 2363-488X

Shaker Verlag GmbH • Am Langen Graben 15a • 52353 Düren

Phone: 0049/2421/99011-0 • Telefax: 0049/2421/99011-9

Internet: www.shaker.de • e-mail: info@shaker.de

Acknowledgements

The present cumulative dissertation is the outcome of my activities as research associate at the Institute of Applied Mechanics (IFAM) at the RWTH Aachen University. At this point, I would like to express my sincere gratitude to all the people who supported me and thus contributed to the successful completion of this thesis. The English-speaking reader may forgive me for writing the following personal acknowledgements in German.

An erster Stelle möchte ich mich ganz besonders bei der Betreuerin meiner Doktorarbeit, Frau Prof. Dr.-Ing. Stefanie Reese bedanken, die mir die Möglichkeit gegeben hat ein Teil ihres wunderbaren Teams in Aachen zu werden. Durch ihre kontinuierliche Förderung und Forderung konnte ich fachlich stets das Beste aus mir herausholen und mich insbesondere auch persönlich weiterentwickeln. Des Weiteren möchte ich mich auch für ihren unermüdlichen Einsatz und ihre Ausdauer bei der Drittmittelaquirierung bedanken, der es mir unter anderem ermöglichte meine wissenschaftlichen Erkenntnisse auf vielen internationalen Fachtagungen vorzustellen sowie im Jahre 2018 einen Forschungsaufenthalt an der UCSD in San Diego, USA zu verbringen. An dieser Stelle möchte ich mich auch bei Prof. Petr Krysl bedanken, der mich sehr herzlich in San Diego empfangen und betreut hat.

Weiterhin danke ich Prof. Dr.-Ing. Friedrich Gruttmann, der mir während meines Masterstudiums an der TU Darmstadt die Grundlagen der FEM beigebracht und mich zur Promotion ermutigt hat. Ich danke ihm insbesondere auch für die Übernahme des Zweitgutachtens dieser Dissertation. Außerdem möchte ich mich bei Prof. Dr.-Ing. Sven Klinkel bedanken, der sich dazu bereit erklärt hat den Vorsitz der Promotionskommission zu übernehmen.

Ein besonderer Dank gilt auch den weiteren Koautoren meiner Veröffentlichungen, die mir stets mit klugen Ratschlägen zur Seite standen. Hier möchte ich an erster Stelle meinen Freund Dr.-Ing. Tim Brepols nennen, der mich als Kollege und später auch als Oberingenieur am IFAM wissenschaftlich begleitet und mich insbesondere mit seiner Geduld, seiner fachlichen Kompetenz und den unzähligen wissenschaftlichen Diskussionen unterstützt hat. Ich danke auch Tim van der Velden und Jan Frischkorn, die mit ihren hervorragenden (Vor-)Arbeiten einen wichtigen Grundstein zum Gelingen dieser Dissertation gelegt haben. Weiterhin danke ich auch Hagen (Hansi) Holthusen für die vielen fachlichen Diskussionen rund um die FET sowie die Durchsicht meiner Manuskripte.

Ich danke auch Prof. Dr.-Ing. Jaan-Willem Simon für die erfolgreiche Zusammenarbeit während der Lehrveranstaltungen Mechanik 2 sowie der Kontinuumsmechanik, welche mir insgesamt sehr viel Spaß bereit hat.

Ich möchte mich aber auch bei allen weiteren aktuellen sowie ehemaligen Kolleginnen und

Kollegen des IFAMs für die hervorragende Zusammenarbeit, die vielen schönen Momente sowie die generell sehr gute Stimmung am Institut als auch abseits der Arbeit bedanken. Namentlich erwähnen möchte ich meine Bürokolleginnen und Kollegen Marek Fassin, Fabiola Cavaliere, Erik Prume, Kiran Manjunatha sowie auch Julian Kochmann und Sebastian Felder. Neben den Menschen am Institut möchte ich auch meinen Freunden sowie meiner Familie danken. Insbesondere meinen Eltern, Katerina und Alex, die mir meine akademische Laufbahn ermöglicht und meine Entscheidungen stets respektiert haben. Tief verbunden und dankbar bin ich für den Rückhalt, die Unterstützung sowie Geduld meiner Lebensgefährtin Katrin, die mich während der gesamten Zeit dieser Arbeit begleitet hat. Vielen herzlichen Dank!

Oliver Barfusz
Aschaffenburg, 2022

Summary

Favored by the immense progress in information technology, numerical simulations based on the finite element method have become an indispensable tool in engineering science as well as industry. By using virtual prototypes, time-consuming, large-scale experiments can be reduced to a minimum, resulting in considerable time and cost savings. Furthermore, numerical simulations allow a particularly detailed analysis of processes, which would otherwise only be possible with great difficulty, and therefore contribute decisively to a deeper understanding of mechanical processes.

The quality and thus the validity of simulation results strongly depends on the underlying mathematical models. On the one hand, this concerns the employed material models, which are constantly being further developed in order to be able to represent even the most complex mechanical effects and phenomena. At this point, for example, the (mesh-independent) description of ductile damage and failure processes should be mentioned, which represents a part of the focus of this dissertation. On the other hand, the choice of the finite element formulation plays a decisive role. Due to their simplicity, robustness and efficiency, element formulations based on low-order shape functions are preferred. However, it is known that such formulations behave much too stiffly, for example, in the case of bending dominated deformations as well as in the case of nearly incompressible materials, thus distorting the quality of the simulation results. Therefore, the main goal of the research field of finite element technology is to address these stiffening (locking) effects of low polynomial order elements in order to allow the most versatile use of the respective formulation.

This cumulative dissertation aims to make a valuable contribution in this regard. It consists essentially of three peer-reviewed journal articles in the subject area already published by the author (and his co-authors). Herein, the main goal is to extend a class of low-order continuum elements, which are based on the technology of reduced integration with hourglass stabilization, to the analysis of gradient-extended damage. In this context, gradient-extended damage is used to address the pathological mesh dependence in finite element simulations in the presence of softening material behavior.

After an introductory part, which outlines the motivation, the research relevant topics and a comprehensive literature review on the state of the art, the thesis starts with a work on a novel continuum element formulation for gradient-extended damage for large deformations. The essential goal of this work is to provide an accurate and particularly efficient finite element technology that is as generally applicable as possible for the prediction of damage phenomena in solids. The numerical efficiency results from the fact that only a single integration point is

used at the center of the element. Since there is a remarkable analogy between the micromorphic balance equation and the steady-state heat equation, a similar derivation of a consistent hourglass stabilization is adopted from the thermomechanically fully coupled situation, which has already been studied by members of the author's work group. Here, the Taylor series expansion of all constitutively dependent quantities plays a crucial role. The performance of the novel single Gaussian point formulation is demonstrated by means of four representative structural examples with softening. The simulations show that the proposed stabilization scheme works reliably for the present multi-field problem. Compared to conventional low-order solid elements with eight integration points, the novel formulation is computationally much more efficient and less sensitive to mesh distortions, which especially improves robustness in regions with highly localized damage.

The two subsequent articles deal with the incorporation of gradient-extended damage into reduced integration-based continuum shell elements (solid-shells). They differ essentially in the underlying kinematic assumptions (geometrically linear and non-linear theory, respectively). The crucial goal of these works is to extend the gradient-extended damage analysis to thin-walled structures. In contrast to the single Gaussian point formulation of Article 1, the assumed natural strain (ANS) method is applied to address curvature thickness locking as well as the transverse shear locking. Reduced integration is performed in the shell plane only and multiple integration points are considered in the direction of the shell thickness coordinate to capture potential material non-linearities in that direction. For this purpose, a combined Taylor series expansion of the strain-like quantities with respect to the element center and the stress-like quantities with respect to the normal through the element center is utilized, resulting in an appropriate hourglass stabilization. The finite element formulations are extensively tested in several rather complex plate and shell problems, including both brittle and ductile damage up to ultimate failure. The simulation results demonstrate the excellent performance of the gradient-enhanced solid-shells.

Zusammenfassung

Durch den immensen Fortschritt in der Informationstechnik sind numerische Simulationen auf Basis der Finite-Elemente-Methode ein unerlässliches Instrument in der Ingenieurwissenschaft sowie Industrie geworden. Durch den Einsatz virtueller Prototypen können aufwendige, großmaßstäbliche Experimente auf ein Minimum reduziert und damit erhebliche Zeit- und Kostenersparnisse realisiert werden. Des Weiteren ermöglichen numerische Berechnungsverfahren eine besonders detaillierte Analyse von Prozessen, welche sonst nur sehr schwer möglich wäre und tragen deshalb entscheidend zu einem tiefergehenden Verständnis der mechanischen Vorgänge bei.

Die Qualität und Aussagekraft von Simulationsergebnissen hängt dabei stark von den zugrundeliegenden mathematischen Modellen ab. Dies betrifft zum einen die verwendeten Materialmodelle, welche immer weiter entwickelt werden, um selbst die komplexesten mechanischen Effekte und Phänomene abbilden zu können. An dieser Stelle sei beispielsweise die (netzunabhängige) Beschreibung duktiler Schädigungs- und Versagensvorgänge genannt, welche einen Teil des Schwerpunkts dieser Dissertation darstellt. Zum anderen spielt aber auch die Wahl der verwendeten Finite-Elemente Formulierung eine entscheidende Rolle. Aufgrund ihrer Einfachheit, Robustheit und Effizienz werden Elementformulierungen basierend auf Polynomansätzen niedriger Ordnung bevorzugt eingesetzt. Es ist jedoch bekannt, dass sich solche Formulierungen beispielsweise bei biegedominierten Deformationen sowie bei nahezu inkompressiblen Materialien viel zu steif verhalten und somit die Güte der Simulationsergebnisse verfälschen. Das Hauptziel des Forschungsfelds der Finite-Elemente-Technologie ist es deshalb, die Versteifungseffekte (sogenanntes "locking") von Elementen niedriger Polynomordnung zu beheben, um einen möglichst vielseitigen Einsatz der jeweiligen Formulierung zu ermöglichen.

Dazu möchte die hier vorliegende kumulative Dissertation einen wertvollen Beitrag leisten. Sie besteht im Wesentlichen aus drei bereits vom Autor (und seinen Co-Autoren) veröffentlichten und begutachteten Artikeln in Fachzeitschriften des Themengebiets. Das Hauptziel ist dabei die Erweiterung von Kontinuumselementen niedriger Ansatzordnung, welche auf der Technologie der reduzierten Integration mit Stabilisierung basieren, auf die Analyse von gradientenerweiterter Schädigung. Dabei kommt die Gradientenerweiterung der Schädigung zum Einsatz, um die pathologische Netzabhängigkeit in Finite-Elemente-Simulationen bei entfestigendem Materialverhalten zu beheben.

Nach einem einleitenden Teil, welcher die Motivation, die forschungsrelevanten Themen sowie eine umfassende Literaturrecherche zum Stand der Technik aufführt, beginnt die Dissertation mit einer Arbeit zu einer neuartigen Kontinuumselementformulierung für gradientener-

weiterte Schädigung für große Deformationen. Das wesentliche Ziel dieser Arbeit ist es, eine genaue und besonders effiziente Finite-Elemente-Technologie bereitzustellen, welche möglichst allgemein für die Vorhersage von Schädigungsphänomenen in Festkörpern anwendbar ist. Die numerische Effizienz ergibt sich aus der Tatsache, dass nur ein einziger Integrationspunkt in der Mitte des Elements verwendet wird. Da eine auffällige Analogie zwischen der mikromorphen Bilanz- und der stationären Wärmeleichung besteht, wird eine ähnliche Herleitung einer konsistenten Hourglassstabilisierung aus der vollständigen thermomechanischen Kopplung übernommen, die bereits von Mitgliedern der Arbeitsgruppe des Autors untersucht wurde. Dabei spielt die Taylorreihenentwicklung aller konstitutiv abhängigen Größen eine entscheidende Rolle. Die Leistungsfähigkeit der neuartigen Ein-Gauß-Punkt Formulierung wird an vier repräsentativen Strukturbeispielen mit Entfestigung demonstriert. Die Simulationen zeigen, dass das vorgeschlagene Stabilisierungsschema für das vorliegende Mehrfeldproblem zuverlässig funktioniert. Im Vergleich zu konventionellen Volumenelementen niedriger Ordnung mit acht Integrationspunkten ist die neuartige Formulierung rechnerisch deutlich effizienter und unempfindlicher gegenüber Netzverzerrungen, was insbesondere die Robustheit in Regionen mit stark lokalisierter Schädigung verbessert.

Die beiden darauf aufbauenden Artikel beschäftigen sich mit der Einbindung von gradientenerweiterter Schädigung in reduziert integrierte Kontinuumsschalenelemente. Dabei unterscheiden sie sich im Wesentlichen in den zugrundeliegenden kinematischen Annahmen (geometrisch lineare bzw. nichtlineare Theorie). Das entscheidende Ziel dieser Arbeit ist die Erweiterung der gradientenerweiterten Schädigungsanalyse auf dünnwandige Strukturen. Im Gegensatz zur Ein-Gauß-Punkt Formulierung aus Artikel 1, wird die Methode der angenommenen natürlichen Dehnung (ANS) verwendet, um das Locking resultierend aus der Krümmungsdicke sowie der transversalen Scherbelastung zu beheben. Die reduzierte Integration wird lediglich in der Schalenebene durchgeführt und es werden mehrere Integrationspunkte in Richtung der Schalendickenkoordinate verwendet, um potenzielle Nichtlinearitäten des Materials in dieser Richtung zu erfassen. Zu diesem Zweck wird eine kombinierte Taylorreihenentwicklung der dehnungsbasierten Größen in Bezug auf den Elementmittelpunkt sowie der spannungsbasierten Größen in Bezug auf die Normale durch den Elementmittelpunkt verwendet, was zu einer geeigneten Hourglassstabilisierung führt. Die Finite-Elemente-Formulierungen werden ausgiebig anhand mehrerer komplexer Platten- und Schalenbeispiele getestet, darunter sowohl spröde (rein elastisch) als auch duktile (elasto-plastische) Schädigung bis zum endgültigen Versagen. Die Simulationsergebnisse zeigen die hervorragende Leistungsfähigkeit der gradientenerweiterten Kontinuumsschalen.

Contents

1	Introduction	1
1.1	Motivation and research-relevant topics	1
1.2	State-of-the-art in computational modeling of damage and fracture	3
1.2.1	Discrete modeling approaches	3
1.2.2	Continuous modeling approaches	6
1.3	Outline of the dissertation	9
2	Article 1:	
	A single Gauss point continuum finite element formulation for gradient-extended damage at large deformations	13
2.1	Abstract	14
2.2	Introduction	14
2.3	Gradient-extended damage plasticity model	19
2.4	Governing equations	23
2.4.1	Analogy between micromorphic balance and stationary heat equation	23
2.4.2	Parametrization of the element geometry	25
2.4.3	Weak form of the multi-field problem	26
2.5	Interpolation	27
2.5.1	Compatible strain field	29
2.5.2	Enhanced assumed strain field	30
2.5.3	Micromorphic damage gradient field	31
2.6	Single Gauss point concept	31
2.6.1	Modification of the weak form and polynomial representation	32
2.6.2	Discretized weak form	38
2.6.3	Program flow	41
2.7	Representative numerical examples	43
2.7.1	Single-edge notched specimen	43
2.7.2	Tensile specimen with imperfection	47
2.7.3	Symmetrically notched specimen	53

2.7.4	Asymmetrically notched specimen	58
2.8	Conclusion	64
2.9	Appendix	65
2.9.1	Coefficients of the shape function vector	65
2.9.2	Taylor expansion of the gradient of the virtual micromorphic damage field	66
2.9.3	Determination of the element residual vectors and stiffness matrices	67
2.9.4	Operators resulting from the geometric nonlinearity	69

3 Article 2:

	A reduced integration-based solid-shell finite element formulation for gradient-extended damage	71
3.1	Abstract	72
3.2	Introduction	72
3.3	Gradient-extended two-surface damage plasticity model	75
3.4	Solid-shell formulation	78
3.4.1	Weak forms – three-field functional	78
3.4.2	Interpolation and parametrization of the element geometry	79
3.4.3	Modification and enhancement of the standard interpolation	82
3.4.4	Reduced integration concept	84
3.4.5	Discretized weak forms	87
3.4.6	Program flow	89
3.5	Representative numerical examples	91
3.5.1	Brittle damage	92
3.5.2	Ductile damage	102
3.6	Conclusion	108
3.7	Appendix	109
3.7.1	Shape function coefficients	109
3.7.2	Locking effects in solid-shells	109
3.7.3	ANS-modified strain field	110
3.7.4	Micromorphic B -operator	111
3.7.5	Hourglass material tangent	112
3.7.6	Hourglass stabilization matrices	113
3.7.7	Element stiffness matrices	113

4 Article 3:	
Gradient-extended damage analysis with reduced integration-based solid-shells at large deformations	115
4.1 Abstract	116
4.2 Introduction	116
4.3 Gradient-extended damage-plasticity model	119
4.4 Solid-shell finite element formulation	120
4.4.1 Weak forms - three-field functional	120
4.4.2 Interpolation, parametrization and kinematics	122
4.4.3 Polynomial approximation	125
4.4.4 Discretized weak forms and reduced integration	127
4.5 Numerical examples	129
4.5.1 Annular plate	129
4.5.2 Hexcan	135
4.5.3 Out-of-plane stretching and tearing of a plate	144
4.6 Conclusion	146
4.7 Appendix	146
4.7.1 Specification of the Helmholtz free energy	146
4.7.2 Influence of the number of Gaussian points for the hexcan example in Sec. 4.5.2 using Q1STs	148
5 Conclusions and Outlook	151
List of Figures	155
List of Tables	159
Bibliography	161