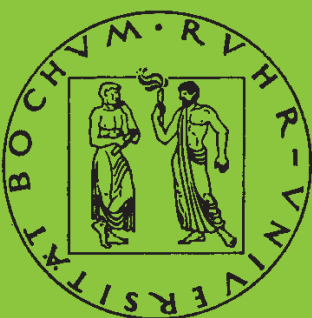


Mitteilungen aus dem Institut für Mechanik

Thorsten Bartel

**Multiskalenmodellierung
martensitischer Phasentransformationen
in Formgedächtnislegierungen unter
Verwendung relaxierter Energiepotenziale**

Heft Nr. 150



RUHR-UNIVERSITÄT BOCHUM

RUHR-UNIVERSITÄT BOCHUM
Institut für Mechanik

Thorsten Bartel

**Multiskalenmodellierung martensitischer
Phasentransformationen in Formgedächtnislegierungen
unter Verwendung relaxierter Energiepotenziale**

Mitteilungen aus dem Institut für Mechanik Nr. 150

Herausgeber:
Institut für Mechanik
— Schriftenreihe —
Ruhr-Universität Bochum
D-44780 Bochum

ISBN 3-935892-28-5

Dieses Werk ist urheberrechtlich geschützt. Die dadurch begründeten Rechte, insbesondere die der Übersetzung, des Nachdrucks, des Vortrags, der Entnahme von Abbildungen und Tabellen, der Funksendung, der Mikroverfilmung oder der Vervielfältigung auf anderen Wegen und der Speicherung in Datenverarbeitungsanlagen, bleiben, auch bei nur auszugsweiser Verwertung, vorbehalten. Eine Vervielfältigung dieses Werkes oder von Teilen dieses Werkes ist zulässig. Sie ist grundsätzlich vergütungspflichtig. Zuwiderhandlungen unterliegen den Strafbestimmungen des Urheberrechtsgesetzes.

©2009 Institut für Mechanik der Ruhr-Universität Bochum

Printed in Germany

Kurzfassung

Die vorliegende Arbeit befasst sich mit der Multiskalenmodellierung von Formgedächtnislegierungen auf Grundlage mikromechanischer, hyperelastischer Stoffgesetze, welche die Eigenschaft aufweisen, die Bildung von Mikrostrukturen bis zu einem gewissen Grad zu simulieren. Speziell werden drei auf dem Konzept der sogenannten *Relaxierung* basierende Möglichkeiten der Modellbildung aufgezeigt, von denen zwei im weiteren Verlauf konkret für numerische Analysen umgesetzt und verwendet werden. Insbesondere wird eine neue Energiedichte zur Approximation der sogenannten *Quasikonvexifizierung* hergeleitet, welche im mathematischen und auch physikalischen Sinn eine höchst plausible Lösung liefert. Die angestrebte Simulation der bezüglich des Spannungs–Dehnungs–Verhaltens vorhandenen Hysterese–Schleife von Formgedächtnislegierungen bedingt die Einbindung von Dissipation, was mittels eines Variationsprinzips für inelastische Materialien vollzogen wird, welches auf Evolutionsgleichungen für die dissipativen internen Variablen führt. Diesbezüglich werden drei unterschiedliche Evolutionsgesetze für diese Variablen aufgezeigt: zwei Formen elasto–plastischer sowie ein visko–plastisches Gesetz. Die jeweils resultierende Materialantwort der unterschiedlichen Modelle wird anhand mannigfaltiger Beispielrechnungen auf Materialpunktebene analysiert. Zu weiterführenden Untersuchungen des Einflusses mesoskopischer Prozesse auf das makroskopische Materialverhalten von Formgedächtnislegierungen werden die Materialmodelle der mikroskopischen Materialebene mittels der *Multiskalen–Finite–Elemente–Methode* erweitert und auf Ausscheidungen, Polykristalle, Mikrorisse sowie Inklusionen umfassende Problemstellungen angewandt.

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand in den Jahren 2003–2008 während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehrstuhl für Allgemeine Mechanik der Ruhr-Universität Bochum und wurde von der Fakultät für Bau- und Umweltingenieurwissenschaften als Dissertation angenommen.

Mein aufrichtiger Dank gilt zunächst Herrn Prof. Dr. rer. nat. Klaus Hackl, der mir im Rahmen meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter seines Lehrstuhls die Möglichkeit bot, ein profundes Fachwissen anzueignen und auch immer eigene Ideen zu entwickeln und verfolgen. Auch Herrn Prof. Dr.-Ing. Christian Miehe möchte ich für die Übernahme des Koreferates danken.

Ganz besonders möchte ich einen Dank an die (z.T. ehemaligen) Mitarbeiter des Lehrstuhls für Allgemeine Mechanik, insbesondere Dr.-Ing. techn. Martin Schmidt-Baldassari, Herrn Dr.-Ing. Ulrich Hoppe, Herrn Dr.-Ing. Gregor Kotucha, Herrn Dr.-Ing. Rainer Fechte-Heinen, Frau Dr.-Ing. Sandra Ilic M.Sc., Herrn Dipl. Ing. Dennis Kochmann M.Sc. und Herrn Ralf Dader, richten. Der kollegiale und erheiternde Umgang miteinander, die stete Bereitschaft zu fachlichen Diskussionen sowie die uneingeschränkte Motivation zur effektiven Zusammenarbeit in Forschung und Lehre haben für eine einzigartige Arbeitsatmosphäre gesorgt.

Herausstellen möchte ich dabei an dieser Stelle zum einen Herrn Dr.-Ing. Ulrich Hoppe, der immerzu ein offenes Ohr für fachliche (und auch sonstige) Probleme hatte und diese mit seinem Fachwissen meist direkt zu beheben wusste. Überdies waren die wissenschaftlichen Diskussion mit ihm stets interessant sowie hilf- und lehrreich, boten häufig neue Anregungen und trugen sehr zum Gelingen dieser Arbeit bei.

Zum anderen möchte ich mich ganz herzlich bei Herrn Dr.-Ing. techn. Martin Schmidt-Baldassari bedanken, der mich durch seine fachliche Kompetenz beeindruckt und schon während meines Studiums für die Mechanik begeistert hat. Die mir geleisteten Anregungen zu Beginn meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter waren sehr hilfreich und der Grundstein für diese Arbeit.

Schließlich möchte ich mich bei meiner Familie, speziell meiner Frau Mareike, meiner Tochter Sarah, meinem Sohn Lukas sowie meiner Mutter, meinem Stiefvater und meinen Schwiegereltern für die fortwährende Unterstützung in den übrigen Lebensbereichen und den familiären Zusammenhalt bedanken.

Mündliche Prüfung: 27.02.2009

1. Gutachter: Prof. Dr. rer. nat. Klaus Hackl
2. Gutachter: Prof. Dr.-Ing. Christian Miehe

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	1
I. Grundlagen	5
2. Grundlagen der Kontinuumsmechanik	7
2.1. Kinematik	7
2.2. Dehnungsmaße und –tensoren	10
2.3. Konzept der mechanischen Spannungen	13
2.4. Variationsprinzipien hyperelastischer Materialien	18
3. Attribute von Formgedächtnislegierungen	23
3.1. Kristallographische Aspekte martensitischer Phasentransformationen	23
3.2. Makroskopische Materialeigenschaften	28
4. Das mathematische Konzept der Relaxierung	31
4.1. Direkte Methoden der Variationsrechnung	31
4.2. Konvexität	32
4.3. Polykonvexität	34
4.4. Quasikonvexität	35
4.5. Rang–1–Konvexität	36
II. Konstitutivgesetze der Mikroebene	41
5. Energiedichte der Phasenmischung	43
5.1. Phasenenergien	44
5.2. Energiedichte nach Taylor	47
5.3. Konvexifizierung	48
5.4. Poly–Konvexifizierung	50
5.5. Rang–1–Konvexifizierung	52
6. Dissipationsfunktionale und Evolutionsgleichungen	61
6.1. Grundlegendes Konzept	61
6.2. Elasto–plastische Evolution	65
6.2.1. von Mises–Typ	65
6.2.2. Tresca–Typ	66
6.3. Viskoplastische Evolution: Perzyna–Typ	67
7. Algorithmische Umsetzung spezifischer Modelle	69
7.1. Algorithmische Umsetzung der Konsistenzbedingungen	69
7.2. Materialroutinen	70
7.2.1. von Mises–Typ	72

7.2.2.	Tresca–Typ	76
7.2.3.	Perzyna–Typ	77
8.	Materialpunkt–Analysen	81
8.1.	Grundlegende Eigenschaften	81
8.2.	Analyse verschiedener Materialien und Lastpfade	87
8.3.	Vergleich unterschiedlicher Stoffgesetze	97
8.3.1.	Vergleich der Transformationsmodi	97
8.3.2.	Vergleich der Relaxierungsmethoden	109
8.3.3.	Vergleich der Evolutionsgesetze	113
8.3.4.	Ratenabhängiges Stoffgesetz	116
8.4.	Spezielle Analysen	122
8.4.1.	Innere Hysteresen	122
8.4.2.	Kombinierte Axial– und Torsionsbelastung	123
8.5.	Algorithmische Aspekte der Materialroutinen	123
8.5.1.	Größenordnung der Materialparameter	126
8.5.2.	Initialwerte der Volumenfraktionen	126
8.5.3.	Initialwerte der Laminatorientierungen	127
8.5.4.	Initialwerte der algorithmischen Parameter	133
8.6.	Zusammenfassung und Beurteilung	133
III.	Modellbildung auf mesoskopischer Ebene	137
9.	Motivation und grundlegende Konzepte	139
9.1.	Motivation des Multiskalen–Konzeptes	139
9.2.	Homogenisierung	139
9.3.	Klassische Methoden	141
9.4.	Multiskalen–Finite–Elemente–Methode (MFEM)	144
9.4.1.	Grundlagen	144
9.4.2.	Algorithmischer Tangentenoperator	146
9.4.3.	Grundlegende Beispielrechnungen	150
10.	Modellierung: Ausscheidungen	159
10.1.	Grundlagen der Ni_4Ti_3 –Ausscheidungen	159
10.2.	Numerische Analysen	160
11.	Modellierung: Polykristall	189
11.1.	Geometrische Diskretisierung	189
11.2.	Numerische Analysen	195
12.	Weitere Anwendungen des Multiskalen–Modells	209
12.1.	Mikrorisse	209
12.2.	FGL–Inklusion	217
13.	Zusammenfassung	231
A.	Transformationsdehnungen	235

1. Einleitung

Spricht man vor allem in der Industrie von Formgedächtnislegierung, so ist in nahezu 100% der Fälle *Nickel–Titan* (NiTi) gemeint, wobei auch häufig der Begriff Nitinol gebraucht wird als Reminiszenz an das *Naval Ordnance Laboratory* in den USA, in dem 1958 die erste Formgedächtnislegierung aus diesen Bestandteilen erschaffen wurde. NiTi wird zu ca. 85% als binäre und 10% als ternäre Legierung unter Beimengung etwa von Kupfer (Cu), Niob (Nb) oder Palladium (Pd) verwendet. Die meisten Anwendungen von Werkstücken aus Formgedächtnislegierungen finden sich in der Medizintechnik, wobei die bekanntesten die sogenannten *Stents* sind, welche der Erweiterung von verengten Blutgefäßen dienen. Weitere Verwendungen sind Knochenklammern und –bleche zur schnelleren Heilung von Brüchen sowie orthodontische Drähte. Allerdings setzen sich Formgedächtnislegierungen mittlerweile auch in anderen Sparten mehr und mehr durch, wie etwa als Aktoren in der Luft- und Raumfahrttechnik. Alle Stufen der industriellen Nutzung bzw. Herstellung (Schmelzen und Warmumformung, Halbzeuge, Komponenten, Endgültiges Produkt) weisen Zuwachsraten zwischen 10 und 15% p.a. auf und jährlich werden weltweit ca. 150 Patente erteilt. Großes Potenzial werden sogenannten *Hochtemperatur–Legierungen* vor allem im Automobilbereich zugesprochen, wobei hier wie auch in allen anderen Anwendungsgebieten die problematische Fertigung dieser Materialien noch ein Hemmnis in der Entwicklung und Vermarktung darstellt. Diese primär für die Industrie relevanten Informationen und Zahlen entstammen einem Vortrag von Herrn Dr. Ing. M. Mertmann (Memory-Metalle GmbH) im Rahmen der Sitzung des Industriellen Beraterkreises (IBK) des an der Ruhr–Universität Bochum ansässigen SFBs 459 aus dem Jahr 2007.

Das Potenzial, welches Formgedächtnislegierungen hinsichtlich der industriellen Nutzung zugesprochen wird, bedingt einen steigenden Bedarf an numerischer Simulation der Bauteile insbesondere unter Berücksichtigung zyklischer Belastungen und der daraus resultierenden Schädigung des Formgedächtnismaterials. Die Grundlage für solche Simulationen ist dabei ein zweckmäßiges mechanisches Stoffgesetz. Im Allgemeinen können Materialmodelle grob in zwei Kategorien eingeteilt werden: Phänomenologische (oder mathematische) Modelle, welche darauf ausgelegt sind, das makroskopische Materialverhalten möglichst genau zumeist unter Verwendung „nicht physikalischer“ Parameter abbilden zu können sowie mikromechanische (oder physikalische) Modelle, die auf physikalisch motivierten Größen basieren und direkt die Prozesse auf mikroskopischer Materialebene einbeziehen. Diese Arbeit vertieft Ansätze zur mikromechanischen Modellierung von Formgedächtnislegierungen und stellt in diesem Zusammenhang eine eigenständige Energiedichte einer aus Austenit und Martensit bestehenden Phasenmischung vor, die zu gewissen Teilen Parallelen mit Modellen von Govindjee and Miehe (2001), Stupkiewicz and Petryk (2002), Balandraud and Zanzotto (2006) oder Govindjee et al. (2007) aufweist.

Diesen Modellen ist zu eigen, dass sie zumeist nur für die mikroskopische Ebene Gültigkeit besitzen, also für ideale Einkristalle. Für die Simulation eines realen Bauteils ist es daher notwendig, weitere Prozesse bzw. Einflüsse auf das makroskopische Verhalten, welche auf anderen Materialebenen lokalisiert sind, mit einzubeziehen. Im Rahmen dieser Arbeit wird

eine bestimmte Multiskalen-Methode angewandt, um unterschiedliche Materialebenen im Sinne einer Homogenisierung zu verknüpfen und beispielsweise das Verhalten von Polykristallen und die Auswirkungen von Ausscheidungen innerhalb der Legierungen auf das Materialverhalten zu untersuchen. In diesem Zusammenhang spricht man auch vom „*scale bridging*“, also der Überbrückung unterschiedlicher Skalen. Die einzelnen Skalen müssen dabei mindestens eine Größenordnung bezüglich der jeweiligen Längeneinheit voneinander abweichen um den Einfluss des „Randes“ einer solchen auf die nächst höhere Ebene vernachlässigen zu können. Eine anschauliche Darstellung der verschiedenen Skalen, die für martensitische Umwandlungen relevant sind, ist beispielsweise in Turteltaub und Suiker (2005) und Turteltaub und Suiker (2006) enthalten. Im allgemeinen naturwissenschaftlichen Kontext findet sich unter Molecular ExpressionsTM, Science, Optics & You (2008) eine beeindruckende Demonstration unterschiedlicher Skalen, die unter Anderem von der Größenordnung 10^{23} m (Betrachter, der 10 Millionen Lichtjahre von der Milchstraße entfernt ist) über 10^{13} m (Sonnensystem), 10^7 m (westliche Hemisphäre der Erde), 10^0 m (Ast eines Eichenbaums), 10^{-4} m (Zellen der Blattoberfläche) bis hin zur Ebene der Quarks bei 10^{-16} m reicht.

Die vorliegende Arbeit ist wie folgt hinsichtlich unterschiedlicher Zielsetzungen gegliedert:

Teil I: Die im Rahmen dieser Arbeit verwendete Methodik zur Modellierung von martensitischen Festkörperphasentransformationen weist einen interdisziplinären Hintergrund bezüglich der Fachgebiete Mechanik, Mathematik und Werkstoffwissenschaften auf, weshalb in diesem Teil spezielle Grundlagen dieser Teilbereiche beschrieben werden.

- **Kapitel 2** beinhaltet die für die vorliegende Arbeit relevanten *Grundlagen der Kontinuumsmechanik*, wobei recht früh die Beschränkung auf kleine Verformungen erfolgt. Als elementare Basis für die weiteren Verfahren, welche auf Energieminimierungsprinzipien aufbauen, wird u.A. das klassische Variationsprinzip der linearen Elastostatik erläutert.
- **Kapitel 3** soll aus materialwissenschaftlicher Sicht die *mikroskopischen Mechanismen* verdeutlichen, die zu dem ebenfalls erörterten *makroskopischen Materialverhalten* von Formgedächtnislegierungen führen. Zudem werden einige Beispiele zur Verdeutlichung der außerordentlichen Komplexität des Materials aufgeführt.
- **Kapitel 4** dient der Verdeutlichung des zunächst rein mathematisch betrachteten Konzeptes der *Relaxierung* und der *Direkten Methoden der Variationsrechnung*. Diese stellen die Grundlage für die hier verwendete Methodik der Materialmodellierung dar.

Teil II: In diesem Teil werden mikromechanische Stoffgesetze für ideale Einkristalle von Formgedächtnislegierungen auf Basis relaxierter Energiepotenziale aufgeführt und analysiert. Bestandteil dieser Modelle ist die Fähigkeit der Abbildung induzierter Mikrostrukturen. Zudem soll ein Beitrag zur fortgeschrittenen numerischen sowie algorithmischen Behandlung und Umsetzung geleistet werden.

- **Kapitel 5** beschreibt die Herleitungen unterschiedlicher *konstitutiver Gesetze*, darunter insbesondere das im Rahmen der vorliegenden Arbeit neu entwickelte Verfahren

auf Basis laminarer Mikrostrukturen. Damit einher geht die analytische Herleitung sogenannter treibender Kräfte sowie effektiver Spannungen.

- **Kapitel 6** erweitert die Modelle um aus Dissipationsfunktionalen hergeleitete *Evolutionsgesetze* für die inelastischen internen Variablen. Dabei werden sowohl elastoplastische als auch ein viskoplastisches Gesetz hergeleitet.
- **Kapitel 7** verdeutlicht die *algorithmische Umsetzung* der Evolutionsgesetze unter besonderer Beachtung der Behandlung vorhandener Konsistenzbedingungen sowie der analytischen Darstellung der für das verwendete Newton–Raphson–Verfahren zur Lösung der zeitdiskretisierten Evolutions–Gleichungssysteme notwendigen Jakobi-matrizen.
- **Kapitel 8** befasst sich ausführlich mit *numerischen Analysen* des Materialverhaltens unterschiedlicher Formgedächtnislegierungen insbesondere hinsichtlich der effektiven Spannungs–Dehnungs–Beziehung und der Evolution interner Variablen. Zudem werden algorithmische Aspekte angesprochen sowie eine Beurteilung bzw. Einschätzung der behandelten Verfahren.

Teil III: Die Erweiterung der mikromechanischen Stoffgesetze im Sinne der Einbindung in ein skalenübergreifendes Modell ist unumgänglich für einen Vergleich des Verhaltens makroskopischer Körper mit experimentellen Daten sowie die Simulation und Verifikation mikromechanischer Prozesse. Im Rahmen dieser Arbeit werden die Materialgefüge auf diesen sogenannten mesoskopischen Ebenen als unveränderlich angenommen.

- **Kapitel 9** stellt zur Erweiterung des mikromechanischen Stoffgesetzes im Sinne eines skalenübergreifenden Modells grundlegende Verfahren zur *Homogenisierung* respektive *Multiskalen–Modellierung* heraus. Besonderer Augenmerk wird dabei auf die Erfüllung der sogenannten *Hill–Mandel–Bedingung* unter Berücksichtigung periodischer Randbedingungen für das eingeführte, mesoskopische Verschiebungs–Fluktuationsfeld gelegt. Zudem werden die notwendigen Erweiterungen der Materialroutinen zur Einbindung in die FEM dargelegt.
- **Kapitel 10** zeigt die Grundlagen der praxisrelevanten Ni_4Ti_3 –Ausscheidungen auf, welche anschließend als innerhalb einer FGL–Matrix eingebetteten Inhomogenität modelliert und deren Einfluss auf die Materialantwort numerisch analysiert wird.
- **Kapitel 11** beschreibt zunächst hinsichtlich der angestrebten Simulation des Verhaltens polykristalliner, aus FGL gefertigter Bauteile deren geometrische Diskretisierung mittels Voronoi–Zellen. Anschließend wird eine FE–Berechnung zum Vergleich mit dem Verhalten der idealen Einkristalle herangezogen.
- **Kapitel 12** verdeutlicht anhand zweier weiterer Beispiele die Vielfältigkeit der verwendeten Methode. Konkret wird der Einfluss eines Mikrorisses auf die Phasentransformationen sowie das Materialverhalten einer elastischen Matrix mit eingebetteter FGL–Inklusion analysiert.

Insgesamt lässt sich die Zielsetzung dieser Arbeit derart zusammenfassen, dass zum einen ein zweckmäßiges Stoffgesetz zur Simulation der charakteristischen Phänomene von Form-

gedächtnislegierungen auf mikroskopischer Ebene und mikromechanischer Basis hergeleitet wird. Zum anderen wird dieses Modell mittels der Multiskalen-FEM in dem Sinne erweitert, dass auch Einflüsse von höheren Materialebenen auf das globale Verhalten erfasst werden können. Auf Grund der Komplexität der Modellierung wird eine geschlossene Formulierung bis hin zur makroskopischen Ebene hier nicht vorgenommen. Aus diesen Gründen eignen sich die dargestellten Modelle in erster Linie zur mechanischen Verifizierung bzw. Erklärung der lokalen Vorgänge innerhalb des Materials sowie deren Einfluss auf die makroskopische Materialantwort.

Teil I.

Grundlagen

2. Grundlagen der Kontinuumsmechanik

Eine der Hauptaufgaben der Festkörpermechanik besteht darin, die inneren Beanspruchungen sowie Verformungen eines Körpers infolge von äußeren Einwirkungen zu bestimmen bzw. zu approximieren.

Die Kontinuumsmechanik liefert als allgemeine, makroskopische Feldtheorie ihren Beitrag dazu. Sie stellt die Basis für die Modellierung von industrierelevanten Materialien sowie die konstruktive Auslegung von Bauwerken bzw. Werkstücken im Rahmen von *Tragfähigkeits-* und *Gebrauchsfähigkeitsnachweisen* dar.

Im Allgemeinen besitzt ein kontinuierlicher Körper eine unendliche Anzahl von Freiheitsgraden und ist demnach unendlich-fach *statisch unbestimmt*. Aus diesem Grunde wirkt sich zusätzlich zu den äußeren Einwirkungen auch das Verformungsverhalten des zu Grunde liegenden Materials auf die Beanspruchungen des Körpers aus. Die Kontinuumsmechanik verknüpft also Aspekte der

- Kinematik: Bewegung eines Körpers, Zwangsbedingungen, Zusammenhang zwischen Verschiebungen und repräsentativen Dehnungsmaßen
- Gleichgewichtsbedingungen
- Konstitutiven Gesetze: Materialmodelle zur Kopplung von Spannungen und Dehnungen

Das Ziel dieses Kapitels ist die für die weiteren Vorgehensweisen relevanten Aspekte aufzuzeigen und zu erläutern. Eine umfassende Abhandlung des Themas wird nicht angestrebt, wobei diesbezüglich auf Werke wie Coleman and Noll (1959) und Truesdell and Noll (1965) hingewiesen sein soll.

2.1. Kinematik

Ein Körper $\mathcal{B}$ (siehe Abb. 2.1) sei im mathematischen Sinne als dreidimensionale Mannigfaltigkeit (siehe z.B. Marsden and Hughes (1983)) definiert, deren Bestandteile die *Materialpunkte* oder nach Truesdell and Noll (1965) die sogenannten *Partikel* X sind, deren Lage im euklidischen Raum durch die *Lagrangeschen Koordinaten* $X_i, i = 1, 2, 3$ beschrieben wird.

Jeder dieser Materialpunkte erfährt im Laufe der Belastung des Körpers eine Verschiebung $\mathbf{u}(t)$. Für jeden bestimmten Zeitpunkt nimmt ein konkretes Partikel X also den Ort $\mathbf{x}(X)$ ein. Die Gesamtheit dieser Positionsänderung aller Materialpunkte lässt sich als *Konfiguration* $\mathbf{x} = \chi(\mathcal{B})$ mit den *Eulerschen Koordinaten* x_i bezeichnen.

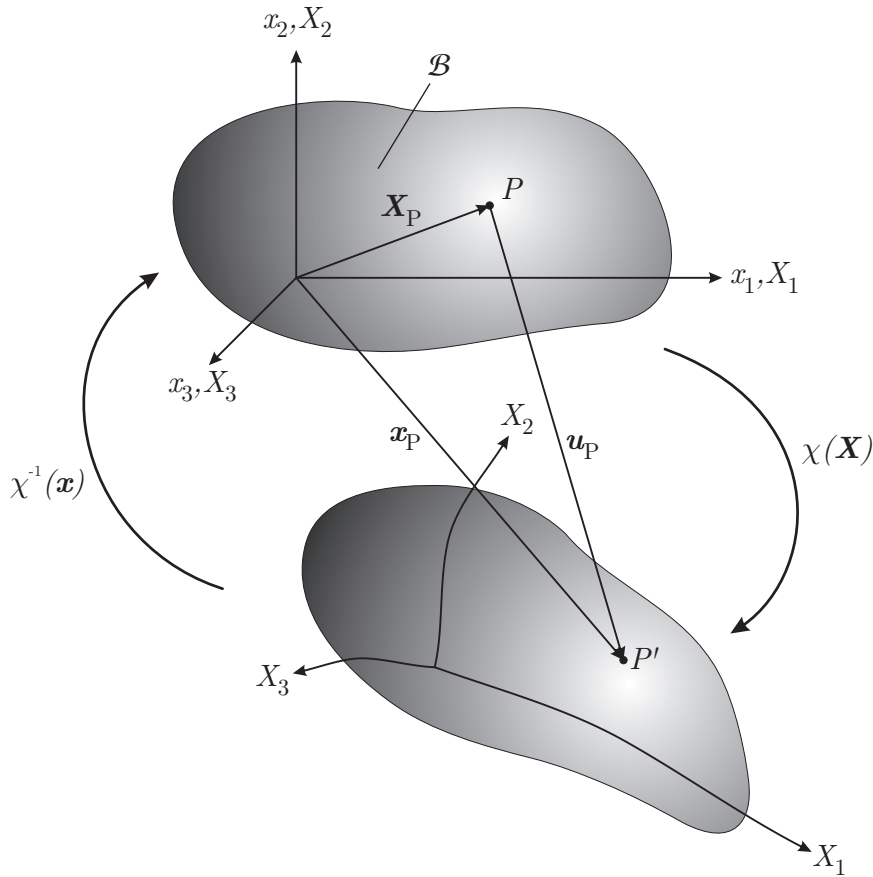


Abbildung 2.1.: Kinematik eines beliebigen Körpers $\mathcal{B}$: Referenzkonfiguration (Zeitpunkt t_0) und Momentankonfiguration (Zeitpunkt t)

Generell lassen sich sämtliche Vorgänge nun in Abhängigkeit der Lagrangeschen oder Eulerschen Koordinaten beschreiben. Dabei sind die Lagrangeschen Koordinaten $\mathbf{X}$ praktisch wie ein „Name“ eines Partikels anzusehen. Durch den Umstand, dass die Achsen X_i körperfest sind und sich so mit dem Körper verformen, bleiben die Koordinaten für einen Materialpunkt (beispielsweise P) identisch. Während die Lagrangeschen Koordinaten also immer eindeutig ein bestimmtes Partikel beschreiben, sind die Eulerschen Koordinaten $\mathbf{x}$ Platzhalter für einen bestimmten Ort, den unterschiedliche Partikel „durchlaufen“ können. Gemäß Truesdell and Noll (1965) ist die Abbildung $\chi(\mathbf{X})$ der Ort, der zum Zeitpunkt t von einem Partikel $\mathbf{X}$ eingenommen wird, während $\chi^{-1}(\mathbf{x})$ das Partikel beschreibt, dessen Ort zum Zeitpunkt t gleich $\mathbf{x}$ ist.

Die Wahl, ob das zu Grunde liegende Problem in Lagrangeschen oder Eulerschen Koordinaten formuliert werden soll, hängt hauptsächlich davon ab, ob im Rahmen der mathematischen Behandlung des Problems der Raum oder der Körper diskretisiert wird. Auf Grund der vorhandenen Kräfte– sowie Verschiebungsrandbedingungen des betrachteten Körpers wird daher in der Festkörpermechanik vorzugsweise die Lagrangesche Formulierung gewählt. Dies setzt allerdings auch die Verfügbarkeit einer Referenzkonfiguration voraus, was wiederum in der Strömungsmechanik nicht gegeben ist, weshalb in diesem Fall eine Formulierung in Eulerschen Koordinaten erfolgen muss.

Hinsichtlich der erwünschten Analyse einer Beanspruchung des betrachteten Körpers ist es

offensichtlich jedoch nicht ausreichend, lediglich Kenntnis über die Abbildung $\chi(\mathbf{X})$ und damit die aktuelle Position des Partikels $\mathbf{X}$ zu besitzen. Vielmehr gilt es zu bestimmen, welche relative Verformung sich in einer infinitesimalen Umgebung des Partikels $\mathbf{X}$ einstellt. Gemäß Ciarlet (1993) kann die aktuelle Konfiguration bei festgehaltener Zeit,

$$\chi(\mathbf{X}) = \mathcal{ID} + \mathbf{u}(\mathbf{X}) = \mathbf{X} + \mathbf{u}(\mathbf{X}) \quad , \quad (2.1)$$

aufgeteilt werden in die Identität $\mathcal{ID}$, welche den Körper auf sich selber abbildet, und das gesamte Verschiebungsfeld $\mathbf{u}(\mathbf{X})$.

Die differentielle Änderung der Position eines Partikels ergibt sich dann standardgemäß zu

$$dx_j \mathbf{e}_j = \frac{\partial \chi_j}{\partial X_i} dX_i \mathbf{e}_j \quad . \quad (2.2)$$

Die darin enthaltene partielle Ableitung ist als *Deformationsgradiententensor*

$$\mathbf{F} := \frac{\partial \chi_j}{\partial X_i} \mathbf{E}_i \mathbf{e}_j = \nabla_{\mathbf{X}} \otimes \chi(\mathbf{X}) = \nabla_{\mathbf{X}} \chi(\mathbf{X}) \quad (2.3)$$

definiert. Mit (2.1) ergibt sich daraus

$$\mathbf{F} := \mathbf{I} + \nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{u}(\mathbf{X}) \quad (2.4)$$

mit $\mathbf{I} = \delta_{ij} \mathbf{E}_i \mathbf{e}_j$ als Einheitstensor zweiter Stufe (Einheitsmatrix).

Der Deformationsgradiententensor ist ein sogenannter *Doppelfeld-* oder auch *Zweifeldtensor*, da die Basis $\mathbf{E}_i$ in Lagrangeschen und die Basis $\mathbf{e}_j$ in Eulerschen Koordinaten vorgegeben ist. Betten (2001) interpretiert diesen zweistufigen Tensor derart, dass dieser einen Linienelementvektor, welcher zwei infinitesimal benachbarte materielle Punkte in der Referenzkonfiguration verbindet, auf den Linienelementvektor, der die selben Punkte in einer aktuellen Konfiguration verbindet, abbildet.

Insgesamt lassen sich den Standardwerken (z.B. Ogden (1984), Ciarlet (1993)) folgende Zusammenhänge

$$d\mathbf{l} = \mathbf{F} \cdot d\mathbf{L} \quad (2.5)$$

$$d\mathbf{a} = \det(\mathbf{F}) \mathbf{F}^{-T} \cdot d\mathbf{A} = \text{cof}(\mathbf{F}) \cdot d\mathbf{A} \quad (2.6)$$

$$dv = \det(\mathbf{F}) dV \quad (2.7)$$

bezüglich der Änderung eines Linienelementes $d\mathbf{L}$, Flächenelementes $d\mathbf{A}$ sowie Volumenelementes dV entnehmen (siehe Abb. 2.2). Dabei sind $\mathbf{a} = \mathbf{n} da$ bzw. $\mathbf{A} = \mathbf{N} dA$ mit $\mathbf{n}$ als Normaleneinheitsvektor auf dem betrachteten Flächenelement in der aktuellen bzw. $\mathbf{N}$ in der Referenzkonfiguration.

Es soll an dieser Stelle nicht unerwähnt bleiben, dass eine komplett geometrisch nichtlineare Formulierung der Kontinuumsmechanik eine differentialgeometrische Betrachtungsweise erfordert, wie es z.B. in Marsden and Hughes (1983) in allgemeiner Weise oder auch in Miehe (1994), Miehe (1998) und Miehe and Apel (2004) im Zusammenhang mit finiter Elastoplastizität bzw. Schalentheorie erläutert wird.

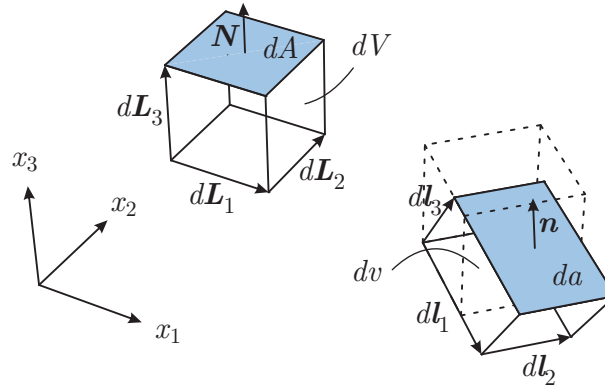


Abbildung 2.2.: Änderung von Linien-, Flächen- und Volumenelementen

2.2. Dehnungsmaße und –tensoren

Wie im vorangegangenen Abschnitt beschrieben wurde, dient der Deformationsgradiententensor $\mathbf{F}$ in geeigneter Weise der Beschreibung von Bewegungsvorgängen eines Kontinuums. Als allgemein anwendbares *Dehnungsmaß* empfiehlt er sich jedoch nicht, da er Starrkörperrotationen enthält, die nicht zu einer Verzerrung des Kontinuums führen. Auf seiner Basis lassen sich jedoch geeignete Dehnungsmaße herleiten.

Ausgangspunkt ist die erneute Betrachtung eines Linienelementvektors $d\mathbf{L}$ in der Ausgangslage sowie $d\mathbf{l}$ in einer zu einem beliebigen Zeitpunkt korrespondierenden Konfiguration. Betrachtet man nun die Abstandsqadrate der jeweils durch die Linienelementvektoren verbundenen, infinitesimal benachbarten Punkte, so lässt sich durch

$$dl^2 - dL^2 = d\mathbf{l} \cdot d\mathbf{l} - d\mathbf{L} \cdot d\mathbf{L} \quad (2.8)$$

ein elementares Dehnungsmaß herleiten. Wählt man die Lagrangeschen Koordinaten als Basis, so gilt

$$d\mathbf{l} \cdot d\mathbf{l} = F_{ij} F_{il} dL_j dL_l = (\mathbf{F}^T \cdot \mathbf{F}) : (d\mathbf{L} \otimes d\mathbf{L}) \quad (2.9)$$

An dieser Stelle sei angemerkt, dass die unweigerlich mit der Kontinuumsmechanik finiter Deformationen verknüpften Termini wie etwa *Metrik*, *push-forward*, *pull-back*, *ko-* und *kontravariant*, *Objektivität* bzw. *material frame indifference* etc. auf Grund mangelnder Relevanz im Rahmen der vorliegenden Arbeit nicht eingeführt werden sollen. Ausführliche Erläuterungen dazu enthalten Werke wie z.B. Marsden and Hughes (1983).

Häufig wird $\mathbf{C} := \mathbf{F}^T \cdot \mathbf{F}$ definiert und als *rechter Cauchy–Green–Tensor* betitelt. Ciarlet (1993) verdeutlicht sehr eingehend, dass eine *rigid deformation*, also eine Starrkörperbewegung, vorliegt, wenn $\mathbf{C} = \mathbf{I}$ gilt und somit der Term $\mathbf{C} - \mathbf{I}$ ein geeignetes Dehnungsmaß darstellt. Die Differenz der Abstandquadrate lässt sich damit als

$$dl^2 - dL^2 = (\mathbf{C} - \mathbf{I}) : (d\mathbf{L} \otimes d\mathbf{L}) \quad (2.10)$$

angeben. Daraus ergibt sich der sogenannte *Green–Lagrangesche* oder auch *Green–St. Venantsche–Dehnungstensor*

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2} (\mathbf{C} - \mathbf{I}) \quad (2.11)$$

In analoger Weise lässt sich durch Substitution der inversen Beziehung $d\mathbf{L} = \mathbf{F}^{-1} \cdot d\mathbf{l}$ über die Definition des sogenannten *Finger-Tensors* $\mathbf{c} = \mathbf{F}^{-T} \cdot \mathbf{F}^{-1}$ der Dehnungstensor

$$\mathbf{e} = \frac{1}{2} (\mathbf{I} - \mathbf{c}) \quad (2.12)$$

angeben, welcher unter dem Namen *Euler–Almansi-Tensor* bekannt ist. Der hier noch recht künstlich wirkende Faktor $1/2$ kann auch durch die folgenden Betrachtungen motiviert werden. In Abhängigkeit der Verschiebungsgradienten stellt sich der Green–Lagrangesche Dehnungstensor als

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2} (\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u} + \mathbf{u} \nabla_{\mathbf{x}} + \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} \nabla_{\mathbf{x}}) \quad (2.13)$$

dar. Anhand dieser Schreibweise wird der Zusammenhang zwischen $\mathbf{E}$ und den *linearisierten Dehnungen* $\boldsymbol{\varepsilon}$, häufig als *Ingenieursdehnungen* bezeichnet, deutlich. Durch die Annahme $\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} \nabla_{\mathbf{x}} \ll \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u}$, also die Vernachlässigung der quadratischen Terme, erhält man

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2} (\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u} + \mathbf{u} \nabla_{\mathbf{x}}) \quad (2.14)$$

Die Ingenieursdehnungen lassen sich einerseits als Linearisierung von $\mathbf{E}$, andererseits als Symmetrisierung von $\mathbf{F}$ in der Form

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2} (\mathbf{F} + \mathbf{F}^T) - \mathbf{I} \quad (2.15)$$

auffassen. Eine Invertierung des Zusammenhangs (2.15) ist offensichtlich nicht möglich. Lediglich ein Abgleich bezüglich der physikalischen Bedeutung kann durch

$$\mathbf{F} \approx \boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{I} \quad (2.16)$$

erfolgen, was in den folgenden Kapiteln noch von Belang sein wird. Jeder reguläre, zweistufige Tensor $\mathbf{A}$ lässt sich gemäß

$$\mathbf{A} = \mathbf{R} \cdot \mathbf{U} = \mathbf{V} \cdot \mathbf{R} \quad (2.17)$$

in die positiv definiten, symmetrischen und zweistufigen Tensoren $\mathbf{U}$, $\mathbf{V}$ sowie den orthogonalen, zweistufigen Tensor $\mathbf{R}$ zerlegen, wobei man (2.17) die *Polare Zerlegung* eines solchen Tensors nennt. Angewandt auf den Deformationsgradiententensor ergibt sich

$$\mathbf{F} = \mathbf{R} \cdot \mathbf{U} = \mathbf{V} \cdot \mathbf{R} \quad , \quad (2.18)$$

wobei sich im Kontext $\mathbf{U}$ als sogenannter *Rechter Streck-Tensor*, $\mathbf{V}$ als *Linker Streck-Tensor* und $\mathbf{R}$ als Rotationsmatrix ergeben. Der Deformationsgradiententensor wird in dieser Weise also in Anteile zerlegt, die eine reine Verzerrung ($\mathbf{U}$, $\mathbf{V}$) bzw. eine reine Starrkörperrotation ($\mathbf{R}$) widerspiegeln. Im Fall $\mathbf{F} = \mathbf{R} \cdot \mathbf{U}$ wird ein unverformtes Linienvektorelement zunächst durch $\mathbf{U}$ verformt und anschließend durch $\mathbf{R}$ gedreht, im alternativen Fall verhält es sich umgekehrt.

Die Streck-Tensoren stellen daher auch geeignete Dehnungsmaße dar. Ihre Berechnung erfolgt unter Ausnutzung der Kenntnis, dass es zu jedem symmetrischen, positiv definiten, zweistufigen Tensor $\mathbf{T}$ genau einen gleichartigen Tensor $\mathbf{U}$ gibt, so dass

$$\mathbf{U}^2 = \mathbf{T} \quad , \quad \mathbf{U}^2 = \mathbf{U} \cdot \mathbf{U} \quad (2.19)$$

gilt. Die Invertierung dieses Zusammenhangs, $U = \sqrt{T}$, gestaltet sich etwas komplexer, da man in diesem Fall gezwungen ist, den Tensor ins Hauptachsensystem zu transformieren, um die Wurzel aus den Eigenwerten zu ziehen und ihn dann ins Ausgangssystem zurück zu transformieren. Dabei kann gezeigt werden, dass im Kontext der Dehnungsmaße

$$U^2 = C \quad ; \quad V^2 = b := c^{-1} \quad (2.20)$$

mit $b = F \cdot F^T$ als sogenanntem *linken Cauchy–Green–Tensor* gilt. Mit Hilfe der Streck–Tensoren lassen sich die bereits erwähnten Dehnungsmaße nun durch

$$E = \frac{1}{2} (U^2 - I) \quad ; \quad e = \frac{1}{2} (I - V^{-2}) \quad (2.21)$$

ausdrücken.

Im Allgemeinen lassen sich in Abhängigkeit der Streck–Tensoren generalisierte Dehnungsmaße durch

$$\mathbb{E} = \begin{cases} \frac{1}{m} (U^m - I) \text{ bzw. } \frac{1}{m} (V^m - I) & , \text{ für } m \neq 0 \\ \ln(U) \text{ bzw. } \ln(V) & , \text{ für } m = 0 \end{cases} \quad (2.22)$$

angeben (z.B. Ogden (1984)). Diesen liegt zu Grunde, dass für $U, V = I$

$$\mathbb{E} = \mathbf{0} \quad , \quad \mathbb{E}' = I \quad (2.23)$$

gilt. Dies impliziert, dass sich zum einen für Starrkörperbewegungen keine Dehnungen ergeben und zum anderen sich die Dehnungsmaße für kleine Deformationen den linearisierten Dehnungen ε annähern.

Zusätzlich zu den bereits genannten Dehnungsmaßen (für $m = 2$ und $m = -2$) seien an dieser Stelle noch zwei weitere aufgeführt. Einerseits ergibt sich für $m = 0$ die sogenannte *Hencky–Dehnung*

$$G = \ln(U) \quad , \quad (2.24)$$

welche auch *wahre Dehnung* oder *natürliche Dehnung* genannt wird. Ihr Charakteristikum ist die uneingeschränkte Gültigkeit einer additiven Zerlegung von Dehnungsanteilen, wie sie beispielsweise in der Plastizitätstheorie Anwendung findet.

Andererseits erhält man für $m = 1$ den sogenannten *Biot–Dehnungstensor*

$$K = U - I \quad , \quad (2.25)$$

der im weiteren Verlauf dieser Arbeit im Zusammenhang mit den sogenannten *Bain–Matrizen* noch von entscheidender Bedeutung sein wird. Zudem besitzt dieser Tensor eine einleuchtende geometrische Interpretation: Bei Fachwerkstäben ist der Biot–Tensor gleich dem Term $\Delta l / l_0$ (gemäß der linearen Theorie), wobei die Längenänderung Δl des Stabes jedoch geometrisch exakt, also auch für große Rotationen des Stabs, berechnet wird (siehe z.B. Crisfield (1991)).

Abb. 2.3 zeigt die grundlegenden Dehnungsmaße E, e, G, K im direkten Vergleich. Den Ergebnissen liegt die Vorgabe einer Längenänderung u_0 in axialer Richtung eines Stabes der normierten Ausgangslänge 1, welcher einseitig unverschieblich gelagert ist, zu Grunde.

Das Dehnungsmaß $\mathbf{K}$, welches für den gegebenen Lastfall gleichbedeutend mit den linearisierten Dehnungen $\boldsymbol{\varepsilon}$ ist, weicht deutlich von dem Referenzmaß $\mathbf{E}$ ab, wobei die Dehnungen im Zugbereich unterschätzt und im Druckbereich betraglich gesehen überschätzt werden. Die Maße $\mathbf{e}$, $\mathbf{G}$ weichen sogar noch erheblicher von $\mathbf{E}$ ab. Allerdings weisen sie den Vorteil auf, dass sie für $u_0 \mapsto -1^+$ den Wert $-\infty$ annehmen. Diese Dehnungsmaße erfüllen demnach a priori die aus physikalischer Hinsicht dringend einzuhaltende Bedingung, dass ein Körper nicht auf ein unendlich kleines Ausmaß komprimiert werden kann bzw. dazu eine unendlich hohe Dehnung nötig wäre. Bei der Verwendung von Dehnungsmaßen, welche diese Eigenschaft nicht aufweisen, muss dies durch Verwendung geeigneter Terme in den konstitutiven Beziehungen gewährleistet werden. Im Rahmen einer geometrisch linearen Theorie verliert dies allerdings an Bedeutung. Die Werte der verschiedenen Dehnungsmaße weichen nicht mehr in dieser signifikanten Weise voneinander ab (siehe Abb. 2.4 für $u_0 \in [-0.1, 0.1]$).

Abschließend sei noch erörtert, in welchem Sinn sich die Dehnungen $\boldsymbol{\varepsilon}$ und $\mathbf{K}$ voneinander unterscheiden. Eine eingeprägte Starrkörperrotation, die ein Partikel $\mathbf{X}$ auf

$$\mathbf{x} = \mathbf{R} \cdot \mathbf{X} \quad (2.26)$$

abbildet, bewirkt für den Fall einer Drehung mit dem Winkel φ um die x -Achse, also

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} \cos(\varphi) & \sin(\varphi) & 0 \\ -\sin(\varphi) & \cos(\varphi) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (2.27)$$

eine Dehnung

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \cos(\varphi) - 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\varphi) - 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.28)$$

welche nur für den Fall $\varphi \approx 0$ und damit $\cos(\varphi) \approx 1$ mit

$$\mathbf{K} = \mathbf{0} \quad (2.29)$$

übereinstimmt.

2.3. Konzept der mechanischen Spannungen

Das Konzept der mechanischen Spannungen geht hauptsächlich auf *Augustin Louis Cauchy* (1789–1857) zurück. Ausgangspunkt seiner Überlegungen ist ein beliebiger, in Abb. 2.5 dargestellter Körper $\mathcal{B}$ in seiner Momentankonfiguration $\chi(\mathcal{B})$. Dieser Körper kann dabei äußeren Belastung in Form von flächenhaft verteilten Kräften $\mathbf{q}(\mathbf{x})$, welche auf einem bestimmten Teil $\partial\mathcal{B}_q \subset \partial\mathcal{B}$ der Oberfläche $\partial\mathcal{B}$ wirken, sowie Volumenkräften $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ ausgesetzt sein.

Die Oberflächenkräfte $\mathbf{q}(\mathbf{x})$ sind in der Realität zumeist gegeben durch Kontaktkräfte zwischen $\mathcal{B}$ und anderen Körpern. Zudem zählen von der Umgebung auf den Körper übertragene Belastungen dazu, wie etwa Wind-, Schnee- oder weitere, sogenannte Verkehrslasten. Volumenkräfte $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ ergeben sich generell dadurch, dass sich der betrachtete Körper $\mathcal{B}$ in

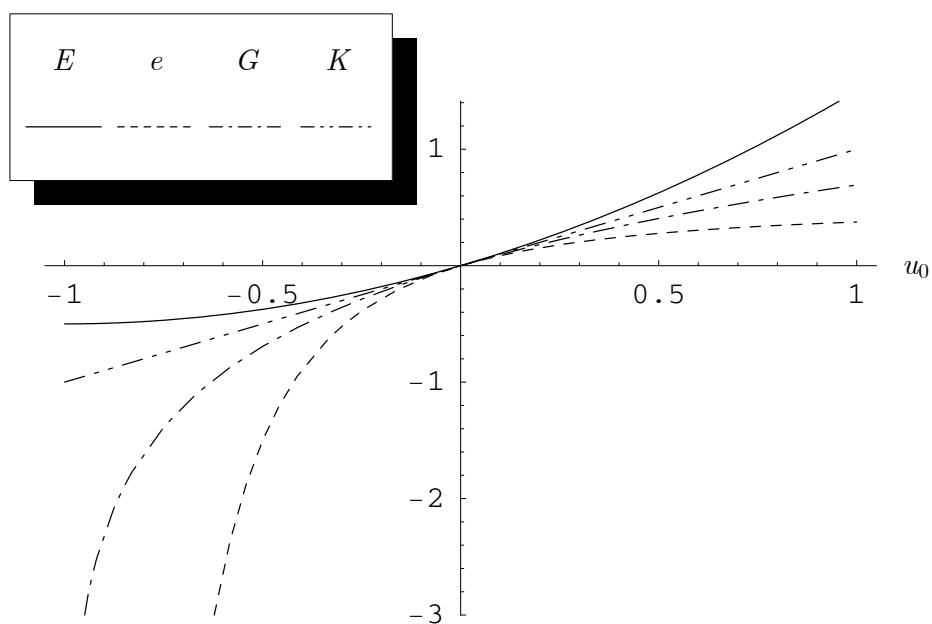


Abbildung 2.3.: Vergleich ausgewählter Dehnungsmaße für eine eingeprägte Längenänderung u_0 für finite Deformationen

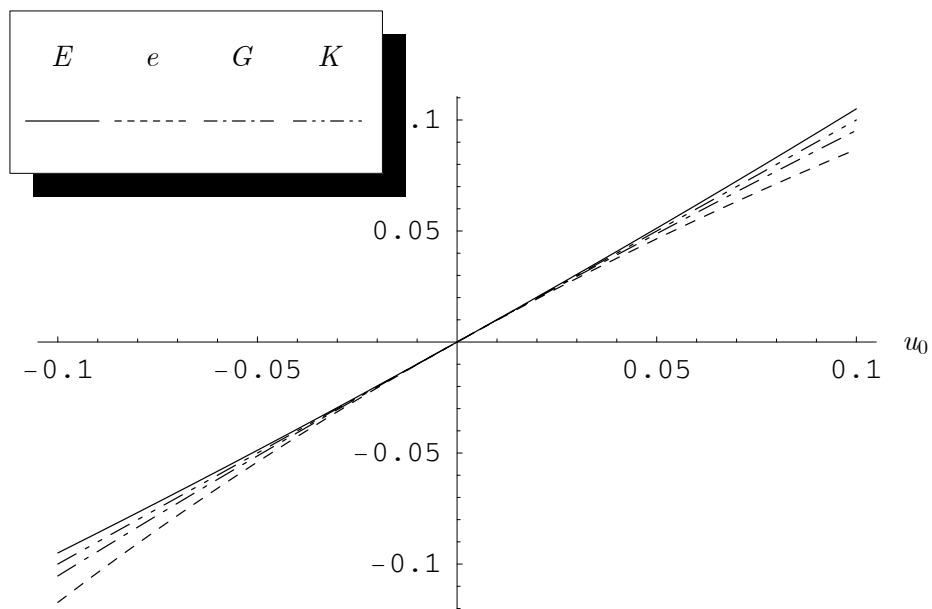


Abbildung 2.4.: Vergleich ausgewählter Dehnungsmaße für eine eingeprägte Längenänderung u_0 für kleine Verformungen

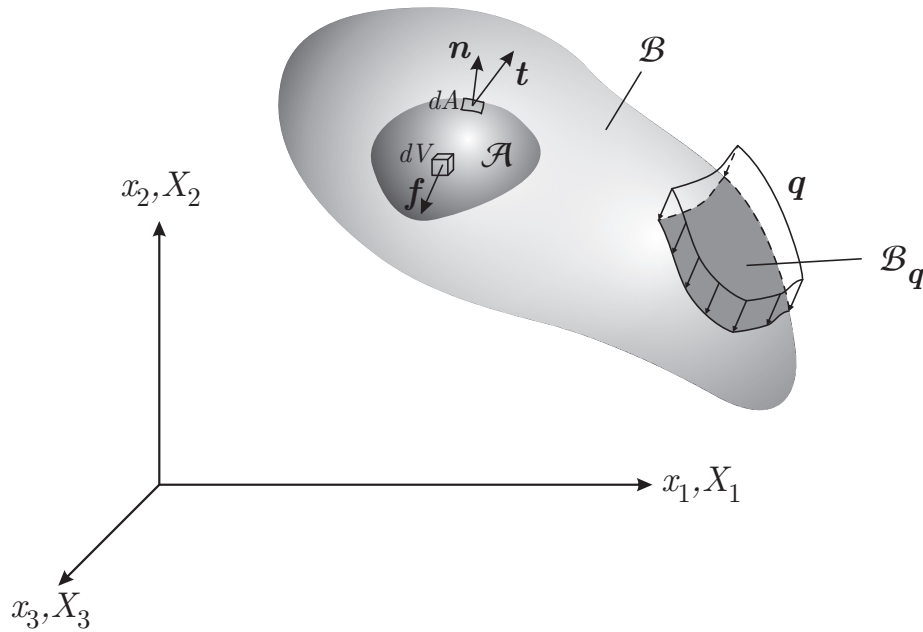


Abbildung 2.5.: Beliebiger Körper unter Einwirkung äußerer Lasten

einem Kräftefeld, wie etwa dem Gravitationsfeld oder einem elektrischen Feld, befindet. Diesbezüglich soll an dieser Stelle die Annahme getroffen werden, dass derartige Felder keine Elementarmomente bewirken (*Boltzmann-Axiom*).

Ciarlet (1993), dessen Herangehensweise zur Verdeutlichung dieses Themas hier hauptsächlich adaptiert wurde, führt die grundlegenden Aspekte des *Prinzips der Spannungen* nach Euler und Cauchy wie folgt auf:

1. Vorausgesetzt wird die Existenz eines Vektorfeldes $\mathbf{t}(\mathbf{x}, \mathbf{n})$, dem sogenannten *Cauchy'schen Spannungsvektor*, welches auf dem Rand $\partial\mathcal{A}$ eines beliebig gewählten, geschlossenen Volumens $\mathcal{A} \subset \mathcal{B}$ wirkt und an einem bestimmten Ort lediglich vom Normalenvektor $\mathbf{n}$ des differentiellen Flächenelementes dA abhängt.
2. Für jedes abgeschlossene Gebiet $\mathcal{A} \subset \mathcal{B}$ müssen die auf dem gesamten Rand $\partial\mathcal{A}$ verteilten Vektoren $\mathbf{t}(\mathbf{x}, \mathbf{n})$ die Wirkung der in $\mathcal{A}$ vorhandenen Volumenkräfte $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ aufheben, und zwar bezüglich der

- Kräfte

$$\int_{\mathcal{A}} \mathbf{f}(\mathbf{x}) dV + \int_{\partial\mathcal{A}} \mathbf{t}(\mathbf{x}, \mathbf{n}) dA = \mathbf{0} \quad (2.30)$$

- und Momente

$$\int_{\mathcal{A}} \mathbf{r}_O \times \mathbf{f}(\mathbf{x}) dV + \int_{\partial\mathcal{A}} \mathbf{r}_O \times \mathbf{t}(\mathbf{x}, \mathbf{n}) dA = \mathbf{0} \quad , \quad (2.31)$$

wobei $\mathbf{r}_O$ den Ortsvektor von einem beliebigen Bezugspunkt O ausgehend darstellt¹.

3. Auf dem Rand $\partial\mathcal{B}$ des Körpers $\mathcal{B}$ muss der Spannungsvektor den von außen eingeprägten Flächenlasten $\mathbf{q}(\mathbf{x})$ in jedem Punkt $\mathbf{x} \in \partial\mathcal{B}$ entsprechen, speziell auf dem „belasteten“ Gebiet $\partial\mathcal{B}_q$ gilt also:

$$\mathbf{t}(\mathbf{x}, \mathbf{n}) = \mathbf{q}(\mathbf{x}) \quad \text{auf } \partial\mathcal{B}_q \quad (2.32)$$

Cauchy postulierte nun, dass der Spannungsvektor $\mathbf{t}(\mathbf{x}^*, \mathbf{n})$ lediglich linear vom Normalenvektor $\mathbf{n}$ des differentiellen Flächenelementes dA an einem bestimmten Ort $\mathbf{x}^*$ abhängt. Daraus folgt, dass an jedem Ort $\mathbf{x} \in \partial\mathcal{A}$ ein zweistufiger Tensor $\mathbf{T}$ mit

$$\mathbf{t}(\mathbf{x}) = \mathbf{T}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n} \quad (2.33)$$

existiert. Das sogenannte *Cauchy–Theorem* (2.33) lässt sich anhand des in Abb. 2.6 dargestellten Tetraeders, welches ein infinitesimales Volumenstück dA am Rand des Gebietes $\mathcal{A}$ darstellt, verifizieren.

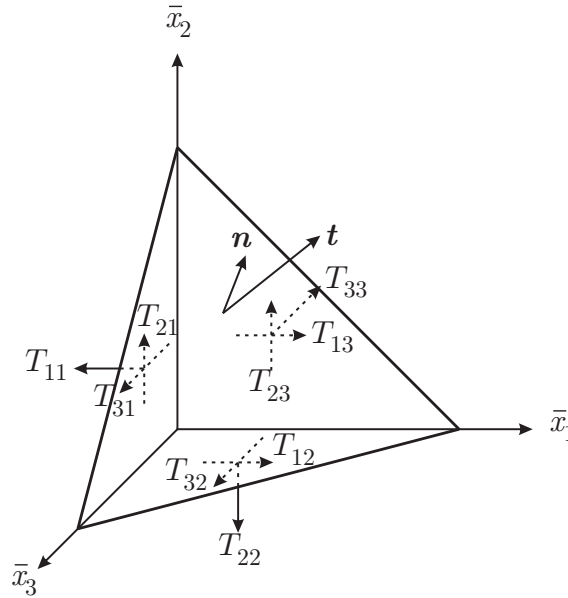


Abbildung 2.6.: Betrachtung eines elementaren Tetraeders zur Verifizierung des Cauchy–Theorems

Auf der schrägen Fläche des Tetraeders mit dem Normalenvektor $\mathbf{n}$ wirkt der Spannungsvektor $\mathbf{t}$. Auf den zu den Koordinatenachsen parallelen Flächen wirken die Spannungen $\mathbf{T}_{ij}$, wobei Index j die Richtung des jeweiligen Normalenvektors der betrachteten Fläche und Index i die Richtung der jeweiligen Spannung angibt. Aus Gleichgewichtsbetrachtungen an diesem Teilkörper kann gezeigt werden, dass (2.33) gelten muss.

Besagter Tensor $\mathbf{T}$ ist als *Cauchyscher Spannungstensor* oder auch *wahre Spannung* bekannt, da diese Feldgröße die innere Beanspruchung eines Körpers in der Momentankonfiguration angibt.

¹Diese Forderungen steht in Einklang mit dem *Schnittprinzip* und *Gleichgewicht an Teilsystemen* und damit den Grundprinzipien der Statik

Mit diesem zur Hand lassen sich unter Verwendung des *Gaußschen* sowie *Greenschen Integralsatzes* die Gleichungen (2.30) und (2.31) sowie (2.32) zu

$$-\nabla \cdot \mathbf{T}(\mathbf{x}) =: -\operatorname{div}(\mathbf{T}(\mathbf{x})) = \mathbf{f}(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \in \mathcal{B} \quad (2.34)$$

$$\mathbf{T}(\mathbf{x}) = \mathbf{T}(\mathbf{x})^T \quad \forall \mathbf{x} \in \mathcal{B} \quad (2.35)$$

$$\mathbf{T}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n} = \mathbf{q}(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \in \partial\mathcal{B}_q \quad (2.36)$$

umformulieren. Diese Gleichungen lassen sich in der aufgeführten Reihenfolge als *lokale Gleichgewichtsbedingungen*, Bedingung der *Symmetrie des Spannungstensors* sowie *Neumann-Randbedingungen* auffassen. Dabei stellt (2.34), (2.35) den statischen Sonderfall des *Cauchyschen Bewegungsgesetzes* dar.

Basierend auf diesen Gegebenheiten lassen sich für geometrisch nichtlineare Theorien zahlreiche Spannungsmaße durch etwaige auf $\mathbf{T}$ angewandte pull-Back-Operationen, wie etwa den *Ersten* und *Zweiten Piola-Kirchhoff-Spannungstensor*, herleiten. Auf Grund mangelnder Relevanz im Rahmen der vorliegenden Arbeit wird dies allerdings an dieser Stelle unterlassen.

Veranschaulicht man sich den Cauchyschen Spannungstensor ob seiner Bedeutung am Beispiel eines einaxialen Zugversuches, so stellt dieser den Quotienten aus eingprägter Kraft F und aktueller, auf Grund der Querdehnung veränderter, Querschnittsfläche A

$$T = \frac{F}{A} \quad (2.37)$$

dar. Die linearisierten Spannungen σ beziehen die aktuelle Belastung auf den unverformten Zustand (Referenzkonfiguration), der für dieses simple Beispiel durch die ursprüngliche Querschnittsfläche A_0 charakterisiert wird, also

$$\sigma = \frac{F}{A_0} \quad (2.38)$$

Sind die Differenzen in den Abmessungen der Querschnittsfläche von unverformter zu verformter Konfiguration von vernachlässigbarer Größe, so gilt $\boldsymbol{\sigma} \approx \mathbf{T}$ und unter der Voraussetzung, dass auch $\boldsymbol{\sigma}$ symmetrisch ist ergeben sich die linearisierten Formen der Gleichungen (2.34) und (2.36) zu

$$-\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) =: -\operatorname{div}(\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})) = \mathbf{f}(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \in \mathcal{B} \quad (2.39)$$

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n} = \mathbf{q}(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \in \partial\mathcal{B}_q \quad (2.40)$$

Berücksichtigt man zudem noch, dass der Körper $\mathcal{B}$ an gewissen Rändern $\partial\mathcal{B}_u$ gelagert ist bzw. vorgegebenen Verschiebungen u^* ausgesetzt wird, erhält man demnach mit

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}^* \quad \forall \mathbf{x} \in \partial\mathcal{B}_u \quad (2.41)$$

sowie (2.39) und (2.40) das sogenannte *Randwertproblem der linearen Elastostatik*.

2.4. Variationsprinzipien hyperelastischer Materialien

Die Lösung des Randwertproblems der Elastostatik, sei es nun für finite oder infinitesimale Verformungen formuliert, gibt Aufschluss über die aus einer gegebenen Belastung resultierende Verformung des Körpers sowie dessen innere Beanspruchung in Form von Spannungen und ist daher eine elementare Aufgabe im Ingenieurwesen. Da die Gleichungen (2.39), (2.40) und (2.41) jedoch lokale Bedingungen darstellen, welche strikt in jedem Materialpunkt erfüllt sein müssen, lassen sich lediglich für Sonderfälle analytische Lösungen herleiten.

Zur approximativen Lösung haben sich in Forschung und Industrie, gerade was die Umsetzung in Rechenprogrammen anbelangt, Verfahren auf Basis der *Energiemethoden* durchgesetzt. Daher soll im weiteren Verlauf dieses Abschnitts das sogenannte *Variationsprinzip der linearen Elastostatik* als Grundlage für die speziell in Kapitel 4 aufgeführten Methoden erläutert werden.

Grundvoraussetzung ist die Wahl einer konstitutiven Gesetzmäßigkeit, die in diesem Fall durch eine interne Energiedichte ψ (in der englischen Fachliteratur oft *stored energy function* genannt) gegeben ist. Diese Energiedichte ψ kann zusammen mit der Bedingung

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{\epsilon}} \quad (2.42)$$

dazu verwendet werden, das zu Grunde liegende Material bezüglich seines Verhaltens komplett zu beschreiben. Die einfachste Form einer derartigen Beschreibung eines Materials sind die sogenannten *St. Venant–Kirchhoff–Materialien*, welche durch die quadratische Form

$$\psi = \frac{1}{2} \boldsymbol{\epsilon} : \mathbf{C} : \boldsymbol{\epsilon} \quad (2.43)$$

mit $\mathbf{C}$ als vierstufigem *Material–* oder auch *Elastizitätstensor* gegeben sind. Über (2.42), dessen Gültigkeit die sogenannte *Hyperelastizität* überhaupt definiert, ergibt sich für solche Materialien das *verallgemeinerte Hookesche Gesetz*

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C} : \boldsymbol{\epsilon} \quad (2.44)$$

als konstitutive Beziehung zwischen Spannungen und Dehnungen.

Das weitere Vorgehen basiert nun darauf, dass man in klassischer Manier den Energiezustand eines Systems als konstant voraussetzt mit der Ausnahme, dass über die Systemgrenzen hinaus Arbeit verrichtet wird. Dabei muss im Gleichgewichtszustand eine Variation der internen Energie

$$\Pi_i = \int_{\mathcal{B}} \psi(\nabla \mathbf{u}) \, dV \quad (2.45)$$

immer gleich der Variation der äußeren Arbeit

$$\Pi_a = \int_{\mathcal{B}} \mathbf{f} \cdot \mathbf{u} \, dV + \int_{\partial \mathcal{B}_t} \mathbf{q} \cdot \mathbf{u} \, dA \quad (2.46)$$

mit $\mathbf{u} = \hat{\mathbf{u}}(\mathbf{x})$ als Vektorfeld der Verschiebungen sein, also

$$\delta \Pi_i = \delta \Pi_a \quad . \quad (2.47)$$

Eine Umformulierung dieser Gleichung zu

$$\delta \Pi_i = \delta \Pi_a \Leftrightarrow \delta \Pi_i - \delta \Pi_a = 0 \Leftrightarrow \delta (\Pi_i - \Pi_a) = 0 \quad (2.48)$$

lässt erkennen, dass diese Methode gleichbedeutend mit der Berechnung des Stationärwertes des Funktional $\Pi_{ges} = \Pi_i - \Pi_a$ ist. In diesem Zusammenhang bedeutet *Variation*, dass lediglich die primären Variablen eine infinitesimale Störung erfahren, diese also variiert werden, während alle anderen Größen als konstant gelten. Nähere Erläuterungen hierzu siehe z.B. Gurtin (1972). Daher ergeben sich die Variationen der beiden Potenziale zu

$$\delta \Pi_i = \frac{1}{2} \int_{\mathcal{B}} (\delta \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon} + \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbf{C} : \delta \boldsymbol{\varepsilon}) dV \quad (2.49)$$

mit

$$\delta \boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2} (\nabla \delta \mathbf{u} + \delta \mathbf{u} \nabla) \quad (2.50)$$

sowie

$$\delta \Pi_a = \int_{\mathcal{B}} \mathbf{f} \cdot \delta \mathbf{u} dV + \int_{\partial \mathcal{B}_t} \mathbf{q} \cdot \delta \mathbf{u} dA \quad . \quad (2.51)$$

Setzt man (2.50) in (2.49) ein, so erhält man unter Voraussetzung der Symmetrie von $\mathbf{C}$ und $\boldsymbol{\sigma}$

$$\delta \Pi_i = \int_{\mathcal{B}} \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbf{C} : (\nabla \delta \mathbf{u}) dV = \int_{\mathcal{B}} \boldsymbol{\sigma} : (\nabla \delta \mathbf{u}) dV \quad . \quad (2.52)$$

Die Variation des Gesamtpotenzials Π_{ges} ergibt sich damit zu

$$\int_{\mathcal{B}} \boldsymbol{\sigma} : (\nabla \delta \mathbf{u}) dV - \int_{\mathcal{B}} \mathbf{f} \cdot \delta \mathbf{u} dV - \int_{\partial \mathcal{B}_t} \mathbf{q} \cdot \delta \mathbf{u} dA = 0 \quad . \quad (2.53)$$

Eine Aufspaltung des ersten Terms in (2.53) durch die Anwendung der partiellen Integration (*integration by parts*) liefert

$$\int_{\mathcal{B}} \nabla (\boldsymbol{\sigma} \cdot \delta \mathbf{u}) dV - \int_{\mathcal{B}} (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}) \cdot \delta \mathbf{u} dV - \int_{\mathcal{B}} \mathbf{f} \cdot \delta \mathbf{u} dV - \int_{\partial \mathcal{B}_t} \mathbf{q} \cdot \delta \mathbf{u} dA = 0 \quad , \quad (2.54)$$

wobei wiederum der erste Term durch den *Gauß'schen Integralsatz* (alternative Bezeichnung: *Divergenztheorem*) umgewandelt werden kann, sodass nun

$$\int_{\partial \mathcal{B}} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \cdot \delta \mathbf{u} dA - \int_{\mathcal{B}} (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}) \cdot \delta \mathbf{u} dV - \int_{\mathcal{B}} \mathbf{f} \cdot \delta \mathbf{u} dV - \int_{\partial \mathcal{B}_t} \mathbf{q} \cdot \delta \mathbf{u} dA = 0 \quad (2.55)$$

die Variation des Gesamtpotenzials darstellt. Da auf dem Rand $\partial\mathcal{B}_u$ der vorgeschriebenen Verschiebungen $\delta\mathbf{u} = 0$ gilt, reicht es aus, den ersten Term lediglich über den Rand $\partial\mathcal{B}_t$ zu integrieren, also

$$\int_{\partial\mathcal{B}_t} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \cdot \delta\mathbf{u} \, dA - \int_{\mathcal{B}} (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}) \cdot \delta\mathbf{u} \, dV - \int_{\mathcal{B}} \mathbf{f} \cdot \delta\mathbf{u} \, dV - \int_{\partial\mathcal{B}_t} \mathbf{q} \cdot \delta\mathbf{u} \, dA = 0 \quad . \quad (2.56)$$

Die Separation der Volumen– und Oberflächenanteile ergibt nun

$$- \int_{\mathcal{B}} (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}) \cdot \delta\mathbf{u} \, dV = \int_{\mathcal{B}} \mathbf{f} \cdot \delta\mathbf{u} \, dV \quad (2.57)$$

$$\int_{\partial\mathcal{B}_t} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \cdot \delta\mathbf{u} \, dA = \int_{\partial\mathcal{B}_t} \mathbf{q} \cdot \delta\mathbf{u} \, dA \quad (2.58)$$

Dabei stellt (2.57) die sogenannte *Schwache Form des Gleichgewichts* dar, welche unter anderem elementar für die Methode der Finiten Elemente ist und daher auch im Rahmen dieser Arbeit noch von Bedeutung sein wird.

Wird nun das *Fundamentallemma der Variationsrechnung* auf (2.57), (2.58) angewandt, so erhält man schließlich

$$- \int_{\mathcal{B}} \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} \, dV = \int_{\mathcal{B}} \mathbf{f} \, dV \quad (2.59)$$

$$\int_{\partial\mathcal{B}_t} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} \, dA = \int_{\partial\mathcal{B}_t} \mathbf{q} \, dA \quad (2.60)$$

was bei der zusätzlichen Forderung nach Erfüllung in jedem Punkt des zu Grunde liegenden Körpers auf

$$-\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{f} \quad \forall \mathbf{x} \in \mathcal{B} \quad (2.61)$$

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{q} \quad \forall \mathbf{x} \in \partial\mathcal{B}_t \quad (2.62)$$

und damit exakt auf (2.39), (2.40) führt. Auch wenn die eben aufgeführte Herleitung der *Schwachen Form des Gleichgewichts* bzw. des *Randwertproblems der linearen Elastostatik* aus einem Energiepotenzial auf den Fall linearer Elastizität beschränkt ist, so liefert dies dennoch die Grundlage für die Formulierung konstitutiver Zusammenhänge für inelastische Materialien mittels Variationsprinzipien.

Mittlerweile existieren unzählige Veröffentlichungen zu diesem Themenkomplex, sodass bei der folgenden Auflistung kein Anspruch auf Vollständigkeit bzw. Rangordnung bezüglich der wissenschaftlichen und historischen Relevanz erhoben wird. Einen wichtigen Grundstein legten Halphen and Nguyen (1975) mit der Einführung der sogenannten *Generalisierten Standard–Medien*. Darauf aufbauend formulierte Hackl (1997) Variationsprinzipien

für klassische und finite Elastoplastizität. In diesem Zusammenhang lässt sich noch Carstensen et al. (2002) nennen. Ortiz and Repetto (1999) sowie Ortiz and Stainier (1999) wandten diese Methoden auf Theorien zu Dislokationen, Kristallplastizität sowie Visko-plastizität an. Im Rahmen der Festkörperphasentransformationen arbeiteten Mielke et al. (2002) eine Methode aus. Miehe et al. (2002) behandeln mit Hilfe dieses Konzeptes unter anderem Texturentwicklung von Polykristallen. Eine Anwendung für Schädigungsmodelle liefert Schmidt-Baldassari and Hackl (2003). Die Behandlung von bruchmechanischen Problemen wie Rissausbreitungskriterien wird in Stumpf and Le (1990) erläutert. Eine umfassende Abhandlung beinhaltet Maugin (1992) für Plastizität sowie Bruchmechanik.

Diesbezüglich sei erwähnt, dass der Nachweis der Existenz sowie Eindeutigkeit von Lösungen etwaiger Variationsprinzipien im Allgemeinen eine sehr komplexe Aufgabe darstellt und gerade für finite Deformationen immer Bestandteil von fachlichen Diskussionen war und immer noch ist. In diesem Kontext seien vor allem die Beiträge von Truesdell and Noll (1965) und Gurtin (1972) erwähnt. Eine knappe aber eingehende Übersicht zu diesem Thema ist auch in Marsden and Hughes (1983) enthalten. Eng verknüpft mit den letztgenannten Aspekten sind die sogenannten *Direkten Methoden der Variationsrechnung*, welche es ermöglichen, direkt von der „Gestalt“ einer internen Energiedichte ψ auf die Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen zu schließen. Diese Methoden und die damit eingeschlossenen *Relaxierungsverfahren* sind zentraler Bestandteil dieser Arbeit und werden grundlegend in Kapitel 4 sowie in Teil II bezüglich ihrer konkreten Anwendungen behandelt.

3. Attribute von Formgedächtnislegierungen

3.1. Kristallographische Aspekte martensitischer Phasentransformationen

Martensitische Phasentransformation, wie sie beispielsweise auch in herkömmlichen Stählen auftreten, sind grundlegend durch ein diffusionsloses, spontanes *Umklappen* von einer ursprünglichen in eine bestimmte andere Kristallstruktur gekennzeichnet und dadurch als Phasentransformation *erster Ordnung* einzuordnen. Dieser Vorgang kann spannungs- und temperaturinduziert erfolgen und äußert sich in drei grundlegenden Phänomenen: dem *pseudoelastischen*, *pseudoplastischen* und *Einweg-Formgedächtnis-Effekt*.

Diese Phänomene lassen sich anhand der Abb. 3.1 gut versinnbildlichen, wobei elastische thermische Ausdehnungen vernachlässigt wurden.

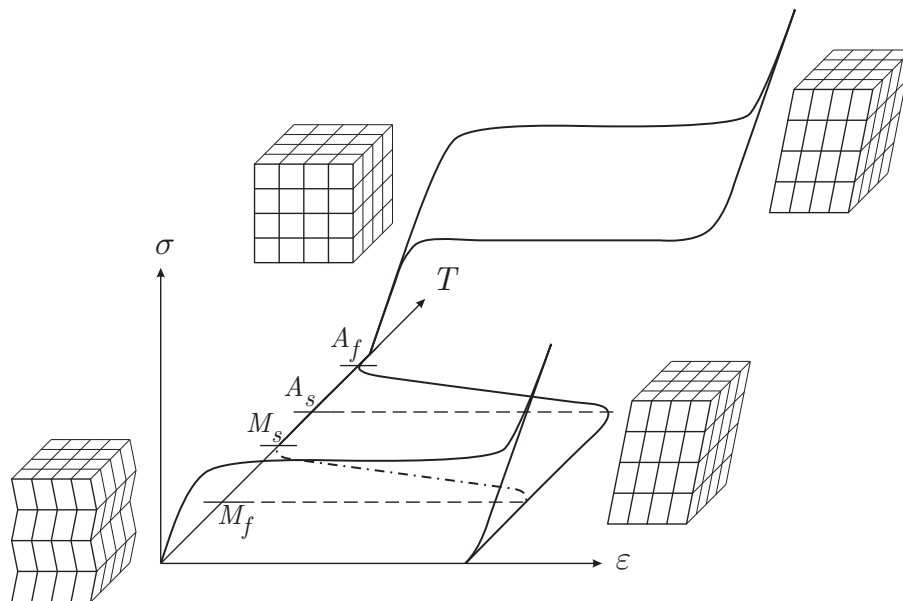


Abbildung 3.1.: Schematische Darstellung des Materialverhaltens im Spannungs–Dehnungs–Temperatur–Raum und der damit verbundenen Kristallstrukturen in FGLen

Oberhalb der sogenannten *Austenit–Finish–Temperatur* A_f ist die Austenit–Phase stabil. Durch Aufbringen mechanischer Belastungen transformiert das Material beim Erreichen der sogenannten und idealisierten *Plateauspannung* nun in Martensit, je nach Vorgaben in eine oder auch mehrere präferierte Varianten.

Die Zurücknahme der Spannungen führt zu einer Rücktransformation zu Austenit, aller-

dings auf einem niedrigeren Spannungsniveau. Diesen Vorgang nennt man die *Pseudoelastizität*, da der entlastete Körper wieder in seine ursprüngliche Lage zurückkehrt, allerdings während des mechanischen Belastungszykluses eine Hysterese-Schleife durchläuft und dadurch Energie dissipiert worden sein muss. Eine detailliertere Beschreibung des Materialverhaltens von FGLen bezüglich der Spannungen und Dehnungen erfolgt in Abschnitt 3.2.

Wird eine austenitische Formgedächtnislegierung dann unter die *Martensit-Start-Temperatur* M_s sowie *Martensit-Finish-Temperatur* M_f abgekühlt, entsteht *ungerichteter* Martensit, bei dem theoretisch alle Varianten im Material bezüglich der Volumenfraktionen gleich verteilt sind. Eine anschließend aufgebrachte mechanische Belastung sorgt für eine scheinbare irreversible Verformung des Körpers, die auch bei vollständiger Zurücknahme der Spannungen auf Grund der Transformation in sogenannten *gerichteten* Martensit bestehen bleibt. Dieses Phänomen ist als *Pseudoplastizität* bekannt.

Der Effekt ist *pseudoplastisch*, da durch eine Erhöhung der Temperatur über die *Austenit-Start-Temperatur* A_s und folgend die *Austenit-Finish-Temperatur* A_f eine Rücktransformation sowie –verformung zum ursprünglichen Austenitgitter bewirkt werden kann. Zudem führt eine nachfolgende Abkühlung auf die ebenfalls unverformte Konfiguration des ungerichteten Martensits zurück. Dies ist der sogenannte *Einweg-Formgedächtniseffekt*, welcher das Haupt-Charakteristikum solcher Legierungen ist und sich demnach auch für die Namensgebung *Formgedächtnis* verantwortlich zeigt. Durch die Erhöhung der Temperatur scheint sich das Material an seine ursprüngliche Konfiguration zu erinnern, der Körper nimmt exakt seine Ausgangsposition wieder ein.

Die Rücktransformation nach erfolgtem Formgedächtniseffekt von Austenit zu gerichtetem Martensit durch Abkühlen, was in Abb. 3.1 durch die strichpunktierte Linie symbolisiert wird, kann durch spezielles Behandeln der Kristalle, dem sogenannten *Trainieren*, ebenfalls herbei geführt werden, was als *Zweiweg-Formgedächtniseffekt* bekannt ist.

Die in Abb. 3.1 enthaltenen Kristallstrukturen bezogen sich lediglich auf homogene Zustände des Materials. Eine zentrale Fragestellung aktueller Forschung ist jedoch die Darstellung bzw. Simulation von Mischzuständen koexistenter Phasen. Grundlegend werden zunächst Darstellungen wie in Otsuka and Wayman (1999) oder auch Guempel (2004) zu Hilfe genommen, um sich die Zusammenhänge bei koexistenten Phasen deutlich zu machen. Abb. 3.2 zeigt eine Adaption dieser Darstellungen.

Für die beiden Fälle der Pseudoelastizität und –plastizität sind dabei als Schritt zwischen den homogenen Zuständen mögliche Mischzustände des Materials angedeutet. Vom jeweiligen Ausgangszustand her betrachtet klappen beispielsweise bei entsprechender mechanischer Belastung $\Delta\sigma$ die Kristallgitter jenseits der grau eingezeichneten, oft als *habit plane* bezeichneten Grenzfläche um.

Diesen Darstellungen liegt jedoch zu Grunde, dass die Grenzfläche zwischen den einzelnen Phasen kohärent ist, was im allgemeinen Fall nicht zutrifft. Dazu seien an dieser Stelle die elementaren Grundlagen der Kristallographie im Rahmen der martensitischen Phasentransformationen erwähnt, wie sie beispielsweise in Otsuka and Wayman (1999) und Bhattacharya (2003) eingehender erläutert werden.

Beispiele für Materialien, in denen diese spontanen Änderungen des kristallografischen Gefüges geschehen, sind *kubisch-tetragonal* in Indium–Thallium, *kubisch-orthorhombisch*

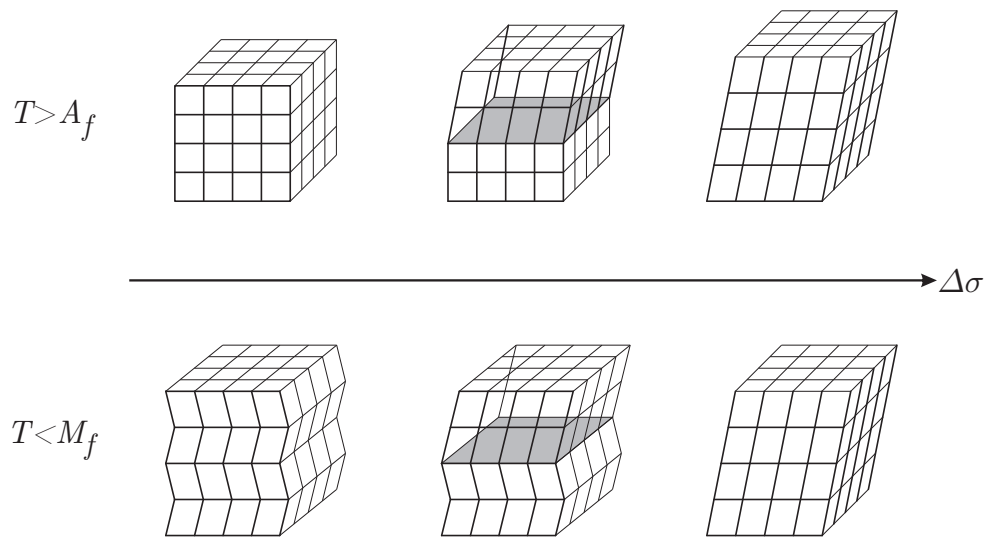


Abbildung 3.2.: Martensitischer Umwandlungsmechanismus (vereinfacht)

in Kupfer–Aluminium–Nickel (CuAlNi) und *kubisch–monoklin I* in Nickel–Titan (NiTi). Da es sich bei martensitischen Umwandlungen um diffusionslose Vorgänge handelt und damit die Konfiguration der Atome gleich bleibt, lässt sich der Wechsel vom ursprünglichen zum „umgeklappten“ Zustand gemäß Bain (1924) durch eine homogene Deformation beschreiben. Diese Deformation wird durch den Rechten Streck–Tensor U^t beschrieben, der in diesem Zusammenhang auch *Bain–* oder *Transformationsmatrix* genannt wird. Im Falle der in dieser Arbeit vorgegebenen linearen Kinematik werden Transformationsdehnungen vom Biot–Typ

$$\epsilon^t = U^t - I \quad (3.1)$$

verwendet.

Geht man vom austenitischen Gefüge des Materials als Referenzzustand aus, so wird durch eine Transformation in Martensit der Symmetriegrad des Kristallgitters reduziert. In dieser Hinsicht erhält man zwangsläufig mehrere kristallographische *Varianten* von Martensit. Diese Tatsache erfordert die Einführung von NV (*Number of Variants*) Transformationsmatrizen respektive –dehnungen der oben aufgeführten Art. Die Anzahl der möglichen Varianten hängt von der im jeweiligen Material vorherrschenden Transformationsart ab: Sie beträgt beispielsweise 3 bei kubisch–tetragonaler, 6 bei kubisch–orthorhombischer sowie 12 bei kubisch–monokliner Transformation. Abb. 3.3 verdeutlicht dies für den Fall einer kubisch–tetragonalen Umwandlung.

Die bekannten Kristallgeometrien der jeweiligen Phasen des Materials führen nun aber zu der Erkenntnis, dass eine kohärente Phasengrenze im Allgemeinen sogar ausgeschlossen werden kann. Zur Verdeutlichung sei Abb. 3.4 angeführt: Dargestellt ist die auf eine Schnittebene vereinfachte Phasengrenze zwischen kubischem Austenit und einer tetragonalen Martensit–Variante, dessen Kristallstruktur um einen beliebigen Winkel bezüglich der horizontal verlaufenden Grenzfläche des Austenits geneigt ist. Es ist zu erkennen, dass unabhängig vom Neigungswinkel des tetragonalen Gitters der Martensitphase keine Kohärenz erreicht werden kann. Vielmehr existiert ein Bereich zwischen den als durchgezogene Linie dargestellten Phasenfronten, welcher stark verformte Kristalle beinhalten müsste, die weder der Struktur von Austenit noch der von Martensit gleichen. Diese zusätzlich vorhandene

Verformungsenergie der Kristalle im Grenzbereich zwischen den Phasen könnte man als eine Art *Oberflächenenergie* ansehen.

In diesem Sinne lässt sich annehmen, dass die tatsächlich im Material vorhandene Ausprägung der Phasengrenze sich so ergeben wird, dass diese zusätzliche Energie minimiert wird. Tatsächlich existieren Phänomene, die einen solchen Schluss zulassen, z.B. die sogenannte *Zwillingsbildung* (siehe u.A. Ball and James (1987), Šilhavý (1997), Bhattacharya (2003)) sowie die „Verästelung“ der Mikrostruktur zur Phasengrenze hin (*branching*, siehe Conti (2000), Kohn and Müller (1994), Kohn and Müller (1992)).

Basierend auf der durch Wechsler et al. (1953) eingeführten kristallographischen Theorie des Martensits (*cristallographic theory of martensite*) leiten Ball and James (1987) mathematisch her, dass

- Martensit-Varianten untereinander kohärente Phasengrenzen bilden können, was allerdings bei realen Materialien wie NiTi (kubisch–monokline Transformation) nicht für beliebige Martensit-Paarungen gilt (siehe Fechte-Heinen (2007))
- Austenit zu einer einzigen Martensitvariante ausschließlich inkohärente Phasengrenzen bilden kann
- Austenit und verzwilligter Martensit kohärente Phasengrenzen bilden können, sofern die „Lattenbreite“ der Martensitbereiche unendlich fein ist

Grundlage für die erwähnten Resultate ist die sogenannte *Zwillingsgleichung*

$$\mathbf{R} \cdot \mathbf{U}_i^t - \mathbf{U}_j^t = \mathbf{a} \otimes \mathbf{n} \quad , \quad (3.2)$$

die primär in Abhängigkeit der Transformationsmatrizen $\mathbf{U}$ benachbarter Phasen i und j eine Bedingung für kohärente Phasengrenzen und in diesem Sinne eine Kompatibilitätsbedingung zwischen den Deformationszuständen der Martensitzwillinge darstellt (siehe auch James and Hane (2000)). Eine kohärente Phasengrenze kann dabei nur entstehen, wenn der mittlere Eigenwert der Transformationsmatrix $\mathbf{U}$ gleich 1 ist. Dies impliziert die Lösbarkeit der Zwillingsgleichung. Der Vollständigkeit halber sei erwähnt, dass in (3.2) $\mathbf{R}$ eine beliebige Rotationsmatrix, $\mathbf{a}$ einen beliebigen Vektor sowie $\mathbf{n}$ den Richtungsvektor senkrecht zur Phasengrenze bedeuten.

Ein aktueller Forschungszweig basiert auf James and Zhang (2005) sowie Cui et al. (2006), bei dem der mittlere Eigenwert der Transformationsdehnung in Zusammenhang mit der Größe der mechanischen und auch thermischen Hysterese-Schleife gebracht wird. Dies konnte auch bereits für ternäre NiTi–Legierungen experimentell verifiziert werden. Derartige Erkenntnisse könnten zu einer weitaus effektiveren Nutzung solcher Materialien führen, denn das Durchlaufen einer Hysterese sowie die durch die Höhe der Hystereseschleife bedingte, größere Transformationsspannung können auch immer als Quelle für mikroskopische Schädigungen angesehen werden, die unter Dauerbelastung zur Beeinträchtigung der Funktionalität des Materials führen.

Erweiterte Grundlagen speziell von NiTi–Legierungen werden im Kontext der numerischen Simulation von Ausscheidungen in Kapitel 10 eingehend behandelt.

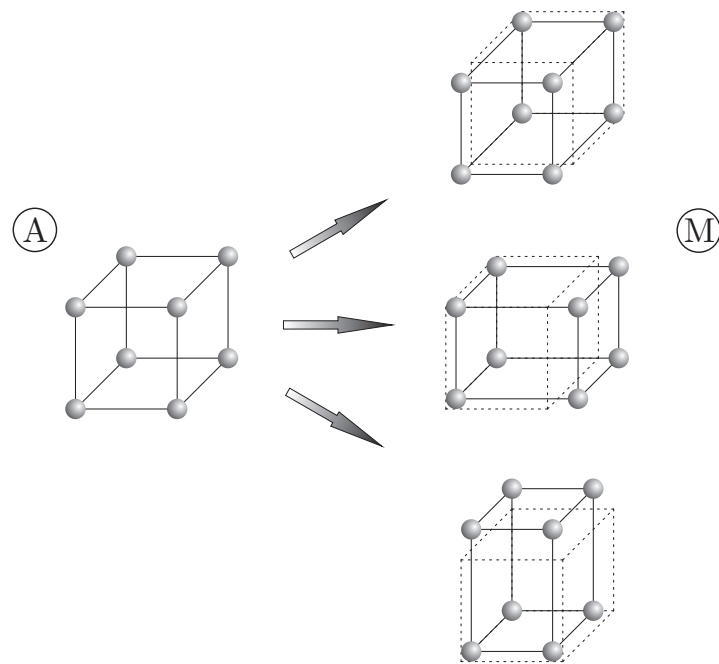


Abbildung 3.3.: Martensitische Varianten bei vorliegender kubisch–tetragonaler Transformation (A: Austenit, M: Martensit)

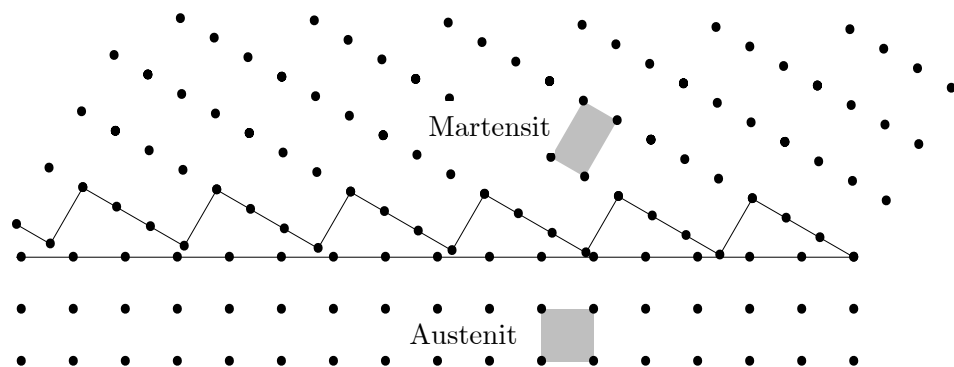


Abbildung 3.4.: Schematische Phasengrenze zwischen Austenit/Martensit (kubisch–tetragonal)

3.2. Makroskopische Materialeigenschaften

Die im vorherigen Abschnitt auf kristallographischer Ebene betrachteten, charakteristischen Effekte von Formgedächtnislegierungen wirken sich auf das globale Materialverhalten in Form von unterschiedlichen Spannungs–Dehnungs–Beziehungen aus, was bereits in Abb. 3.1 angedeutet wurde. Abb. 3.5 zeigt schematisch die idealisierte Materialantwort einer Formgedächtnislegierung für Pseudoelastizität sowie –plastizität.

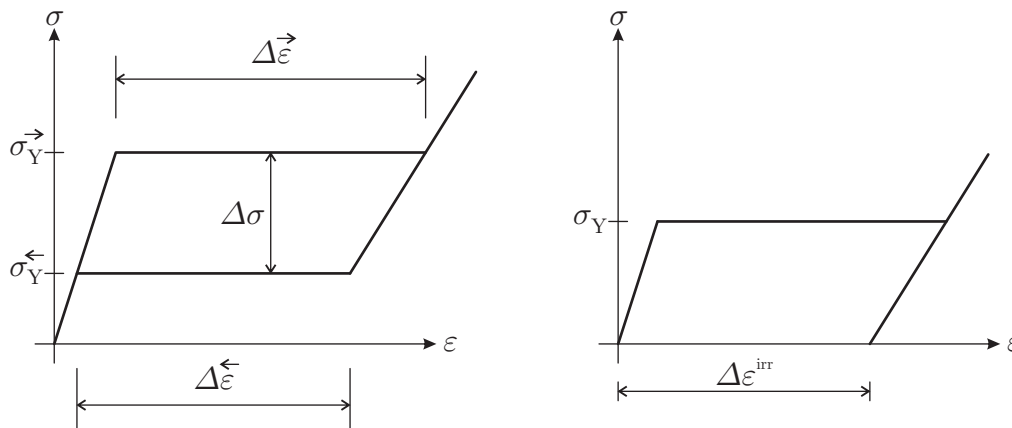


Abbildung 3.5.: Makroskopische Materialeigenschaften hinsichtlich der Spannungs–Dehnungs–Beziehung

Beiden Phänomenen ist gemein, dass zunächst nahezu linear elastisches Materialverhalten vorliegt bis zu einem bestimmten Schwellenwert, hier $\sigma_Y^{\rightarrow}$ bzw. σ_Y genannt, bei dessen Erreichen sich das Materialverhalten in der Hinsicht signifikant ändert, dass die Spannungen während der dort einsetzenden Phasentransformation über den Dehnungsbereich $\Delta\epsilon$ konstant bleiben. Man spricht in diesem Zusammenhang von dem sogenannten *Spannungspalt*. Nach vollendeter Transformation geht das Materialverhalten wieder in einen linear elastischen Bereich über.

Während bei hohen Temperaturen $T > A_f$ bei anschließender Entlastung eine komplette Rücktransformation auf einem niedrigeren Spannungsniveau $\sigma_Y^{\leftarrow}$ stattfindet und dadurch beim erneuten Erreichen des unbelasteten Zustands keine bleibenden Verformungen bestehen bleiben (Pseudoelastizität), liegt für tiefe Temperaturen nach vollständig vollzogener Entlastung eine zu mindestens mechanisch irreversible Deformation ϵ^{irr} vor (Pseudoplastizität). Diese bleibende Verformung in Folge der Pseudoplastizität kann über eine ausreichend hohe Erwärmung ($T \geq A_f$) des Materials wieder rückgängig gemacht werden (Einweg–Formgedächtniseffekt).

Grundsätzlich lässt sich an dieser Stelle festhalten, dass ein mechanisches Modell zur Simulation des lokalen Materialverhaltens von Formgedächtnislegierungen diese drei Phänomene abdecken sollte. Dabei ist das gezeigte idealisierte Verhalten Basis für phänomenologische Modelle (siehe beispielsweise Raniecki et al. (1992), Auricchio and Taylor (1997) oder Helm and Haupt (2003)). Allerdings zeigen die in Otsuka and Wayman (1999) zusammengefassten Analysen, dass die reale Materialantwort von Formgedächtnislegierungen allgemein und NiTi im Speziellen durchaus deutlich von dem idealisierten Verhalten abweicht.

Experimentell ermittelte Spannungs–Dehnungs–Kurven wie von Saburi et al. (1982) zeigen eine signifikante bleibende Verformung auch für den Temperaturbereich $T > A_f$, die zudem auch durch anschließende Erhitzung des Materials nicht vollständig zurück geht. Es lässt sich sogar zeigen, dass für höhere Temperaturen, welche eigentlich die Rückwandlung in die *Hochtemperaturphase* Austenit erleichtern sollten, diese bleibenden Verformungen größer werden. Eine weit akzeptierte Erklärung dafür ist, dass durch den Anstieg der Transformationsspannung bei höheren Temperaturen durchaus Gleitebenen innerhalb der Kristallstrukturen aktiviert werden, was zu plastischen Deformationen führt. Dies führt zur Notwendigkeit weiterer thermo–mechanischer Vorbehandlungen des Materials zur Erhöhung der Resistenz gegen plastische Verformungen auf Gleitebenen (Miyazaki et al. (1982)). Saburi et al. (1986) zeigen, dass ein Kaltwalzen des Materials dafür sorgt, dass sich ein nahezu ideales Materialverhalten hinsichtlich der Pseudoelastizität einstellt.

Ohnehin besteht bei Formgedächtnislegierungen eine starke Abhängigkeit des Verhaltens von der Textur des Materials. Gemäß den Experimenten von Saburi (1989) entwickelt sich bei warmgewalzten Probekörpern eine zum Teil stark ausgeprägte Anisotropie im Vergleich zum isotropen Verhalten eines Gusskörpers. Die ebenfalls in Otsuka and Wayman (1999) abgebildeten Spannungs–Dehnungs Diagramme zeigen deutlich die Unterschiede zwischen zwei Probekörpern, welche einerseits parallel zur Walzrichtung sowie senkrecht dazu aus dem Material geschnitten wurden, in Abhängigkeit verschiedener Stufen des Walzprozesses. Diese Methoden lassen sich im positiven Sinne auch zu einer Verbesserung der „Erinnerungs–Kapazität“ des Materials nutzen, sofern beispielsweise durch Walzen die präferierte kristallographische Orientierung im Sinne der maximal wiederherstellbaren Elongation (*recoverable elongation*) ausgenutzt wird.

Für Industrie–Anwendungen ist es von erheblicher Bedeutung, das Langzeitverhalten eines Materials wenigstens konservativ abschätzen zu können. Dazu ist eine ausreichende Quantität an Belastungstests zyklischer Art, sei es thermisch oder mechanisch, erforderlich. Dieses Spektrum ist allerdings zu umfassend als dass es in dieser Arbeit erschöpfend behandelt werden könnte. Als grundlegende Ergebnisse solcher Analysen sei jedoch hier erwähnt, dass thermische Zyklen zu einer schwachen Absenkung der M_S – und einer signifikanten Absenkung der M_f –Temperatur führen (u.A. nach Miyazaki et al. (1986)), während ein Hauptaspekt zyklischer mechanischer Belastung die Absenkung der Plateauspannung bei der Transformation Austenit–Martensit ist (Rücktransformation scheinbar unberührt, siehe Miyazaki et al. (1986)).

4. Das mathematische Konzept der Relaxierung

4.1. Direkte Methoden der Variationsrechnung

Die in den folgenden Abschnitten behandelten mathematischen Grundlagen stehen in Zusammenhang mit den sogenannten *Direkten Methoden der Variationsrechnung* (siehe z.B. Dacorogna (1982)) und damit der Frage, welche Bedingungen für eine Funktion erfüllt sein müssen, damit im mathematischen Sinn die Existenz von Minimierern bewiesen werden kann. Im Rahmen der Materialmodellierung unter Verwendung von Energieminimierungs-Prinzipien stellt diese Frage einen zentralen Aspekt dar. Diese Methoden werden als *direkt* bezeichnet, da lediglich die zu Grunde liegende Funktion selbst analysiert werden muss und nicht zusätzlich, wie bei der herkömmlichen Herangehensweise, noch Variationen davon (Gradient sowie Hesse-Matrix). Somit sind die Stetigkeitsanforderungen an die Funktionen geringer.

Für die Materialmodellierung in der Mechanik bedeutet die Anwendung der direkten Methoden nicht etwa nur eine Möglichkeit, ein vorhandenes konstitutives Gesetz in Form eines Energiefunktionals bezüglich der Existenz von eindeutigen Lösungen zu überprüfen. Vielmehr erlangt man dadurch eine Handhabe, notwendige und sogar hinreichende Bedingungen dafür direkt für die „Konstruktion“ eines zweckmäßigen Funktionals und damit konstitutiven Gesetzes zu benutzen.

Den detaillierten Ausführungen der folgenden Abschnitte vorausgreifend sei an dieser Stelle mit Hilfe der Abb. 4.1 das Konzept der *Relaxierung* generell erläutert.

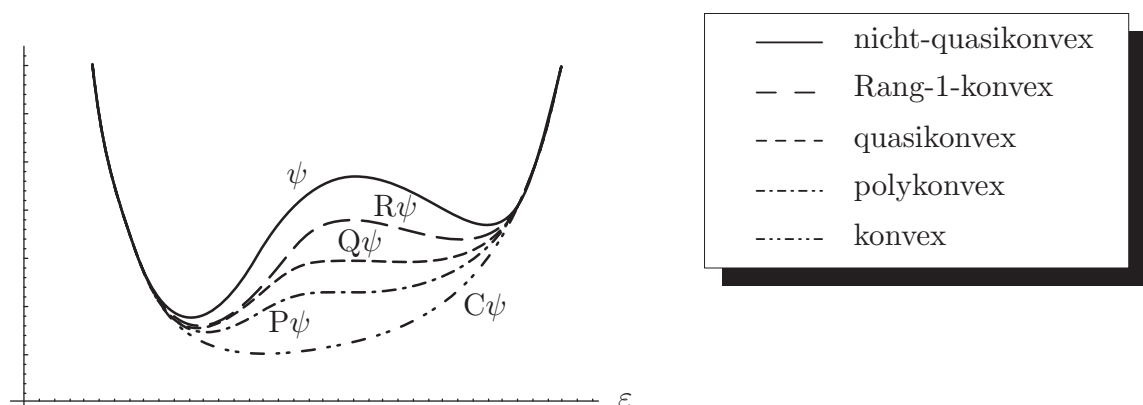


Abbildung 4.1.: Relaxierte Energiepotenziale

Energiefunktionale sind probat im Sinne der Existenz eines eindeutigen Minimums, wenn sie *schwach folgenunterhalbstetig* sind. Ein *quasikonvexes* Potenzial ist schwach folgenunterhalbstetig und daher die erwünschte *Hülle* eines eventuell zu Grunde liegenden, nicht-quasikonvexen Energiepotenzials. Diese quasikonvexe Hülle ist allerdings schlecht reali-

sierbar, weshalb versucht wird sich dieser mittels anderer Verfahren anzunähern. Dabei liefern die sogenannten Verfahren der *Polykonvexifizierung* sowie *Konvexifizierung* untere, die Methoden der Gruppe *Rang-1-Konvexifizierung* obere Schranken hinsichtlich der Quasi-konvexifizierung. Allgemeingültig ist dabei die Aussage

$$C\psi \leq P\psi \leq Q\psi \leq R\psi \leq R_k\psi \leq R_1\psi \leq \psi \quad , \quad (4.1)$$

wobei der Index der Rang-1-Verfahren auf die jeweilige Ordnung hindeutet. Die Rang-1-konvexe Hülle $R\psi$ kann im Allgemeinen nur für $k \mapsto \infty$ erzielt werden.

4.2. Konvexität

Betrachtet sei ein Funktional $f : X \rightarrow Y$, welches Elemente $\mathbf{A}, \mathbf{B}$ aus der Menge aller 3×3 -Matrizen X auf $Y \subset \mathbb{R}$ abbildet. Die Funktion f ist konvex, wenn

$$f((1 - \theta) \mathbf{A} + \theta \mathbf{B}) \leq (1 - \theta) f(\mathbf{A}) + \theta f(\mathbf{B}) \quad (4.2)$$

in dem Intervall $\theta \in [0, 1]$ oder alternativ das sogenannte *Tangentenkriterium*

$$f(\mathbf{B}) \geq f(\mathbf{A}) + \mathbf{m}(\mathbf{A}) : (\mathbf{B} - \mathbf{A}) \quad \exists \mathbf{m}(\mathbf{A}) \quad (4.3)$$

für alle $\mathbf{A}, \mathbf{B}$ gilt. Eine grafische Interpretation ist in Abb. 4.2 am Beispiel einer eindimensionalen Funktion $f(x)$ aufgeführt.

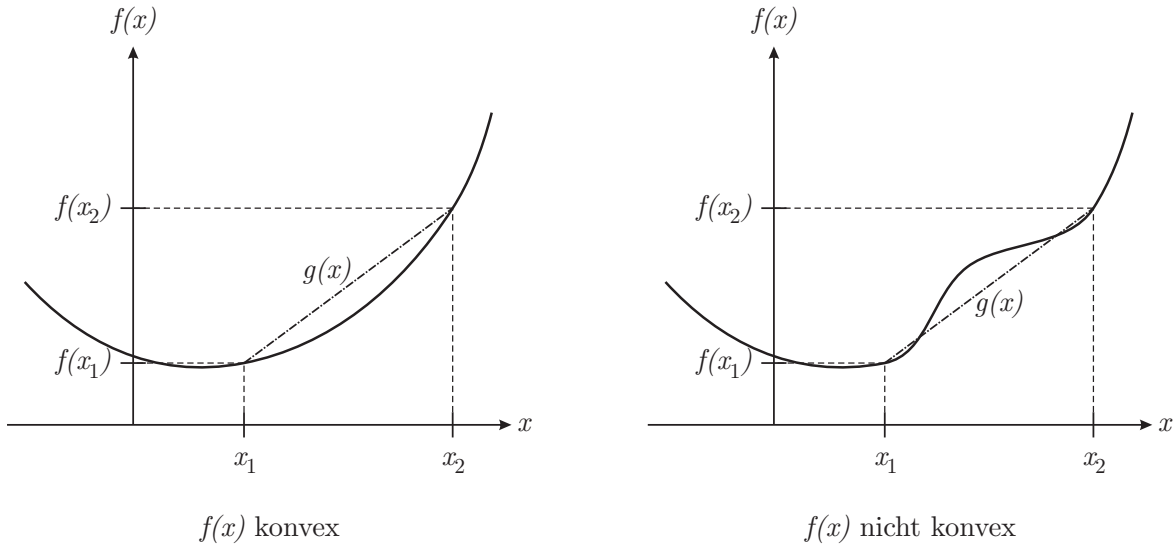


Abbildung 4.2.: Grafische Erläuterung zum Begriff der Konvexität

Der rechte Term in (4.2) stellt für den dargestellten Fall die Verbindungsgerade zwischen den Punkten $\{x_1, f(x_1)\}$ und $\{x_2, f(x_2)\}$ dar. Sofern die Funktion $f(x)$ an allen anderen Stellen $(1 - \theta)x_1 + \theta x_2$ mit $0 < \theta < 1$ unterhalb dieser Geraden liegt, ist $f(x)$ konvex. Das Tangentenkriterium lässt sich derart interpretieren, dass die Funktion $f(x)$ konvex ist, wenn eine Gerade $g(x)$ mit dem Punkt $\{x_1, f(x_1)\}$ und der Steigung $m(x_1)$ existiert, für die $g(x) \geq f(x) \forall x$ gilt. Konvexität sowie auch die im weiteren Verlauf dieses Kapitels

aufgeführten Konvexitätsbegriffe beschreiben globale Kriterien: Die Funktion f muss (4.2) bzw. (4.3) im gesamten Definitionsbereich erfüllen.

Konvexe Funktionen haben im Zusammenhang mit Minimierungsproblemen den Vorteil, dass bei Gültigkeit gewisser Annahmen bezüglich der Glattheit und Wachstumsbedingungen der zu Grunde liegenden Funktion eindeutige Minimierer existieren (siehe z.B. Ciarlet (1993)). Allerdings ist deutlich zu konstatieren, dass im Rahmen der Modellbildung für Festkörper konvexe Energiefunktionale physikalisch fragwürdig sind, da solche

- die Bedingung der materiellen Objektivität (*material frame indifference*) im Allgemeinen nicht erfüllen (siehe Coleman and Noll (1959), Truesdell and Noll (1965)). Ein anschauliches Beispiel für diese Tatsache ist in (Ciarlet, 1993, S. 174) enthalten, welches darlegt, dass konvexe Energiefunktionale für hydrostatische Spannungszustände die Objektivität nicht erfüllen können.
- unvereinbar mit der notwendigen Eigenschaft sind, dass Energiefunktionale für Deformationen mit $\det(\mathbf{F}) \rightarrow 0^+$ gegen Unendlich streben müssen (siehe Antman (1970)). Materialien, die auf konvexen Energiefunktionalen beruhen, können demnach unendlich komprimiert werden.
- lediglich eindeutige und damit stabile Gleichgewichtszustände zulassen, was im Widerspruch zu evidenten Phänomenen wie etwa *Knicken* und *Beulen* steht (siehe Ball (1977)). Auch die Initiierung einer Phasentransformation kann in diesem Zusammenhang als auftretende Instabilität des Materials aufgefasst werden.

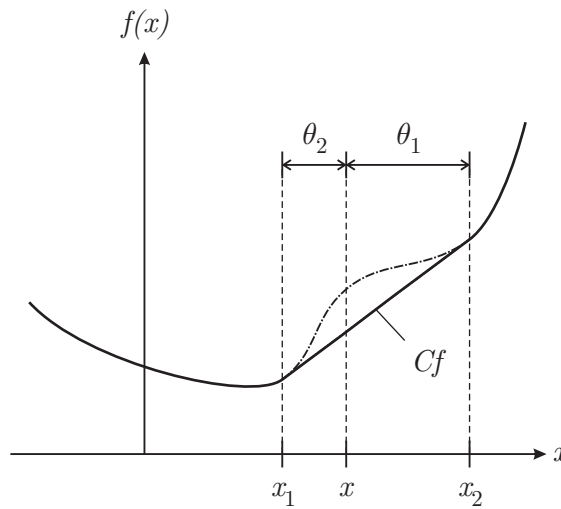


Abbildung 4.3.: Konstruktion der konvexen Hülle Cf einer eindimensionalen Funktion $f(x)$

Zur Bestimmung der konvexen Hülle Cf eines nichtkonvexen Funktionals f (siehe Abb. 4.3) gereicht die Minimierungsaufgabe

$$Cf(\mathbf{A}) = \min \left\{ \sum_{i=1}^{NA} \theta_i f(\mathbf{A}_i); \theta_i, \mathbf{A}_i, \sum_{i=1}^{NA} \theta_i = 1, \sum_{i=1}^{NA} \theta_i \mathbf{A}_i = \mathbf{A} \right\} . \quad (4.4)$$

Dabei stellen θ_i die Volumenanteile der einzelnen Atome $\mathbf{A}_i$ dar, deren Gesamtanzahl mit NA (*Number of Atoms*) angegeben ist. Durch Mischungen dieser Zustände $\mathbf{A}_i$ mit den Vo-

lumenanteilen θ_i lässt sich die zu Grunde liegende Energie derart reduzieren, dass dabei eine konvexe Hülle berechnet wird.

Die Nebenbedingung $\sum_{i=1}^{NA} \theta_i \mathbf{A}_i = \mathbf{A}$ lässt sich auch dahingehend interpretieren, dass die einzelnen Zustände im Mittel, also in der mit den jeweiligen Volumenfraktionen θ_i gewichteten Summe der diskreten $\mathbf{A}_i$, gleich des vorgegebenen Zustands $\mathbf{A}$ ist. In dieser Hinsicht gleicht die Nebenbedingung zur Erfüllung der Konvexität einer im Mittel formulierten Kompatibilitätsbedingung bezüglich der Zustände $\mathbf{A}_i$.

4.3. Polykonvexität

In Kapitel 4.2 wurde deutlich, dass konvexe Funktionale immer eindeutige Minima aufweisen, diese allerdings gegen fundamentale physikalische Bedingungen verstoßen. Ein Funktional f , welches nicht nur bezüglich der Zustände $\mathbf{A}_i$ konvex ist, sondern zusätzlich bezüglich $\text{cof}(\mathbf{A}_i) = \det(\mathbf{A}_i) \mathbf{A}_i^{-T}$ und $\det(\mathbf{A}_i)$, widerspricht diesen physikalischen Bedingungen nicht. Derartige Funktionale gelten nach Ball (1977) als *polykonvex*.

Analog zum Tangentenkriterium für die Konvexität ist f polykonvex, wenn für ein $\mathbf{m}(\mathbf{A})$, $\mathbf{n}(\mathbf{A})$, $j(\mathbf{A})$

$$\begin{aligned} f(\mathbf{B}) \geq & f(\mathbf{A}) + \mathbf{m}(\mathbf{A}) : (\mathbf{B} - \mathbf{A}) \\ & + \mathbf{n}(\mathbf{A}) : (\text{cof}(\mathbf{B}) - \text{cof}(\mathbf{A})) \\ & + j(\mathbf{A}) : (\det(\mathbf{B}) - \det(\mathbf{A})) \end{aligned} \quad (4.5)$$

für alle $\mathbf{A}, \mathbf{B}$ gilt. Die Bedingungen für die Polykonvexität lassen sich im Rahmen der Kontinuumsmechanik auch als Konvexität bezüglich der Änderung des Linienelementes ($\mathbf{F}$), des Flächenelementes ($\text{cof}(\mathbf{F})$) und des Volumenelementes ($\det(\mathbf{F})$) zwischen aktueller und Referenz-Konfiguration auffassen (siehe Abschnitt 2.1).

Viele konstitutive Modelle zur Beschreibung von Materialien mit sehr großen Verformungen (z.B. Gummi), wie etwa die sogenannten *Mooney–Rivlin*– oder *Ogden*–Materialien, erfüllen die Bedingungen der Polykonvexität und sind damit physikalisch unbedenklich und die Existenz von Minimierern kann bewiesen werden (siehe ebenfalls Ball (1977) oder bspw. Ciarlet (1993)).

Die polykonvexe Hülle Pf eines Funktionals f berechnet sich aus dem Minimierungsproblem

$$Pf(\mathbf{A}) = \min \left\{ \sum_{i=1}^{NA} \theta_i f(\mathbf{A}_i); \theta_i, \mathbf{A}_i, \sum_{i=1}^{NA} \theta_i = 1, \sum_{i=1}^{NA} \theta_i \mathbf{A}_i = \mathbf{A}, \right. \\ \left. \sum_{i=1}^{NA} \theta_i \text{cof}(\mathbf{A}_i) = \text{cof}(\mathbf{A}), \sum_{i=1}^{NA} \theta_i \det(\mathbf{A}_i) = \det(\mathbf{A}) \right\}, \quad (4.6)$$

wobei für die Ausdrücke θ_i , $\mathbf{A}_i$ sowie das Symbol NA die in Kapitel 4.2 aufgeführten Definitionen gelten. Demnach existieren drei Kompatibilitätsbedingungen: sowohl die Linien– als auch die Flächen– und Volumenänderung der Zustände $\mathbf{A}_i$ sind im integralen Mittel kompatibel zu den korrespondierenden Größen des globalen Zustands $\mathbf{A}$, sofern man davon ausgeht, dass $\mathbf{A}$ dem Deformationsgradienten $\mathbf{F}$ entspricht.

4.4. Quasikonvexität

Der Begriff der *Quasikonvexität* wurde von Morrey (1952) eingeführt und beschreibt eine notwendige und hinreichende Bedingung für die Folgenunterhalbstetigkeit (*lower semicontinuity*) von Funktionen. Da laut Dacorogna (1982) die schwache Folgenunterhalbstetigkeit neben angemessenen Wachstums– und Glattheitsanforderungen eines Funktionals die Existenz eines Minimums beweist, kann auch die Quasikonvexität als Kriterium dafür verwendet werden (siehe Morrey (1952), Meyers (1965)). Zudem zeigte zunächst Meyers (1965), dass die Forderung nach Quasikonvexität dem Prinzip des Minimums des Gesamtpotenzials unter homogenen Dirichlet–Randbedingungen entspricht. Für Kräfte–Randbedingungen existiert mit der von Ball and Marsden (1984) eingeführten, sogenannten *Quasikonvexität am Rand* (*quasiconvexity at the boundary*) ein Analogon.

Ein wie in Kapitel 4.2 definiertes Funktional f gilt als quasikonvex in einem Gebiet Ω , wenn für alle in Ω periodischen Perturbationsfelder ϕ unter der Bedingung $\phi = 0$ auf dem Rand $\partial\Omega$

$$\frac{1}{V_\Omega} \int_{\Omega} f(\mathbf{A} + \nabla \phi) \, dV \geq f(\mathbf{A}) \quad (4.7)$$

für alle $\mathbf{A}$ im Definitionsbereich von f gilt. Mit der Definition (4.7) eröffnet sich zusätzlich zu den mathematischen Hintergründen noch eine intuitive, „ingenieurmäßige“ Deutung der Quasikonvexität, die in Abb. 4.4 für den Fall eines im Kontext der Kontinuumsmechanik vorliegenden Energiefunktional $\psi(\mathbf{F})$ visualisiert ist. Dargestellt ist zum einen die homogene Verschiebung $u^{hom} = \mathbf{F} \cdot \mathbf{x}$ einer infinitesimalen Umgebung Ω eines makroskopischen Materialpunktes, hier als Einheitsquadrat gewählt, unter der eingprägten Scherung $\mathbf{F} = \gamma (1 \ 0 \ 0)^T \otimes (0 \ 1 \ 0)^T$. Diese Umgebung kann im Rahmen der Materialmodellierung als *repräsentatives Volumenelement* (RVE) einer untergeordneten Größenskala angesehen werden. Zum anderen ist dargestellt, wie sich eine den oben aufgeführten Anforderungen entsprechende, beliebig gewählte überlagerte Fluktuation ϕ , hier exemplarisch zu

$$\phi = \begin{pmatrix} 0.025 \sin(4\pi x_1) \sin(4\pi x_2) \\ 0.025 \sin(4\pi x_1) \sin(4\pi x_2) \end{pmatrix}$$

mit $\gamma = 0.25$ gewählt, auf den Zustand des RVEs auswirkt.

Ist die für das RVE charakteristische Energiedichte nun quasikonvex, so befindet sich der homogene Zustand immer auf einem niedrigeren Energieniveau als sämtliche inhomogene, durch Überlagerung einer den Ansprüchen genügenden Störung herbeigeführten Zustände. Im Umkehrschluss gilt ebenso, dass ein zu Grunde liegendes Energiefunktional, welches nicht quasikonvex ist, durch Superpositionierung eines Perturbationsfeldes inhomogene Zustände einnimmt, die energetisch günstiger sind.

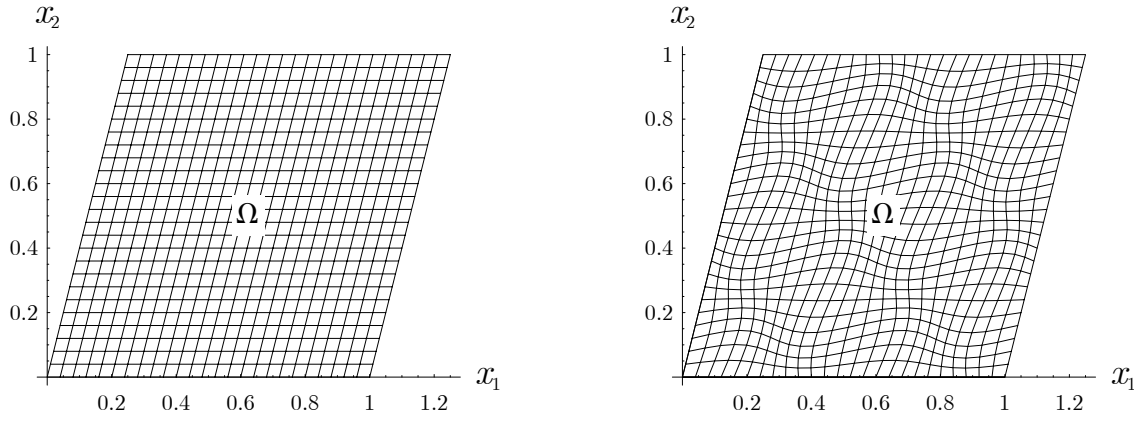


Abbildung 4.4.: Beispiel zur Erläuterung der Quasikonvexität

Die Konstruktion einer quasikonvexen Hülle Qf des Funktionals f lässt sich zwar formell durch das Minimierungsproblem

$$Qf(\mathbf{A}) = \min \left\{ \int_{\Omega} f(\mathbf{A} + \nabla \phi) dV; \phi, \phi \text{ periodisch in } \Omega, \phi = 0 \text{ auf } \partial\Omega \right\} \quad (4.8)$$

beschreiben, ist allerdings schwierig wenn nicht gar in den meisten Fällen unmöglich zu realisieren, da es sich bei (4.8) um einen integralen Ausdruck handelt und zudem ϕ die Funktion aus der Menge aller in Ω periodischen Funktionen sein muss, die den niedrigsten Energiezustand garantiert.

Nach Ball (1977) erfüllt ein quasikonvexes Funktional $f(\mathbf{A})$ lokal die *Legendre–Hadamard* oder *Elliptizitäts*–Bedingung

$$(\mathbf{a} \otimes \mathbf{b}) : \mathbf{K} : (\mathbf{a} \otimes \mathbf{b}) \geq 0 \quad (4.9)$$

oder wahlweise

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{N} \cdot \mathbf{a} \geq 0, \quad (4.10)$$

sofern es zweifach stetig differenzierbar ist. In diesem Kontext stellt $\mathbf{N} := \mathbf{n} \cdot \mathbf{K} \cdot \mathbf{n}$ den sogenannten *Akustik–Tensor* dar mit $\mathbf{a}, \mathbf{b} \neq 0$ als beliebige Vektoren. Die Größe $\mathbf{K}$ symbolisiert im linear elastischen Fall den Materialtensor $\mathbf{C}$, während für nichtlineare Materialien der Tangentenmodul verwendet werden muss.

4.5. Rang–1–Konvexität

Die *Rang–1–Konvexität* basiert auf der Quasikonvexität, wobei bei diesem Verfahren das Perturbationsfeld ϕ aus einer bestimmten Klasse von Funktionen gewählt wird. Grundsätzlich sei diesbezüglich das in Abb. 4.5 dargestellte, periodische Störungsfeld betrachtet.

Entlang der Richtung $\mathbf{n}$ wird das RVE in periodische Zellen der Länge $\bar{l}$ eingeteilt und das dargestellte C^0 –stetige Fluktuationsfeld aufgebracht. Diese „Dachstruktur“ teilt wiederum

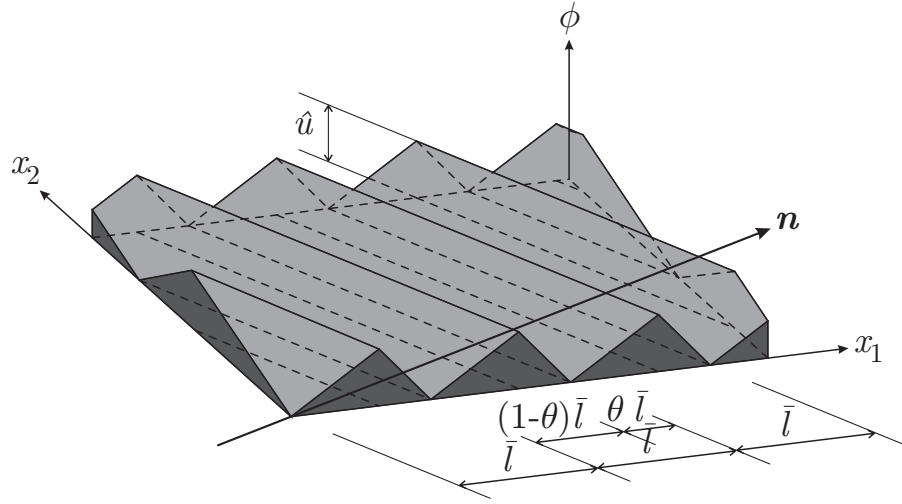


Abbildung 4.5.: Periodische Störung durch Lamine erster Ordnung (exemplarisch für 2D)

jede Periodizitätszelle in zwei Bereiche der Länge $(1 - \theta) \bar{l}$ bzw. $\theta \bar{l}$ mit $\theta \in [0, 1]$. Die beiden Bereiche können in diesem Zusammenhang als die *Phasen* des Materials aufgefasst werden; θ ist damit hier gleich der Volumenfraktion der zweiten Phase. Die unterschiedlichen Bereiche der somit vorausgesetzten Mikrostruktur werden dabei als *Lamine* bezeichnet, im dargestellten Fall exakt als *Lamine erster Ordnung*.

Das Fluktuationsfeld mit den Amplituden $\hat{u}$ kann als

$$\phi = \begin{cases} \frac{1}{(1-\theta)\bar{l}} \hat{u} (\mathbf{x} \cdot \mathbf{n} - (j-1)\bar{l}) & , \text{für } (j-1)\bar{l} \leq \mathbf{x} \cdot \mathbf{n} \leq (j-\theta)\bar{l} \\ -\frac{1}{\theta\bar{l}} \hat{u} (\mathbf{x} \cdot \mathbf{n} - j\bar{l}) & , \text{für } (j-\theta)\bar{l} \leq \mathbf{x} \cdot \mathbf{n} \leq j\bar{l} \end{cases} \quad (4.11)$$

für alle Periodizitätszellen j dargestellt werden, wobei $\hat{u}$ und $\bar{l}$ in diesem Zusammenhang als spezifische Größen und damit als dimensionslos angesehen werden können. Die dadurch erhaltene Gesamtverschiebung des RVEs

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{u}^{hom}(\mathbf{x}) + \phi(\mathbf{x}) = \mathbf{F} \cdot \mathbf{x} + \phi(\mathbf{x}) \quad (4.12)$$

ist in Abb. 4.6 exemplarisch für

$$\bar{\mathbf{n}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \mathbf{n} = \frac{1}{\sqrt{\bar{\mathbf{n}} \cdot \bar{\mathbf{n}}}} \bar{\mathbf{n}}, \bar{l} = \frac{1}{3}, \hat{u}_i = \frac{1}{30}, \theta = \frac{1}{2}$$

und die bereits in Kapitel 4.4 angewandte Scherung dargestellt.

Der Deformationszustand innerhalb des RVEs berechnet sich aus

$$\nabla \mathbf{u} = \mathbf{F} + \nabla \phi \quad (4.13)$$

zu

$$\hat{\mathbf{F}} = \mathbf{F} + \begin{cases} \frac{1}{(1-\theta)\bar{l}} \hat{u} \otimes \mathbf{n} & , \text{für } (j-1)\bar{l} \leq \mathbf{x} \cdot \mathbf{n} \leq (j-\theta)\bar{l} \\ -\frac{1}{\theta\bar{l}} \hat{u} \otimes \mathbf{n} & , \text{für } (j-\theta)\bar{l} \leq \mathbf{x} \cdot \mathbf{n} \leq j\bar{l} \end{cases} \quad (4.14)$$

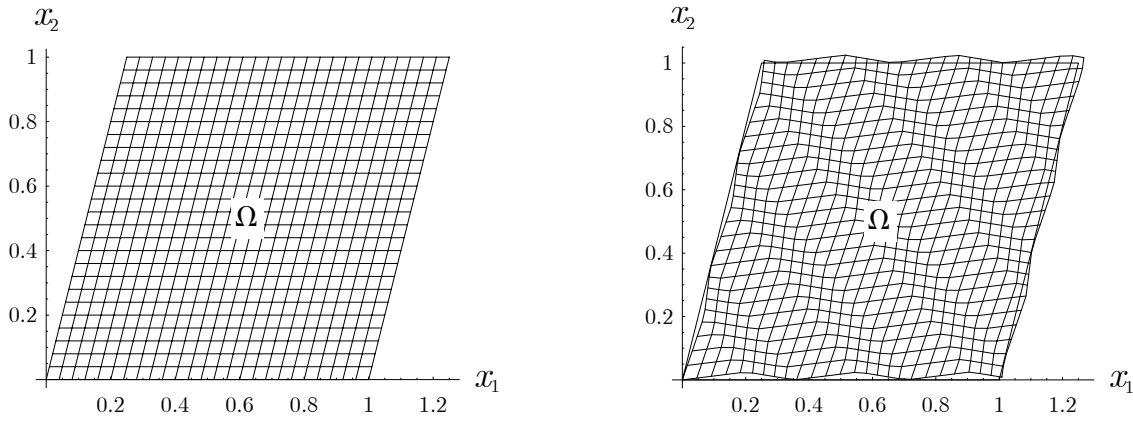


Abbildung 4.6.: Beispiel zur Erläuterung der Rang-1-Konvexität

Die Abbildungen 4.5 und 4.6 verdeutlichen, dass am Rand des RVEs inkompatible Verschiebungszustände vorliegen, da dort $\phi \neq 0$ gilt. Dieser augenscheinliche Malus kann aber dadurch entkräftet werden, dass keine Informationen über die Anzahl respektive die Breite der einzelnen Lamine vorhanden sind bzw. in die Methode einfließen. Daher bedeutet die Annahme unendlich feiner Lamine keine Einschränkung für die Anwendbarkeit dieses Verfahrens und führt dazu, dass die inhomogenen Randfluktuationen vernachlässigt werden können.

Das gewählte Perturbationsfeld ist dabei konform mit der sogenannten *Hadamard-Bedingung* (siehe z.B. Šilhavý (1997)), welche eine Rang-1-Verknüpfung zwischen zwei Dehnungszuständen angrenzender Phasen im Sinne einer kompatiblen Anordnung fordert, was durch (4.14) eindeutig gegeben ist.

Die Berechnung einer *Rang-1-konvexen Hülle bezüglich Laminaten erster Ordnung* kann also durch

$$Rf = \min \left\{ (1 - \theta) \psi \left(\mathbf{A} + \frac{1}{1 - \theta} \hat{\mathbf{u}} \otimes \mathbf{n} \right) + \theta \psi \left(\mathbf{A} - \frac{1}{\theta} \hat{\mathbf{u}} \otimes \mathbf{n} \right); \theta, \hat{\mathbf{u}}, \mathbf{n}, \theta_I \geq 0, \sum_{I=1}^{NV} \leq 1 \right\} \quad (4.15)$$

berechnet werden, wobei die zuvor benutzte Größe $\bar{l}$ irrelevant ist und daher nicht mehr berücksichtigt wird. Häufig findet sich auch

$$(1 - \theta) \psi(\mathbf{A} + \theta \mathbf{a} \otimes \mathbf{n}) + \theta \psi(\mathbf{A} - (1 - \theta) \mathbf{a} \otimes \mathbf{n}) \quad (4.16)$$

als die zwecks Erhalt oben genannter Hülle zu minimierende Funktion. Diese unterscheidet sich darin im Vergleich zu (4.15), dass der Vektor $\mathbf{a}$ nicht die Amplitude der Störung, sondern den Sprung bezüglich der Deformation darstellt, was nun kurz erläutert werden soll. Die Differenz der Verschiebungsgradienten des Perturbationsfeldes ϕ ergibt sich zu

$$\mathbf{a} := \frac{1}{1 - \theta} \hat{\mathbf{u}} - \left(-\frac{1}{\theta} \right) \hat{\mathbf{u}} = \frac{1}{(1 - \theta) \theta} \hat{\mathbf{u}} \quad (4.17)$$

Die Umstellung nach $\hat{u} = (1 - \theta) \theta \alpha$ und Einsetzen in (4.15) ergibt (4.16). Im weiteren Verlauf soll jedoch (4.15) als Basis für die in Kapitel 5.5 erfolgenden Herleitungen auf Grund des eindeutigen physikalischen Bezugs des Parameters $\hat{u}$ dienen.

Das Verfahren der *sequentiellen Laminierung* unter Verwendung der von Kohn and Strang (1983), Kohn and Strang (1986) entwickelten Rekursionsformeln, also die aufeinander folgende Verfeinerung der Lamine in solche immer höherer Ordnung, sichert streng genommen erst für Lamine unendlicher Ordnung die *Rang-1-Konvexität* zu. Im weiteren Verlauf dieser Arbeit soll allerdings generell bei den Verfahren unter Anwendung laminarer Strukturen der Terminus *Rang-1-Konvexität* bzw. *Rang-1-Konvexifizierung* Verwendung finden.

Teil II.

Konstitutivgesetze der Mikroebene

5. Energiedichte der Phasenmixture

Wie bereits angedeutet, sollen die im vorangegangenen Kapitel dargestellten Verfahren bzw. Kriterien nun konkret für die „Konstruktion“ einer sowohl mathematisch als auch physikalisch motivierten Energiedichte und damit eines konstitutiven Gesetzes im Rahmen der Modellierung von martensitischen Phasentransformationen angewandt werden.

Zur notwendigen Abbildung der dissipativen Vorgänge innerhalb des Materials, die sich makroskopisch z.B. in der auftretenden Spannungs–Dehnungs–Hysterese äußern, kann das jeweilige Relaxierungsverfahren nicht auf die zu Grunde liegende Energiefunktion allein, sondern muss auf eine um Dissipationsanteile erweiterte Funktion angewandt werden. Dies führt auf die sogenannten *inkrementellen Variationsprinzipien* (siehe u.A. Hackl (1997), Ortiz and Stainier (1999), Ortiz and Repetto (1999), Carstensen et al. (2002), Mielke et al. (2002), Miehe et al. (2002)). Das in Abb. 5.1 dargestellte Schaubild verdeutlicht die beiden grundlegenden Konzepte für Relaxierungsmethoden unter Einbindung von Dissipation.

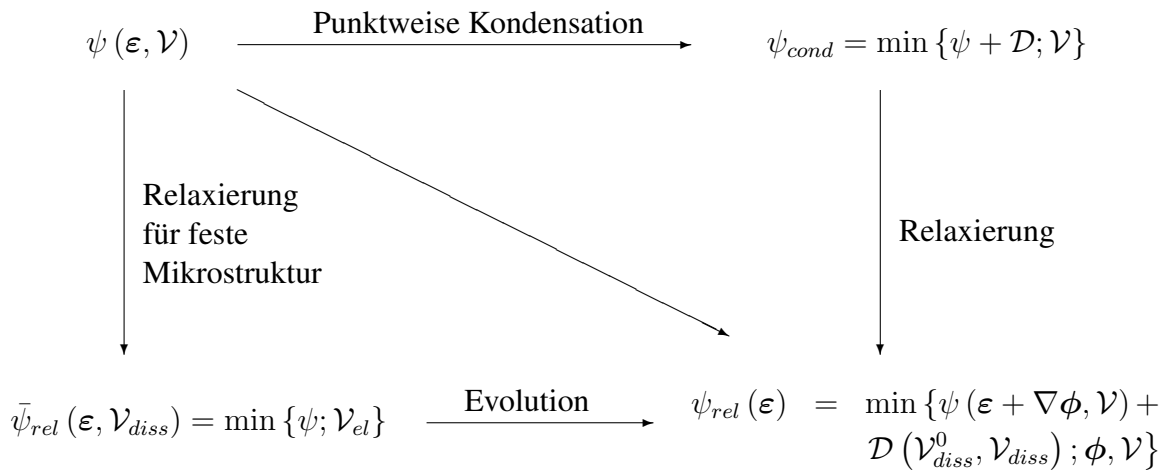


Abbildung 5.1.: Schema zur Bestimmung der relaxierten Energiedichte unter Berücksichtigung von Dissipation

Der Weg über die sogenannte *kondensierte Energie* ψ_{cond} bedarf der Einbindung sowie Minimierung eines inelastischen Potentials in zeitlich diskretisierter Form sowie einer Relaxierung dessen bezüglich der die Mikrostruktur repräsentierenden Variablen (siehe z.B. Bartels et al. (2004)).

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wird der alternative Pfad zur Bestimmung der relaxierten Energie bzw. der internen Variablen gewählt. Dies bedingt eine Unterteilung der internen Variablen $\mathcal{V}$ in sogenannte *elastische* Variablen $\mathcal{V}_{el}$ und *dissipative* Variablen $\mathcal{V}_{diss}$, wobei das zu Grunde liegende Potenzial ψ zunächst bezüglich $\mathcal{V}_{el}$ für festgehaltene Werte

der dissipativen Variablen minimiert wird. Aufbauend auf der dadurch erhaltenen, „partiell relaxierten“ Energiedichte $\bar{\psi}_{rel}$ werden anschließend die optimalen Werte der dissipativen Variablen durch Evolutionsgesetze bestimmt, was Gegenstand des Kapitels 6 ist. Ziel dieses Kapitels ist es nun, solche Energiedichten $\bar{\psi}_{rel}$ für unterschiedliche Relaxierungsverfahren herzuleiten.

5.1. Phasenenergien

Grundlegend kann die Energiedichte einer Festkörperphase I des Materials gemäß

$$\psi_I = \psi_{I,mech} + \psi_{I,chem} \quad (5.1)$$

in einen mechanischen Anteil $\psi_{I,mech}$ und einen chemischen Anteil $\psi_{I,chem}$ aufgeteilt werden. Die Energiedichte $\psi_{I,mech}$ soll demnach alle Anteile berücksichtigen, die zu einer elastischen Formänderung des Materials führen. Die zugehörigen Variablen sind durch die elastischen Dehnungen ϵ^e gegeben. Gemäß der in dieser Arbeit zu Grunde liegenden Annahme kleiner Verformungen soll die additive Zerlegung

$$\epsilon_I = \epsilon_I^e + \epsilon_I^t \quad (5.2)$$

der Gesamtdehnungen Anwendung finden. ϵ_I^t stellt dabei eine der bereits in Kapitel 3.1 eingeführten Transformationsdehnungen dar. Zur Berücksichtigung von Temperaturdehnungen oder der zusätzlichen Implementierung plastischer Verformungen ließe sich die Gesamtdehnung um entsprechende Anteile erweitern.

Eine quadratische Energiefunktion vom St. Venant-Kirchhoff-Typ,

$$\psi_{I,mech} = \frac{1}{2} (\epsilon - \epsilon_I^t) : \mathbf{C}_I : (\epsilon - \epsilon_I^t) \quad , \quad (5.3)$$

dient als Energiedichte der betrachteten Festkörperphase, wobei $\mathbf{C}$ den 4-stufigen Materialtensor darstellt, der für die im weiteren Verlauf folgenden Herleitungen lediglich als symmetrisch vorausgesetzt wird und daher generell auch Anisotropie repräsentieren kann. Grundlegend wird die Austenitphase als Ausgangszustand des Materials angesehen (*parent phase*), wodurch $\epsilon_A^t = 0$ gilt.

Die chemischen Energien werden in Anlehnung an Frémond (1987) unter Verwendung der Wärmekapazität C_0 , der Latenten Wärme L_0 sowie einer Referenztemperatur T_0 zu

$$\psi_{A,chem} = -C_0 T \log(T) - L_0 \frac{T - T_0}{T_0} \quad (5.4)$$

$$\psi_{I,chem} = -C_0 T \log(T) \quad (5.5)$$

definiert. Zusammenfassend können nun die Energiedichten für die Austenitphase sowie die I -te Martensit-Variante als

$$\psi_A = \frac{1}{2} \epsilon : \mathbf{C} : \epsilon - C_0 T \log(T) - L_0 \frac{T - T_0}{T_0} \quad (5.6)$$

$$\psi_I = \frac{1}{2} (\epsilon - \epsilon_I^t) : \mathbf{C} : (\epsilon - \epsilon_I^t) - C_0 T \log(T) \quad (5.7)$$

geschrieben werden. Zur besseren Veranschaulichung sind in Abb. 5.2 die einzelnen Energiedichten exemplarisch für die drei Fälle $T > T_0$, $T = T_0$ und $T < T_0$, hier nicht näher erörterte Materialparameter und einen Belastungspfad $\epsilon = \kappa \epsilon_1^t$ für eine kubisch–tetragonale Transformation dargestellt, wobei auf Grund des gewählten Belastungspfad $\psi_2 = \psi_3$ gilt.

Die Ansätze bewirken also, dass die jeweilige Phasenenergie der Martensit–Variante I im Dehnungsraum um ϵ_I^t verschoben und zudem das Minimum der Austenit–Phasenenergiedichte um die Differenz der chemischen Energien nach oben bzw. unten verschoben wird. Die hier definierten Phasenenergiedichten gelten einheitlich als Basis für die weiteren Herleitungen.

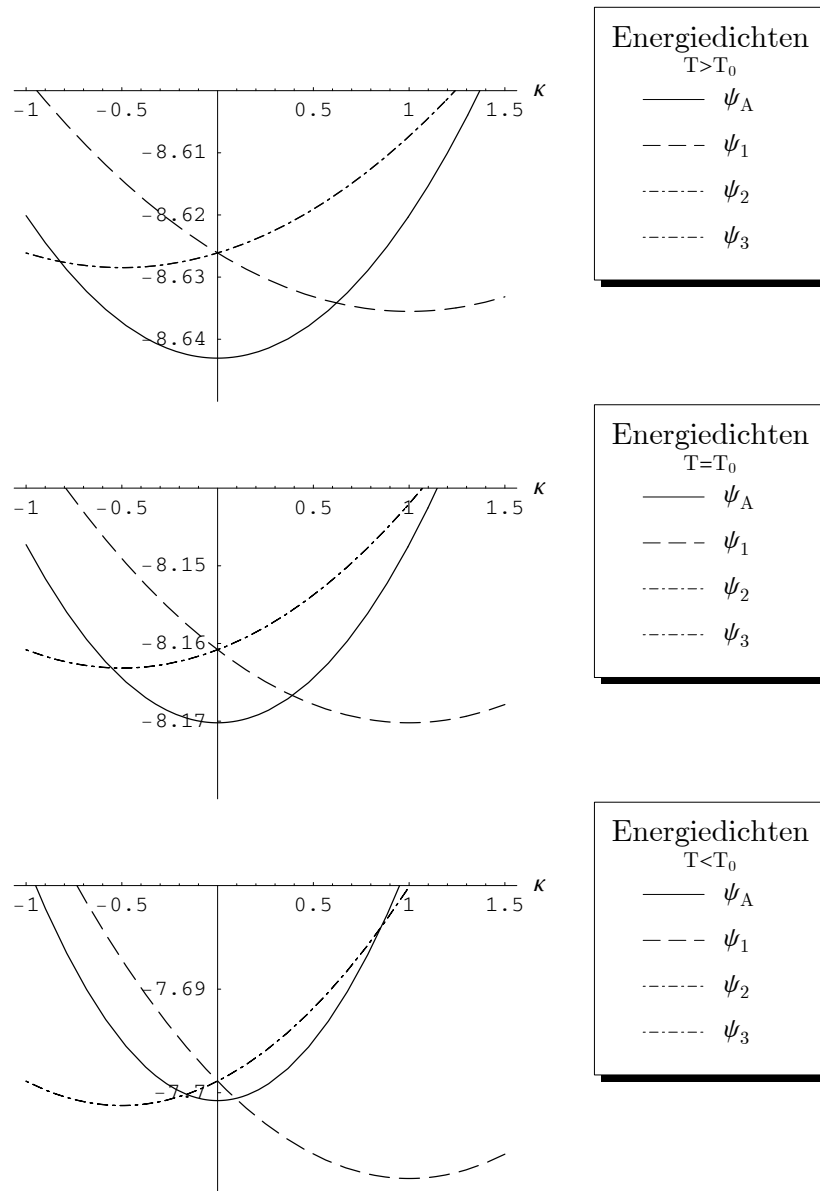


Abbildung 5.2.: Phasenenergien eines kubisch-tetragonal transformierenden Materials für unterschiedliche Temperaturen T

5.2. Energiedichte nach Taylor

Der erste, intuitive Ansatz für eine Energiedichte, die repräsentativ für eine mögliche Phasenmischung ist, ergibt sich durch die gewichtete Summe aller Phasenenergien

$$\psi = \theta_A \psi_A(\varepsilon) + \sum_{I=1}^{NV} \theta_I \psi_I(\varepsilon, \varepsilon_I^t) \quad , \quad (5.8)$$

wobei θ_A und θ_I die jeweiligen Volumenfraktionen der Austenitphase bzw. I -ten Martensitvariante darstellen. Dieser Ansatz scheint nützlich zu sein, erweist sich jedoch, wie nun gezeigt wird, als völlig unbrauchbar für die gesuchte Energiedichte der Phasenmischung. Alle weiteren Vorgehen unterliegen den Restriktionen

$$\theta_A > 0 \quad , \quad \theta_I > 0 \text{ für } I = 1 \dots NV \quad , \quad \theta_A + \sum_{I=1}^{NV} \theta_I = 1 \quad . \quad (5.9)$$

Eliminiert man θ_A durch $\theta_A = 1 - \sum_{I=1}^{NV} \theta_I$, so ergeben sich die Restriktionen zu

$$\theta_I > 0 \text{ für } I = 1 \dots NV \quad , \quad \sum_{I=1}^{NV} \theta_I \leq 1 \quad . \quad (5.10)$$

Betrachtet man die eingeführten Volumenfraktionen als interne Variablen und damit als zusätzliche Minimierer der Energie neben den Dehnungen, so ist erkenntlich, dass durch die lineare Abhängigkeit der gemittelten Energiedichte von den Volumenfraktionen lediglich reine Phasen möglich sind, also

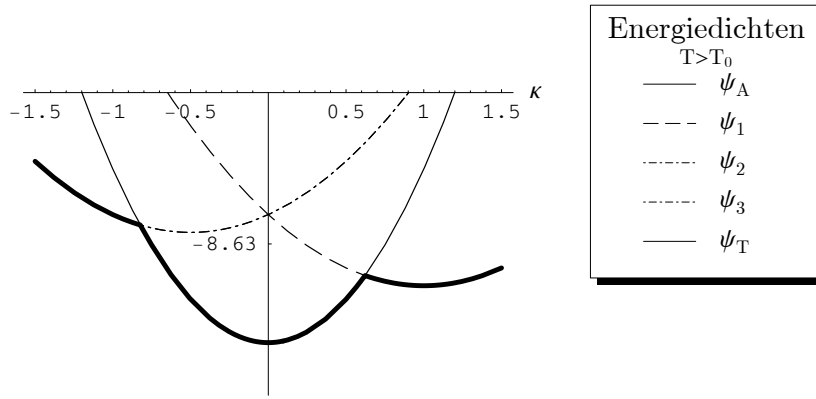
$$\begin{aligned} & (\theta_I = 0 \text{ für } I = 1 \dots NV) \\ \vee & (\theta_J = 1 \wedge \theta_I = 0 \text{ für } I \neq J, I = 1 \dots NV) \quad . \end{aligned} \quad (5.11)$$

Eine ausführlichere Betrachtung dieser Tatsache findet sich in Pagano et al. (1998). Die minimale Energie ergibt sich auf Grundlage von (5.8) demnach durch

$$\psi_{min} = \min(\psi_A, \psi_1, \dots, \psi_{NV}) \quad . \quad (5.12)$$

Abb. 5.3 verdeutlicht die Bedeutung dieses Resultates: Die Energiedichte der Phasenmischung gemäß (5.12) ist gleichbedeutend mit der *Einhüllenden* der einzelnen Phasenenergien, wobei sich die Werte der Volumenfraktionen in jedem Schnittpunkt der Phasenenergien sprunghaft von 0 auf 1 bzw. umgekehrt ändern. Diese die Phasenenergien einhüllende Energie ist auch als *Taylor–Grenze* bekannt, die man durch Annahme konstanter Dehnungen innerhalb des gesamten RVEs erhält. Diesbezüglich ist sie äquivalent zur sogenannten *Voigt–Grenze* (siehe Abschnitt 9.3).

Wie bereits in Kapitel 4 erläutert, ist die als nicht–quasikonvex zu identifizierende Taylor–Grenze sowohl mathematisch als auch physikalisch betrachtet als Energiedichte der Phasenmischung nicht zu gebrauchen. Genauer gesagt ist anzunehmen, dass Mischungsvorgänge im Material, welche durch kontinuierliche Werte der Volumenfraktionen $\theta_I \in [0, 1]$ charakterisiert sind, für eine signifikante Reduzierung der Energiedichte sorgen. In den folgenden Abschnitten wird eingehend die konkrete Anwendung der in Kapitel 4 behandelten Relaxierungsverfahren erläutert, wobei (5.8) dabei zu mindestens als Ausgangspunkt dient.

Abbildung 5.3.: Phasenenergien sowie Taylor-Grenze ψ_T

5.3. Konvexifizierung

Die Konvexifizierung der Energiedichte (5.8) wird mittels der Minimierungsaufgabe (4.4) bewerkstelligt, was für den konkret vorliegenden Fall

$$\bar{\psi} = \left(1 - \sum_{I=1}^{NV} \theta_I\right) \psi_A(\epsilon_A) + \sum_{I=1}^{NV} \theta_I \psi_I(\epsilon_I, \epsilon_I^t) \quad (5.13)$$

$$C\psi = \min \left\{ \bar{\psi}; \theta_I, \epsilon_A, \epsilon_I, \theta_I \geq 0, \sum_{I=1}^{NV} \theta_I \leq 1, \mathbf{g} = \mathbf{0} \right\}, I = 1 \dots NV \quad (5.14)$$

$$\mathbf{g} = \epsilon - \left(1 - \sum_{I=1}^{NV} \theta_I\right) \epsilon_A - \sum_{I=1}^{NV} \theta_I \epsilon_I \quad (5.15)$$

bedeutet, wobei hier im Gegensatz zu den in Kapitel 4 enthaltenen Angaben komplett der Übergang zu kleinen Verformungen vollzogen wurde.

Jeder Phase wird demnach ein komplett eigenständiger Dehnungszustand ϵ_A bzw. ϵ_I zugeordnet, welcher als Minimierer der Energie fungiert und somit den elastischen Variablen $\mathcal{V}_{el}$ zugeordnet wird. Da die Phasendehnungen zwar im Mittel kompatibel zu den makroskopischen Dehnungen ϵ sind, jedoch untereinander keinerlei Kompatibilitätsbedingungen unterliegen, lässt sich durch diese Relaxierungsmethode keine lokale Kompatibilität zwischen den Phasen gewährleisten. Demnach lässt sich weder die rein geometrische Anordnung der Phasen innerhalb der Mischung nachvollziehen, noch basieren die Dehnungszustände auf einem physikalisch sinnvollen Verschiebungsfeld, z.B. der in den Abb. 4.4 und 4.6 dargestellten Art. Dies stellt neben den in Abschnitt 4.2 aufgeführten einen weiteren, im Sinne der mikromechanischen Modellierung noch gravierenderen Kritikpunkt konvexer Energiepotenziale dar.

Als Ansatz zur Modellierung von Aggregatzustandsänderungen (also die Transformationen gasförmig–flüssig, flüssig–fest, gasförmig–fest) kann die Konvexifizierung wiederum ohne Vorbehalt dienen, da in diesem Fall keine lokalen Kompatibilitäten zwischen den einzelnen Phasen vorhanden sind.

Zur Lösung des Problems (5.14) wird zunächst die Lagrange-Funktion

$$\mathcal{L} = \left(1 - \sum_{I=1}^{NV} \theta_I\right) \psi_A(\boldsymbol{\varepsilon}_A) + \sum_{I=1}^{NV} \theta_I \psi_I(\boldsymbol{\varepsilon}_I, \boldsymbol{\varepsilon}_I^t) + \boldsymbol{\lambda} : \mathbf{g} \quad (5.16)$$

definiert, durch welche die Gleichungsrestriktion (5.15) mit Hilfe der in $\boldsymbol{\lambda}$ enthaltenen Lagrange-Parameter berücksichtigt werden kann. Die Herleitungen in Pagano et al. (1998) oder beispielsweise Leonhardt (2007) verdeutlichen, dass

$$\boldsymbol{\lambda} = \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_A} = \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_I} \quad \forall I = 1 \dots NV \quad (5.17)$$

gilt und somit in allen Phasen gleiche Spannungszustände vorliegen. Daher ist die Konvexifizierung gleichbedeutend mit der sogenannten *Reuss-Grenze*, die a priori von konstanten Spannungen innerhalb eines RVEs ausgeht. Ferner leitet Leonhardt (2007) aus

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_A} = 0 \quad \text{bzw.} \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_I} = 0 \quad I = 1 \dots NV \quad (5.18)$$

die optimalen Dehnungszustände innerhalb der einzelnen Phasen

$$\boldsymbol{\varepsilon}_A = \mathbf{C}^* : \left[\mathbf{C}_M : \boldsymbol{\varepsilon} - \sum_{J=1}^{NV} \theta_J \mathbf{C}_M : \boldsymbol{\varepsilon}_J^t \right] \quad (5.19)$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}_I = \mathbf{C}^* : \left[\mathbf{C}_A : \boldsymbol{\varepsilon} - \sum_{J=1}^{NV} \theta_J \mathbf{C}_A : \boldsymbol{\varepsilon}_J^t \right] + \boldsymbol{\varepsilon}_I^t, \quad I = 1 \dots NV \quad (5.20)$$

mit

$$\mathbf{C}^* = \left[\mathbf{C}_M + \Delta \mathbf{C} \sum_{J=1}^{NV} \theta_J \right]^{-1} \quad (5.21)$$

$$\Delta \mathbf{C} = \mathbf{C}_A - \mathbf{C}_M \quad (5.22)$$

her. Einsetzen dieser optimalen Werte in (5.13) liefert die in der Einleitung dieses Kapitels erwähnte Energiedichte $\bar{\psi}_{rel}$. Vorgreifend auf die im nachfolgenden Kapitel erläuterten Vorgehensweisen seien zusätzlich die (negativen) Ableitungen der relaxierten Energiedichte bezüglich der Volumenfraktionen, $\mathbf{q} := -\partial_{\boldsymbol{\theta}} \bar{\psi}$, aufgeführt. Es ergibt sich für $I = 1 \dots NV$:

$$\begin{aligned} q_I &= \psi_A(\boldsymbol{\varepsilon}_A) - \psi_{M,I}(\boldsymbol{\varepsilon}_I) \\ &+ \left(1 - \sum_{J=1}^{NV} \theta_J\right) [\mathbf{C}_A : \boldsymbol{\varepsilon}_A] : \mathbf{C}^* : [\mathbf{C}_M : \boldsymbol{\varepsilon}_I^t + \Delta \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}_A] \\ &+ \sum_{J=1}^{NV} \{ \theta_J [\mathbf{C}_M : (\boldsymbol{\varepsilon}_J - \boldsymbol{\varepsilon}_J^t)] : \mathbf{C}^* : [\mathbf{C}_A : \boldsymbol{\varepsilon}_I^t + \Delta \mathbf{C} : (\boldsymbol{\varepsilon}_J - \boldsymbol{\varepsilon}_J^t)] \} \end{aligned} \quad (5.23)$$

Wie bereits angedeutet, sind diese im Folgenden als *treibende Kräfte* betitelten Größen¹ Bestandteil der in Kapitel 6 dargestellten Verfahren. Die effektive Materialantwort in Form der Spannungen $\sigma = \partial_{\epsilon} \bar{\psi}_{rel}$ lässt sich abschließend laut Leonhardt (2007) durch

$$\begin{aligned} \sigma_C = & \left(1 - \sum_{J=1}^{NV} \theta_J \right) [C_A : \epsilon_A] : [C^* : C_M] \\ & + \sum_{I=1}^{NV} \{ \theta_I [C_M : (\epsilon_I - \epsilon_I^t)] : [C^* : C_A] \} \end{aligned} \quad (5.24)$$

mit C^* gemäß (5.21) angeben.

5.4. Poly-Konvexifizierung

In Anlehnung der Erläuterungen in Kapitel 4.3 stellt sich die Polykonvexifizierung als vergleichbar mit der Konvexifizierung unter Berücksichtigung zusätzlicher Restriktionen dar. Die hier als

$$g_1 = \epsilon - \left(1 - \sum_{I=1}^{NV} \theta_I \right) \epsilon_A - \sum_{I=1}^{NV} \theta_I \epsilon_I = 0 \quad (5.25)$$

definierte Restriktion bezüglich der Konvexität der Dehnungszustände bzw. der Länge differentieller Linienelemente bleibt unverändert bestehen (siehe (5.15)). Nun lassen sich die weiteren Bedingungen, denen eine Polykonvexifizierung unterliegt, als Konvexitätsbedingungen bezüglich differentieller Flächen- sowie Volumenelemente generell in der nichtlinearen Form

$$g_2 = \text{cof}(\mathbf{F}) - \left(1 - \sum_{I=1}^{NV} \theta_I \right) \text{cof}(\mathbf{F}_A) - \sum_{I=1}^{NV} \theta_I \text{cof}(\mathbf{F}_I) = 0 \quad (5.26)$$

$$g_3 = \det(\mathbf{F}) - \left(1 - \sum_{I=1}^{NV} \theta_I \right) \det(\mathbf{F}_A) - \sum_{I=1}^{NV} \theta_I \det(\mathbf{F}_I) = 0 \quad (5.27)$$

auffassen. Eine konsistente Linearisierung der Bedingungen (5.26) sowie (5.27), beispielsweise durch Austausch der Terme $\det(\mathbf{F}_\bullet)$ durch $1 + \text{spur}(\epsilon_\bullet)$ in (5.27), würde jedoch keine Änderung gegenüber der linearisierten Konvexifizierung ergeben. Dieser Umstand ist darin begründet, dass die Einhaltung der Restriktion (5.25) bezüglich der einzelnen Komponenten der Dehnungszustände auch die weiteren, linear von den Dehnungskomponenten abhängenden Restriktionen identisch erfüllt.

Aus diesem Grund soll nun nicht die linearisierte Form hinsichtlich der Konvexität der Flächenelemente bzw. Volumenelemente betrachtet werden. Vielmehr wird $\mathbf{F}$ konsequent

¹Alternativ werden diese Größen in der Literatur in verschiedenen Zusammenhängen auch als *Konfigurationskräfte* oder auch *thermodynamisch konjugierte Kräfte* bezeichnet.

durch den Term $\mathbf{I} + \boldsymbol{\varepsilon}$ unter Vernachlässigung der Rotationen ersetzt. Dies entspricht zwar keiner konsistenten Linearisierung, jedoch sind beide Terme in physikalischer Hinsicht gleichbedeutend im Rahmen der jeweilig zu Grunde liegenden Kinematik (siehe Abschnitt 2.2). Damit lassen sich die für die Durchführung der Polykonvexifizierung zu berücksichtigenden Restriktionen als

$$\mathbf{g}_1 = \boldsymbol{\varepsilon} - \left(1 - \sum_{I=1}^{NV} \theta_I\right) \boldsymbol{\varepsilon}_A - \sum_{I=1}^{NV} \theta_I \boldsymbol{\varepsilon}_I = \mathbf{0} \quad (5.28)$$

$$\mathbf{g}_2 = \text{cof}(\mathbf{I} + \boldsymbol{\varepsilon}) - \left(1 - \sum_{I=1}^{NV} \theta_I\right) \text{cof}(\mathbf{I} + \boldsymbol{\varepsilon}_A) - \sum_{I=1}^{NV} \theta_I \text{cof}(\mathbf{I} + \boldsymbol{\varepsilon}_I) = \mathbf{0} \quad (5.29)$$

$$g_3 = \det(\mathbf{I} + \boldsymbol{\varepsilon}) - \left(1 - \sum_{I=1}^{NV} \theta_I\right) \det(\mathbf{I} + \boldsymbol{\varepsilon}_A) - \sum_{I=1}^{NV} \theta_I \det(\mathbf{I} + \boldsymbol{\varepsilon}_I) = 0 \quad (5.30)$$

darstellen. Die Polykonvexifizierung ist demnach im Rahmen dieser Arbeit durch das Minimierungsproblem

$$\bar{\psi} = \left(1 - \sum_{I=1}^{NV} \theta_I\right) \psi_A(\boldsymbol{\varepsilon}_A) + \sum_{I=1}^{NV} \theta_I \psi_{M,I}(\boldsymbol{\varepsilon}_I, \boldsymbol{\varepsilon}_I^t) \quad (5.31)$$

$$P\psi = \min \left\{ \bar{\psi}; \theta_I, \boldsymbol{\varepsilon}_A, \boldsymbol{\varepsilon}_I, \theta_I \geq 0, \sum_{I=1}^{NV} \theta_I \leq 1, \mathbf{g}_1 = \mathbf{0}, \mathbf{g}_2 = \mathbf{0}, g_3 = 0 \right\} \quad (5.32)$$

, $I = 1 \dots NV$

unter Berücksichtigung von (5.28) bis (5.30) definiert. Analog zum Vorgehen in Kapitel 5.3 dient die Lagrange-Funktion

$$\mathcal{L} = \left(1 - \sum_{I=1}^{NV} \theta_I\right) \psi_A(\boldsymbol{\varepsilon}_A) + \sum_{I=1}^{NV} \theta_I \psi_{M,I}(\boldsymbol{\varepsilon}_I, \boldsymbol{\varepsilon}_I^t) + \boldsymbol{\lambda} : \mathbf{g}_1 + \boldsymbol{\mu} : \mathbf{g}_2 + \nu g_3 \quad (5.33)$$

als Basis für die weiteren Herleitungen.

Auf Grund der nichtlinearen Restriktionen lässt sich für die Polykonvexifizierung keine analytische Form der relaxierten Energiedichte angeben. Die Bestimmung der optimalen Dehnungszustände muss also in den gleichen iterativen Prozess eingebunden werden wie die Berechnung der aktuellen Volumenfraktionen. Die treibenden Kräfte lassen sich durch

$$\begin{aligned} q_I &= -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \theta_I} \\ &= \psi_A(\boldsymbol{\varepsilon}_A) - \psi_I(\boldsymbol{\varepsilon}_I) - \boldsymbol{\lambda} : (\boldsymbol{\varepsilon}_A - \boldsymbol{\varepsilon}_I) \\ &\quad - \boldsymbol{\mu} : [\text{cof}(\mathbf{I} + \boldsymbol{\varepsilon}_A) - \text{cof}(\mathbf{I} + \boldsymbol{\varepsilon}_I)] \\ &\quad - \nu [\det(\mathbf{I} + \boldsymbol{\varepsilon}_A) - \det(\mathbf{I} + \boldsymbol{\varepsilon}_I)] \\ &\quad , I = 1 \dots NV \end{aligned} \quad (5.34)$$

für die Volumenfraktionen sowie

$$\mathbf{q}_{\varepsilon_A} = -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varepsilon_A} = -\mathbf{C}_A : \varepsilon_A + \boldsymbol{\lambda} + \boldsymbol{\mu} : \text{cof}'(\mathbf{I} + \varepsilon_A) + \nu \text{cof}(\mathbf{I} + \varepsilon_A) \quad (5.35)$$

$$\mathbf{q}_{\varepsilon_I} = -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varepsilon_I} = -\mathbf{C}_M : (\varepsilon_I - \varepsilon_I^t) + \boldsymbol{\lambda} + \boldsymbol{\mu} : \text{cof}'(\mathbf{I} + \varepsilon_I) + \nu \text{cof}(\mathbf{I} + \varepsilon_I) \quad (5.36)$$

für die optimalen Dehnungszustände angeben. Dabei gilt die Definition

$$\begin{aligned} \text{cof}'(\mathbf{A}) &:= \det(\mathbf{A}) [A_{ij}^{T-1} A_{kl}^{T-1} - A_{kj}^{T-1} A_{il}^{T-1}] \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j \mathbf{e}_k \mathbf{e}_l \\ &= \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & A_{33} & -A_{32} \\ 0 & -A_{23} & A_{22} \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ -A_{33} & 0 & A_{31} \\ A_{23} & 0 & -A_{21} \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ A_{32} & -A_{31} & 0 \\ -A_{22} & A_{21} & 0 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} 0 & -A_{33} & A_{32} \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & A_{13} & -A_{12} \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} A_{33} & 0 & -A_{31} \\ 0 & 0 & 0 \\ -A_{13} & 0 & A_{11} \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} -A_{32} & A_{31} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ A_{12} & -A_{11} & 0 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} 0 & A_{23} & -A_{22} \\ 0 & -A_{13} & A_{12} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} -A_{23} & 0 & A_{21} \\ A_{13} & 0 & -A_{11} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} A_{22} & -A_{21} & 0 \\ -A_{12} & A_{11} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (5.37)$$

Die Umstellung der Stationaritätsbedingungen $\mathbf{q}_{\varepsilon_A} = \mathbf{0}$ sowie $\mathbf{q}_{\varepsilon_I} = \mathbf{0}$ nach

$$\boldsymbol{\lambda} = \mathbf{C}_A : \varepsilon_A - \boldsymbol{\mu} : \text{cof}'(\mathbf{I} + \varepsilon_A) - \nu \text{cof}(\mathbf{I} + \varepsilon_A) \quad (5.38)$$

$$= \mathbf{C}_M : (\varepsilon_I - \varepsilon_I^t) - \boldsymbol{\mu} : \text{cof}'(\mathbf{I} + \varepsilon_I) - \nu \text{cof}(\mathbf{I} + \varepsilon_I) \quad (5.39)$$

zeigt im direkten Vergleich zu (5.17) aus Abschnitt 5.3, dass die Spannungen $\mathbf{C}_A : \varepsilon_A$ bzw. $\mathbf{C}_M : (\varepsilon_I - \varepsilon_I^t)$ innerhalb der verschiedenen Festkörperphasen nicht zwangsläufig identisch sein müssen.

5.5. Rang-1-Konvexifizierung

In diesem Abschnitt wird die Herleitung einer relaxierten Energiedichte auf Basis laminarer Mikrostrukturen dargestellt, die auf den in Kapitel 4.5 eingeführten Grundlagen beruht. Die hier präsentierte Energiedichte ist dabei als Approximation der sogenannten *Rang-1-konvexen Hülle* zu verstehen, die eine obere Schranke der quasikonvexen Hülle darstellt.

Die auf laminaren Strukturen basierenden Relaxierungsverfahren sind nicht nur physikalisch unbedenklich hinsichtlich der lokalen Zusammenhänge zwischen den einzelnen Deformationszuständen der Phasen. Weiterhin weisen die angenommenen Mikrostrukturen eine bemerkenswerte Ähnlichkeit zu realen mikroskopischen Gefügen auf, die mittels Mikroskopien visualisiert wurden (siehe z.B. Otsuka and Wayman (1999)). Trotz der mathematischen und physikalischen Motivation der durch die Rang-1-Konvexifizierung bezüglich Laminaten beliebiger Ordnung erzielbaren Energiedichten bleibt die strenge mathematische Forderung nach Quasikonvexität im Allgemeinen unerfüllt.

Während bei der Konvexifizierung und Polykonvexifizierung keine Annahmen bezüglich der geometrischen Anordnung von Bereichen homogener Phasen getätigt werden, setzt man diese hier durch die Wahl einer konkreten Mikrostruktur, welche sich im Verlauf der Belastung einstellen kann, voraus. Die Unterscheidung zwischen den Dehnungszuständen koexistierender Phasen unterliegt dabei in diesem Fall der Definition eines den lokalen Verschiebungen überlagerten Perturbationsfeldes $\mathbf{u}^{pert}$. Darin ist auch begründet, dass innerhalb dieses Verfahrens nicht die Dehnungszustände der unterschiedlichen Phasen als interne Variablen fungieren, sondern aus erwähnter, konkret gewählter Verschiebungsfluktuation resultierende, geometrische Größen.

Der Ansatz für die bezüglich der elastischen Variablen relaxierte Energiedichte lautet demnach

$$\bar{\psi}_{rel} = \min \left\{ \int_{\mathcal{R} \vee \mathcal{E}} \psi(\boldsymbol{\varepsilon} + \nabla_{sym} \mathbf{u}^{pert}) dV; \mathcal{V}_{el} \right\} . \quad (5.40)$$

Dabei bedingt die Beschränkung auf kleine Verformungen die Symmetrisierung des Gradienten von $\mathbf{u}^{pert}$. Ausgangspunkt der hier aufgeführten Herleitungen ist zunächst die Aufteilung des RVEs in die möglichen Hauptbestandteile Austenit und gesamter Martensit an Hand von Laminaten erster Ordnung. Abb. 5.4 dient der Anschauung dieses Vorgehens mittels einer zweidimensionalen Darstellung für ein angenommenes Verhältnis von Austenit zu Martensit von 30 : 70.

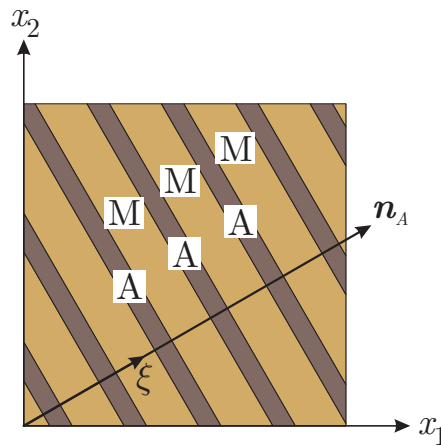
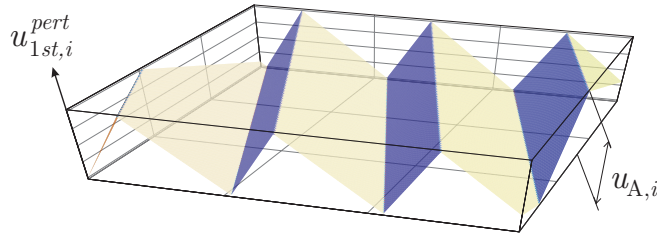


Abbildung 5.4.: Aufteilung der Hauptbestandteile Austenit (A) und Martensit (M) mittels Laminaten erster Ordnung

Einhergehend mit der Einführung der Lamine erster Ordnung wird nun eine Störung auf jede Komponente des homogenen Verschiebungsfeldes des RVEs aufgebracht. Gewählt wird die in Abb. 5.5 dargestellte Funktion $u_{1st,i}^{pert}$, die sich entlang einer Koordinate $\xi = \mathbf{x} \cdot \mathbf{n}_A$ periodisch fortsetzt. Die maximale durch das zusätzliche Feld entstehende Störung der Komponente i ist dabei als $\mathbf{u}_{A,i}$ bezeichnet. Dieses Vorgehen entspricht dabei exakt dem in Abschnitt 4.5 beschriebenen.

Für die m -te Periodizitätszelle der gewählten Mikrostruktur lässt sich das zusätzliche Ver-

Abbildung 5.5.: Perturbationen entlang der Richtung $\mathbf{n}_A$

schiebungsfeld demnach durch

$$\mathbf{u}_{1st}^{pert} = \begin{cases} \frac{1}{\theta_A} \mathbf{u}_A (\xi - m + 1) & , \text{ falls } m - 1 \leq \xi \leq m - 1 + \theta_A \\ -\frac{1}{\theta_M} \mathbf{u}_A (\xi - m) & , \text{ sonst} \end{cases} \quad (5.41)$$

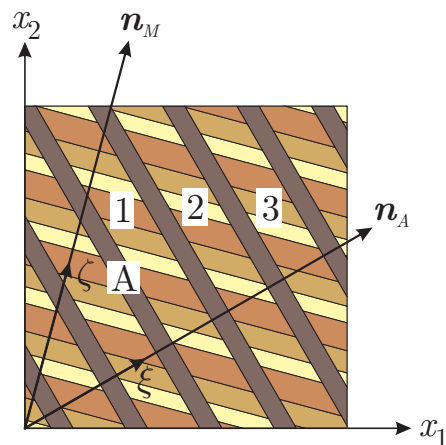
ausdrücken, wobei

$$\theta_A = 1 - \theta_M \quad (5.42)$$

$$\theta_M = \sum_{i=1}^{NV} \theta_i \quad (5.43)$$

zur kompakteren Darstellung eingeführt wurden.

Analog zum Vorgehen bei der Unterscheidung zwischen Austenit und gesamtem Martensit wird eine zusätzliche Störung definiert, die sich allerdings nur auf die mit Martensit gefüllten Bereiche auswirkt und entlang einer Koordinate $\zeta = \mathbf{x} \cdot \mathbf{n}_M$ ausgerichtet ist. Diese Störung basiert dabei auf der Definition sogenannter *Laminate zweiter Ordnung* in den Martensit-Regionen. Abb. 5.6 und 5.7 verdeutlichen diese Prozedur exemplarisch für eine kubisch-tetragonale Transformation ($NV = 3$).

Abbildung 5.6.: Unterteilung des Martensits in seine möglichen Varianten anhand von Laminaten zweiter Ordnung (exemplarisch für $NV = 3$)

Diese Aufteilung dient dem Zweck, dass sich eine Mischung aus Austenit- und gegebenenfalls mehreren Martensitanteilen einstellen kann, je nachdem welche Konfiguration das

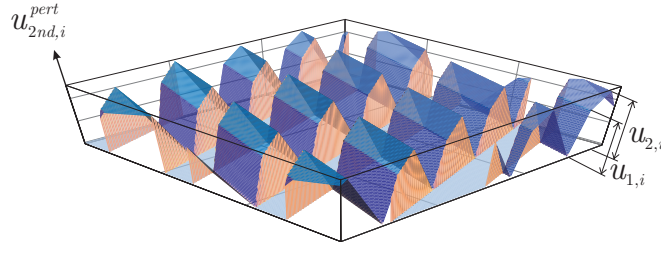


Abbildung 5.7.: Perturbationen entlang der Richtung $\mathbf{n}_M$ (exemplarisch für $NV = 3$)

niedrigste Energieniveau aufweist. Setzt man nun

$$\mathbf{u}_M^{pert} = -\frac{1}{\theta_M} \mathbf{u}_A (\xi - m) \quad , \quad (5.44)$$

so lässt sich die Perturbation des I -ten Martensit-Laminates in der n -ten Periodizitätszelle entlang $\mathbf{n}_M$ durch

$$\mathbf{u}_I^{pert} = \mathbf{u}_M^{pert} + \frac{1}{\theta_I} (\mathbf{u}_I - \mathbf{u}_{I-1}) \left(\zeta - \sum_{k=1}^{I-1} \theta_k - (n-1)\theta_M \right) + \mathbf{u}_{I-1} \quad (5.45)$$

mit

$$\mathbf{u}_0 = \mathbf{u}_{NV} = 0 \quad (5.46)$$

ausdrücken. Demnach erhält man für das gesamte Störungsfeld innerhalb des Martensit-Bereiches

$$\mathbf{u}_{2nd}^{pert} = \begin{cases} \mathbf{u}_1^{pert} & , \text{ falls } m-1+\theta_A \leq \xi \leq m \wedge n-1 \leq \zeta \leq n-1+\theta_1 \\ \mathbf{u}_2^{pert} & , \text{ falls } m-1+\theta_A \leq \xi \leq m \wedge n-1+\theta_1 \leq \zeta \leq n-1+\theta_1+\theta_2 \\ \vdots & \\ 0 & , \text{ sonst} \end{cases} \quad (5.47)$$

Insgesamt ergibt sich also

$$\mathbf{u}^{pert} = \mathbf{u}_{1st}^{pert} + \mathbf{u}_{2nd}^{pert} \quad (5.48)$$

als Perturbationsfeld der homogenen Verschiebungen gemäß Abb. 5.8, in der dieses zum besseren Verständnis in zwei verschiedenen Perspektiven dargestellt ist.

Zusätzlich zu der in Abschnitt 4.5 bereits beschriebenen Inkompatibilität des Perturbationsfelds am Rand des RVEs stellt sich hier das Problem ein, dass die Verschiebungen an der Grenze zwischen Austenit- und Martensitbereich ebenfalls nicht kompatibel sind. Diese Diskrepanz lässt sich mit einer weiteren Annahme entschärfen, dass die Lamine zweiter Ordnung unendlich feiner sind als die Lamine erster Ordnung, was wiederum im Rahmen der verwendeten Theorie in keinerlei Widerspruch mündet und beispielsweise durch Ball and James (1987) bekräftigt wird.

Das gesamte Verschiebungsfeld auf der Mikroebene ist nun in Abhängigkeit der von der übergeordneten Skale bekannten, im Kontext dieser Arbeit als *mesoskopisch* zu bezeichnenden Dehnungen ε und den räumlichen Koordinaten $\mathbf{x}$ der Mikroskala zu

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \varepsilon \cdot \mathbf{x} + \mathbf{u}^{pert} \quad (5.49)$$

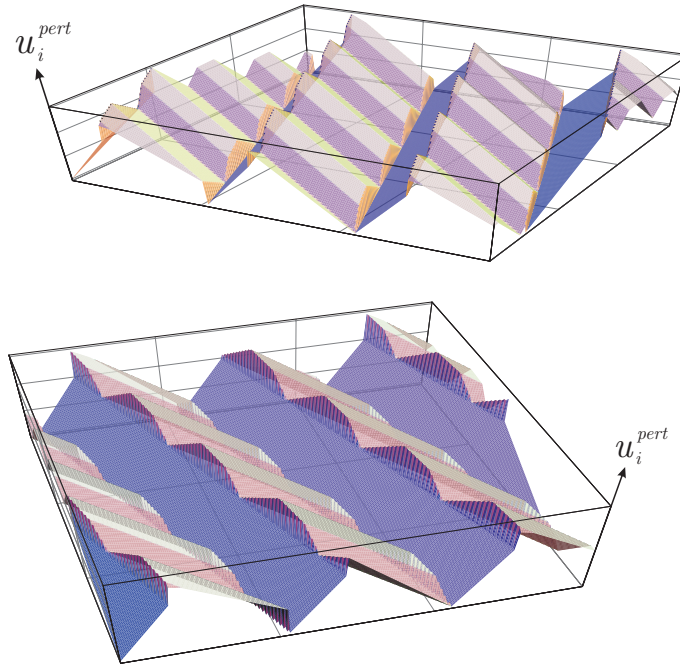


Abbildung 5.8.: Komplettes Störungsfeld innerhalb des RVE (exemplarisch für $NV = 3$)

definiert, woraus sich aus dem Zusammenhang

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2} (\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u} + \mathbf{u} \nabla_{\mathbf{x}}) \quad (5.50)$$

die Dehnungszustände in den einzelnen Phasengebieten zu

$$\boldsymbol{\varepsilon}_A = \boldsymbol{\varepsilon} + \frac{1}{\theta_A} \mathbf{n}_A \otimes_S \mathbf{u}_A \quad (5.51)$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}_I = \boldsymbol{\varepsilon} - \frac{1}{\theta_M} \mathbf{n}_A \otimes_S \mathbf{u}_A + \frac{1}{\theta_I} \mathbf{n}_M \otimes_S (\mathbf{u}_I - \mathbf{u}_{I-1}) \quad (5.52)$$

mit

$$\mathbf{a} \otimes_S \mathbf{b} := \frac{1}{2} (\mathbf{a} \otimes \mathbf{b} + \mathbf{b} \otimes \mathbf{a}) \quad (5.53)$$

ergeben. Trotz der Tatsache, dass die lokalen Verschiebungen nicht kompatibel sind, lässt sich aus

$$\int_{\mathcal{RVE}} (\boldsymbol{\varepsilon} + \nabla_{\text{sym}} \mathbf{u}^{\text{pert}}) dV = \theta_A \boldsymbol{\varepsilon}_A + \sum_{I=1}^{NV} \theta_I \boldsymbol{\varepsilon}_I = \boldsymbol{\varepsilon} \quad (5.54)$$

erkennen, dass die Kompatibilität hinsichtlich der aus dem Verschiebungsfeld abgeleiteten Dehnungszustände im Mittel über das RVE gegeben ist. Berücksichtigt man diese Ansätze nun in der gemittelten Energiedichte

$$\bar{\psi} = \left(1 - \sum_{I=1}^{NV} \theta_I \right) \psi_A(\boldsymbol{\varepsilon}_A) + \sum_{I=1}^{NV} \theta_I \psi_{M,I}(\boldsymbol{\varepsilon}_I, \boldsymbol{\varepsilon}_I^t) \quad , \quad (5.55)$$

so ergibt sich zunächst durch

$$\begin{aligned}
 \bar{\psi} = & \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} : \bar{\mathbf{C}} : \boldsymbol{\varepsilon} + \boldsymbol{\varepsilon} : [(\Delta \mathbf{C} \cdot \mathbf{n}_A) \cdot \mathbf{u}_A] + \frac{1}{2} \mathbf{u}_A \cdot \hat{\mathbf{C}} \cdot \mathbf{u}_A - \bar{\boldsymbol{\tau}} : \boldsymbol{\varepsilon} \\
 & + \frac{1}{\theta_M} (\bar{\boldsymbol{\tau}} \cdot \mathbf{n}_A) \cdot \mathbf{u}_A + \sum_{I=1}^{NV} \left\{ \frac{1}{2\theta_I} (\mathbf{u}_I - \mathbf{u}_{I-1}) \cdot \hat{\mathbf{C}}_M \cdot (\mathbf{u}_I - \mathbf{u}_{I-1}) \right\} \\
 & - \sum_{I=1}^{NV} \{ \boldsymbol{\tau}_I \cdot (\mathbf{u}_I - \mathbf{u}_{I-1}) \} \cdot \mathbf{n}_M + \bar{\mathbf{C}}
 \end{aligned} \quad (5.56)$$

eine die gewählte Mikrostruktur repräsentierende Energiedichte der Phasenmischung. Gleichung (5.56) enthält dabei folgende als Abkürzung eingeführte Größen:

$$\begin{aligned}
 \bar{\mathbf{C}} &:= \theta_A \mathbf{C}_A + \theta_M \mathbf{C}_M \\
 \Delta \mathbf{C} &:= \mathbf{C}_A - \mathbf{C}_M \\
 \tilde{\mathbf{C}} &:= \frac{1}{\theta_A} \mathbf{C}_A + \frac{1}{\theta_M} \mathbf{C}_M \\
 \hat{\mathbf{C}} &:= \mathbf{n}_A \cdot \tilde{\mathbf{C}} \cdot \mathbf{n}_A = n_{A,i} \tilde{C}_{ijkl} n_{A,l} \mathbf{e}_j \mathbf{e}_k \\
 \hat{\mathbf{C}}_M &:= \mathbf{n}_M \cdot \mathbf{C}_M \cdot \mathbf{n}_M = n_{M,i} C_{M,ijkl} n_{M,l} \mathbf{e}_j \mathbf{e}_k \\
 \boldsymbol{\tau}_I &:= \boldsymbol{\varepsilon}_I^t : \mathbf{C}_M \\
 \bar{\boldsymbol{\tau}} &:= \sum_{I=1}^{NV} \theta_I \boldsymbol{\tau}_I \\
 \bar{\mathbf{C}} &:= \theta_A \psi_{A,chem} + \theta_M \psi_{M,chem} + \frac{1}{2} \sum_{I=1}^{NV} \theta_I \boldsymbol{\tau}_I : \boldsymbol{\varepsilon}_I^t
 \end{aligned} \quad (5.57)$$

Es lässt sich erkennen, dass die Mikrostruktur durch insgesamt $4NV + 6$ zusätzliche Variablen beschrieben werden kann, wovon jede als unabhängig angesehen werden soll. Die Liste aller internen Variablen lässt sich also nun durch

$$\mathcal{V} = (\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_{NV}, \mathbf{u}_A, \mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_{NV-1}, \mathbf{n}_A, \mathbf{n}_M) \quad (5.58)$$

konkretisieren. Dabei werden lediglich die sogenannten *Amplituden* der Störung $\mathbf{u}_1$ bis $\mathbf{u}_{NV-1}$ zu den elastischen Variablen $\mathcal{V}_{el}$ gezählt.

Die optimalen Amplituden des Perturbationsfeldes $\mathbf{u}^*$ lassen sich demnach durch

$$\frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{u}_A} = \mathbf{0} \quad (5.59)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{u}_I} = \mathbf{0}, I = 1 \dots NV - 1 \quad (5.60)$$

zu

$$\mathbf{u}_A^* = -\hat{\mathbf{C}}^{-1} \cdot \left(\Delta \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon} + \frac{1}{\theta_M} \bar{\boldsymbol{\tau}} \right) \cdot \mathbf{n}_A \quad (5.61)$$

$$\mathbf{u}_I^* = -\frac{1}{\theta_M} \hat{\mathbf{C}}_M^{-1} \cdot \left(\sum_{i=1}^I \sum_{j=I+1}^{NV} \{ \theta_i \theta_j (\boldsymbol{\tau}_j - \boldsymbol{\tau}_i) \} \right) \cdot \mathbf{n}_M \quad (5.62)$$

bestimmen. Durch Einsetzen dieser Resultate in (5.56) lässt sich die gemittelte Energiedichte zu

$$\begin{aligned} \bar{\psi}_{rel} = & \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} : \bar{\mathbf{C}} : \boldsymbol{\varepsilon} + \boldsymbol{\varepsilon} : [(\Delta \mathbf{C} \cdot \mathbf{n}_A) \cdot \mathbf{u}_A^*] + \frac{1}{2} \mathbf{u}_A^* \cdot \hat{\mathbf{C}} \cdot \mathbf{u}_A^* - \bar{\boldsymbol{\tau}} : \boldsymbol{\varepsilon} \\ & + \frac{1}{\theta_M} (\bar{\boldsymbol{\tau}} \cdot \mathbf{n}_A) \cdot \mathbf{u}_A^* - \frac{1}{2} \sum_{I=1}^{NV} \{ \boldsymbol{\tau}_I \cdot (\mathbf{u}_I^* - \mathbf{u}_{I-1}^*) \} \cdot \mathbf{n}_M + \bar{\mathcal{C}} \end{aligned} \quad (5.63)$$

umformulieren. Berücksichtigt man zusätzlich $\mathbf{u}_0^* = \mathbf{u}_{NV}^* = \mathbf{0}$, so stellt (5.63) nun eine recht kompakte Form der resultierenden Energiedichte auf Basis der angenommenen Mikrostruktur dar. Zur Behandlung der übrigen internen Variablen seien analog zu den Herleitungen der vorangegangenen Kapitel die Größen

$$\begin{aligned} q_I = & \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} : \Delta \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{n}_A \cdot \mathcal{K} \cdot \mathcal{H}_I + \frac{1}{2} \mathbf{u}_A^* \cdot \check{\mathbf{C}} \cdot \mathbf{u}_A^* + \boldsymbol{\tau}_I : \boldsymbol{\varepsilon} \\ & + \frac{1}{2} \theta_M^2 \mathbf{n}_M \cdot \hat{\boldsymbol{\tau}}_I \cdot \mathbf{n}_M - \frac{1}{2} \boldsymbol{\tau}_I : \boldsymbol{\varepsilon}_I^t + \psi_{A,chem} - \psi_{I,chem} \end{aligned} \quad (5.64)$$

$$\begin{aligned} q_{\mathbf{n}_A} = & -\boldsymbol{\varepsilon} : \left[\mathbf{u}_A^* \cdot \Delta \mathbf{C} + \frac{\partial \mathbf{u}_A^*}{\partial \mathbf{n}_A} \cdot (\mathbf{n}_A \cdot \Delta \mathbf{C}) \right] \\ & - \frac{1}{2} \left[2 \frac{\partial \mathbf{u}_A^*}{\partial \mathbf{n}_A} \cdot \hat{\mathbf{C}} \cdot \mathbf{u}_A^* + \left(\frac{\partial \hat{\mathbf{C}}}{\partial \mathbf{n}_A} \cdot \mathbf{u}_A^* \right) \cdot \mathbf{u}_A^* \right] \\ & - \frac{1}{\theta_M} \left[\mathbf{u}_A^* \cdot \bar{\boldsymbol{\tau}} + \frac{\partial \mathbf{u}_A^*}{\partial \mathbf{n}_A} \cdot \bar{\boldsymbol{\tau}} \cdot \mathbf{n}_A \right] \end{aligned} \quad (5.65)$$

$$q_{\mathbf{n}_M} = \frac{1}{2} \sum_{I=1}^{NV-1} \left\{ \frac{\partial \mathbf{u}_I}{\partial \mathbf{n}_M} \cdot (\boldsymbol{\tau}_I - \boldsymbol{\tau}_{I+1}) \cdot \mathbf{n}_M + (\boldsymbol{\tau}_I - \boldsymbol{\tau}_{I+1}) \cdot \mathbf{u}_I \right\} \quad (5.66)$$

definiert. Dabei dienen

$$\begin{aligned} \mathcal{K} &:= \boldsymbol{\varepsilon} : \Delta \mathbf{C} + \frac{1}{\theta_M} \bar{\boldsymbol{\tau}} \\ \mathcal{H}_I &:= \hat{\mathbf{C}}^{-1} \cdot (\check{\mathbf{C}} \cdot \mathbf{u}_A^* + \tilde{\boldsymbol{\tau}}_I \cdot \mathbf{n}_A) \\ \check{\mathbf{C}} &:= \mathbf{n}_A \cdot \left(\frac{1}{\theta_A^2} \mathbf{C}_A - \frac{1}{\theta_M^2} \mathbf{C}_M \right) \cdot \mathbf{n}_A \\ \hat{\boldsymbol{\tau}}_I &:= \tilde{\boldsymbol{\tau}}_I \cdot \hat{\mathbf{C}}_M^{-1} \cdot \tilde{\boldsymbol{\tau}}_I \\ \tilde{\boldsymbol{\tau}}_I &:= \frac{1}{\theta_M} \left(\boldsymbol{\tau}_I - \frac{1}{\theta_M} \bar{\boldsymbol{\tau}} \right) \end{aligned} \quad (5.67)$$

sowie

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \mathbf{u}_A^*}{\partial \mathbf{n}_A} &:= - \left(\kappa + \frac{\partial \hat{\mathbf{C}}}{\partial \mathbf{n}_A} \cdot \mathbf{u}_A^* \right) \cdot \hat{\mathbf{C}}^{-1} \\
\frac{\partial \hat{\mathbf{C}}}{\partial \mathbf{n}_A} &:= \left(\tilde{C}_{ijkl} n_{A,l} + n_{A,l} \tilde{C}_{ljk i} \right) \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j \mathbf{e}_k \\
\frac{\partial \mathbf{u}_I^*}{\partial \mathbf{n}_M} &:= - \left(\frac{1}{\theta_M} \mathcal{A}_1 + \frac{\partial \hat{\mathbf{C}}_M}{\partial \mathbf{n}_m} \cdot \mathbf{u}_I^* \right) \cdot \hat{\mathbf{C}}_M^{-1} \\
\mathcal{A}_1 &:= \sum_{i=1}^I \sum_{j=I+1}^{NV} \{ \theta_i \theta_j (\boldsymbol{\tau}_j - \boldsymbol{\tau}_i) \} \\
\frac{\partial \hat{\mathbf{C}}_M}{\partial \mathbf{n}_m} &:= (C_{M,ijkl} n_{M,l} + n_{M,l} C_{M,ljki}) \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j \mathbf{e}_k
\end{aligned} \tag{5.68}$$

als Abkürzungen. Als effektive Spannungen ergeben sich analog zu Abschnitt 5.3 aus der partiellen Ableitung des Energiefunktionals $\bar{\psi}_{rel}$ bezüglich der Dehnungen

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\sigma}_R &= \bar{\mathbf{C}} : \boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon} : \left[(\Delta \mathbf{C} \cdot \mathbf{n}_A) \cdot \hat{\mathbf{C}}^{-1} \cdot (\mathbf{n}_A \cdot \Delta \mathbf{C}) \right] \\
&\quad - \frac{1}{\theta_M} (\Delta \mathbf{C} \cdot \mathbf{n}_A) \cdot \hat{\mathbf{C}}^{-1} \cdot (\bar{\boldsymbol{\tau}} \cdot \mathbf{n}_A) - \bar{\boldsymbol{\tau}}
\end{aligned} \tag{5.69}$$

mit den in (5.57) definierten Abkürzungen.

6. Dissipationsfunktionale und Evolutionsgleichungen

6.1. Grundlegendes Konzept

Auf der Basis der in Kapitel 5 hergeleiteten Energiefunktionen $\bar{\psi}_{rel}(\boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{p})$ bedarf es nun der Entwicklung probater Evolutionsgesetze zur Bestimmung der inelastischen Variablen $\mathcal{V}_{diss}$. Im Gegensatz zur Verwendung der kondensierten Energie wird dazu die im Material eingebrachte Leistung

$$\mathbb{L} = \frac{d\bar{\psi}_{rel}}{dt} + \Delta(\dot{\mathbf{p}}) \quad (6.1)$$

betrachtet, wobei nun $\mathbf{p}$ im Folgenden als Liste aller dissipativen Variablen verwendet wird. Das sogenannte *Dissipationsfunktional* Δ misst dabei praktisch den Anteil an dissipierter Energie pro Zeit bei Änderungen von internen Variablen $\dot{\mathbf{p}}$. Die zeitliche Ableitung der jeweiligen Energiedichte kann dabei generell durch

$$\frac{d\bar{\psi}_{rel}}{dt} = \frac{\partial \bar{\psi}_{rel}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} + \frac{\partial \bar{\psi}_{rel}}{\partial \mathbf{p}} \cdot \dot{\mathbf{p}} \quad (6.2)$$

unter der Voraussetzung, dass $\mathbf{p}$ lediglich skalare Variablen beinhaltet, angegeben werden. Mit der klassischen Definition $\boldsymbol{\sigma} := \partial \psi / \partial \boldsymbol{\varepsilon}$ sowie den in Kapitel 5 definierten treibenden Kräften $\mathbf{q} := -\partial \psi / \partial \mathbf{p}$ lässt sich (6.2) zu

$$\frac{d\bar{\psi}_{rel}}{dt} = \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} - \mathbf{q} \cdot \dot{\mathbf{p}} \quad (6.3)$$

umschreiben. Die gesamte Leistung ergibt sich damit zu

$$\mathbb{L} = \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} - \mathbf{q} \cdot \dot{\mathbf{p}} + \Delta(\dot{\mathbf{p}}) \quad (6.4)$$

Entgegen der Anwendung des *Postulates der maximalen Dissipation*, bei welchem die Raten der internen Variablen durch die Maximierung der in der elementaren Thermodynamik gebräuchlichen Definition der Dissipation $D := \mathbf{q} \cdot \dot{\mathbf{p}}$ berechnet werden, soll hier von der Annahme ausgegangen werden, dass diese Raten die Gesamtleistung $\mathbb{L}$ minimieren, was dem *Prinzip der kleinsten Wirkung* entspricht. Hackl and Fischer (2008) zeigen, dass diese eventuell konträr erscheinenden Vorgehensweisen für zahlreiche Beispiele zu identischen Resultaten hinsichtlich der hergeleiteten Evolutionsgleichungen führen und sogar ineinander überführt werden können.

Im konkreten Fall der hier durchgeführten Modellierung gilt es also zunächst zu unterscheiden, ob es sich bei den betrachteten Variablen um die Volumenfraktionen θ_I (Restriktion (5.10) auf S.47) handelt oder für den Fall der Rang-1-Konvexifizierung um die Orientierungswinkel der Lamine $\mathbf{n}_A$ bzw. $\mathbf{n}_M$ (unrestringiert). Betrachtet sei zunächst der nicht triviale Fall der Stationarität der Leistung bezüglich der Volumenfraktionen. Dabei treten

für $\mathbf{p} \in \{\theta_1, \dots, \theta_{NV}\}$ die sogenannten *Karush–Kuhn–Tucker–Bedingungen* in Kraft. Diese lauten

$$\frac{\partial \mathbb{L}}{\partial \dot{\theta}_I} = - \sum_{i=1}^{NV} \Lambda_i \frac{\partial \dot{r}_i}{\partial \dot{\theta}_I} - \Gamma \frac{\partial \dot{\bar{r}}}{\partial \dot{\theta}_I}, \quad i = 1 \dots NV \quad (6.5)$$

$$0 = r_i \Lambda_i, \quad i = 1 \dots NV \quad (6.6)$$

$$0 \geq r_i, \quad i = 1 \dots NV \quad (6.7)$$

$$0 \leq \Lambda_i, \quad i = 1 \dots NV \quad (6.8)$$

$$0 = \bar{r} \Gamma \quad (6.9)$$

$$0 \geq \bar{r} \quad (6.10)$$

$$0 \leq \Gamma \quad (6.11)$$

für folgende Definitionen der Restriktionen

$$r_I := -\theta_I \leq 0, \quad I = 1 \dots NV \quad ; \quad \bar{r} := \sum_{I=1}^{NV} \theta_I - 1 \leq 0 \quad . \quad (6.12)$$

Einsetzen dieser Zusammenhänge sowie (6.4) in (6.5) ergibt für jede Martensit–Variante I

$$\frac{\partial \mathbb{L}}{\partial \dot{\theta}_I} = -q_I + \frac{\partial \Delta}{\partial \dot{\theta}_I} = \Lambda_I - \Gamma \quad . \quad (6.13)$$

Die Umstellung dieser Gleichung gemäß

$$\underbrace{q_I + \Lambda_I - \Gamma}_{=: q_I^{enh}} = \frac{\partial \Delta}{\partial \dot{\theta}_I} \quad (6.14)$$

lässt eine anschauliche Deutung der Terme auf der linken Seite von (6.14) zu, die sich zu einer *erweiterten treibenden Kraft* q_I^{enh} zusammenfassen lassen. Droht beispielsweise die Summe einer bestimmten Volumenfraktion den Wert 1 zu übersteigen, da die korrespondierende treibende Kraft weiterhin einen Anstieg dieser Variable bedingt, so muss Γ aktiviert werden ($\dot{\Gamma} > 0$), woraufhin q_I abgemindert wird bis durch q_I^{enh} keine Notwendigkeit der Erhöhung dieser Volumenfraktion mehr besteht. Analog verhält es sich mit den Werten Λ_I bei Verletzung der Restriktionen r_I . Die Behandlung der Karush–Kuhn–Tucker–Bedingungen (6.6) bis (6.11), die nachfolgend durch *KKT* abgekürzt werden, wird eingehend in Kapitel 7 beschrieben.

Die Stationaritätsbedingungen für die Laminat–Richtungsvektoren im Falle der Rang–1–Konvexifizierung reduzieren sich wegen nicht vorhandener Restriktionen auf

$$q_{\mathbf{n}_A} = \frac{\partial \Delta}{\partial \dot{\mathbf{n}}_A} \quad (6.15)$$

$$q_{\mathbf{n}_M} = \frac{\partial \Delta}{\partial \dot{\mathbf{n}}_M} \quad (6.16)$$

Die Gleichungen (6.14), (6.15) und (6.16) stellen somit grundlegend das Evolutionsgleichungssystem für die inelastischen Variablen dar, die nun mit Ausnahme der Terme $\partial \Delta / \partial \dot{\mathbf{p}}$

gegeben sind. Da bislang keine schlüssige Theorie zur Herleitung des Dissipationsfunktional Δ existiert, ist dies sinnvoll zu wählen. Basierend auf unterschiedlichen Annahmen bezüglich dieser Größe ergeben sich die in den nachfolgenden Abschnitten hergeleiteten Evolutionsgesetze.

Es besteht dabei noch die Möglichkeit, die Stationaritätsbedingung in Abhängigkeit der treibenden Kräfte $\mathbf{q}$ mit Hilfe der Legendre–Transformation und des dadurch erhaltenen, sogenannten *dualen Dissipationsfunktional* herzuleiten. Eine mögliche Motivation dafür könnte die gewünschte Verwendung einer bestimmten, in Anlehnung an die klassische Elastoplastizität „Fließbedingung“ genannte Bedingung für die notwendige Änderung der inelastischen Variablen sein. Den folgenden Abschnitten vorausgreifend sei an dieser Stelle erwähnt, dass sich im Rahmen dieser Arbeit sowie Schwane (2008) herausgestellt hat, dass sich bei der Wahl von Dissipationsfunktionalen, welche homogen erster Ordnung sind, die Verwendung des dualen Dissipationsfunktional als hilfreich und im Sinne einer geradlinigen Herleitung der Evolutionsgesetze vorteilhaft herausgestellt hat.

Die verallgemeinerte Form der Legendre–Transformation, die sogenannte *Legendre–Fenchel–Transformation*, bietet überdies die Möglichkeit einer durchweg algebraischen Herleitung der Evolutionsgesetze, auch wenn ihre Verwendung nicht zwingend erforderlich ist, da es sich bei den hier verwendeten Ansätzen für das Dissipationsfunktional stets um konvexe Funktionen handelt. Insbesondere können dadurch die Fließbedingungen in natürlicher Weise hergeleitet werden.

Die Definition des dualen Dissipationsfunktional kann über die klassische Legendre–Transformation

$$\Delta^* = \mathbf{q} \cdot \dot{\mathbf{p}} - \Delta \quad (6.17)$$

mit der zu (6.14) bzw. (6.15), (6.16) äquivalenten Bedingung

$$\dot{\mathbf{p}} = \frac{\partial \Delta^*(\mathbf{q})}{\partial \mathbf{q}} \quad (6.18)$$

bzw. über die Legendre–Fenchel–Transformation

$$\Delta^* = \max \{ \mathbf{q} \cdot \dot{\mathbf{p}} - \Delta; \dot{\mathbf{p}} \} \quad (6.19)$$

mit

$$\dot{\mathbf{p}} \in \partial \Delta^*(\mathbf{q}) \quad (6.20)$$

erfolgen. Dabei stellen (6.18) bzw. (6.20) die Evolutionsgleichungen bezüglich $\dot{\mathbf{p}}$ dar. Ist Δ ein Funktional, welches nicht homogen erster Ordnung ist, bietet sich der direkte Weg über (6.14) bzw. (6.15) sowie (6.16) zur Bestimmung der Evolutionsgleichungen an. Bei den Dissipationsfunktionalen, welche homogen erster Ordnung sind, stellt sich zunächst noch ein zusätzliches, im Folgenden erörtertes Problem im Zusammenhang mit der Legendre–(Fenchel–)Transformation ein.

Das Dissipationsfunktional Δ sei homogen erster Ordnung, d.h.

$$\frac{\partial \Delta(\dot{\mathbf{p}})}{\partial \dot{\mathbf{p}}} \cdot \dot{\mathbf{p}} = \Delta \quad (6.21)$$

Gemäß (6.14) bzw. (6.15), (6.16) gilt in diesem Fall $\mathbf{q} = \partial\Delta(\dot{\mathbf{p}}) / \partial\dot{\mathbf{p}}$ und damit

$$\mathbf{q} \cdot \dot{\mathbf{p}} = \Delta \quad (6.22)$$

Berücksichtigt man dies im Zusammenhang mit der Legendre–Transformationen (6.17) und (6.19) so wird die angesprochene Problematik deutlich: Das duale Dissipationsfunktional ist identisch gleich Null. Daher wird ein Term

$$\Delta^* = \sum_m \lambda_m \Phi_m \quad (6.23)$$

für das duale Dissipationsfunktional eingeführt, für den die Bedingungen

$$\lambda_m \Phi_m = 0, \lambda_m \geq 0, \Phi_m \leq 0 \quad (6.24)$$

angesetzt werden, welche analog zu drei der vier *KKT*B bei restringierten Optimierungsproblemen sind (siehe bspw. (6.6) bis (6.8)). Die Anzahl m der hier zu berücksichtigenden Größen ist dabei abhängig vom Ansatz für das Dissipationsfunktional und kann daher noch nicht konkretisiert werden.

In Anlehnung an die klassische Elastoplastizität stellen λ_m Konsistenzparameter sowie Φ_m Fließbedingungen dar, welche sich eben durch Anwendung der Legendre–Fenchel–Transformation auf natürliche Weise ergeben. Wird die Legendre–(Fenchel–)Transformation auf ein Funktional Δ angewandt, welches homogen erster Ordnung ist, führt dies immer auf die sogenannte *Indikatorfunktion*

$$\Delta^* = \begin{cases} 0 & , \Phi_m < 0 \ \forall m \\ \infty & , \Phi_m = 0 \ \exists m \end{cases} \quad (6.25)$$

für das duale Funktional Δ^* , welches auch in Abb. 6.1 dargestellt ist.

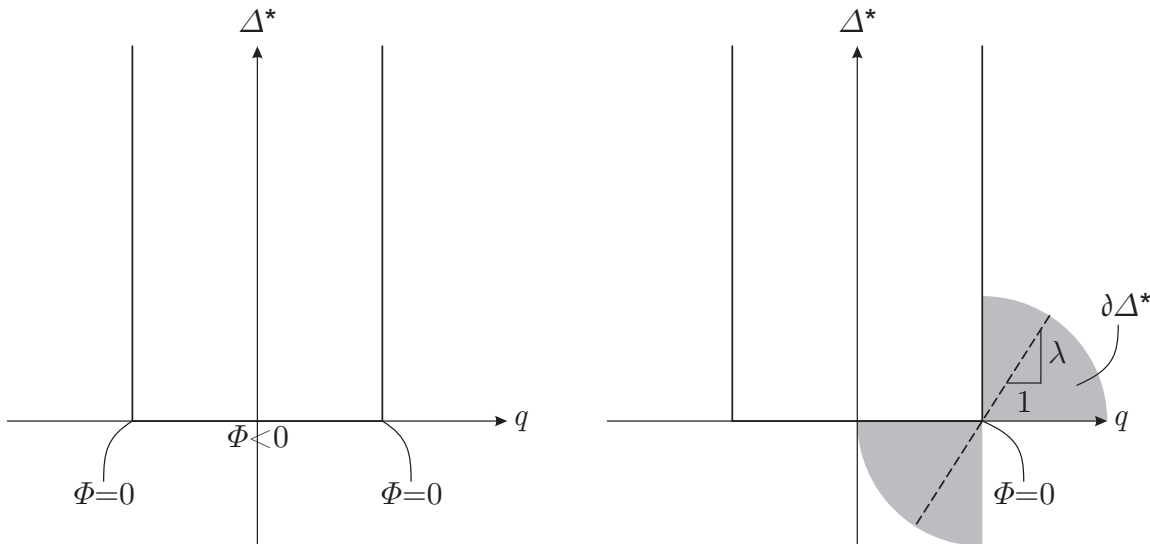


Abbildung 6.1.: Indikatorfunktion Δ^*

Die Evolutionsgesetze (6.18) bzw. (6.20) lassen sich damit nun zu

$$\dot{\mathbf{p}} \in \partial\Delta^*(\mathbf{q}) = \sum_m \lambda_m \partial\Phi_m(\mathbf{q}) \quad (6.26)$$

umformulieren, sofern das zu Grunde liegende Dissipationsfunktional Δ ein erster Ordnung homogenes ist.

Die rechte Darstellung in Abb. 6.1 verdeutlicht eine zusätzliche grafische Interpretation dieser Herleitungen. Aus der in Grau dargestellten, gesamten Menge aller sogenannten Subdifferenziale im Punkt $\Phi = 0$ (m sei hier exemplarisch zu 1 angenommen) wird eben die Tangente mit der „optimalen“ Steigung λ ausgewählt.

In den folgenden Abschnitten werden verschiedene Evolutionsgesetze für die inelastischen Variablen hergeleitet, die alle auf der Annahme eines bestimmten Dissipationsfunktionals Δ basieren. Diesbezüglich sei an dieser Stelle angemerkt, dass ausführliche Herleitungen der hier vorgestellten Evolutionsgesetze in Schwane (2008) enthalten sind.

6.2. Elasto–plastische Evolution

Im Rahmen dieses Kapitels sollen solche Evolutionsgesetze als *elasto–plastisch* betitelt werden, die sowohl Arten von Fließbedingungen (*yield functions*) zur scharfen Abgrenzung zwischen elastischem und inelastischem Materialverhalten als auch Konsistenzparameter zur strikten Einhaltung der Nichtpositivität dieser Bedingungen beinhalten. Damit verknüpft ist auch die Ratenunabhängigkeit des jeweiligen Evolutionsgesetzes. Dissipationsfunktionale, die homogen erster Ordnung sind, führen immer auf die im vorherigen Abschnitt erläuterte Indikatorfunktion samt den einzuhaltenden *KKT*B und somit auf Evolutionsgesetze, die als *elasto–plastisch* anzusehen sind.

6.2.1. von Mises–Typ

Der erste Ansatz für das Dissipationsfunktional lautet

$$\Delta = k \sqrt{\sum_{i=1}^{NVAR} \dot{p}_i^2} \quad , \quad (6.27)$$

wobei k einen Wichtungsfaktor darstellt, der später maßgeblich die Höhe der Hystereseschleife beeinflusst und somit auch eine Anpassung der Transformationsspannungen ermöglicht. Das Symbol *NVAR* steht dabei stellvertretend für die Anzahl interner Variablen, die je nach verwendetem Relaxierungsverfahren und Evolutionsgesetz unterschiedlich ist.

Mit Hilfe der Cauchy–Schwartzschen Ungleichung kann gezeigt werden, dass aus diesem Ansatz mit der Fließbedingung

$$\Phi = \sqrt{\sum_{i=1}^{NVAR} q_i^2} - k \quad (6.28)$$

die Evolutionsgleichungen für die inelastischen Variablen

$$\dot{p}_j = \lambda q_j \left(\sum_{i=1}^{NVAR} q_i^2 \right)^{-\frac{1}{2}} \quad (6.29)$$

unter Berücksichtigung von

$$\lambda \Phi = 0, \lambda \geq 0, \Phi \leq 0 \quad (6.30)$$

folgen.

6.2.2. Tresca–Typ

Das als nächstes betrachtete Dissipationsfunktional lautet

$$\Delta = k \sum_{i=1}^{NVAR} |\dot{p}_i| \quad (6.31)$$

Die für die Durchführung der Legendre–Fenchel–Transformation zur Findung des dualen Dissipationsfunktionals Δ^* zu verwendende Funktion

$$f = \mathbf{q} \cdot \dot{\mathbf{p}} - \Delta = \sum_{i=1}^{NVAR} q_i \dot{p}_i - k \sum_{i=1}^{NVAR} |\dot{p}_i| \quad (6.32)$$

besitzt ihr Maximum bei

$$\Delta^* = \begin{cases} 0 & , \text{für } \Phi_i < 0 \forall i \\ \infty & , \text{für } \Phi_i = 0 \exists i \end{cases} \quad (6.33)$$

mit

$$\Phi_i = |q_i| - k \quad (6.34)$$

Dies lässt sich in diesem Fall auch anhand der Abb. 6.2 grafisch herleiten, wobei die Berücksichtigung einer einzelnen Variable ausreichend ist.

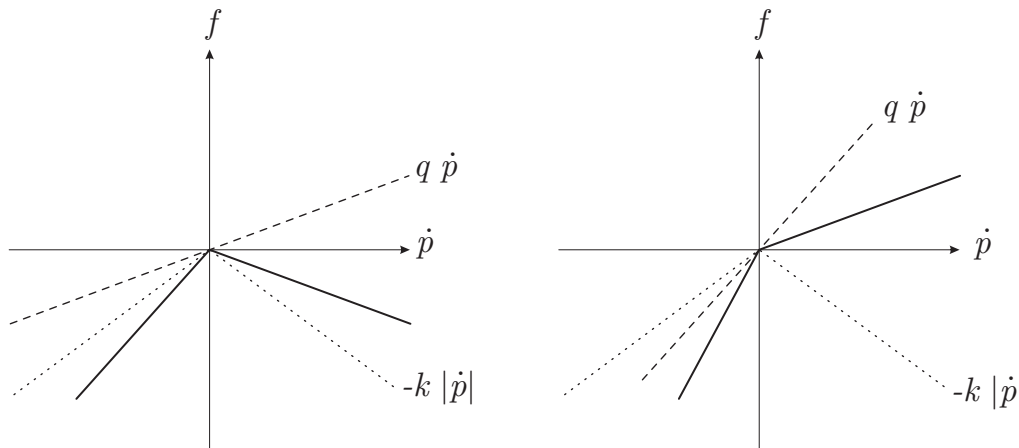


Abbildung 6.2.: Fallunterscheidung bzgl. des Maximums der Funktion f gemäß (6.32)

Bei moderater Steigung aller Geraden $q_i \dot{p}_i$ liegt das Maximum der betrachteten Funktion bei $\dot{p} = 0$ und beträgt ebenfalls Null. Übersteigt der Wert für eine der treibenden Kräfte q_i die

Steigung k der jeweils korrespondierenden Betragsfunktion $k |\dot{p}_i|$, so liegt das Maximum im Unendlichen und besitzt den Wert ∞ .

Analog zur Methodik der vorangegangenen Abschnitte lassen sich die entkoppelten Gleichungen

$$\dot{p}_i = \lambda_i \partial \Phi_i (q_i) = \lambda_i \text{sign} (q_i) \quad , i = 1 \dots NVAR \quad (6.35)$$

für die Evolution der verschiedenen Variablen herleiten.

6.3. Viskoplastische Evolution: Perzyna–Typ

Viskoplastische Evolutionsgesetze basieren darauf, dass diese zwar auch mit Hilfe von Fließbedingungen Φ formuliert werden können, die einen Indikator für einsetzende Inelastizität darstellen. Allerdings besteht in diesem Fall nicht die Notwendigkeit $\Phi = 0$, die durch etwaige Konsistenzparameter erzwungen werden müsste (siehe z.B. Simo and Hughes (1998)). Diese Charakteristik eines Evolutionsgesetzes lässt sich durch Annahme eines Dissipationfunktional erreichen, welches nicht homogen erster Ordnung ist. Damit einhergehend ist die direkte Abhängigkeit der Evolution der Variablen von der Zeit. Der hier betrachtete Ansatz lautet dementsprechend

$$\Delta = k_1 \sum_{i=1}^{NVAR} |\dot{p}_i| + k_2 \sum_{i=1}^{NVAR} \dot{p}_i^2 \quad . \quad (6.36)$$

Die Herleitung der Evolutionsgleichungen ist für diesen Fall auch direkt über (6.14) bzw. (6.15), (6.16) zu realisieren. Der hier vorgestellte Ansatz führt eben nicht auf die Indikatorfunktion zurück; das duale Dissipationsfunktional stellt eine stetige und stetig differenzierbare Funktion bezüglich der treibenden Kräfte q_i dar.

Wie bereits angedeutet lässt sich dennoch mit

$$\Phi_i = |q_i| - k_1 \quad (6.37)$$

eine Funktion definieren, die für jede Variable unabhängig elastisches von inelastischem Verhalten abgrenzt. In diesem Fall bedeutet $\Phi_i > 0$ ebenfalls die Notwendigkeit der Änderung der korrespondierenden Variable. Die bezüglich der einzelnen Variablen entkoppelten Evolutionsgleichungen lassen sich als

$$\dot{p}_i = \frac{1}{2 k_2} \text{sign} (q_i) \langle \Phi_i \rangle \quad (6.38)$$

darstellen, wobei

$$\langle \Phi_i \rangle = \begin{cases} \Phi_i & , \text{für } \Phi_i > 0 \\ 0 & , \text{sonst} \end{cases} \quad (6.39)$$

die sogenannte Rampenfunktion (*ramp function*) darstellt (siehe ebenfalls Simo and Hughes (1998)). Konkret wurde diese hier zu

$$\langle \Phi_i \rangle = \frac{1}{2} [1 + \text{sign} (\Phi_i)] \Phi_i \quad (6.40)$$

gewählt, was zu den Evolutionsgleichungen

$$\dot{p}_i = \frac{1}{4k_2} \operatorname{sign}(q_i) [1 + \operatorname{sign}(\Phi_i)] \Phi_i \quad (6.41)$$

führt.

7. Algorithmische Umsetzung spezifischer Modelle

In diesem Abschnitt wird die konkrete algorithmische Umsetzung der verschiedenen Evolutionsgesetze im Rahmen der jeweilig gewählten Relaxierungsmethode erläutert. Dies im Verbund definiert letztendlich das Materialmodell auf der mikroskopischen Ebene. Einer Unterscheidung der verschiedenen Relaxierungsverfahren bedarf es dabei grundlegend nicht, lediglich die jeweils korrespondierenden treibenden Kräfte gehen in die algorithmische Formulierung der Modelle ein. Allerdings gilt es den Sonderstatus der Laminatwinkel im Rahmen der Rang-1-Konvexifizierung zu beachten.

Generell bedarf die numerische Umsetzung des jeweiligen Evolutionsgesetzes eines angemessenen numerischen Verfahrens zur zeitlichen Diskretisierung. Im Rahmen dieser Arbeit soll das sogenannte *Backward-Euler-Verfahren* Anwendung finden, welches die Anforderungen an die *A-* und *L-Stabilität* erfüllt (siehe Deuffhard and Bornemann (1994)).

7.1. Algorithmische Umsetzung der Konsistenzbedingungen

Wie in Kapitel 6 aufgeführt, unterliegen die weiteren Vorgehen Konsistenzbedingungen, welche zum einen aus den Restriktionen bezüglich der Phasenanteile (6.12) und zum anderen aus der Verwendung elasto-plastischer Evolutionsgesetze herrühren. Diese sind in beiden Fällen gemäß der *KKT*B in Form von jeweils einer Gleichung sowie zwei Ungleichungen gegeben (siehe z.B. (6.6) bis (6.8) sowie (6.24)).

Ungleichungen stellen dabei hinsichtlich der algorithmischen Umsetzung ein Problem dar, welches in herkömmlicher Manier durch Anwendung sogenannter *Prädiktor-Korrektor-Verfahren* (z.B. *Radial-Return-Algorithm*, siehe dazu u.A. Simo and Hughes (1998)) gelöst wird. Diese Methode stellt sich dabei angesichts der hier behandelten Evolutionsgesetze insbesondere dadurch als nicht praktikabel heraus, dass alle Evolutionsgleichungen bezüglich der internen Variablen zu mindestens über die treibenden Kräfte gekoppelt sind. Aus diesem Grund soll für die folgende algorithmische Umsetzung der Modelle eine alternative Behandlung der Konsistenzbedingungen Anwendung finden, die im Rahmen der Festkörpermechanik auf Schmidt-Baldassari (2003) zurück geht. Dabei werden grundlegend die *KKT*B der allgemeinen Form

$$\lambda \Phi = 0 \quad , \quad \lambda \geq 0 \quad , \quad \Phi \leq 0 \quad (7.1)$$

durch die Gleichung

$$\sqrt{\Phi^2 + \lambda^2} + \Phi - \lambda = 0 \quad (7.2)$$

ersetzt. Zur Verdeutlichung der Äquivalenz beider Formulierungen sei an dieser Stelle folgende kurze Herleitung aufgezeigt. Ausgangspunkt ist die Forderung

$$\lambda \Phi = 0 \quad . \quad (7.3)$$

Aus dieser Gleichung ergibt sich durch Multiplikation mit -2 sowie anschließender Addition von $\lambda^2 + \Phi^2$

$$\lambda^2 - 2\lambda\Phi + \Phi^2 = \lambda^2 + \Phi^2 \quad . \quad (7.4)$$

Unter Ausnutzung der 2. binomischen Formel lässt sich durch anschließendes Ziehen der Quadratwurzel diese Gleichung in

$$|\lambda - \Phi| = \sqrt{\lambda^2 + \Phi^2} \quad (7.5)$$

umformulieren. Setzt man nun $\lambda \geq 0 \wedge \Phi \leq 0$ voraus, so folgt daraus $\lambda \geq \Phi$ und damit

$$\lambda - \Phi = \sqrt{\lambda^2 + \Phi^2} \quad , \quad (7.6)$$

was durch Umstellen auf (7.2) führt. Abb. 7.1 verdeutlicht die Bedeutung von (7.2). Für die

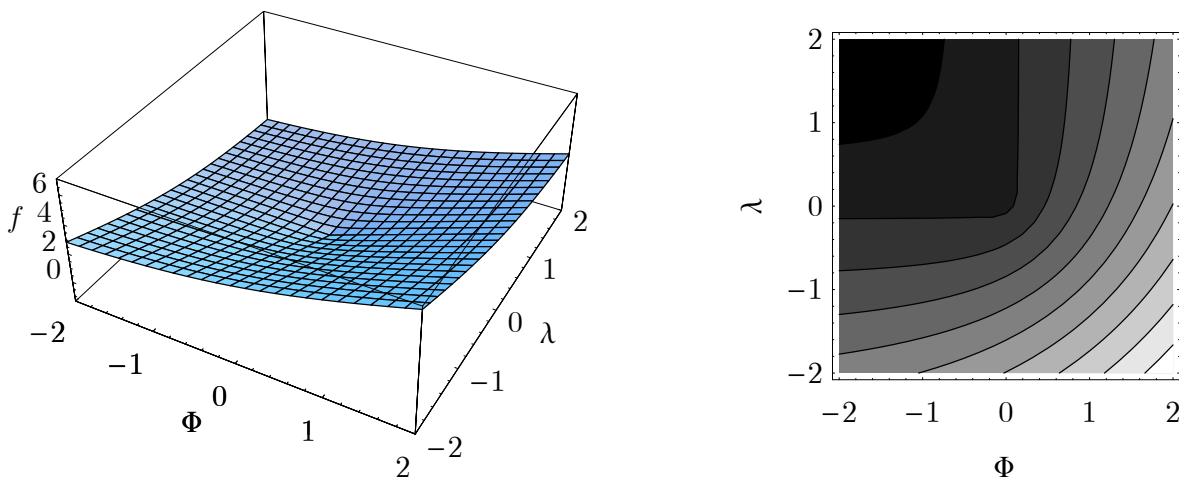


Abbildung 7.1.: Darstellung der Funktion $f = \sqrt{\Phi^2 + \lambda^2} + \Phi - \lambda$

Erfüllung der Restriktionen bezüglich der Phasenanteile sowie zur Einhaltung der Konsistenzbedingungen der elasto–plastischen Evolutiongesetze werden also fortan die Substitutionsgleichungen (7.2) angewandt.

7.2. Materialroutinen

Alle bislang aufgeführten Herleitungen führen auf Gleichungssysteme, welche das jeweilige Stoffgesetz repräsentieren und deren Lösung die Werte der inelastischen Variablen und damit in einer Art *Postprocessing*–Prozedur die effektive Materialantwort in Form von Spannungen ergeben. Diese in jedem Fall differential–algebraischen und damit im numerischen Sinne als *stiff* zu bezeichnenden Gleichungssysteme bestehen dabei zusammengefasst aus

- zeitdiskretisierten Evolutionsgleichungen
- Konsistenzbedingungen im Fall elasto–plastischer Evolution in Form von umformulierten *KKT*B

- Restriktionen bezüglich der Phasenanteile, ebenfalls in Form von umformulierten *KKT*B

deren algorithmische Umsetzung in den folgenden Abschnitten eingehend dargelegt werden soll.

Hinsichtlich der weiteren Vorgehen sollen an dieser Stelle die im Rahmen der Rang-1-Konvexifizierung verwendeten Richtungsvektoren $\mathbf{n}_A$ bzw. $\mathbf{n}_M$ der Laminat konkretisiert werden. Durch die zulässige und zudem sinnvolle Annahme, dass es sich bei besagten Vektoren um Einheitsvektoren handelt, kann die Anzahl der Variablen durch die Verwendung von jeweils zwei Winkeln ρ und ϕ verringert werden. Die Richtungsvektoren lassen sich damit durch

$$\mathbf{n}_A = \begin{pmatrix} \cos(\rho_A) \cos(\phi_A) \\ \cos(\rho_A) \sin(\phi_A) \\ \sin(\rho_A) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{n}_M = \begin{pmatrix} \cos(\rho_M) \cos(\phi_M) \\ \cos(\rho_M) \sin(\phi_M) \\ \sin(\rho_M) \end{pmatrix} \quad (7.7)$$

angeben. Von dieser Änderung sind auch die korrespondierenden treibenden Kräfte (5.65) und (5.66) betroffen. Über die Kettenregel lassen sich daraus treibende Kräfte bezüglich der neu eingeführten Winkel herleiten, z.B. für ρ_A über

$$q_{\rho_A} = -\frac{\partial \bar{\psi}_{rel}}{\partial \rho_A} = -\frac{\partial \bar{\psi}_{rel}}{\partial \mathbf{n}_A} \cdot \frac{\partial \mathbf{n}_A}{\partial \rho_A} = \mathbf{q}_{n_A} \cdot \frac{\partial \mathbf{n}_A}{\partial \rho_A} \quad (7.8)$$

Damit ergibt sich unter Berücksichtigung von (7.7) für die Winkel $\rho_\bullet$

$$q_{\rho_\bullet} = \mathbf{q}_{n_\bullet} \cdot \begin{pmatrix} -\sin(\rho_\bullet) \cos(\phi_\bullet) \\ -\sin(\rho_\bullet) \sin(\phi_\bullet) \\ \cos(\rho_\bullet) \end{pmatrix} \quad (7.9)$$

sowie für die Winkel $\phi_\bullet$

$$q_{\phi_\bullet} = \mathbf{q}_{n_\bullet} \cdot \begin{pmatrix} -\cos(\rho_\bullet) \sin(\phi_\bullet) \\ \cos(\rho_\bullet) \cos(\phi_\bullet) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (7.10)$$

wobei $\bullet$ als Platzhalter für das jeweils betrachtete Laminat erster Ordnung fungiert (A oder M).

Grundlegend sollen für die weiteren Abschnitte dieses Kapitels folgende Vereinbarungen gelten:

- Im Falle der Rang-1-Konvexifizierung werden die geometrischen Variablen der Mikrostruktur in der Liste $\boldsymbol{\xi} = \{\rho_A, \phi_A, \rho_M, \phi_M\}$ zusammengefasst
- Grundsätzlich sollen die Evolutionsgesetze bezüglich der Volumenfraktionen θ und der Laminatwinkel $\boldsymbol{\xi}$ (nur für den Fall der Rang-1-Konvexifizierung) getrennt betrachtet werden, da unterschiedliche Schwellen-Parameter k_θ bzw. k_ξ verwendet werden sollen.
- Die einzelnen treibenden Kräfte sind generell als q bezeichnet. Damit sind bezüglich der Volumenfraktionen die in Kapitel 6 eingeführten, erweiterten treibenden Kräfte q_I^{enh} nach (6.14) und für die Laminatwinkel innerhalb der Rang-1-Konvexifizierung die Größen gemäß (7.9) sowie (7.10) gemeint. Für die Rang-1-Konvexifizierung gilt zudem $\bar{\mathbf{q}} = \{q_{\rho_A}, q_{\phi_A}, q_{\rho_M}, q_{\phi_M}\}$

- Die Abkürzung (R1) symbolisiert das Verfahren der Rang-1-Konvexifizierung.
- Hinsichtlich der zeitlichen Diskretisierung sind alle nicht bezüglich der Zeit indizierten Variablen immer auf den aktuellen Zeitschritt t_n bezogen.

7.2.1. von Mises-Typ

Für einen gegebenen Dehnungs- und Temperaturzustand zum Zeitpunkt t_n und unter Kenntnis der Lösungen für den vorangegangenen Zeitpunkt t_{n-1} berechnen sich die aktuellen Werte der internen Variablen aus den zeitdiskretisierten Gleichungen (6.29). Gemäß des Backward-Euler Verfahrens ergeben sich für die Aktualisierung der Volumenfraktionen NV Gleichungen der Art

$$\theta_i - \theta_i^{n-1} - \Delta\lambda q_i \tilde{q}_\theta^{-1} = 0 \quad (7.11)$$

$$\text{mit } \Delta\lambda := \Delta t \lambda \text{ und } \tilde{q}_\theta := \sqrt{\sum_{k=1}^{NV} q_k^2}.$$

Zusätzlich ergeben sich für (R1) die insgesamt 4 Gleichungen

$$\xi_i - \xi_i^{n-1} - \Delta\bar{\lambda} \bar{q}_i \tilde{q}_\xi^{-1} = 0 \quad (7.12)$$

$$\text{mit } \Delta\bar{\lambda} := \Delta t \bar{\lambda} \text{ und } \tilde{q}_\xi := \sqrt{\sum_{k=1}^4 \bar{q}_k^2}.$$

Mit der Fließbedingung (6.28), hier umformuliert zu

$$\Phi = \tilde{q}_\theta - k_\theta \quad (7.13)$$

bzw.

$$\bar{\Phi} = \tilde{q}_\xi - k_\xi \quad (\text{R1}) \quad , \quad (7.14)$$

ergeben sich die Konsistenzbedingungen zu

$$0 = \sqrt{\Phi^2 + \Delta\lambda^2} + \Phi - \Delta\lambda \quad \text{bzw.} \quad (7.15)$$

$$0 = \sqrt{\bar{\Phi}^2 + \Delta\bar{\lambda}^2} + \bar{\Phi} - \Delta\bar{\lambda} \quad (\text{R1}) \quad (7.16)$$

Erweitert um die noch zu berücksichtigenden Massenrestriktionen ergibt sich demnach das im Folgenden zusammengefasste Gleichungssystem für die elasto-plastische Evolution gemäß des von Mises-Typs:

$$\mathbf{g} := \begin{pmatrix} \theta_i - \theta_i^{n-1} - \Delta\lambda q_i \tilde{q}_\theta^{-1} & i = 1 \dots NV \\ \xi_i - \xi_i^{n-1} - \Delta\bar{\lambda} \bar{q}_i \tilde{q}_\xi^{-1} & i = 1 \dots 4 \\ \sqrt{\Phi^2 + \Delta\lambda^2} + \Phi - \Delta\lambda & \\ \sqrt{\bar{\Phi}^2 + \Delta\bar{\lambda}^2} + \bar{\Phi} - \Delta\bar{\lambda} & \\ \sqrt{r_i^2 + \Lambda_i^2} + r_i - \Lambda_i & i = 1 \dots NV \\ \sqrt{\bar{r}^2 + \Gamma^2} + \bar{r} - \Gamma & \end{pmatrix} \begin{matrix} (\text{R1}) \\ (\text{R1}) \\ \\ \end{matrix} = \mathbf{0} \quad (7.17)$$

Dieses System besteht dabei aus $2\,NV+2$ bzw. $2\,NV+7$ (R1) Gleichungen zur Bestimmung der internen sowie algorithmischen Variablen

$$v = \{\theta_1 \dots \theta_{NV}, \lambda, \Lambda_1 \dots \Lambda_{NV}, \Gamma\} \quad (7.18)$$

bzw.

$$v = \{\theta_1 \dots \theta_{NV}, \rho_A, \phi_A, \rho_M, \phi_M, \lambda, \bar{\lambda}, \Lambda_1 \dots \Lambda_{NV}, \Gamma\} \quad (\text{R1}) \quad (7.19)$$

Die durch die Verwendung des Backward–Euler–Verfahrens bedingte iterative Lösung des Gleichungssystems (7.17) erfolgt mit dem klassischen *Newton–Raphson–Verfahren*. Dazu ist die Definition der sogenannten *Jakobimatrix* erforderlich, die hier zunächst generell in die Submatrizen

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} \mathbf{J}_{\theta\theta} & (\mathbf{J}_{\theta\xi}) & \mathbf{J}_{\theta\lambda} & (\mathbf{J}_{\theta\bar{\lambda}}) & \mathbf{J}_{\theta\Lambda} & \mathbf{J}_{\theta\Gamma} \\ (\mathbf{J}_{\xi\theta}) & (\mathbf{J}_{\xi\xi}) & (\mathbf{J}_{\xi\lambda}) & (\mathbf{J}_{\xi\bar{\lambda}}) & (\mathbf{J}_{\xi\Lambda}) & (\mathbf{J}_{\xi\Gamma}) \\ \mathbf{J}_{\lambda\theta} & (\mathbf{J}_{\lambda\xi}) & \mathbf{J}_{\lambda\lambda} & (\mathbf{J}_{\lambda\bar{\lambda}}) & \mathbf{J}_{\lambda\Lambda} & \mathbf{J}_{\lambda\Gamma} \\ (\mathbf{J}_{\bar{\lambda}\theta}) & (\mathbf{J}_{\bar{\lambda}\xi}) & (\mathbf{J}_{\bar{\lambda}\lambda}) & (\mathbf{J}_{\bar{\lambda}\bar{\lambda}}) & (\mathbf{J}_{\bar{\lambda}\Lambda}) & (\mathbf{J}_{\bar{\lambda}\Gamma}) \\ \mathbf{J}_{\Lambda\theta} & (\mathbf{J}_{\Lambda\xi}) & \mathbf{J}_{\Lambda\lambda} & (\mathbf{J}_{\Lambda\bar{\lambda}}) & \mathbf{J}_{\Lambda\Lambda} & \mathbf{J}_{\Lambda\Gamma} \\ \mathbf{J}_{\Gamma\theta} & (\mathbf{J}_{\Gamma\xi}) & \mathbf{J}_{\Gamma\lambda} & (\mathbf{J}_{\Gamma\bar{\lambda}}) & \mathbf{J}_{\Gamma\Lambda} & \mathbf{J}_{\Gamma\Gamma} \end{pmatrix} \quad (7.20)$$

aufgeteilt wird, wobei die in Klammern gesetzten Einträge lediglich für (R1) relevant sind. Konkret ergeben sich die Einträge in den von $\mathbf{0}$ verschiedenen Submatrizen, bei denen nun im oberen Index die jeweilige Dimension und damit die maximale Schrittzahl für die Zeilen und Spalten i bzw. j angegeben ist, zu

$$\mathbf{J}_{\theta\theta}^{NV \times NV} = \delta_{ij} - \Delta\lambda \left(\frac{\partial q_i}{\partial \theta_j} \tilde{q}_\theta^{-1} - q_i \tilde{q}_\theta^{-3} \sum_{k=1}^{NV} \left\{ q_k \frac{\partial q_k}{\partial \theta_j} \right\} \right) \quad (7.21)$$

$$\mathbf{J}_{\theta\xi}^{NV \times 4} = -\Delta\lambda \left(\frac{\partial q_i}{\partial \xi_j} \tilde{q}_\theta^{-1} - q_i \tilde{q}_\theta^{-3} \sum_{k=1}^{NV} \left\{ q_k \frac{\partial q_k}{\partial \xi_j} \right\} \right) \quad (7.22)$$

$$\mathbf{J}_{\theta\lambda}^{NV \times 1} = -q_i \tilde{q}_\theta^{-1} \quad (7.23)$$

$$\mathbf{J}_{\theta\Lambda}^{NV \times NV} = -\Delta\lambda (\delta_{ij} \tilde{q}_\theta^{-1} - q_i \tilde{q}_\theta^{-3} q_j) \quad (7.24)$$

$$\mathbf{J}_{\theta\Gamma}^{NV \times 1} = -\Delta\lambda \left(-\tilde{q}_\theta^{-1} + q_i \tilde{q}_\theta^{-3} \sum_{k=1}^{NV} \{q_k\} \right) \quad (7.25)$$

$$\mathbf{J}_{\xi\theta}^{4 \times NV} = -\Delta\bar{\lambda} \left(\frac{\partial \bar{q}_i}{\partial \theta_j} \tilde{q}_\xi^{-1} - \bar{q}_i \tilde{q}_\xi^{-3} \sum_{k=1}^4 \left\{ \bar{q}_k \frac{\partial \bar{q}_k}{\partial \theta_j} \right\} \right) \quad (7.26)$$

$$\mathbf{J}_{\xi\xi}^{4 \times 4} = \delta_{ij} - \Delta\bar{\lambda} \left(\frac{\partial \bar{q}_i}{\partial \xi_j} \tilde{q}_\xi^{-1} - \bar{q}_i \tilde{q}_\xi^{-3} \sum_{k=1}^4 \left\{ \bar{q}_k \frac{\partial \bar{q}_k}{\partial \xi_j} \right\} \right) \quad (7.27)$$

$$\mathbf{J}_{\xi\bar{\lambda}}^{4 \times 1} = -\bar{q}_i \tilde{q}_\xi^{-1} \quad (7.28)$$

$$\mathbf{J}_{\lambda\theta}^{1 \times NV} = \Xi^\Phi \tilde{q}_\theta^{-1} \sum_{k=1}^{NV} \left\{ q_k \frac{\partial q_k}{\partial \theta_j} \right\} \quad (7.29)$$

$$\mathbf{J}_{\lambda\xi}^{1 \times 4} = \Xi^\Phi \tilde{q}_\theta^{-1} \sum_{k=1}^{NV} \left\{ q_k \frac{\partial q_k}{\partial \xi_j} \right\} \quad (7.30)$$

$$\mathbf{J}_{\lambda\lambda}^{1 \times 1} = \Xi^\lambda \quad (7.31)$$

$$\mathbf{J}_{\lambda\Lambda}^{1 \times NV} = \Xi^\Phi \tilde{q}_\theta^{-1} q_j \quad (7.32)$$

$$\mathbf{J}_{\lambda\Gamma}^{1 \times 1} = -\Xi^\Phi \tilde{q}_\theta^{-1} \sum_{k=1}^{NV} \{q_k\} \quad (7.33)$$

$$\mathbf{J}_{\lambda\theta}^{1 \times NV} = \Xi^\Phi \tilde{q}_\xi^{-1} \sum_{k=1}^4 \left\{ \bar{q}_k \frac{\partial \bar{q}_k}{\partial \theta_j} \right\} \quad (7.34)$$

$$\mathbf{J}_{\lambda\xi}^{1 \times 4} = \Xi^\Phi \tilde{q}_\xi^{-1} \sum_{k=1}^4 \left\{ \bar{q}_k \frac{\partial \bar{q}_k}{\partial \xi_j} \right\} \quad (7.35)$$

$$\mathbf{J}_{\bar{\lambda}\bar{\lambda}}^{1 \times 1} = \Xi^{\bar{\lambda}} \quad (7.36)$$

$$\mathbf{J}_{\Lambda\theta}^{NV \times NV} = -\Xi_i^r \delta_{ij} \quad (7.37)$$

$$\mathbf{J}_{\Lambda\Lambda}^{NV \times NV} = \Xi_i^\Lambda \delta_{ij} \quad (7.38)$$

$$\mathbf{J}_{\Gamma\theta}^{1 \times NV} = \Xi^{\bar{r}} \quad (7.39)$$

$$\mathbf{J}_{\Gamma\Gamma}^{1 \times 1} = \Xi^\Gamma \quad (7.40)$$

mit den Definitionen

$$\Xi^\Phi := \frac{\Phi}{\sqrt{\Phi^2 + \lambda^2}} + 1 \quad (7.41)$$

$$\Xi^{\bar{\Phi}} := \frac{\bar{\Phi}}{\sqrt{\bar{\Phi}^2 + \bar{\lambda}^2}} + 1 \quad (7.42)$$

$$\Xi^\lambda := \frac{\lambda}{\sqrt{\Phi^2 + \lambda^2}} - 1 \quad (7.43)$$

$$\Xi^{\bar{\lambda}} := \frac{\bar{\lambda}}{\sqrt{\bar{\Phi}^2 + \bar{\lambda}^2}} - 1 \quad (7.44)$$

$$\Xi_i^r := \frac{r_i}{\sqrt{r_i^2 + \Lambda_i^2}} + 1 \quad (7.45)$$

$$\Xi^{\bar{r}} := \frac{\bar{r}}{\sqrt{\bar{r}^2 + \Gamma^2}} + 1 \quad (7.46)$$

$$\Xi_i^\Lambda := \frac{\Lambda_i}{\sqrt{r_i^2 + \Lambda_i^2}} - 1 \quad (7.47)$$

$$\Xi^\Gamma := \frac{\Gamma}{\sqrt{\bar{r}^2 + \Gamma^2}} - 1 \quad (7.48)$$

Dazu ist anzumerken, dass die in Erscheinung tretenden Ableitungen der treibenden Kräfte ∂q_k in analytischer Form hergeleitet werden können, jedoch auf Grund der langen Ausdrücke hier nicht aufgeführt werden.

Mit diesen Herleitungen zur Hand lässt sich der Algorithmus für den Evolutionstyp *von Mises* gemäß des folgenden Ablaufschemas Alg. 7.1 darstellen, wobei TOL die numerische Toleranz für die Erfüllung des Gleichungssystems darstellt (Größenordnung 10^{-8}). Dabei ist die in Kapitel 8.5 detailliert beschriebene Behandlung der internen Variablen hinsichtlich deren Startwerte zu beachten.

Elastoplastisches Evolutionsgesetz — von Mises–Typ

Geg.: $t_n, \varepsilon(t_n), T(t_n)$	
Setze $\theta_k = \theta_{n-1}$ Die Behandlung der Laminatwinkel wird in Abschnitt 8.5.3 erläutert	
Berechne $\mathbf{q}_k$ nach (5.23) bzw. (5.64), (7.9) und (7.10)	
Berechne $\mathbf{g}_k$ nach (7.17)	
Berechne $res = \sqrt{\mathbf{g} \cdot \mathbf{g}}$	
Y Ist $res \leq TOL$ N	
Setze $\mathbf{v}_n = \mathbf{v}_k$ Abbruch der Schleife	Löse $\mathbf{J}_k \cdot \Delta \mathbf{v}_k = -\mathbf{g}_k$ mit $\mathbf{J}_k$ nach (7.20) Setze $\mathbf{v}_{k+1} = \mathbf{v}_k + \Delta \mathbf{v}_k, k = k + 1$
Berechne $\sigma(t_n)$ nach (5.24) bzw. (5.69)	
$t_{n+1} = t_n + \Delta t$	
$n = n + 1$	

Algorithmus 7.1: Elastoplastische Evolution: von Mises–Typ

7.2.2. Tresca–Typ

In Analogie zum vorherigen Abschnitt ergibt sich mit

$$\Phi_i = |q_i| - k_\theta, \quad i = 1 \dots NV \quad (7.49)$$

$$\bar{\Phi}_i = |\bar{q}_i| - k_\xi, \quad i = 1 \dots 4 \quad (\text{R1}) \quad (7.50)$$

gemäß (6.34) für das Gleichungssystem der elastoplastischen Evolution des Tresca–Typs

$$\mathbf{g} := \begin{pmatrix} \theta_i - \theta_i^{n-1} - \Delta\lambda_i \operatorname{sign}(q_i) & i = 1 \dots NV \\ \xi_i - \xi_i^{n-1} - \Delta\bar{\lambda}_i \operatorname{sign}(\bar{q}_i) & i = 1 \dots 4 \\ \sqrt{\Phi_i^2 + \Delta\lambda_i^2} + \Phi_i - \Delta\lambda_i & i = 1 \dots NV \\ \sqrt{\bar{\Phi}_i^2 + \Delta\bar{\lambda}_i^2} + \bar{\Phi}_i - \Delta\bar{\lambda}_i & i = 1 \dots 4 \\ \sqrt{r_i^2 + \Lambda_i^2} + r_i - \Lambda_i & i = 1 \dots NV \\ \sqrt{\bar{r}^2 + \Gamma^2} + \bar{r} - \Gamma \end{pmatrix} = \mathbf{0} \quad (\text{R1}) \quad (7.51)$$

Da die Evolutionsgleichungen der internen Variablen nun in dem Sinne entkoppelt sind, dass jede treibende Kraft alleine für die Entwicklung der korrespondierenden Variablen verantwortlich ist (im Gegensatz zu (7.13) bzw. (7.14)), existieren nun zu jeder internen Variable eine Fließbedingung sowie ein Konsistenzparameter. Dies erhöht die Anzahl der Unbekannten für diesen Fall auf $3 NV + 1$ bzw. $3 NV + 9$ (R1). Die Liste der Variablen ist demnach in diesem Falle gegeben durch

$$\mathbf{v} = \{\theta_1 \dots \theta_{NV}, \lambda_1 \dots \lambda_{NV}, \Lambda_1 \dots \Lambda_{NV}, \Gamma\} \quad (7.52)$$

bzw.

$$\mathbf{v} = \{\theta_1 \dots \theta_{NV}, \rho_A, \phi_A, \rho_M, \phi_M, \lambda_1 \dots \lambda_{NV}, \bar{\lambda}_1 \dots \bar{\lambda}_4, \Lambda_1 \dots \Lambda_{NV}, \Gamma\} \quad (\text{R1}) \quad (7.53)$$

Die Jakobimatrix des Newton–Raphson–Verfahrens lässt sich grundlegend identisch zu (7.20) als

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} \mathbf{J}_{\theta\theta} & (\mathbf{J}_{\theta\xi}) & \mathbf{J}_{\theta\lambda} & (\mathbf{J}_{\theta\bar{\lambda}}) & \mathbf{J}_{\theta\Lambda} & \mathbf{J}_{\theta\Gamma} \\ (\mathbf{J}_{\xi\theta}) & (\mathbf{J}_{\xi\xi}) & (\mathbf{J}_{\xi\lambda}) & (\mathbf{J}_{\xi\bar{\lambda}}) & (\mathbf{J}_{\xi\Lambda}) & (\mathbf{J}_{\xi\Gamma}) \\ \mathbf{J}_{\lambda\theta} & (\mathbf{J}_{\lambda\xi}) & \mathbf{J}_{\lambda\lambda} & (\mathbf{J}_{\lambda\bar{\lambda}}) & \mathbf{J}_{\lambda\Lambda} & \mathbf{J}_{\lambda\Gamma} \\ (\mathbf{J}_{\bar{\lambda}\theta}) & (\mathbf{J}_{\bar{\lambda}\xi}) & (\mathbf{J}_{\bar{\lambda}\lambda}) & (\mathbf{J}_{\bar{\lambda}\bar{\lambda}}) & (\mathbf{J}_{\bar{\lambda}\Lambda}) & (\mathbf{J}_{\bar{\lambda}\Gamma}) \\ \mathbf{J}_{\Lambda\theta} & (\mathbf{J}_{\Lambda\xi}) & \mathbf{J}_{\Lambda\lambda} & (\mathbf{J}_{\Lambda\bar{\lambda}}) & \mathbf{J}_{\Lambda\Lambda} & \mathbf{J}_{\Lambda\Gamma} \\ \mathbf{J}_{\Gamma\theta} & (\mathbf{J}_{\Gamma\xi}) & \mathbf{J}_{\Gamma\lambda} & (\mathbf{J}_{\Gamma\bar{\lambda}}) & \mathbf{J}_{\Gamma\Lambda} & \mathbf{J}_{\Gamma\Gamma} \end{pmatrix} \quad (7.54)$$

darstellen. Die einzelnen, von $\mathbf{0}$ verschiedenen Submatrizen ergeben sich zu

$$\mathbf{J}_{\theta\theta}^{NV \times NV} = \delta_{ij} \quad (7.55)$$

$$\mathbf{J}_{\theta\lambda}^{NV \times NV} = -\delta_{ij} \operatorname{sign}(q_i) \quad (7.56)$$

$$\mathbf{J}_{\xi\xi}^{4 \times 4} = \delta_{ij} \quad (7.57)$$

$$\mathbf{J}_{\xi\bar{\lambda}}^{4 \times 4} = -\delta_{ij} \operatorname{sign}(\bar{q}_i) \quad (7.58)$$

$$\mathbf{J}_{\lambda\theta}^{NV \times NV} = \Xi_i^\Phi \operatorname{sign}(q_i) \frac{\partial q_i}{\partial \theta_j} \quad (7.59)$$

$$\mathbf{J}_{\lambda\xi}^{NV \times 4} = \Xi_i^\Phi \operatorname{sign}(q_i) \frac{\partial q_i}{\partial \xi_j} \quad (7.60)$$

$$\mathbf{J}_{\lambda\lambda}^{NV \times NV} = \Xi_i^\lambda \delta_{ij} \quad (7.61)$$

$$\mathbf{J}_{\lambda\Lambda}^{NV \times NV} = \Xi_i^\Phi \operatorname{sign}(q_i) \delta_{ij} \quad (7.62)$$

$$\mathbf{J}_{\lambda\Gamma}^{NV \times 1} = -\Xi_i^\Phi \operatorname{sign}(q_i) \quad (7.63)$$

$$\mathbf{J}_{\bar{\lambda}\theta}^{4 \times NV} = \Xi_i^{\bar{\Phi}} \operatorname{sign}(\bar{q}_i) \frac{\partial \bar{q}_i}{\partial \theta_j} \quad (7.64)$$

$$\mathbf{J}_{\bar{\lambda}\xi}^{4 \times 4} = \Xi_i^{\bar{\Phi}} \operatorname{sign}(\bar{q}_i) \frac{\partial \bar{q}_i}{\partial \xi_j} \quad (7.65)$$

$$\mathbf{J}_{\bar{\lambda}\bar{\lambda}}^{4 \times 4} = \Xi_i^{\bar{\lambda}} \delta_{ij} \quad (7.66)$$

$$\mathbf{J}_{\Lambda\theta}^{NV \times NV} = -\Xi_i^r \delta_{ij} \quad (7.67)$$

$$\mathbf{J}_{\Lambda\Lambda}^{NV \times NV} = \Xi_i^\Lambda \delta_{ij} \quad (7.68)$$

$$\mathbf{J}_{\Gamma\theta}^{1 \times NV} = \Xi^{\bar{r}} \quad (7.69)$$

$$\mathbf{J}_{\Gamma\Gamma}^{1 \times 1} = \Xi^\Gamma \quad (7.70)$$

mit den in (7.41) bis (7.48) angegebenen Abkürzungen, wobei es hier die Indizierung zu beachten gilt. Im Ablaufschema Alg. 7.2 ist der Algorithmus des Evolutionstyps *Tresca* aufgezeigt.

7.2.3. Perzyna–Typ

Gemäß den Ausführungen in Abschnitt 6.3 können auch für den Fall viskoplastischer Evolution Fließbedingungen der Form

$$\Phi_i = |q_i| - k_1, \quad i = 1 \dots NV \quad (7.71)$$

$$\bar{\Phi}_i = |\bar{q}_i| - \bar{k}_1, \quad i = 1 \dots 4 \quad (\text{R1}) \quad (7.72)$$

angegeben werden, welche identisch zum Evolutionstyp *Tresca* sind. Da diese jedoch nicht durch etwaige Konsistenzparameter gegebenenfalls auf Werte ≤ 0 gebracht werden müssen, entfallen diese in den folgenden Listen der insgesamt $2 NV + 1$ bzw. $2 NV + 5$ (R1) internen Variablen

$$v = \{\theta_1 \dots \theta_{NV}, \Lambda_1 \dots \Lambda_{NV}, \Gamma\} \quad (7.73)$$

bzw.

$$v = \{\theta_1 \dots \theta_{NV}, \rho_A, \phi_A, \rho_M, \phi_M, \Lambda_1 \dots \Lambda_{NV}, \Gamma\} \quad (\text{R1}) \quad (7.74)$$

Das Gleichungssystem des viskoplastischen Evolutionsgesetzes

$$\mathbf{g} := \begin{pmatrix} \theta_i - \theta_i^{n-1} - \frac{\Delta t}{4 k_2} \operatorname{sign}(q_i) [1 + \operatorname{sign}(\Phi_i)] \Phi_i & i = 1 \dots NV \\ \xi_i - \xi_i^{n-1} - \frac{\Delta t}{4 \bar{k}_2} \operatorname{sign}(\bar{q}_i) [1 + \operatorname{sign}(\bar{\Phi}_i)] \bar{\Phi}_i & i = 1 \dots 4 \quad (\text{R1}) \\ \sqrt{r_i^2 + \Lambda_i^2} + r_i - \Lambda_i & i = 1 \dots NV \\ \sqrt{\bar{r}^2 + \Gamma^2} + \bar{r} - \Gamma \end{pmatrix} = \mathbf{0} \quad (7.75)$$

Elastoplastisches Evolutionsgesetz — Tresca–Typ

Geg.: $t_n, \varepsilon(t_n), T(t_n)$	
Setze $\theta_k = \theta_{n-1}$ Die Behandlung der Laminatwinkel wird in Abschnitt 8.5.3 erläutert	
Berechne $\mathbf{q}_k$ nach (5.23) bzw. (5.64), (7.9) und (7.10)	
Berechne $\mathbf{g}_k$ nach (7.51)	
Berechne $res = \sqrt{\mathbf{g} \cdot \mathbf{g}}$	
Y Ist $res \leq TOL$ N	
Setze $\mathbf{v}_n = \mathbf{v}_k$ Abbruch der Schleife	Löse $\mathbf{J}_k \cdot \Delta \mathbf{v}_k = -\mathbf{g}_k$ mit $\mathbf{J}_k$ nach (7.54) Setze $\mathbf{v}_{k+1} = \mathbf{v}_k + \Delta \mathbf{v}_k, k = k + 1$
Berechne $\sigma(t_n)$ nach (5.24) bzw. (5.69)	
$t_{n+1} = t_n + \Delta t$	
$n = n + 1$	

Algorithmus 7.2: Elastoplastische Evolution: Tresca–Typ

unterscheidet sich dahin gehend drastisch von den anderen, dass es explizit von der Zeit bzw. dem vorgegebenen Zeitschritt $\Delta t = t_n - t_{n-1}$ abhängt. Die konkrete Bedeutung für den Algorithmus ist in dem Ablaufschema Alg. 7.3 detailliert aufgeführt.

Die für das Newton–Raphson–Verfahren benötigte Jakobimatrix reduziert sich für diesen Fall auf

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} \mathbf{J}_{\theta\theta} & (\mathbf{J}_{\theta\xi}) & \mathbf{J}_{\theta\Lambda} & \mathbf{J}_{\theta\Gamma} \\ (\mathbf{J}_{\xi\theta}) & (\mathbf{J}_{\xi\xi}) & (\mathbf{J}_{\xi\Lambda}) & (\mathbf{J}_{\xi\Gamma}) \\ \mathbf{J}_{\Lambda\theta} & (\mathbf{J}_{\Lambda\xi}) & \mathbf{J}_{\Lambda\Lambda} & \mathbf{J}_{\Lambda\Gamma} \\ \mathbf{J}_{\Gamma\theta} & (\mathbf{J}_{\Gamma\xi}) & \mathbf{J}_{\Gamma\Lambda} & \mathbf{J}_{\Gamma\Gamma} \end{pmatrix} \quad (7.76)$$

Im Folgenden sind analog zu den vorherigen Abschnitten die von $\mathbf{0}$ verschiedenen Submatrizen

$$\mathbf{J}_{\theta\theta}^{NV \times NV} = \delta_{ij} - \frac{\Delta t}{4 k_2} (1 + \text{sign}(\Phi_i)) \frac{\partial q_i}{\partial \theta_j} \quad (7.77)$$

$$\mathbf{J}_{\theta\xi}^{NV \times 4} = -\frac{\Delta t}{4 k_2} (1 + \text{sign}(\Phi_i)) \frac{\partial q_i}{\partial \xi_j} \quad (7.78)$$

$$\mathbf{J}_{\theta\Lambda}^{NV \times NV} = -\frac{\Delta t}{4 k_2} (1 + \text{sign}(\Phi_i)) \delta_{ij} \quad (7.79)$$

$$\mathbf{J}_{\theta\Gamma}^{NV \times 1} = \frac{\Delta t}{4 k_2} (1 + \text{sign}(\Phi_i)) \quad (7.80)$$

$$\mathbf{J}_{\xi\theta}^{4 \times NV} = -\frac{\Delta t}{4 \bar{k}_2} (1 + \text{sign}(\bar{\Phi}_i)) \frac{\partial \bar{q}_i}{\partial \theta_j} \quad (7.81)$$

$$\mathbf{J}_{\xi\xi}^{4 \times 4} = \delta_{ij} - \frac{\Delta t}{4 \bar{k}_2} (1 + \text{sign}(\bar{\Phi}_i)) \frac{\partial \bar{q}_i}{\partial \xi_j} \quad (7.82)$$

$$\mathbf{J}_{\Lambda\theta}^{NV \times NV} = -\Xi_i^r \delta_{ij} \quad (7.83)$$

$$\mathbf{J}_{\Lambda\Lambda}^{NV \times NV} = \Xi_i^\Lambda \delta_{ij} \quad (7.84)$$

$$\mathbf{J}_{\Gamma\theta}^{1 \times NV} = \Xi^{\bar{r}} \quad (7.85)$$

$$\mathbf{J}_{\Gamma\Gamma}^{1 \times 1} = \Xi^\Gamma \quad (7.86)$$

aufgeführt, wobei erneut die in (7.41) bis (7.48) angegebenen Definitionen gelten.

Viskoplastisches Evolutionsgesetz — Perzyna–Typ

Geg.: $t_n, \varepsilon(t_n), T(t_n)$	
Setze $\Delta\tau = \Delta t/m, m = 1, 2, 3, \dots$ Setze $\tau_k = t_n$ Setze $\theta_k = \theta_{n-1}$	
Die Behandlung der Laminatwinkel wird in Abschnitt 8.5.3 erläutert	
Berechne $\mathbf{q}_k$ nach (5.23) bzw. (5.64), (7.9) und (7.10)	
Berechne $\mathbf{g}_k$ nach (7.75)	
Berechne $res = \sqrt{\mathbf{g} \cdot \mathbf{g}}$	
Y Ist $res \leq TOL$ N	
Setze $\mathbf{v}_n = \mathbf{v}_k$ Abbruch der Schleife	Löse $\mathbf{J}_k \cdot \Delta \mathbf{v}_k = -\mathbf{g}_k$ mit $\mathbf{J}_k$ nach (7.76) Setze $\mathbf{v}_{k+1} = \mathbf{v}_k + \Delta \mathbf{v}_k, k = k + 1$
Berechne $\sigma(\tau_k)$ nach (5.24) bzw. (5.69)	
$\tau_{k+1} = \tau_k + \Delta\tau$	
Abbruch der Schleife nach m Durchgängen	
$k = k + 1$	
$\theta_k = \theta_{k-1}$	
$t_{n+1} = t_n + \Delta t$	
$n = n + 1$	

Algorithmus 7.3: Viskoplastische Evolution: Perzyna–Typ

8. Materialpunkt–Analysen

8.1. Grundlegende Eigenschaften

Im ersten Abschnitt dieses Kapitels sollen die grundlegenden Charakteristika der Materialmodelle aufgezeigt werden. Dazu dient konkret das aus der Rang–1–Konvexifizierung in Verbindung mit dem Evolutionsgesetz des Typs Tresca erhaltene Stoffgesetz. Weiterhin gilt zunächst die Beschränkung auf die 3–variante kubisch–tetragonale Transformation sowie einen einaxialen Zug der Form

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \kappa(t) \begin{pmatrix} \varepsilon_{max} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (8.1)$$

als Belastungspfad. Die Materialkenndaten wurden zu

$$\begin{aligned} \text{E–Modul Austenit} & : E_A = 83 \text{ GPa} \\ \text{Querkontraktionszahl Austenit} & : \nu_A = 0.33 \\ \text{E–Modul Martensit} & : E_M = 34 \text{ GPa} \\ \text{Querkontraktionszahl Martensit} & : \nu_M = 0.33 \\ \text{spez. Wärmekapazität} & : C_0 = 5.405 \cdot 10^{-3} \text{ GPa/K} \\ \text{Latente Wärme} & : L = 0.1562 \text{ GPa/K} \\ \text{Referenztemperatur} & : T_0 = 293 \text{ K} \end{aligned} \quad (8.2)$$

gewählt. Diese Werte entsprechen den Kenndaten, die von der Firma Johnson Matthey™ z.B. unter Johnson Matthey Inc. (2008) für NiTi angegeben werden. Obwohl z.B. Sedláček et al. (2005) bezüglich der mechanischen Kenndaten von FGL–Materialien weitaus differenziertere Resultate aufzeigen, sollen für die folgenden numerischen Analysen der Einfachheit halber die oben genannten Werte unabhängig vom vorliegenden Material bzw. Transformationsmodus gelten. Für die Transformationsdehnungen wurden jeweils die in Anhang A aufgeführten Größen verwendet.

Abb. 8.1 zeigt die resultierenden Normalspannungen für einen Versuch mit $0 \leq \kappa(t) \leq 1$, $T = 338 \text{ K}$ sowie den Dissipationsparametern $k_\theta = k_\xi = 0.01 \text{ GN}/(\text{m}^2 \text{ s})$ und $\varepsilon_{max} = 0.055$. Grundsätzlich wird die scharfe Trennung der elastischen und inelastischen Bereiche der Spannungs–Dehnungs–Beziehung durch das bereits in Abschnitt 3.2 erläuterte Spannungsplateau wiedergegeben, wobei der Transformationsbereich lediglich durch die Bildung der ersten Martensit–Variante (siehe Abb. 8.3) gekennzeichnet ist. Die Phasentransformation bedingt eine, wenn auch in vernachlässigbarer Größenordnung vorherrschende, Anisotropie, welche durch das Aufkommen von Schubspannungen deutlich wird (siehe Abb. 8.2). Diese resultiert aus einer in Abb. 8.4 erkennbaren, leichten Schiefstellung der Laminate

erster Ordnung gegenüber der Zugrichtung mit $\mathbf{n}_A = \{0.999, 0.027, 0.036\}$. Die Orientierung der Lamine zweiter Ordnung beträgt konstant $\mathbf{n}_M = \{0.57735, 0.57735, -0.57735\}$ während der Transformation, wobei diese auf Grund der Entwicklung von lediglich einer Martensitvariante unerheblich ist. Besonders auffällig bezüglich der Laminatorientierungen ist ein stetiges Springen der Komponenten des Richtungsvektors $\mathbf{n}_M$, worauf in Abschnitt 8.5.3 detailliert eingegangen wird.

In Abb. 8.6 ist der Kernpunkt des Konzepts der relaxierten Energiepotenziale erkennbar: In den nicht quasikonvexen Bereichen der die Phasenenergien einhüllenden Taylor–Grenze wird das Energieniveau signifikant durch die Bildung der Mikrostruktur und damit einhergehenden Phasenmischungen auf ein niedrigeres Niveau befördert bzw. die zu Grunde liegende Energie wird *relaxiert*.

Aus algorithmischer Sicht interessant ist die Entwicklung der Parameter $\Lambda_i, i = 1 \dots NV$ und Γ zur Einhaltung der Massenrestriktionen. Dabei fällt insbesondere auf, dass diese Parameter bereits im unbelasteten Zustand „aktiv“ sind, da die korrespondierenden treibenden Kräfte der Volumenfraktionen eine Abminderung dieser Werte fordern. Sobald die Summe der Volumenfraktionen den Wert 1 erreicht sorgt der Parameter Γ für die Einhaltung der Massenrestriktion.

Abb. 8.8 zeigt die Veränderung des Materialverhaltens auf Grund verschiedener Vorgaben bezüglich der Temperatur für einen kompletten Lastzyklus. Die elastischen Pfade verlaufen dabei immer auf verlängerten „Hookeschen Geraden“, welche das jeweilige Spannungs–Dehnungs–Diagramm einrahmen. Lediglich das Niveau der Spannungen während der Transformationen sowie die Höhe der deutlich zu erkennenden Hystereseschleifen ändern sich. Dies ist darin begründet, dass durch die identische Wahl des Parameters k_θ die dissipierte Leistung und damit der Flächeninhalt der Hystereseschleife in allen Versuchen gleich groß sein muss. Dies bedingt weiterhin, dass für $T = 298 \text{ K}$ eine scheinbar bleibende Verformung im spannungslosen Zustand besteht. Da für alle hier gezeigten Fälle $T > T_0$ gilt, handelt es sich um die Visualisierung des *pseudoelastischen* Effekts.

Für $T = 278 \text{ K} < T_0$ ist in den Abb. 8.9 und 8.10 das Verhalten für den *pseudoplastischen* Fall bezüglich der Spannungs–Dehnungs–Beziehung sowie der Entwicklung der Phasenanteile dargestellt. Ausgehend von gleichverteiltem Martensit im Ausgangszustand bildet sich bei fortschreitender Belastung gemäß (8.1) eine präferierte Martensitvariante 1 im Zug– sowie zwei Varianten 2 und 3 im Druckbereich aus, wobei die Transformationsbereiche hier nicht durch ein Spannungsplateau gekennzeichnet sind sondern eine markante Steigung aufweisen. Die optimalen Laminatorientierungen ergeben sich identisch zu den in Abb. 8.4 und 8.5 gezeigten Resultaten für den pseudoelastischen Versuch.

Wie bereits erwähnt, besteht die Möglichkeit über den Parameter k_θ die Höhe der Hystereseschleife zu beeinflussen, was in Abb. 8.11 für einen Lastzyklus unter $T = 338 \text{ K}$ gezeigt ist. Für Werte $k_\theta \mapsto 0$ nähert man sich der *Maxwellschen Gerade* an und damit dem Fall einer kompletten Relaxierung des zu Grunde liegenden Energiepotenzials ohne Berücksichtigung von Dissipation.

Der Parameter k_n vermag ebenfalls das Materialverhalten signifikant zu beeinflussen, wenn auch auf andere Art und Weise. Abb. 8.12 zeigt für einen Lastzyklus, der auf den Kompressionsbereich beschränkt ist, die Spannungs–Dehnungs–Beziehung für unterschiedliche Parameter k_n , wobei $k_\theta = 0.01$ gesetzt wurde. Je kleiner der Parameter gewählt wird, desto

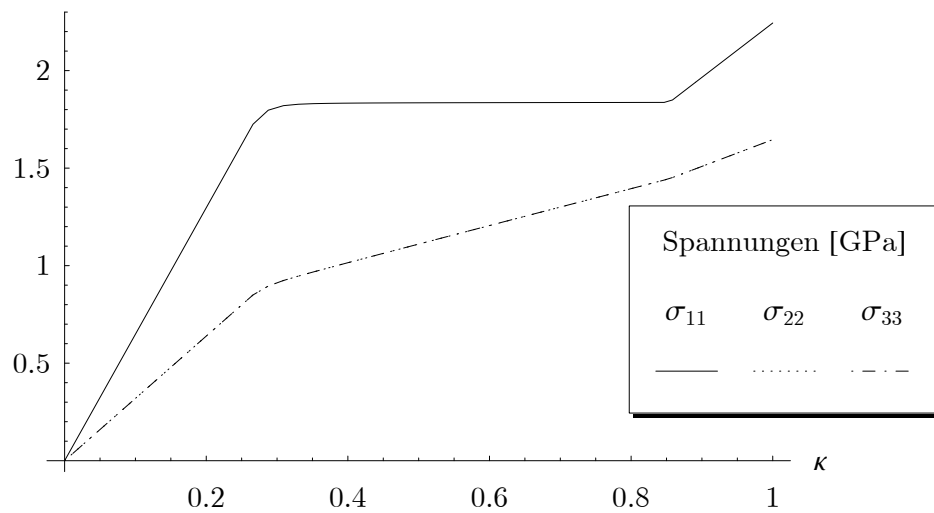


Abbildung 8.1.: Resultierende Normalspannungen (pseudoelastisch)

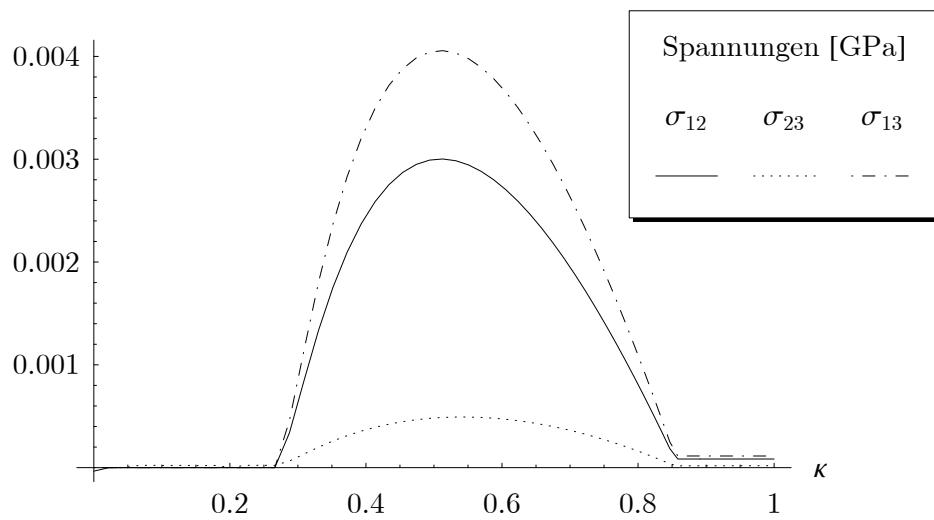


Abbildung 8.2.: Resultierende Schubspannungen (pseudoelastisch)

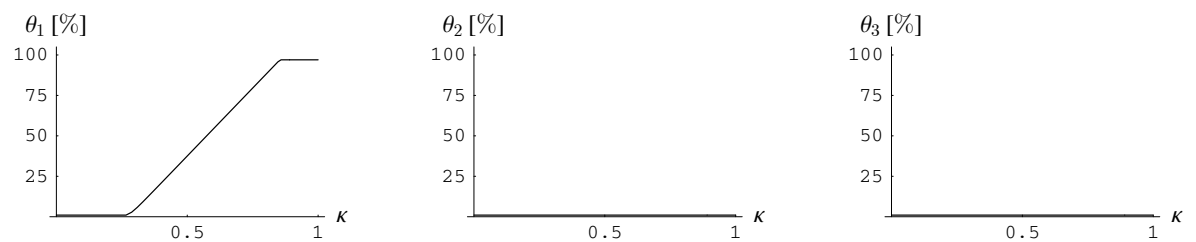


Abbildung 8.3.: Resultierende Volumenfraktionen Martensit (pseudoelastisch)

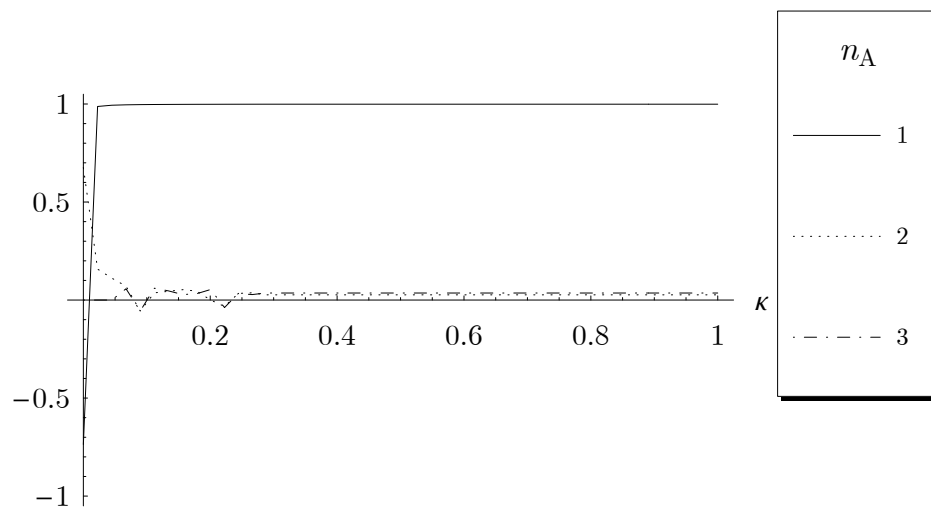


Abbildung 8.4.: Resultierende Komponenten der Richtung n_A (pseudoelastisch)

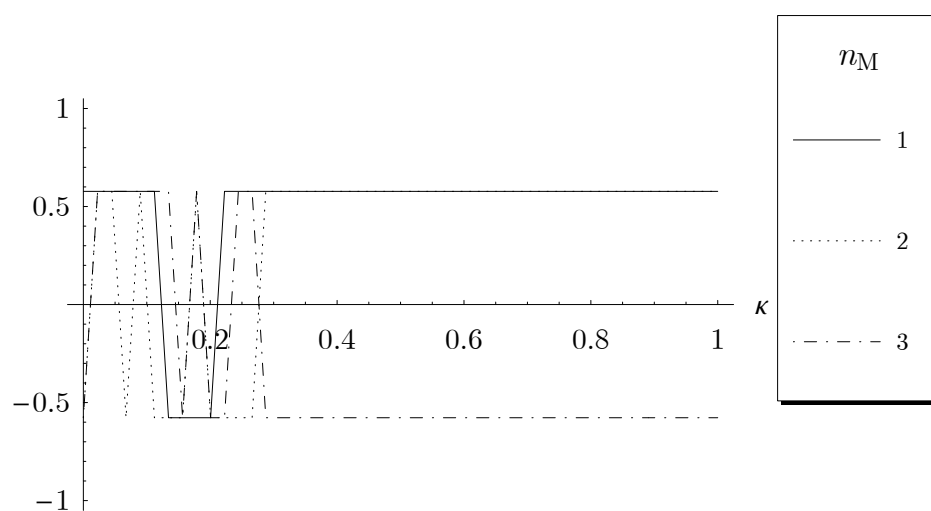


Abbildung 8.5.: Resultierende Komponenten der Richtung n_M (pseudoelastisch)

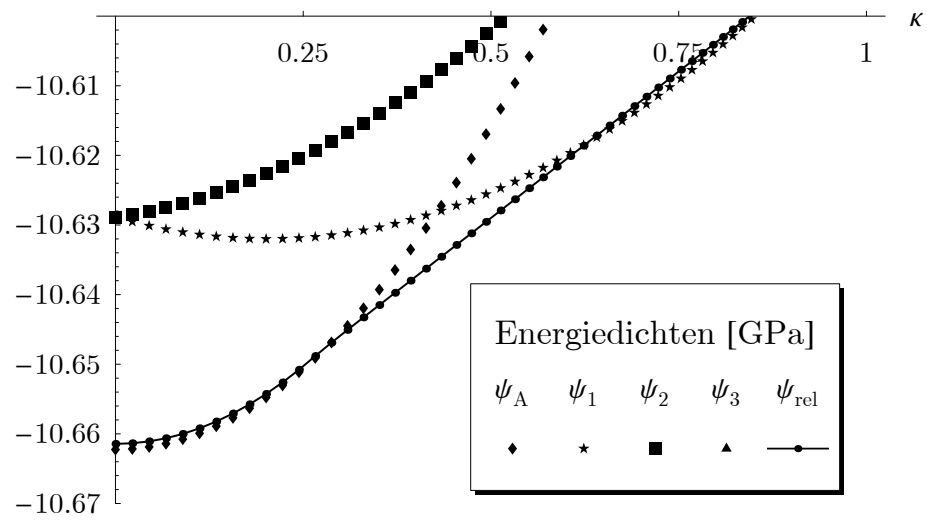


Abbildung 8.6.: Resultierende, relaxierte Energiedichte (pseudoelastisch)

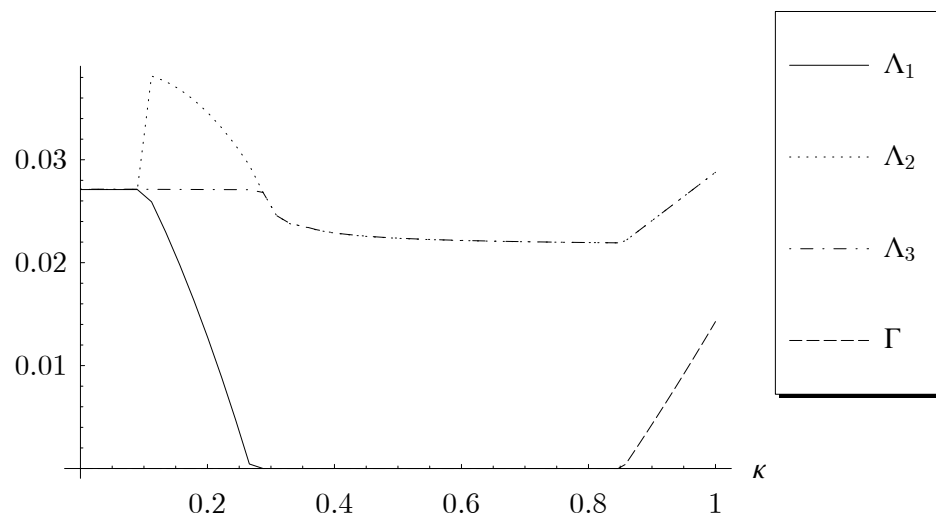


Abbildung 8.7.: Resultierende Strafparameter (pseudoelastisch)

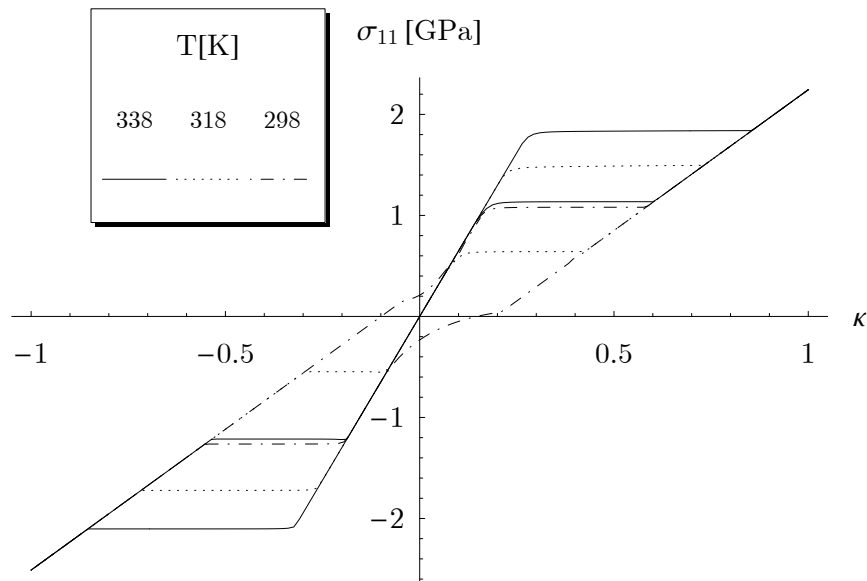


Abbildung 8.8.: Resultierende Spannungen σ_{11} für unterschiedliche Temperaturen (pseudoelastisch)

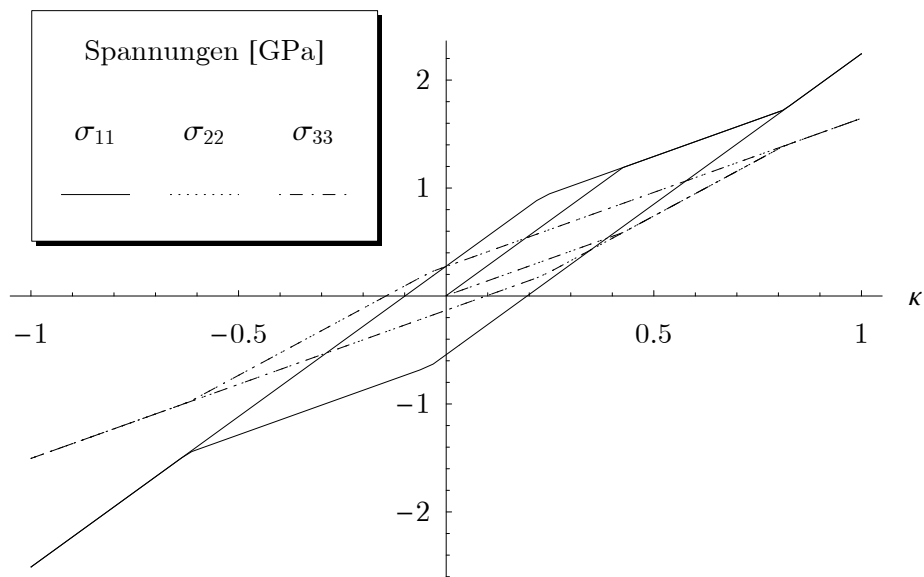


Abbildung 8.9.: Resultierende Normalspannungen für $T = 278$ K (pseudoplastisch)

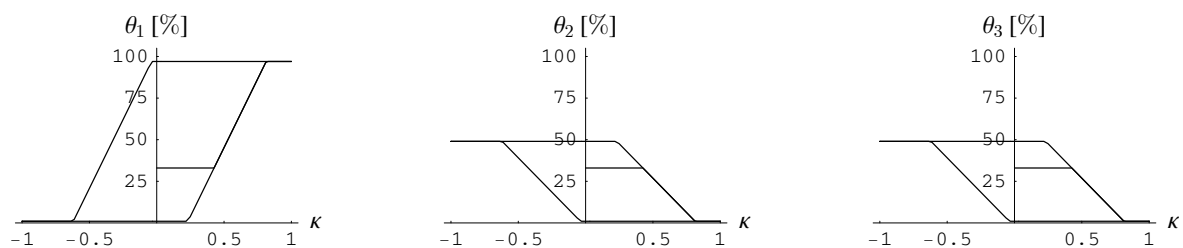


Abbildung 8.10.: Resultierende Volumenfraktionen Martensit für $T = 278$ K (pseudoplastisch)

früher setzt ein Rückgang des Absolutwertes der Spannung σ_{11} ein, die in jedem der Fälle zu einem bestimmten und zudem identischen Wert konvergiert. Die Abnahme der Spannung ist in der Umordnung der Mikrostruktur nach einsetzender Phasentransformation begründet, wie es in den Abb. 8.13 bis 8.15 für alle 3 Komponenten der Laminatorientierung n_M gezeigt ist. Dementsprechend ändert sich das Niveau der Rücktransformationsspannung für die einzelnen Fälle, da der Flächeninhalt der Hystereseschleife erneut identisch sein muss.

8.2. Analyse verschiedener Materialien und Lastpfade

Dieser Abschnitt soll dazu dienen, die effektive Materialantwort der Stoffgesetze für unterschiedliche Materialien respektive Transformationsmodi sowie verschiedene Belastungen zu analysieren, wobei hier erneut die Beschränkung auf das Modell der Rang-1-Konvexifizierung verbunden mit dem Evolutionsgesetz des Typs Tresca gilt. Zudem wird lediglich der pseudoelastische Effekt aufgeführt bei einer verwendeten Temperatur von $T = 318$ K, da die Analysen des pseudoplastischen Effekts im Rahmen dieses Abschnitts keine signifikanten Änderungen zu den bereits in Abschnitt 8.1 gezeigten Resultaten aufweisen. Sofern nicht anders erwähnt wurde der Dissipationsparameter $k_\theta = 0.01$ GN/(m² s) gesetzt, während k_n grundsätzlich so hoch gewählt wurde, dass eine Evolution der Laminatorientierungen hier ausgeschlossen wurde.

Die Belastungspfade sind zum Einen als einaxialer Zug der Form

$$\varepsilon = \kappa(t) \begin{pmatrix} \varepsilon_{max} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (8.3)$$

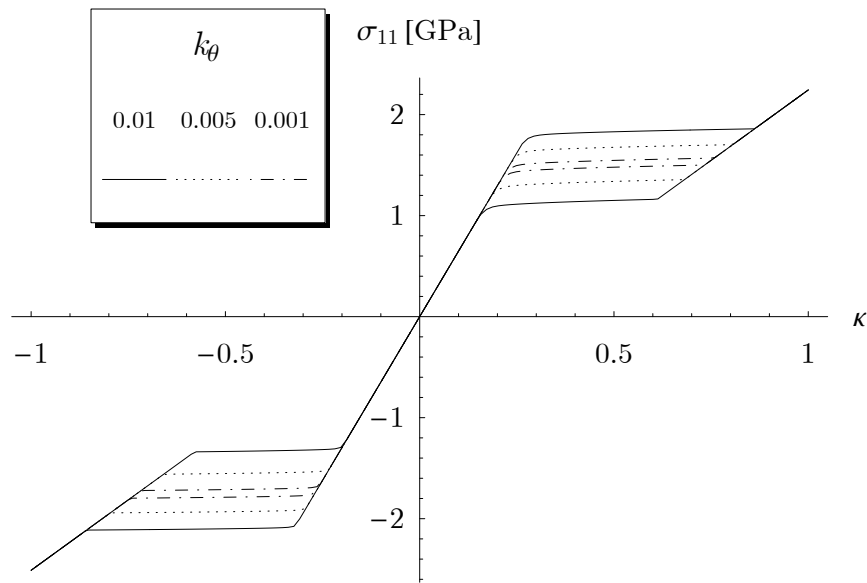
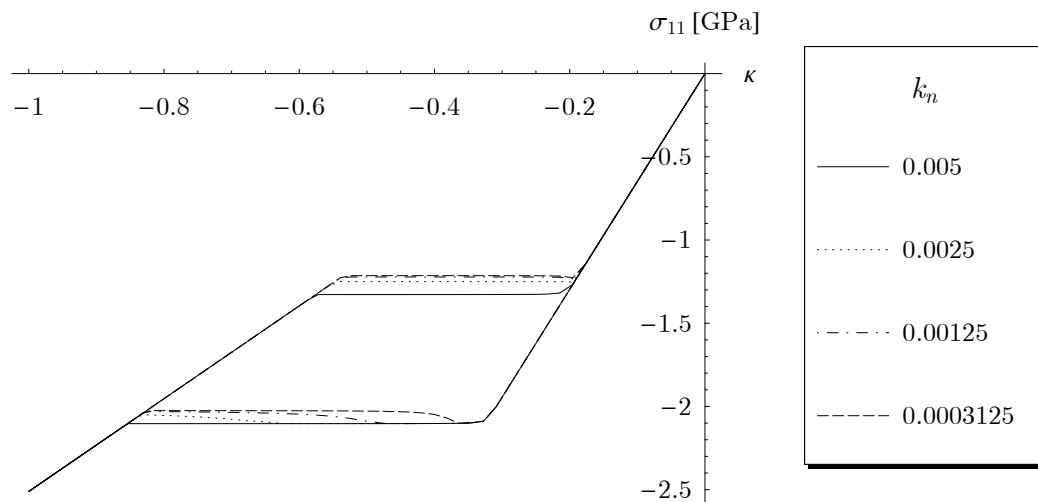
und zum Anderen als reine Scherung gemäß

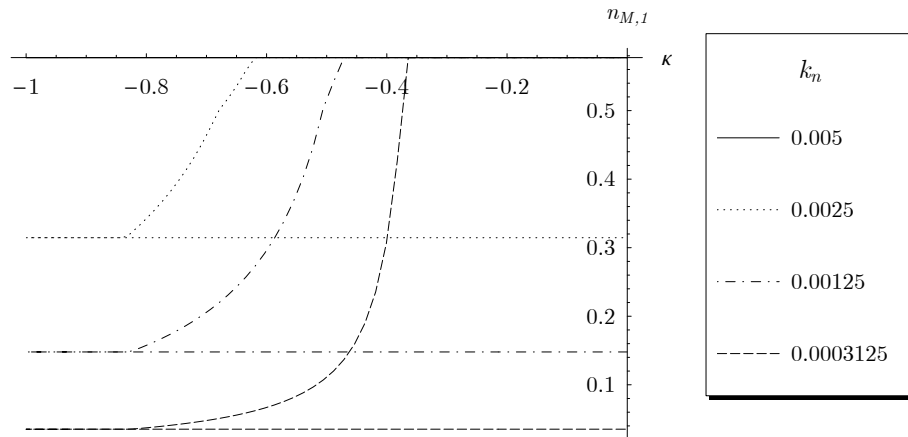
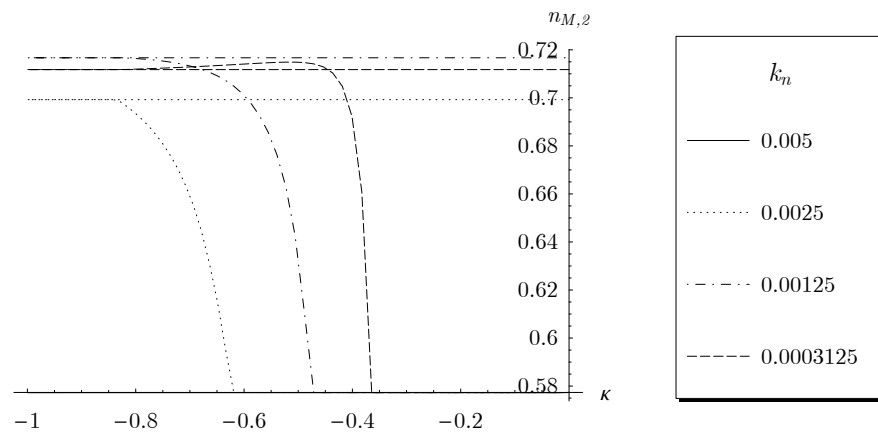
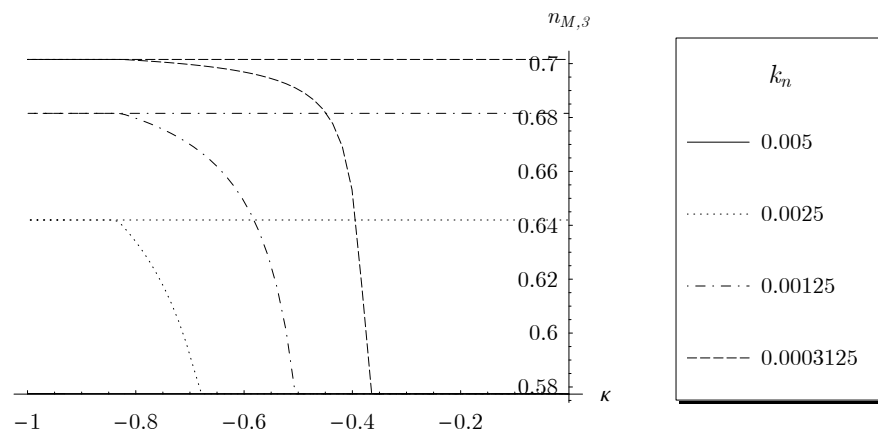
$$\varepsilon = \kappa(t) \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \gamma_{max} \\ 0 & \gamma_{max} & 0 \end{pmatrix} \quad (8.4)$$

mit $\kappa(t) = \sin(2\pi t)$ definiert, wobei $0 \leq t \leq 1$ einen kompletten Lastzyklus darstellt.

Im Folgenden sind die Ergebnisse der unterschiedlichen numerischen Analysen aufgeführt, wobei als Überschrift die Kristallstruktur des Martensits sowie die Belastungsart Verwendung finden. Die visualisierten Resultate beschränken sich dabei auf die Beziehung zwischen der relevanten Spannung σ_{11} bzw. σ_{23} und dem Belastungsparameter κ sowie die Verteilung und Entwicklung der einzelnen Phasenanteile.

Tetragonal, einaxialer Zug Der in Abb. 8.16 dargestellte Spannungsverlauf, der prinzipiell schon Bestandteil von Abb. 8.8 war, weist für $\varepsilon_{max} = 0.05$ ebenfalls klar abgegrenzte elastische und inelastische Bereiche auf, welche durch lineare Verläufe der Spannungen bzw. horizontal verlaufende Spannungen (Spannungsplateaus) gekennzeichnet sind. Auffällig ist dabei die Tatsache, dass sich eine Zug–Druck–Asymmetrie ergibt. Dies ist in der unterschiedlichen Entwicklung der Phasenanteile begründet (siehe Abb. 8.17). Da die Kristallstrukturen der Martensitvarianten 2 und 3 jeweils gegenüber der Belastungsrichtung gleichgerichtet sind, bilden diese sich gleichmäßig im Druckbereich aus.

Abbildung 8.11.: Resultierende Spannungen σ_{11} (pseudoelastisch)Abbildung 8.12.: Resultierende Spannungen σ_{11} (pseudoelastisch)

Abbildung 8.13.: Resultierende Komponente 1 der Orientierung $\mathbf{n}_M$ (pseudoelastisch)Abbildung 8.14.: Resultierende Komponente 2 der Orientierung $\mathbf{n}_M$ (pseudoelastisch)Abbildung 8.15.: Resultierende Komponente 3 der Orientierung $\mathbf{n}_M$ (pseudoelastisch)

Tetragonal, reine Scherung Bei diesem mit $\gamma_{max} = 0.05$ durchgeführten Versuch zeigt sich, wie in den Abb. 8.18 und 8.19 zu erkennen ist, keine Asymmetrie zwischen Zug- und Druckbereich. Dies ist darin begründet, dass es bei einer reinen Scherung keine präferierten Martensit-Varianten gibt und sich daher alle Phasenanteile immer gleichmäßig entwickeln.

Orthorhombisch, einaxialer Zug Der Verlauf der Spannung σ_{11} für den Lastfall einaxialer Zug mit $\varepsilon_{max} = 0.06$ und einem hier gewählten $k_\theta = 0.005 \text{ GN}/(\text{m}^2 \text{ s})$ lässt die deutlichsten Unterschiede bezüglich des Materialverhaltens im Zug- und Druckbereich aller Materialpunktanalysen erkennen. Abb. 8.20 zeigt, dass die elastischen und inelastischen Bereiche in diesem Fall durch sanfte Übergänge gekennzeichnet sind, wobei im Zugbereich das Spannungsniveau während der Transformation deutlich geringer ausfällt als im Druckbereich und zudem nicht einem Spannungsplateau gleicht. Die sich einstellenden Phasenanteile der Mischung können Abb. 8.21 entnommen werden.

Orthorhombisch, reine Scherung Während die orthorhombische Transformation unter einaxialem Zug die deutlichste Zug-Druck-Asymmetrie aufweist, lässt die in Abb. 8.22 dargestellte, durch reine Scherung mit $\gamma_{max} = 0.06$ hervorgerufene Materialantwort die signifikanteste Abweichung des Spannungsverlaufes während der Phasentransformationen von einem Spannungsplateau erkennen. Ferner ist festzustellen, dass in allen Transformationsbereichen betragsmäßig abfallende Spannungen vorliegen, also eine Art Entfestigung. Dieses eventuell zunächst überraschende Ergebnis ist aber vollkommen konform mit den in Kapitel 4 behandelten, theoretischen Grundlagen. Die verwendete Relaxierungsmethode ergibt eine obere Grenze der quasikonvexen Hülle, welche wiederum eine obere Grenze für die Konvexifizierung darstellt. Demnach muss die effektive Energiedichte der hier benutzten Methode nicht zwangsläufig konvex sein, was gleichbedeutend mit der Möglichkeit abfallender Spannungen ist. Dies wird auch bei Betrachtung der erhaltenen Energie entlang des Lastpfads in Abb. 8.24 deutlich: Der Verlauf ist durch negativ gekrümmte und damit nicht-konvexe Bereiche gekennzeichnet.

Monoklin, einaxialer Zug Der Verlauf der effektiven Spannung weist im Falle eines einaxialen Zugs mit $\varepsilon_{max} = 0.09$ und $k_\theta = 0.01$ ausgeprägte Spannungsplateaus mit nicht stetig differenzierbaren Übergängen auf. Zudem ist das Niveau der Transformationsspannungen deutlich höher als bei den zuvor untersuchten Materialien. Abb. 8.26 zeigt, dass keine der aktiven Martensitvarianten sowohl im Zug- als auch im Druckbereich präsent ist.

Monoklin, reine Scherung Lediglich je 2 Martensitvarianten entwickeln sich bei einer vorherrschenden Scherung des Materials mit $\gamma_{max} = 0.09$ (siehe Abb. 8.28). Der Verlauf der Spannung σ_{23} , wie er in Abb. 8.27 dargestellt ist, ist nahezu identisch bezüglich des Zug- und Druckbereiches, allein im letzteren steigt die Spannung gegen Ende der Transformation leicht an. Im Gegensatz zum einaxialen Zug, welcher die höchsten Transformationspannungen ergab, sind diese für reine Scherung am geringsten verglichen mit allen anderen Ergebnissen.

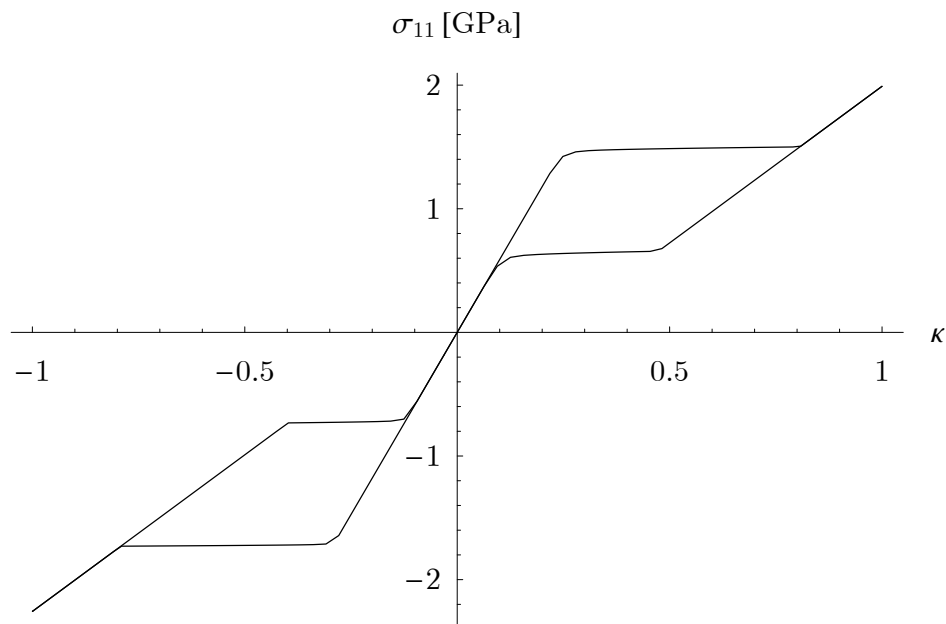
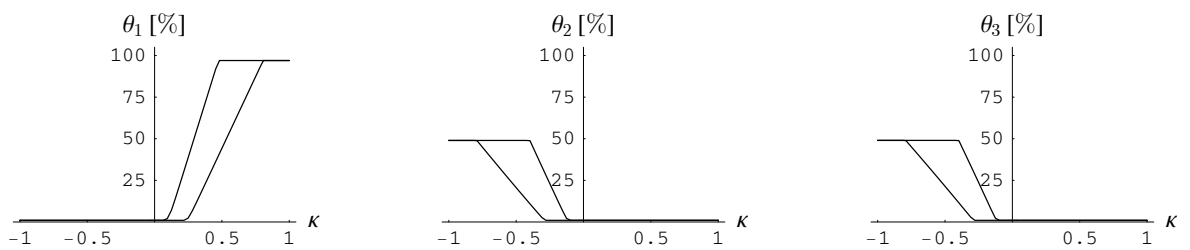
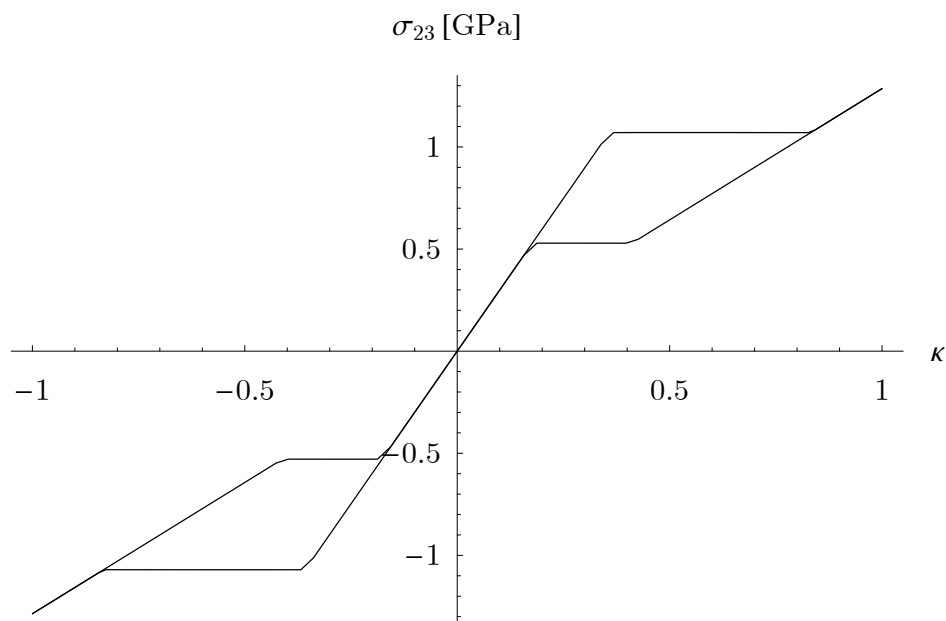
Abbildung 8.16.: Resultierende Spannung σ_{11} (kubisch–tetragonal, einaxialer Zug)

Abbildung 8.17.: Resultierende Volumenfraktionen (kubisch–tetragonal, einaxialer Zug)

Abbildung 8.18.: Resultierende Spannung σ_{23} (kubisch–tetragonal, reine Scherung)

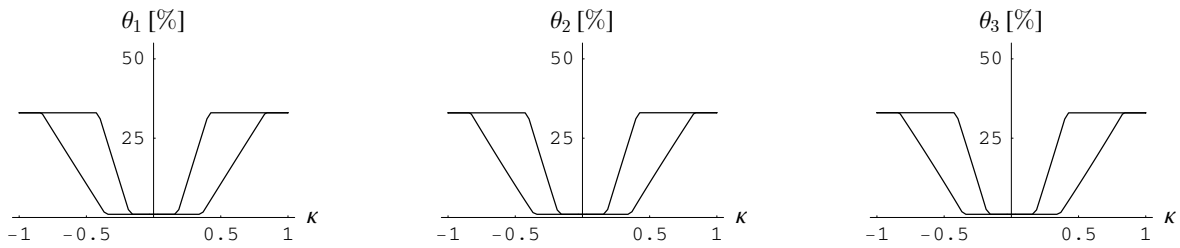


Abbildung 8.19.: Resultierende Volumenfraktionen (kubisch–tetragonal, reine Scherung)

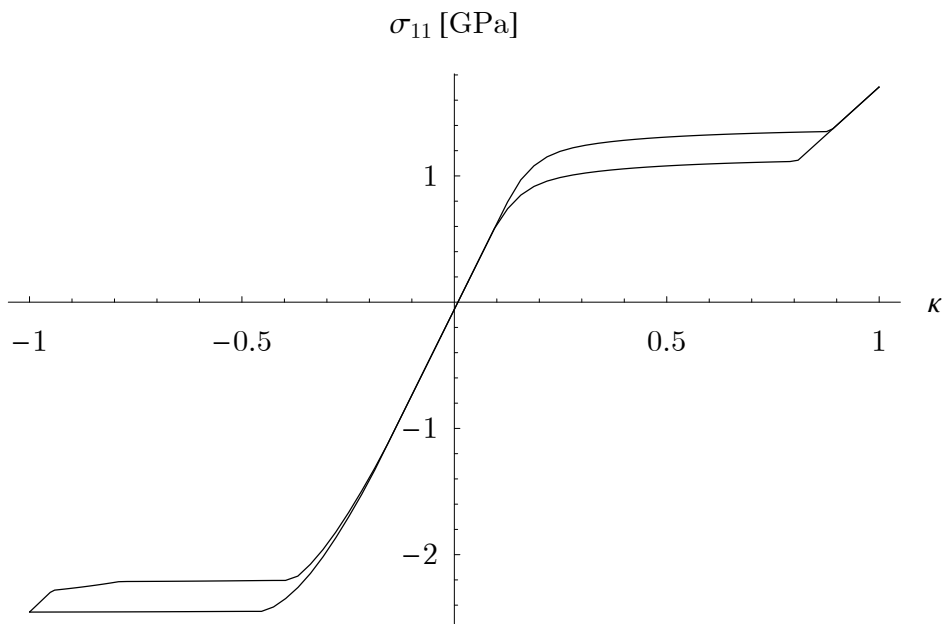
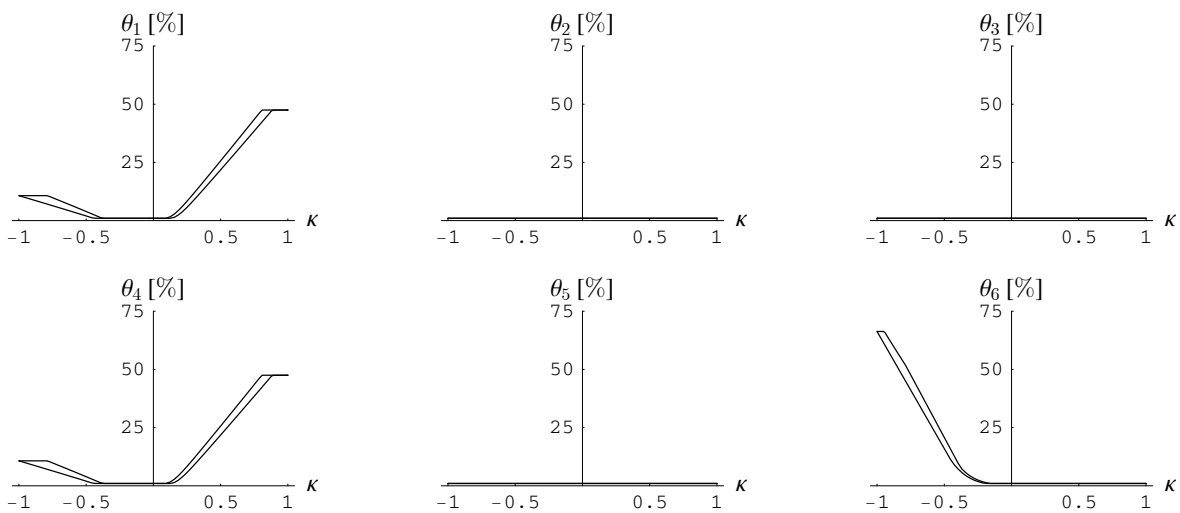
Abbildung 8.20.: Resultierende Spannung σ_{11} (kubisch–orthorhombisch, einaxialer Zug)

Abbildung 8.21.: Resultierende Volumenfraktionen (kubisch–orthorhombisch, einaxialer Zug)

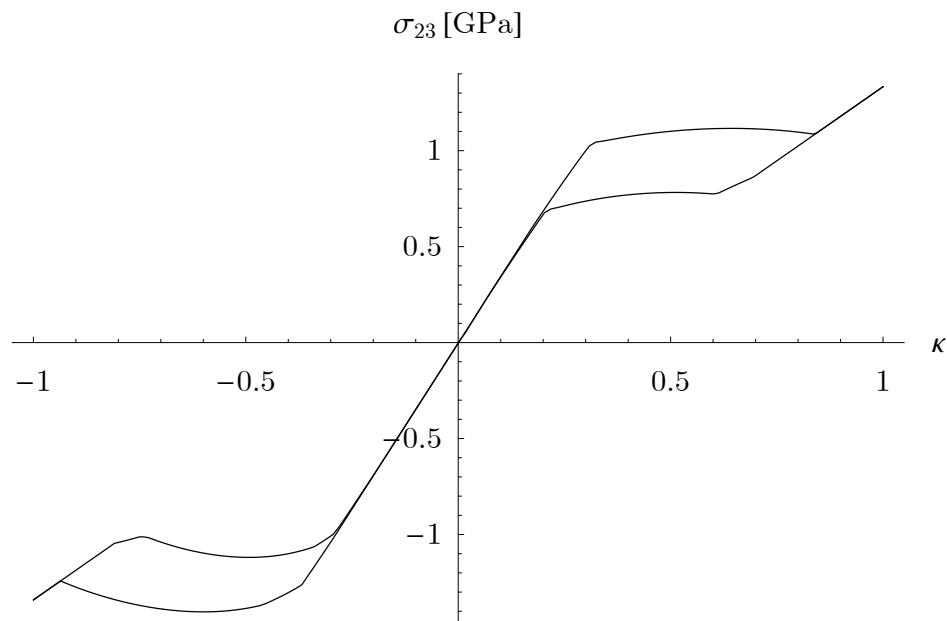
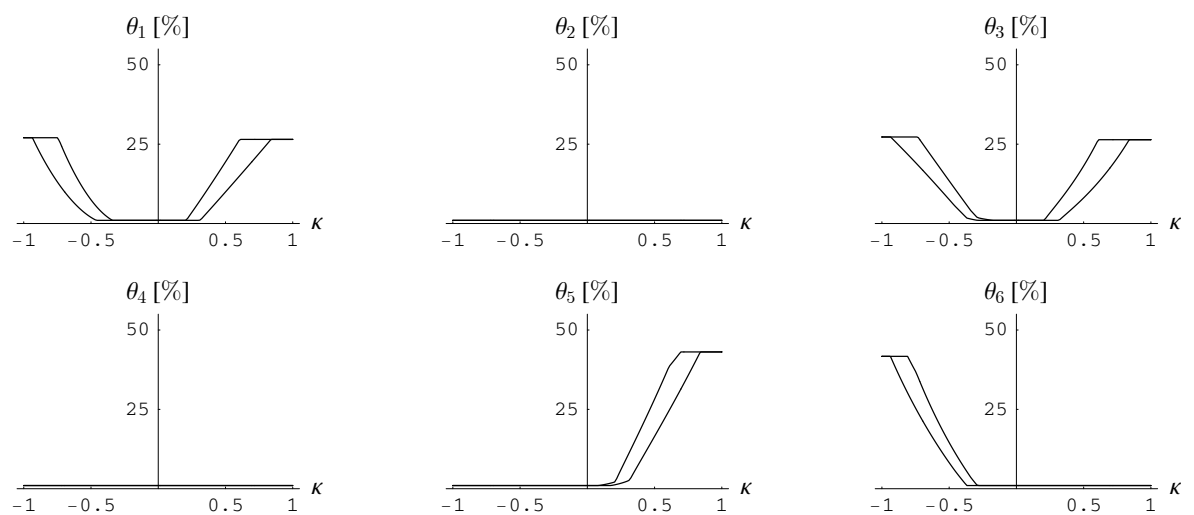
Abbildung 8.22.: Resultierende Spannung σ_{23} (kubisch–orthorhombisch, reine Scherung)

Abbildung 8.23.: Resultierende Volumenfraktionen (kubisch–orthorhombisch, reine Scherung)

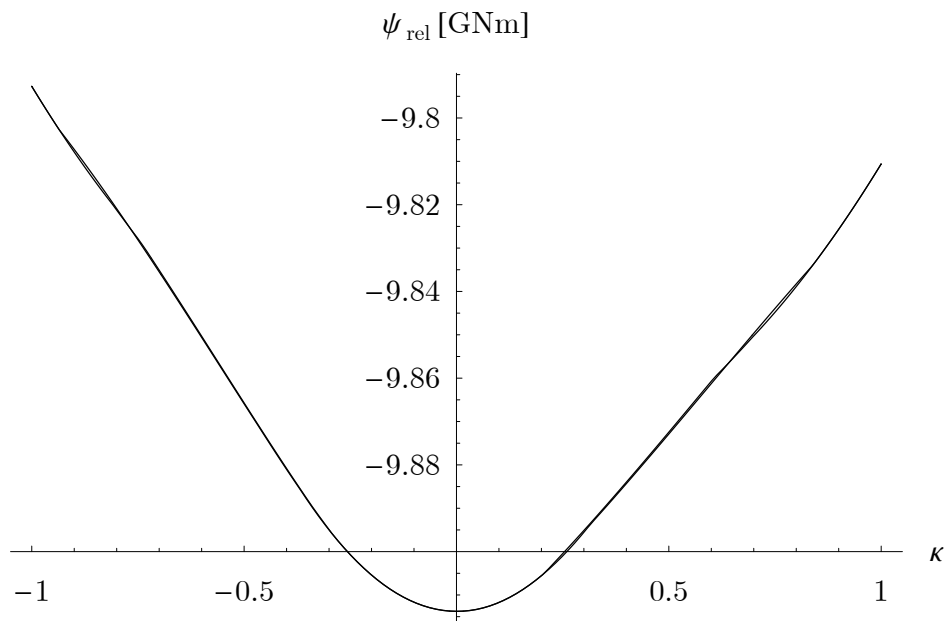


Abbildung 8.24.: Relaxierte Energie (kubisch–orthorhombisch, reine Scherung)

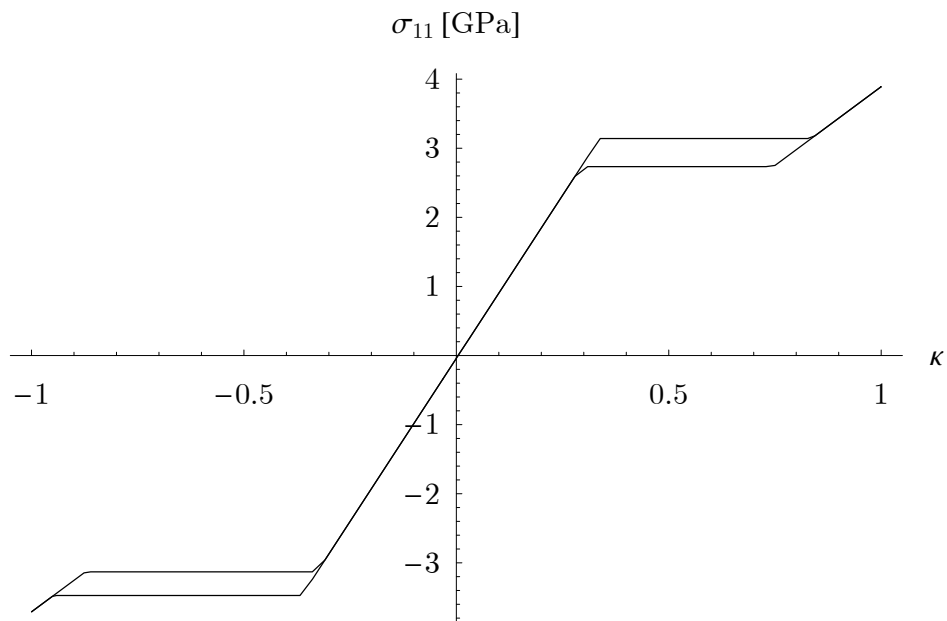


Abbildung 8.25.: Resultierende Spannung σ_{11} (kubisch–monoklin, einaxialer Zug)

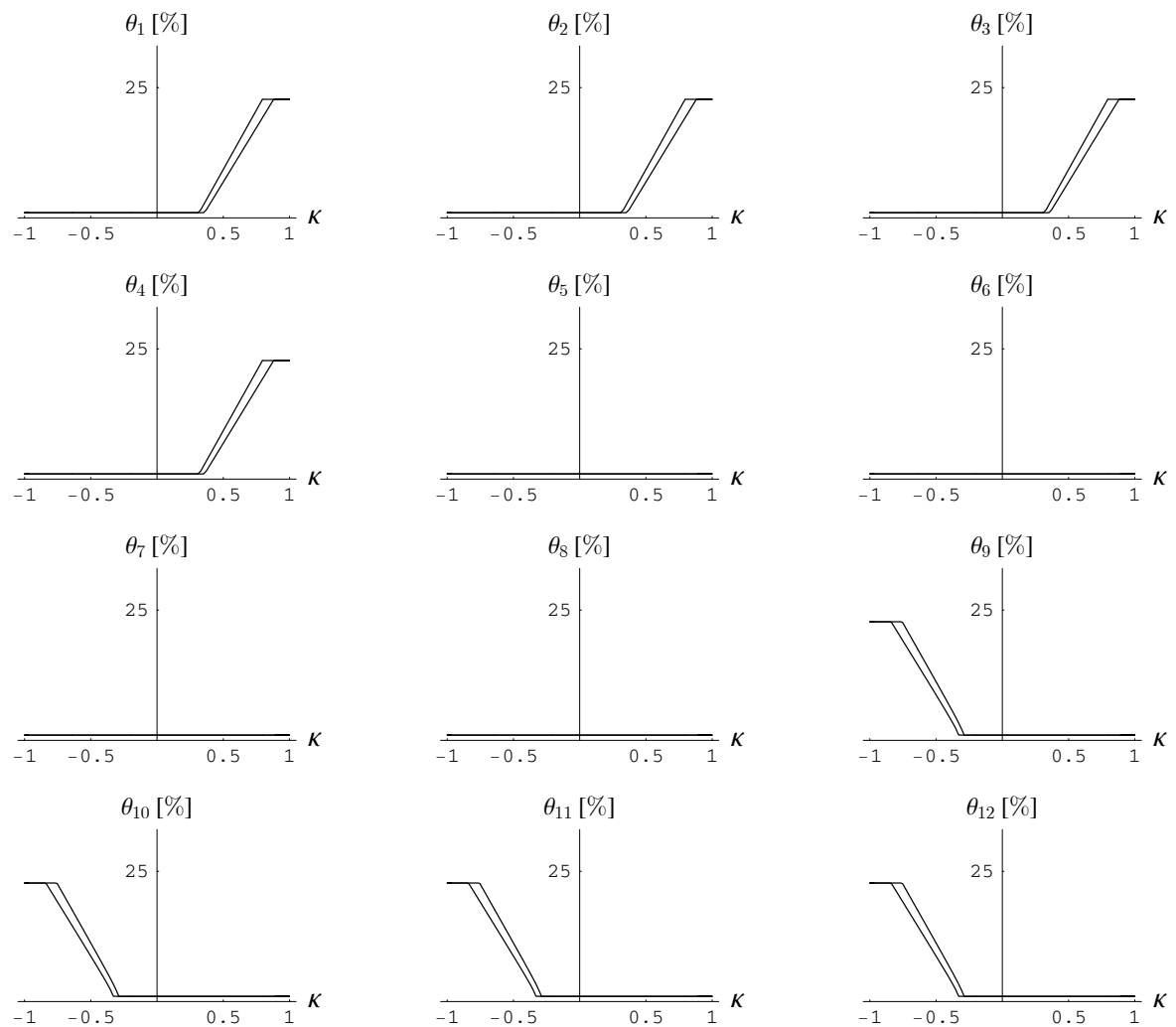
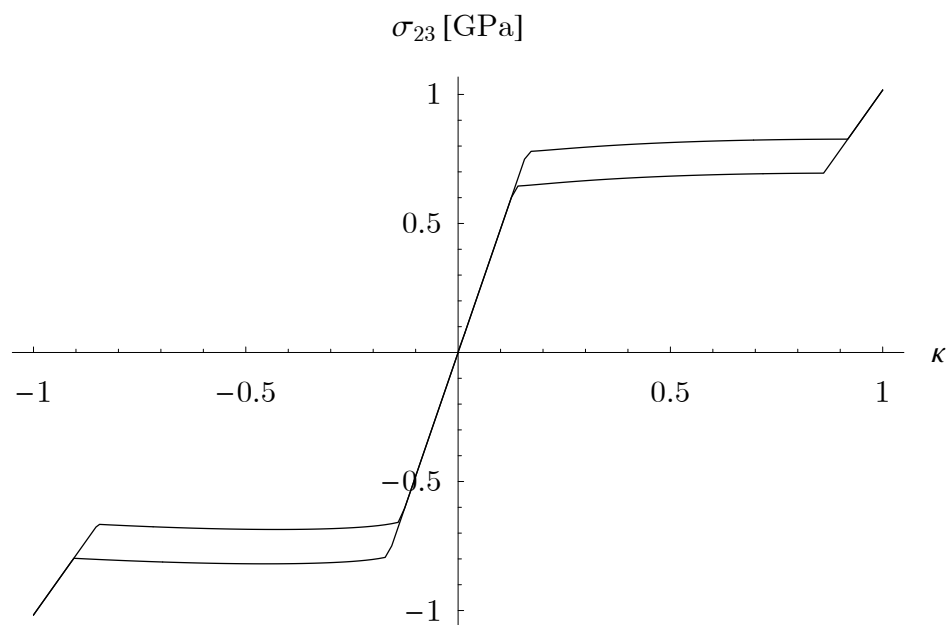


Abbildung 8.26.: Resultierende Volumenfraktionen (kubisch-monoklin, einaxialer Zug)

Abbildung 8.27.: Resultierende Spannung σ_{23} (kubisch-monoklin, reine Scherung)

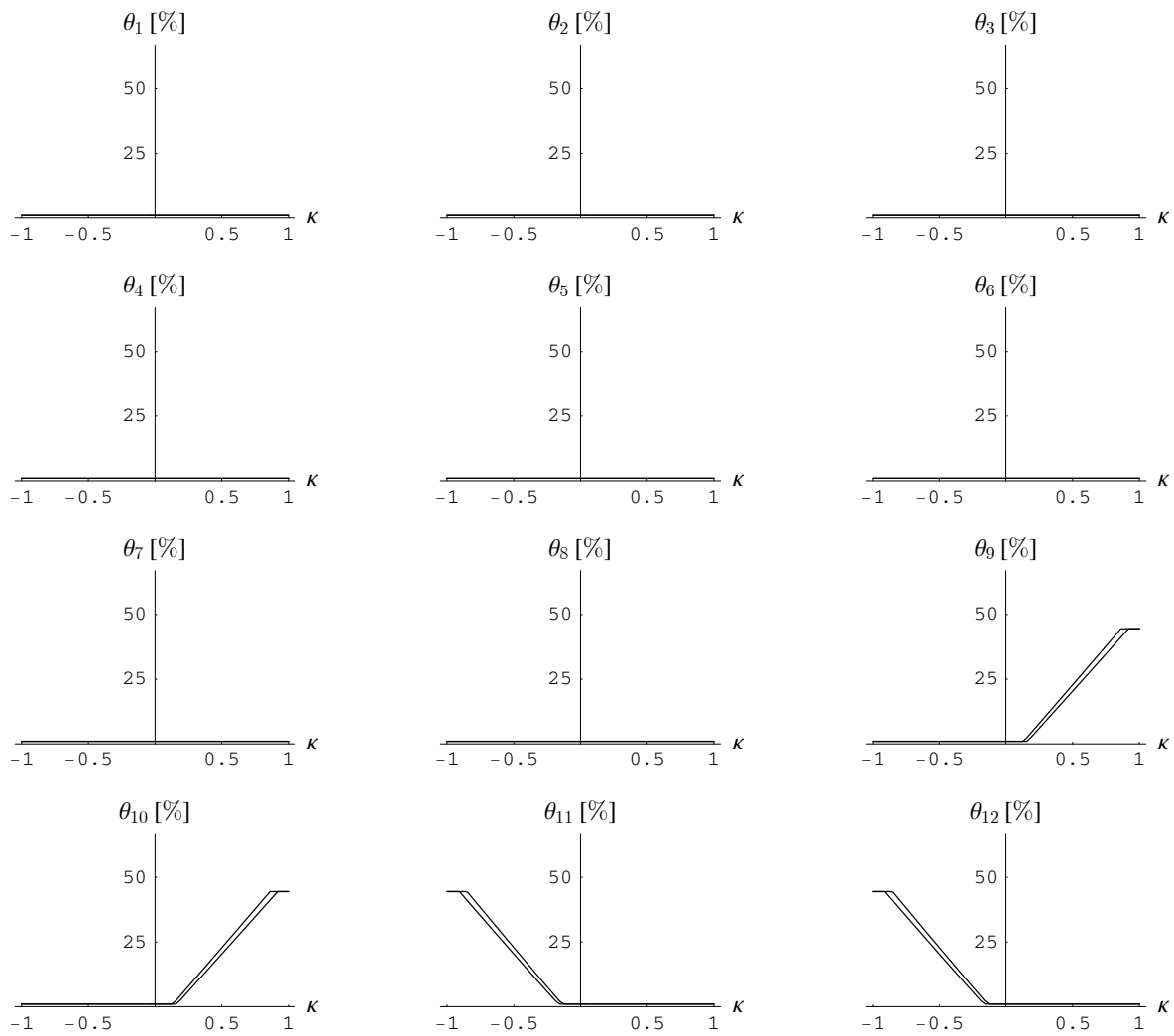


Abbildung 8.28.: Resultierende Volumenfraktionen (kubisch–monoklin, reine Scherung)

8.3. Vergleich unterschiedlicher Stoffgesetze

8.3.1. Vergleich der Transformationsmodi

In diesem Abschnitt sollen die Unterschiede zwischen den einzelnen Stoffgesetzen grundlegend an Hand von visualisierten „Fließgrenzen“ dargelegt werden. Dazu wurden Dehnungszustände der Form

$$\varepsilon = \kappa(t) \begin{pmatrix} \cos(\varphi)\varepsilon_{max} & 0 & 0 \\ 0 & \sin(\varphi)\varepsilon_{max} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (8.5)$$

bzw.

$$\varepsilon = \kappa(t) \begin{pmatrix} \cos(\varphi)\varepsilon_{max} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sin(\varphi)\varepsilon_{max} \\ 0 & \sin(\varphi)\varepsilon_{max} & 0 \end{pmatrix} \quad (8.6)$$

für diskrete Werte $\varphi \in [0, 2\pi]$ vorgegeben. Für jede dieser Vorgaben wurde $\kappa(t)$ nun so lange erhöht bis eine Phasentransformation einsetzte und die in diesem Zustand geltenden Dehnungen gespeichert. Auf Grund der kontrollierten Dehnungen können die erzielten Resultate nicht direkt mit Analysen wie etwa von LExcellent et al. (2001) oder Gao and Huang (2002) verglichen werden, da diese abgesehen von der Tatsache, dass sie für polykristalline Werkstoffe gelten, Fließflächen in Folge kontrollierter Spannungen beinhalten. Dennoch sind hier die bei Initiierung der Transformation vorliegenden, zu den vorgegebenen Dehnungskomponenten korrespondierenden Spannungskomponenten aufgeführt.

Konvexifizierung Für einen pseudoelastischen Versuch bei $T = 318\text{ K}$ sowie $k_\theta = 0.01$ und $k_n \gg k_\theta$ erhält man im Rahmen des Stoffgesetzes auf Basis der Konvexifizierung mit dem Evolutionsgesetz nach von Mises die in Abb. 8.29 und 8.30 dargestellten Fließgrenzen. Die Abb. 8.31 bzw. 8.32 zeigen die jeweils entsprechenden Spannungskomponenten zu Beginn des Phasenübergangs. Analog sind die Ergebnisse für das Evolutionsgesetz nach Tresca in den Abb. 8.33 bis 8.36 visualisiert.

Für eingeprägte Hauptdehnungen ist bezüglich einer „hydrostatischen“ Achse $\varepsilon_{11} = \varepsilon_{22}$ für alle Transformationsmodi im Rahmen der Konvexifizierung eine deutliche Symmetrie der Fließfläche auszumachen. Während orthorhombische und monokline Kristallsysteme in diesem Zusammenhang die gleiche Charakteristik aufweisen, wobei der elastische Bereich der monoklinen Systeme größer ausfällt, weicht der elastische Bereich der tetragonalen Gitter hinsichtlich Gestalt und Größe stark davon ab.

Für die Kombination aus Axial- und Scherdehnungen ergeben sich bezüglich der Axialdehnung symmetrische Fließflächen, die je nach vorliegendem Kristallsystem stark voneinander abweichen. Auffällig ist der Unterschied hinsichtlich der Größe der elastischen Bereiche: Die monoklinen Systeme transformieren besonders bei vorherrschenden Scherungen sehr viel früher als die restlichen, während orthorhombische Materialien bei überwiegend vorhandenen Axialbeanspruchungen den kleinsten elastischen Bereich aufweisen. Das für diese Analyse verwendete Material mit tetragonalen Martensitvarianten erreicht die Fließgrenze in jedem Fall zuletzt.

Rang–1–Konvexifizierung Für identische Vorgaben verdeutlichen die Abb. 8.37 bis 8.40 das Verhalten bezüglich der Fließgrenzen für die Rang–1–Konvexifizierung, wobei sich hier auf das Evolutionsgesetz des Typs Tresca beschränkt wurde.

Ebenfalls tritt deutlich eine Symmetrie entlang der bereits zuvor genannten „hydrostatischen“ Achse für eingeprägte Hauptdehnungen in Erscheinung. Bis auf wenige „Ausreißer“ beim monoklinen Martensit verlaufen die Grenzen der elastischen Bereiche sehr glatt, weisen aber jeweils in einem Punkt einen Knick auf. Die Fehlstellen, an denen keine Symbole auf den Linien erkennbar sind, deuten auf algorithmische Probleme hin die dafür sorgten, dass für die zu Grunde liegende Parameterwahl kein Ergebnis erzielt werden konnte. An dieser Stelle sei deshalb angemerkt, dass eine den hier durchgeführten Rechnungen zu Grunde liegende Wahl sehr kleiner Zeitinkremente zur bestmöglichen Erfassung des tatsächlichen Startpunktes der Phasentransformation für numerische Instabilitäten sorgen kann. Auf Grund der Tatsache, dass sich die Form der Fließgrenzen auch mit den fehlenden Resultaten wohl kaum signifikant verändert hätten, wurden keine weiteren Bemühungen zur Findung dieser Ergebnisse unternommen.

Bei den Resultaten für die Kombination aus vorgegebenen Axial– und Scherdehnungen erhält man für die orthorhombischen Martensite ein in dem Sinne bemerkenswertes Ergebnis, dass es sich zu keiner der Achsen symmetrisch zeigt, was für alle anderen Kristallsysteme gilt (vergleiche dazu auch die Resultate der Konvexifizierung). Obwohl bereits für diesen Fall, wie aus den Abbildungen durch die erhöhte Anzahl berechneter Werte erkennbar ist, eine feinere Auflösung der verschiedenen Lastfälle durchgeführt wurde konnte dieses Phänomen nicht ergründet werden. Dies bedarf demnach eventuell noch einer tiefer greifenden Analyse.

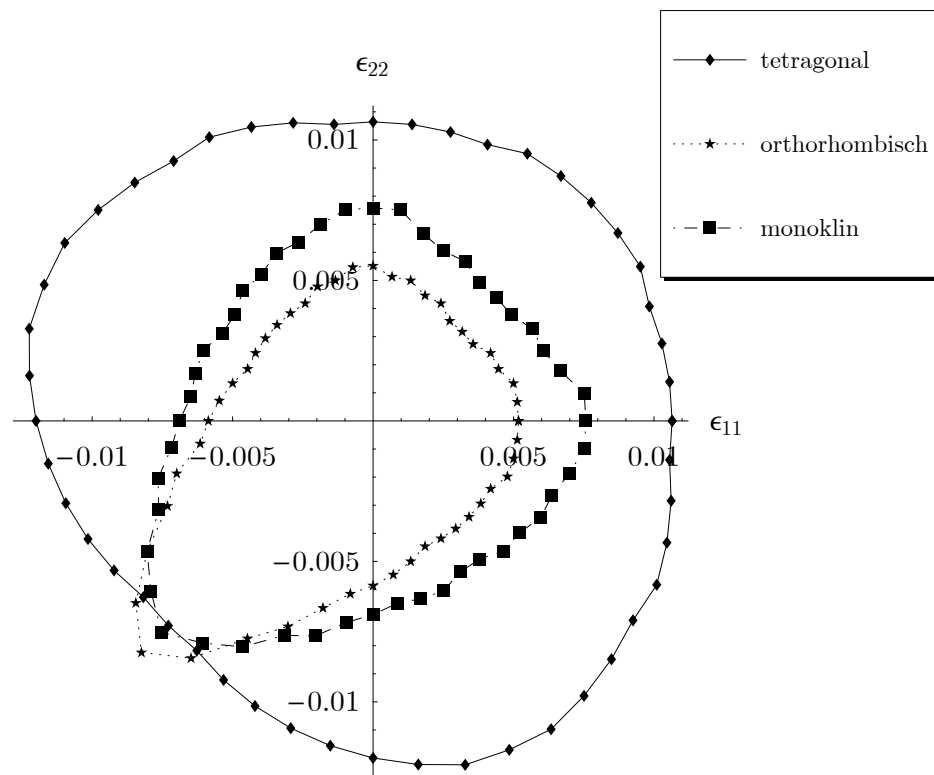


Abbildung 8.29.: Konvexifizierung: Fließgrenzen der unterschiedlichen Transformationsmodi (eingepreßte Hauptdehnungen, von Mises)

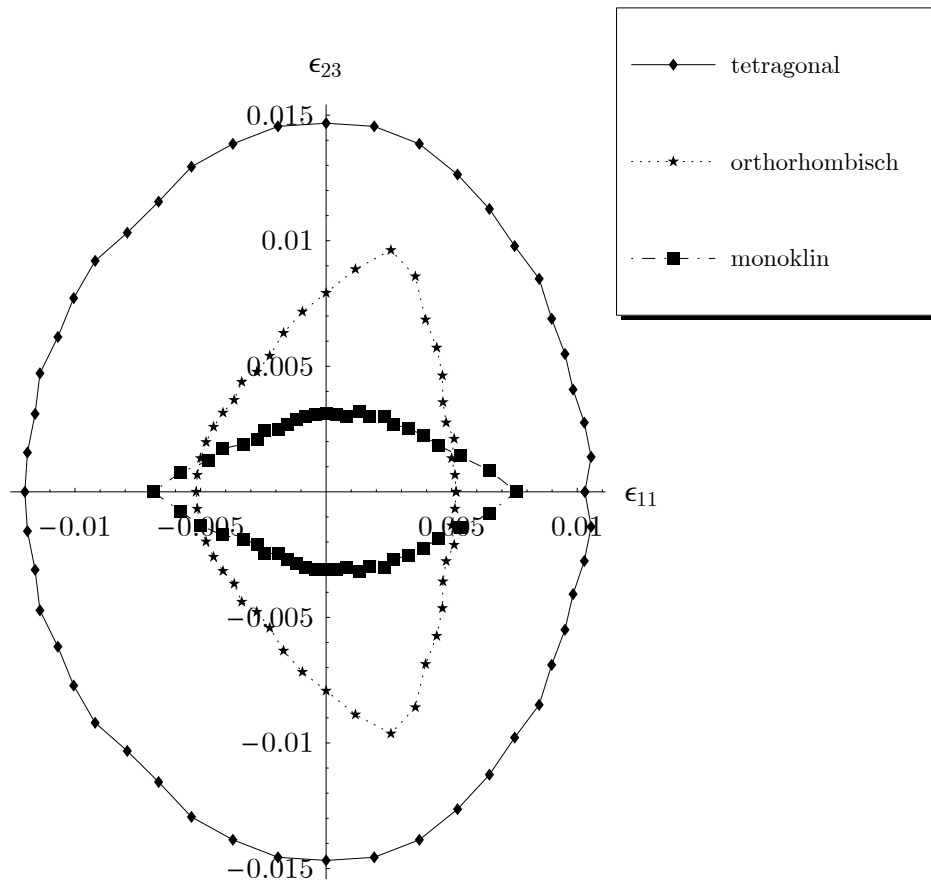


Abbildung 8.30.: Konvexifizierung: Fließgrenzen der unterschiedlichen Transformationsmodi (eingeprägte Axial- und Scherdehnungen, von Mises)

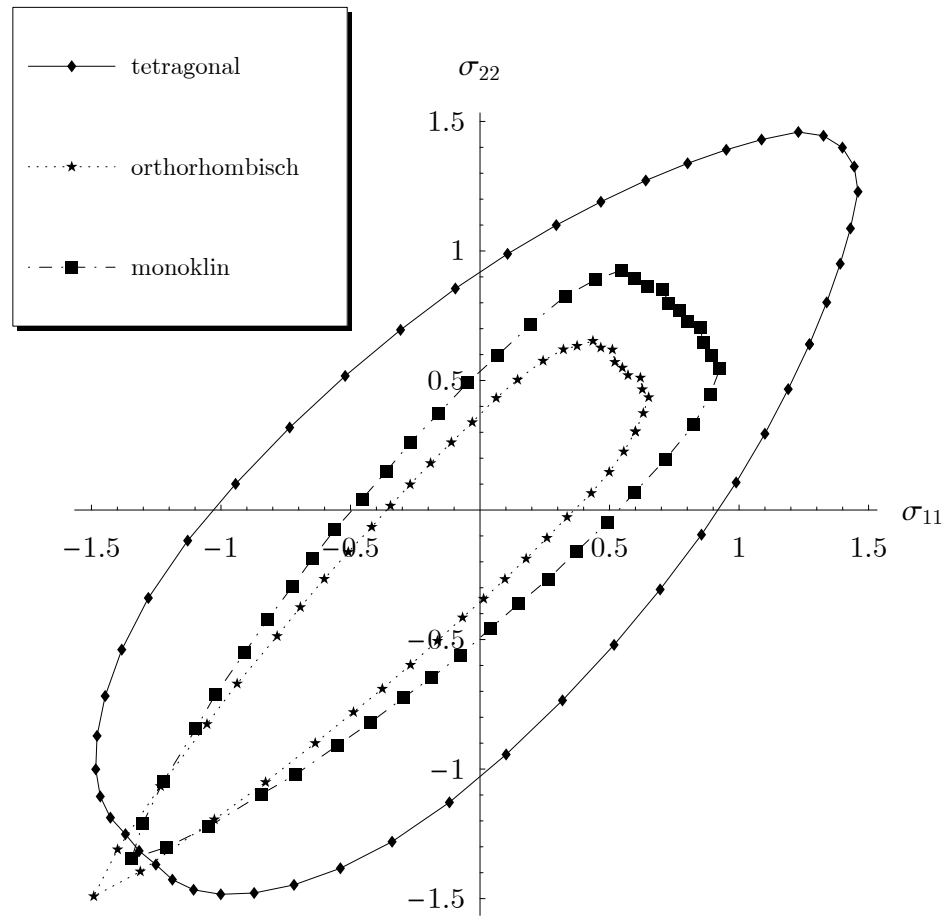


Abbildung 8.31.: Konvexifizierung: Fließgrenzen der unterschiedlichen Transformationsmodi (eingeprägte Hauptdehnungen, von Mises)

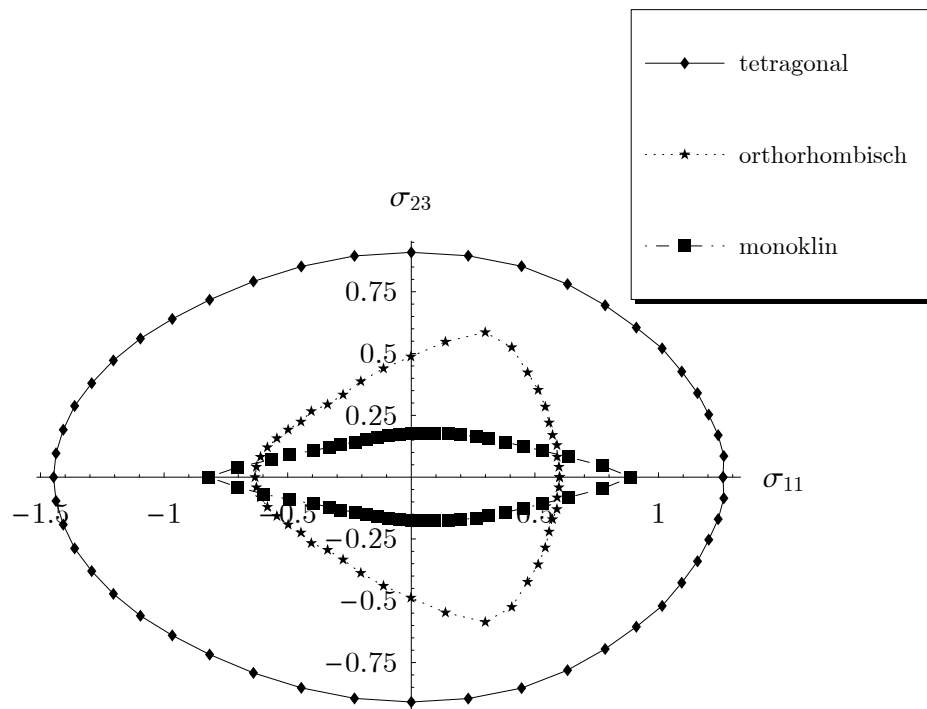


Abbildung 8.32.: Konvexifizierung: Fließgrenzen der unterschiedlichen Transformationsmodi (eingeprägte Axial- und Scherdehnungen, von Mises)

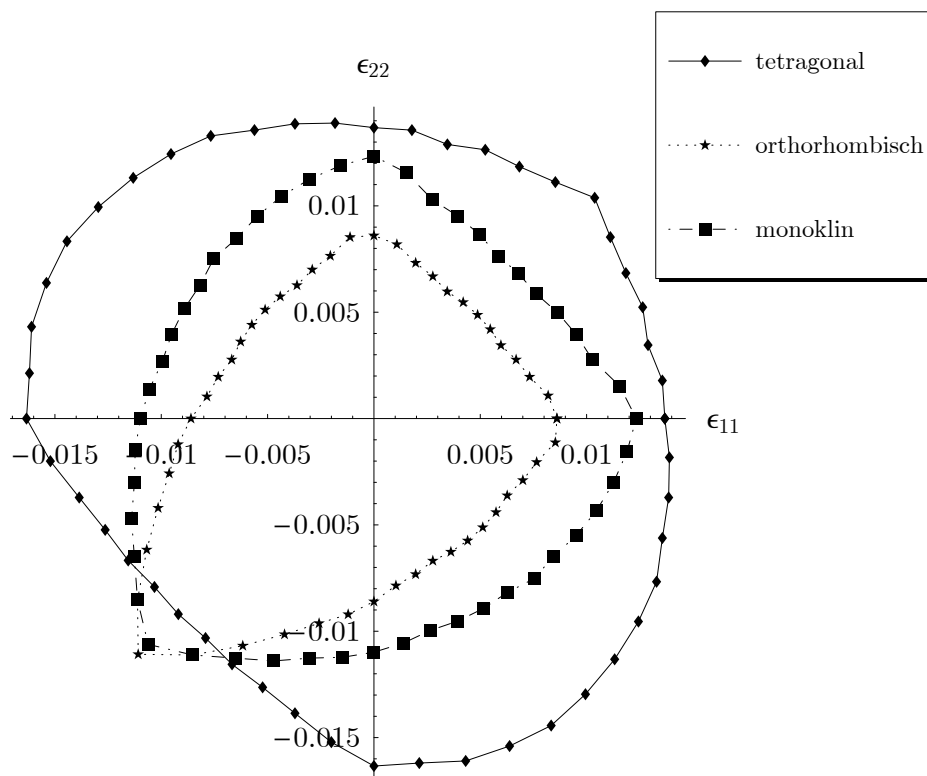


Abbildung 8.33.: Konvexifizierung: Fließgrenzen der unterschiedlichen Transformationsmodi (eingeprägte Hauptdehnungen, Tresca)

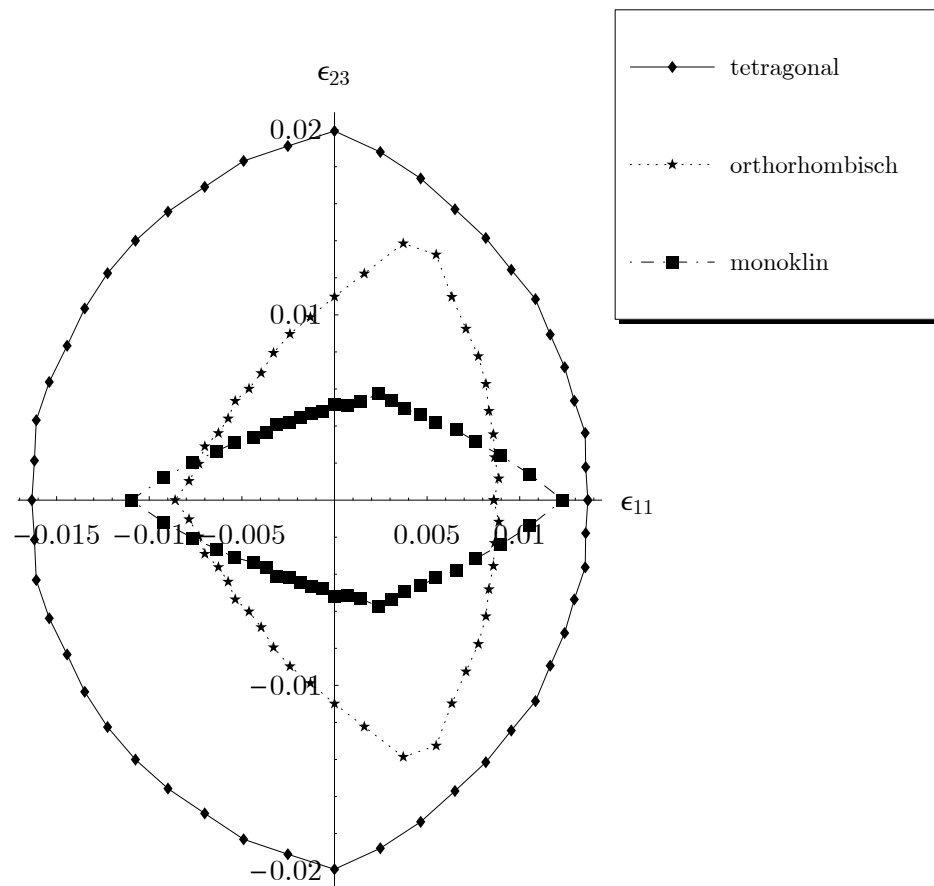


Abbildung 8.34.: Konvexifizierung: Fließgrenzen der unterschiedlichen Transformationsmodi (eingeprägte Axial- und Scherdehnungen, Tresca)

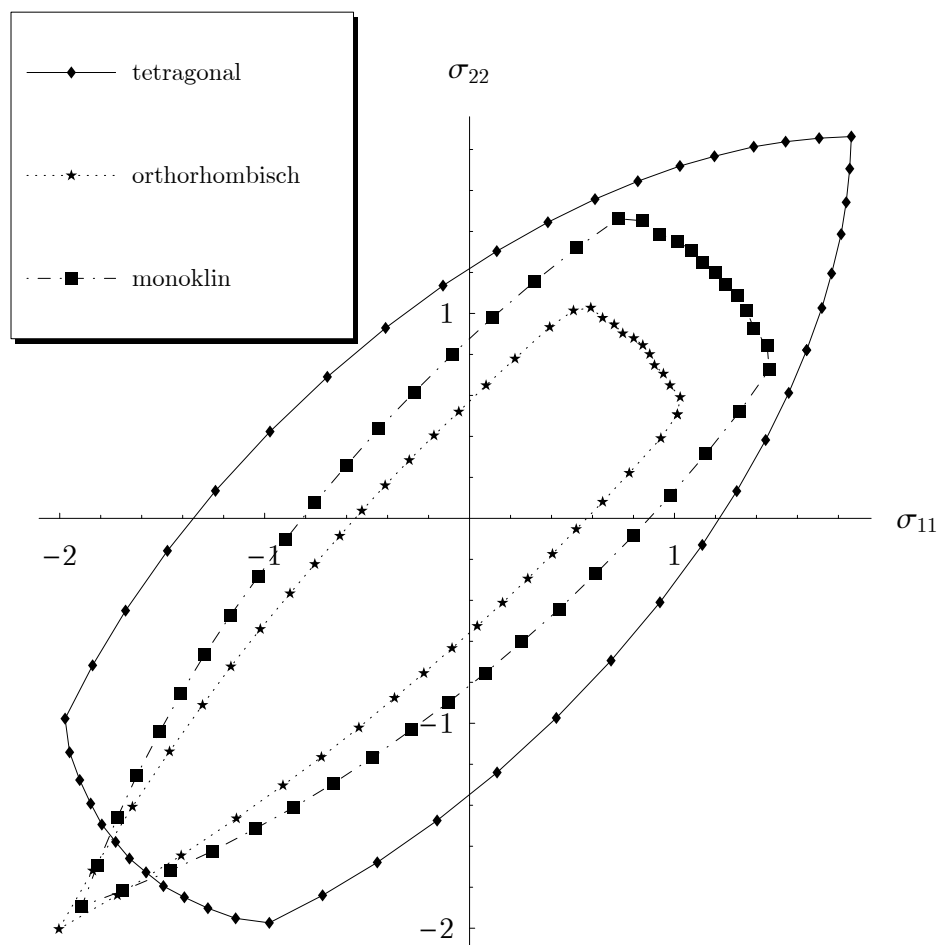


Abbildung 8.35.: Konvexifizierung: Fließgrenzen der unterschiedlichen Transformationsmodi (eingeprägte Hauptdehnungen, Tresca)

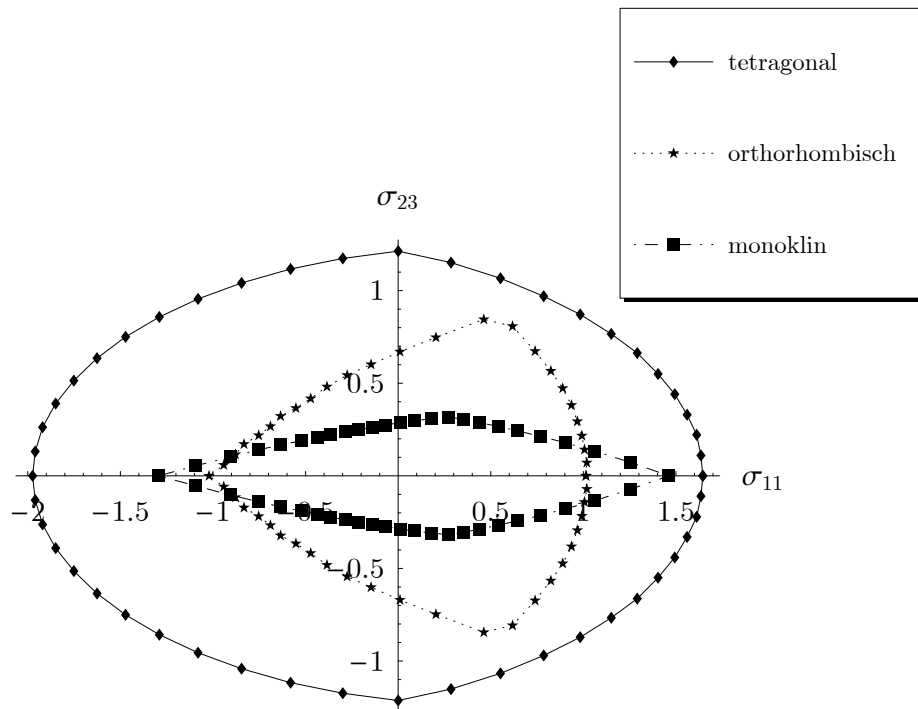


Abbildung 8.36.: Konvexifizierung: Fließgrenzen der unterschiedlichen Transformationsmodi (eingeprägte Axial- und Scherdehnungen, Tresca)

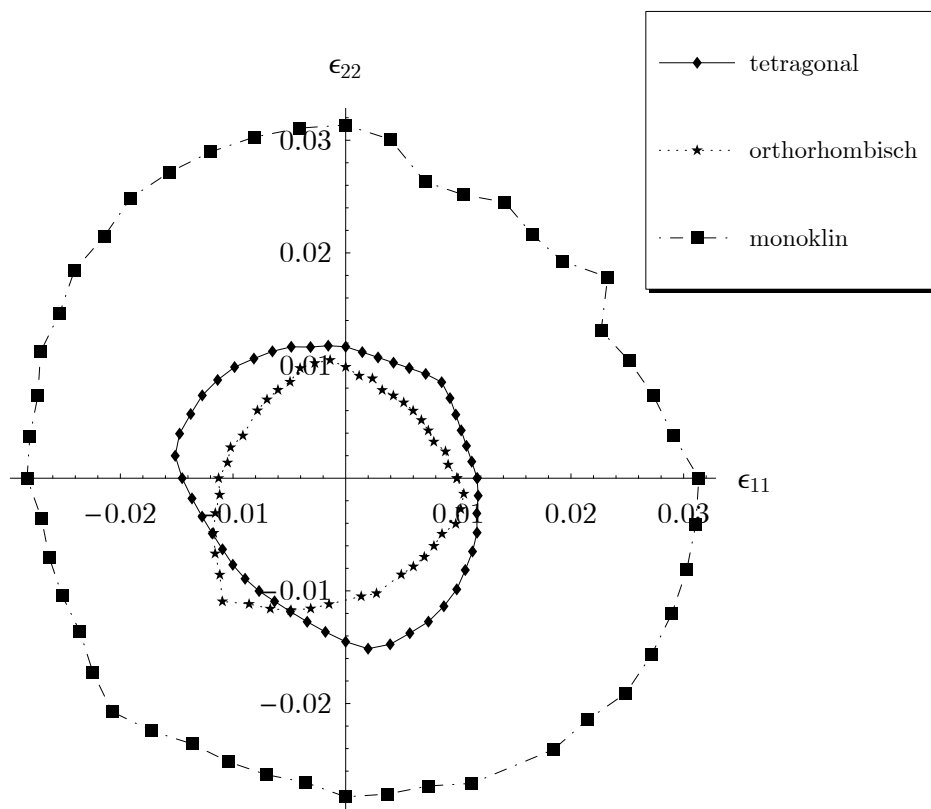


Abbildung 8.37.: Rang-1-Konvexifizierung: Fließgrenzen der unterschiedlichen Transformationsmodi (eingeprägte Hauptdehnungen)

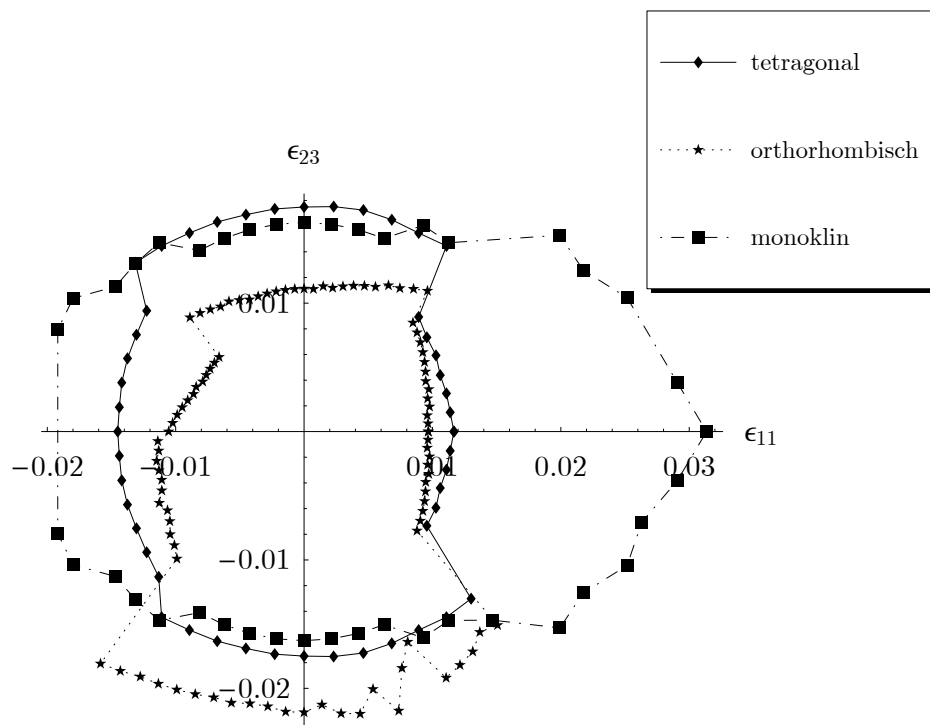


Abbildung 8.38.: Rang-1-Konvexifizierung: Fließgrenzen der unterschiedlichen Transformationsmodi (eingeprägte Axial- und Scherdehnungen)

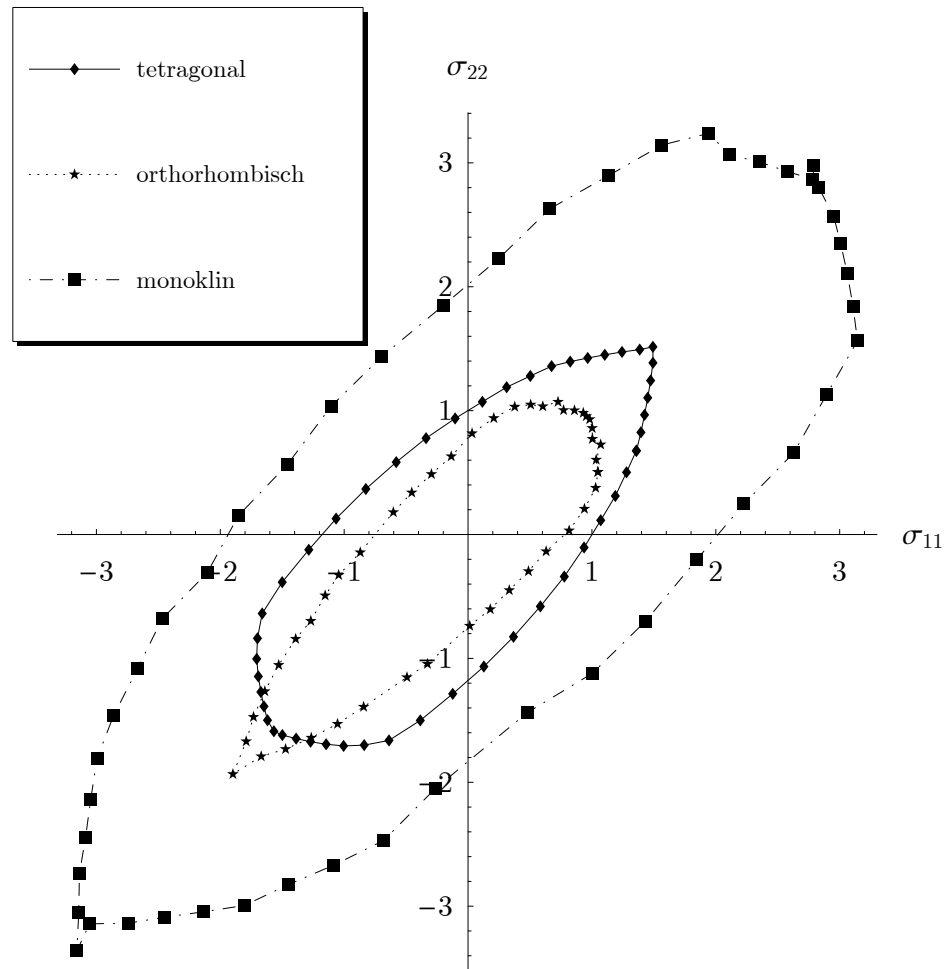


Abbildung 8.39.: Rang-1-Konvexifizierung: Fließgrenzen der Transformationsmodi (eingeprägte Hauptdehnungen)

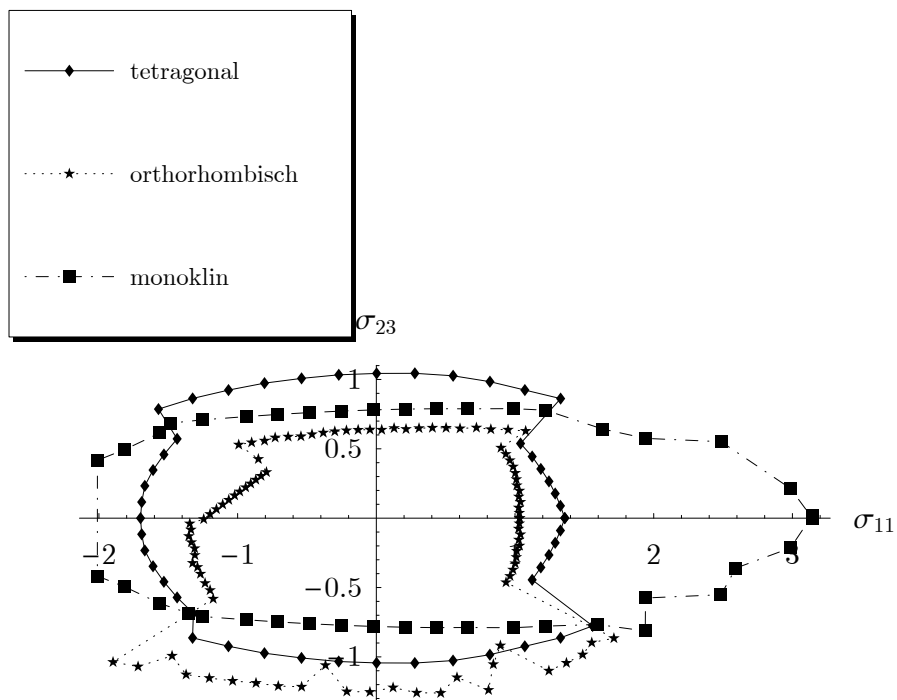


Abbildung 8.40.: Rang-1-Konvexifizierung: Fließgrenzen der unterschiedlichen Transformationsmodi (eingeprägte Axial- und Scherdehnungen)

8.3.2. Vergleich der Relaxierungsmethoden

Die Ergebnisse des vorangegangenen Abschnittes lassen mitunter deutliche Unterschiede im Materialverhalten zwischen den beiden Relaxierungsverfahren erkennen. Bei Betrachtung der Abb. 8.33 fällt im Vergleich mit Abb. 8.37 auf, dass sich vor allem das Verhalten der monoklinen Kristallsysteme dahingehend unterscheidet, dass der elastische Bereich bei vorgegebenen Normaldehnungen im Rahmen der Rang-1-Konvexifizierung erheblich größer ist als bei der Konvexifizierung. In den Abb. 8.41 bis 8.43 sind daher die Ergebnisse beider Verfahren für einen einaxialen Zugversuch gemäß (8.3) ($T = 318 \text{ K}$, $k_\theta = 0.01 \text{ GN}/(\text{m}^2 \text{ s})$, $k_n \gg k_\theta$, Evolutionstyp Tresca) im direkten Vergleich aufgeführt.

Der Grund für diesen signifikanten Unterschied wird aus dem Spannungs-Dehnungs-Verhalten ersichtlich: Während sich bei der Rang-1-Konvexifizierung ausgeprägte Spannungsplateaus während der Phasentransformation ausbilden ist dieser Bereich im Rahmen der Konvexifizierung durch eine deutliche Steigung der Spannungen gekennzeichnet. Dabei setzen die Transformationen sehr viel früher ein, durch die Zunahme der Spannungen auch während der Transformation wird allerdings auch eine höhere Dehnung bzw. Spannung bei vollendetem Phasenübergang erreicht.

Dieses Verhalten liegt erneut begründet in der Natur des jeweiligen Relaxierungsverfahrens, was anhand der in Abb. 8.42 dargestellten relaxierten Energiedichten versinnbildlicht ist. Während die Rang-1-konvexe Hülle im Transformationsbereich eine lineare Funktion der Dehnungen ist und sich demnach eine konstante Spannungen σ_{11} einstellt, verläuft die konvexe Hülle zwangsläufig unterhalb dieser und weist somit im gesamten Bereich positive Krümmungen und dementsprechend eine monoton steigende Spannung auf. Die unterschiedliche Materialantwort manifestiert sich selbstverständlich auch in der Evolution der verschiedenen Phasenanteile (siehe Abb. 8.43).

Vergleicht man die Gestalt des elastischen Bereiches für orthorhombische Martensite bei gleichen Voraussetzungen wie zuvor (siehe ebenfalls Abb. 8.33 und 8.37) machen sich auch deutliche Unterschiede bemerkbar. Gleicht die Kontur der Fließgrenze bei der Konvexifizierung einem um 45° geneigten Wappen, so stellt sie sich für die Rang-1-Konvexifizierung als kreisförmig mit einer deutlichen „Einkerbung“ im Bereich $\varepsilon_{11} \approx \varepsilon_{22} > 0$ sowie einer ausgeprägten „Ausbuchtung“ im Bereich $\varepsilon_{11} \approx \varepsilon_{22} < 0$ dar.

Abb. 8.44 zeigt den Vergleich der Spannungs-Dehnungs-Kurven für einen einaxialen Zug gemäß (8.3) ($T = 318 \text{ K}$, $k_\theta = 0.01 \text{ GN}/(\text{m}^2 \text{ s})$, $k_n \gg k_\theta$, Evolutionstyp Tresca) bzw. Abb. 8.45 für vorgegebene, biaxiale Dehnungszustände der Form

$$\varepsilon = \kappa(t) \begin{pmatrix} \varepsilon_{max} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{max} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (8.7)$$

bei identischen Versuchparametern und $\varepsilon_{max} = 0.04$. Besonders hervor zu heben ist die signifikante Zug-Druck-Asymmetrie, die sich bei Verwendung der Konvexifizierung insbesondere bei einaxialem Zug ergibt. Während sich im Zugbereich zu mindestens annähernd ein Spannungsplateau ergibt, nimmt die Steifigkeit im Druckbereich gegenüber dem elastischen kaum ab. Demzufolge stellt sich auch eine sehr kleine Hysterese-Schleife ein. Im Gegensatz dazu ergibt sich bei der Rang-1-Konvexifizierung ein ausgeprägtes Spannungsplateau. Diese Charakteristik der Konvexifizierung findet sich z.B. in Hackl and Heinen (2008) selbst für Polykristalle bestätigt.

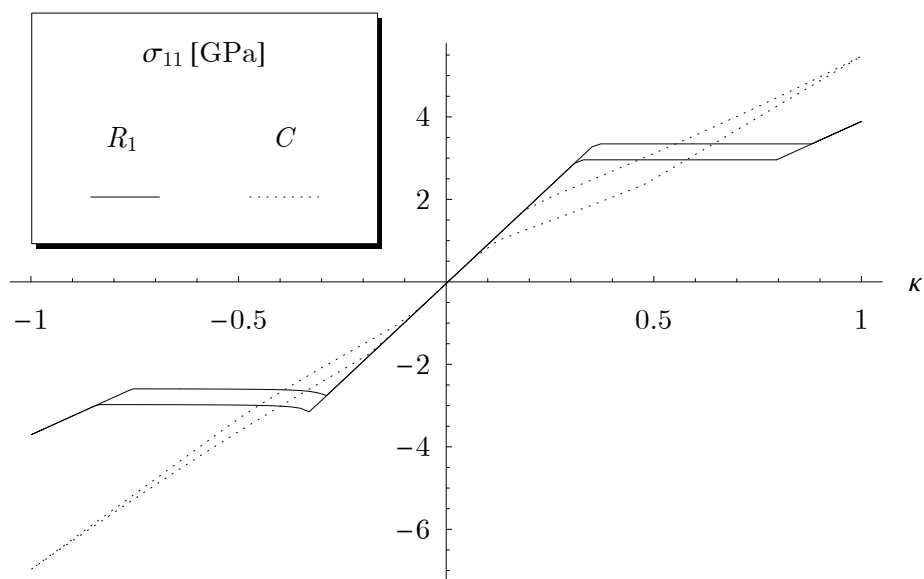


Abbildung 8.41.: Vergleich R_1 – C : Spannung σ_{11} (monoklin, einaxialer Zug)

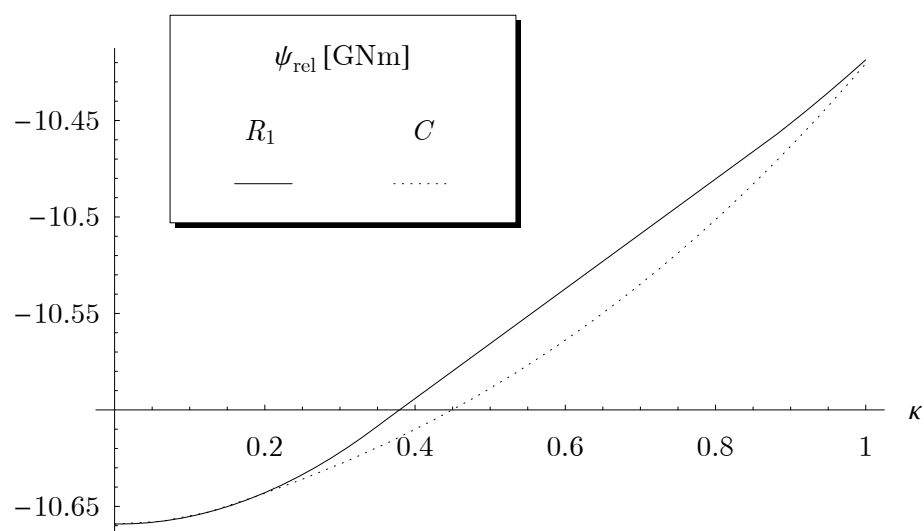
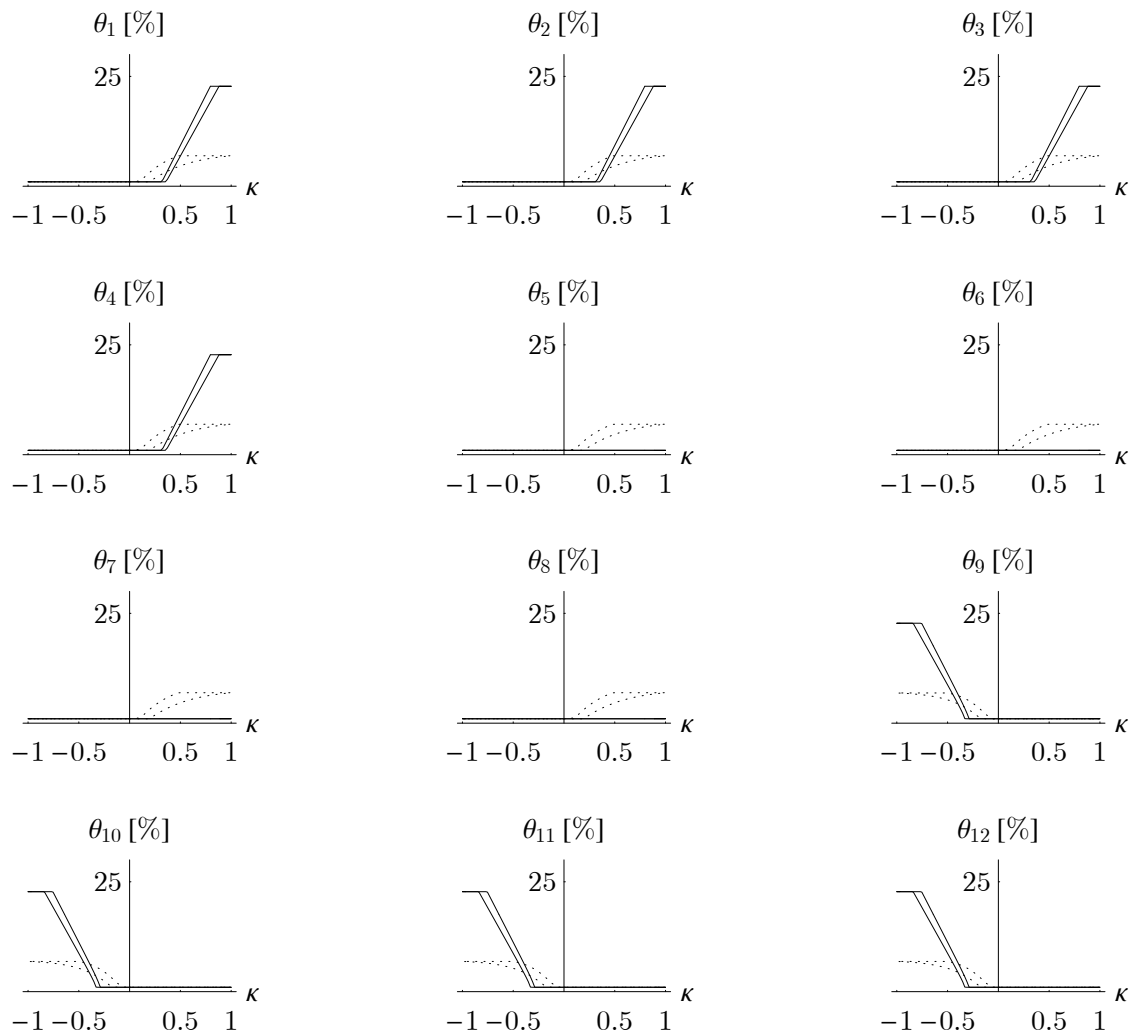


Abbildung 8.42.: Vergleich R_1 – C : relaxierte Energie ψ_{rel} (monoklin, einaxialer Zug)

Abbildung 8.43.: Vergleich Volumenfraktionen (R_1 : durchgezogen, C : gepunktet)

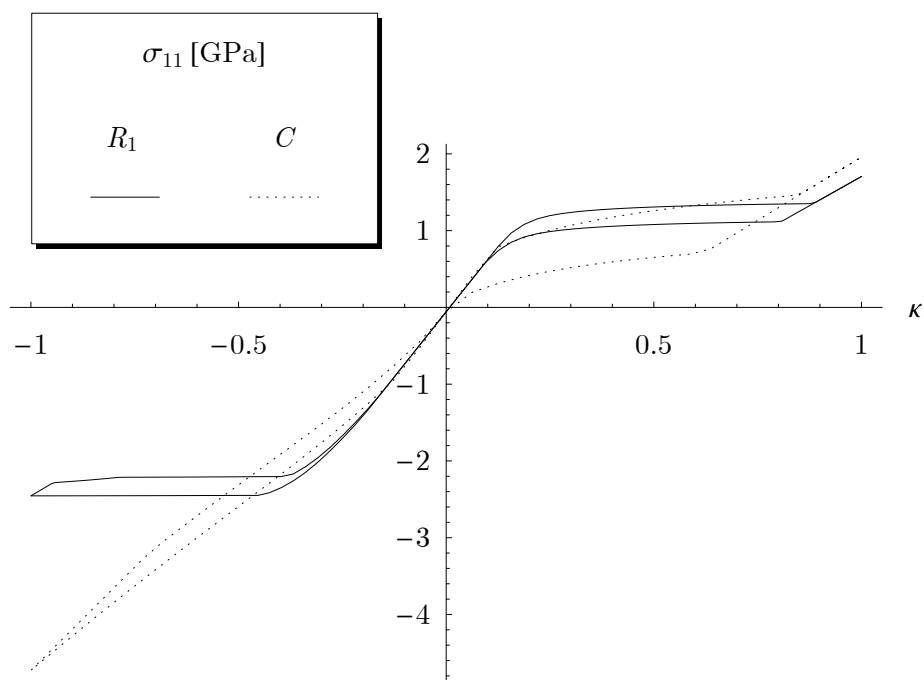


Abbildung 8.44.: Vergleich R_1 – C : Spannung σ_{11} (orthorhombisch, einaxialer Zug)

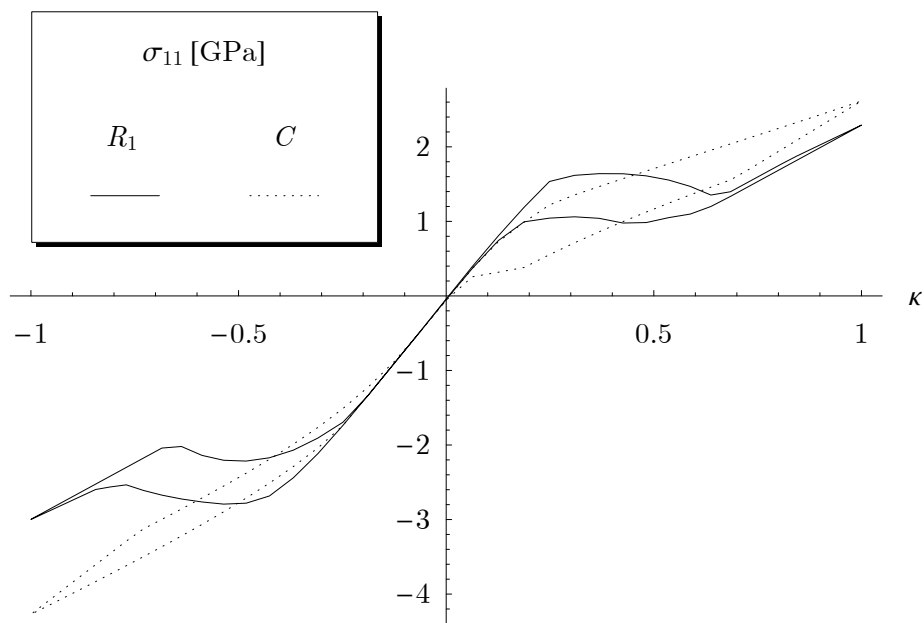


Abbildung 8.45.: Vergleich R_1 – C : Spannung σ_{11} (orthorhombisch, biaxialer Zug)

8.3.3. Vergleich der Evolutionsgesetze

An Hand der Abb. 8.46 bis 8.48 sollen für die hier verwendete Konvexifizierung und den gewählten Parametern $T = 338 \text{ K}$, $k_\theta = 0.01$ die Abhängigkeit der effektiven Materialantwort vom gewählten Evolutionstyp analysiert werden. Grundsätzlich lässt sich sagen, dass die Gestalt der Spannungs–Dehnungs–Kurven gewahrt bleibt, sich im Detail jedoch markante Unterschiede zwischen den beiden betrachteten Evolutionstypen heraus stellen. Insbesondere ist die dissipierte Leistung beim Typ von Mises immer geringer als beim Tresca–Typ, was zumeist auch eine geringere Transformationsdehnung bzw. –spannung mit sich bringt.

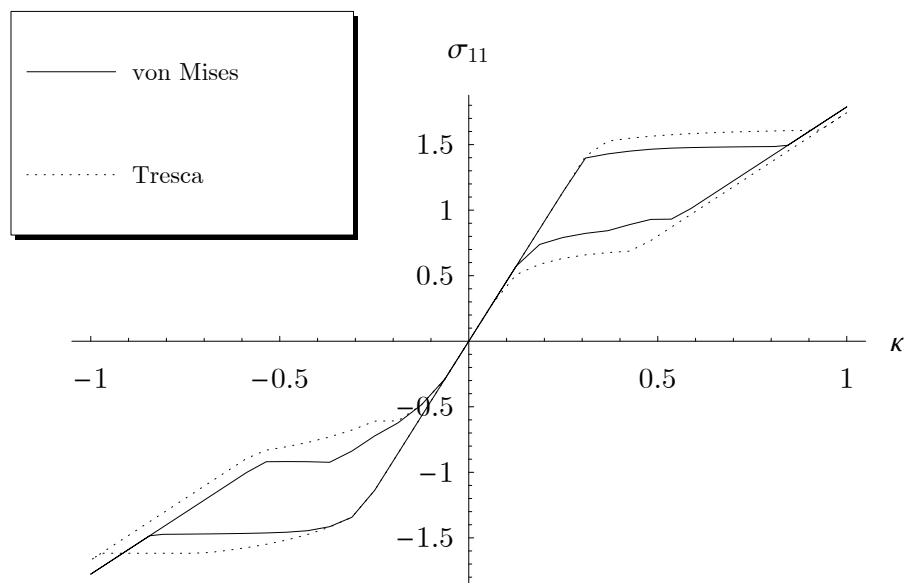


Abbildung 8.46.: Vergleich von Mises–Tresca: Spannung σ_{11} (tetragonal, biaxialer Zug)

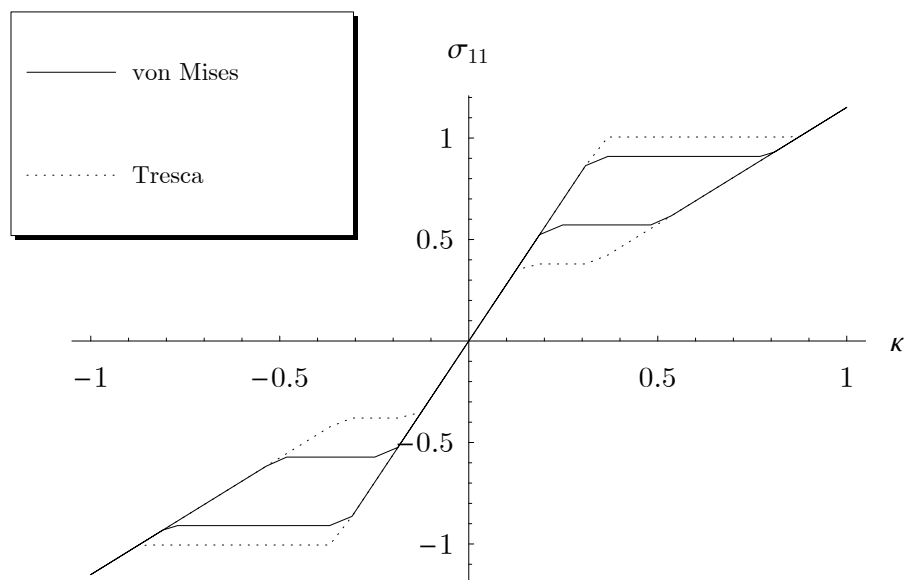


Abbildung 8.47.: Vergleich von Mises–Tresca: Spannung σ_{11} (tetragonal, Torsion)

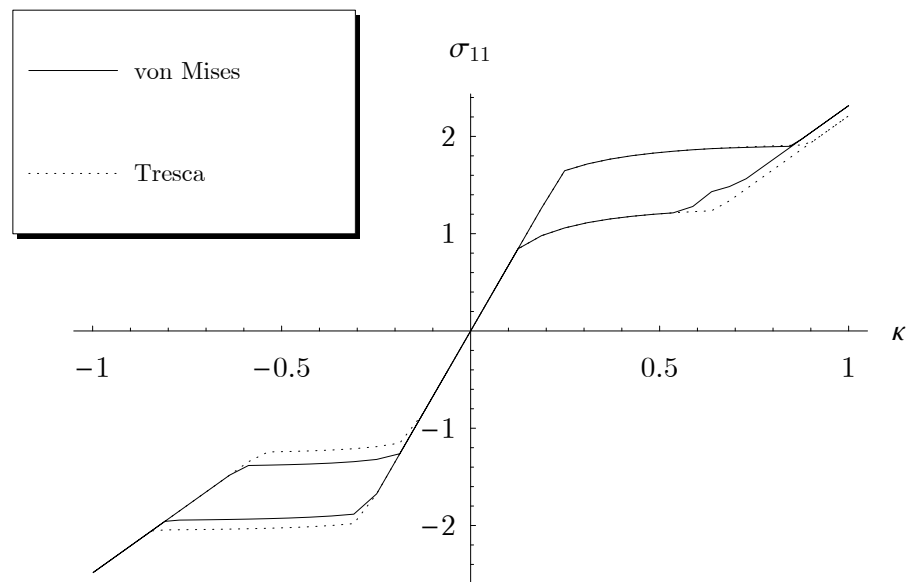


Abbildung 8.48.: Vergleich von Mises–Tresca: Spannung σ_{11} (monoklin, einaxialer Zug)

8.3.4. Ratenabhängiges Stoffgesetz

Wie bereits aus Alg. 7.3 ersichtlich, unterscheidet sich der Evolutionstyp Perzyna dadurch von den übrigen, dass hierbei die gewählten Zeitintervalle Δt und damit verknüpft die Rate der Belastung $\dot{\epsilon}$ einen Einfluss auf das Ergebnis hat. Zwar geht diese Belastungsgeschwindigkeit nicht direkt in das Modell ein, jedoch lässt sich über die Wahl der Zeitabstände, in denen die Belastung erhöht wird, diese Abhängigkeit approximieren. Die Belastung wird dabei in mehrere Bereiche unterteilt, zu deren Beginn diese durch ein Inkrement $\Delta\epsilon$ der Dehnung jeweils erhöht wird. Das Zeitfenster zwischen den Belastungsschritten wird seinerseits in mehrere Zeitabschnitte gegliedert. Je größer das Zeitfenster zwischen den Belastungsschritten gewählt wird, desto mehr Zeit lässt man dem Material auf die erhöhte Belastung zu reagieren. Je mehr interne Zeitschritte innerhalb dieser Fenster gewählt werden, desto feiner wird die Approximation der Ergebnisse für die konstant vorherrschende Dehnung.

Grundlegende Ergebnisse sind in Abb. 8.49 sowie 8.50 in Folge eines einaxialen Zuges mit den Parametern $T = 338 \text{ K}$, $k_1 = 0.01$, $k_2 = 0.001$ für ein kubisch-tetragonal transformierendes Material angegeben, wobei die Belastung hier in 25 Bereiche und jeder einzelne Bereich in 12 Zeitinkremente gegliedert wurde. An Hand der resultierenden Spannung σ_{11} wird bereits deutlich, wie sich die viskoplastische Evolution auswirkt. Die Spannungen reagieren sofort mit einem sprunghaften Anstieg auf die Belastungsschritte und bleiben, sofern sich keine Phasentransformationen ergeben, innerhalb des folgenden Zeitabschnittes konstant. Tritt das Material dann in den Bereich der Phasenübergänge ein, so bleiben die Spannungssprünge bestehen, allerdings wird die Spannung durch die Evolution der Phasenanteile relaxiert. Das angesprochene Zeitfenster ist dementsprechend als Relaxationszeit anzusehen (siehe dazu auch Simo and Hughes (1998)).

Dieses Phänomen ist in der Entwicklung der Phasenanteile begründet: Während sich bei den übrigen Evolutionstypen die aktuellen Volumenfraktionen unendlich schnell ergaben, bleiben sie in diesem Fall bei erfolgtem Lastinkrement zunächst unverändert, werden aber sogleich „beschleunigt“. Die Geschwindigkeit der Evolution nimmt dann stetig ab bis bei einem ausreichend langen Zeitintervall ein stationärer Wert erreicht wird. Wählt man die Zeitabschnitte zwischen den Lastinkrementen kleiner, so wird dieser stationäre Zustand nicht erreicht und das globale Verhalten verändert sich, wie es in den Abb. 8.51 und 8.52 in Abhängigkeit der Anzahl an Lastinkrementen erkenntlich ist. Dazu sei angemerkt, dass der deutlich spätere Beginn der Transformation für 60 Zeitschritte darin begründet ist, dass der Initiierungszustand der übrigen Fälle durch die grobe Einteilung übersprungen wurde. Es ist insbesondere beim Vergleich der Resultate für 80 und 120 Zeitschritte zu erkennen, dass bei höherer Dehnungsrate der stationäre Wert der Volumenfraktionen nicht erreicht wird und daher für den nächsten Belastungsschritt von anderen Startwerten ausgegangen wird, was das globale Verhalten signifikant beeinflusst.

Neben der indirekt wählbaren Relaxationszeit beeinflusst zudem der neu hinzu gekommene Dissipationsparameter k_2 (die Auswirkungen des viskoplastischen Ansatzes auf eine eventuelle Evolution der Laminatorientierung sei hier unberücksichtigt) das Materialverhalten in erheblichem Ausmaß. Die Abb. 8.53 bis 8.56 verdeutlichen, dass dieser Parameter ein Maß für die Viskosität des Materials darstellt und damit steuert, wie träge auf eine Laststeigerung reagiert wird. Für kleine Werte nähert man sich stetig dem als „Referenz“ ausgewiesenen Wert, welcher der Lösung bei Verwendung des Evolutionsgesetzes vom Typ Tresca ent-

spricht. Die Verbindung zwischen den Evolutionstypen Tresca und Perzyna wird bereits in Kapitel 6 bzw. 7 deutlich, da die „Fließbedingungen“ für beide Fälle identisch sind.

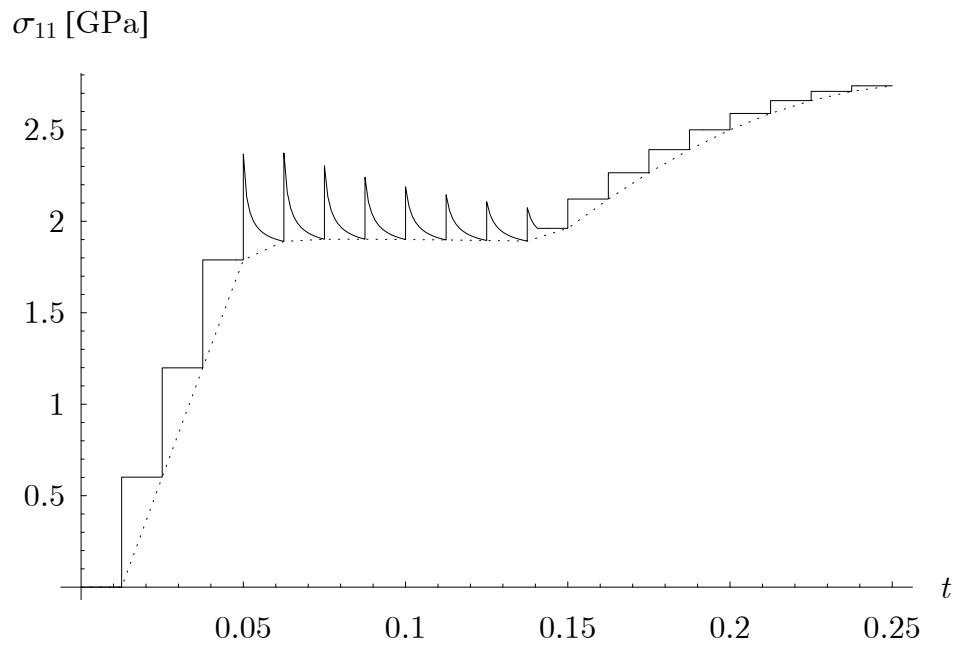


Abbildung 8.49.: Resultierende Spannung σ_{11} im Verlauf der Zeit (kubisch–tetragonal, einaxialer Zug)

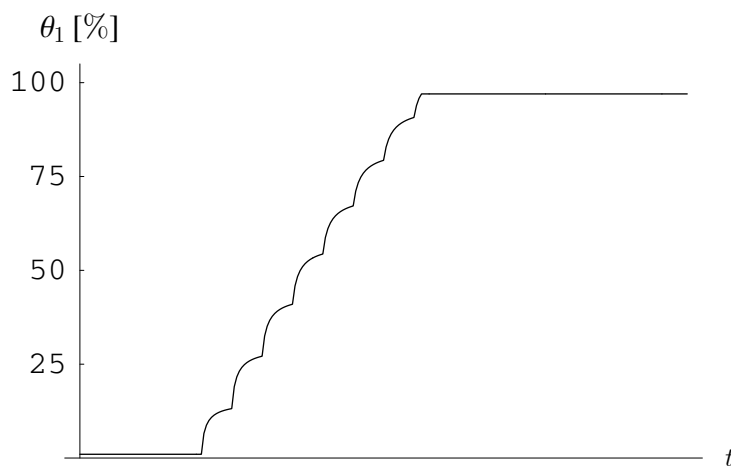


Abbildung 8.50.: Volumenfraktion θ_1 im Verlauf der Zeit (kubisch–tetragonal, einaxialer Zug)

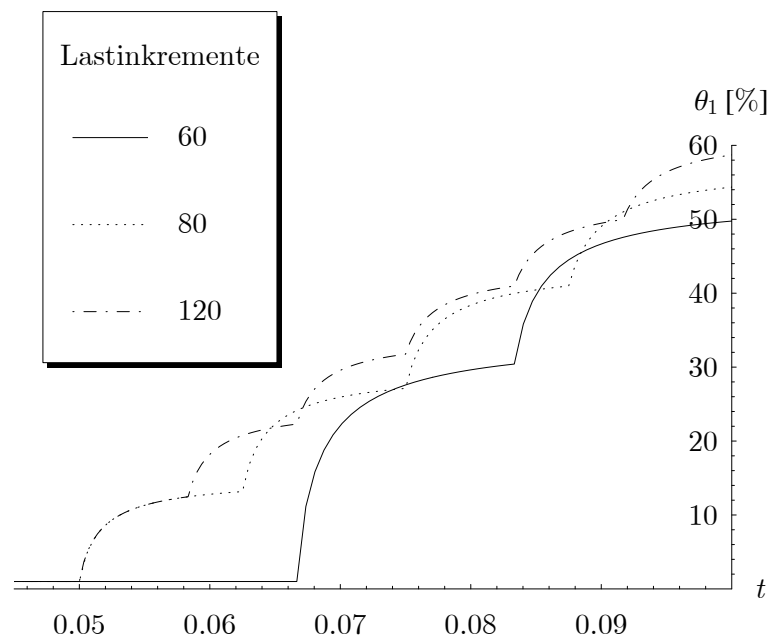


Abbildung 8.51.: Volumenfraktion θ_1 im Verlauf der Zeit (kubisch-tetragonal, einaxialer Zug)

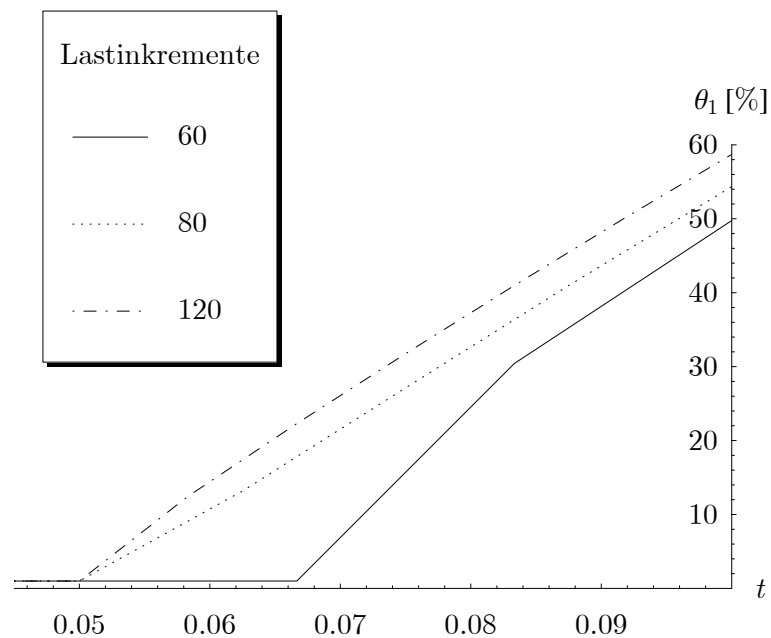


Abbildung 8.52.: Volumenfraktion θ_1 , ausgewertet zu Beginn jedes Lastinkrementes (kubisch-tetragonal, einaxialer Zug)

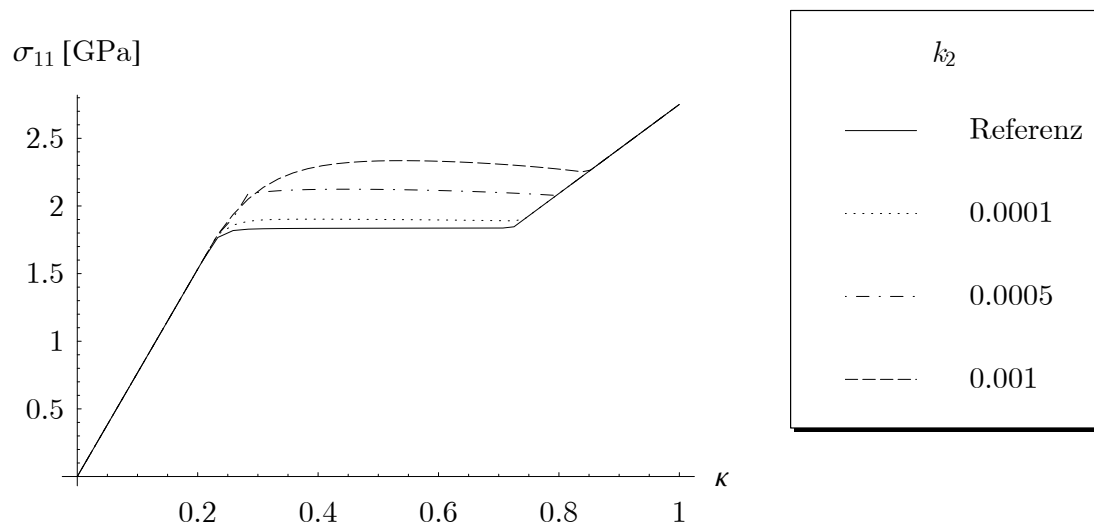


Abbildung 8.53.: Resultierende Spannung σ_{11} , ausgewertet zu Beginn jedes Lastinkrementes (kubisch–tetragonal, einaxialer Zug)

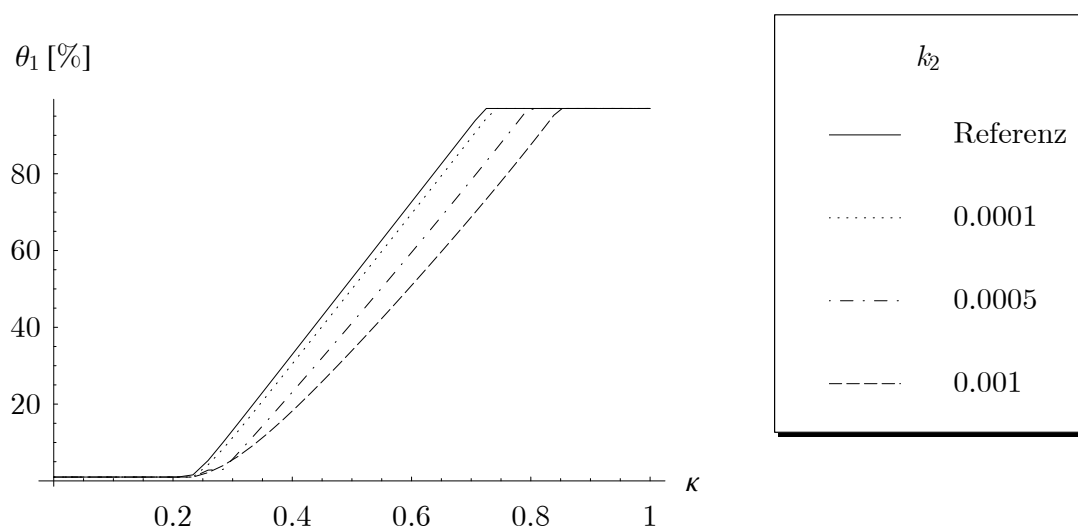


Abbildung 8.54.: Volumenfraktion θ_1 , ausgewertet zu Beginn jedes Lastinkrementes (kubisch–tetragonal, einaxialer Zug)

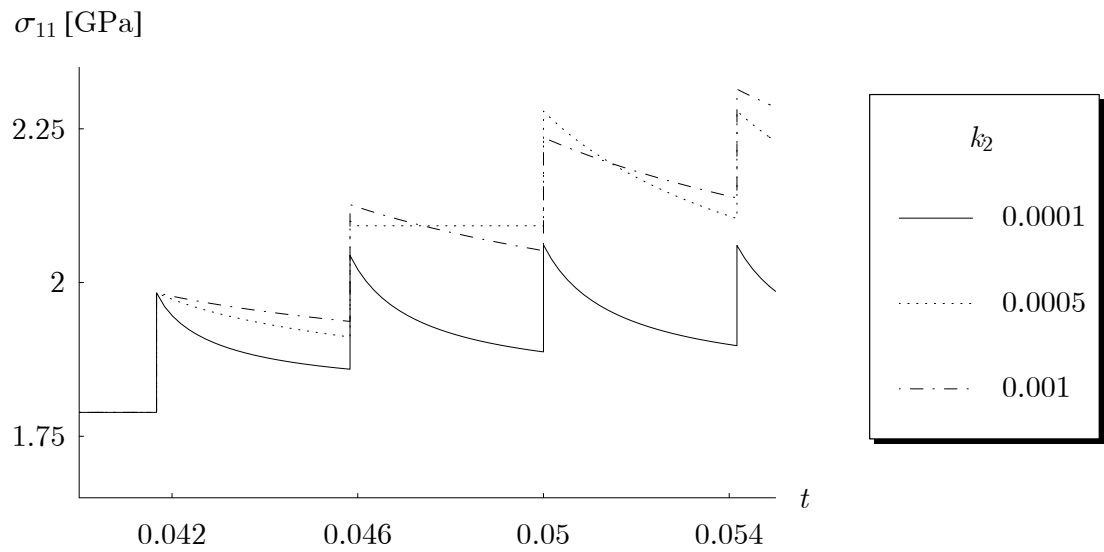


Abbildung 8.55.: Resultierende Spannung σ_{11} im Verlauf der Zeit (kubisch-tetragonal, einaxialer Zug)

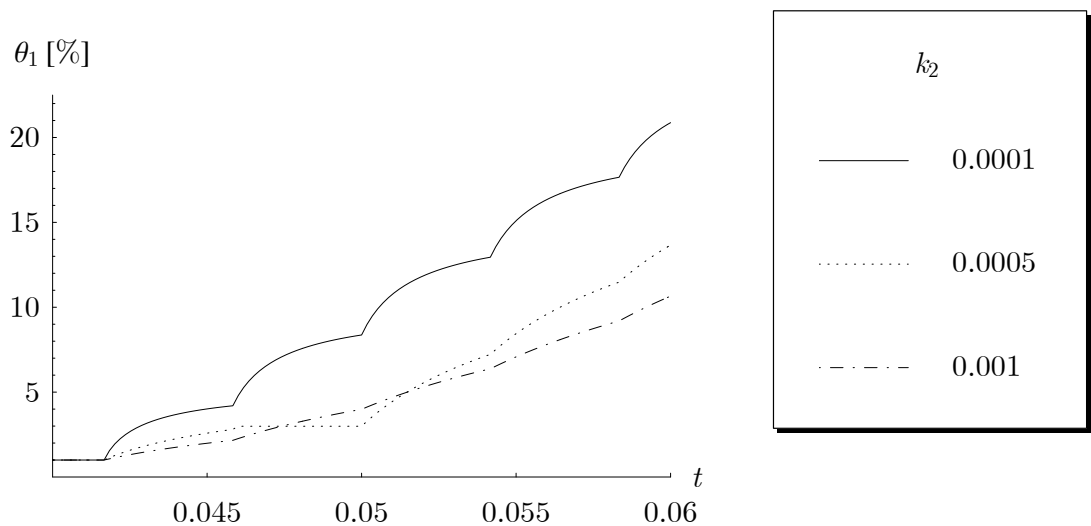


Abbildung 8.56.: Volumenfraktion θ_1 im Verlauf der Zeit (kubisch-tetragonal, einaxialer Zug)

8.4. Spezielle Analysen

8.4.1. Innere Hysteresen

Eine grundlegende und oft diskutierte Fragestellung ist, ob sich bei einer inmitten des Transformationsbereiches vollführten Entlastung je nach Belastungszustand das jeweils gleiche Spannungsniveau bei der Rücktransformation einstellt. Basierend auf Huo and Mueller (1993) liegt einigen Materialmodellen zu Grunde, dass die Rücktransformation bei Erreichen einer Diagonalen hinsichtlich der Hystereseschleife, die sich bei einer vollkommenen Transformation ergibt, einsetzt. Abb. 8.57 zeigt für den Fall einer orthorhombischen Transformation und vorherrschendem einaxialen Zug, dass dies im Allgemeinen von den hier vorgestellten Materialmodellen nicht nachvollzogen werden kann, wobei die Notwendigkeit dafür auch äußerst umstritten ist.

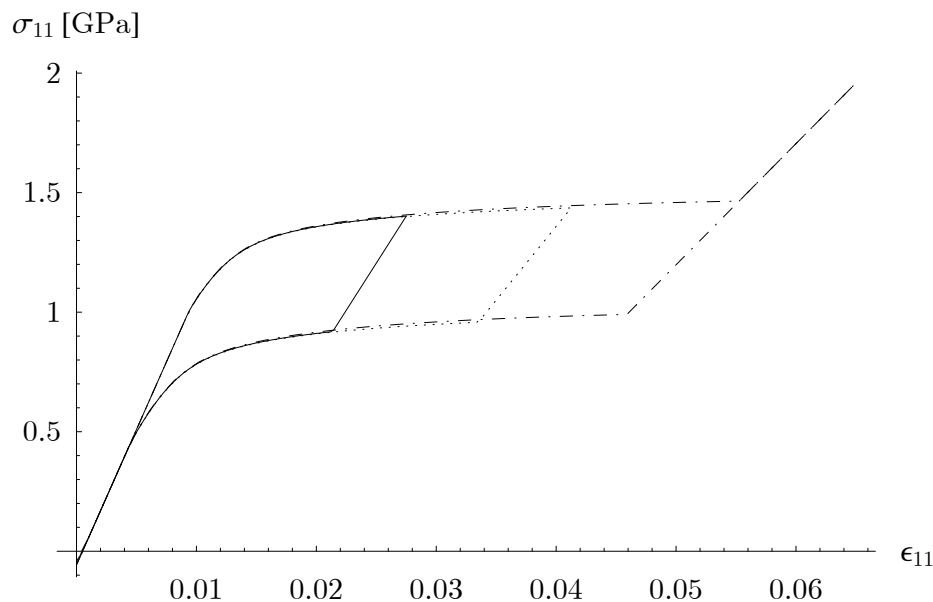


Abbildung 8.57.: Materialverhalten bei vorzeitiger Entlastung

Lässt man durch die Wahl eines relativ kleinen Wertes für den Dissipationsparameter der Laminatorientierungen, wie in diesem Fall $k_n = 0.0075 \text{ GN}/(\text{m}^2 \text{ s})$, eine Änderung dieser zu, so zeigen sich wie in Abb. 8.58 dargestellt Unterschiede im Materialverhalten in Abhängigkeit des vorliegenden Zustands bei eintretender Entlastung. Die sich nach vollzogener Reorientierung der Laminatorientierungen ergebende Rücktransformationsspannung ist erheblich niedriger als die sich bei Entlastung während der Umstrukturierung einstellende. Mit Hilfe dessen wäre es demnach möglich auch auf mikroskopischer Ebene das z.B. in Wagner (2005) beschriebene Phänomen zu simulieren, dass sich erst bei einer komplett vollzogenen Phasentransformation das Spannungsniveau bei der Rücktransformation deutlich gegenüber dem Spannungswert absenkt, der sich bei einer Entlastung inmitten des Spannungsplateaus ergibt.

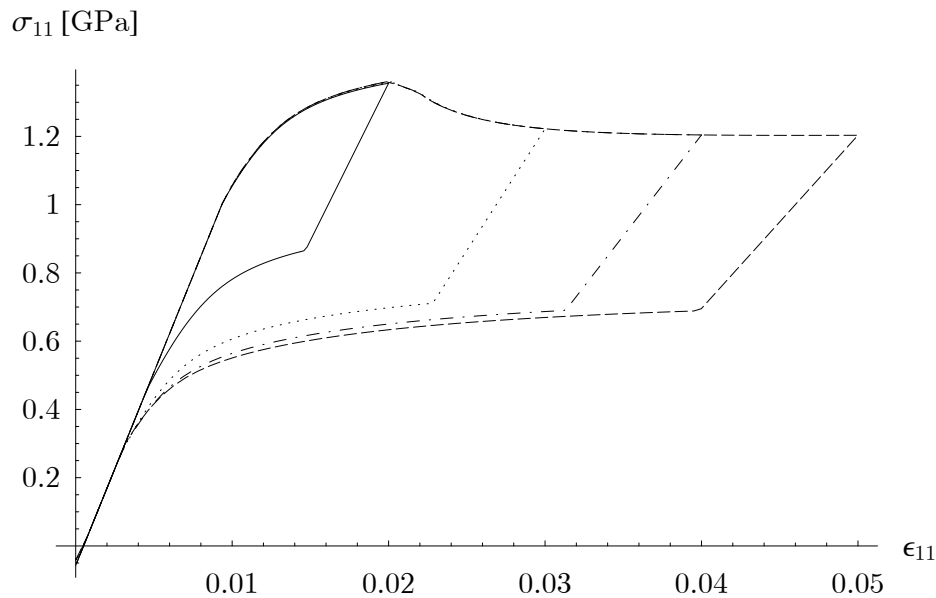


Abbildung 8.58.: Materialverhalten bei vorzeitiger Entlastung unter Berücksichtigung der Laminat-Reorientierung ($k_n = 0.0075$)

8.4.2. Kombinierte Axial- und Torsionsbelastung

Formgedächtnislegierungen weisen ein überaus komplexes und zudem pfadabhängiges Materialverhalten in Folge mehrdimensionaler Belastungen auf, welches von einem mechanischen Modell nachvollzogen werden sollte. Aus diesem Grund wurde exemplarisch für das Verfahren der Konvexifizierung und die Evolutionstypen von Mises und Tresca bei einem zu Grunde liegenden kubisch-orthorhombisch transformierenden Material der in Abb. 8.59 dargestellte Versuch, der sogenannte *box test*, durchgeführt, bei dem zunächst aus dem unbelasteten Zustand heraus die axialen Dehnungen $\varepsilon = \varepsilon_{11}$ auf einen Wert von 0.02 erhöht wird. Anschließend steigert man bei konstanten Axialdehnungen die Schubkomponente $\gamma' = \sqrt{3} \varepsilon_{23}$ ebenfalls auf den Wert 0.02. Im weiteren Verlauf des Versuches werden dann zunächst die Axialdehnungen sowie abschließend die Schubdehnungen wieder auf Null abgesenkt.

In den Abb. 8.60 bis 8.62 sind die Ergebnisse bezüglich der Beziehungen zwischen resultierender Axial- und Schubspannung ($\sigma = \sigma_{11}$ bzw. $\tau' = \sqrt{3} \sigma_{23}$), Axialspannung und -dehnung sowie Schubspannung und -dehnung aufgetragen. Vergleicht man diese Ergebnisse beispielsweise mit experimentellen Daten wie Grabe (2007) lässt sich erkennen, dass die grundlegenden Charakteristika der Materialantwort speziell für den Evolutionstyp Tresca trotz der Diskrepanz der betrachteten Materialskale nachvollzogen werden können.

8.5. Algorithmische Aspekte der Materialroutinen

Während der unterschiedlichen numerischen Analysen haben sich einige markante Details herausgestellt, die zur Steigerung der Effizienz der Algorithmen führten bzw. überhaupt erst einen stabilen Verlauf der Materialroutinen ermöglichten. Deshalb sind in den folgenden

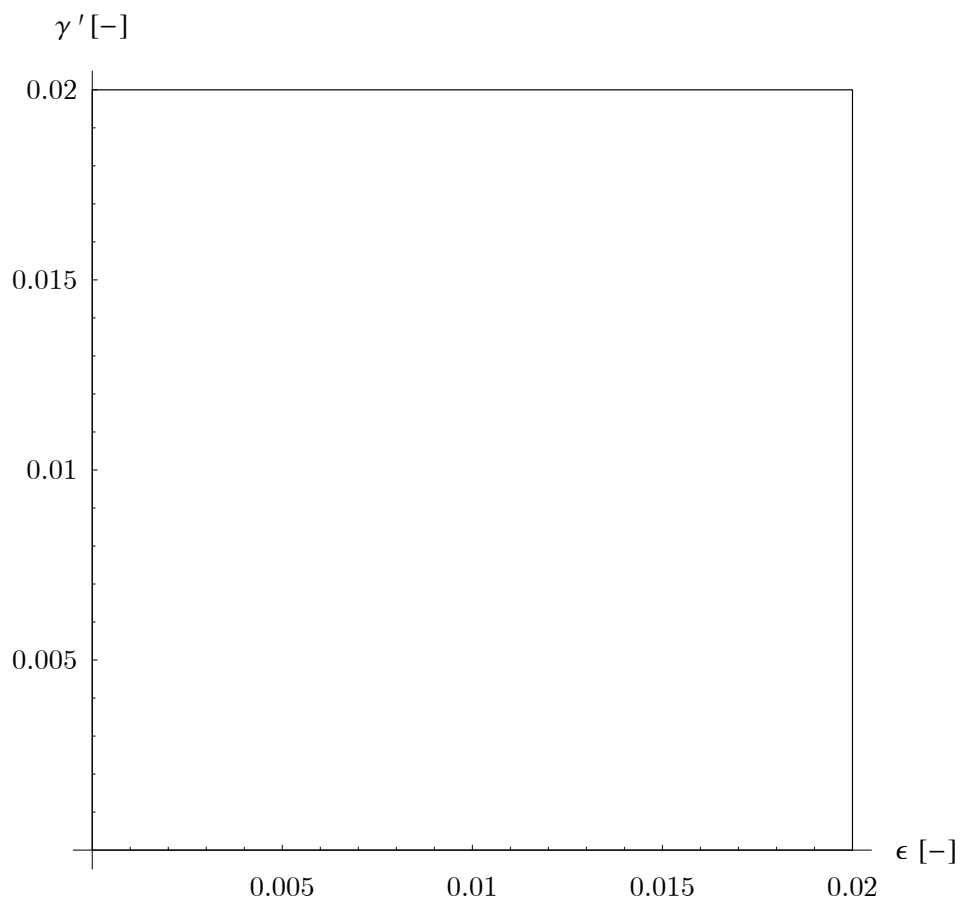


Abbildung 8.59.: Eingeprägte Belastung beim sogenannten *box test*

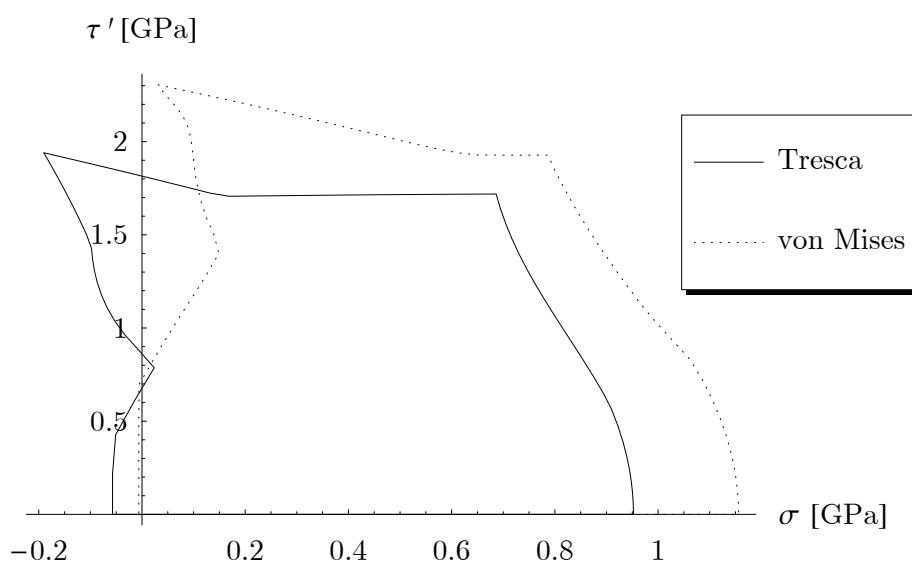


Abbildung 8.60.: Resultierende Beziehung zwischen Axial- und Schubspannungen beim sogenannten *box test*

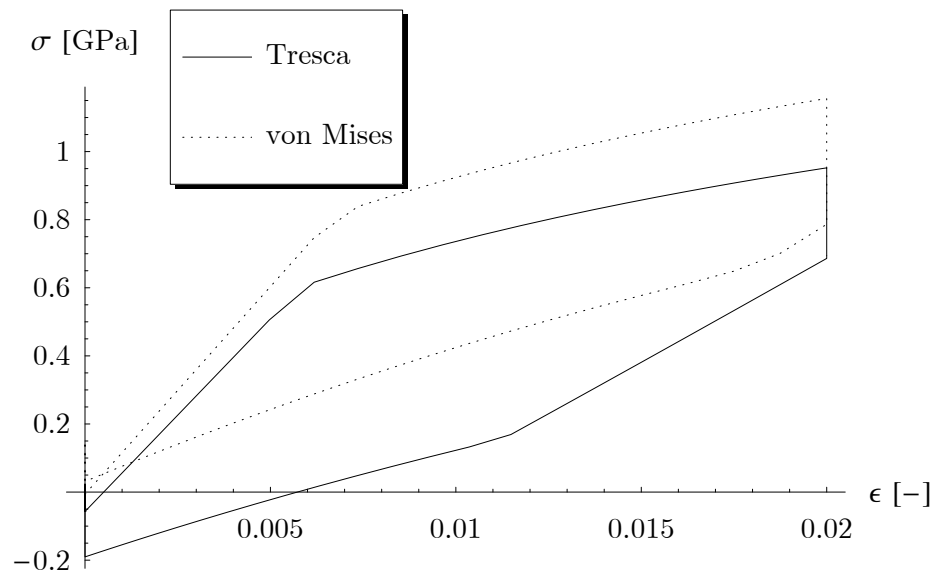


Abbildung 8.61.: Resultierende Beziehung zwischen Axialspannung und –dehnung beim sogenannten *box test*

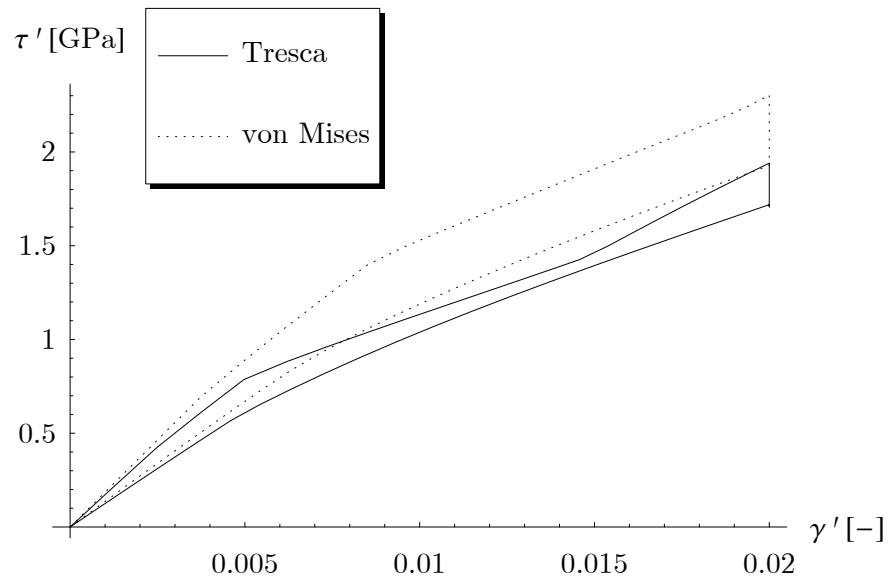


Abbildung 8.62.: Resultierende Beziehung zwischen Schubspannung und –dehnung beim sogenannten *box test*

Abschnitten die wichtigsten notwendigen sowie nützlichen programmiertechnischen Maßnahmen für eine numerisch stabile Anwendung der Stoffgesetze aufgeführt.

8.5.1. Größenordnung der Materialparameter

In Anbetracht der gewählten algorithmischen Umsetzung der Massenrestriktionen und vor allem der Kuhn–Tucker–Bedingungen ist es nicht unerheblich, welche Dimensionen für die verwendeten Materialparameter verwendet wird. Dies wird anhand der in Abschnitt 7.2 aufgeführten Jakobimatrizen zur iterativen Lösung des jeweils zu Grunde liegenden algebraisch-differentiellen Gleichungssystems deutlich, da diese zum Teil Einträge aufweisen, welche unabhängig von den Materialkenndaten sind und überdies die Größenordnung 1 besitzen, während die Größenordnung anderer Einträge von denen der Materialparameter abhängen.

Wählt man abweichend von den in Abschnitt 8.1 gewählten Einheiten beispielsweise N/mm^2 entsprechend 10^{-9} GPa als Dimension für den Elastizitätsmodul, so würde sich die Differenz der Größenordnungen der Komponenten der Jakobimatrix in gleicher Weise unterscheiden und sich demzufolge die Kondition der Matrix erheblich verschlechtern. Dies führt sogar zur Nichtkonvergenz des numerischen Lösungsverfahrens und damit zum Fehlschlagen des gesamten Algorithmus.

8.5.2. Initialwerte der Volumenfraktionen

Die Startwerte für die Phasenanteile lassen sich im unbelasteten Zustand intuitiv in Abhängigkeit der vorgegebenen Temperatur als

$$\theta_i^0 = \begin{cases} 1/NV & , \text{für } T < T_0 \\ 0 & , \text{für } T \geq T_0 \end{cases} \quad i = 1 \dots NV \quad (8.8)$$

setzen. In diesem Zusammenhang ist zu erwähnen, dass die Stoffgesetze grundlegend für eine vorhandene Phasenmischung formuliert sind und die Fälle $\sum_i \theta_i = 0$ bzw. $\sum_i \theta_i = 1$ nicht berücksichtigt werden können, da es zu singulären Ausdrücken kommen würde. Aus diesem Grund werden die Initialwerte der Volumenfraktionen zu $\theta_i^0 = \theta_{\text{start}}$ gewählt, wobei

$$\theta_{\text{start}} = 0.01 \quad (8.9)$$

einen universell stabilen Algorithmus ermöglichte. Dementsprechend müssen die Restriktionen bezüglich der Phasenanteile gemäß

$$\theta_i \geq \theta_{\text{start}} \quad i = 1 \dots NV \quad (8.10)$$

$$\sum_{i=1}^{NV} \theta_i \leq 1 - \theta_{\text{start}} \quad (8.11)$$

modifiziert werden.

8.5.3. Initialwerte der Laminatorientierungen

Die Bestimmung probater Initialwerte für die Laminatorientierungen ρ_A , ϕ_A , ρ_M sowie ϕ_M im Rahmen der Rang-1-Konvexifizierung ist nicht in der intuitiven Weise möglich wie es bei den Volumenfraktionen der einzelnen Phasen der Fall ist. Aus diesem Grund wird der weiteren Berechnung gemäß des verwendeten Evolutionsgesetzes eine Minimierungsroutine zum Zeitpunkt $t = t_0$ vorangestellt, welche

$$\mathbf{q}_\xi = \mathbf{0} \quad (8.12)$$

gewährleisten soll, wobei die Liste $\mathbf{q}_\xi$ sinngemäß aus den 4 treibenden Kräften $\bar{q}_i$ besteht (siehe S. 71).

Das Gleichungssystem (8.12) wird ebenfalls mit Hilfe des Newton–Raphson–Verfahrens gelöst, wobei dies keinerlei Mehraufwand bedeutet, da die Bestandteile der hier zu verwendenden Jakobimatrix auch für das Vorgehen im Rahmen der Evolutionsgesetze relevant sind. Konkret besteht die Jakobimatrix aus den Einträgen

$$\mathbf{J} = \frac{\partial q_i}{\partial \xi_j} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \quad (8.13)$$

Die Durchführung eines einaxialen Zugversuches gemäß Abschnitt 8.1 führt allerdings zu dem in Abb. 8.63 dargestellten Resultat bezüglich der effektiven Spannung, welches offensichtlich als unphysikalisch zu deklarieren ist. Die Analyse der korrespondierenden relaxierten Energiedichte (siehe Abb. 8.64) lässt im Vergleich zu den Phasenenergien den Schluss zu, dass die erzielte Energiegrenze prinzipiell der in Abschnitt 5.2 angesprochenen Taylor–Grenze entspricht.

Der Grund für dieses Resultat ist in der Abhängigkeit der Energiedichte von den Laminatorientierungen zu finden, wie es in den Abb. 8.65 bis 8.69 dargestellt ist. Im unbelasteten Zustand zeigt sich dabei eine Unabhängigkeit der Energiedichte von der Ausrichtung des Laminats erster Ordnung, woraus willkürliche Werte für die Variablen ρ_A sowie ϕ_A zur Lösung von (8.12) folgen. Sobald jedoch eine Belastung vorliegt, ändert sich die Energielandschaft signifikant je nach vorliegender Belastungsart. In diesem Fall zeigen die Abb. 8.67, 8.68 sowie 8.69 die Resultate für einen einaxialen Zug, eine reine Scherung bzw. eine allgemeine Belastung der Form

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{pmatrix} 0.005 & 0.0025 & 0 \\ 0.025 & -0.0165 & 0 \\ 0 & 0 & -0.0165 \end{pmatrix} . \quad (8.14)$$

Je nachdem, welche Werte im unbelasteten Zustand $t = t_0$ für ρ_A und ϕ_A ermittelt werden, besteht die Gefahr, dass es sich dabei im Laufe der weiteren Berechnung zwar um einen stationären Punkt aber zugleich ein Maximum handelt. Dieser Umstand führt beispielsweise zu dem in Abb. 8.63 dargestellten Resultat. Daher ist es einerseits dringend erforderlich, die Minimierung bezüglich der Laminatorientierung nicht nur im unbelasteten Zustand durchzuführen. Die zahlreichen numerischen Analysen zeigten, dass ein stabiler Ablauf des Algorithmus in Einzelfällen sogar nur gewährleistet werden kann, wenn die Suche nach probaten Startwerten für die Laminatorientierungen während des gesamten elastischen Pfads durchgeführt werden.

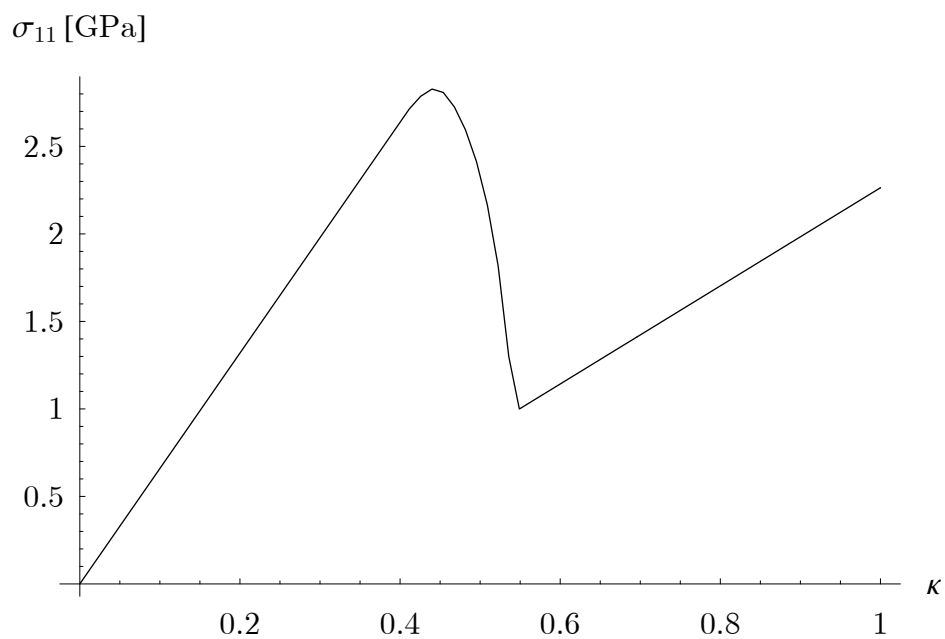
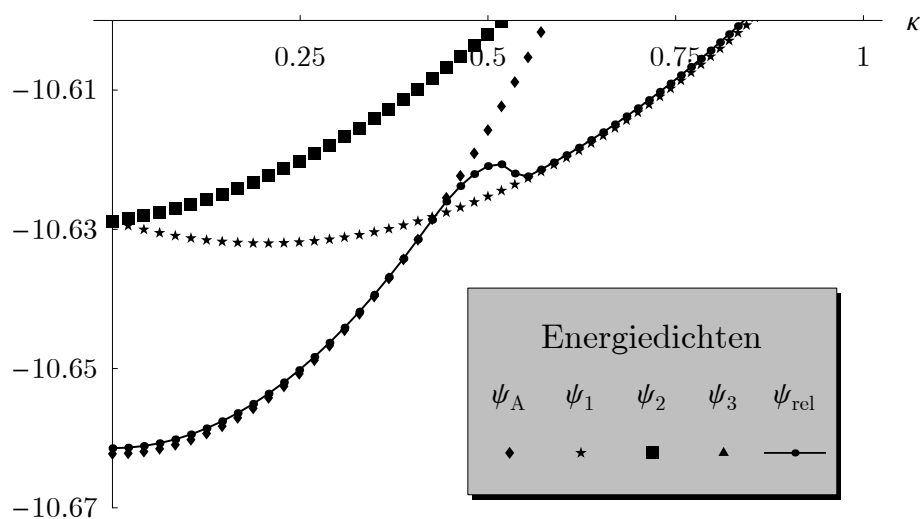
Abbildung 8.63.: Resultierende Spannung σ_{11} 

Abbildung 8.64.: Verlauf der Energiedichten

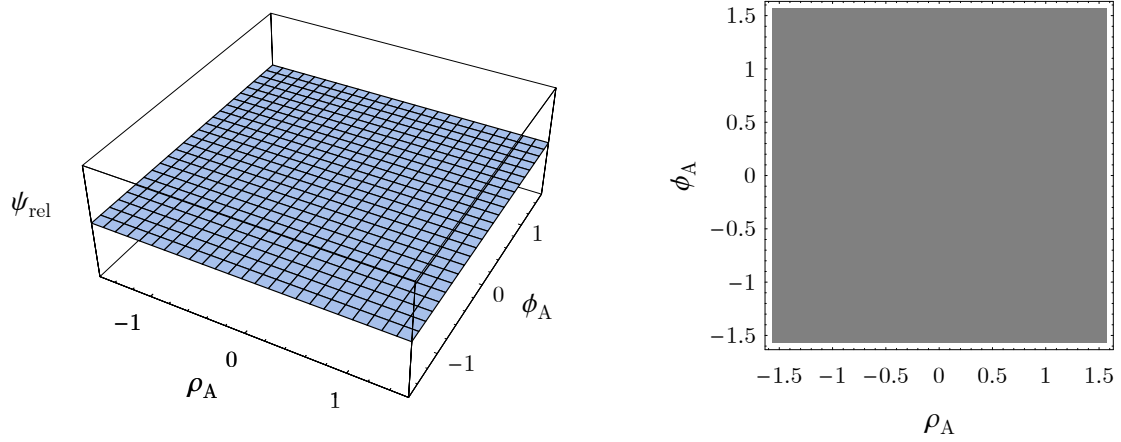


Abbildung 8.65.: Energiedichte in Abhängigkeit der Laminatorientierungen des Austenits, unbelasteter Zustand

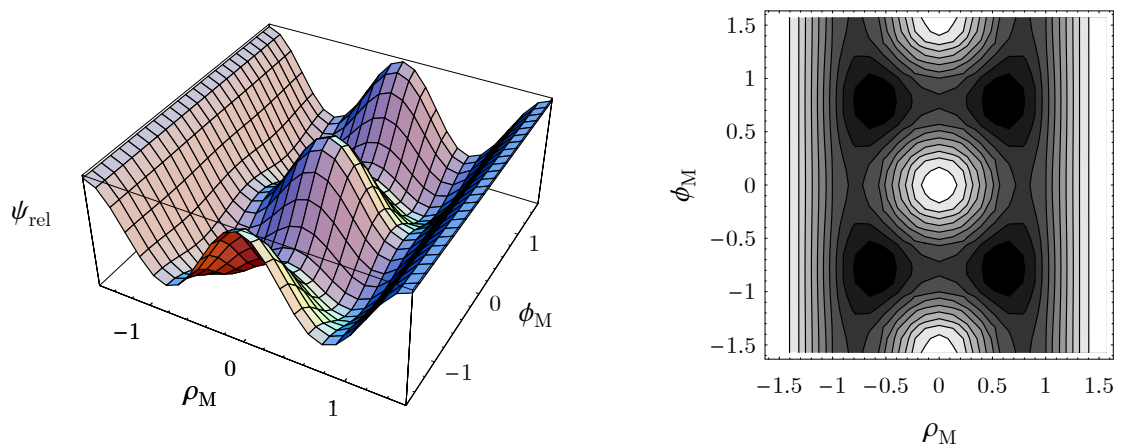


Abbildung 8.66.: Energiedichte in Abhängigkeit der Laminatorientierungen des Martensits, unbelasteter Zustand

Andererseits reicht es nicht aus, die numerische Lösung von (8.12) in Folge nur einer Wahl von Ausgangswerten für die Variablen zu verwenden. Daher wurde eine bestimmte Prozedur verwendet, um das Auffinden eines Minimums gewährleisten zu können, die im Folgenden näher erläutert wird. Zunächst werden diskrete Ausgangswerte für die Variablen gemäß des exemplarisch für die Laminatwinkel des Austenits in Abb. 8.70 dargestellten Raster (zu Grunde liegende Belastung gemäß (8.14)).

Ausgehend von diesen Werten wird nun (8.12) numerisch gelöst, was im vorliegenden Fall unter anderem auf die in Abb. 8.71 Stationaritätspunkte führte. Weitere Lösungen ergaben sich außerhalb des dargestellten Wertebereiches, welche allerdings auf Grund der Periodizität der Energie äquivalent zu den gezeigten Lösungen sind. Wie zu erkennen ist werden auch Maxima als Lösung der Stationaritätsbedingung berechnet. Der Annahme folgend, dass unter den gefundenen Lösungen wenigstens ein Minimum vorhanden ist, kann nun durch Auswahl der Lösung, welche den geringsten Wert bezüglich der Energie liefert, optimale Laminatausrichtungen bestimmt werden.

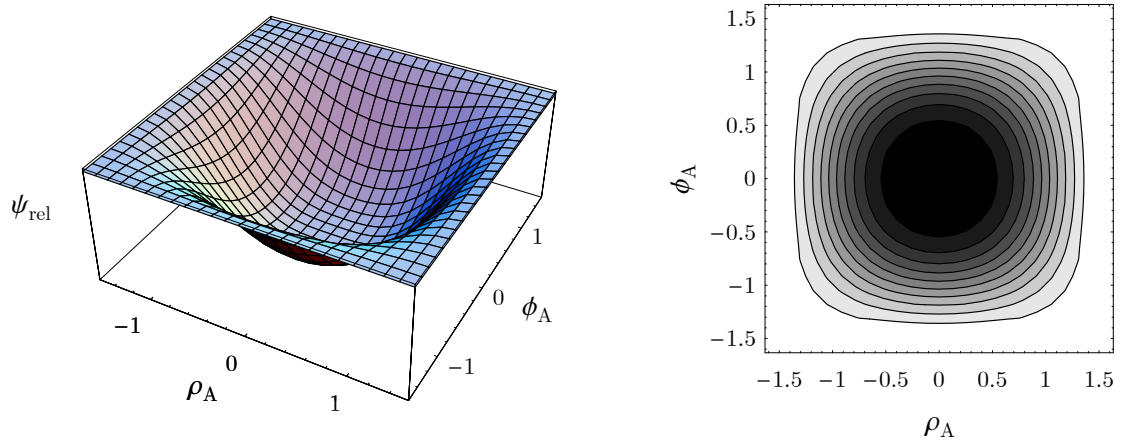


Abbildung 8.67.: Energiedichte in Abhängigkeit der Laminatorientierungen des Austenits, elastischer Zustand unter einaxialem Zug

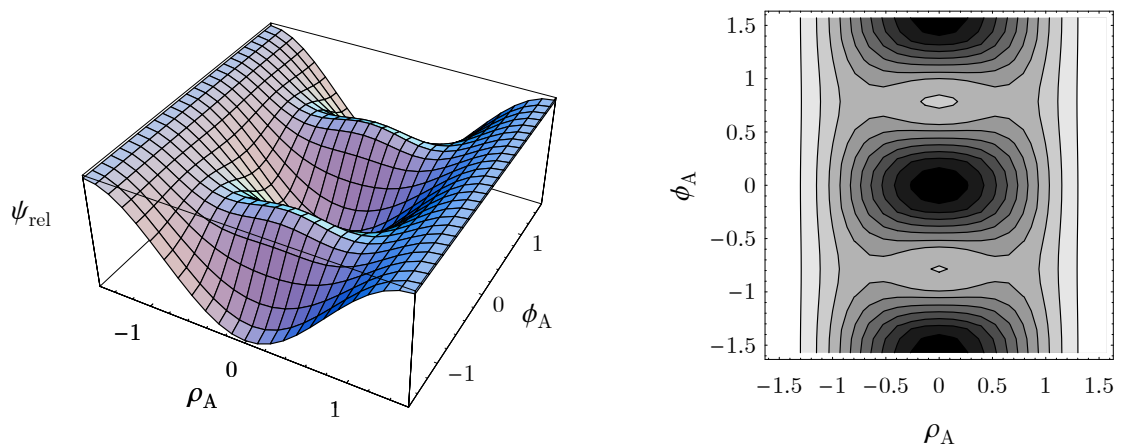


Abbildung 8.68.: Energiedichte in Abhängigkeit der Laminatorientierungen des Austenits, elastischer Zustand unter Scherung

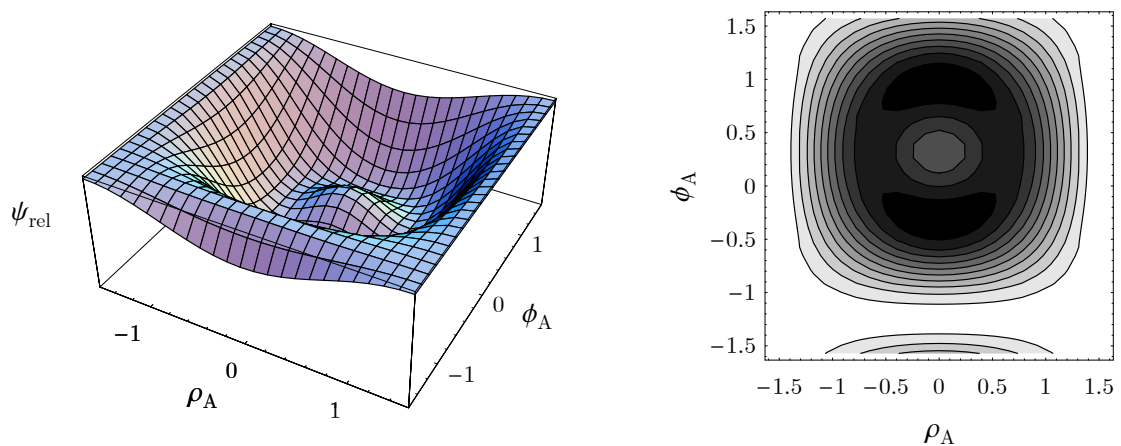


Abbildung 8.69.: Energiedichte in Abhängigkeit der Laminatorientierungen des Austenits, elastischer Zustand unter allgemeiner Belastung

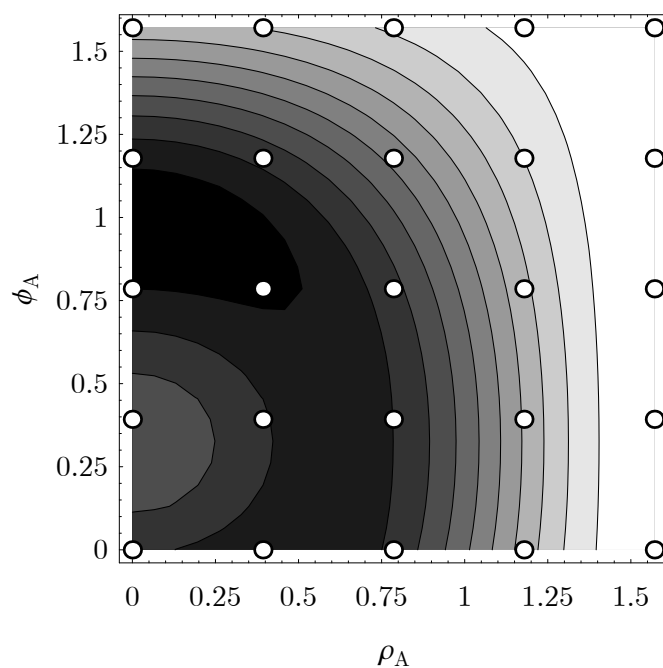


Abbildung 8.70.: Energiedichte in Abhängigkeit der Laminorientierungen des Austenits und gewähltes Raster für Ausgangswerte der Optimierung

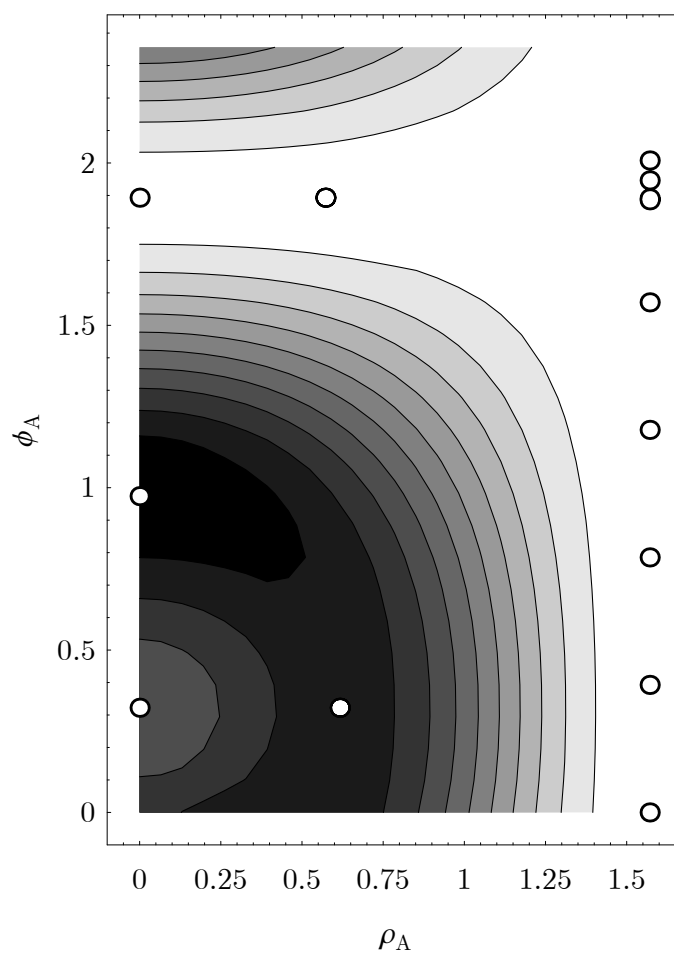


Abbildung 8.71.: Energiedichte in Abhängigkeit der Laminorientierungen des Austenits und berechnete stationäre Punkte

8.5.4. Initialwerte der algorithmischen Parameter

Wie bereits einleitend in Abschnitt 8.1 zu erkennen war, nehmen die algorithmischen Variablen zur Einhaltung der Masserestriktionen Λ_i sowie Γ je nach vorgegebener Temperatur bereits im unbelasteten Ausgangszustand Werte größer Null an. Aus dieser Erkenntnis ist bereits abzuleiten, dass bspw. die Wahl $\Lambda_i = 0$ für einen pseudoelastischen Versuch unvorteilhaft in dem Sinne ist, dass diese Initialwerte in Zusammenhang mit dem verwendeten Newton–Raphson–Verfahren relativ weit von der Lösung entfernt sind und die Konvergenz erheblich verlangsamt bzw. gegebenenfalls sogar verhindert wird.

Die Analysen von Leonhardt (2007) ergaben, dass die Werte der algorithmischen Variablen Λ_i für den pseudoelastischen Fall im Rahmen einer angewandten Konvexifizierung für den unbelasteten Zustand exakt der Differenz der chemischen Phasenenergieanteile entsprach. Demzufolge wurde generell

$$\Lambda_i^0 = \begin{cases} 0.0001 & , \text{für } T < T_0 \\ L_0 \frac{T-T_0}{T_0} & , \text{für } T \geq T_0 \end{cases}, i = 1 \dots NV \quad (8.15)$$

als Initialwerte gesetzt, wobei die Vermeidung des Wertes Null als Startwert speziell für den Fall $T < T_0$ erneut der numerischen Stabilität dient.

8.6. Zusammenfassung und Beurteilung

Abschließend lässt sich an Hand der in diesem Kapitel aufgezeigten Resultate konstatieren, dass die Methode der relaxierten Energiepotenziale eine probate Möglichkeit zur Modellierung von inelastischen Materialien, insbesondere unter Berücksichtigung induzierter Mikrostrukturen, bietet. Es lassen sich damit durch eine möglichst genaue Approximation der quasikonvexen Hülle der zu Grunde liegenden Energiedichte Stoffgesetze entwickeln, welche sowohl physikalisch als auch mathematisch auf einer soliden Basis stehen. Wie gezeigt, lassen sich die elementaren Phänomene von Formgedächtnislegierungen, nämlich die Pseudoelastizität sowie –plastizität, nachbilden. Darüber hinaus erhält man je nach gewählter Relaxierungsmethode detaillierte Resultate bezüglich des mikrostrukturellen Aufbaus des Materials, sei es durch Kenntnis der genauen Zusammensetzung der Phasenanteile oder wie im Fall der Rang–1–Konvexifizierung sogar der geometrischen Anordnung der Phasenbestandteile.

Obwohl ein Vergleich der Materialmodelle mit experimentellen Daten auf Grund der Beschränktheit auf ideale Einkristalle äußerst schwierig zu realisieren wäre, zeigt sich im direkten Vergleich der beiden hauptsächlich behandelten Verfahren, dass die Rang–1–Konvexifizierung das tatsächliche Materialverhalten deutlich realistischer simuliert. Die Resultate der Konvexifizierung weisen in den meisten Fällen eine künstliche, nicht mit experimentellen Analysen zu vereinbarende Steifigkeit des Materials während der Phasentransformation auf.

Grundlegend sei an dieser Stelle zur Einstufung des Konzeptes der Relaxierung im Vergleich zu anderen Verfahren noch einmal der bereits in Abschnitt 4.4 angedeutete Zusammenhang bzw. Unterschied zwischen Quasikonvexität und Elliptizität aufgegriffen. Historisch betrachtet wurde die Analyse der Elliptizität eines vorliegenden Problems zunächst

vorwiegend auf Modelle angewandt, welche sogenannte *Lokalisierungsphänomene* z.B. im Kontext von Rissbildung bzw. –ausbreitung oder Schädigung behandelten (siehe u.A. Perzyna (1998)). Die Studien der damit zusammenhängenden, sogenannten *Schwachen Diskontinuitäten* geht u.A. auf Hill (1962) zurück. In diesem Zusammenhang existiert mit dem *Verlust der Elliptizität* eines mathematischen Systems ein Schlüsselkriterium für das Auftreten von Lokalisierungen und damit verknüpften Instabilitäten. Dieses Kriterium wird für die notwendige Änderung interner Variablen verwendet.

Lokal betrachtet ist die Erfüllung der Elliptizität identisch mit der Bedingung der Quasikonvexität. Global betrachtet existiert allerdings ein schwer wiegender Unterschied, zu dessen Erläuterung auch die in Abb. 8.72 dargestellte, eindimensionale Funktion $\psi(\varepsilon)$ dienen soll.

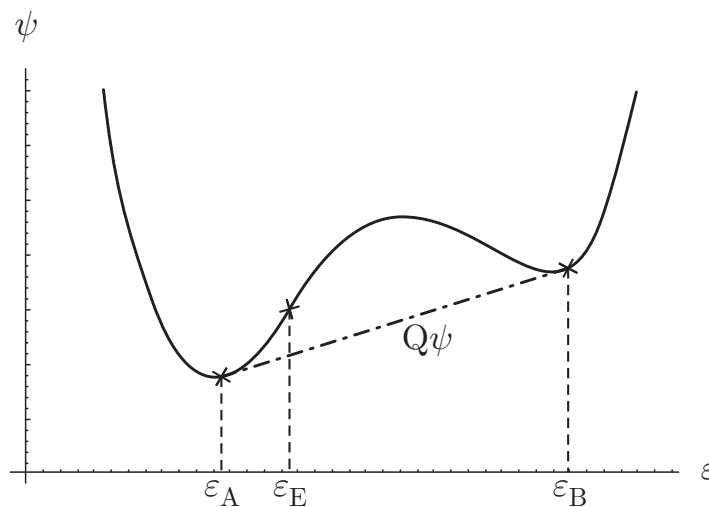


Abbildung 8.72.: Schematische Darstellung einer eindimensionalen Funktion sowie der quasikonvexen Hülle

Während die Verletzung der Legendre–Hadamard–Bedingung, hier exemplarisch am Wendepunkt der Funktion ψ an der Stelle $\varepsilon = \varepsilon_E$ eintretend, ein rein lokales Kriterium darstellt, bedeutet dies für die Quasikonvexifizierung, dass bereits zu einem vorherigen Zustand, nämlich $\varepsilon = \varepsilon_A$ die Relaxierung des Potenzials hätte in Kraft treten müssen. Die quasikonvexe Hülle stellt sich dabei innerhalb des nicht-quasikonvexen Bereiches hier als Tangente an die ursprüngliche Funktion ψ , welche die Punkte ε_A und ε_B verbindet, dar. Obwohl das lokale Kriterium für beide Konzepte identisch ist unterscheidet sich die Auswirkung global betrachtet immens voneinander. Ein Kritikpunkt, den man den Relaxierungsverfahren nun entgegen bringen kann, ist, dass ein Material im Zustand ε_A gewiss sein muss, dass es durch eine Mischung mit dem zuweilen „weit entfernten“ Zustand ε_B die vorhandene Energie drastisch senken kann. Erreicht man in herkömmlicher Manier allerdings den Wendepunkt der Funktion ψ in ε_E , so muss dem Material nicht eine solche „Weitsicht“ zugesprochen werden, damit beispielsweise eine Phasentransformation initiiert wird.

Dieser scheinbare Malus wird zumeist mit dem Argument vorhandener Energiefluktuationen versucht zu entkräften, welche zu der erwähnten Mischung stark abweichender Dehnungszustände führt. Allerdings tritt in diesem Zusammenhang ein weiterer Makel in Augenschein, der anhand von Abb. 8.73 ersichtlich wird.

Ein physikalisch sinnvoller Maßstab dafür, ob die in jedem Fall vorhandenen Fluktuation

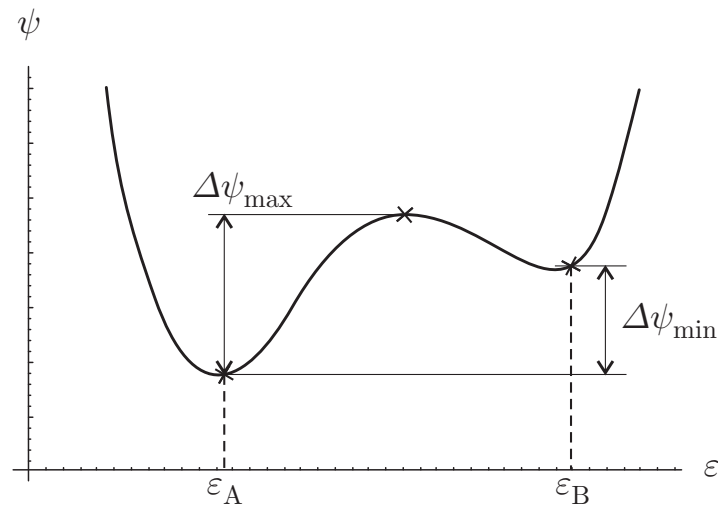


Abbildung 8.73.: Schematische Darstellung einer eindimensionalen Funktion sowie möglichen Energiebarrieren

für die Einleitung einer Phasentransformation ausreichend sind, ist die hier mit $\Delta\psi_{\max}$ bezeichnete Energiebarriere zwischen dem Energieniveau im Zustand ε_A und dem im Bereich $\varepsilon \in [\varepsilon_A, \varepsilon_B]$ befindlichen, lokalen Maximum der Funktion ψ . Diese Größe wird zumeist in Materialmodellen wie von Govindjee and Hall (2000) verwendet, welche auf der statistischen Mechanik beruhen und Übergangswahrscheinlichkeiten verwenden. In die verschiedenen Relaxierungsmethoden geht statt dessen aber lediglich die Differenz der lokalen Minima $\Delta\psi_{\min}$, genauer gesagt der Minima der Phasenenergien, ein, was z.B. anhand von (5.23) deutlich wird. Es erscheint daher im Sinne der physikalischen Plausibilität befremdlich, dass die Fähigkeit der Fluktuation zur Herbeiführung der Phasenmischung nicht von der erwähnten Energiebarriere abhängt.

Durch die Verknüpfung der Relaxierungsverfahren mit dem dargestellten Konzept der Dissipationsfunktionale und den daraus hergeleiteten Evolutionsgesetzen existieren jedoch Verfahren, welche die hier aufgeführten Unzulänglichkeiten der „reinen“ Relaxierung kompensieren und den vermeintlich bestmöglichen Konsens zwischen mathematischer und physikalischer Plausibilität bieten, insbesondere auch wegen der dadurch erst realisierbaren Berücksichtigung dissipativer Mechanismen innerhalb der jeweiligen Stoffgesetze. Eine Analyse von Ball (1977) zeigt in diesem Zusammenhang, dass durchaus für finite Deformationen materielle Instabilitäten, wie etwa das Knicken eines Stabs, auftreten können, obwohl die Legendre–Hadamard–Bedingung nicht verletzt ist. Zu der gleichen Erkenntnis kommen z.B. auch Drugan (2007) sowie Kochmann (2006) im Rahmen der Untersuchung der effektiven Materialparameter von Kompositen, welche eine Phase mit negativer Steifigkeit besitzen.

Die hier aufgeführten differential–algebraischen Gleichungssysteme der elasto–plastischen Evolutionsgesetze weisen mitunter Probleme bezüglich der numerischen Stabilität auf, insbesondere an den kritischen Punkten einer beginnenden bzw. vollendeten Phasentransformation, was sich in einer schlechten Kondition des Gleichungssystems äußert. Allerdings kann durch geeignete Maßnahmen, wie etwa einer bestimmten Parameterwahl oder der Verwendung eines geeigneten Gleichungslösers, ein weitestgehend stabiler Algorithmus gewährleistet werden. Das viskoplastische Evolutionsgesetz weist zusätzlich zu einer weitaus größeren numerischen Stabilität den Vorteil auf, dass es auf Grund des zeitabhängigen Verhaltens

im Prinzip eine Phasenfrontausbreitung mit endlicher Geschwindigkeit abbildet und daher gegenüber der unendlichen schnellen Entwicklung der Phasenanteile im Rahmen der elasto-plastischen Gesetze deutlich realistischer erscheint.

Im Kontext der algorithmischen Umsetzung der Stoffgesetze muss jedoch erwähnt werden, dass die in Abschnitt 8.5.3 beschriebenen Maßnahmen zur Bestimmung probater Startwerte für die Laminatorientierung die Effizienz der Rang-1-Konvexifizierung in hohem Maße verschlechtert. Insbesondere hinsichtlich der Einbindung in die FEM ist es daher dringend erforderlich durch verfeinerte numerische Vorgehensweisen den Algorithmus bezüglich der Rechenzeit zu optimieren, was den Rahmen dieser Arbeit jedoch überschritten hätte.

Teil III.

Modellbildung auf mesoskopischer Ebene

9. Motivation und grundlegende Konzepte

9.1. Motivation des Multiskalen–Konzeptes

Wie bereits in der Einleitung angedeutet, ist es die Interaktion mehrerer, auf unterschiedlichen Skalen des Materials ablaufender Prozesse, die letztlich das makroskopische Materialverhalten beeinflussen bzw. definieren. Polykristalline Materialgefüge mitsamt deren Korngrenzen oder diffusionsgesteuerte Ausscheidungen sind nur zwei von vielen Einflussfaktoren. Die mikromechanischen Modelle aus Teil II sind dabei z.B. im Gegensatz zu dem mikromechanischen Modell von Hackl and Schmidt-Baldassari (2004), welches direkt auf Polykristall–Ebene angesiedelt ist, auf die mikroskopische Ebene beschränkt und simulieren das Verhalten idealer Einkristalle bei vorgegebener Kristallorientierung. Daher ist die Berücksichtigung weiterer Skalen zur adäquaten Modellbildung von FGL unvermeidbar.

Vorgreifend auf die folgenden Abschnitte sei bereits angemerkt, dass der Fokus im Rahmen der vorliegenden Arbeit diesbezüglich eindeutig auf der numerischen Umsetzung und Anwendung der vorgestellten Verfahren liegt. Die theoretischen Grundlagen werden daher rudimentär behandelt und können den im weiteren Verlauf des Kapitels genannten Literaturangaben entnommen werden.

9.2. Homogenisierung

Die elementare Fragestellung hinter dem Konzept der Homogenisierung ist, wie sich ein Körper unter vorgegebener Belastung verhält, dessen mechanische Eigenschaften räumlich variieren, also inhomogen ist. Dies setzt für die weitere Vorgehensweise speziell in Verbindung mit den verwendeten Multiskalen–Methoden voraus, dass die Größenordnung der Inhomogenitäten eines Materials weitaus kleiner ist als die des betrachteten makroskopischen Körpers bzw. der übergeordneten Skale. Ferner müssen diese Inhomogenitäten in periodischen Strukturen zusammengefasst werden können, den sogenannten *repräsentativen Volumenelementen* (RVE), deren Größenordnung ebenfalls weitaus geringer als die der übergeordneten Skale ausfallen muss. Im Gegensatz dazu konnten die RVE im Kontext von Teil II dieser Arbeit als lokale Erweiterung eines Materialpunktes aufgefasst werden.

Zur besseren Verdeutlichung sei Abb.9.1 angeführt: Dargestellt ist ein makroskopischer Körper, dessen Material exemplarisch die durch die schwarzen „Partikel“ symbolisierten Inhomogenitäten aufweist. Unter Kenntniss des makroskopischen Dehnungszustandes $\bar{\epsilon}$ sowie notwendigen Informationen über die untergeordnete Skale (beispielsweise Volumenfraktionen der einzelnen Bestandteile sowie deren elastische Konstanten) gilt es nun, die effektiven Spannungen gemäß

$$\bar{\sigma} = C^* \circ \bar{\epsilon} \quad (9.1)$$

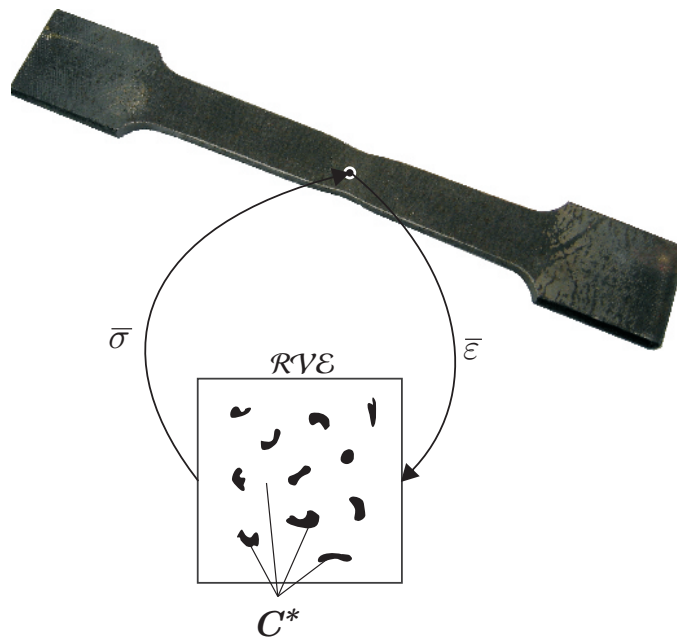


Abbildung 9.1.: Skalentransfer effektiver Größen

zu berechnen, wobei C^* den effektiven Materialoperator des RVE oder auch die generalisierte Steifigkeitsmatrix und $\circ$ eine allgemeine Anwendung darstellt¹. Die Bestimmung des Operators C^* ist dabei in mehrere Schritte untergliedert, die sich zunächst ohne Betrachtung der detaillierten algorithmischen Umsetzung im Rahmen dieser Arbeit wie folgt darstellen:

1. Eine (zumeist) heterogene Aufteilung des vorgegebenen Dehnungszustandes innerhalb des RVE
2. Die Bestimmung des Spannungsfeldes, welches zum Gleichgewichtszustand innerhalb des RVE führt
3. Eine Mittelwertbildung des Spannungsfeldes zur Festlegung des effektiven Spannungszustandes des RVEs

Die notwendige „Umwandlung“ diskreter Zustände in ein lokales Feld und umgekehrt definiert dabei den Skalentransfer der relevanten Größen (*scale bridging, micro–macro–transition*).

Auf Grund der durch die unterschiedlichen Längenskalen bedingte Unabhängigkeit der Materialebenen lässt sich diese Prozedur auf eine große Anzahl zu verknüpfender Skalen erweitern, so lange die Voraussetzungen zur Durchführung der Homogenisierung gewahrt bleiben, was diese Methoden zu universellen Instrumenten der Materialmodellierung macht.

¹Eine Formulierung für vorgegebene Spannungen unter Verwendung einer generalisierten Nachgiebigkeitsmatrix ist ebenso möglich.

9.3. Klassische Methoden

Für eine umfassende Übersicht der klassischen Methoden sowie eine tiefgreifendere Auseinandersetzung mit dem hier behandelten Themenkomplex sei an dieser Stelle im Vorfeld exemplarisch auf Mura (1987) und Zohdi and Wriggers (2005) verwiesen, die auch als Grundlage für die vorliegende Arbeit dienen.

Reuss– und Voigt–Grenze

Die Pionierarbeit zur Bestimmung effektiver Materialparameter von Kompositen bzw. Polykristallen, was unverändert von großer Bedeutung hinsichtlich der Modellierung moderner Materialien ist, wurde von Voigt (1889) und Reuss (1929) geleistet. Beiden Theorien liegt die Annahme zu Grunde, dass eines der unbekannten Felder innerhalb des hier durch die Koordinaten $\mathbf{x}$ beschriebenen RVEs konstant ist. Dabei führt die Annahme konstanter Dehnungen $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$ auf die sogenannte *Voigt–Grenze*, während ein konstant angenommenes Spannungsfeld $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \bar{\boldsymbol{\sigma}}$ die sogenannte *Reuss–Grenze* ergibt. Gemäß der jeweilig zu Grunde liegenden Theorie ergibt sich der effektive Materialoperator durch Mittelbildung über das Volumen V zu

$$\mathbf{C}_V^* = \frac{1}{V} \int_{\mathcal{RVE}} \mathbf{C}(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \quad \text{nach Voigt} \quad (9.2)$$

$$\mathbf{C}_R^* = \frac{1}{V} \left(\int_{\mathcal{RVE}} \mathbf{C}^{-1}(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \right)^{-1} \quad \text{nach Reuss} \quad (9.3)$$

Exakt sind diese Resultate nur für den Fall parallel (Voigt) bzw. seriell (Reuss) geschalteter elastischer Komponenten (z.B. Federn). Für allgemeine Problemstellungen können diese klassischen Grenzen jedoch lediglich als mitunter grobe Abschätzung dienen. Unter bestimmten Voraussetzungen hinsichtlich der Materialkonstanten, insbesondere der Positivität des E–Moduls, können diese als obere bzw. untere Grenze zu der tatsächlich existierenden Steifigkeit des inhomogenen Materials angesehen werden. Verwirft man diese Voraussetzungen jedoch, so lässt sich zeigen, dass die effektiven Materialparameter sehr wohl Werte jenseits dieser Grenzen annehmen können (siehe erneut Drugan (2007) sowie Kochmann (2006)).

Wie anhand der Gleichungen (9.2) und (9.3) deutlich wird, erhalten außer den Volumenfraktionen der einzelnen Bestandteile sowie deren jeweilige Materialparameter keine weiteren mikromechanischen Größen Einzug in die Berechnungen.

Lösung nach Eshelby

Von eminenter Bedeutung selbst für die moderne Mikromechanik ist die Arbeit von Eshelby (1957) sowie weiterführend Eshelby (1959) und Eshelby (1961), in denen der Einfluss einer ellipsoiden Inklusion innerhalb eines isotropen Matrixmaterials analytisch untersucht wird.

Die dort beschriebene, sogenannte *equivalent inclusion method* basiert auf der Idee, dass sich dieser Einfluss z.B. hinsichtlich des Spannungsfeldes durch eine künstlich eingeführte, sogenannte *äquivalente Eigendehnung* ϵ^* innerhalb der Inklusion beschreiben lässt. Diese Eigendehnung kann über die folgende Äquivalenzbedingung

$$\mathbf{C}^* : (\bar{\epsilon} + \mathbb{S} : \epsilon^*) = \mathbf{C} : (\bar{\epsilon} + \mathbb{S} : \epsilon^* - \epsilon^*) \quad (9.4)$$

bestimmt werden. Dabei bedeuten $\mathbf{C}$ und $\mathbf{C}^*$ den Materialtensor des Matrixmaterials bzw. der Inklusion, $\bar{\epsilon}$ den makroskopischen Dehnungszustand sowie $\mathbb{S}$ den sogenannten *Eshelby-Tensor*. Sind sowohl das Material der Matrix als auch der Inklusion isotrop, so lässt sich dieser durch

$$\begin{aligned} \mathbb{S}_{1111} &= \frac{3}{8\pi(1-\nu)} a_1^2 I_{11} + \frac{1-2\nu}{8\pi(1-\nu)} I_1 \\ \mathbb{S}_{1122} &= \frac{1}{8\pi(1-\nu)} a_2^2 I_{12} - \frac{1-2\nu}{8\pi(1-\nu)} I_1 \\ \mathbb{S}_{1133} &= \frac{1}{8\pi(1-\nu)} a_3^2 I_{13} - \frac{1-2\nu}{8\pi(1-\nu)} I_1 \\ \mathbb{S}_{1212} &= \frac{a_1^2 + a_2^2}{16\pi(1-\nu)} I_{12} + \frac{1-2\nu}{16\pi(1-\nu)} (I_1 + I_2) \end{aligned} \quad (9.5)$$

berechnen. Während die Größen a_i den jeweiligen Achsen-Halbmesser des Ellipsoids symbolisieren, können die mit I gekennzeichneten Ausdrücke durch

$$\begin{aligned} I_1 &= 2\pi a_1 a_2 a_3 \int_0^\infty \frac{1}{(a_1^2 + s) \Delta(s)} ds \\ I_{11} &= 2\pi a_1 a_2 a_3 \int_0^\infty \frac{1}{(a_1^2 + s)^2 \Delta(s)} ds \\ I_{12} &= 2\pi a_1 a_2 a_3 \int_0^\infty \frac{1}{(a_1^2 + s)(a_2^2 + s) \Delta(s)} ds \\ \Delta(s) &= \sqrt{a_1^2 + s} \sqrt{a_2^2 + s} \sqrt{a_3^2 + s} \end{aligned} \quad (9.6)$$

berechnet werden. Zu berücksichtigen ist dabei, dass sich weitere von Null verschiedene Einträge durch zyklische Permutation ergeben.

Hinsichtlich vieler Anwendungen gilt die Voraussetzung, dass die Inhomogenität eine reale Eigendehnung ϵ^p aufweist, bspw. gerade bei Ausscheidungen oder martensitischen Umwandlungen. Dies kann ebenfalls mit der Methode nach Eshelby berücksichtigt werden, indem anstatt (9.4) die Bedingung

$$\mathbf{C}^* : (\bar{\epsilon} + \mathbb{S} : (\epsilon^p + \epsilon^*) - \epsilon^p) = \mathbf{C} : (\bar{\epsilon} + \mathbb{S} : (\epsilon^p + \epsilon^*) - (\epsilon^p + \epsilon^*)) \quad (9.7)$$

zur Bestimmung der äquivalenten Eigendehnung heran gezogen wird.

Hinsichtlich eines in Abschnitt 9.4.3 aufgeführten Vergleiches der klassischen Methoden mit der in Kapitel 9.4 beschriebenen Multiskalen–Finite–Elemente–Methode (MFEM) seien an dieser Stelle die speziell für eine kreisförmige Inklusion geltenden Resultate erwähnt. Gemäß Li et al. (2005a) und Li et al. (2005b), die im Übrigen Eshelbys Analysen auf ebenfalls kreisförmige RVEs mit finiten Abmessungen verallgemeinern, lassen sich die Komponenten des Eshelby–Tensors durch

$$\mathbb{S}_{ijmn}^{I,\infty} = \boldsymbol{\theta}_{ijmn}^T \cdot \mathbf{S}^{I,\infty} \quad \text{im Inneren der Inklusion, bzw.} \quad (9.8)$$

$$\mathbb{S}_{ijmn}^{E,\infty} = \boldsymbol{\theta}_{ijmn}^T \cdot \mathbf{S}^{E,\infty} \quad \text{außerhalb der Inklusion} \quad (9.9)$$

mit

$$\boldsymbol{\theta}_{ijmn}^T := \begin{pmatrix} \delta_{ij} \delta_{mn} \\ \delta_{im} \delta_{jn} + \delta_{in} \delta_{jm} \\ \delta_{ij} r_m r_n \\ \delta_{mn} r_i r_j \\ r_i r_j r_m r_n \end{pmatrix} \quad (9.10)$$

in sehr kompakter Art und Weise sowohl für die Inklusion (*Interior field*) als auch die Matrix (*Exterior field*) schreiben, wobei r die Komponenten des normierten Richtungsvektors zu einem beliebigen Punkt innerhalb des RVEs darstellen und das Symbol ∞ bedeutet, dass die klassische Lösung nach Eshelby nur Gültigkeit für eine im Vergleich zur Inklusion unendlich großen Umgebung besitzt. Die später relevanten Größen für die kreisförmige Inklusion lassen sich mit Hilfe von

$$\mathbf{S}^{I,\infty} = \frac{1}{8(1-\nu)} \begin{pmatrix} 4\nu - 1 \\ 3 - 4\nu \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (9.11)$$

mit ν als Querkontraktionszahl der Matrix berechnen.

Hashin–Shtrikman–Schränken

In Hashin and Shtrikman (1962a), Hashin and Shtrikman (1962b) sowie Hashin and Shtrikman (1962c) werden Variationsprinzipien zur Behandlung mehrphasiger Materialien vorgestellt sowie daraus folgende Ergebnisse z.B. hinsichtlich der effektiven Materialparameter hergeleitet. Dabei werden sowohl obere als auch untere Schranken präsentiert. Für ein zweiphasiges Material gilt exemplarisch für den effektiven Kompressionsmodul (*bulk modulus*)

K^* sowie für den Gleitmodul (*shear modulus*) G^*

$$\begin{aligned} K_u^* &= K_{Ink} + (1 - c_{Ink}) \left(\frac{1}{K_{Mat} - K_{Ink}} + \frac{3 c_{Ink}}{3 K_{Ink} + 4 G_{Ink}} \right)^{-1} \\ K_l^* &= K_{Mat} + c_{Ink} \left(\frac{1}{K_{Ink} - K_{Mat}} + \frac{3 (1 - c_{Ink})}{3 K_{Mat} + 4 G_{Mat}} \right)^{-1} \\ G_u^* &= G_{Ink} + (1 - c_{Ink}) \left(\frac{1}{G_{Mat} - G_{Ink}} + \frac{6 (K_{Ink} + 2 G_{Ink}) c_{Ink}}{5 G_{Ink} (3 K_{Ink} + 4 G_{Ink})} \right)^{-1} \\ G_l^* &= G_{Mat} + c_{Ink} \left(\frac{1}{G_{Ink} - G_{Mat}} + \frac{6 (K_{Mat} + 2 G_{Mat}) (1 - c_{Ink})}{5 G_{Mat} (3 K_{Mat} + 4 G_{Mat})} \right)^{-1} \end{aligned}$$

mit c_{Ink} als Volumenanteil der Inklusion. Generell symbolisieren hier die Indizes $\bullet_{Ink}$ und $\bullet_{Mat}$ Größen für die Inklusion bzw. das Matrixmaterial sowie $\bullet_u$ und $\bullet_l$ die obere (*upper*) bzw. untere (*lower*) Schranke der Parameter.

9.4. Multiskalen–Finite–Elemente–Methode (MFEM)

9.4.1. Grundlagen

Das Manko der zuvor präsentierten und sonstigen analytischen Methoden ist, dass diese sehr restriktiv bezüglich der Voraussetzungen an das Material sind, bspw. bezüglich des Volumenanteils der Inhomogenitäten oder der isotropen Elastizität der verschiedenen Komposite. Daher ist es u.A. hinsichtlich der Berücksichtigung großer Deformationen sowie inelastischer Materialien notwendig, diese Theorien zu erweitern und numerisch umzusetzen, was im Rahmen dieser Arbeit mittels der sogenannten *Multiskalen–FEM* (hier desweiteren mit MFEM abgekürzt) erfolgt.

Es sei diesbezüglich hier angemerkt, dass zur Behandlung der elementaren Grundlagen dieses Themenkomplexes auf die Arbeiten von Hill (1972), Willis (1981), Hashin (1983), Krauwig (1986), Suquet (1987), Nemat-Nasser and Hori (1993) und Castaneda and Suquet (1998) verwiesen sei. Eine umfassende Abhandlung dazu unter besonderer Berücksichtigung numerischer Simulationen finden sich zudem in den Arbeiten von Miehe et al. (2002), Miehe et al. (2002), Miehe (2003) und Miehe and Dettmar (2004). Im Folgenden werden lediglich die Grundgerüste dieses Verfahrens erläutert, und zwar erneut mit der Beschränkung auf kleine Verformungen.

Ausgangspunkt ist die Diskretisierung der Mesostruktur des Materials mittels Finiten Elemente, wobei nicht nur die Inhomogenitäten geometrisch sondern auch insgesamt ein repräsentativer Ausschnitt des Materials erfasst werden müssen. Grundlage für die Berechnungen ist nun ein Variationsprinzip der Art

$$\bar{\psi}(\bar{\epsilon}) = \min \left\{ \frac{1}{V} \int_{\mathcal{RVE}} \psi(\bar{\epsilon} + \nabla_s \mathbf{w}) \, dV; \mathbf{w} \right\} \quad (9.12)$$

und die damit einhergehende Einführung eines sogenannten *Fluktuationsfeldes* $\mathbf{w}$, welches periodisch innerhalb des RVEs sein muss, so dass

$$\int_{\mathcal{RVE}} \mathbf{w} \, dV = \mathbf{0} \quad (9.13)$$

gilt. An dieser Stelle sei ausdrücklich auf die Ähnlichkeit dieses Variationsprinzips bzw. der zu Grunde liegenden Energie mit denen der Quasikonvexifizierung (siehe 4.8 auf S. 36) hingewiesen. In diesem Sinne kann man demnach ebenfalls von einer Approximation der quasikonvexen Hülle auf der Mesoskala sprechen, wobei die Güte der Näherung bspw. nicht von der verwendeten Ordnung von Laminaten, sondern u.A. von der gewählten Vernetzungsdichte abhängt.

Gemäß des Ansatzes

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \cdot \mathbf{x} + \nabla_s \mathbf{w} \quad (9.14)$$

für das Dehnungsfeld $\boldsymbol{\varepsilon}$ in Abhängigkeit des Ortes $\mathbf{x}$ auf der Mesoskala ist dieses aufgeteilt in einen homogenen Anteil, welcher durch den vorgegebenen, makroskopischen Verformungszustand $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$ eindeutig bestimmt ist, sowie einen heterogenen Anteil aus dem symmetrischen Gradienten $\nabla_s \mathbf{w} := 1/2 (\nabla \mathbf{w} + \mathbf{w} \nabla)$ des Fluktuationsfeldes, welches sich für die FE–Routine in diskretisierter Form als variable Knotenverschiebungen darstellt. Die Randbedingungen des Fluktuationsfeldes sind dabei natürlich nicht eindeutig. Die elementare Vorgabe diesbezüglich ist allerdings, dass diese die sogenannte *Hill–Mandel microheterogeneity condition*

$$\bar{\mathbf{P}} : \dot{\bar{\mathbf{F}}} = \frac{1}{V} \int_{\mathcal{RVE}} \mathbf{P} : \dot{\mathbf{F}} \, dV \quad (9.15)$$

bzw. in linearisierter Form

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}} : \dot{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}} = \frac{1}{V} \int_{\mathcal{RVE}} \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} \, dV \quad (9.16)$$

erfüllen und damit die makroskopische Spannungsleistung identisch ist mit der mesoskopischen. Die Gleichheit der effektiven Größen $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$ und $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$ mit den jeweiligen volumenanteiligen Mittelwerten ist im Übrigen nur gewährleistet, wenn das RVE keine Löcher oder Diskontinuitäten aufweist.

Mögliche Annahmen hinsichtlich der Randbedingungen von $\mathbf{w}$, welche (9.15) bzw. (9.16) erfüllen, sind:

- lineare Randverschiebungen, gleichbedeutend mit $\mathbf{w} = 0$ auf dem Rand $\partial \mathcal{RVE}$
- periodische Randverschiebungen, gleichbedeutend mit antiperiodischen Traktionen auf dem Rand $\partial \mathcal{RVE}$
- konstante Traktionen auf dem Rand $\partial \mathcal{RVE}$

In diesem Zusammenhang kann gezeigt werden, dass lineare Randverschiebungen eine obere sowie konstante Traktionen eine untere Schranke für die effektive Steifigkeit C^* des RVEs

ergeben. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wird ausschließlich die Variante mit periodischen Randverschiebungen angewandt.

Für die algorithmische Umsetzung bedeutet dies, dass zusätzlich zu den Standardprozeduren der FEM noch die in Abb. 9.2 dargestellten Bedingungen hinsichtlich der Gleichheit von Verschiebungen auf gegenüberliegenden Rändern des RVEs erfüllt sein müssen. Auf Grund

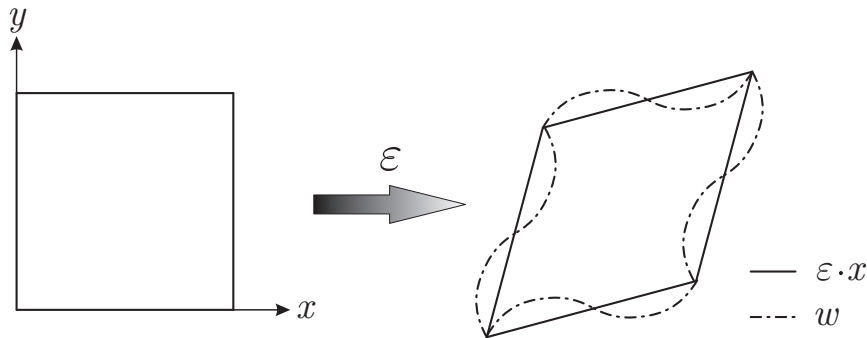


Abbildung 9.2.: homogene Deformation eines RVEs und Fluktuations-Randbedingungen

der damit verbundenen uneingeschränkten Kontrolle der Routine sowie der in kommerziellen Programmen noch nicht standardisierten Anwendung der MFEM wurde ein eigens erstellter FE-Code mit Hilfe der Programmiersprache FORTRANTM entwickelt und verwendet. Zur Verdeutlichung der Grundlagen und elementaren Prozeduren der FEM sei dabei an dieser Stelle auf Werke wie Bathe (1990) und Zienkiewicz and Taylor (2005) verwiesen. In diesem Zusammenhang hat sich auch über das Ingenieursstudium hinaus Kuhl and Meschke (2001) als sehr hilfreich erwiesen. Ohne an dieser Stelle erschöpfend auf die Maßnahmen zur Einhaltung der beschriebenen Randbedingungen der Fluktuationen w einzugehen sei aber erwähnt, dass dies mittels im Gesamtpotenzial berücksichtigter Lagrange-Terme bewerkstelligt wurde.

Für die geometrische Diskretisierung der Mesoebene, das Pre- und Postprocessing sowie die nötige Verknüpfung dieser Bestandteile untereinander sowie zur eigentlichen FE-Routine wurden die Programmsysteme bzw. -sprachen MATHEMATICATM, GiDTM und PYTHONTM verwendet.

Einer der wichtigsten Aspekte der Finite-Elemente-Implementation der zu Grunde liegenden Materialmodelle aus Teil II ist die möglichst akurate Berechnung des Tangentenoperators zur Aktualisierung der Knotenvariablen im Rahmen eines Newton-Raphson-Verfahrens zur Bestimmung des globalen Gleichgewichtszustandes. Aus diesem Grund wird dies im folgenden Abschnitt eingehend für bestimmte Evolutionstypen behandelt.

9.4.2. Algorithmischer Tangentenoperator

Die effiziente Umsetzung eines Materialmodells bedarf der Verwendung konsistenter Tangentenoperatoren im Rahmen des Newton-Raphson Verfahrens auf nicht-lokaler Ebene. Den nachfolgenden Abschnitten vorgreifend lässt sich anmerken, dass es sich bei der Bestimmung des besagten Operators um die konsistente Linearisierung der Spannungen $\sigma(\varepsilon, p_i)$

mit p_i als generalisierten internen Variablen handelt. Der grundlegende Ansatz lautet also

$$d\boldsymbol{\sigma} = \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} : d\boldsymbol{\varepsilon} + \sum_i \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial p_i} dp_i \quad . \quad (9.17)$$

Berücksichtigt man noch den Zusammenhang

$$\frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial p_i} = \frac{\partial \psi_{rel}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon} \partial p_i} = -\frac{\partial q_i}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} \quad , \quad (9.18)$$

mit q_i als treibenden Kräften gemäß Kapitel 5, so lässt sich (9.17) zu

$$d\boldsymbol{\sigma} = \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} : d\boldsymbol{\varepsilon} - \sum_i \frac{\partial q_i}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} dp_i \quad . \quad (9.19)$$

umformulieren, was sich im Rahmen dieser Arbeit als praktikabler heraus stellte, da die partiellen Ableitungen $\partial q_i / \partial \boldsymbol{\varepsilon}$ analytisch einfacher herzuleiten sind als $\partial \boldsymbol{\sigma} / \partial p_i$.

Es gilt also nun den Zusammenhang zwischen den Inkrementen dp_i und $d\boldsymbol{\varepsilon}$ zu bestimmen, welcher primär vom jeweils verwendeten Evolutionsgesetz abhängt. Die verschiedenen Materialmodelle gehen durch die jeweiligen Spannungen $\boldsymbol{\sigma}$ und treibenden Kräfte q_i mit ein. Zur Vereinfachung soll dabei folgend die Annahme gelten, dass sich die geometrischen Variablen der Mikrostruktur (Laminatorientierungen) während der gesamten Berechnung nicht ändern, was bei der Wahl eines ausreichend großen Dissipationsparameters auch jederzeit gewährleistet werden kann.

Evolutionstyp von Mises

Grundlage der folgenden Herleitungen ist das aus dem Gleichungssystem (7.17) auf S. 72 bestehende Evolutionsgesetz, welches zur besseren Übersicht an dieser Stelle noch mal wie folgt aufgeführt ist:

$$\begin{aligned} g_i &= \theta_i - \theta_i^{n-1} - \Delta \lambda_\theta q_i \tilde{q}^{-1} = 0 \quad , i = 1 \dots NV \\ f &= \sqrt{\Phi_\theta^2 + \Delta \lambda_\theta^2} + \Phi_\theta - \Delta \lambda_\theta = 0 \\ h_i &= \sqrt{r_i^2 + \Lambda_i^2} + r_i - \Lambda_i = 0 \quad , i = 1 \dots NV \\ \bar{h} &= \sqrt{\bar{r} + \Gamma^2} + \bar{r} - \Gamma = 0 \end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned} \tilde{q} &:= \sqrt{\sum_{k=1}^{NV} q_k^2} \quad . \\ \Phi_\theta &= \tilde{q} - k \end{aligned}$$

Die in diesen Gleichungen enthaltenen Funktionen weisen überdies folgende Abhängigkeiten auf:

$$\begin{aligned} q_i &= \hat{q}_i(\boldsymbol{\varepsilon}, \theta_1 \dots \theta_{NV}, \Lambda_i, \Gamma) \\ \tilde{q} &= \hat{\tilde{q}}(q_1 \dots q_{NV}) \\ r_i &= \hat{r}_i(\theta_i) \\ \bar{r} &= \hat{\bar{r}}(\theta_1 \dots \theta_{NV}) \end{aligned}$$

Diese Gleichungen sind nun konsistent zu linearisieren. Für die diskretisierten Evolutionsgleichungen g_i ergibt sich demnach

$$dg_i = \frac{\partial g_i}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} : d\boldsymbol{\varepsilon} + \sum_{j=1}^{NV} \frac{\partial g_i}{\partial \theta_j} d\theta_j + \frac{\partial g_i}{\partial \Delta \lambda_\theta} d\Delta \lambda_\theta + \sum_{j=1}^{NV} \frac{\partial g_i}{\partial \Lambda_j} d\Lambda_j + \frac{\partial g_i}{\partial \Gamma} d\Gamma = 0 \quad (9.20)$$

mit

$$\begin{aligned} \frac{\partial g_i}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} &= -\Delta \lambda_\theta \frac{\partial q_i}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} \tilde{q}^{-1} + \Delta \lambda_\theta q_i \tilde{q}^{-3} \sum_{k=1}^{NV} q_k \frac{\partial q_k}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} \\ \frac{\partial g_i}{\partial \theta_j} &= \delta_{ij} - \Delta \lambda_\theta \frac{\partial q_i}{\partial \theta_j} \tilde{q}^{-1} + \Delta \lambda_\theta q_i \tilde{q}^{-3} \sum_{k=1}^{NV} q_k \frac{\partial q_k}{\partial \theta_j} \\ \frac{\partial g_i}{\partial \Delta \lambda_\theta} &= -q_i \tilde{q}^{-1} \\ \frac{\partial g_i}{\partial \Lambda_j} &= -\Delta \lambda_\theta \delta_{ij} \tilde{q}^{-1} + \Delta \lambda_\theta q_i \tilde{q}^{-3} q_j \\ \frac{\partial g_i}{\partial \Gamma} &= \Delta \lambda_\theta \tilde{q}^{-1} + \Delta \lambda_\theta q_i \tilde{q}^{-3} \sum_{k=1}^{NV} q_k \end{aligned}$$

Die Linearisierung der Konsistenzbedingung f ergibt

$$df = \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} : d\boldsymbol{\varepsilon} + \sum_{j=1}^{NV} \frac{\partial f}{\partial \theta_j} d\theta_j + \frac{\partial f}{\partial \Delta \lambda_\theta} d\Delta \lambda_\theta + \sum_{j=1}^{NV} \frac{\partial f}{\partial \Lambda_j} d\Lambda_j + \frac{\partial f}{\partial \Gamma} d\Gamma = 0 \quad (9.21)$$

mit

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} &= \Xi^\Phi \tilde{q}^{-1} \sum_{k=1}^{NV} q_k \frac{\partial q_k}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} \\ \frac{\partial f}{\partial \theta_j} &= \Xi^\Phi \tilde{q}^{-1} \sum_{k=1}^{NV} q_k \frac{\partial q_k}{\partial \theta_j} \\ \frac{\partial f}{\partial \Delta \lambda_\theta} &= \Xi^\lambda \\ \frac{\partial f}{\partial \Lambda_j} &= \Xi^\Phi \tilde{q}^{-1} q_j \\ \frac{\partial f}{\partial \Gamma} &= -\Xi^\Phi \tilde{q}^{-1} \sum_{k=1}^{NV} q_k \end{aligned}$$

und Ξ^Φ , Ξ^λ gemäß (7.41) und (7.43) auf S. 74. Schließlich bleiben noch die Linearisierungen der Gleichungen h_i und $\bar{h}$, welche zur Erhaltung der Restriktionen hinzugefügt wurden. Da diese unabhängig vom verwendeten Modell und Evolutionsgesetz sind, können die folgenden Herleitungen identisch für alle weiteren Tangentenoperatoren übernommen werden. Es ergibt sich

$$d\Lambda_i = \frac{\Xi_i^r}{\Xi_i^\Lambda} d\theta_i \quad (9.22)$$

$$d\Gamma = -\frac{\Xi^{\bar{r}}}{\Xi^\Gamma} \sum_{k=1}^{NV} d\theta_k \quad (9.23)$$

mit Ξ_i^r , $\Xi^{\bar{r}}$, Ξ_i^Λ und Ξ^Γ gemäß (7.45), (7.46), (7.47) und (7.48) auf S. 74. Eliminiert man nun $d\Delta\lambda_\theta$, $d\Lambda_j$ und $d\Gamma$ in (9.20) mittels (9.21), (9.22) sowie (9.23), so lässt sich der Zusammenhang der Inkremente $d\epsilon$ und $d\theta_j$ durch

$$\mathbf{A}^{NV \times NV} \cdot d\boldsymbol{\theta}^{NV \times 1} = \mathbf{B}^{NV \times 3 \times 3} : d\boldsymbol{\epsilon}^{3 \times 3} \quad (9.24)$$

mit

$$\begin{aligned} A_{ij} = & \frac{1}{\tilde{q}^3 \Xi^\lambda \Xi^\Gamma \Xi_j^\Lambda} \left\{ \Xi_j^r \Xi^\Gamma [q_i q_j (\Delta\lambda_\theta \Xi^\lambda + \tilde{q} \Xi^\Phi) - \tilde{q}^2 \Delta\lambda_\theta \Xi^\lambda \delta_{ij}] \right. \\ & + \Xi_j^\Lambda \left[q_i \sum_{k=1}^{NV} \left\{ q_k \left[\Xi^{\bar{r}} (-\Delta\lambda_\theta \Xi^\lambda + \tilde{q} \Xi^\Phi) + \Xi^\Gamma (\Delta\lambda_\theta \Xi^\lambda + \tilde{q} \Xi^\Phi) \frac{\partial q_k}{\partial \theta_j} \right] \right\} \right. \\ & \left. \left. + \tilde{q}^2 \Xi^\lambda \left[-\Delta\lambda_\theta \left(\Xi^{\bar{r}} + \Xi^\Gamma \frac{\partial q_i}{\partial \theta_j} \right) + \tilde{q} \Xi^\Gamma \delta_{ij} \right] \right] \right\} \end{aligned}$$

und

$$B_{ijk} = -\frac{1}{\tilde{q}^3 \Xi^\lambda} \left[-\tilde{q}^2 \Delta\lambda_\theta \Xi^\lambda \frac{\partial q_i}{\partial \epsilon_{jk}} + q_i (\Delta\lambda_\theta \Xi^\lambda + \tilde{q} \Xi^\Phi) \sum_{k=1}^{NV} \left\{ q_k \frac{\partial q_k}{\partial \epsilon_{jk}} \right\} \right]$$

angeben, wobei die hochgestellten Terme in (9.24) die Dimensionen der einzelnen Operatoren darstellen. Die Lösung des Gleichungssystems (9.24) bezüglich der Inkremente $d\theta_i$ lässt dann über (9.19) die Berechnung des lokalen, algorithmischen Tangentenoperators in jedem Gaußpunkt zu.

Evolutionstyp Tresca

Im Gegensatz zum Vorgehen in Abschnitt 9.4.2 beinhaltet das Evolutionsgesetz vom Tresca–Typ NV Konsistenzbedingungen der Art

$$f_i = \sqrt{\Phi_i^2 + \Delta\lambda_i^2} + \Phi_i - \Delta\lambda_i = 0 \quad (9.25)$$

mit $\Phi_i = |q_i| - k$.

Auf Basis der diskretisierten Evolutionsgleichungen aus dem Gleichungssystem (7.51) auf S. 76

$$g_i = \theta_i - \theta_i^{n-1} - \Delta \lambda_i \operatorname{sign}(q_i) \quad (9.26)$$

lassen sich

$$\begin{aligned} \frac{\partial g_i}{\partial \epsilon} &= 0 \\ \frac{\partial g_i}{\partial \theta_j} &= \delta_{ij} \\ \frac{\partial g_i}{\partial \Delta \lambda_j} &= \delta_{ij} \operatorname{sign}(q_i) \\ \frac{\partial g_i}{\partial \Delta \Lambda_j} &= 0 \\ \frac{\partial g_i}{\partial \Gamma} &= 0 \end{aligned}$$

sowie

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_i}{\partial \epsilon} &= \Xi_i^\Phi \operatorname{sign}(q_i) \frac{\partial q_i}{\partial \epsilon} \\ \frac{\partial f_i}{\partial \theta_j} &= \Xi_i^\Phi \operatorname{sign}(q_i) \frac{\partial q_i}{\partial \theta_j} \\ \frac{\partial f_i}{\partial \Delta \lambda_j} &= \Xi_j^\lambda \delta_{ij} \\ \frac{\partial f_i}{\partial \Lambda_j} &= \Xi_i^\Phi \operatorname{sign}(q_i) \delta_{ij} \\ \frac{\partial f_i}{\partial \Gamma} &= -\Xi_i^\Phi \operatorname{sign}(q_i) \end{aligned}$$

und mit Berücksichtigung von (9.22), (9.23) schließlich analog zu (9.24) die Operatoren

$$A_{ij} = \delta_{ij} - \frac{\Xi_i^\Phi}{\Xi^\Gamma \Xi_i^\lambda \Xi_i^\Lambda} \left[\Xi_i^\Lambda \left(\Xi^{\bar{r}} + \Xi^\Gamma \frac{\partial q_i}{\partial \theta_j} \right) + \Xi^\Gamma \Xi_i^r \delta_{ij} \right]$$

und

$$B_{ijk} = \frac{\Xi_i^\Phi}{\Xi_i^\lambda} \frac{\partial q_i}{\partial \epsilon_{jk}}$$

herleiten.

9.4.3. Grundlegende Beispielrechnungen

Konvergenzstudie bezüglich Netzfeinheit

Im Sinne eines effizienten, skalenübergreifenden Modells auch hinsichtlich einer noch möglichen Erweiterung gemäß der FE²-Methode nach Feyel and Chaboche (2000) und der damit

verbundenen Verknüpfung zusätzlicher Materialebenen ist es von entscheidender Bedeutung, wie fein das RVE der Mesoskala diskretisiert werden sollte. Um eine Einschätzung darüber zu erlangen, wurde ein RVE mit kreisrunder, zentrischer Inklusion mit einem Volumenanteil von 10 % analysiert (siehe Abb. 9.3). Der E–Modul für Matrixmaterial und Inklusion wurden zu $E_{Mat} = 100$ GPa bzw. $E_{Ink} = 10$ GPa sowie eine für das gesamte RVE identische Querkontraktionszahl $\nu = 0.33$ gewählt. Die makroskopische Dehnung wurde zu

$$\bar{\epsilon} = \begin{pmatrix} 0.01 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

vorgegeben sowie Kapitel 10 vorausgreifend die Eigendehnung der Inklusion im spannungslosen Zustand zu

$$\epsilon^p = \begin{pmatrix} -0.005 & 0 & 0 \\ 0 & -0.005 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

bei angenommenem ebenen Spannungszustand. Die Abbildungen 9.4 und 9.5, in denen in einer halblogarithmischen Darstellung der Zusammenhang zwischen der Elementanzahl des FE–Netzes NEL und der Dehnungskomponente ϵ_{11}^* innerhalb der Inklusion bzw. der effektiven Spannung $\bar{\sigma}_{11}$ des RVEs gezeigt wird, verdeutlichen, dass die effektiven Größen mit feiner werdender Diskretisierung einem Grenzwert entgegen streben, im Fall der Spannung konkret $\bar{\sigma}_{11} = 0.926$ GPa. Diesen Ergebnissen wird in Abb. 9.6 die benötigte Rechenzeit in normierter Form gegenüber gestellt, wobei die jeweilige Rechenzeit durch die maximale bei der Analyse des feinsten Netzes dividiert wurde. Der augenscheinlich lineare Zusammenhang zwischen Rechenzeit und Elementanzahl ist trügerisch, da in Abb. 9.6 beide Achsen im logarithmischen Maßstab angezeigt sind. Tatsächlich steigt die Rechenzeit demnach stark überproportional an. Legt man den Wert $\bar{\sigma}'_{11} = 0.926$ GPa als exakt zu Grunde, so zeigt Abb. 9.7, dass für das Erreichen einer relativen Abweichung $\Delta\bar{\sigma}_{11} = (\bar{\sigma}_{11} - \bar{\sigma}'_{11}) / \bar{\sigma}'_{11}$ von 0.01 etwas mehr als 200, von 0.001 ca. 900 Elemente bei der Vernetzung benötigt werden.

Analysen verschiedener Volumenfraktionen, Vergleich mit klassischen Methoden

Für eine mit Abb. 9.3 vergleichbare Mesostruktur wurden für die Vorgaben $E_{Mat} = 10$ GPa, $E_{Ink} = 100$ GPa, $\nu_{Mat} = \nu_{Ink} = 0.33$ sowie einem vorgegebenen Dehnungszustand von

$$\epsilon = \begin{pmatrix} 0.01 & 0.005 & 0 \\ 0.005 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

und keinen vorhandenen Eigendehnungen mehrere Berechnungen in Abhängigkeit unterschiedlicher Volumenanteile der Inklusion durchgeführt. Über die Zusammenhänge

$$\begin{aligned} \bar{\sigma}_{11} &= \frac{\bar{E}}{1 - \bar{\nu}^2} (\bar{\epsilon}_{11} + \nu \bar{\epsilon}_{22}) \\ \bar{\sigma}_{22} &= \frac{\bar{E}}{1 - \bar{\nu}^2} (\bar{\epsilon}_{22} + \nu \bar{\epsilon}_{11}) \end{aligned} \tag{9.27}$$

wurde anschließend in erster Linie der effektive E-Modul $\bar{E}$ der Mesoskale bestimmt und mit den Werten, die aus den Herleitungen der hier vorgestellten, klassischen Methoden (siehe Abschnitt 9.3) folgen, verglichen, was in Abb. 9.8 anhand des Verhältnisses von effektivem E-Modul zu dem des Matrixmaterials visualisiert ist. Es ist zu erkennen, dass die MFEM vergleichbare Resultate zu denen der unteren Hashin–Shtrikman–Schranke (HS low) sowie der Lösung nach Eshelby aufweist, wobei die Werte nach Eshelby für größere Volumenfraktionen immer weiter abweichen. Generell ist zu bekräftigen, dass speziell die Lösung nach Eshelby für die hier aufgeführten Volumenanteile genau genommen nicht aussagekräftig ist, da eine grundlegende Voraussetzung die infinitesimale Ausdehnung der Inklusion im Vergleich zum RVE ist.

Geometrie–bedingte Anisotropie

Im Rahmen der Analysen der effektiven Materialparameter in Abhängigkeit des Volumenanteils der Inklusion wurden Diskrepanzen bezüglich der Isotropie des RVEs deutlich. Konkret zeigte sich, dass der aus den durch Lösung von (9.27) berechneten Größen $\bar{E}, \bar{\nu}$ gemäß

$$G' = \frac{\bar{E}}{2(1 + \bar{\nu})} \quad (9.28)$$

ermittelte Schubmodul nur bedingt mit dem durch Auflösen von

$$\bar{\sigma}_{12} = 2G\bar{\varepsilon}_{12} \quad (9.29)$$

erhaltenen in akzeptabler Näherung übereinstimmt. Die Abbildungen 9.9 und 9.10 bestätigen dies auch anhand der relativen Abweichung $\Delta G = (G - G')/G'$, welche in logarithmischem Maßstab aufgetragen ist.

Dieses Phänomen lässt sich mit Hilfe der am Rand des RVEs wirksamen Knotenkräfte verdeutlichen, wobei diese Resultate für ähnliche Vorgaben wie zuvor erzielt wurden, lediglich die Belastung als reiner einaxialer Zug mit

$$\bar{\varepsilon} = \begin{pmatrix} 0.01 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (9.30)$$

vorlag. Bei einem kleinen Einschlussteilchen mit einem Volumenanteil von 0.5 % lassen die Knotenkräfte in Abb. 9.11 deutlich erkennen, dass die Inklusion und die damit einhergehenden Spannungs– bzw. Dehnungsfelder, welche in den folgenden Kapiteln noch detailliert behandelt werden, sich nicht auf den Rand des RVEs auswirken, da die Knotenkräfte konstant in Richtung und Größe auf dem jeweiligen Rand des RVEs sind. Die in Abb. 9.12 sowie 9.13 dargestellten Kräfte, die sich bei vorgegebenen Volumenfraktionen der Inklusion von 10 % bzw. 50 % ergeben, zeigen eine zunehmend signifikante Beeinträchtigung des RVE–Randes. In diesem Sinne kann man bei größeren Einschlüssen von einer Interaktion der einzelnen Inhomogenitäten der periodisch fortgesetzten RVE ausgehen, was die zu Stande kommende Anisotropie erklärt.

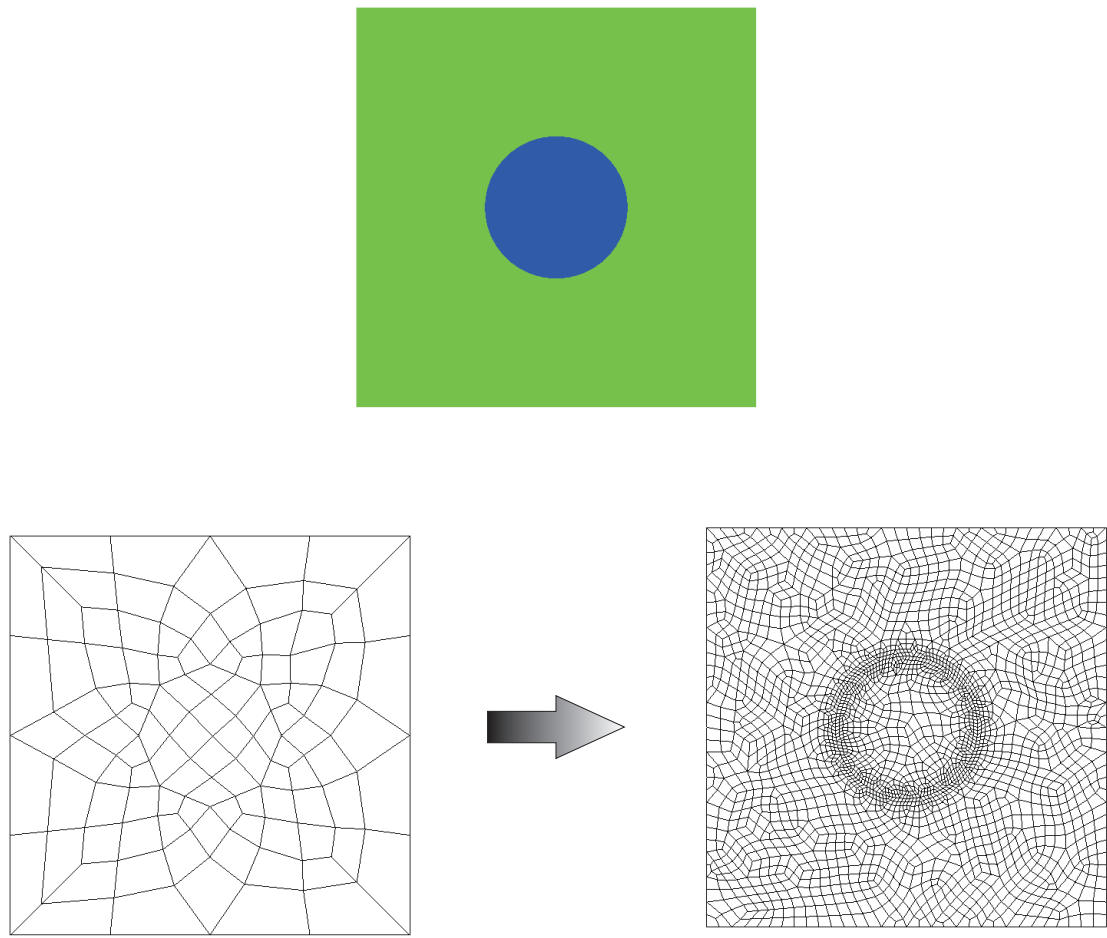


Abbildung 9.3.: Konvergenztest eines RVEs mit kreisförmiger Inklusion hinsichtlich der Netzfeinheit

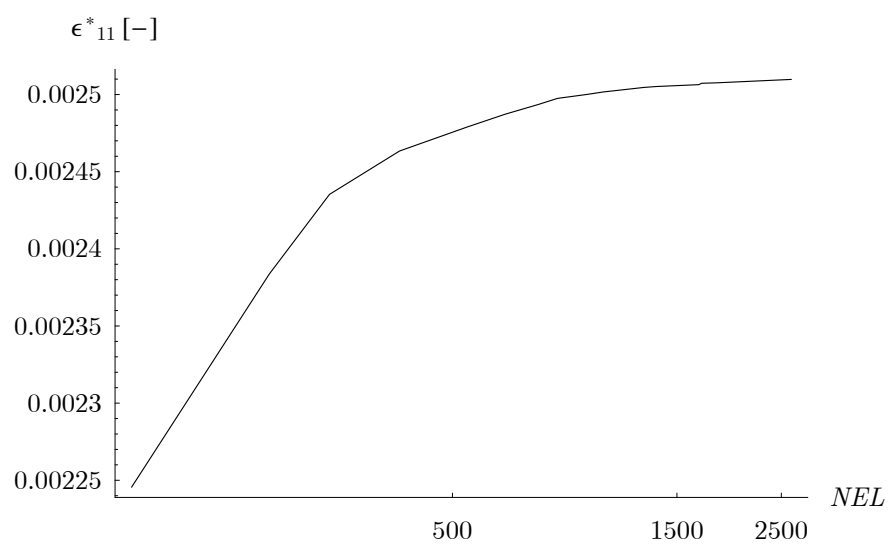


Abbildung 9.4.: Konvergenztest: ϵ_{11}^* innerhalb der Inklusion in Abhängigkeit der Elementanzahl NEL

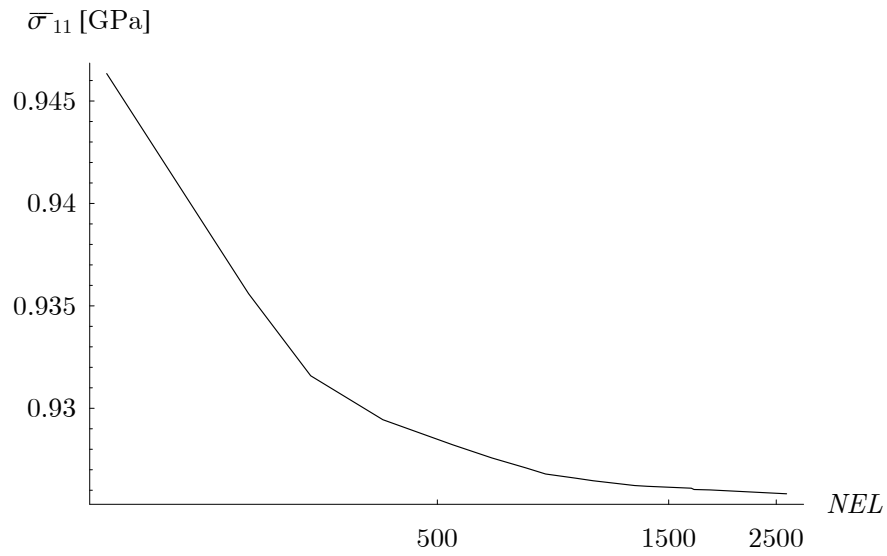


Abbildung 9.5.: Konvergenztest: $\bar{\sigma}_{11}$ des RVEs in Abhängigkeit der Elementanzahl NEL

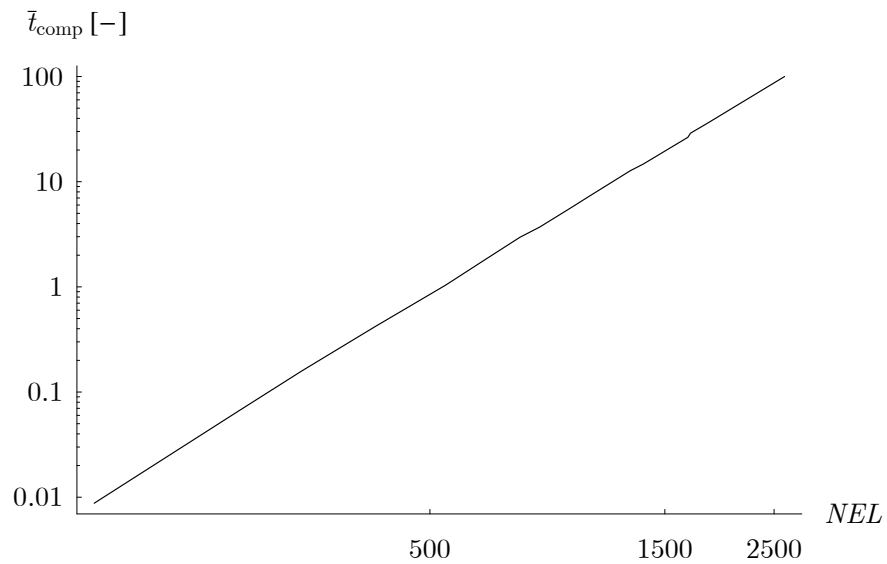


Abbildung 9.6.: Konvergenztest: relative Rechenzeit $\bar{t}_{comp}$ in Abhängigkeit der Elementanzahl NEL

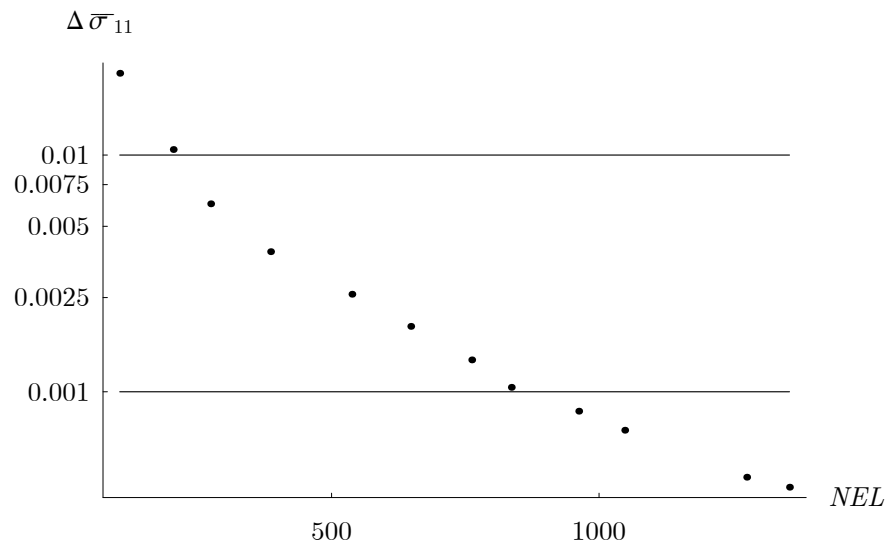


Abbildung 9.7.: Konvergenztest: relative Abweichung der effektiven Spannungen $\Delta \bar{\sigma}_{11}$ in Abhängigkeit der Elementanzahl NEL

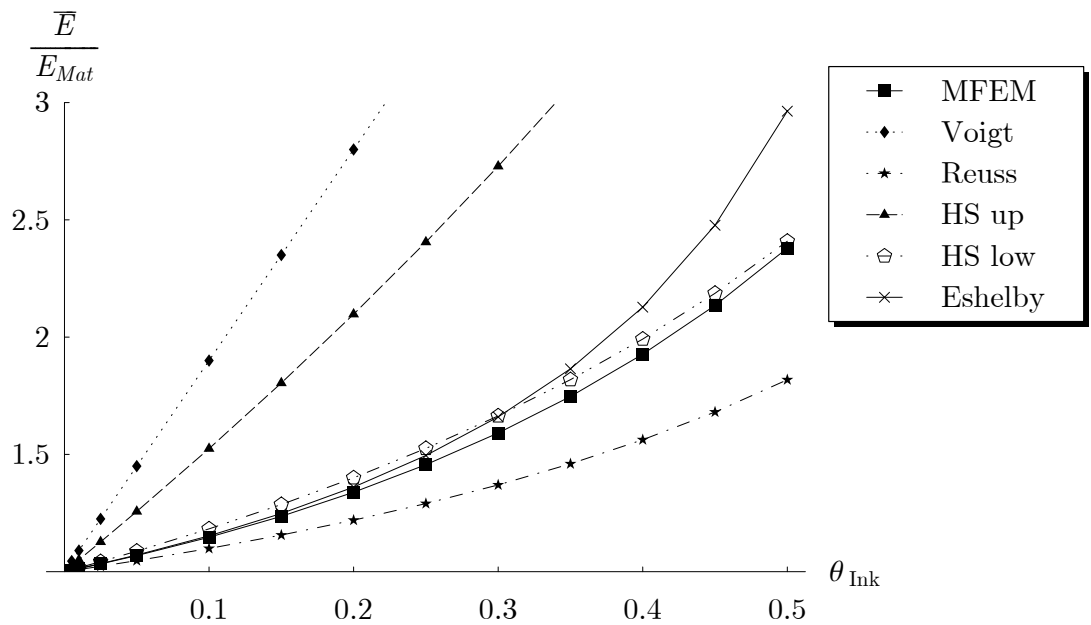


Abbildung 9.8.: Vergleich des resultierenden effektiven E-Moduls für verschiedene Volumenanteile θ_{Ink} der Inklusion

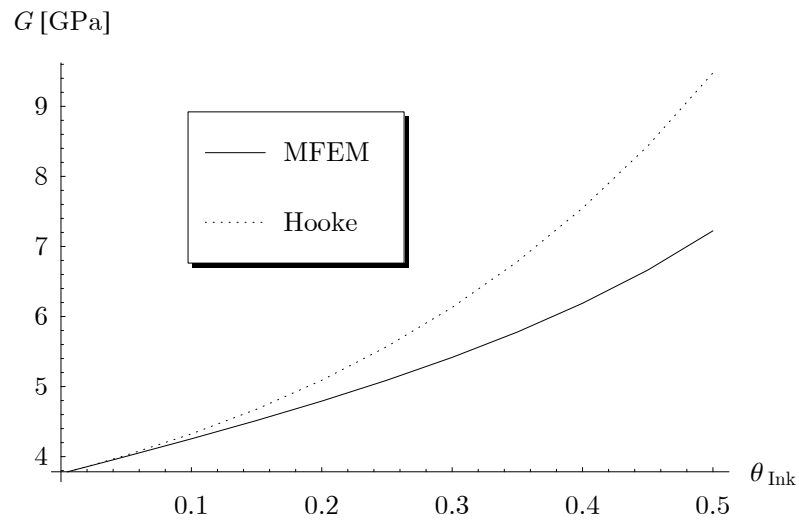


Abbildung 9.9.: Vergleich der Schubmoduli in Abhängigkeit des Volumenanteils der Inklusion

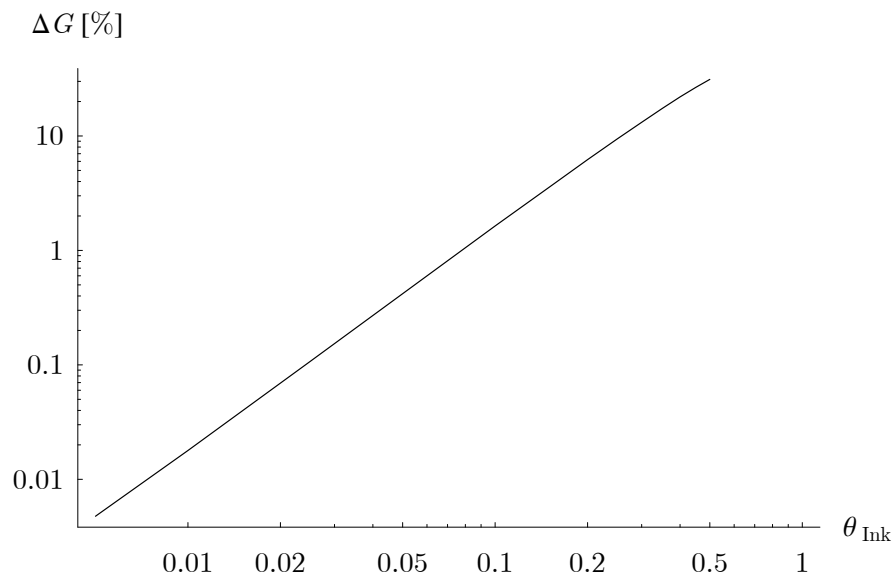


Abbildung 9.10.: Relative Abweichung der Schubmoduli in Abhängigkeit des Volumenanteils der Inklusion

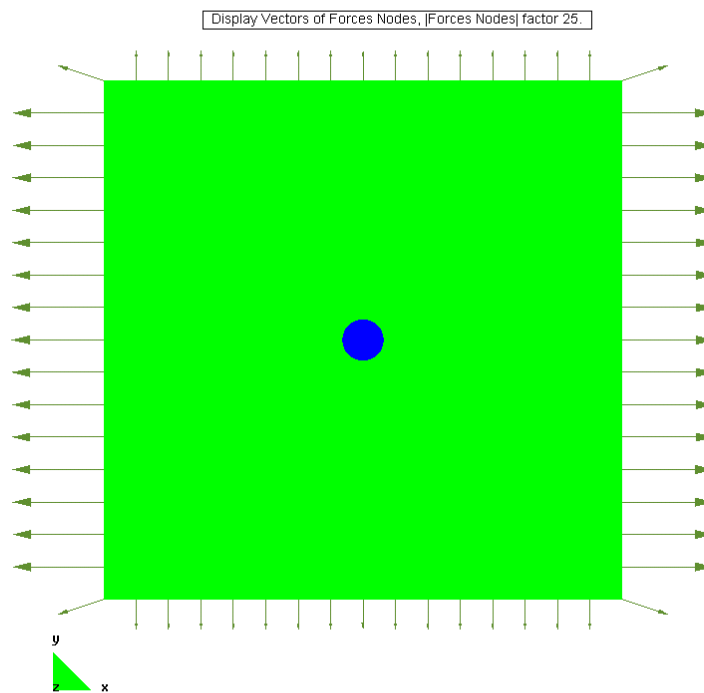


Abbildung 9.11.: Knotenkräfte infolge einaxialen Zuges: Volumenfraktion Inklusion 0.5 %

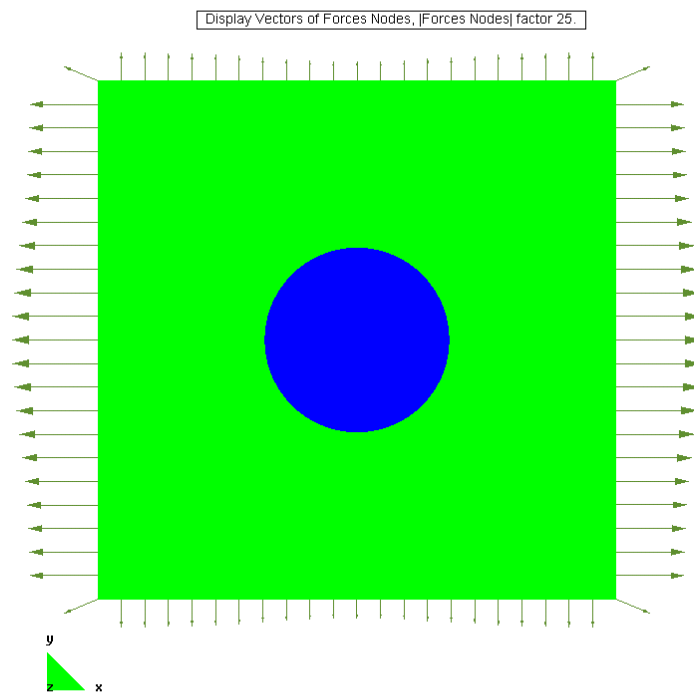


Abbildung 9.12.: Knotenkräfte infolge einaxialen Zuges: Volumenfraktion Inklusion 10 %

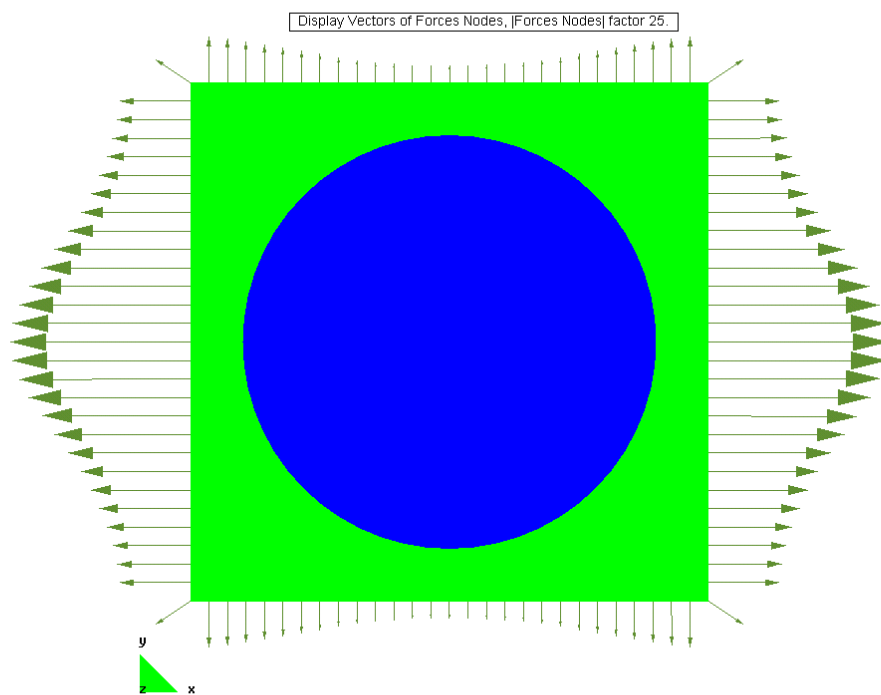


Abbildung 9.13.: Knotenkräfte infolge einaxialen Zuges: Volumenfraktion Inklusion 50 %

10. Modellierung: Ausscheidungen

10.1. Grundlagen der Ni_4Ti_3 -Ausscheidungen

Die Analyse von Ausscheidungen innerhalb des Systems NiTi und deren Auswirkungen auf die Materialeigenschaften ist auf dem Gebiet der Materialwissenschaften ein aktuelles Forschungsthema. Daher soll in diesem Abschnitt zunächst auf tiefgreifendere materialwissenschaftliche Erkenntnisse eingegangen werden. Generell sei dazu vorgreifend angemerkt, dass die hier aufgeführten Informationen zu diesem Thema auf den Arbeiten Tadaki et al. (1986), Bataillard et al. (1998), Khalil-Allafi et al. (2002), Somsen (2002), Dlouhý et al. (2004), Tirry and Schryvers (2005), Michutta and Somsen (2006) sowie Tirry (2007) beruhen. Für eine detailliertere Behandlung dieses Fachgebietes, insbesondere unter materialwissenschaftlichen Gesichtspunkten, sei zudem auf die in den genannten Arbeiten referenzierten Werke verwiesen.

NiTi in einer nahezu gleichen Atom-Konzentration ist bekannt als Formgedächtnis-Legierung mit den optimalsten Materialeigenschaften hinsichtlich der technischen Nutzung. Dabei weist $\text{Ni}_{50}\text{Ti}_{50}$ eine stabile, homogene Austenit-Kristallstruktur auf. Erwiesenermaßen ist die bereits in Kapitel 3 beschriebene Martensit-Starttemperatur M_S abhängig vom Ni-Gehalt der Legierung (siehe bspw. Khalil-Allafi et al. (2002)). Ein Ni-Gehalt von 50% bringt dabei mit ca. 325 K allerdings eine zu hohe M_S -Temperatur für die meisten technischen Anwendungen mit sich.

Die Festlegung der Zusammensetzung einer Formgedächtnislegierung beim Fertigungsprozess stellt sich dabei auch auf Grund der Toleranz von ca. $\pm 0.1\%$ als durchaus schwierig heraus. Daher hat sich die Technik des sogenannten *Anlassens* (*Ageing*) etabliert, die es ermöglicht, den Ni-Gehalt nachträglich auf die jeweiligen Bedürfnisse anzupassen. Dazu wird die Legierung aus der Schmelze heraus abgeschreckt und anschließend für eine gewisse Zeit (*Anlassdauer*) einer bestimmten Temperatur (*Anlasstemperatur*) ausgesetzt. Typische Werte dieser beiden Parameter sind bspw. 36000 s bei 773 K, wobei laut Tirry (2007) die Anlasstemperatur der hauptsächlich maßgebende Parameter ist.

Während des Anlass-Prozesses scheiden sich je nach Wahl der oben genannten Parameter unterschiedliche Substanzen aus (siehe Tadaki et al. (1986)), wobei Ni_4Ti_3 die relevanteste darstellt. Der Übergang von einer Austenit-Phase zu einer Ni_4Ti_3 -Ausscheidung erfolgt diffusionsgesteuert durch Austausch eines Ti- durch ein Ni-Atom und kann z.B. gemäß Tadaki et al. (1986), Somsen (2002) oder Tirry (2007) wahlweise auf Basis einer rhomboedrischen oder hexagonalen Kristallstruktur erklärt werden. Diese linsenförmigen Teilchen mit Durchmessern zwischen 70 und 900 nm, Dicken zwischen 6 und 70 nm sowie Volumenfraktionen von 2.5 % bis 9 % bilden sich gleichverteilt auf kristallografischen Ebenen des Typs $\langle 111 \rangle$ während eines spannungsfreien Anlassens. Im Vergleich dazu zeigen Michutta and Somsen (2006), dass sich bei anliegender Kompression die Ausscheidungen auf einer präferierten $\langle 111 \rangle$ -Ebene bilden.

Wie bereits erwähnt, lässt sich die rhomboedrische Kristallstruktur der Ni_4Ti_3 -Ausscheidungen prinzipiell aus 27 kubisch raumzentrierten Einheitszellen der Austenit-Struktur unter Substitution des zentralen Atoms ableiten. Tadaki et al. (1986) stellten jedoch fest, dass die Kristallparameter nicht vollkommen damit übereinstimmen und das Gitter innerhalb der Ausscheidungen komprimiert wird. Dies führt zu einem auch experimentell nachgewiesenen Eigendehnungs- bzw. Eigenspannungsfeld. Michutta and Somsen (2006) leiten daraus auch die vorhandene Präferenz für die Bildung der sogenannten *R-Phase* ab, einer zusätzlichen martensitischen Variante, die bei vorhandenen Ni_4Ti_3 -Ausscheidungen praktisch immer präsent ist, allerdings im Rahmen der vorliegenden Arbeit nicht berücksichtigt wird.

10.2. Numerische Analysen

Im Rahmen der zweidimensionalen numerischen Analysen werden die Ausscheidungs-Teilchen geometrisch als Ellipsen bzw. Kreise diskretisiert (siehe Abb. 10.1). Die Verwendung der in das RVE eingebetteten Ellipsen könnte der Simulation von Belastungen in $\langle 10\bar{1} \rangle$ -Ebenen der Kristallstruktur dienen, für die Kreise stellt die betrachtete Ebene der FE-Berechnung die $\langle 111 \rangle$ -Kristallebene dar. Die Ausscheidungen werden jeweils zentrisch innerhalb eines quadratischen RVEs platziert und anschließend gemäß der FEM vernetzt, wobei die Knoten auf dem Rand der Ellipse respektive Kreise derart bestimmt werden, dass die zwischen benachbarten Punkten vorhandene Bogenlänge jeweils identisch ist. Die elastischen Konstanten der als isotrop angenommenen Ausscheidung werden mangels exakter Informationen äquivalent zu denen des Martensits gesetzt. Alle Materialparameter wurden äquivalent zu den in (8.2) auf S. 81 angegebenen gewählt. Die vorgeschriebene Temperatur beträgt in jedem der Fälle 338 K sowie $k_\theta = 0.01 \text{ GN}/(\text{m}^2 \text{ s})$. Die Eigendehnung der Ausscheidung wird für alle Analysen einheitlich gemäß Tirry (2007) zu

$$\epsilon^p = \begin{pmatrix} -0.005 & 0 & 0 \\ 0 & -0.005 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (10.1)$$

gewählt, ebenso, falls nicht explizit anders erwähnt, die Volumenfraktion der Ausscheidung zu 10 %, der Drehwinkel von Ellipsen zu 45° sowie für das mikromechanische Modell der Evolutionstyp Tresca unter Verwendung eines kubisch-tetragonal transformierenden Materials.

Grundlegende Ergebnisse

Zur Illustration der reinen Auswirkung des Eigendehnungszustandes der Inklusion sind im Folgenden die Abb. 10.2 bis 10.4 aufgeführt. Die Darstellung der ungeglätteten, elementweise extrapolierten Felder soll bekräftigen, dass der Dehnungszustand der Inklusion homogen ist, was mit den analytischen Herleitungen von Eshelby (1957) übereinstimmt.

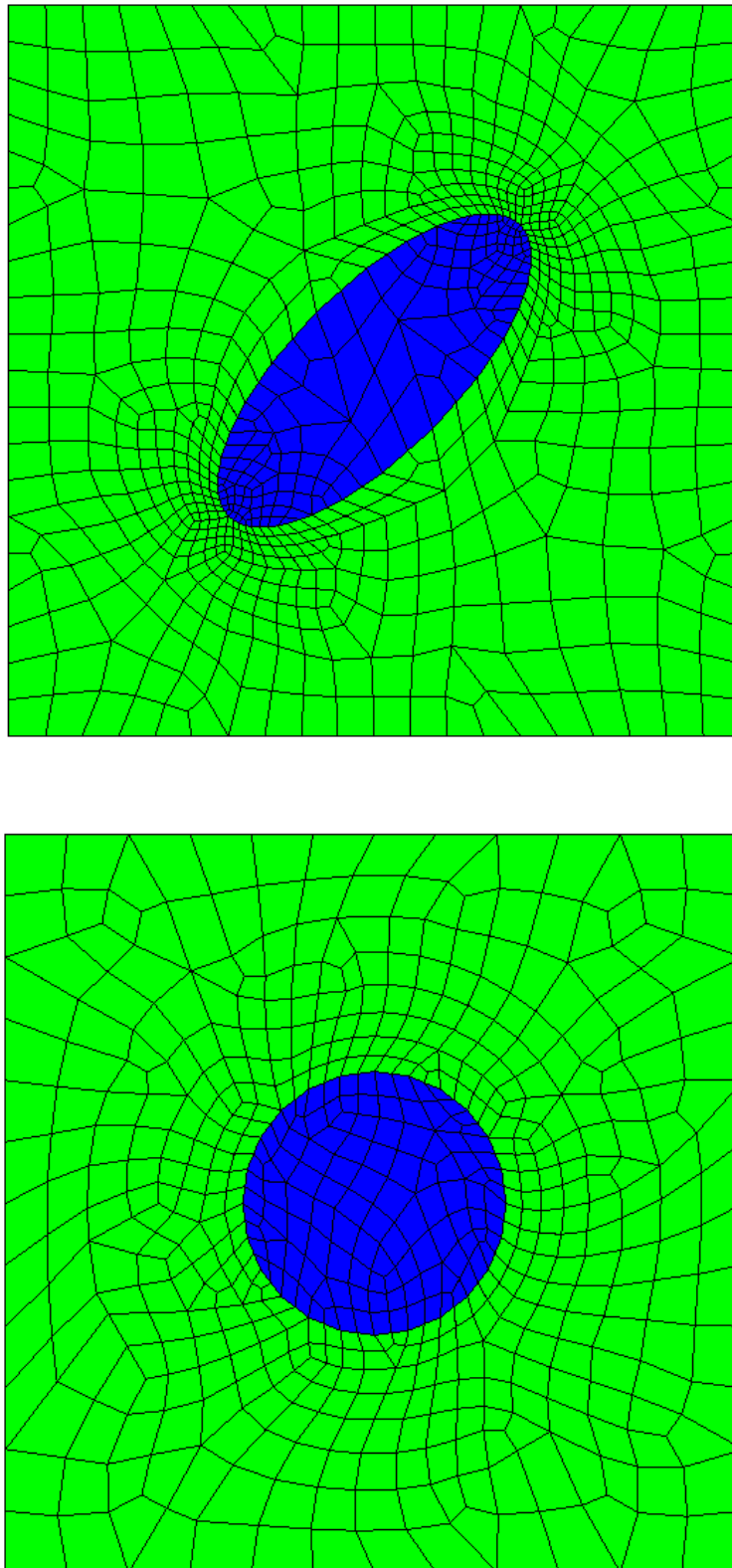


Abbildung 10.1.: Exemplarische FE-Diskretisierung einer FGL-Matrix mit ellipsen- bzw. kreisförmiger Inklusion (Ni_4Ti_3 -Ausscheidung)

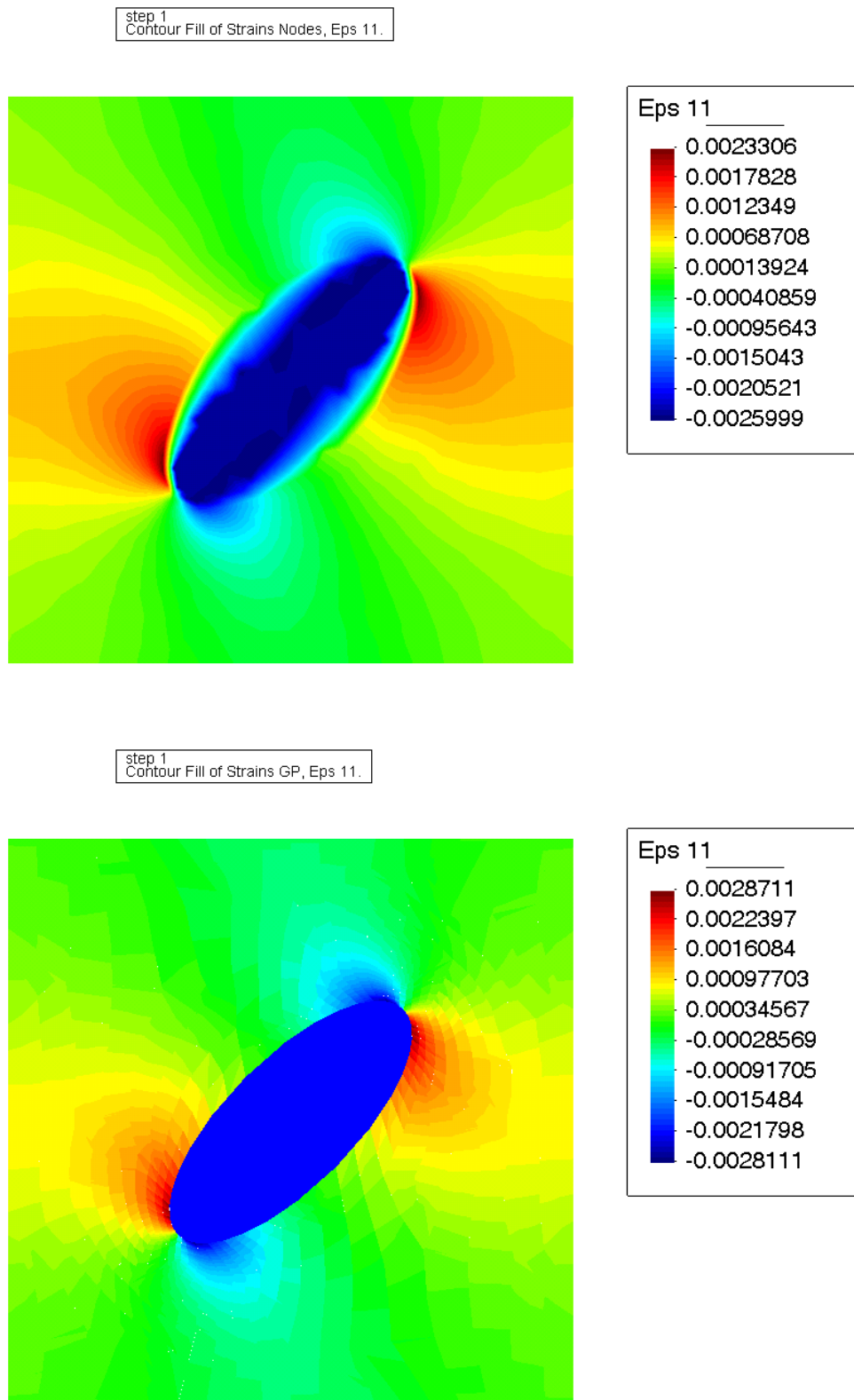


Abbildung 10.2.: Auswirkung des Eigendehnungszustands der Inklusion auf die Verteilung von ε_{11} innerhalb des RVE: geglättete Knotenwerte sowie elementweise Extrapolation

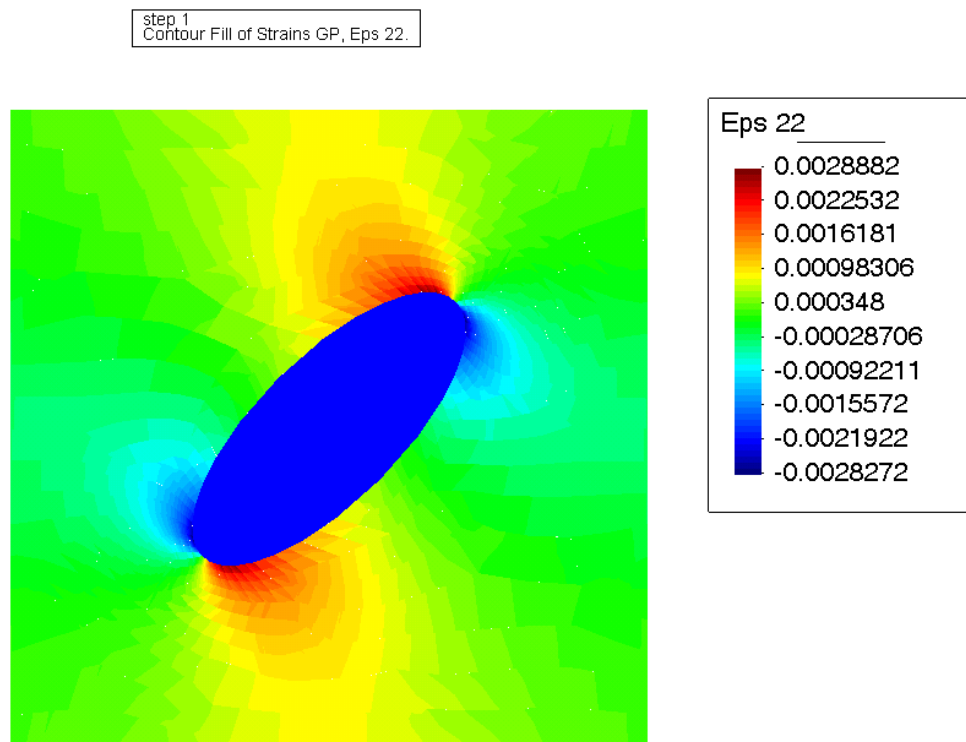
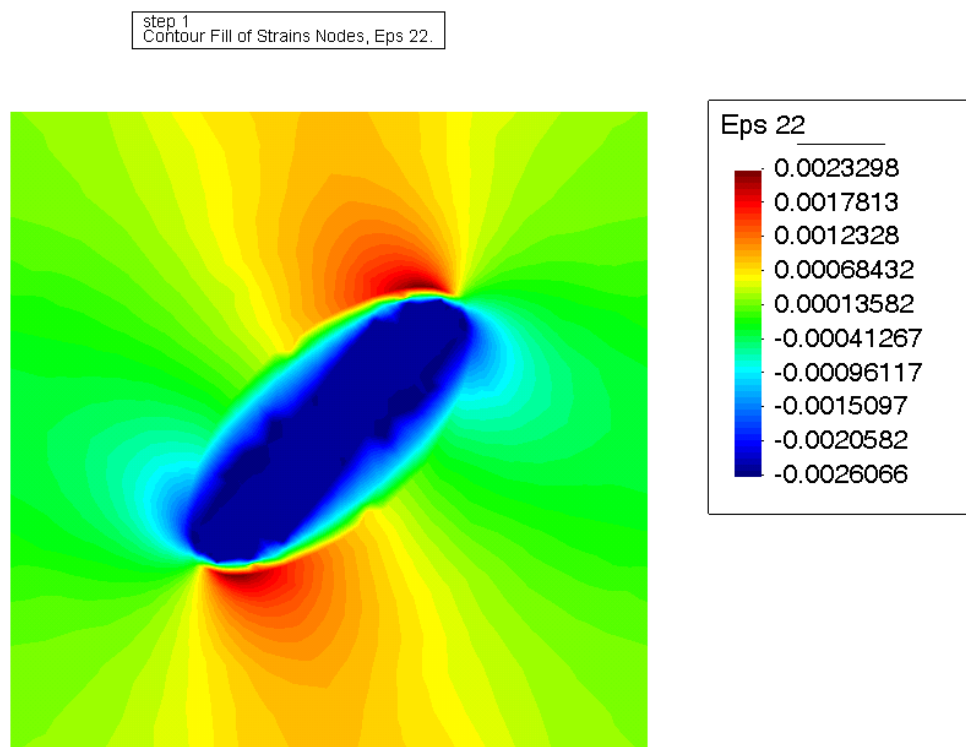


Abbildung 10.3.: Auswirkung des Eigendehnungszustands der Inklusion auf die Verteilung von ε_{22} innerhalb des RVE: geglättete Knotenwerte sowie elementweise Extrapolation

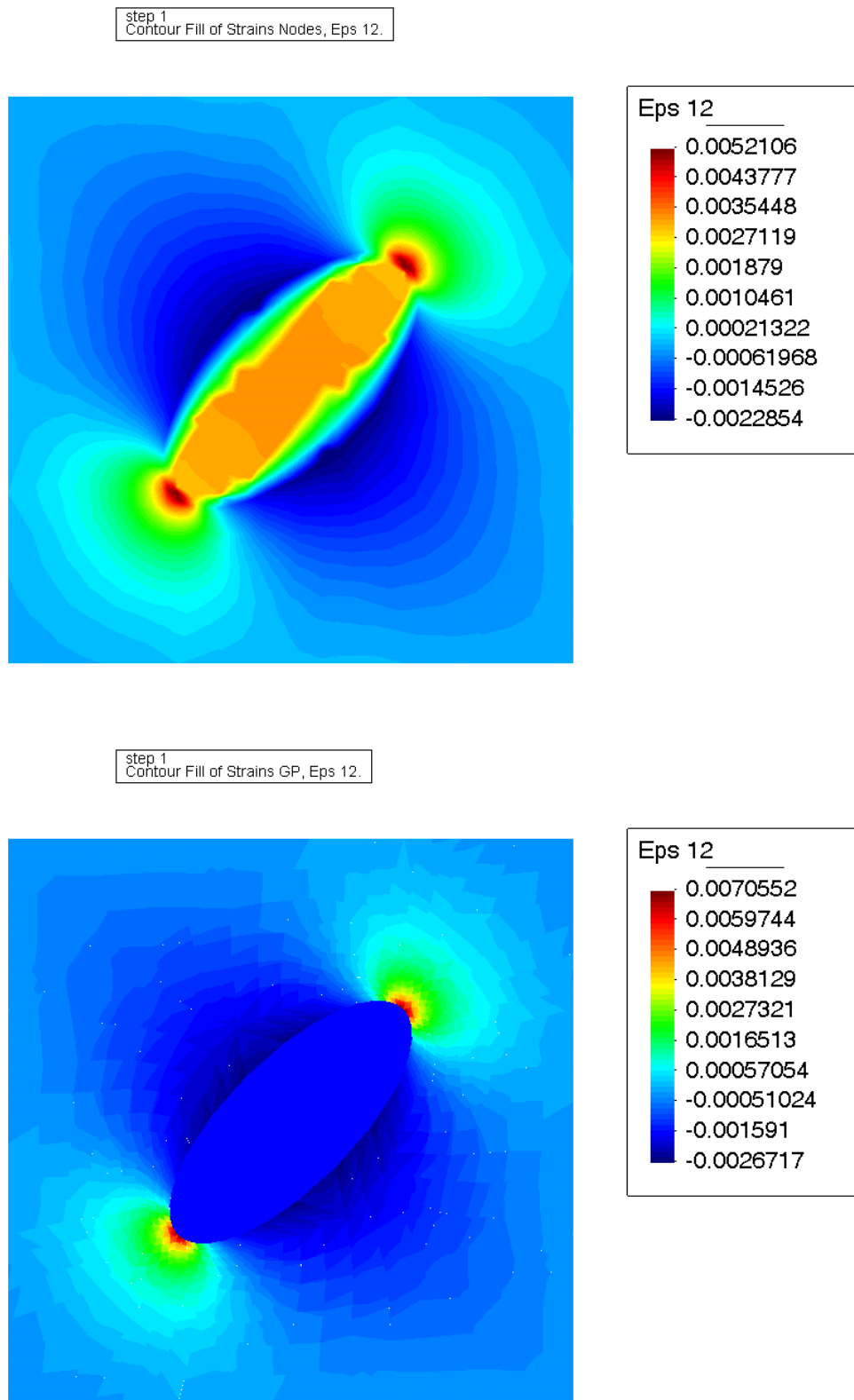


Abbildung 10.4.: Auswirkung des Eigendehnungszustands der Inklusion auf die Verteilung von ε_{12} innerhalb des RVE: geglättete Knotenwerte sowie elementweise Extrapolation

Einaxialer Zug, kreisförmige Ausscheidung

Für vorgeschriebene makroskopische Dehnungszustände von

$$\varepsilon = \kappa(t) \begin{pmatrix} 0.055 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (10.2)$$

mit $\kappa(t) = \sin(2\pi t)$ und $0 \leq t \leq 1$ wurde das effektive Verhalten des mesoskopischen RVEs untersucht und diesbezüglich die Abbildungen 10.5 bis 10.7 erstellt. Die hier enthaltenen und mit Kleinbuchstaben markierten Stellen weisen dabei auf besondere Konstellationen innerhalb des RVEs hin, welche hinsichtlich der Verteilung von Martensit-Variante 1 (im Übrigen die einzige aktive Martensitvariante) in den Abb. 10.8 bis 10.18 visualisiert sind, wobei die Verschiebungsfuktuationen jeweils mit dem Faktor 25 skaliert wurden.

Im Vergleich zu den in Abschnitt 8 dargelegten mikroskopischen Materialantworten weist die Beziehung zwischen vorgegebener Belastung und resultierender, effektiver Spannung $\bar{\sigma}_{11}$ grundlegend sanfte Übergänge zu Beginn und zum Abschluss der Phasentransformationen auf. Eine signifikante Änderung der Transformationsspannung bzw. dem Belastungszustand bei einsetzender Phasentransformation tritt allerdings in Folge der vorhandenen Ausscheidung nicht in Erscheinung.

Die Transformation in Martensit beginnt, wie zu erwarten ist, an den oberen und unteren Scheitelpunkten der auf Grund elastischer Deformationen zu einer Ellipse verformten Ausscheidung (Zustand a). Im Anfangsstadium der Phasenübergänge breitet sich eine lokale Front senkrecht zur „Belastungsrichtung“ zu den Rändern des RVEs hin aus (Zustand b). Im mikromechanischen Sinn kann man dabei gestützt auf Abb. 10.19, in der die innerhalb jeden Elements extrapolierten Spannungsfelder sowie die einzelnen Elemente dargestellt sind, von einer Art *Lokalisierung* sprechen, da die Ausdehnung der Martensit-Zone exakt eine Elementreihe einnimmt und daher netzabhängig zu sein scheint.

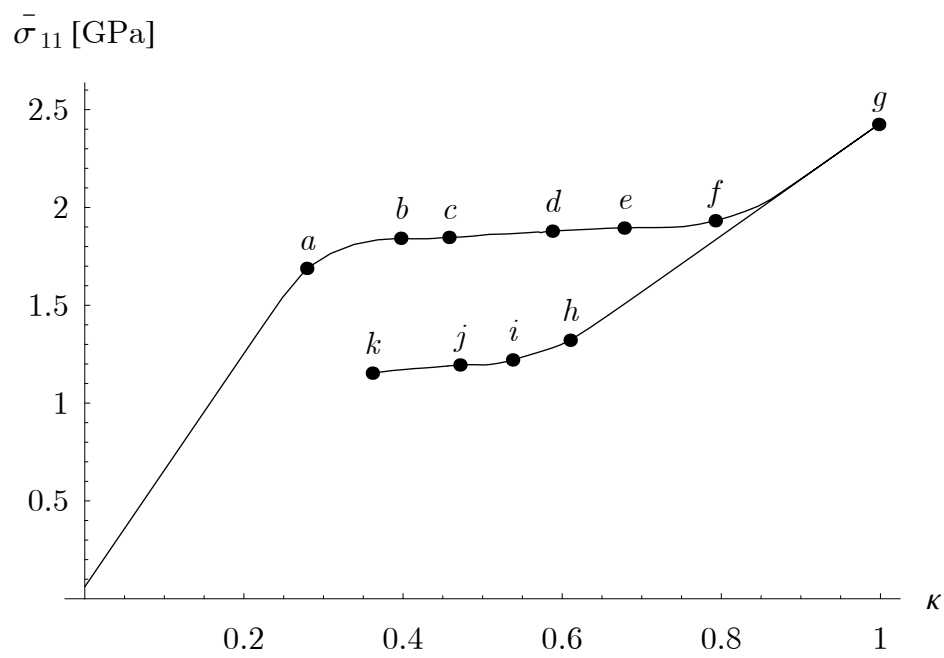
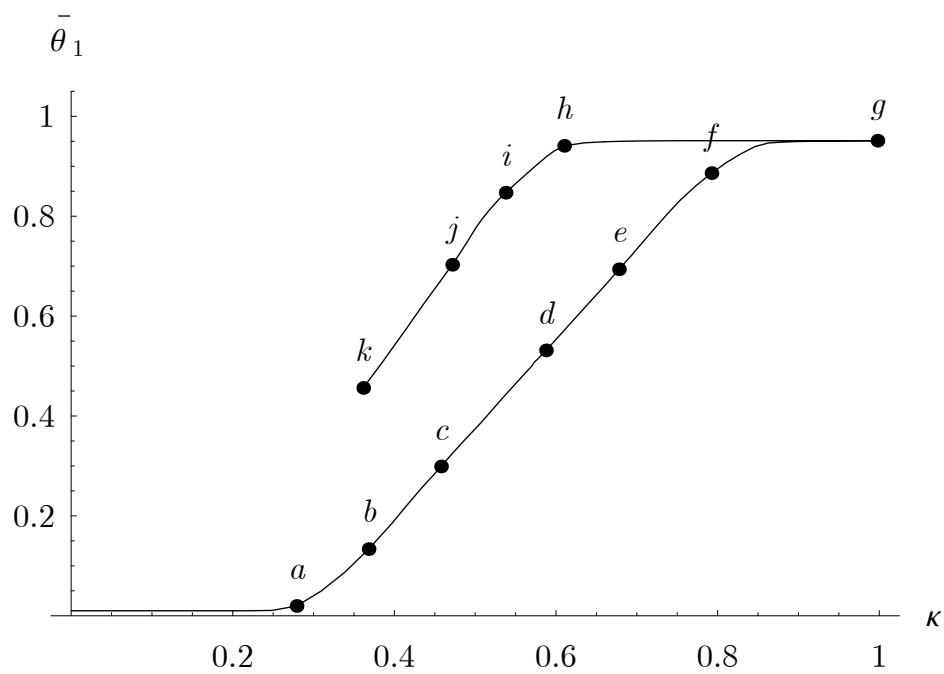
Im weiteren Verlauf der Belastung bis zum Zustand c stagniert diese Transformationszone allerdings und es bilden sich neue Martensitbereiche an den Rändern des RVEs. Während die Zonen der ersten Phasenübergänge weiterhin unverändert in ihrer Ausdehnung bleiben, breiten sich die neu gebildeten „Martensitinseln“ zum einen in Richtung der Inklusion aus, zum anderen bewegen sie sich aufeinander zu (Zustand c), während die Zwischenbereiche im austenitischen Zustand verweilen. Schließlich verbinden sich diese Martensitregionen zu *mesoskopischen Laminaten* (Zustand d), wobei der gemittelte Volumenanteil des Martensits (hier alleinig Variante 1) bei der Bildung dieser laminaren Mesostrukturen wie in Abb. 10.6 erkenntlich ca. 50% beträgt. Diese Lamine werden letztlich immer breiter, umschließen nach und nach das Ausscheidungsteilchen, welches während dieses Vorgangs von einer horizontal in eine vertikal gelängte Ellipse verformt wird, bis das komplette Matrixmaterial aus Martensit besteht (Zustände e, f und g).

Die Rücktransformation bei Entlastung des Materials beginnt wie zuvor auch mit stark lokalisierten Transformationsbereichen (Zustände h und i, Abb. 10.21). Erneut bilden sich desweiteren mesoskopische Lamine mit scharfen Abgrenzungen zwischen Austenit und Martensit, die allerdings hinsichtlich ihrer Ausrichtung gespiegelt zu denen der Belastung sind (Zustände j und k). Im Gegensatz zu den initialen Übergangsbereichen weisen die Mesostrukturen keine Netzabhängigkeit bzw. lokalisierenden Charakter auf, wie aus Abb. 10.20

sowie 10.22 erkenntlich ist. Zustand k markiert im Übrigen den letzten vollendeten Lastschritt bevor die Routine auf Grund von im weiteren Verlauf näher erläuterten Problemen abgebrochen wurde.

Der Vergleich mit den Resultaten der gleichen Analyse mit dem durch das Verfahren der Konvexifizierung gewonnenen, mikroskopischen Materialmodells ergibt hinsichtlich der in den Abb. 10.23 bis 10.25 dargestellten Beziehungen zwischen effektiver Spannung, gemittelter Phasenanteile bzw. gemittelter Energie und der Belastung signifikante Unterschiede. Am deutlichsten treten diese jedoch bei Betrachtung der räumlichen Verteilung der einzig auftretenden Martensitvariante 1 in Erscheinung. Erfolgte der Beginn der Phasenübergänge bei verwendeter Rang-1-Konvexifizierung sehr lokal (siehe Abb. 10.19), so stellen sich diese Zonen bei angewandter Konvexifizierung wie in Abb. 10.26 ersichtlich sehr viel homogener dar. Für den Zustand $\kappa \approx 0.508$ (Endzustände der Diagramme in den Abb. 10.23 bis 10.25) ergeben sich bemerkenswerte Unterschiede. Anhand der Abb. 10.27 und 10.28 lässt sich feststellen, dass unter Voraussetzung der Konvexifizierung im Gegensatz zu den mesoskopischen Laminaten der Rang-1-Konvexifizierung eine homogene Verteilung innerhalb der FGL-Matrix erreicht wird, wobei die Werte der Volumenfraktion für Martensitvariante 1 lediglich zwischen ca. 0.32 und ca. 0.47 liegen. Dementsprechend differieren auch die Deformationen der jeweiligen RVE.

Es bleibt noch anzumerken, dass die mitunter in den Skalen der folgenden Darstellungen enthaltenen, unphysikalischen Werte der Volumenfraktionen kleiner als Null bzw. größer als Eins durch die Extrapolation bedingt sind.

Abbildung 10.5.: Effektive Spannungen $\bar{\sigma}_{11}$ in Abhängigkeit des globalen Lastfaktors κ Abbildung 10.6.: Effektive Volumenanteile der Martensit-Variante 1 ($\bar{\theta}_1$) in Abhängigkeit des globalen Lastfaktors κ

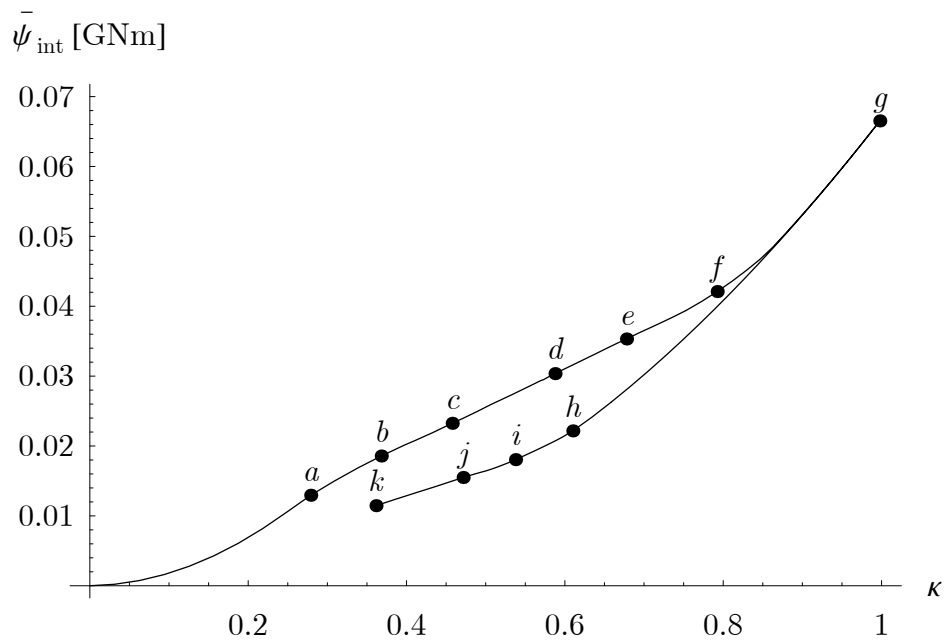


Abbildung 10.7.: Effektive interne Energie $\bar{\psi}_{int}$ des RVEs in Abhängigkeit des globalen Lastfaktors κ

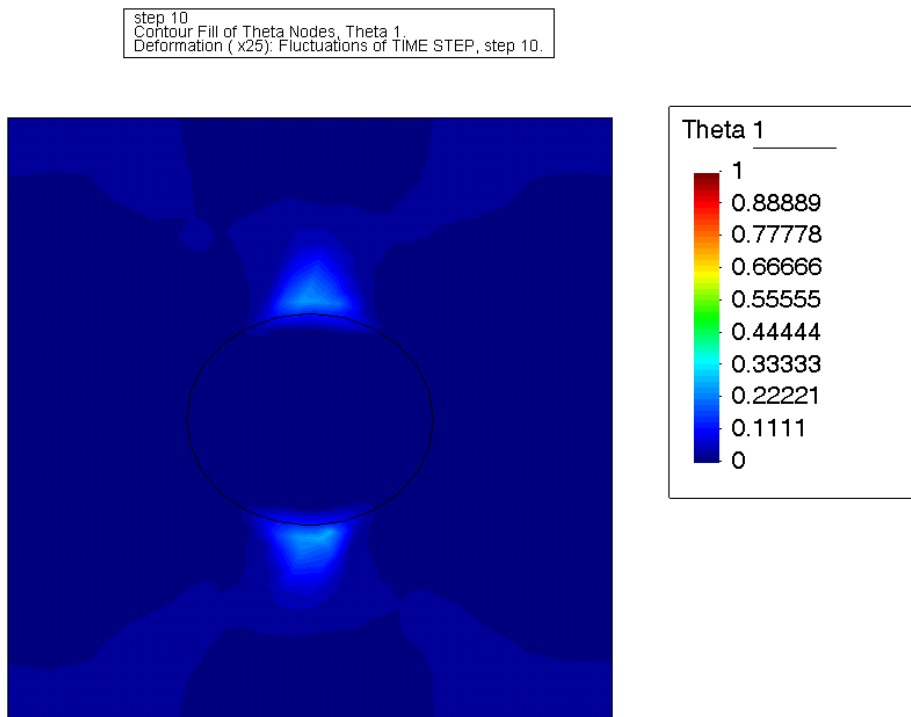


Abbildung 10.8.: Verteilung Martensit–Variante 1 im Zustand a

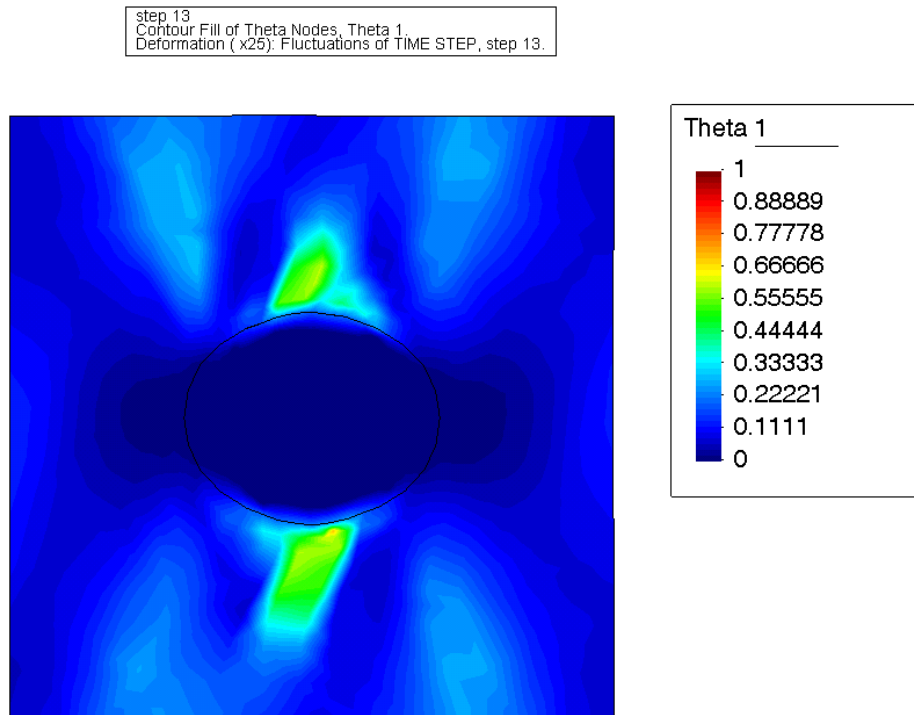


Abbildung 10.9.: Verteilung Martensit-Variante 1 im Zustand b

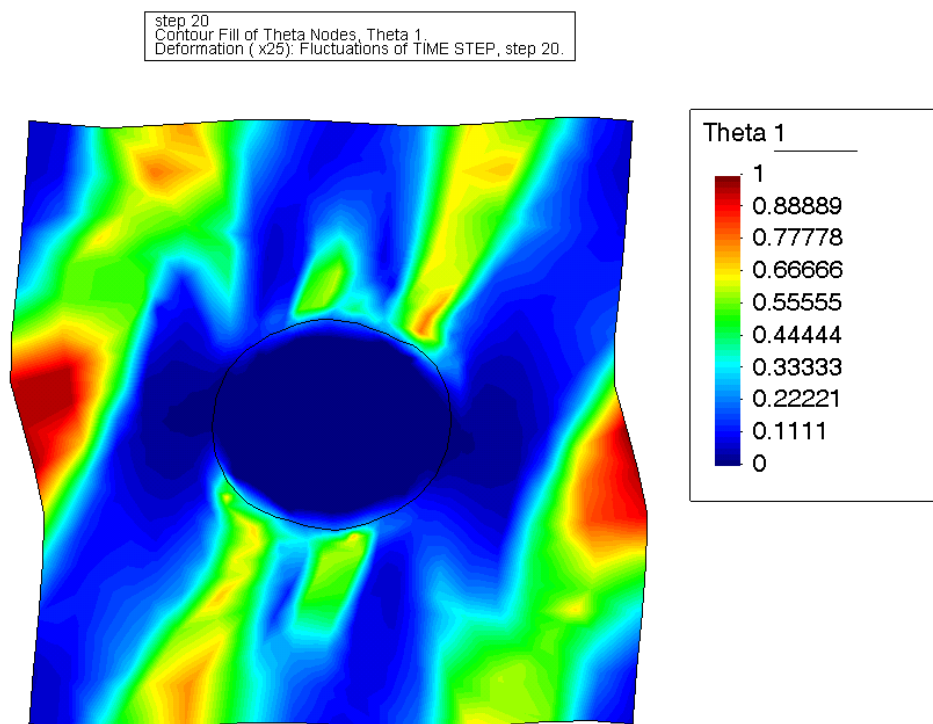


Abbildung 10.10.: Verteilung Martensit-Variante 1 im Zustand c

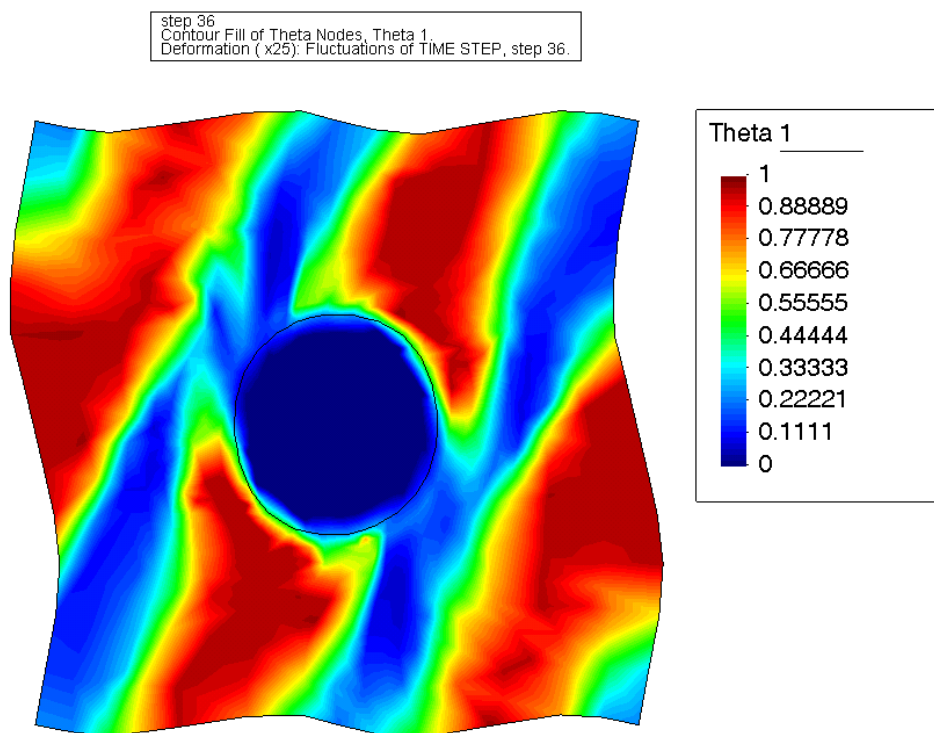


Abbildung 10.11.: Verteilung Martensit-Variante 1 im Zustand d

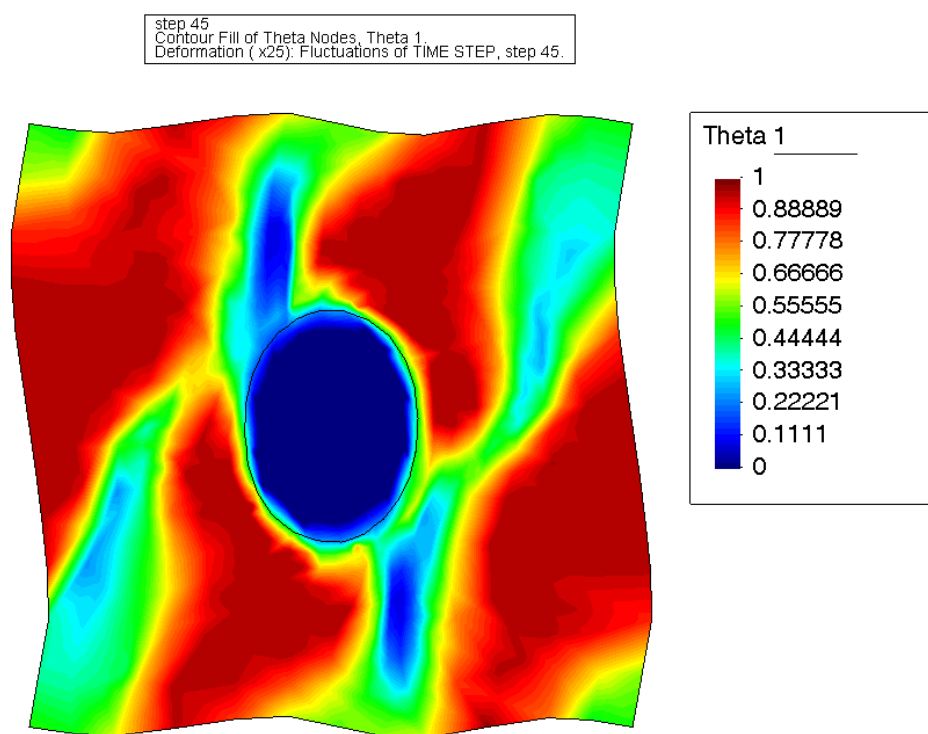


Abbildung 10.12.: Verteilung Martensit-Variante 1 im Zustand e

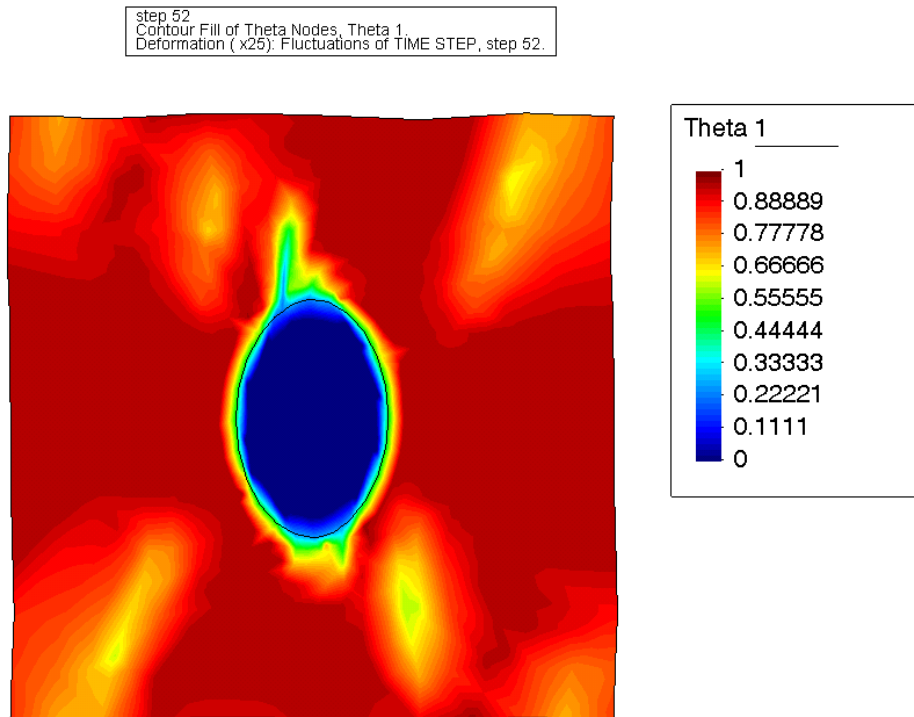


Abbildung 10.13.: Verteilung Martensit–Variante 1 im Zustand f

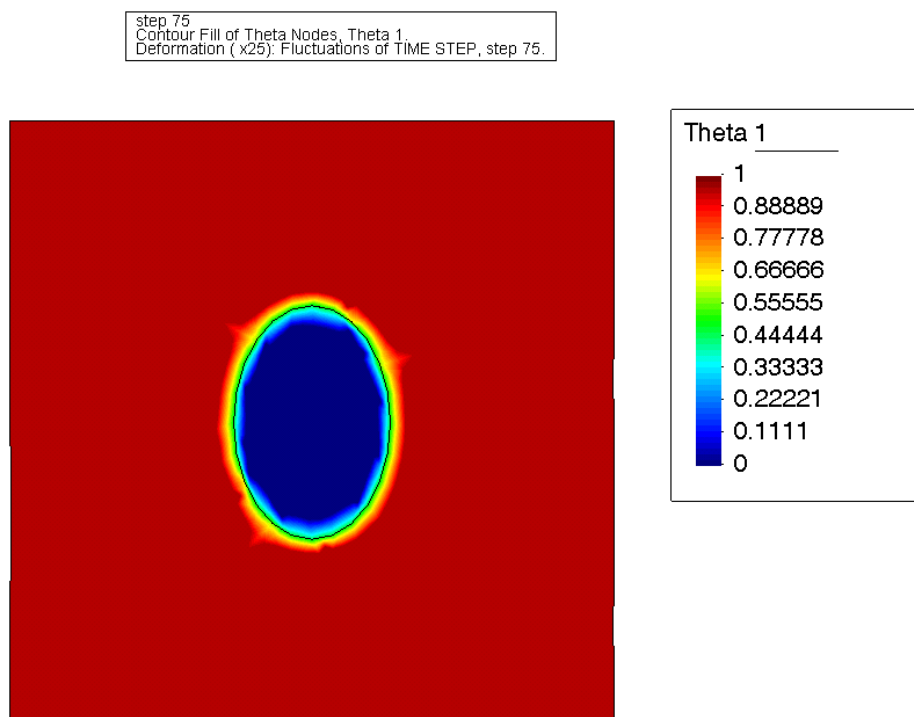


Abbildung 10.14.: Verteilung Martensit–Variante 1 im Zustand g

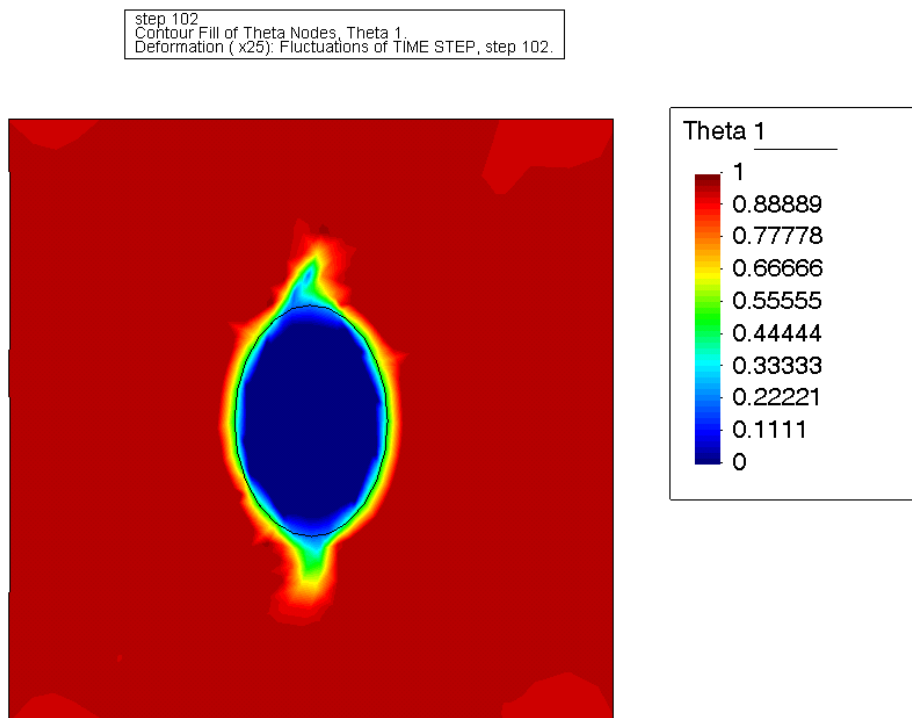


Abbildung 10.15.: Verteilung Martensit-Variante 1 im Zustand h

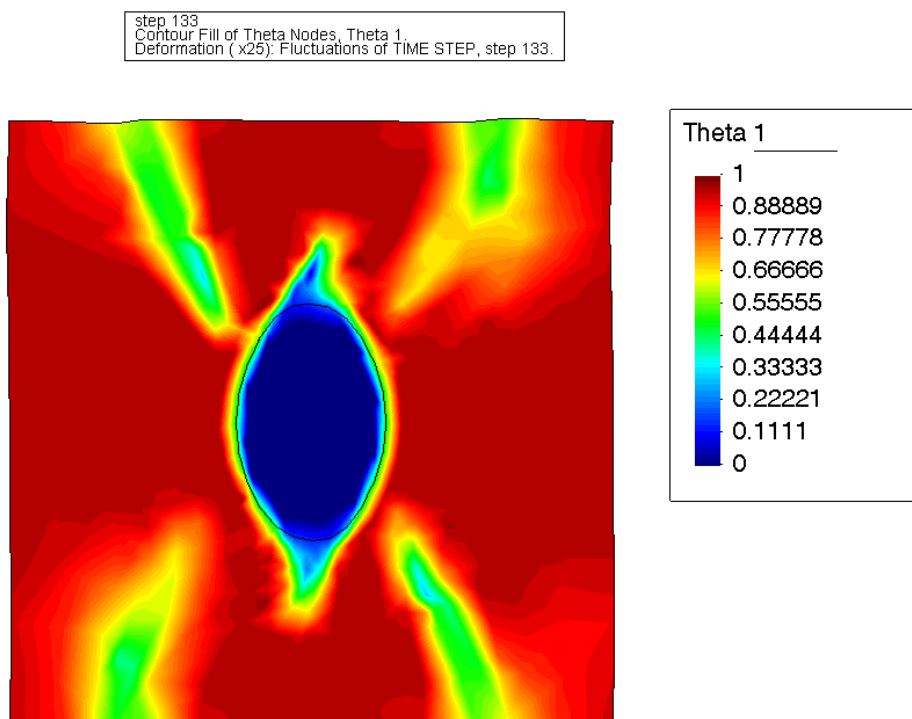


Abbildung 10.16.: Verteilung Martensit-Variante 1 im Zustand i

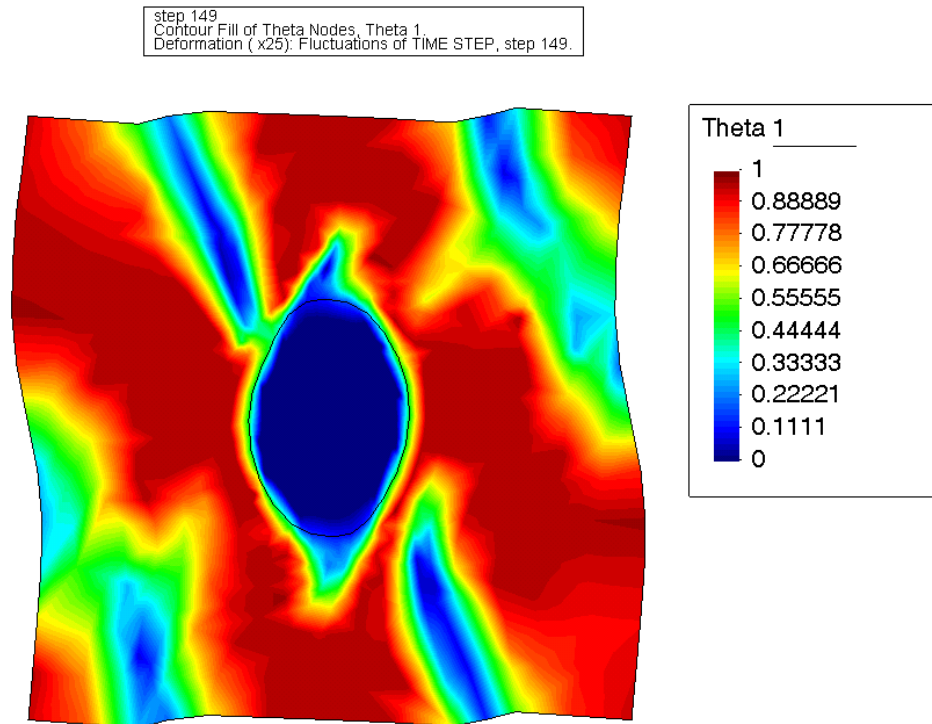


Abbildung 10.17.: Verteilung Martensit-Variante 1 im Zustand j

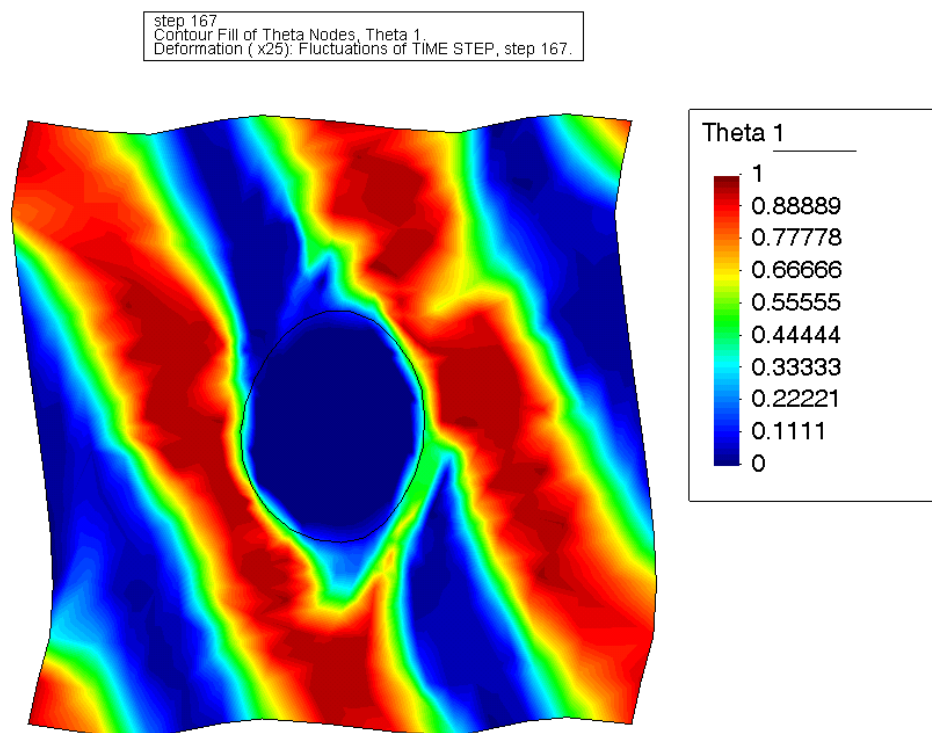


Abbildung 10.18.: Verteilung Martensit-Variante 1 im Zustand k

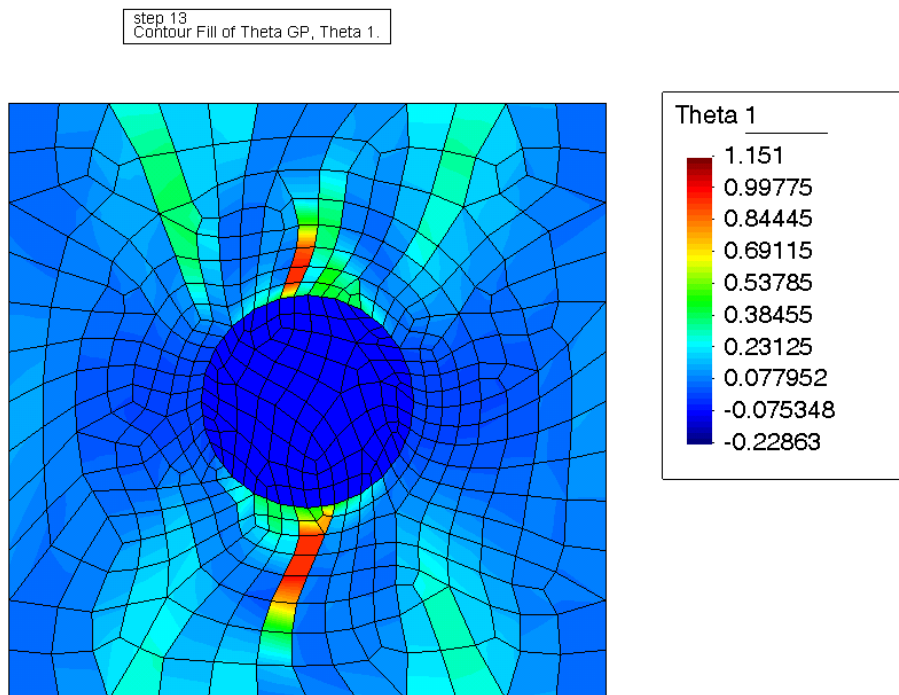


Abbildung 10.19.: Elementweise Verteilung Martensit–Variante 1 im Zustand b: Lokalisier-
te Transformationszonen

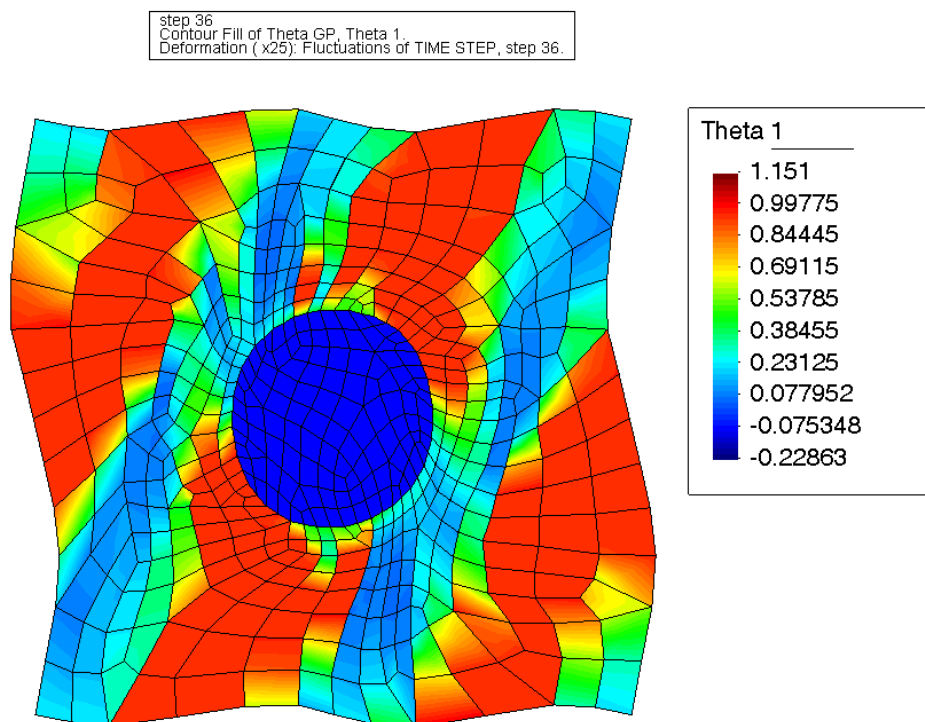


Abbildung 10.20.: Elementweise Verteilung Martensit–Variante 1 im Zustand d: Mesosko-
pische Lamine

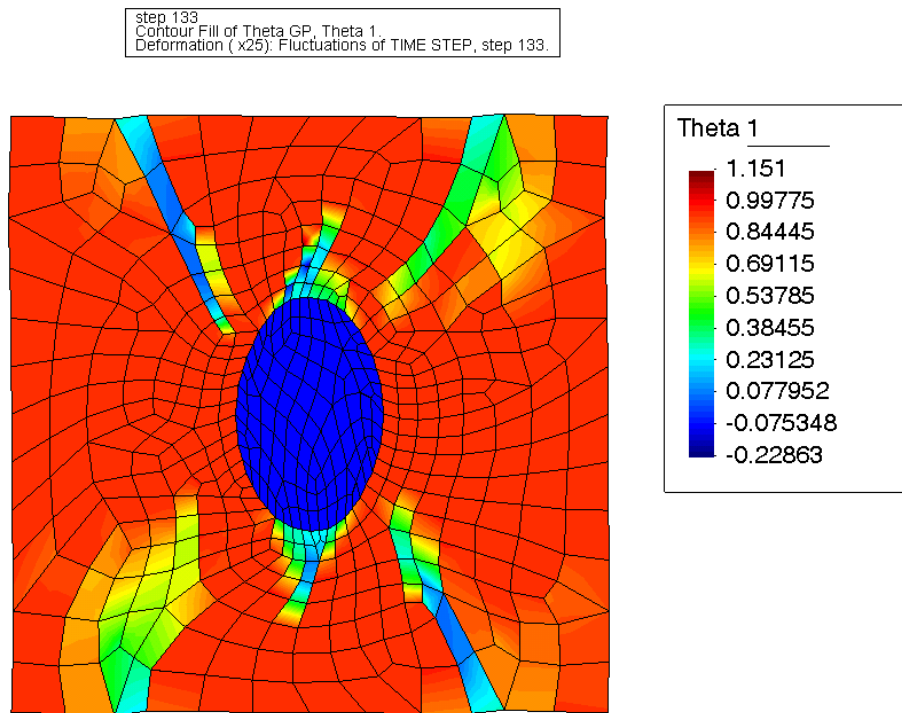


Abbildung 10.21.: Elementweise Verteilung Martensit–Variante 1 im Zustand i: Lokalisierte Transformationszonen

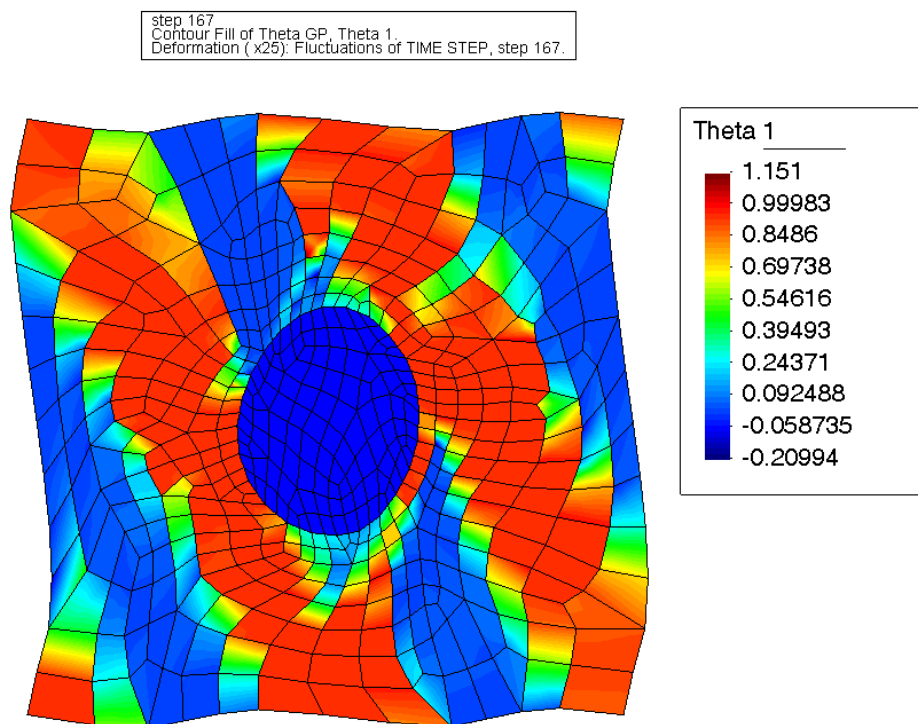


Abbildung 10.22.: Elementweise Verteilung Martensit–Variante 1 im Zustand k: Mesoskopische Laminate

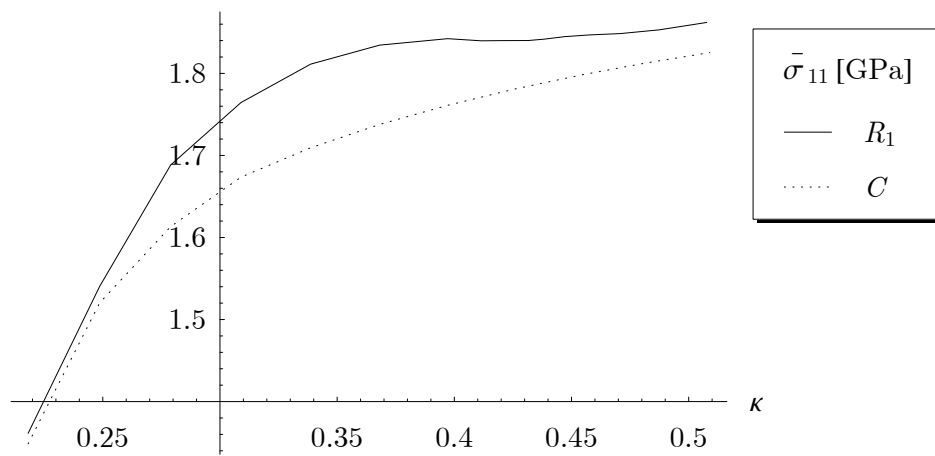


Abbildung 10.23.: Vergleich der effektiven Spannungen $\bar{\sigma}_{11}$ zwischen Konvexifizierung (C) und Rang-1-Konvexifizierung (R_1)

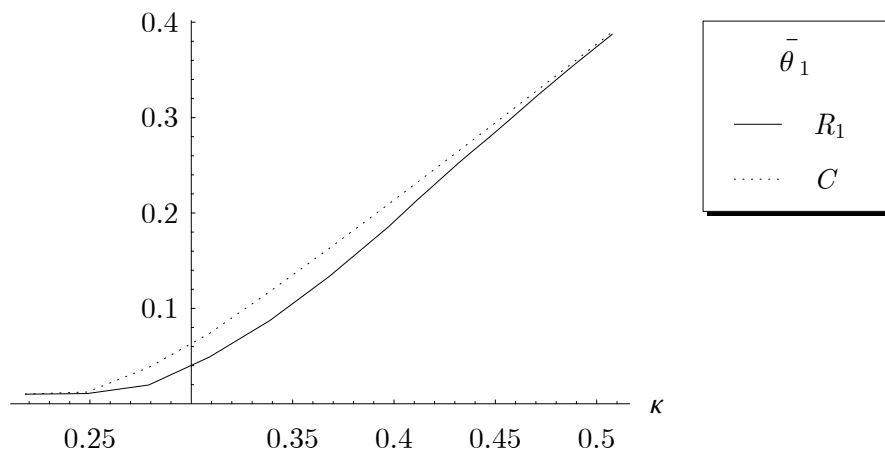


Abbildung 10.24.: Vergleich der Martensitanteile $\bar{\theta}_1$ zwischen Konvexifizierung (C) und Rang-1-Konvexifizierung (R_1)

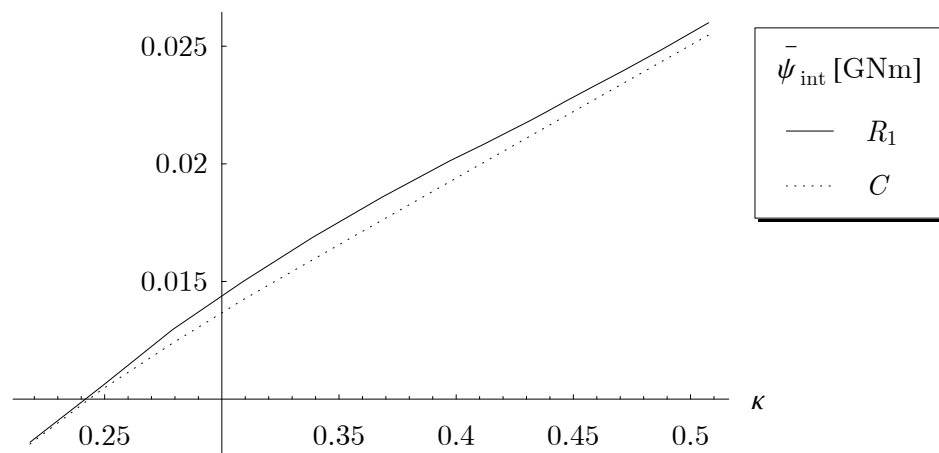


Abbildung 10.25.: Vergleich der internen Energie $\bar{\psi}_{int}$ zwischen Konvexifizierung (C) und Rang-1-Konvexifizierung (R_1)

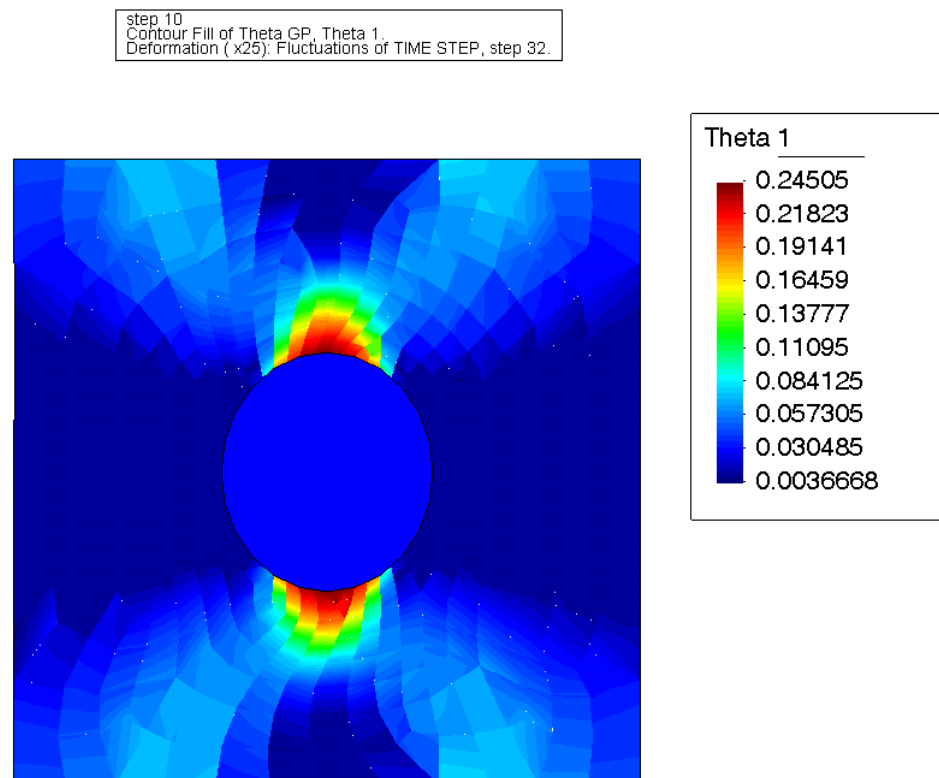


Abbildung 10.26.: Räumliche Verteilung des Martensits bei einsetzender Transformation unter Verwendung der Konvexifizierung (elementweise Extrapolation)

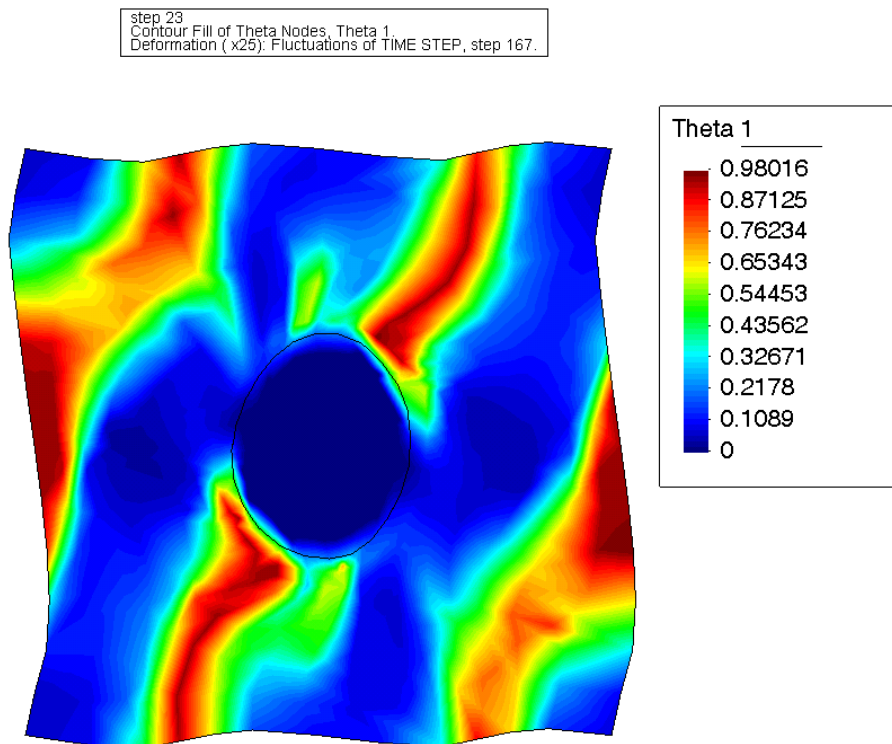


Abbildung 10.27.: Räumliche Verteilung des Martensits unter Verwendung der Rang-1-Konvexifizierung

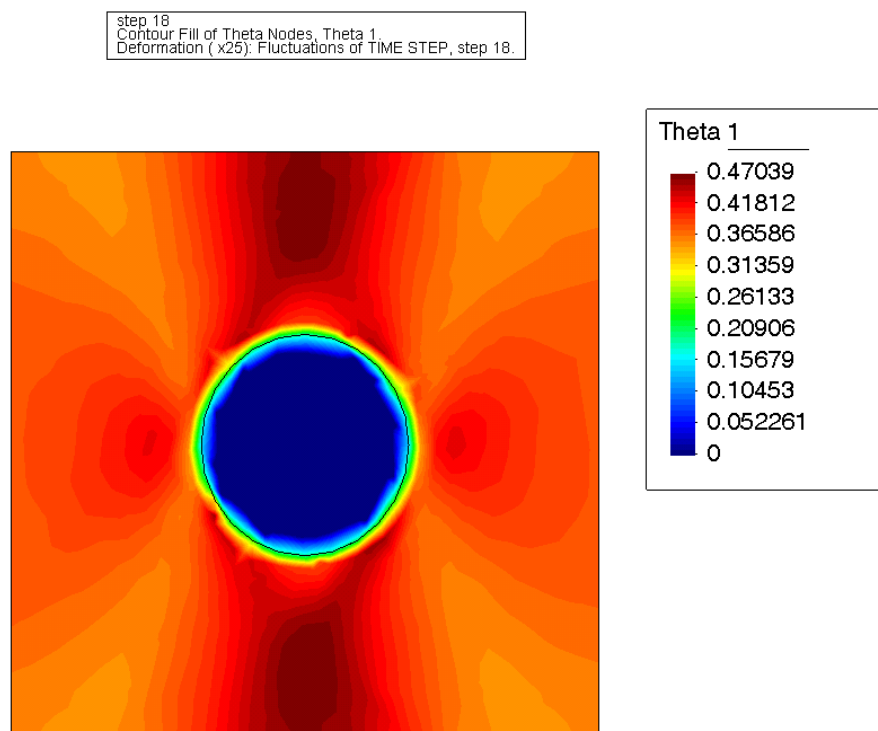


Abbildung 10.28.: Räumliche Verteilung des Martensits unter Verwendung der Konvexifizierung

Scherung, kreisförmige Ausscheidung

Die Analyse des Materialverhaltens eines identischen RVEs unter reiner Scherung $\bar{\varepsilon}_{12} = \bar{\varepsilon}_{21} = \kappa(t) 0.11$ (alle restlichen Komponenten gleich Null) erbrachte die in Abb. 10.29 und 10.30 visualisierte Materialantwort hinsichtlich der effektiven Spannungen $\bar{\sigma}_{12}$ bzw. gemittelten Volumenanteile des Martensits.

Die Verteilung der Anteile der einzelnen Martensit-Varianten zu den in Abb. 10.30 durch Kleinbuchstaben gekennzeichneten Zuständen sind den Abb. 10.31 bis 10.45 zu entnehmen, wobei hier für jeden dargestellten Lastschritt eine eigene Skala bezüglich der extrapolierten Werte gewählt wurde.

Besonders hervorzuheben sind dabei zwei Phänomene: Zum einen stellen sich zunächst erneut bestimmte Strukturen innerhalb des RVEs ein, die allerdings abweichend von den mikroskopischen Laminaten vertikal sowie horizontal verlaufende Transformationszonen aufweisen, welche die jeweiligen Zentren der periodisch fortgesetzten RVEs verbinden. Die scharfe Trennung der Austenit- und Martensitbereiche wird auch anhand der in Abb. 10.46 dargestellten Hauptdehnung ε_1 deutlich. Dabei macht die Darstellung der elementweise extrapolierten Felder deutlich, dass diese Mesostrukturen netzunabhängig sind. Die verschiedenen Martensitvarianten, die sich im Einklang mit den mikroskopischen Analysen nahezu einheitlich entwickeln, konzentrieren sich dabei auf die eben erwähnten lokalen Bereiche (Bereich zwischen Zuständen a und b).

Zum anderen verändert sich der Mischungszustand des RVEs nach Zustand b nochmal erheblich. Die im Zustand b maximalen Werte der Fluktuationen werden zurückgenommen, damit einhergehend ist eine zunehmend komplexe räumliche Verteilung der Martensit-Varianten 1 und 2 auszumachen, während sich Variante 3 wahrscheinlich ob des angenommenen ebenen Dehnungszustandes zunehmend homogener verteilt. Schließlich liegen die Varianten 1 und 2 im Zustand e , also bei vollendeter Transformation des RVEs, in einzelnen „Inseln“ koexistierender Phasen vor. Die Veränderung des Materialverhaltens im Zustand b macht sich ebenfalls in der Entwicklung der effektiven Spannung $\bar{\sigma}_{12}$ bemerkbar (siehe Abb. 10.29), da diese fortan nahezu konstant bleibt und somit ein Spannungsplateau besteht.

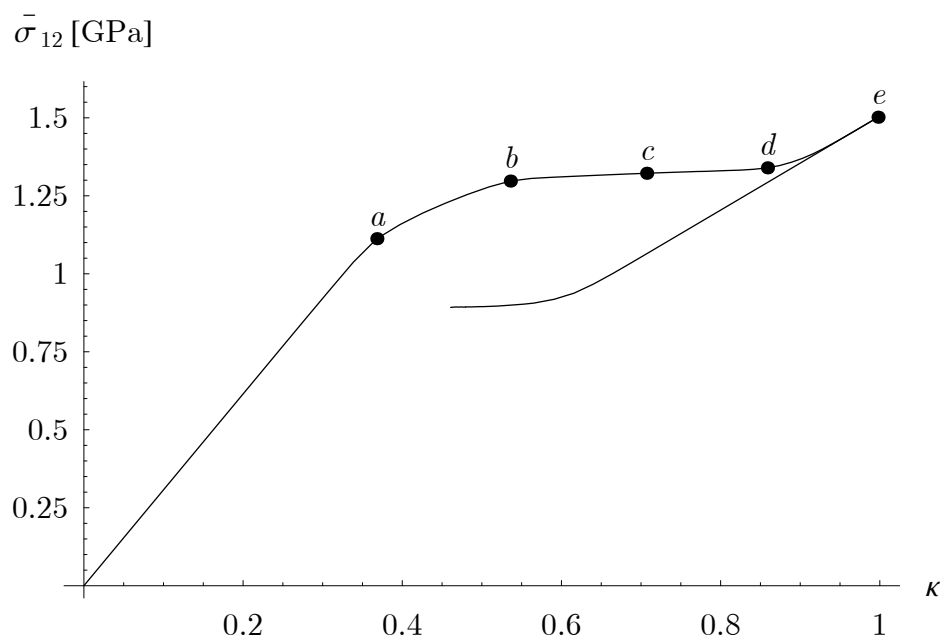


Abbildung 10.29.: Effektive Spannungen $\bar{\sigma}_{12}$ in Abhängigkeit des globalen Lastfaktors κ

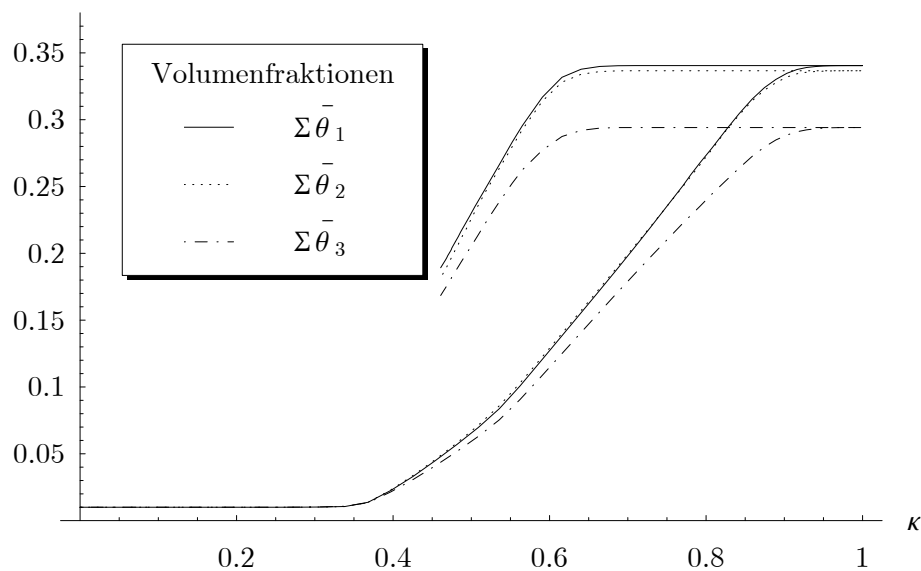


Abbildung 10.30.: Effektive Volumenanteile der Martensit-Varianten in Abhängigkeit des globalen Lastfaktors κ

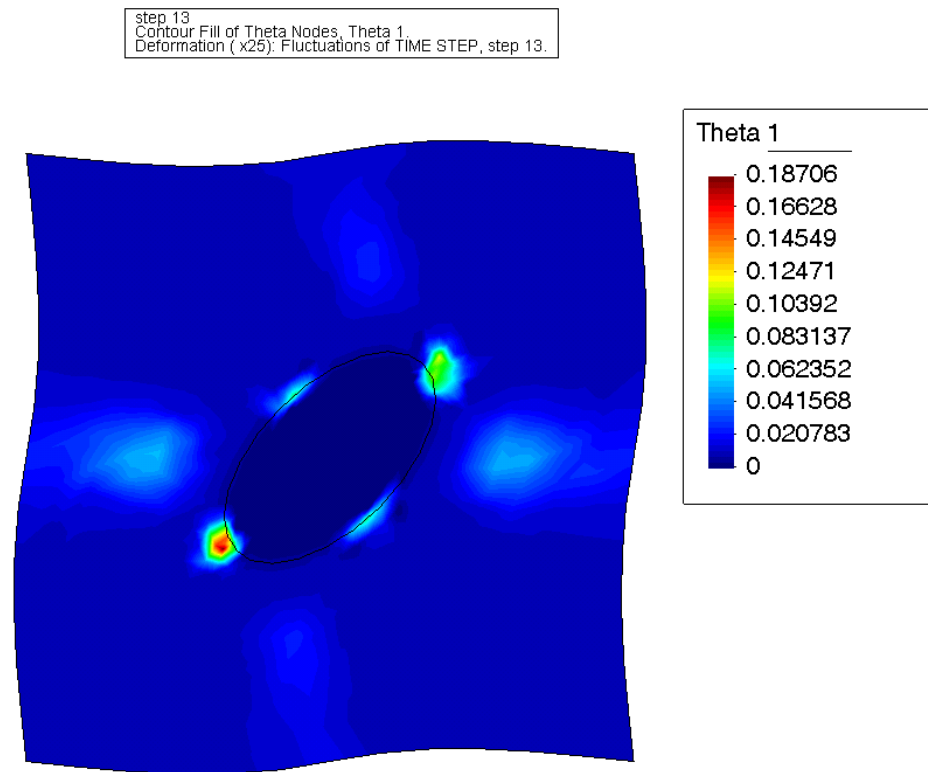


Abbildung 10.31.: Verteilung Martensit–Variante 1 im Zustand a

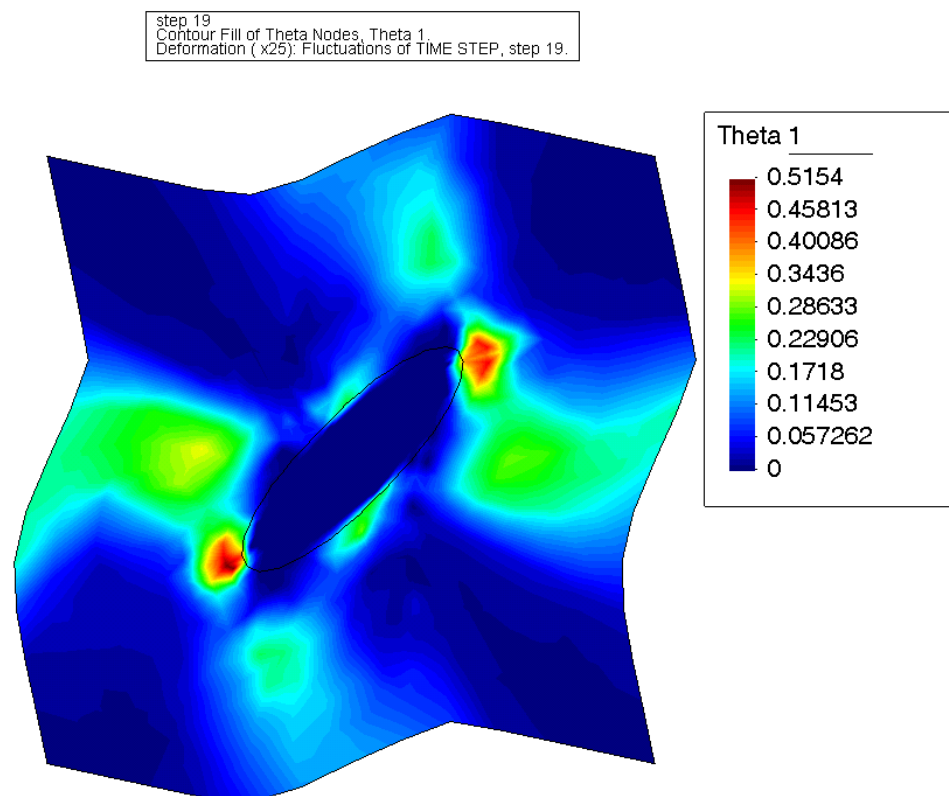


Abbildung 10.32.: Verteilung Martensit–Variante 1 im Zustand b

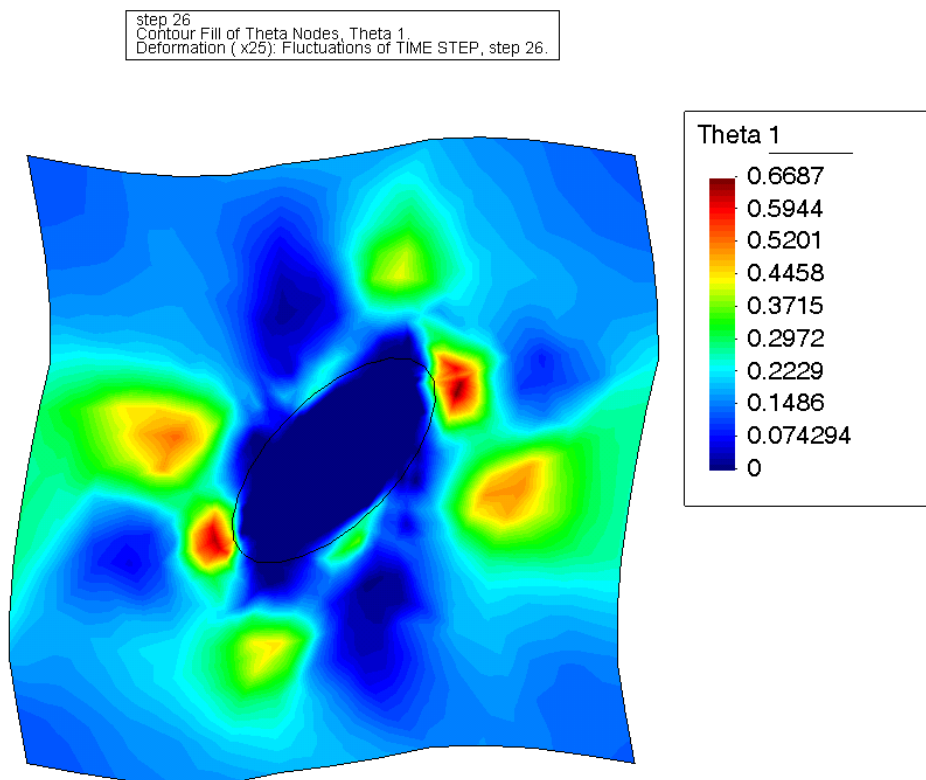


Abbildung 10.33.: Verteilung Martensit-Variante 1 im Zustand c

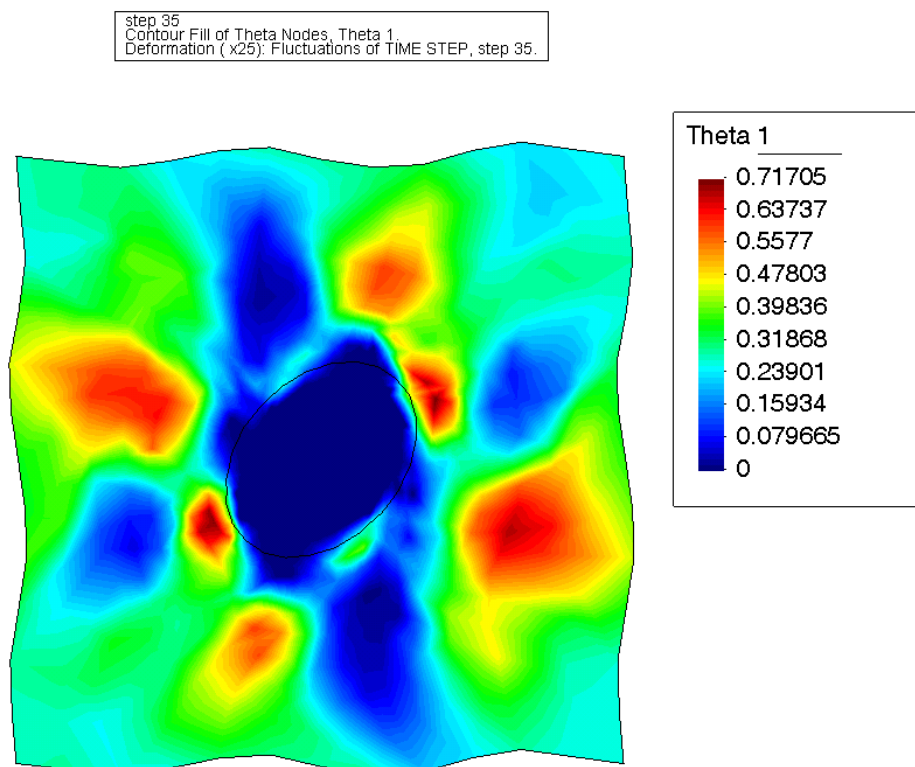


Abbildung 10.34.: Verteilung Martensit-Variante 1 im Zustand d

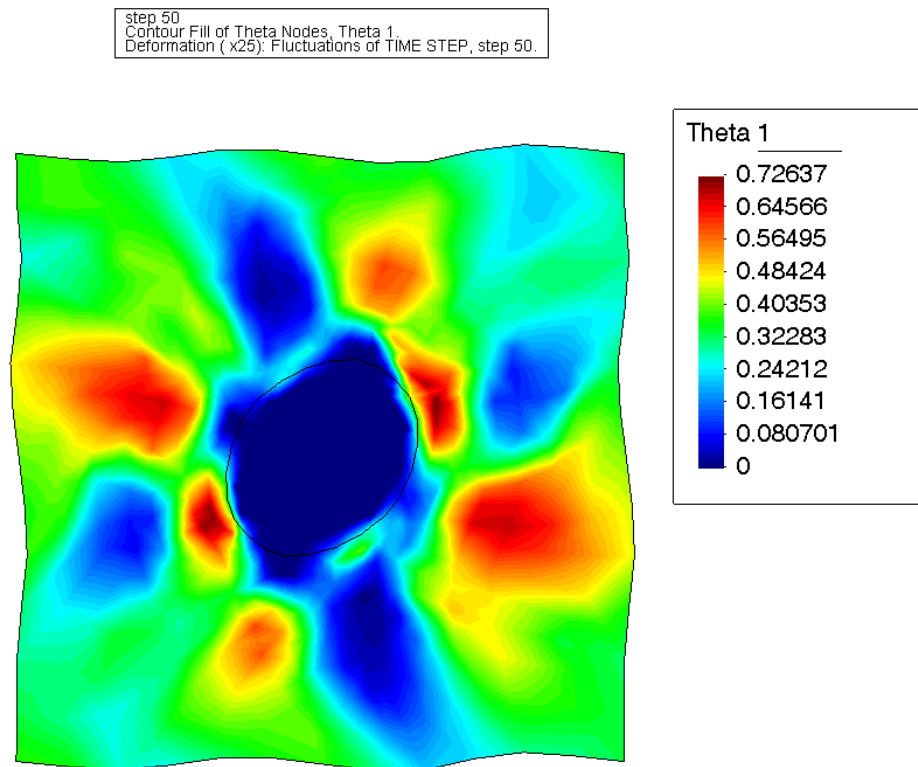


Abbildung 10.35.: Verteilung Martensit–Variante 1 im Zustand e

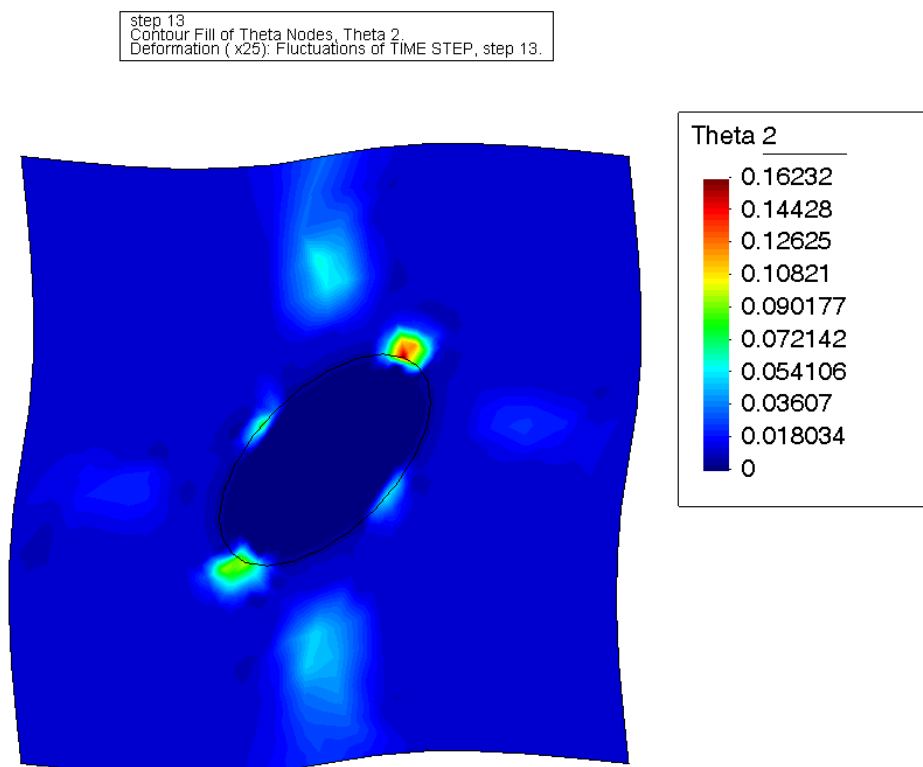


Abbildung 10.36.: Verteilung Martensit–Variante 2 im Zustand a

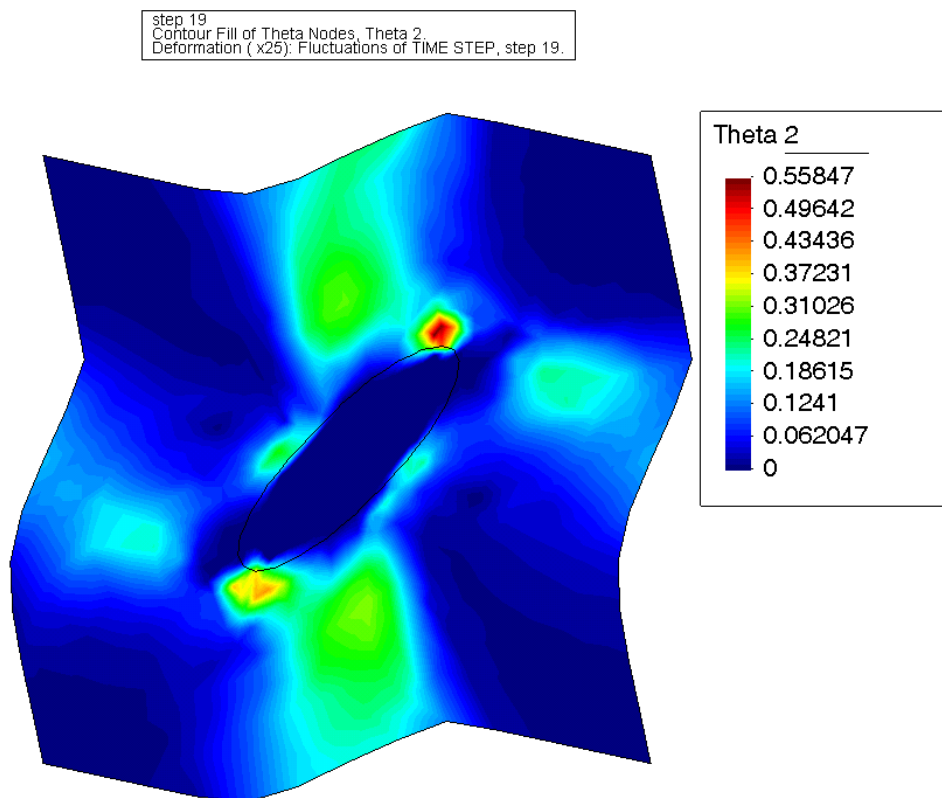


Abbildung 10.37.: Verteilung Martensit–Variante 2 im Zustand b

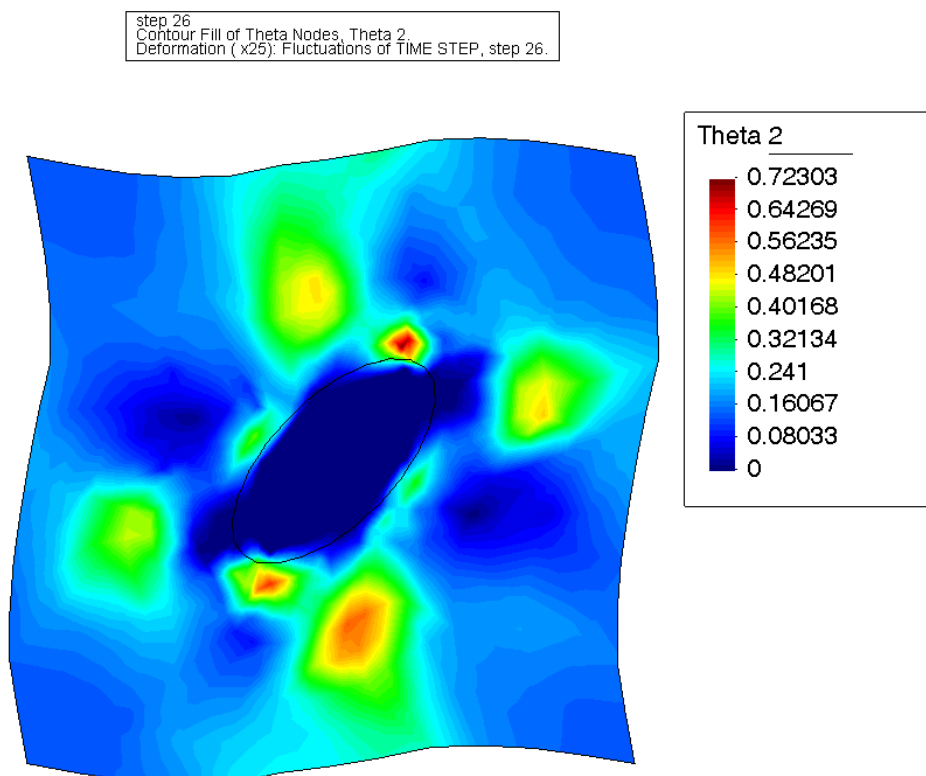


Abbildung 10.38.: Verteilung Martensit–Variante 2 im Zustand c

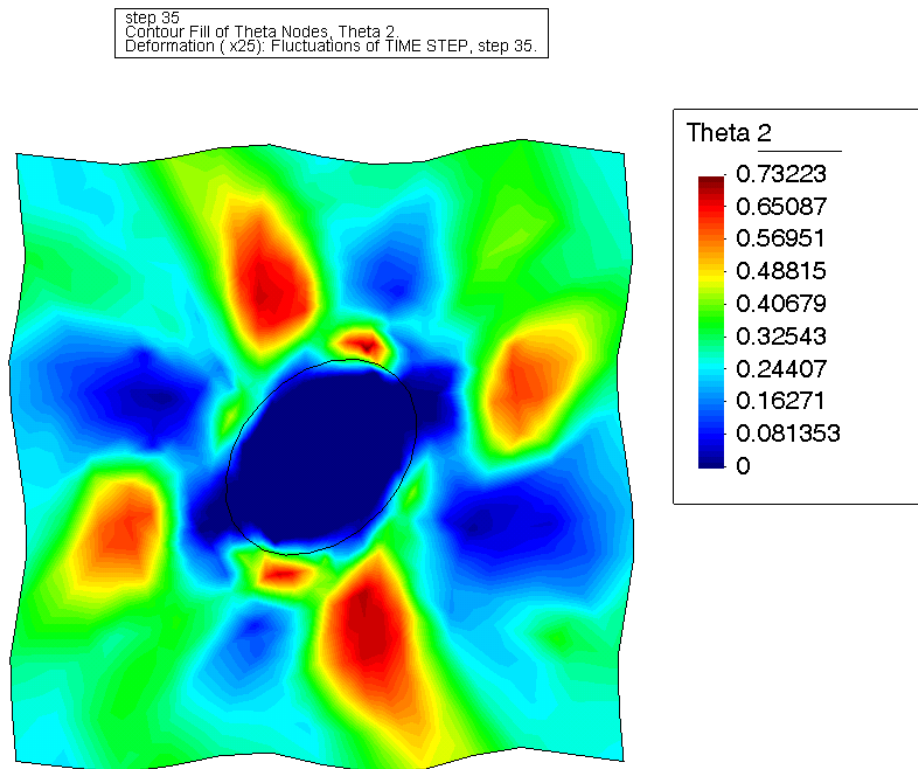


Abbildung 10.39.: Verteilung Martensit–Variante 2 im Zustand d

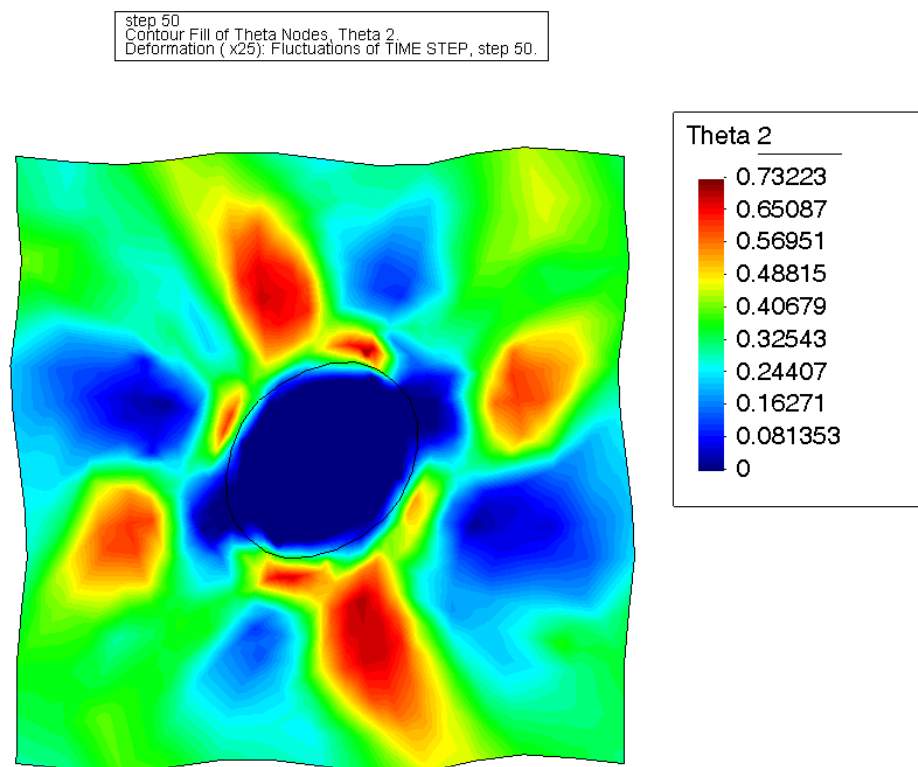


Abbildung 10.40.: Verteilung Martensit–Variante 2 im Zustand e

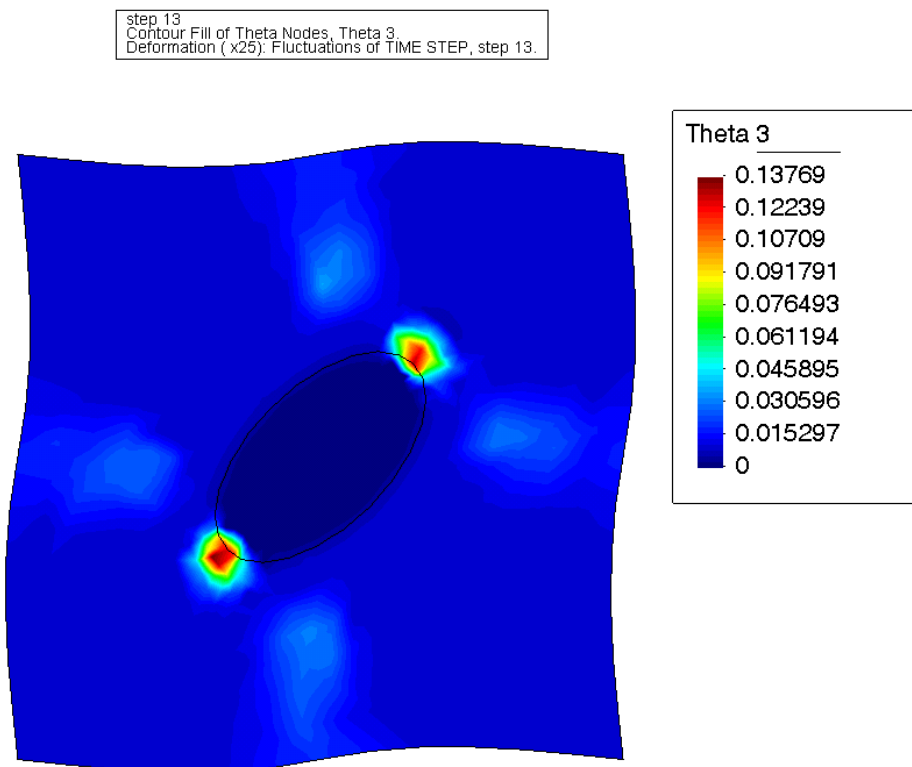


Abbildung 10.41.: Verteilung Martensit-Variante 3 im Zustand a

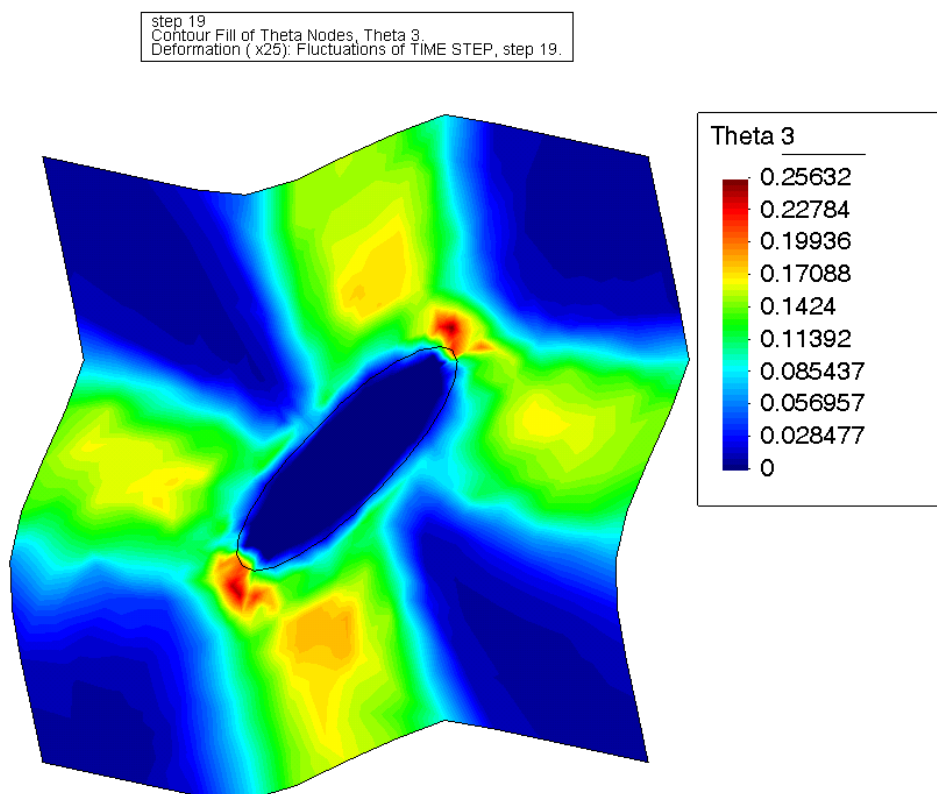


Abbildung 10.42.: Verteilung Martensit-Variante 3 im Zustand b

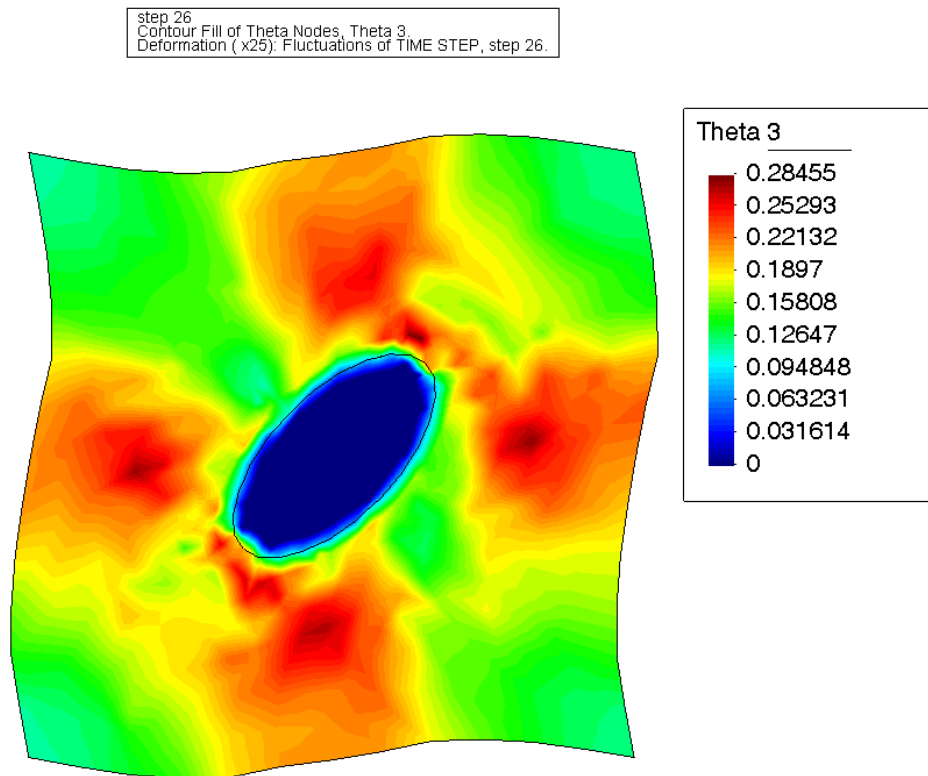


Abbildung 10.43.: Verteilung Martensit–Variante 3 im Zustand c

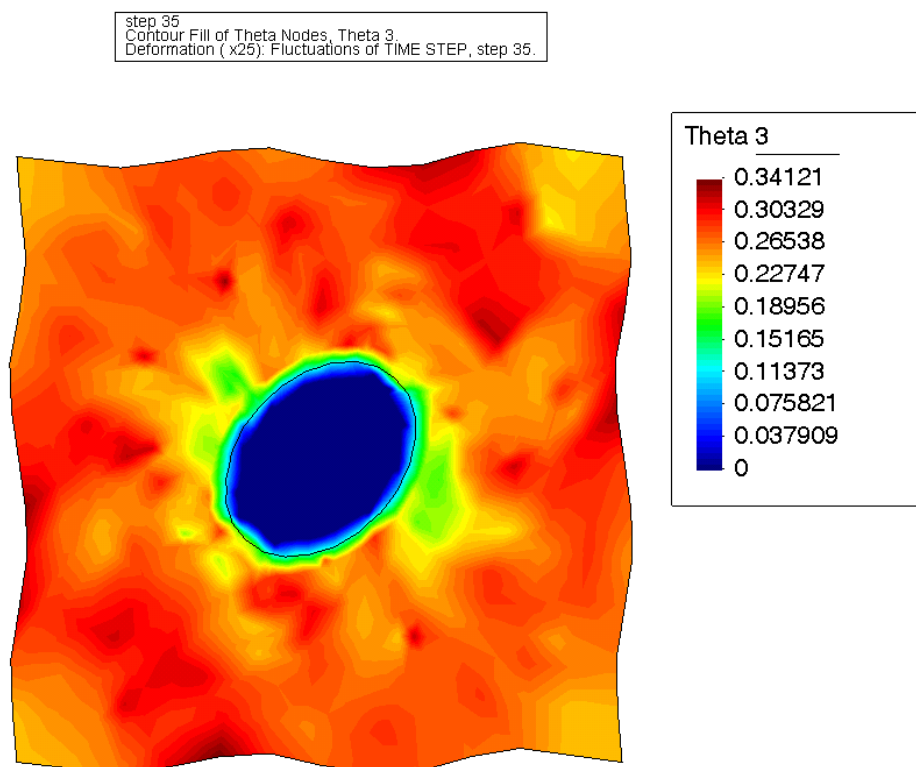


Abbildung 10.44.: Verteilung Martensit–Variante 3 im Zustand d

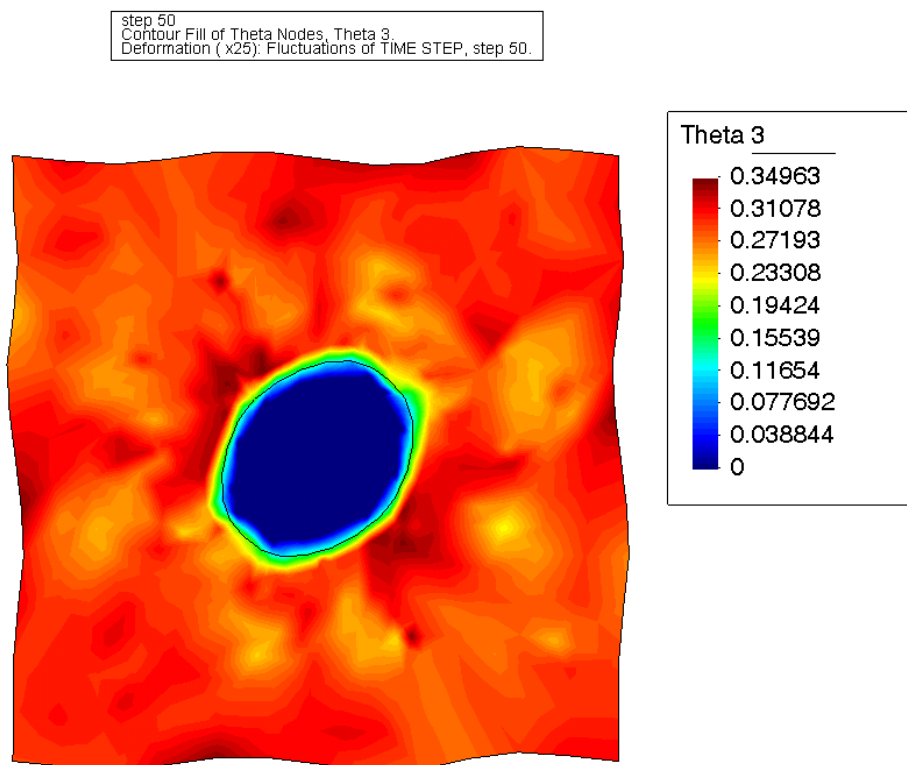
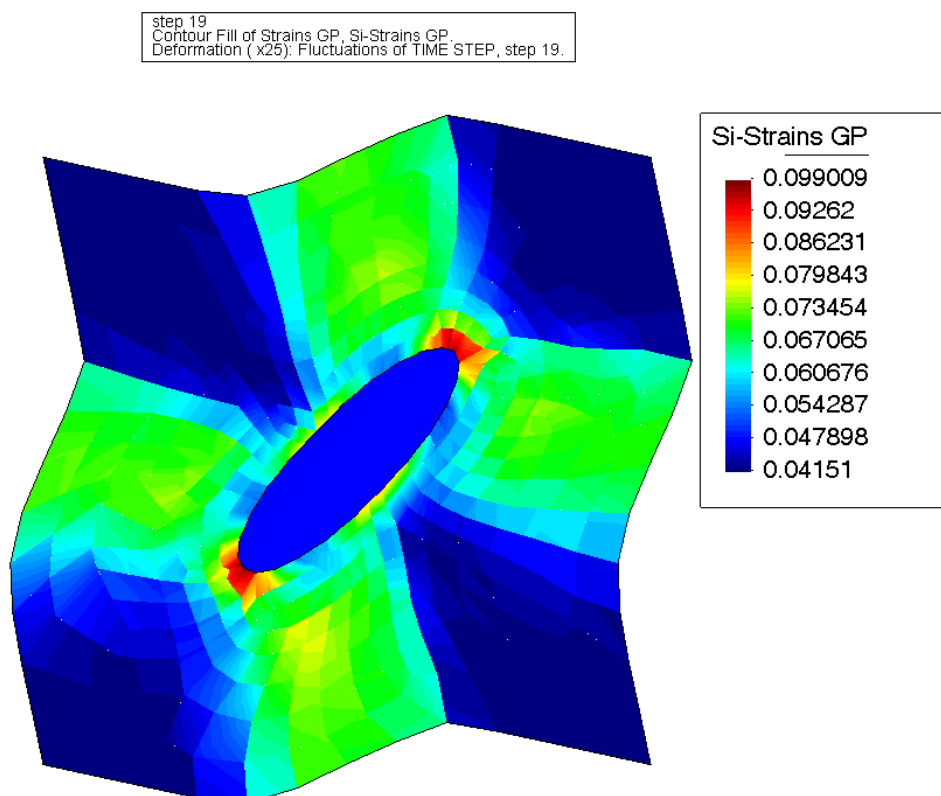


Abbildung 10.45.: Verteilung Martensit-Variante 3 im Zustand e

Abbildung 10.46.: Verteilung der Hauptdehnung ε_1 im Zustand b

11. Modellierung: Polykristall

Formgedächtnislegierungen liegen hauptsächlich als polykristalline Werkstoffe vor, daher ist das mikromechanische Modell im Vorfeld der hier angestrebten Anwendung dahin gehend zu modifizieren, dass die für jedes Korn unterschiedliche Kristallorientierung des austenitischen Gitters berücksichtigt wird¹. Dies geschieht über neu definierte Transformationsdehnungen der Form

$$\epsilon_i^t = \mathbf{R}_i^T \cdot \epsilon_i^t \cdot \mathbf{R}_i \quad (11.1)$$

mit $\mathbf{R}_i$ als gewöhnlicher Rotationsmatrix für das Korn i . Im Rahmen der hier vorgenommenen zweidimensionalen Modellierung können diese gemäß

$$\mathbf{R}_i = \begin{pmatrix} \cos(\varphi_i) & \sin(\varphi_i) & 0 \\ -\sin(\varphi_i) & \cos(\varphi_i) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (11.2)$$

angegeben werden. Die einzelnen Winkel φ_i der Kristallausrichtungen werden dabei zufällig im Bereich $[0, \pi/2]$ ausgewählt.

11.1. Geometrische Diskretisierung

Zur geometrischen Nachbildung eines polykristallinen Materialbereichs, der im Sinne der vorangegangenen Kapitel erneut repräsentativ für das makroskopische Verhalten sein muss, wurden sogenannte *Voronoi-Diagramme* gewählt. Voronoi-Diagramme finden ob ihrer recht einfachen Konstruktion in mannigfaltigen Fachbereichen Anwendung (siehe z.B. Gold (2008)). Voronoi-Diagramme entstehen aus der Verbindung von definierten Punkten, die hier sinngemäß als *Kornzentren* bezeichnet werden, und der anschließenden Konstruktion der Mittelsenkrechten, welche allesamt miteinander verbunden werden.

Auf Grund der dort implementierten Berechnung von Voronoi-Netzen wird zur Erstellung der Polykristall-RVEs das Programm MATHEMATICATM verwendet. Abb. 11.1 zeigt das Resultat einer solchen durch den Rand des RVEs begrenzten Prozedur auf Basis von 48 zufällig gewählten Kornzentren.

Prinzipiell stellt die erzielte Geometrie bereits eine recht anschauliche Approximation eines Polykristalls dar. Jedoch widerspricht diese bei genauerer Betrachtung der Forderung nach periodischen Randbedingungen bzw. eines periodisch fortsetzbaren RVEs, da die Intersektionen der Ränder auf den jeweils gegenüberliegenden Seiten nicht identisch sind. Aus diesem Grund ist die Voronoi-Prozedur noch dahingehend zu modifizieren. Dazu werden zunächst Kornzentren auf den Rändern des RVEs definiert, und zwar gemäß Abb. 11.2 identisch für die gegenüberliegenden Ränder Γ_1 und Γ_3 sowie Γ_2 und Γ_4 .

¹Bislang wurde diese parallel zu den Raumachsen angenommen.

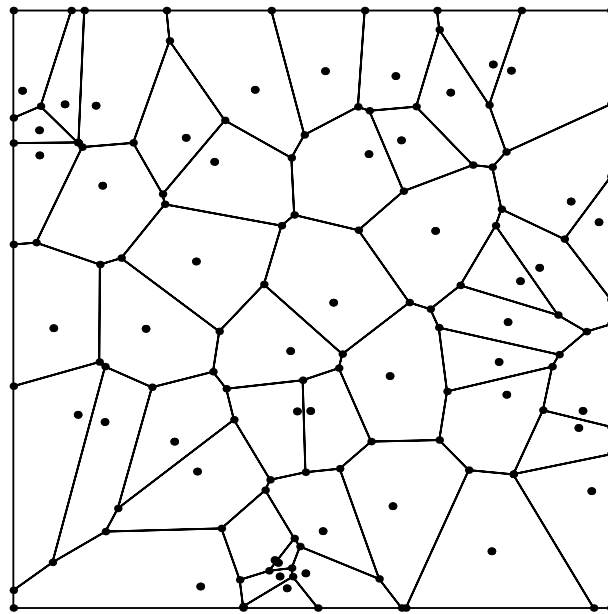


Abbildung 11.1.: Generiertes Voronoi-Diagramm auf Basis zufällig verteilter Kornzentren

Durch diese Maßnahme erlangt man eine verbesserte Kontrolle über die Intersektion der Ränder des RVEs durch die Voronoi-Zellen. Allerdings löst dieses Vorgehen alleine noch nicht vollends die oben beschriebene Problematik, was im folgenden auch mit Hilfe von Abb. 11.3 erläutert werden soll.

Existiert ein zufällig generierter Punkt P_3 innerhalb des Halbkreises um die Punkte P_1 und P_2 , die auf dem Rand des RVE liegen, so kreuzen beide Korngrenzen den Rand in nicht kontrollierbarer Weise (links). Sofern P_3 außerhalb dieses Kreises liegt wird ein Punkt Q auf dem Rand des RVEs generiert, der sich genau mittig zwischen den Punkten P_1 und P_2 befindet (Mitte). Da diese Punkte auf dem gegenüberliegenden Rand identisch gesetzt werden, würde diese Voraussetzung, dass keine Punkte innerhalb solcher Halbkreise liegen dürfen, das Problem der Nicht-Periodizität allgemeiner Voronoi-Diagramme lösen.

Allerdings ist erkenntlich, dass die Ränder der Voronoi-Zellen senkrecht auf den Rändern des RVEs stehen. Alle Körner am Rand besäßen also vertikal bzw. horizontal verlaufende Abgrenzungen, was rein optisch sehr befremdlich wirkt und zudem in der Realität nicht vorzufinden ist. Setzt man aber einen zusätzlichen Punkt P_3 exakt auf den Halbkreis (rechts), so stellt der auf dem Rand generierte Punkt Q zudem den Schnittpunkt des Randes mit den Voronoi-Diagrammen dar, welche jetzt beliebig geneigt sein können. Abb. 11.4 zeigt die zusätzlichen, grau dargestellten Punkte, die nach dem Zufallsprinzip auf die Kreise gesetzt werden.

Weiterhin gilt zu beachten, dass an den Eckpunkten des RVEs die Punkte eines Halbkreises in den des anderen Punktepaares reichen können (siehe Abb. 11.4). Ist dies der Fall, muss die Lage des Punktes geändert werden, bis dieser Umstand behoben ist. Durch diese Manipulation entsteht nun eine Anordnung der Punkte wie in Abb. 11.5, welche die Anforderungen an die Periodizität grundlegend erfüllt.

Die zufällige Generierung weiterer Kornzentren im Zentrum des RVEs (dunkelgrau in Abb. 11.6) liefert schließlich die Grundlage für die abschließende MATHEMATICATM-Prozedur,

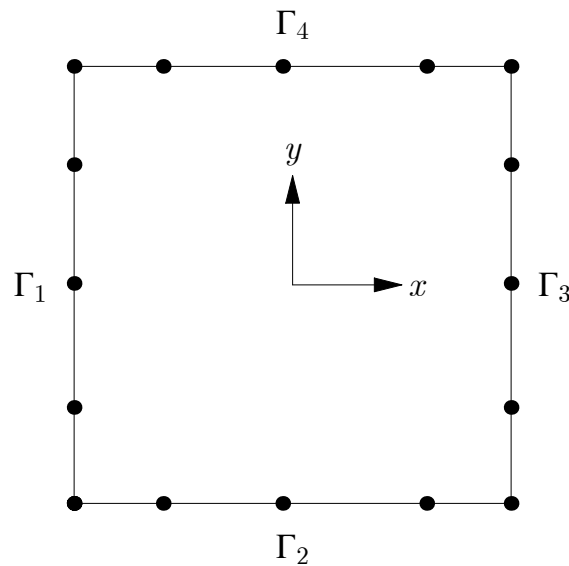


Abbildung 11.2.: Festlegung gleichverteilter Randpunkte

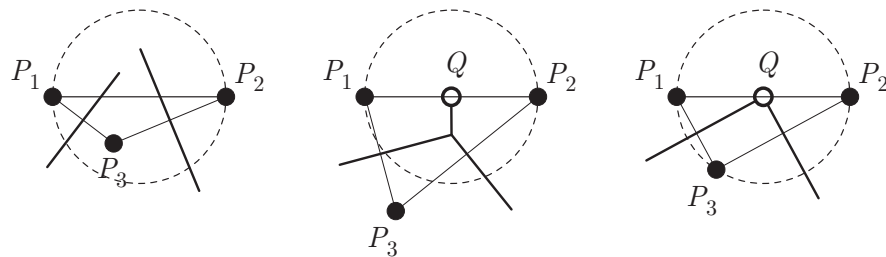


Abbildung 11.3.: Konstruktion periodischer Voronoi-Zellen

welche die in Abb. 11.7 dargestellte Geometrie ergibt.

Für die Netzgenerierung innerhalb des FE-Preprocessing ist zudem allerdings noch zu versichern, dass auch die Knoten auf den gegenüberliegenden Rändern identisch gesetzt werden. Dazu ist es ratsam, vor der mit GiDTM vollzogenen Vernetzung weitere Punkte auf dem Rand zu definieren, wie es für ein anderes Beispiel in den Abb. 11.8 und 11.9 dargestellt ist, da diese anschließend als FE-Knoten verwendet werden. Auf Grund der komplexen geometrischen Anordnung der zu vernetzenden Bereiche ist es trotz der numerischen Nachteile von Dreieckselementen in diesem Fall ratsam, diese dennoch zu verwenden.

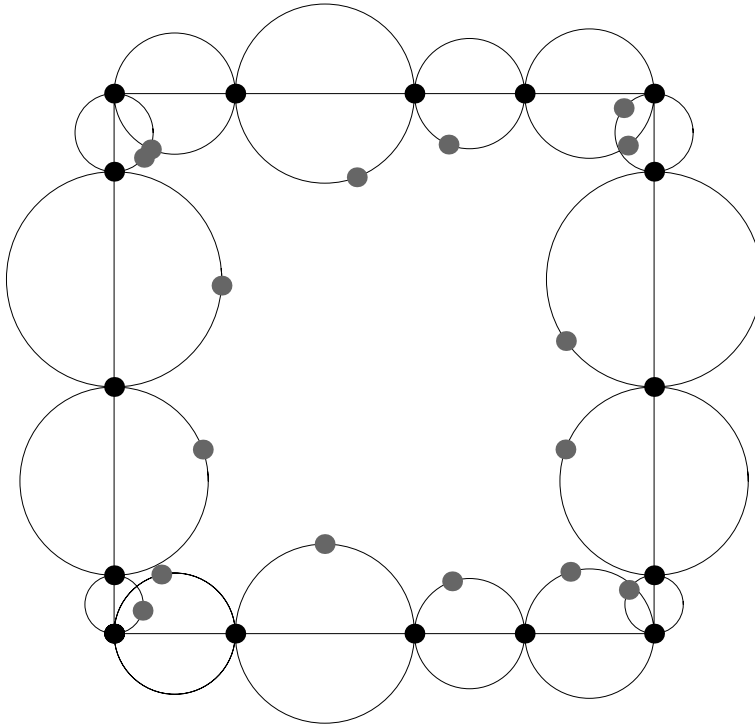


Abbildung 11.4.: Definition zusätzlicher Punkte auf Randhalbkreisen

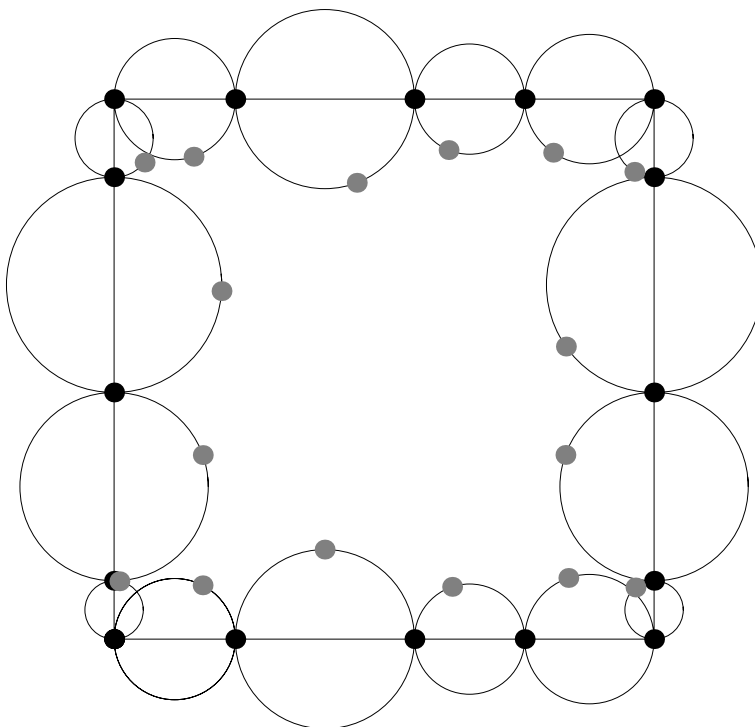


Abbildung 11.5.: Korrektur der Punkte auf Kreisen der Eckpunkte

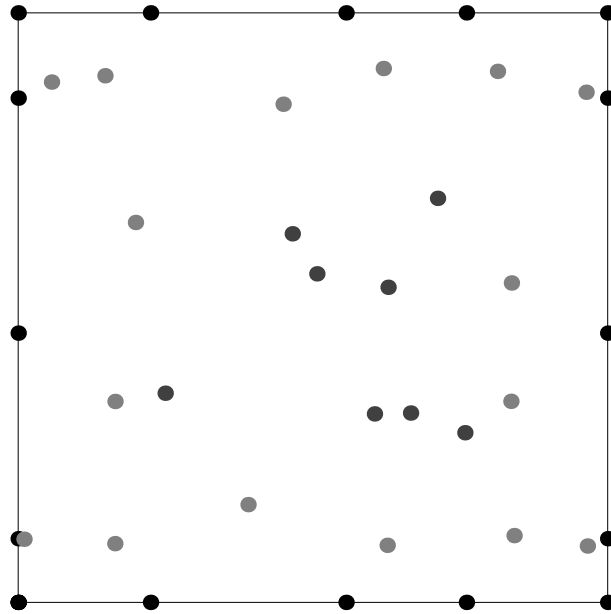


Abbildung 11.6.: Zufällig verteilte Kornzentren im Innenbereich des RVE (dunkelgrau)

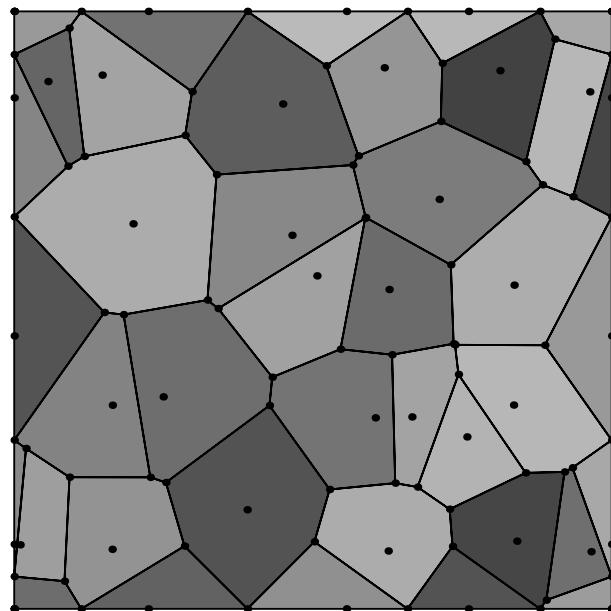


Abbildung 11.7.: Diskretisiertes Polykristall mittels periodischer Voronoi–Zellen

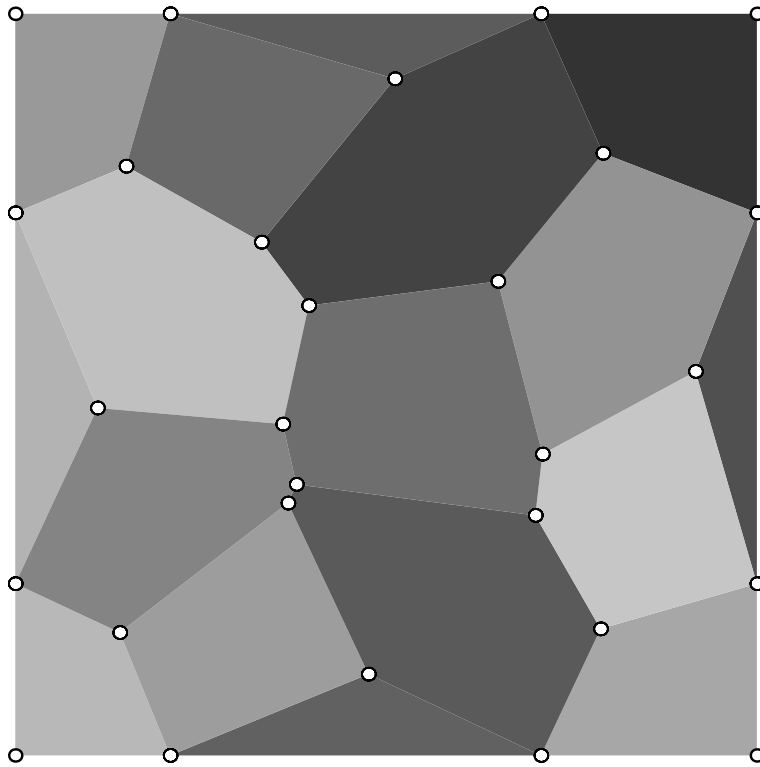


Abbildung 11.8.: Punkte zur Bestimmung der Voronoi-Zellen

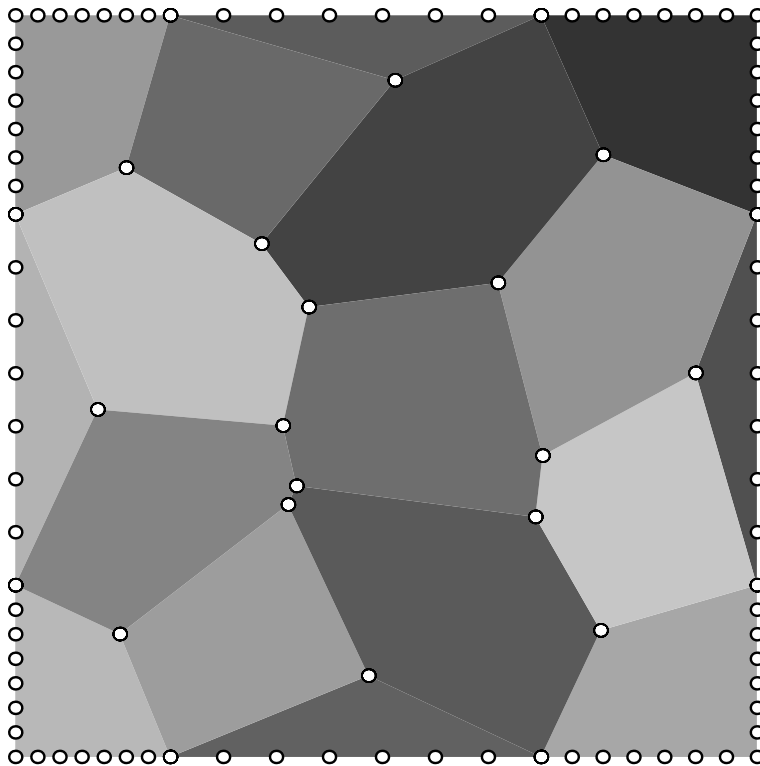


Abbildung 11.9.: Zusätzliche Punkte zur Sicherstellung eines periodischen FE-Netzes

11.2. Numerische Analysen

Das gemäß Abb. 11.10 diskretisierte RVE zur Simulation des Verhaltens eines Polykristalls ergab für die Voraussetzungen eines einaxialen Zugs (siehe dazu auch 10.2 auf S. 165, hier lediglich der Belastungspfad), einer kubisch–tetragonalen Transformation, eines Evolutionsstyps Tresca sowie (8.2) auf S. 81 für die Versuchsparameter die in den Abb. 11.11 und 11.12 dargestellten Resultate bezüglich der effektiven Spannung $\bar{\sigma}_{11}$ bzw. der Volumenfraktionen relevanter Martensitvarianten in Abhängigkeit des Belastungsparameters κ . Erneut deuten die Buchstaben in Abb. 11.11 auf markante Zustände des RVEs hin, welche in den Abb. 11.13 bis 11.17 hinsichtlich der Verteilung von Martensitvarianten verdeutlicht werden. Schließlich zeigen die Abb. 11.28 bis 11.30 exemplarisch die Spannungsfelder für einen dieser Zustände.

Gegenüber der Ergebnisse, welche sich aus den Analysen der Ausscheidungsteilchen ergaben, ist ein deutlicher Unterschied im Verlauf der effektiven Spannungen zu erkennen. Die Initiierung der Phasenübergänge ist hier durch eine abrupte Veränderung im Spannungsverlauf gekennzeichnet. Sobald die ersten, „günstig“ ausgerichteten Körner beginnen zu transformieren, nimmt die Steifigkeit des RVEs schlagartig ab. Im weiteren Verlauf bilden sich Martensit–Inseln in diesen Körnern, welche zunächst bis zu einem gewissen Grad „durchtransformieren“, bevor die Phasenübergänge auch auf andere Körner übergreifen. Die effektive Spannung folgt einem gleichmäßig ansteigendem Pfad, die Steifigkeit des RVEs bleibt annähernd konstant und weicht deutlich von einem horizontal verlaufenden Plateau ab. Erst gegen Ende der kompletten Transformation geht der Verlauf der Spannungen in einen sanft ansteigenden Bereich über, bis schließlich das gesamte Polykristall einen martensitischen Zustand aufweist. Die wenigen Stellen in Abb. 11.17, die noch nicht vollständig umgewandelt sind, wären sehr wahrscheinlich bei einer etwas höher gewählten maximalen Belastung noch vollkommen in Martensit transformiert. Die Spannungsfelder für den Zustand *c* (Verhältnis Austenit/Martensit ca. 1/1) lassen eine deutliche Abweichung zu einer homogenen Verteilung erkennen, wie sie bspw. bei einer Reuss–Approximation gegeben wäre.

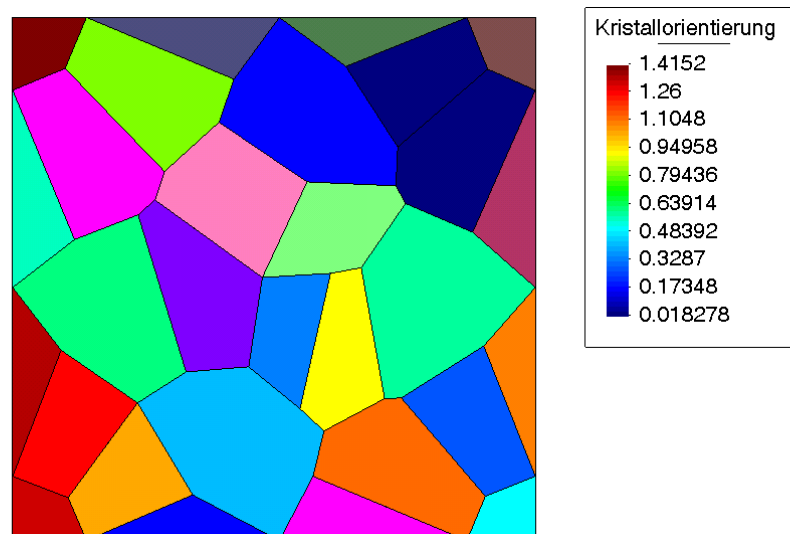
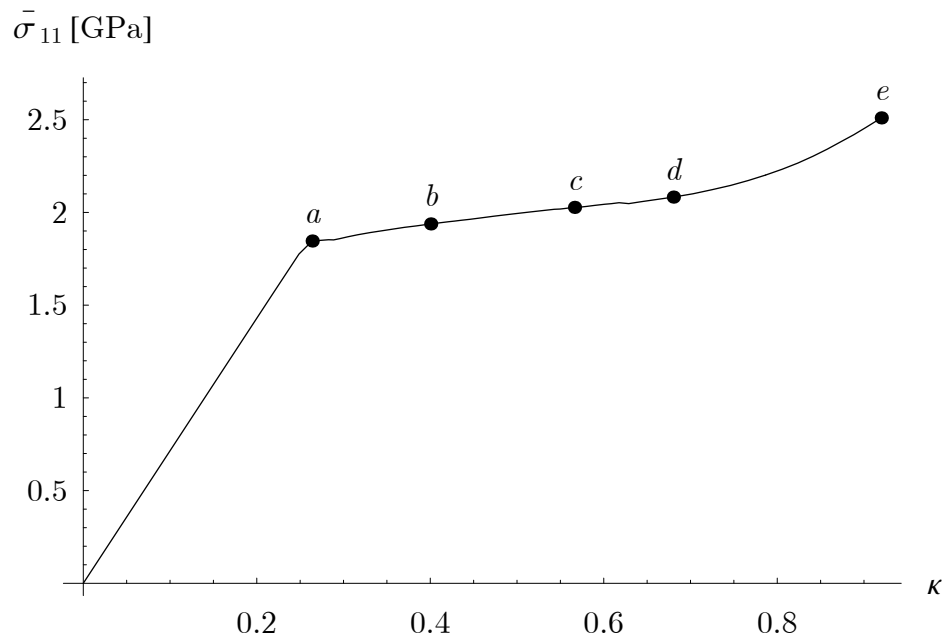
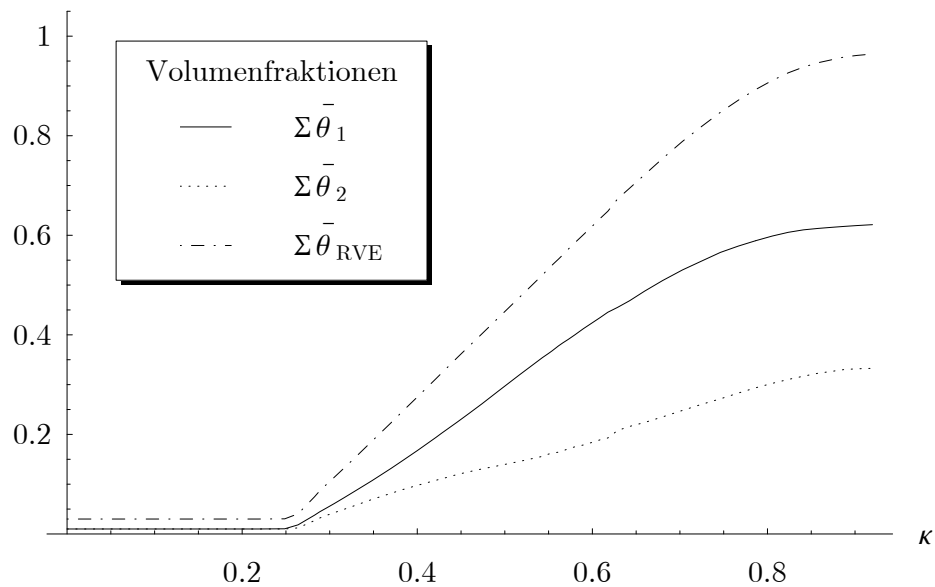


Abbildung 11.10.: Verteilung der Kristallorientierungen im Polykristall

Abbildung 11.11.: Effektive Spannung $\bar{\sigma}_{11}$ des PolykristallsAbbildung 11.12.: Entwicklung der Volumenfraktionen $\bar{\theta}_1$, $\bar{\theta}_2$ sowie des gesamten Martensitanteils

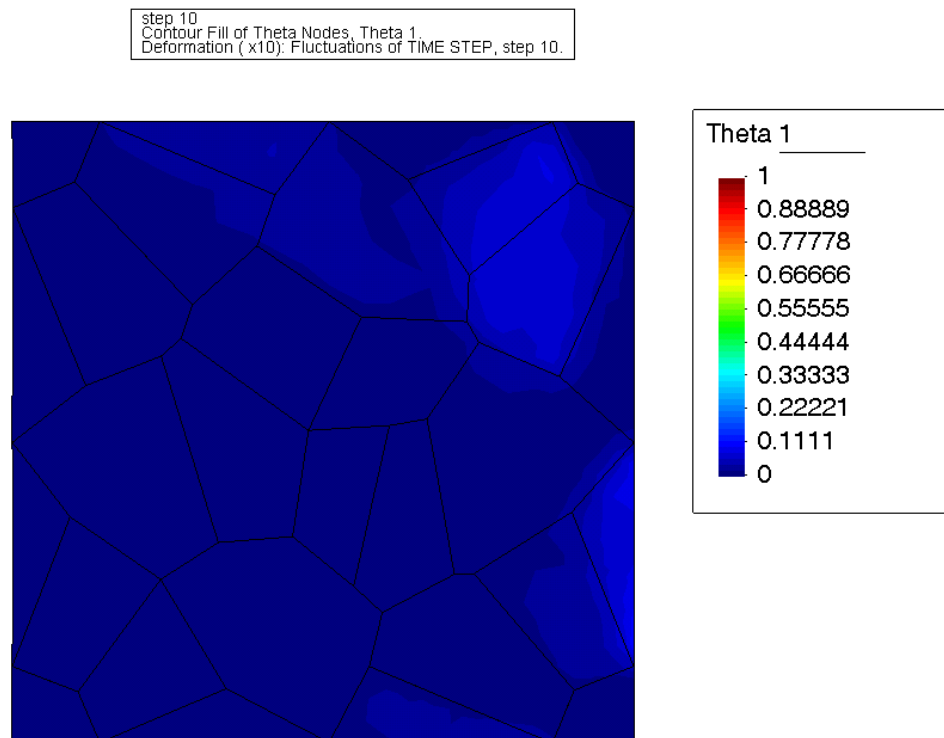


Abbildung 11.13.: Verteilung Martensit-Variante 1 innerhalb des Polykristalls im Zustand a

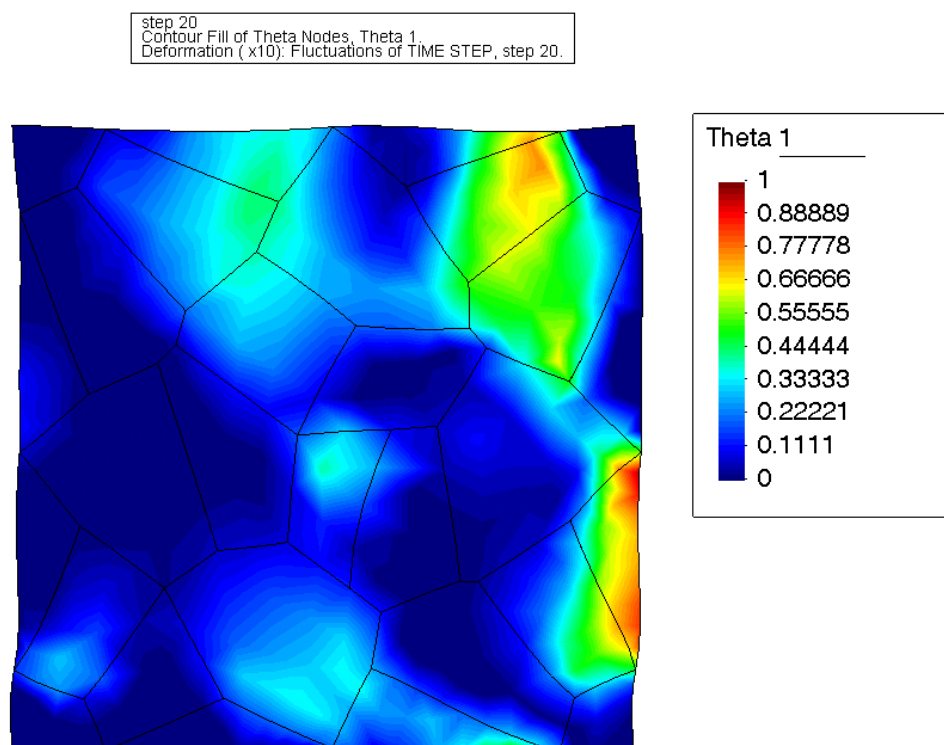


Abbildung 11.14.: Verteilung Martensit-Variante 1 innerhalb des Polykristalls im Zustand
b

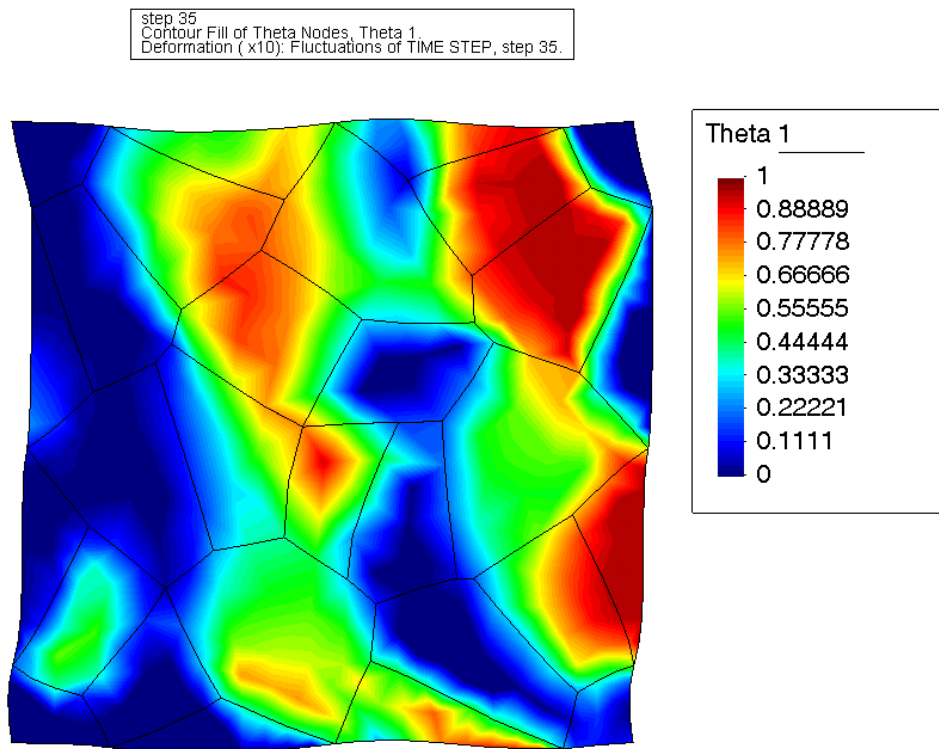


Abbildung 11.15.: Verteilung Martensit–Variante 1 innerhalb des Polykristalls im Zustand c

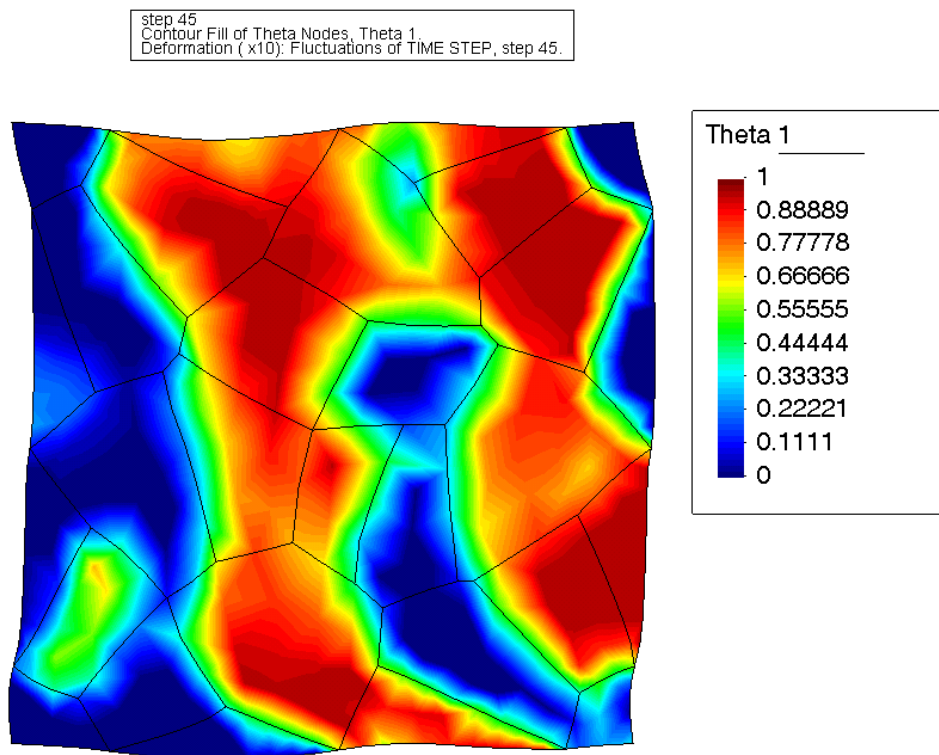


Abbildung 11.16.: Verteilung Martensit–Variante 1 innerhalb des Polykristalls im Zustand d

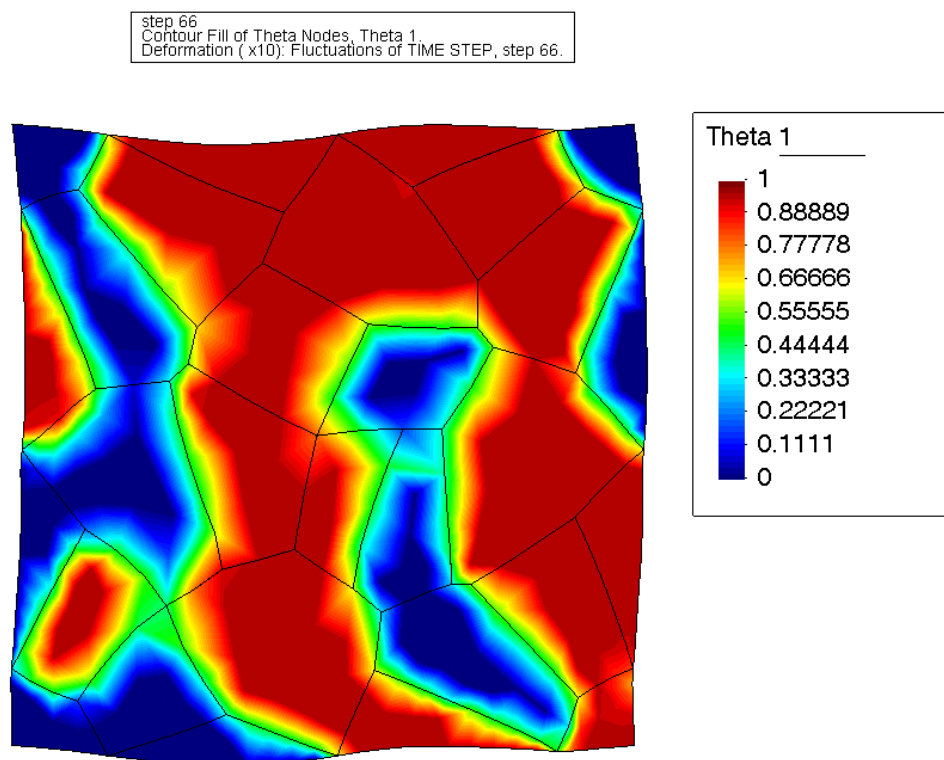


Abbildung 11.17.: Verteilung Martensit–Variante 1 innerhalb des Polykristalls im Zustand e

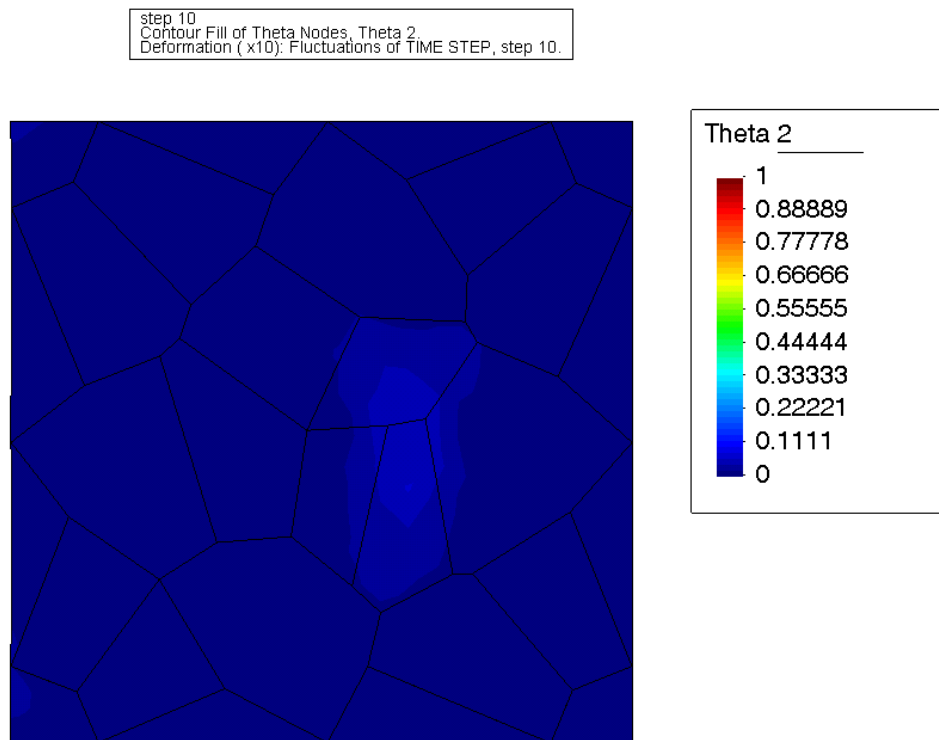
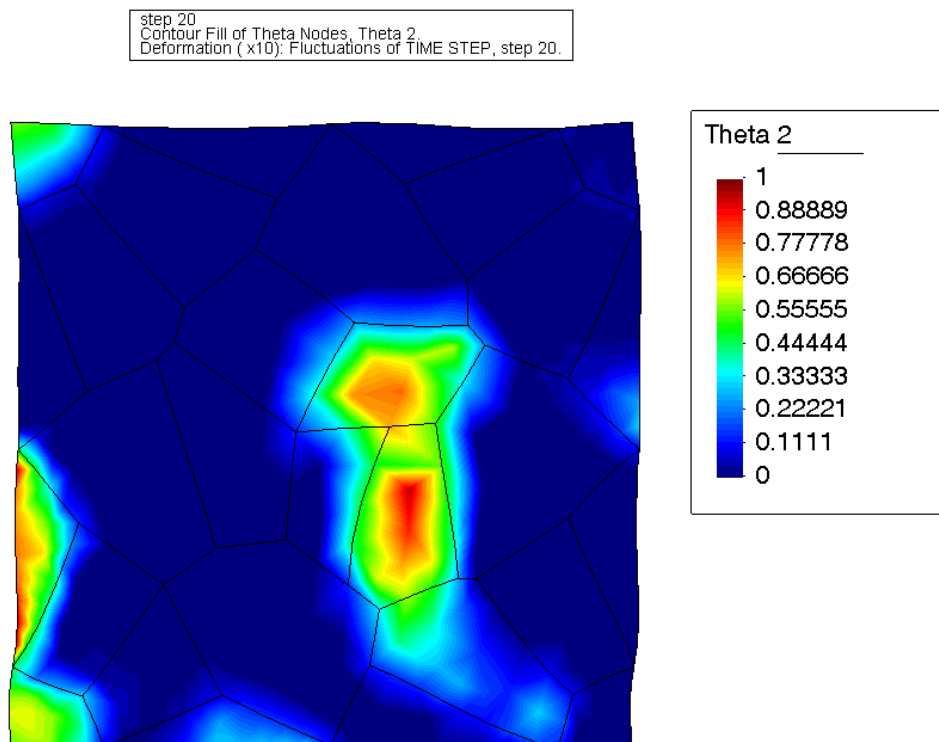


Abbildung 11.18.: Verteilung Martensit–Variante 2 innerhalb des Polykristalls im Zustand a

Abbildung 11.19.: Verteilung Martensit–Variante 2 innerhalb des Polykristalls im Zustand
b

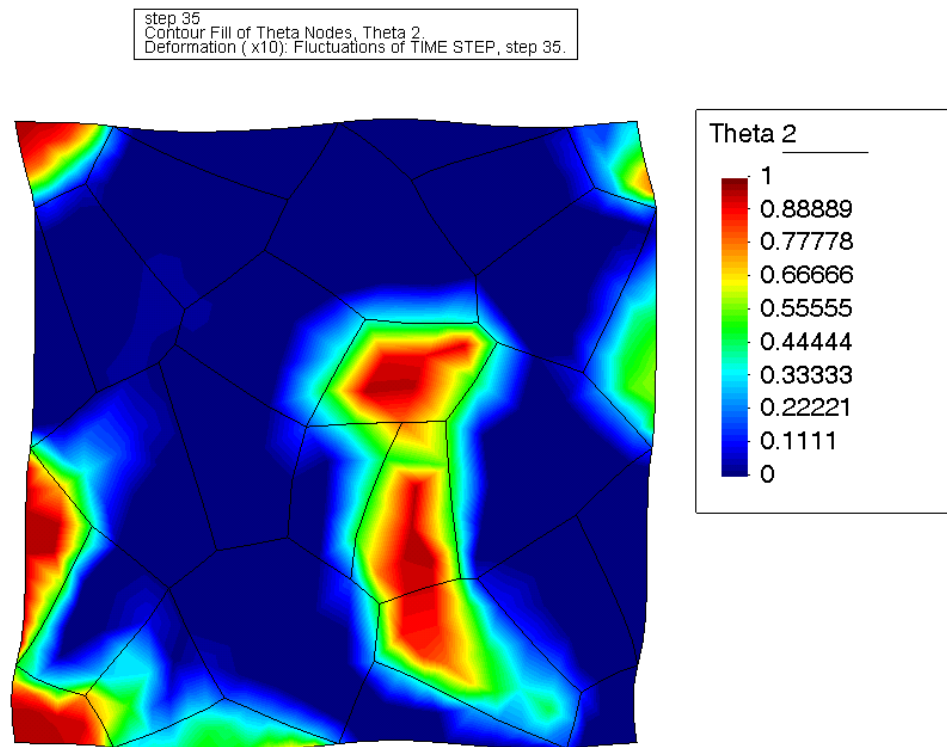


Abbildung 11.20.: Verteilung Martensit–Variante 2 innerhalb des Polykristalls im Zustand c

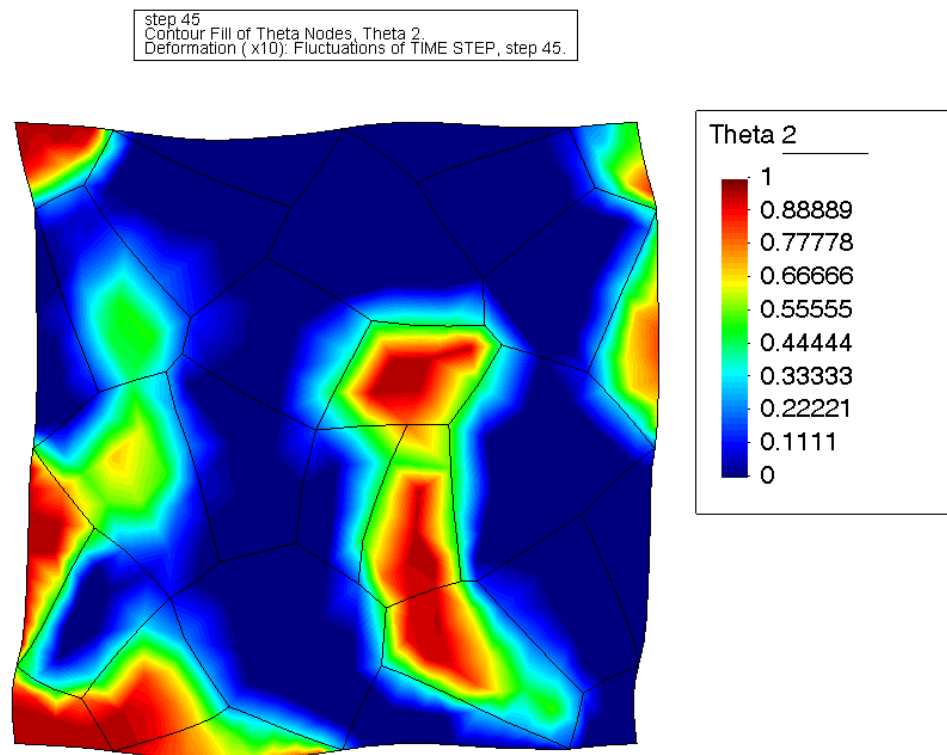


Abbildung 11.21.: Verteilung Martensit–Variante 2 innerhalb des Polykristalls im Zustand d

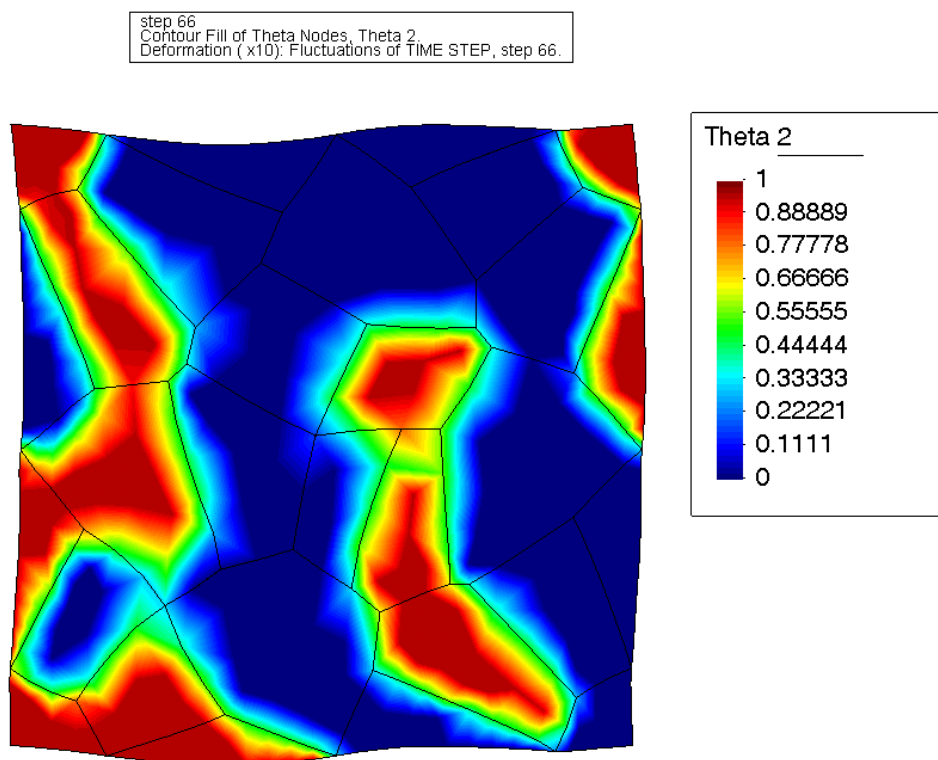


Abbildung 11.22.: Verteilung Martensit–Variante 2 innerhalb des Polykristalls im Zustand e

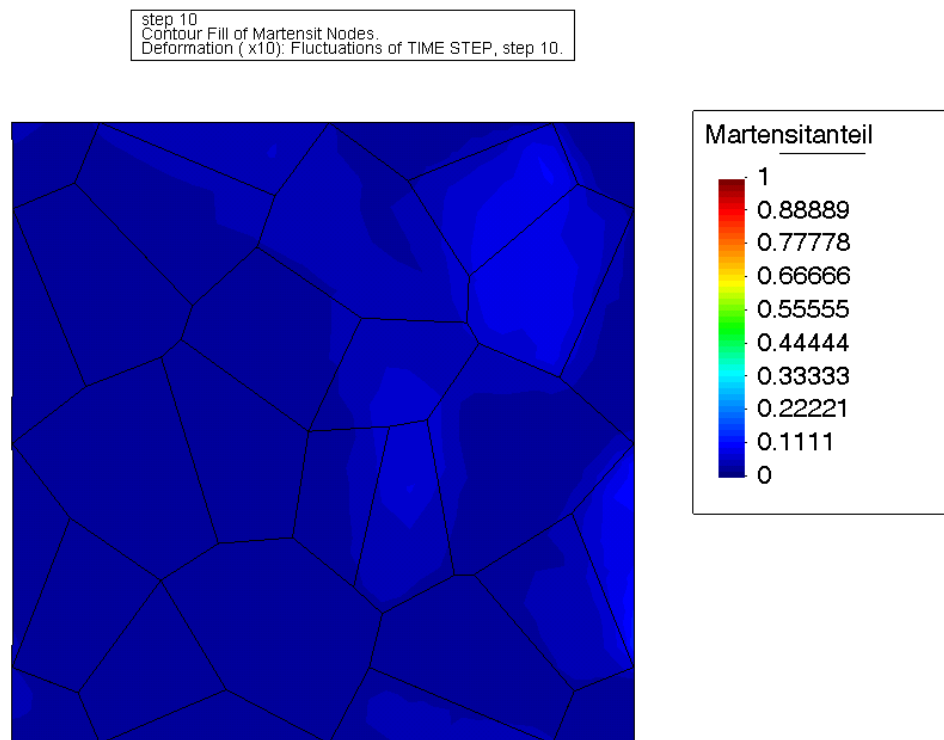


Abbildung 11.23.: Verteilung des gesamten Martensits innerhalb des Polykristalls im Zustand a

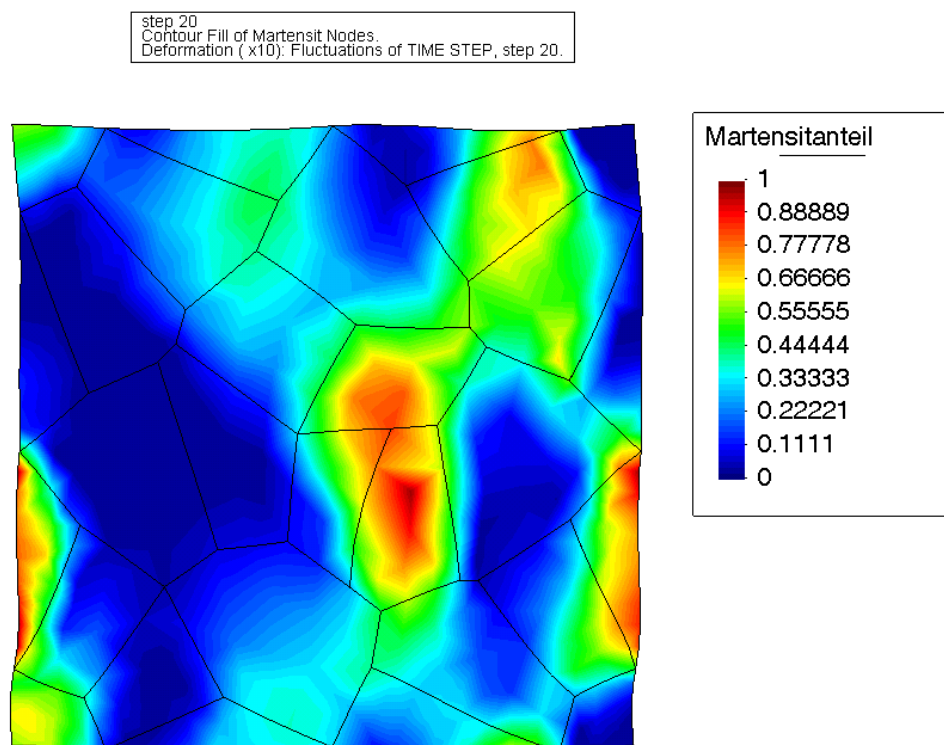


Abbildung 11.24.: Verteilung des gesamten Martensits innerhalb des Polykristalls im Zustand b

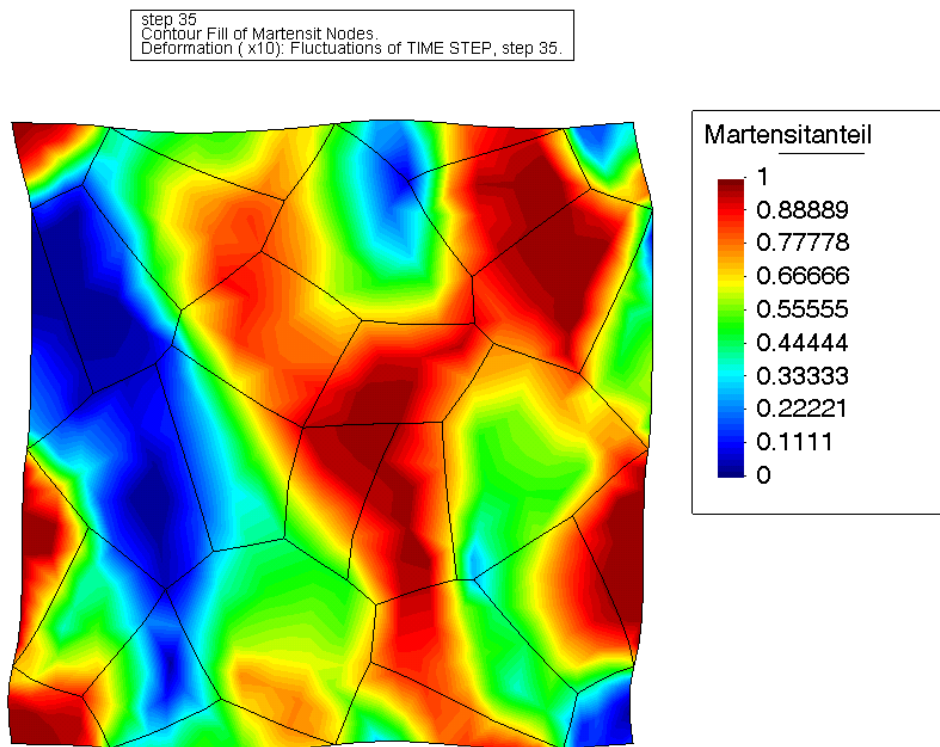


Abbildung 11.25.: Verteilung des gesamten Martensits innerhalb des Polykristalls im Zustand c

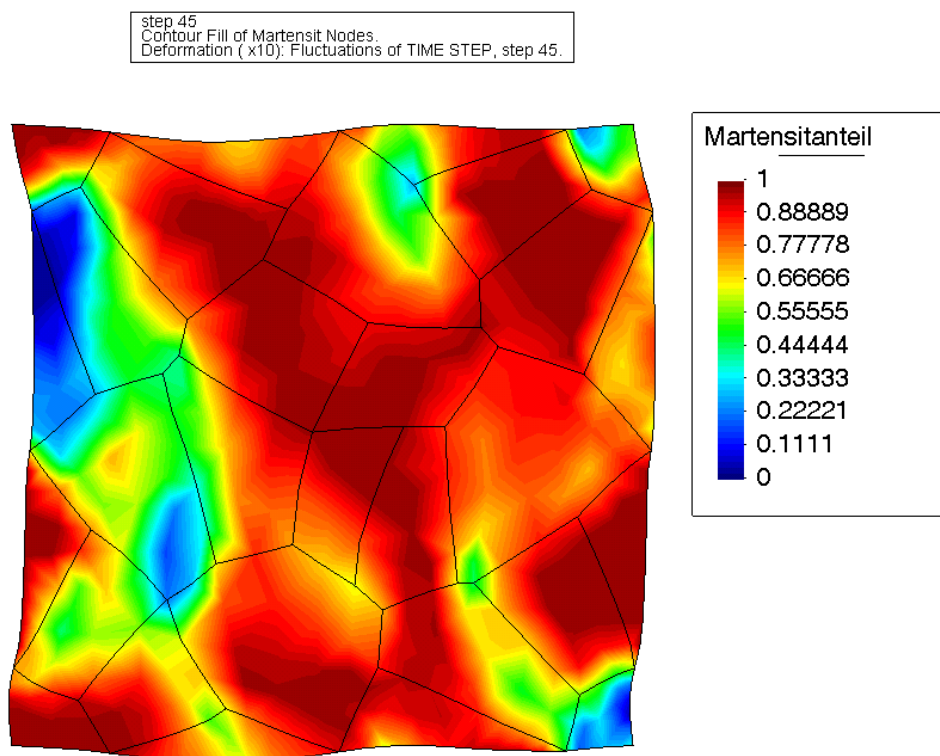


Abbildung 11.26.: Verteilung des gesamten Martensits innerhalb des Polykristalls im Zustand d

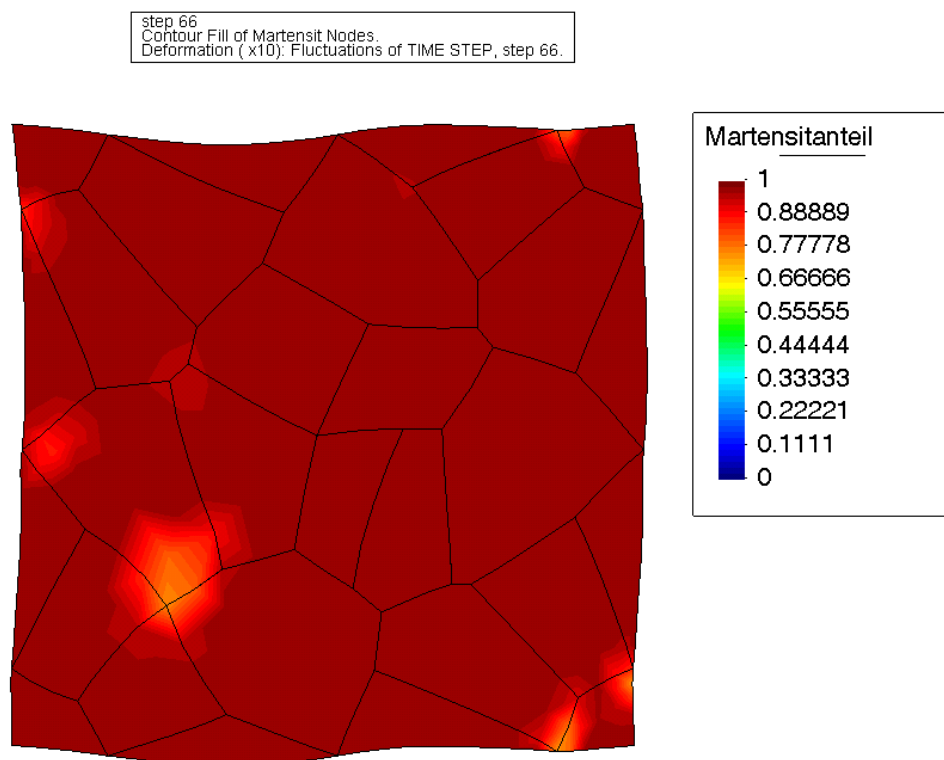
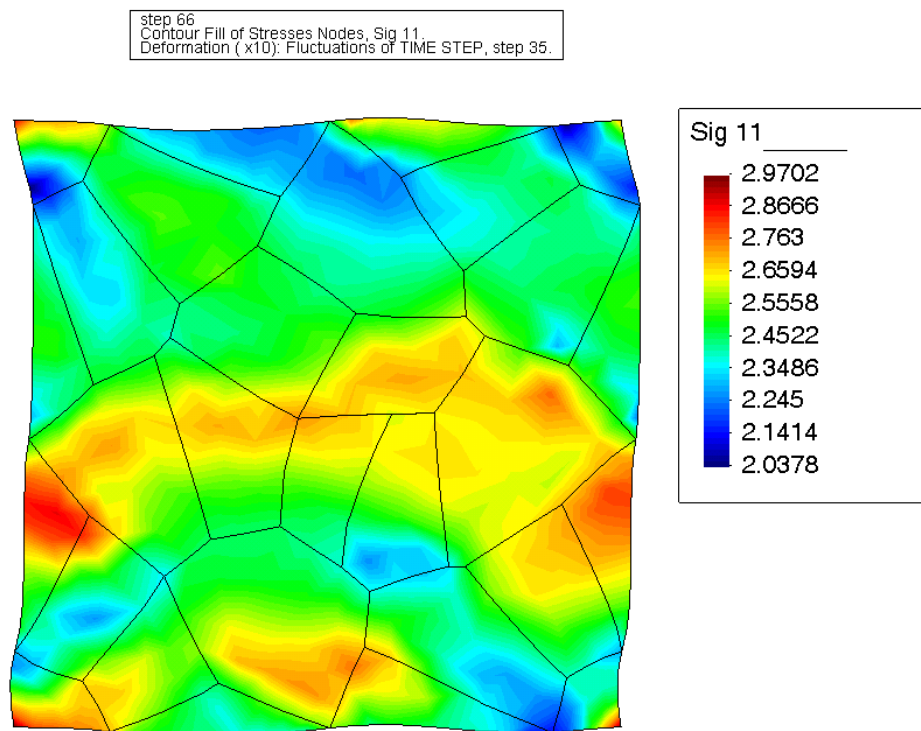
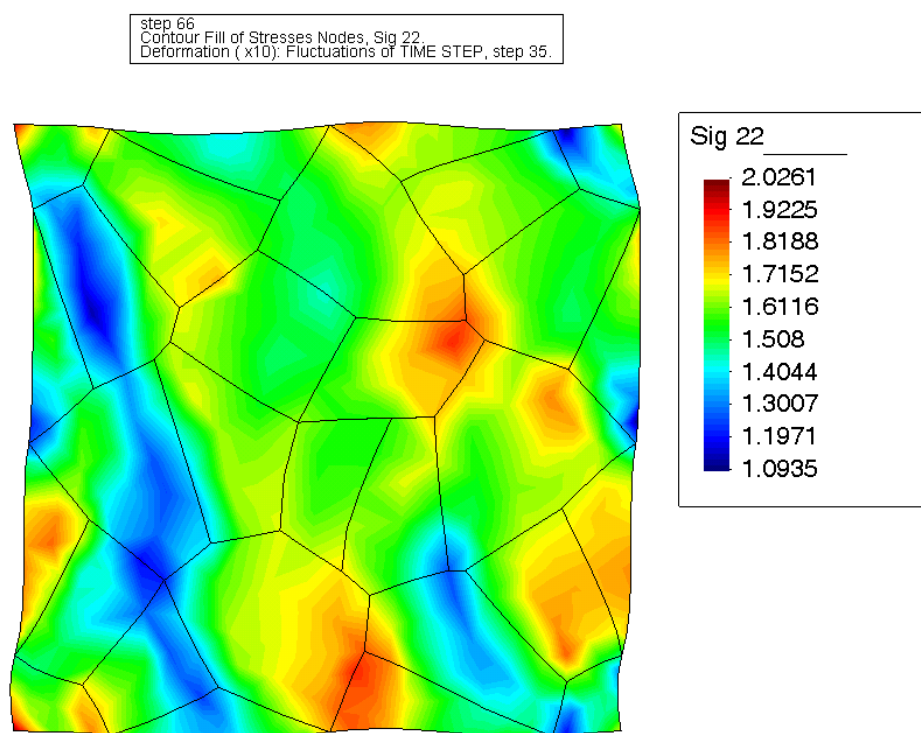


Abbildung 11.27.: Verteilung des gesamten Martensits innerhalb des Polykristalls im Zustand e

Abbildung 11.28.: Spannungsfeld σ_{11} innerhalb des Polykristalls im Zustand cAbbildung 11.29.: Spannungsfeld σ_{22} innerhalb des Polykristalls im Zustand c

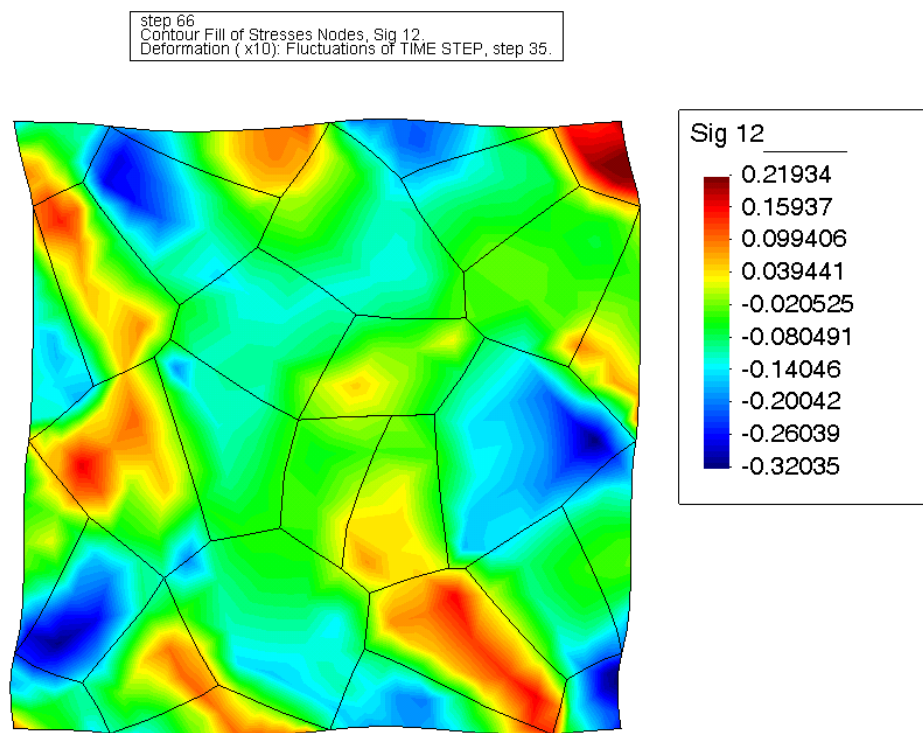


Abbildung 11.30.: Spannungsfeld σ_{12} innerhalb des Polykristalls im Zustand c

12. Weitere Anwendungen des Multiskalen–Modells

Im Rahmen der zuvor dargelegten Modellierung der in einer FGL–Matrix eingebetteten Ni_4Ti_3 –Ausscheidung sowie des Polykristalls ergaben sich zwei weitere grundlegende Anwendungen der Multiskalen–FEM, welche aus rein mechanischer aber auch materialwissenschaftlicher Hinsicht Relevanz besitzen.

12.1. Mikrorisse

Im ersten Beispiel sei ein aus einer Formgedächtnislegierung bestehendes RVE betrachtet, in dessen Mitte eine geometrische Zäsur einer bestimmten Länge besteht. Für die in Abb. 12.1 dargestellte Umsetzung mit Hilfe der FEM bedeutet dies konkret, dass entlang einer Linie Knoten ohne Zusammenhang doppelt definiert werden. Diese Linie wird hier als Art unbelasteter Riss angesehen.

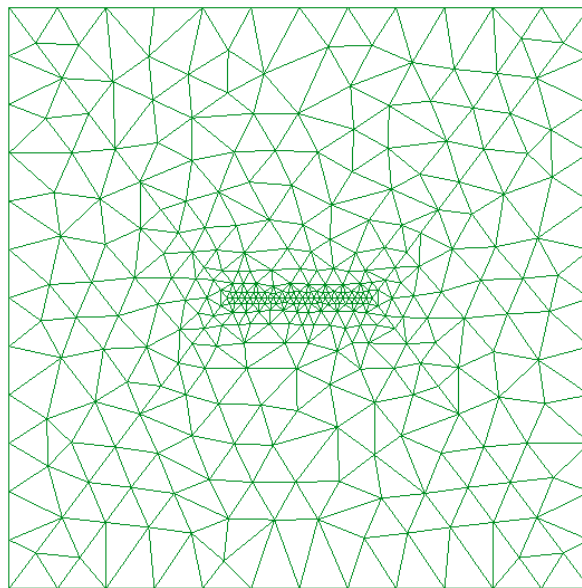


Abbildung 12.1.: FE–Diskretisierung eines RVEs mit innen liegendem Riss

Für einen vorgegebenen einaxialen Zug der Form $\bar{\varepsilon}_{22} = \kappa(t) 0.055$ (alle anderen Dehnungen gleich Null), tetragonale Martensitvarianten, Evolutionstyp Tresca und des weiteren identische Parameter zu denen der vorherigen Abschnitte wurden für diese *Mode I*–artige Belastung die in Abb. 12.2 sowie 12.3 gezeigten Resultate hinsichtlich der Entwicklung der effektiven Spannung $\bar{\sigma}_{22}$ respektive der gemittelten Volumenfraktion $\bar{\theta}_2$ in Abhängigkeit der Belastung berechnet.

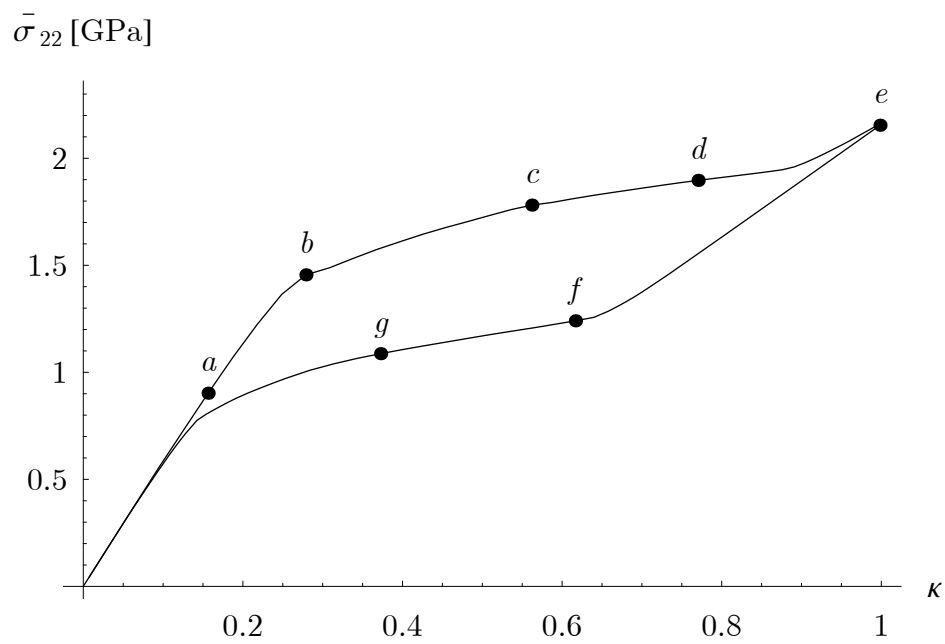


Abbildung 12.2.: Entwicklung der effektiven Spannung $\bar{\sigma}_{22}$ infolge eines Mikrorisses

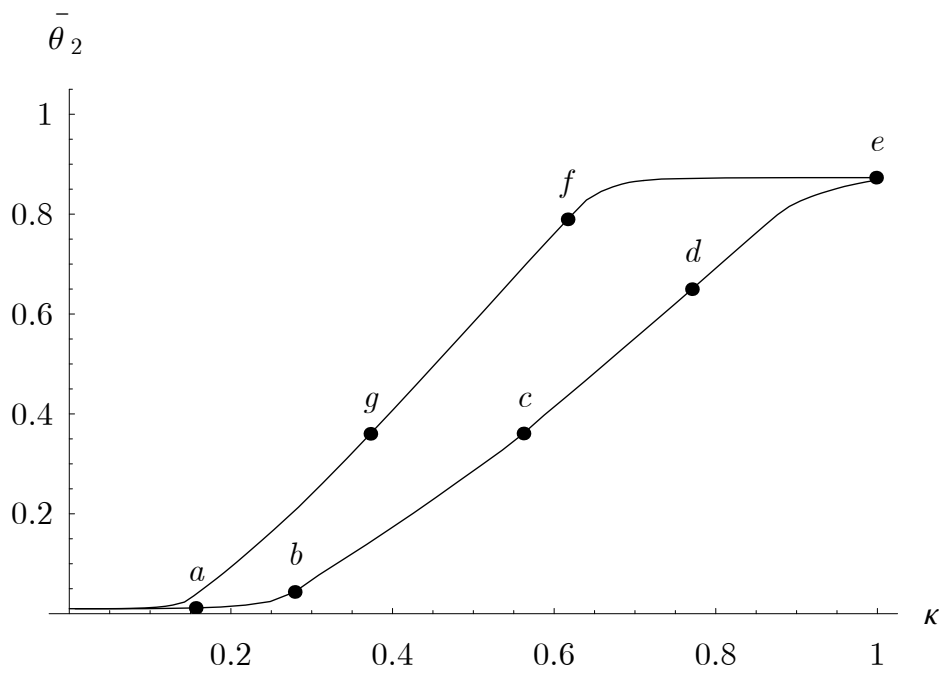


Abbildung 12.3.: Entwicklung des Phasenanteils $\bar{\theta}_2$ infolge eines Mikrorisses

Wie auf Grund der theoretisch vorhandenen Singularität an den Rissspitzen zu erwarten ist, beginnen dort die Phasenübergänge, was sich allerdings auf das Verhalten des RVEs nicht spürbar auswirkt (Bereich bis Zustand *b*, siehe auch Abb. 12.4). Erst zu einem späteren Zeitpunkt ergibt sich eine markante Änderung, die durch eine Minderung der Steifigkeit gekennzeichnet ist (Zustand *b*, siehe auch Abb. 12.5). Die Martensitanteile breiten sich in einer Art Bogen von den Rissspitzen bis zu den Rändern des RVEs aus. Führt man sich erneut periodisch fortgesetzte RVEs vor Augen so bedeutet dies, dass die Risse interagieren. Der Verlauf der effektiven Spannungskomponente $\bar{\sigma}_{22}$ geht sanft in einen monoton steigenden Bereich über, wobei zunächst die anfängliche Transformationszone „durchtransformiert“, bevor auch weitere Bereiche in Martensit übergehen (Zustände *c* bis *e*, siehe auch Abb. 12.6 bis 12.8).

Im Gegensatz zu den vorherigen Analysen lässt sich erkennen, dass der maximale zu erreichende Martensitanteil deutlich unter 100 % liegt, da sich das ergebende Spannungsfeld seitlich der Rissufer „ungünstig“ für Martensitvarianten darstellt und somit eine weitere Transformation verhindert¹. Entsprechend vollzieht sich die Rücktransformation auf einem niedrigeren Spannungsniveau (Zustände *f* und *g*, siehe auch Abb. 12.9 und 12.10).

Die Abb. 12.11 und 12.12 verdeutlichen den Unterschied zu einer rein elastischen Belastung unter Verwendung der elastischen Konstanten des Austenits des Risses anhand des jeweils resultierenden Spannungsfeldes $\bar{\sigma}_{22}$. Die Umwandlung in Martensit bedingt eine homogenere Verteilung der Spannungen und dämpft dabei die maximalen Werte ab. Zusätzlich sei noch erwähnt, dass die Öffnung des Risses *b* in seiner Mitte im Verhältnis von der Lösung mit vorhandener Formgedächtnislegierung zur rein elastischen Lösung

$$\frac{b_{FGL}}{b_{el}} \approx \frac{0.0283}{0.0297} = 0.9529 \quad (12.1)$$

beträgt, die Phasentransformationen demnach die Rissöffnung um ca. 5 % verringern.

¹In der Nähe der Rissspitzen bilden sich zwar noch Bereiche mit Martensit-Variante 1 aus, die in ihrer Ausdehnung jedoch marginal sind und das gesamte Materialverhalten nicht beeinflussen

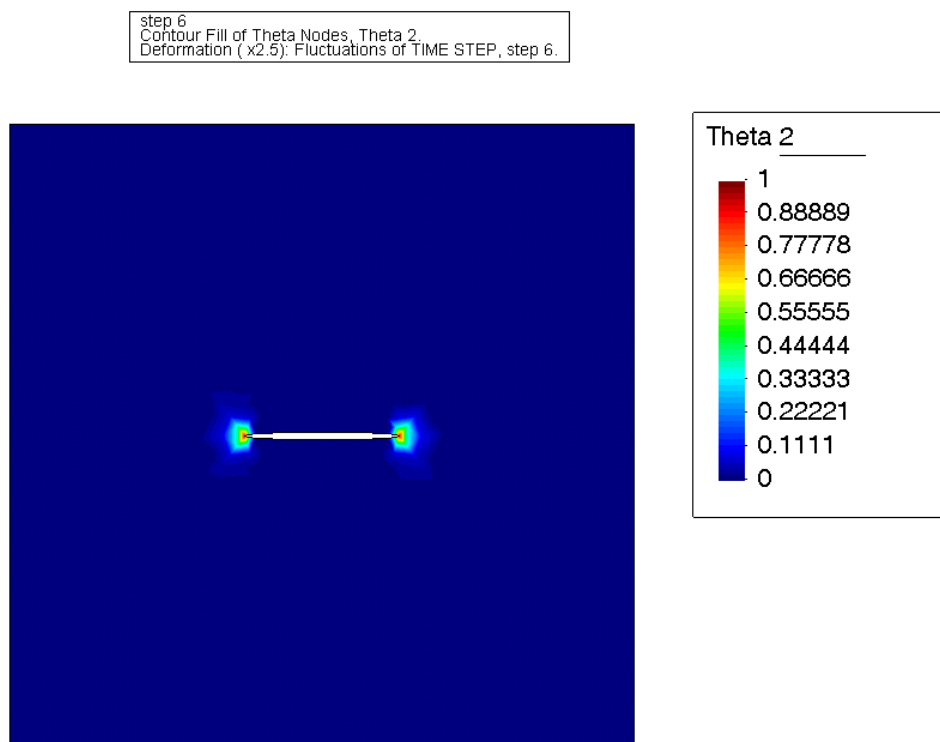


Abbildung 12.4.: Verteilung Martensit-Variante 2 infolge eines Mikrorisses im Zustand a

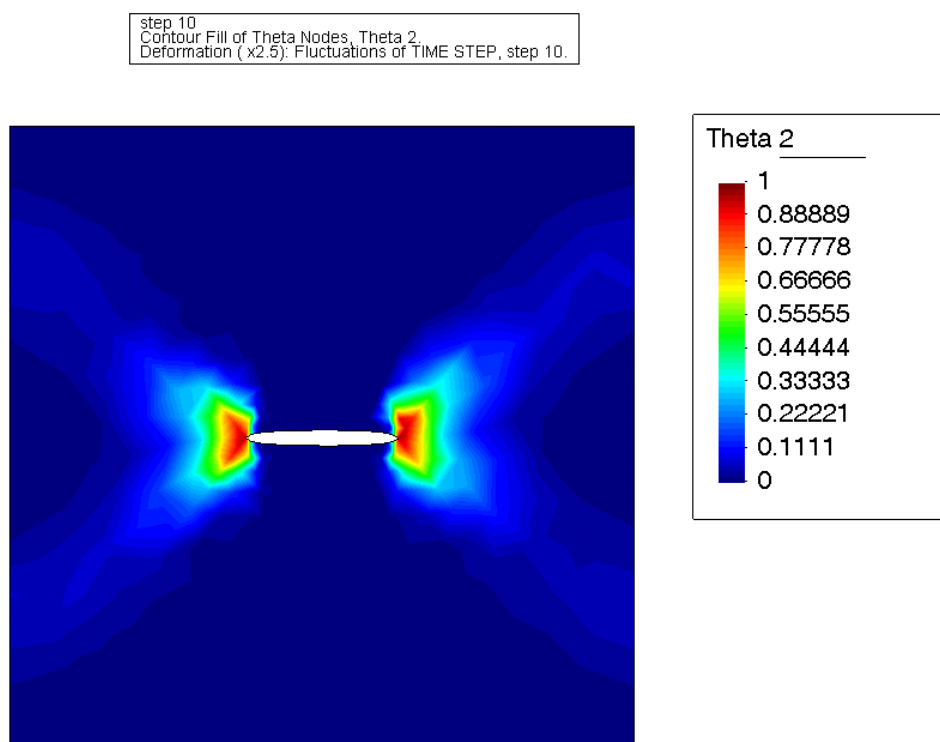


Abbildung 12.5.: Verteilung Martensit-Variante 2 infolge eines Mikrorisses im Zustand b

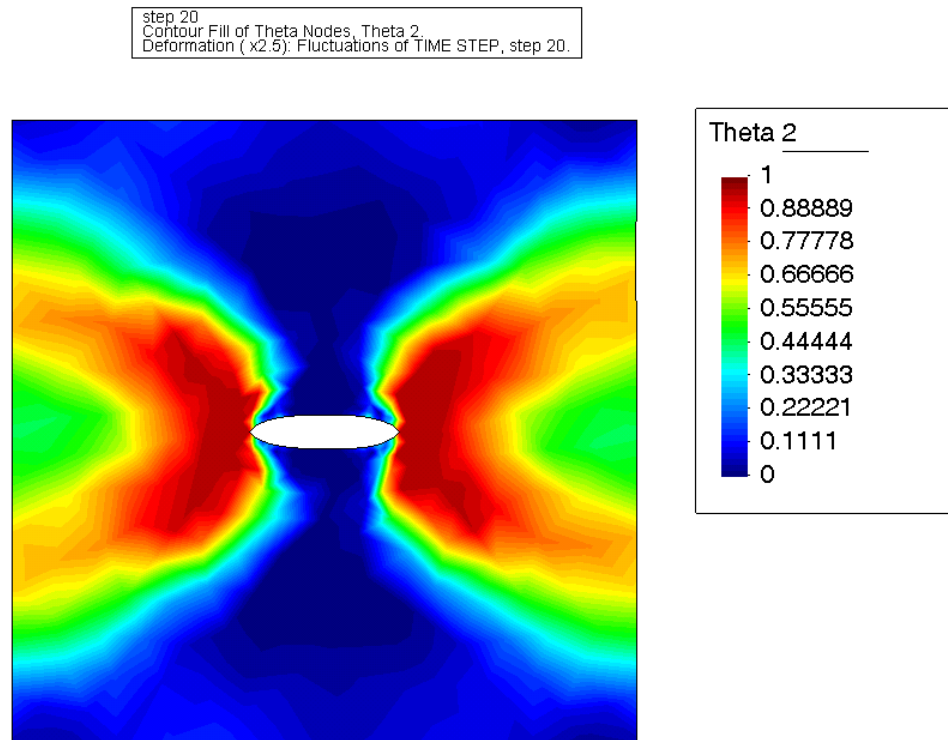


Abbildung 12.6.: Verteilung Martensit–Variante 2 infolge eines Mikrorisses im Zustand c

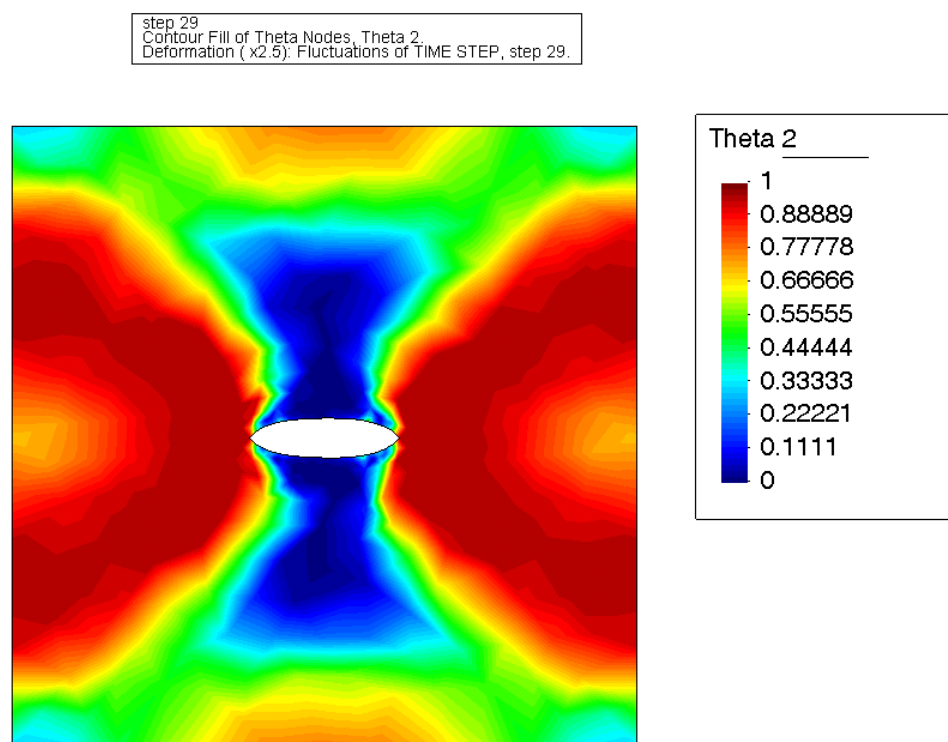


Abbildung 12.7.: Verteilung Martensit–Variante 2 infolge eines Mikrorisses im Zustand d

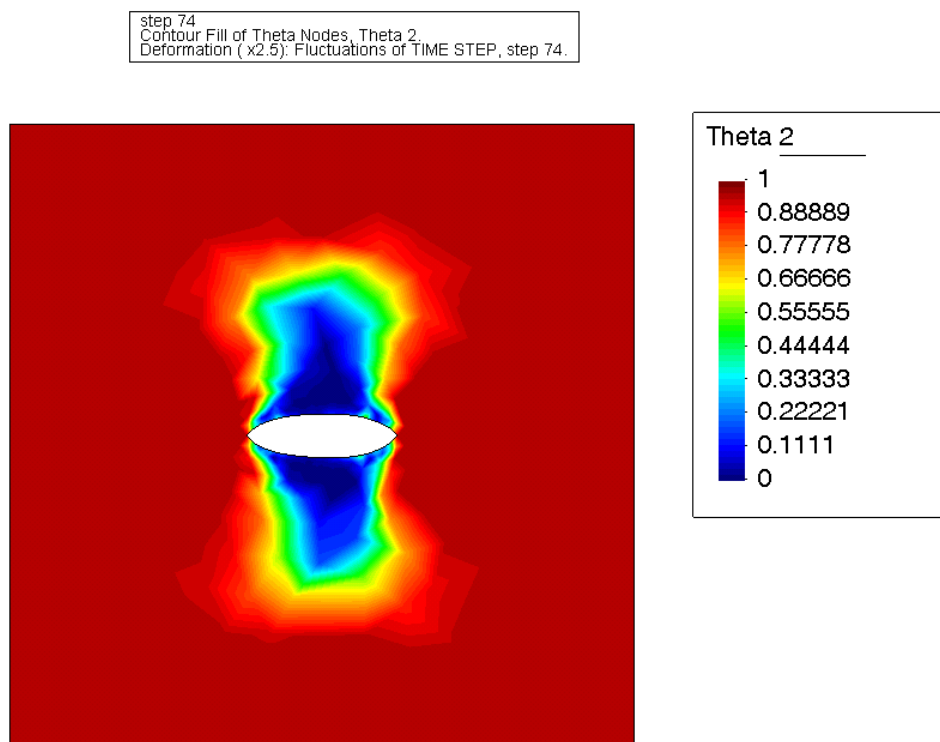


Abbildung 12.8.: Verteilung Martensit-Variante 2 infolge eines Mikrorisses im Zustand e

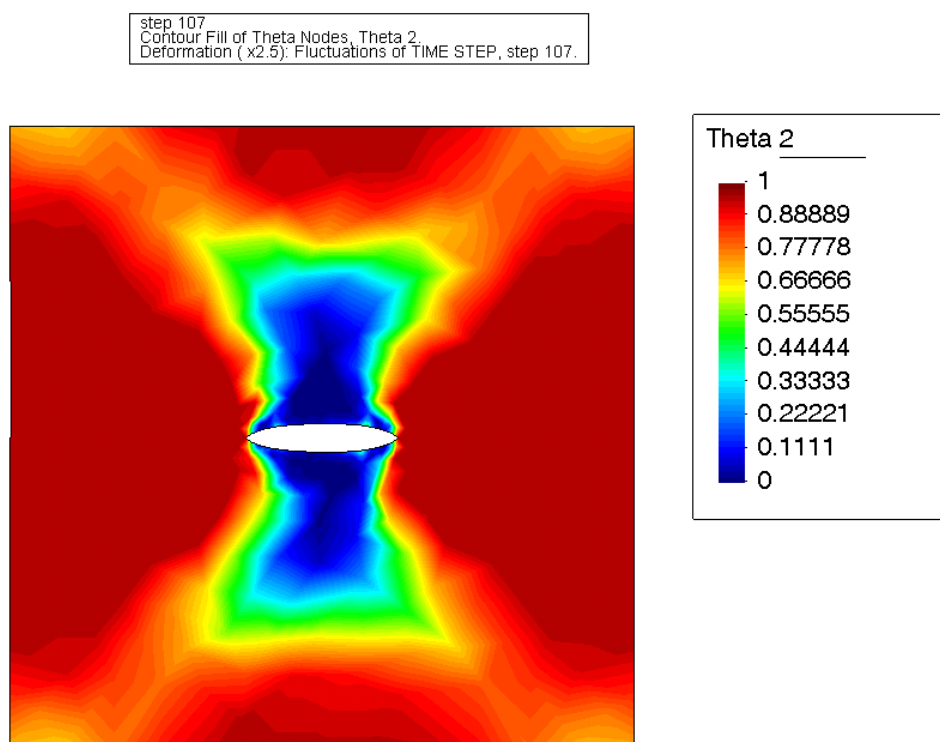


Abbildung 12.9.: Verteilung Martensit-Variante 2 infolge eines Mikrorisses im Zustand f

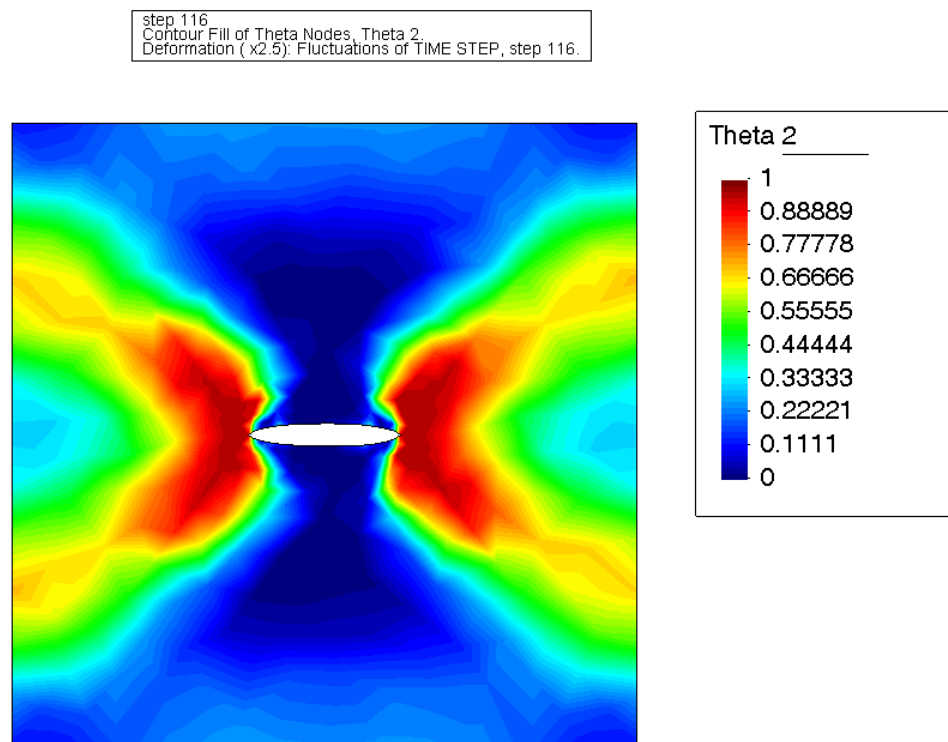


Abbildung 12.10.: Verteilung Martensit–Variante 2 infolge eines Mikrorisses im Zustand g

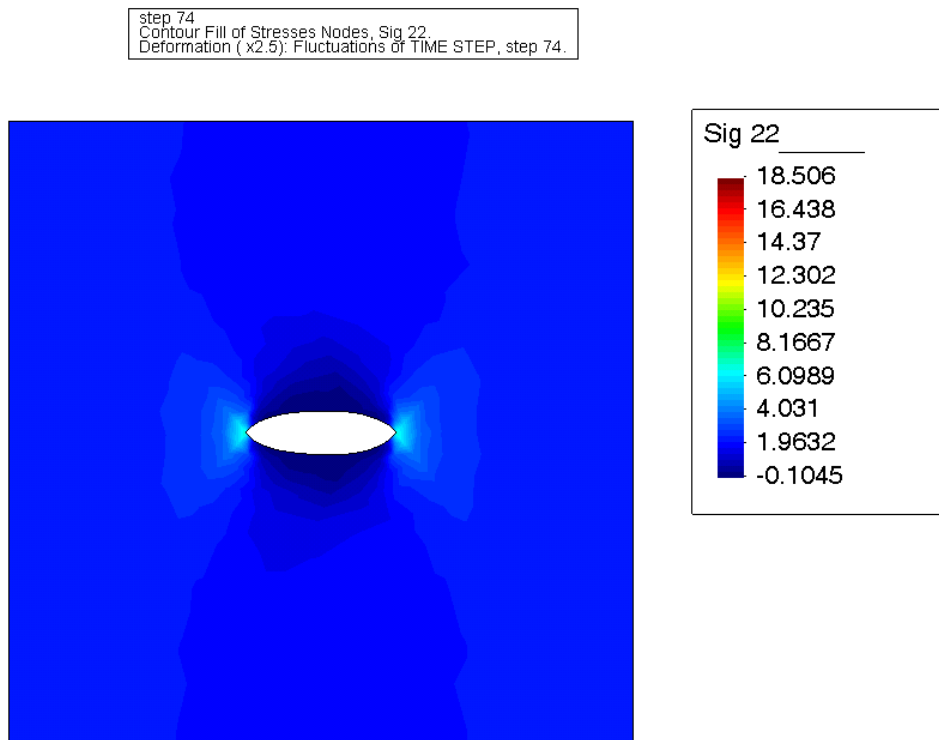


Abbildung 12.11.: Verteilung der effektiven Spannung $\bar{\sigma}_{22}$ infolge eines Mikrorisses im Zustand g

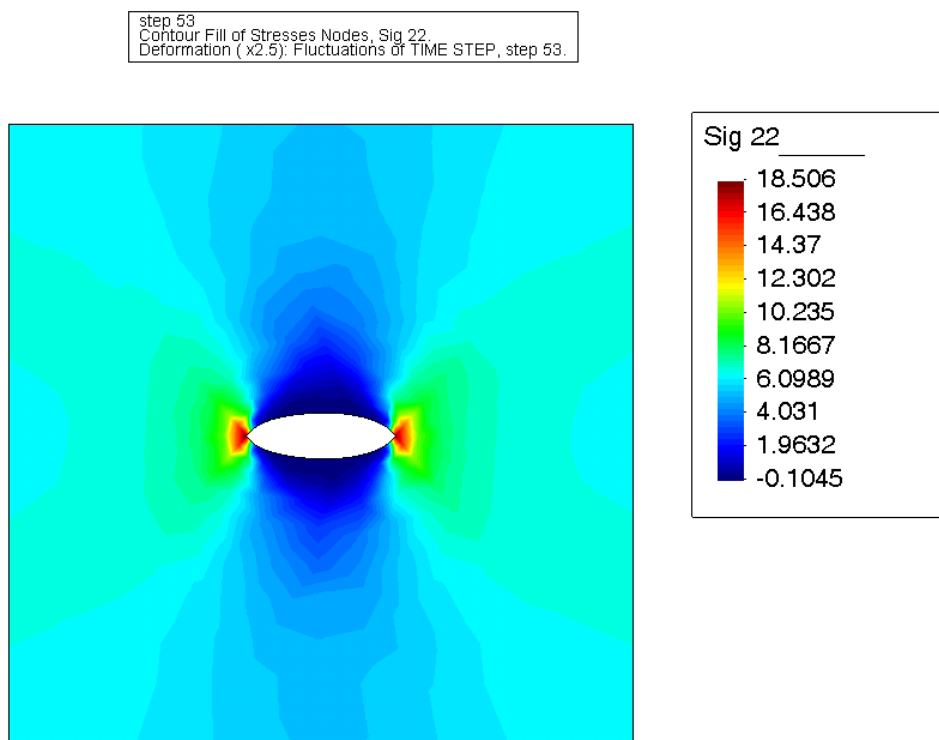


Abbildung 12.12.: Verteilung der effektiven Spannung $\bar{\sigma}_{22}$ infolge eines elastisch belasteten Mikrorisses im Zustand g

12.2. FGL–Inklusion

Durch simples Vertauschen der Materialbereiche bei der Diskretisierung der Ni_4Ti_3 –Ausscheidungen erhält man eine Formgedächtnis–Inklusion, die von einer elastischen Matrix umgeben ist. Diese Anordnung ist z.B. bedeutend für die Simulation sogenannter *funktional gradierter Materialien* (*functionally graded materials*), bei denen bspw. durch eine gezielte geometrische Verteilung von Inklusionen und etwaiger Herbeiführung von Phasentransformationen eine signifikante Verbesserung bestimmter Materialeigenschaften erreicht werden soll. Ein bereits für die Industrie relevantes Beispiel sind die sogenannten *TRIP*–Stähle (*TRansformation Induced Plasticity*), deren Duktilität und Festigkeit durch mit Austenit–Martensit–Transformationen einhergehenden plastischen Zonen verbessert werden. Jaglinski et al. (2007) konnten sogar zeigen, dass Barium–Titanat–Einschlüsse in einer Zinn–Matrix zu einer Steigerung des E–Moduls über die Grenzen der Werte für Diamant hinaus führen können.

Die nachfolgenden Beispiele wurden wiederum für tetragonale Martensitvarianten und den im Rahmen dieser Arbeit üblichen Parametern unter Annahme einer kreisförmigen Inklusion mit einem Volumenanteil von 25 % des gesamten RVEs durchgeführt. Die Konstanten der als elastisch vorausgesetzten Matrix wurden gemäß derer des Martensits gewählt.

Einaxialer Zug

Für einen eingepprägten einaxialen Dehnungszustand $\varepsilon_{11} = \kappa(t) 0.06$ (restliche Komponenten gleich Null) wurden die in den Abb. 12.13 und 12.14 visualisierten Ergebnisse hinsichtlich der effektiven Spannung $\bar{\sigma}_{11}$ bzw. der gemittelte Volumenanteil $\bar{\theta}_1$ der entsprechenden Martensit–Variante (weitere Varianten treten nicht auf) in Abhängigkeit des Belastungsparameters κ berechnet. Das Spannungs–Dehnungs–Verhalten zeigt dabei hier die Besonderheit abrupt ändernder Steifigkeiten auf, da der Spannungsverlauf sowohl im elastischen als auch inelastischen Bereich durch eine Gerade gekennzeichnet ist, wobei diese während der Phasenübergänge eine signifikante Steigung aufweist.

Die räumliche Verteilung der Phasenanteile ist dabei trivial, da die gesamte Inklusion für alle Lastschritte ein homogenes Phasenfeld aufweist. In den Abb. 12.15 bis 12.17 ist jeweils für einen der in Abb. 12.13 markierten Zustände *a* bis *c* das Vektorfeld der Fluktuationen dargestellt. Während die kreisförmige Inklusion auf dem elastischen Pfad immer weiter zu einer vertikal elongierten Ellipse verformt wird, „schlägt“ das Vektorfeld nach einsetzender Phasentransformation um, woraufhin die Inklusion zurück und darüber hinaus in eine horizontal elongierte Ellipse verformt wird. Bemerkenswert hinsichtlich des Fluktuationsfeldes bei vollendetem Phasenübergang sind die „Wirbel“ im jeweiligen Zentrum des geviertelten RVEs.

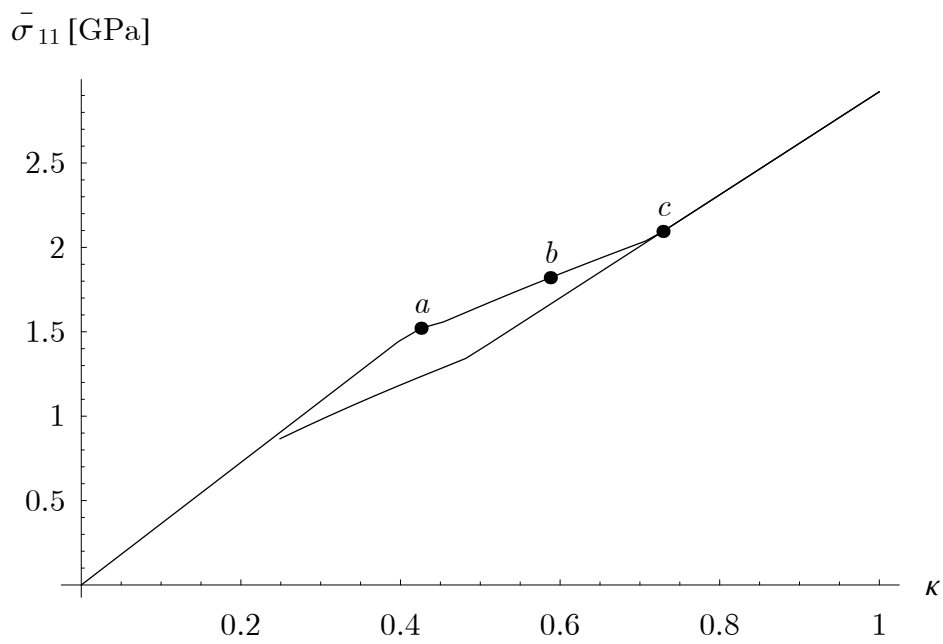


Abbildung 12.13.: Entwicklung der effektiven Spannung $\bar{\sigma}_{11}$ des RVEs mit FGL-Inklusion unter einaxialem Zug

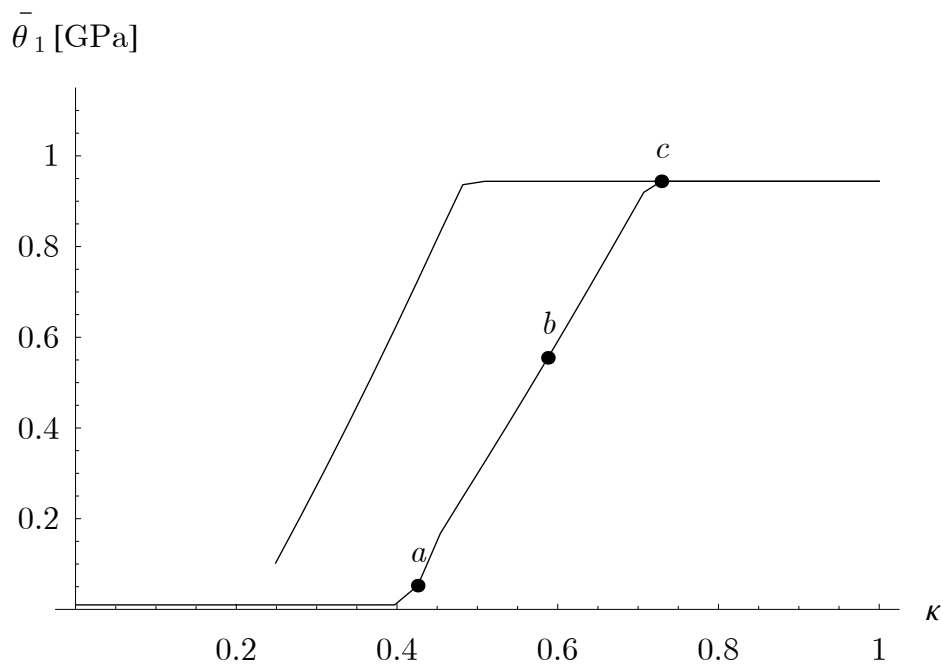


Abbildung 12.14.: Entwicklung des Phasenanteils $\bar{\theta}_1$ des RVEs mit FGL-Inklusion unter einaxialem Zug

step 15
Display Vectors of Fluctuations, |Fluctuations| factor 129.257.
Deformation (x25): Fluctuations of TIME STEP, step 15.

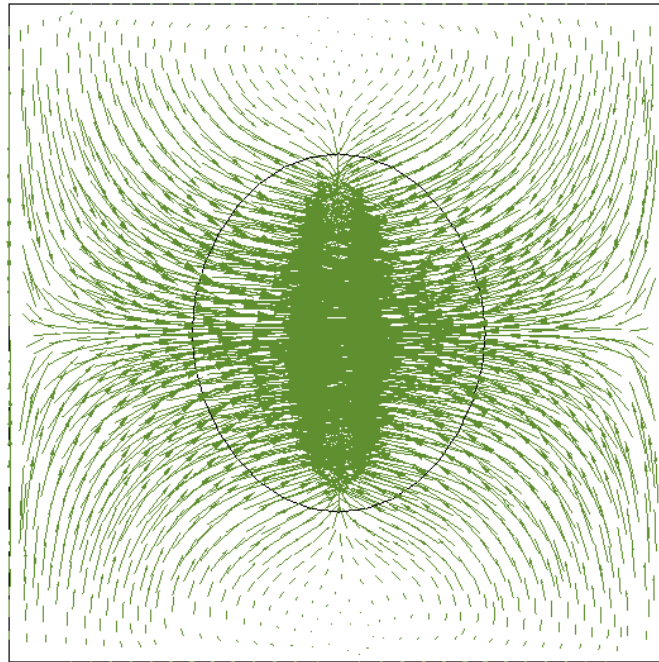


Abbildung 12.15.: Vektorfeld der Fluktuationen im Zustand a

step 21
Display Vectors of Fluctuations, |Fluctuations| factor 129.257.
Deformation (x25): Fluctuations of TIME STEP, step 21.

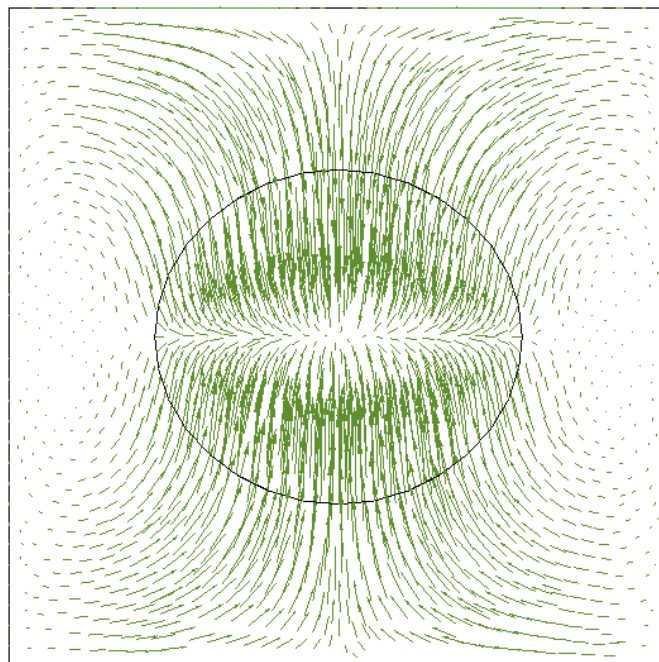


Abbildung 12.16.: Vektorfeld der Fluktuationen im Zustand b

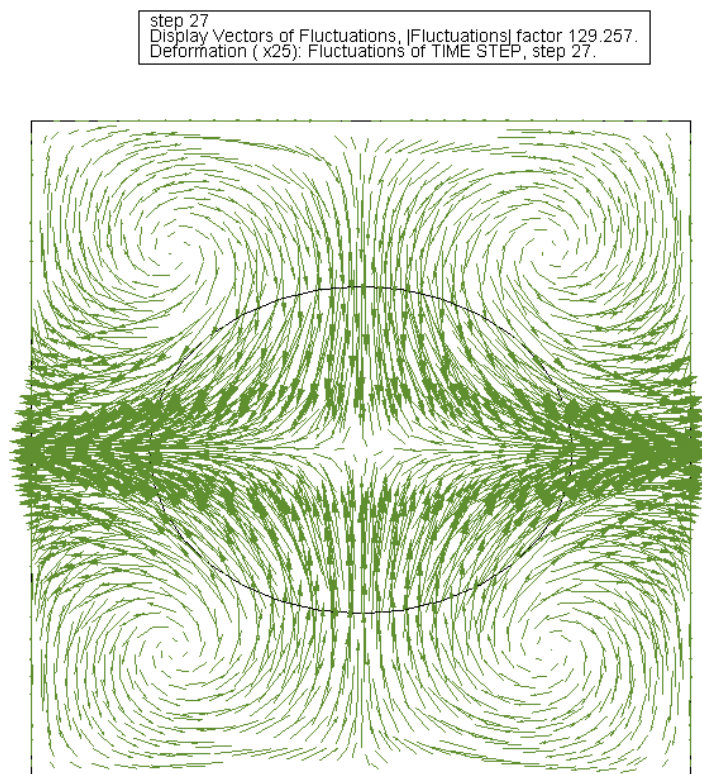


Abbildung 12.17.: Vektorfeld der Fluktuationen im Zustand c

Scherung

Im Gegensatz dazu stellt sich das Verhalten des RVEs unter vorgegebener Scherung $\varepsilon_{12} = \varepsilon_{21} = \kappa(t) 0.11$ vollkommen anders dar. Obwohl die grundlegenden, aus Abb. 12.18 erkenntlichen Charakteristika der Spannungs–Dehnungs–Beziehung gewahrt bleiben, lässt die Entwicklung der gemittelten Volumenfraktionen aus Abb. 12.19 einen deutlichen Unterschied zu den Ergebnissen unter vorgegebenem, einaxialen Zug erkennen. Dabei bestätigt diese FE–Berechnung erneut die erzielte Gleichverteilung des Martensits bei Scherbeanspruchung.

Wie aus den Abb. 12.20 bis 12.28 ersichtlich ist, stellt sich jedoch eine räumlich inhomogene Verteilung der einzelnen Martensit–Varianten ein. Zu Beginn der Umwandlungen transformieren einzelne Bereiche am Rand der Inklusion, im weiteren Verlauf der Belastung nimmt Martensit–Variante 3 eine nahezu homogene Verteilung ein, während die Varianten 1 und 2 komplexe Phasenfelder bilden und zumeist eine dieser bezüglich ihres Phasenanteils verglichen mit der anderen dominiert.

Die Abb. 12.29 bis 12.31 zeigen den Einfluss der Transformation auf das Feld der Spannungskomponente $\bar{\sigma}_{12}$ und lässt erneut erkennen, dass die Spannungen innerhalb der Inklusion konstant sind.

Schließlich stellen die Abb. 12.32 und 12.33 die resultierenden Vektorfelder der Verschiebungs–Fluktuationen respektive der Knotenkräfte dar.

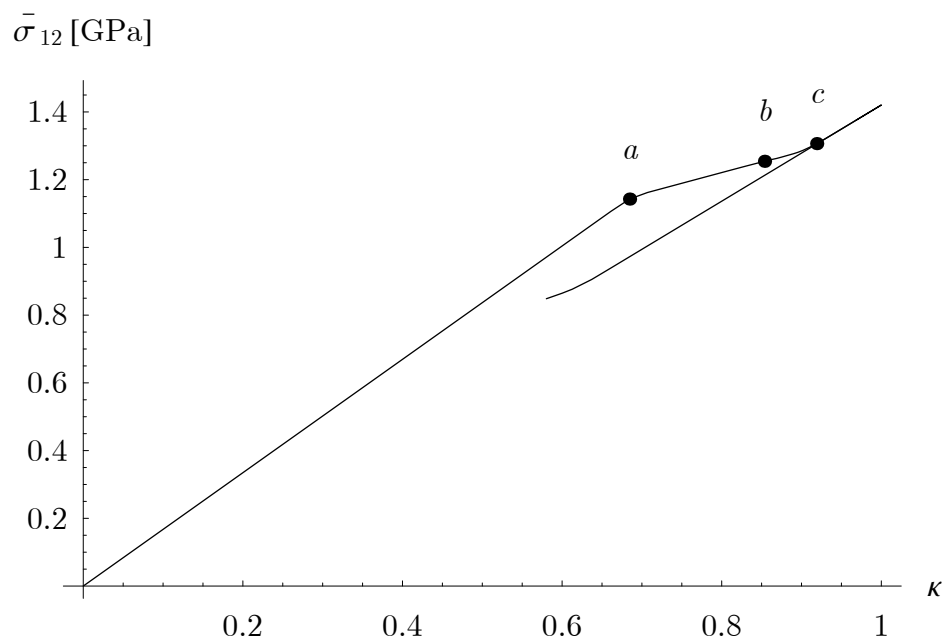


Abbildung 12.18.: Entwicklung der effektiven Spannung $\bar{\sigma}_{12}$ des RVEs mit FGL-Inklusion unter Scherung

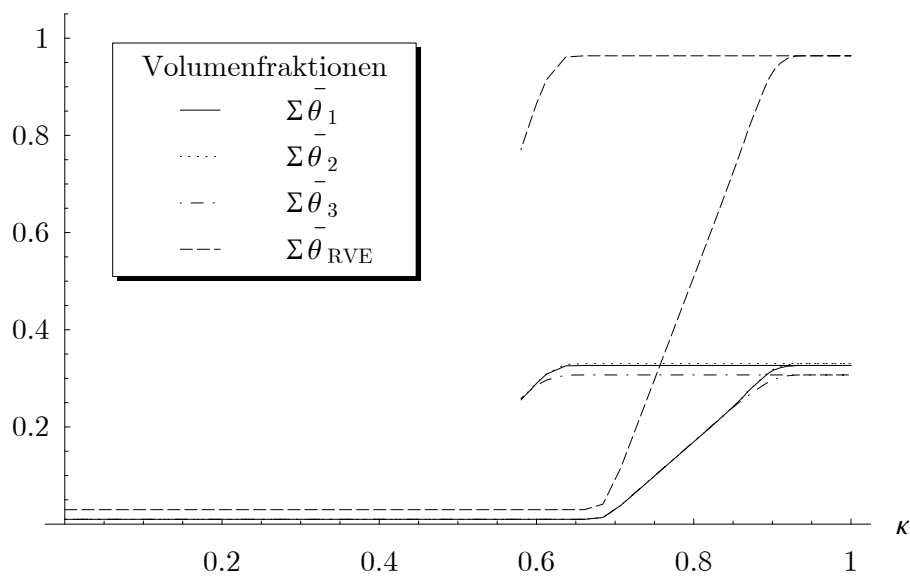


Abbildung 12.19.: Entwicklung der Martensitanteile des RVEs mit FGL-Inklusion unter Scherung

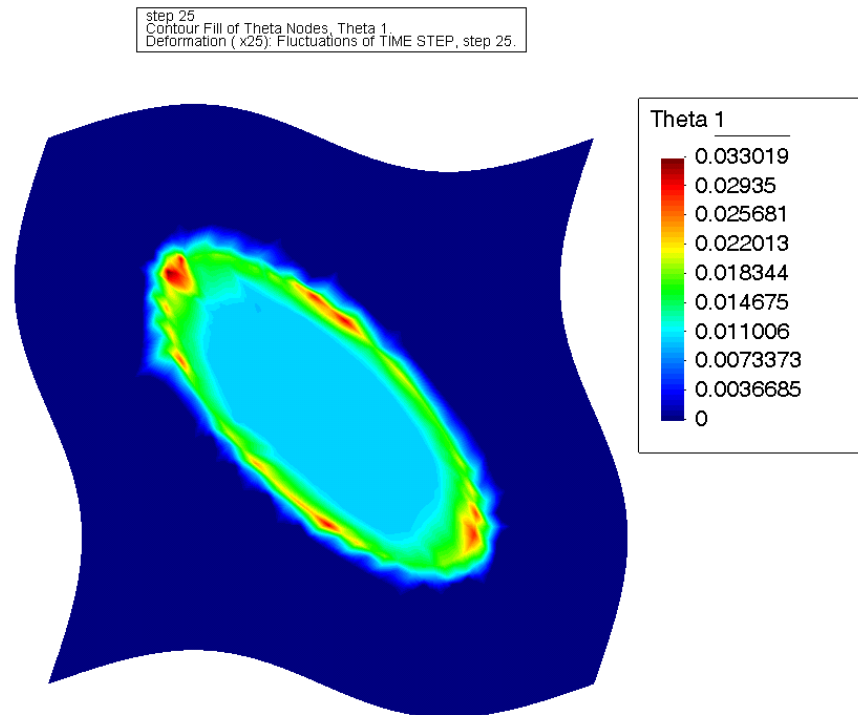


Abbildung 12.20.: Verteilung der Martensit–Variante 1 innerhalb der Inklusion unter Scherung im Zustand a

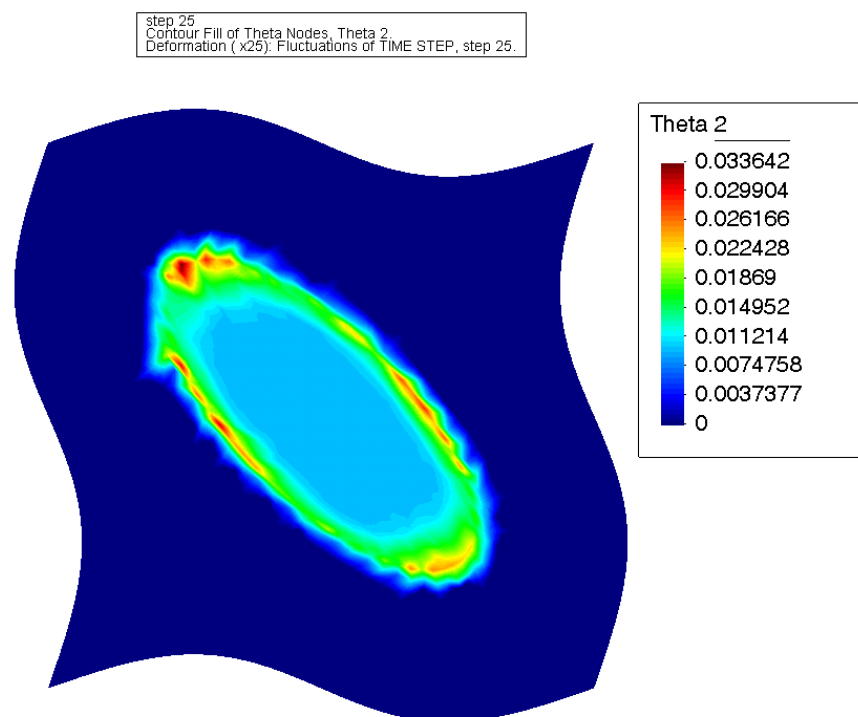


Abbildung 12.21.: Verteilung der Martensit–Variante 2 innerhalb der Inklusion unter Scherung im Zustand a

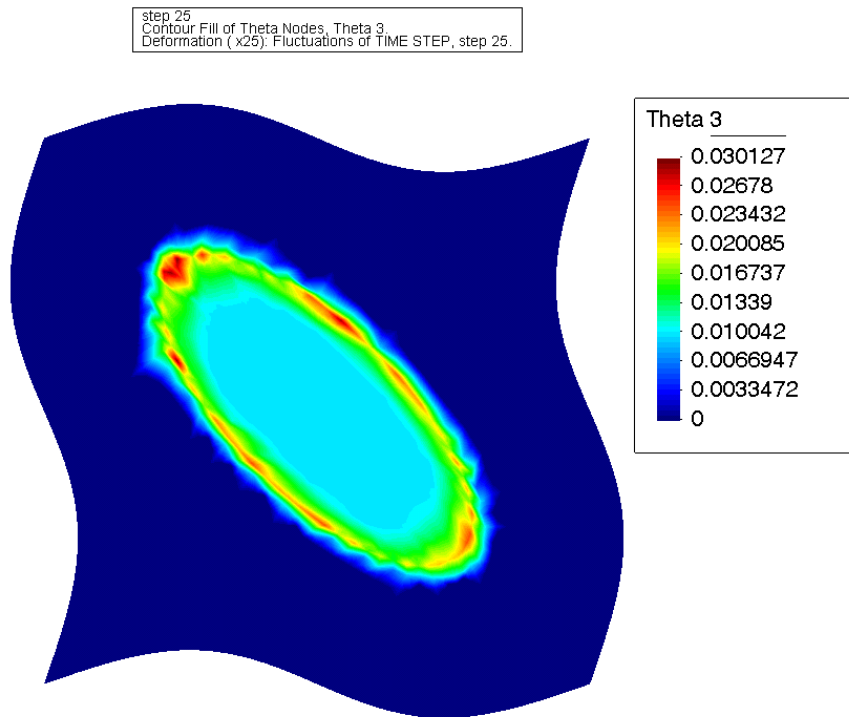


Abbildung 12.22.: Verteilung der Martensit-Variante 3 innerhalb der Inklusion unter Scherung im Zustand a

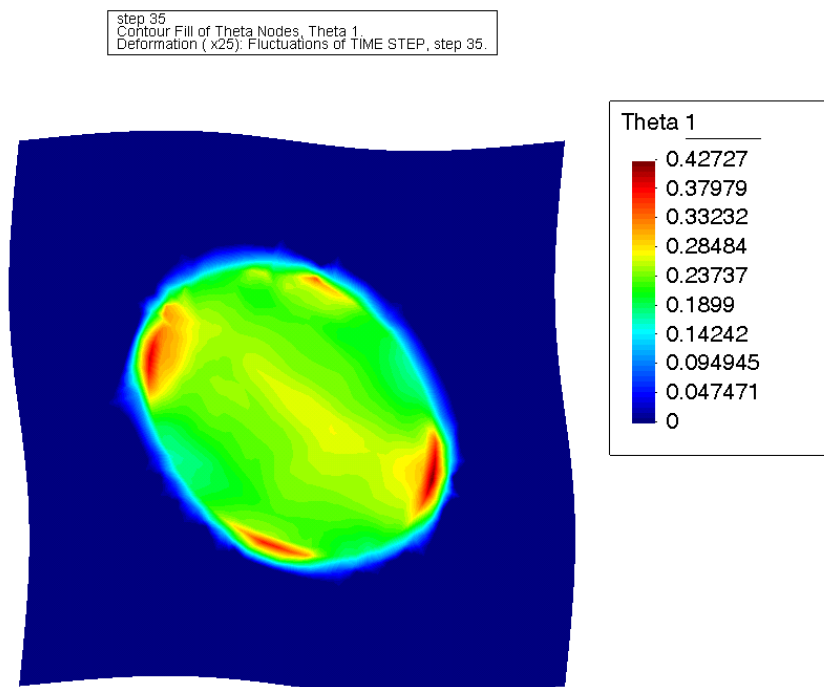


Abbildung 12.23.: Verteilung der Martensit-Variante 1 innerhalb der Inklusion unter Scherung im Zustand b

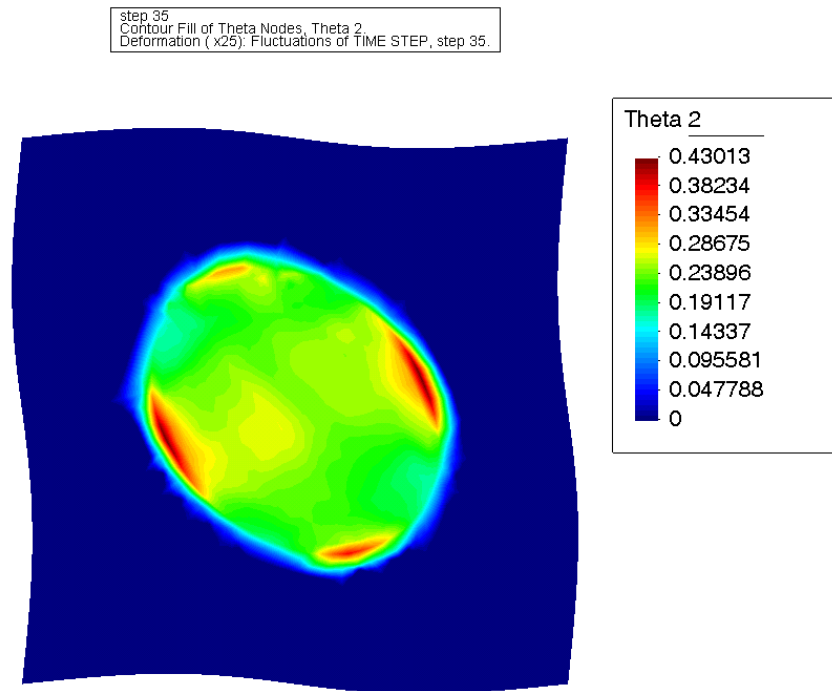


Abbildung 12.24.: Verteilung der Martensit–Variante 2 innerhalb der Inklusion unter Scherung im Zustand b

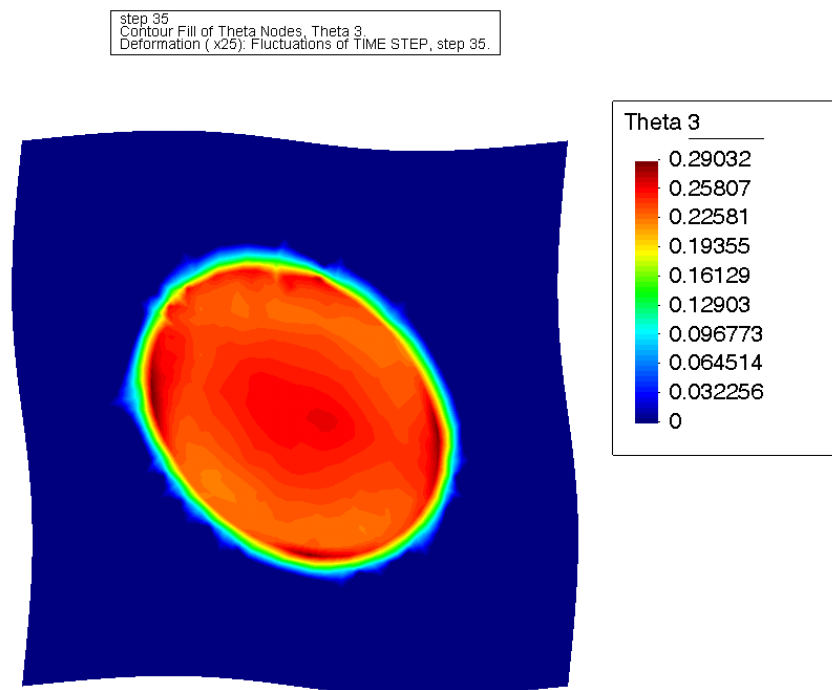


Abbildung 12.25.: Verteilung der Martensit–Variante 3 innerhalb der Inklusion unter Scherung im Zustand b

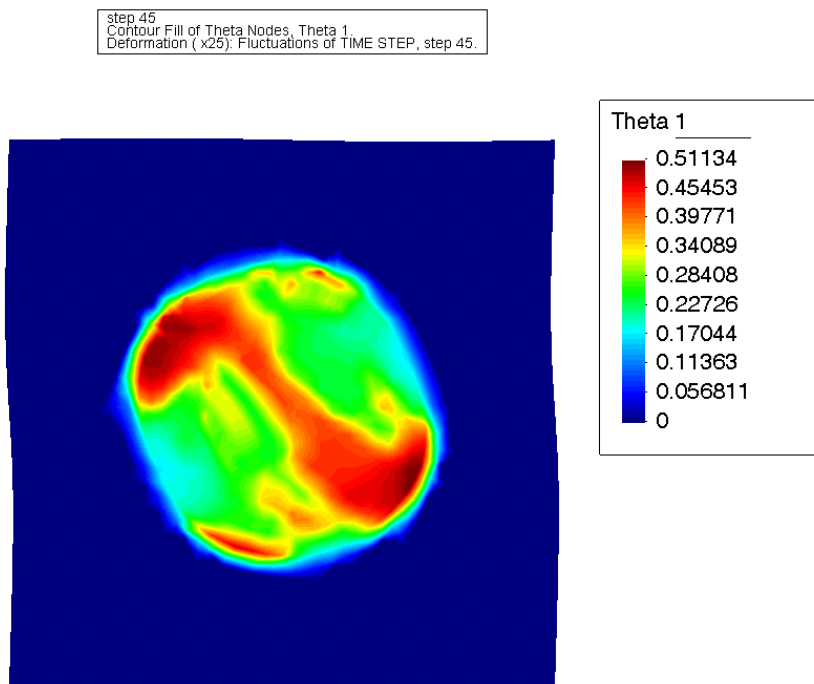


Abbildung 12.26.: Verteilung der Martensit-Variante 1 innerhalb der Inklusion unter Scherung im Zustand c

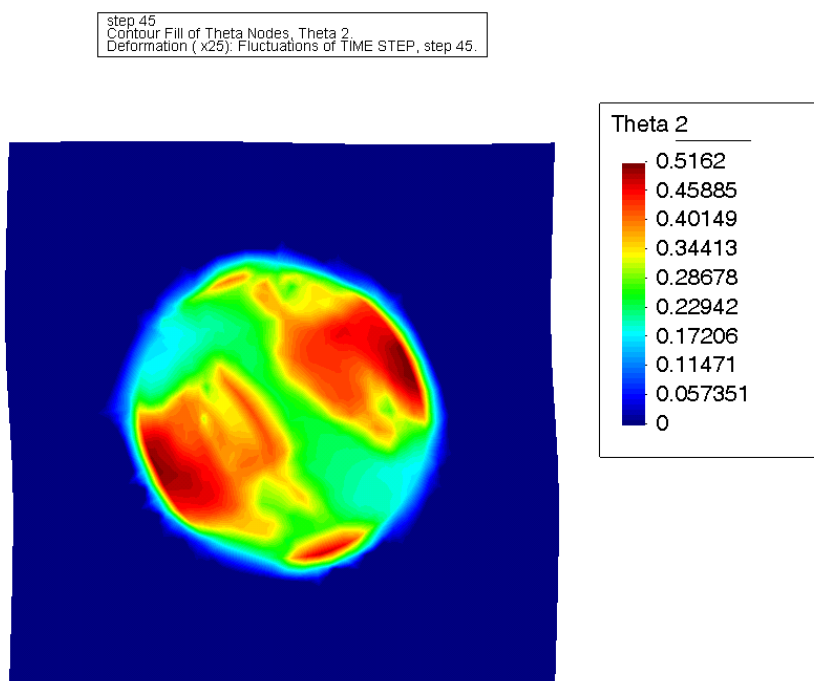


Abbildung 12.27.: Verteilung der Martensit-Variante 2 innerhalb der Inklusion unter Scherung im Zustand c

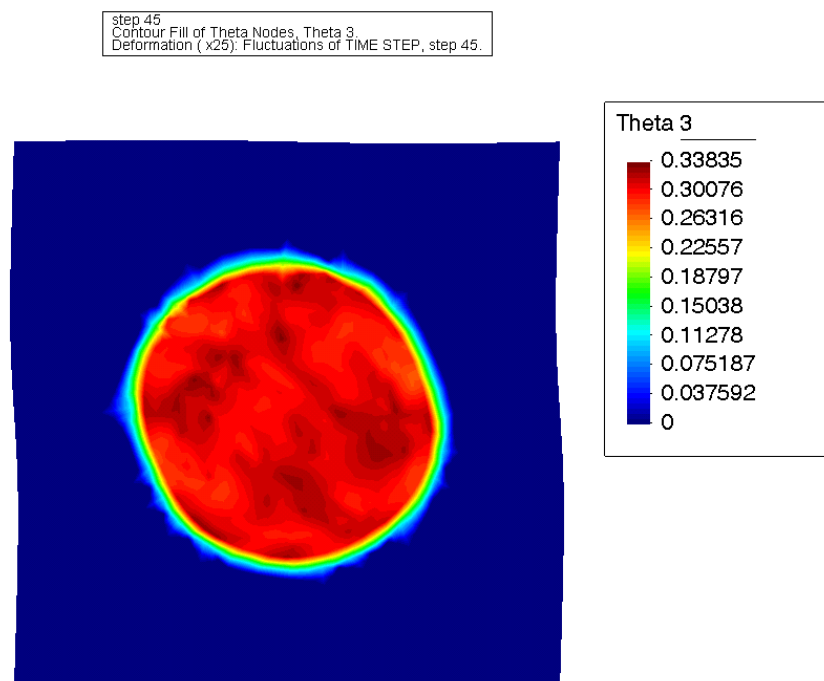


Abbildung 12.28.: Verteilung der Martensit–Variante 3 innerhalb der Inklusion unter Scherung im Zustand c

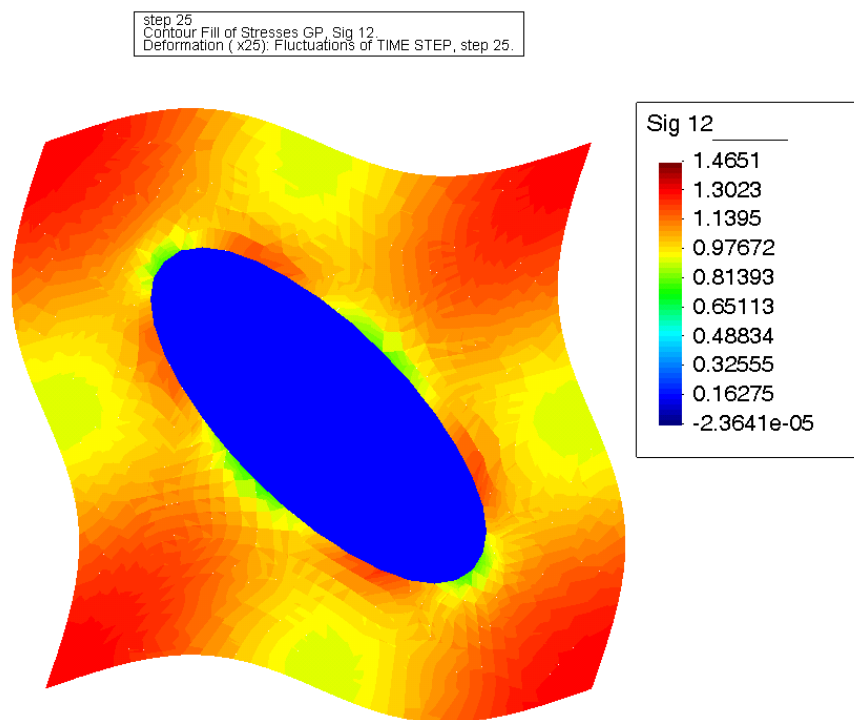


Abbildung 12.29.: Elementweise Verteilung der Spannung $\bar{\sigma}_{12}$ im RVE unter Scherung im Zustand a

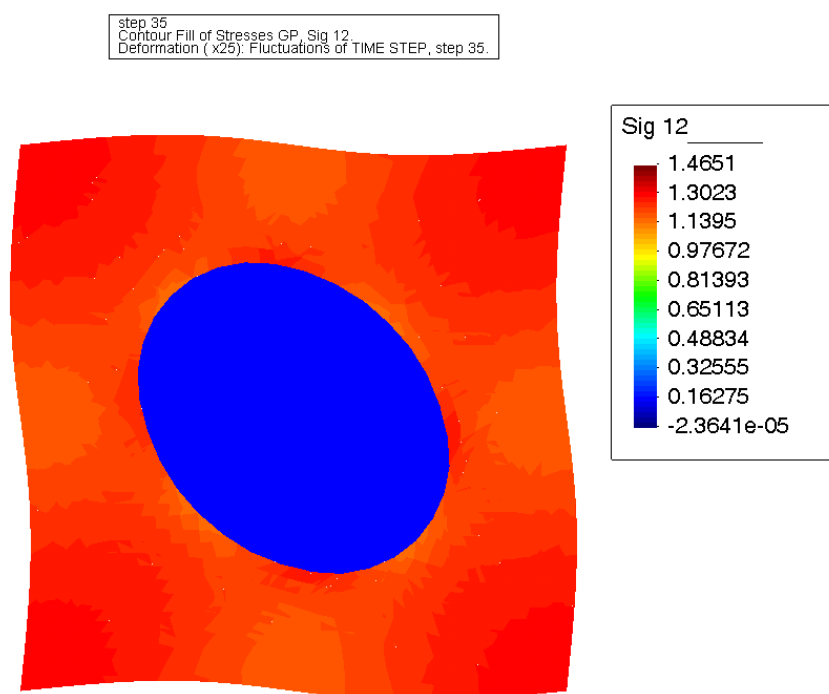


Abbildung 12.30.: Elementweise Verteilung der Spannung $\bar{\sigma}_{12}$ im RVE unter Scherung im Zustand b

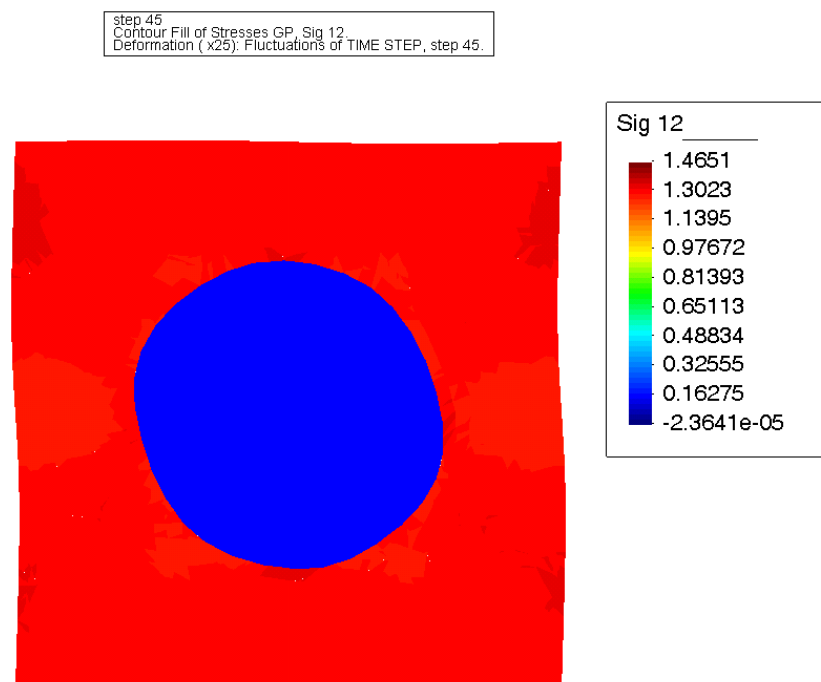


Abbildung 12.31.: Elementweise Verteilung der Spannung $\bar{\sigma}_{12}$ im RVE unter Scherung im Zustand c

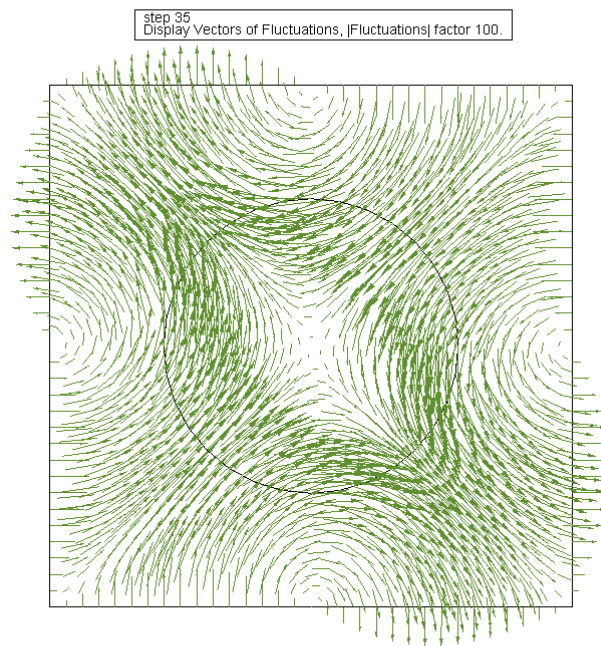


Abbildung 12.32.: Fluktuations-Vektorfeld des RVEs unter Scherung im Zustand b

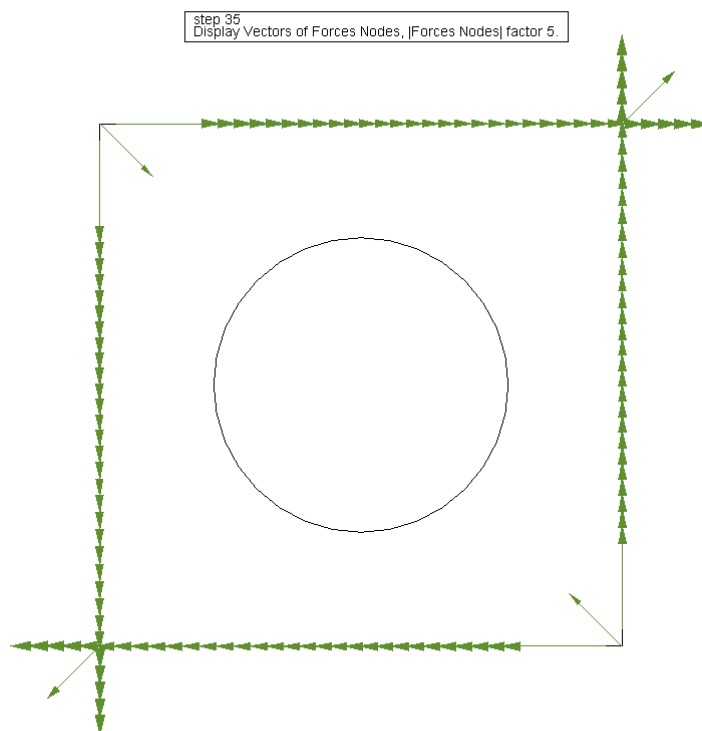


Abbildung 12.33.: Kraftvektorfeld des RVEs unter Scherung im Zustand b

13. Zusammenfassung

Die Verknüpfung der mikromechanischen Modelle mit Problemstellungen auf mesoskopischen Ebenen mittels der Multiskalen-FEM bietet ein nahezu unerschöpfliches Potenzial hinsichtlich der Modellbildung und Simulation von Formgedächtnislegierungen. Dazu gleichen sich die jeweils zu Grunde liegenden Variationsprinzipien derart, dass von einem einheitlichen, skalenübergreifenden Konzept gesprochen werden kann, das zudem auf weiteren Ebenen zwischen atomar und makroskopisch anwendbar ist. Insbesondere die neu entwickelte Energiedichte auf Grundlage der Kombination von Laminaten erster und zweiter Ordnung in Verbindung mit der MFEM stellt mechanische Modelle zur Verfügung, welche vielleicht den best möglichen Konsens zwischen physikalischer und mathematischer Plausibilität bieten.

Für die hier aufgeführten Beispiele ergeben sich folgende Schlussfolgerungen:

- Mit der Nachbildung von laminaren Strukturen, welche durch das Vorhandensein von simulierten Ausscheidungsteilchen inmitten einer FGL-Matrix induziert werden, erreicht man mit Hilfe der zu Grunde liegenden Approximation der Rang-1-Konvexifizierung physikalisch plausible Resultate, die sich u.A. mit experimentellen Beobachtungen wie bspw. in Michutta and Somsen (2006) hinsichtlich der heterogenen Entwicklung des Martensits oder in Khalil-Allafi et al. (2002) bezüglich der Entstehung von Martensitbereichen fernab der Grenzfläche zwischen Matrix und Ausscheidung decken. Dabei ist die induzierte Mesostruktur in hohem Maße abhängig vom vorgegebenen, makroskopischen Deformationszustand. Im direkten Vergleich dazu stellt sich das mechanische Modell auf Basis der Konvexifizierung als unbrauchbar heraus, da es eine zu homogene Verteilung der Phasenfelder liefert.
- Mit Hilfe der periodisch generierten Voronoi-Zellen lassen sich polykristalline Materialgefüge realistisch nachbilden. Der Unterschied zum Materialverhalten des idealen Einkristalls ist signifikant, daher ist die Zwischenebene des Polykristalls für eine realistische Berechnung makroskopischer Bauteile (etwa mittels der FE^2 -Methode nach Feyel and Chaboche (2000)) dringend erforderlich. Das in L. C. Brinson (2004) beschriebene Phänomen, bei dem der maximale zu erreichende Volumenanteil an Martensit innerhalb eines Polykristalls auf Grund von „ungünstig“ ausgerichteten Körnern deutlich unterhalb 100 % liegen kann, konnte nicht nachvollzogen werden. Allerdings könnte dies durch die fehlende Berücksichtigung der Interaktion von Korngrenzen begründet sein.
- Die Modellierung der FGL-Inklusionen sowie der in einer FGL-Matrix vorhandenen Mikrorisse stellen nur 2 weitere von vielen denkbaren Anwendungen auf mesoskopischer Ebene dar. Dabei ist zu erkennen, dass die Phasenübergänge im Falle der Mikrorisse die Spannungsspitzen abbauen und die Rissöffnung, welche im Rahmen des *crack tip opening displacements* auch eine Art Einschätzung der Gefährlichkeit eines Risses darstellt, um ca. 5 % vermindert wurde. Die Steigerung der effektiven

Materialparameter durch die Phasentransformationen innerhalb der Inklusion konnte an Hand des einen gezeigten Beispiels noch nicht nachvollzogen werden, erbrachte jedoch grundlegende Erkenntnisse über die Mischungszustände innerhalb der Inklusion.

Die im Vergleich zu experimentellen Analysen zu großen Transformationsspannungen auch auf mesoskopischer Ebene bedürfen einer Revision bzw. Anpassung der chemischen Energieanteile (5.4) auf S. 44 bzw. der darin verwendeten Werte der Materialparameter und kann daher nicht als Manko des Modells gewertet werden. In diesem Zusammenhang bedingt auch die Vorgabe des „künstlichen“ einaxialen Dehnungszustands die zum Teil unrealistischen Werte. Zur realistischeren Modellierung müssen ohnehin aktuelle Erkenntnisse über die mikromechanischen Materialparameter (wie z.B. von Sedláč et al. (2005)) in die Definitionen der Materialtensoren der einzelnen Phasen eingehen.

Die gezeigten Ergebnisse der FE-Routinen stellen dabei zunächst grundlegende Analysen hinsichtlich der FE-Modellierung an sich dar. Folgende Punkte gilt es demnach für weitere Anwendungen zu beachten:

- Die erzielten Resultate müssen auf Abhängigkeit der verwendeten Ansatzgrade der Formfunktionen (im vorliegenden Fall jeweils linear) sowie der Vernetzungsdichte überprüft werden. Auch der Einfluss der Diskretisierung des RVE-Randes auf die Ergebnisse sollte analysiert werden.
- Wie insbesondere an Hand der während der Entlastungsphase unterbrochenen Routinen zu erkennen ist, läuft der globale Algorithmus noch nicht zufriedenstellend stabil und mitunter ineffektiv bezüglich der Rechenzeit. Zu den vorgenommenen Maßnahmen, wie etwa einer Begrenzung der Verschiebungsinkremente sowie einer adaptiven Anpassung der Schrittweite des globalen Lastfaktors bei Nicht-Konvergenz innerhalb einer bestimmten Anzahl von Iterationen, muss der Algorithmus dahin gehend noch verbessert werden. Denkbar sind z.B. die Programmierung eines gedämpften Newton-Verfahrens oder die Anwendung sogenannter *Bogenlängen-Verfahren*.
- Adaptive Netzverfeinerungs-Strategien zur Verbesserung der FE-Lösung auf Grundlage von Fehlerschätzern wurden bislang nicht berücksichtigt.

Wie bereits in Abschnitt 8.6 erwähnt, verschlechtert die notwendige Bestimmung der Startwerte für die mikroskopischen Laminatorientierungen die Effizienz des Modells erheblich, was sich innerhalb der FE-Routine auf mesoskopischer Ebene in potenziierter Form bemerkbar macht. Abgesehen von der Notwendigkeit einer effizienteren Methode zur Bestimmung der Laminat-Richtungswinkel gilt es noch zu klären, ob andere Relaxierungsverfahren hinsichtlich der effektiven Materialantwort auf mesoskopischer Ebene nicht annähernd gleiche Resultate liefern bei sehr viel kürzerer Rechenzeit¹, auch wenn diese nicht in der Lage sind, z.B. die heterogenen Phasenfelder auf mesoskopischer Ebene adäquat zu simulieren.

Über die detailliertere Analyse der hier dargelegten Problemstellungen hinaus sind folgende Erweiterungen bzw. Anwendungen des Multiskalenmodells angedacht:

¹In diesem Zusammenhang sei erwähnt, dass die Berechnungen auf Basis der Konvexifizierung hinsichtlich der Rechenzeit durchaus vergleichbar mit phänomenologischen Modellen sein dürfte

- Implementation der Polykonvexifizierung auf mikro– und mesoskopischer Ebene
- Berücksichtigung der *R-Phase* und die damit verbundene Fragestellung, ob die präferierte Bildung dieser durch vorhandene Ni_4Ti_3 -Teilchen nachvollzogen werden kann
- Erweiterung der mechanischen Modelle um den Aspekt der Plastizität, bspw. zur Modellbildung und Simulation von TRIP-Stählen
- Tiefergreifende Analysen hinsichtlich funktional gradierter Materialien (*functionally graded materials*), z.B. auf Grundlage der FGL-Inklusionen.
- Erweiterung um Aspekte veränderlicher, geometrischer Strukturen der Mesoskale, wie z.B. Ausbreitung des Mikrorisses auf Grundlage von Konfigurationskräften.
- Komplette Einbindung in ein Mikro–Meso–Makro Modell gemäß der FE^2 -Methode (Feyel and Chaboche (2000))

A. Transformationsdehnungen

Die Transformationsmatrizen U^t der Martensit-Varianten für unterschiedliche Kristallsysteme, die gemäß (3.1) auf S. 25 linearisiert werden, wurden gemäß der in Bhattacharya (2003) genannten Quellen wie folgt gewählt.

Tetragonal (InTi)

$$U_1^t = \begin{pmatrix} 1.0221 & 0 & 0 \\ 0 & 0.9889 & 0 \\ 0 & 0 & 0.9889 \end{pmatrix} \quad (\text{A.1})$$

$$U_2^t = \begin{pmatrix} 0.9889 & 0 & 0 \\ 0 & 1.0221 & 0 \\ 0 & 0 & 0.9889 \end{pmatrix} \quad (\text{A.2})$$

$$U_3^t = \begin{pmatrix} 0.9889 & 0 & 0 \\ 0 & 0.9889 & 0 \\ 0 & 0 & 1.0221 \end{pmatrix} \quad (\text{A.3})$$

Orthorhombisch (CuAlNi)

$$U_1^t = \begin{pmatrix} 1.04245 & 0 & 0.01945 \\ 0 & 0.9278 & 0 \\ 0.01945 & 0 & 1.04245 \end{pmatrix} \quad (\text{A.4})$$

$$U_2^t = \begin{pmatrix} 1.04245 & 0 & -0.01945 \\ 0 & 0.9278 & 0 \\ -0.01945 & 0 & 1.04245 \end{pmatrix} \quad (\text{A.5})$$

$$U_3^t = \begin{pmatrix} 1.04245 & 0.01945 & 0 \\ 0.01945 & 1.04245 & 0 \\ 0 & 0 & 0.9278 \end{pmatrix} \quad (\text{A.6})$$

$$U_4^t = \begin{pmatrix} 1.04245 & -0.01945 & 0 \\ -0.01945 & 1.04245 & 0 \\ 0 & 0 & 0.9278 \end{pmatrix} \quad (\text{A.7})$$

$$U_5^t = \begin{pmatrix} 0.9278 & 0 & 0 \\ 0 & 1.04245 & 0.01945 \\ 0 & 0.01945 & 1.04245 \end{pmatrix} \quad (\text{A.8})$$

$$U_6^t = \begin{pmatrix} 0.9278 & 0 & 0 \\ 0 & 1.04245 & -0.01945 \\ 0 & -0.01945 & 1.04245 \end{pmatrix} \quad (\text{A.9})$$

Monoklin I (NiTi)

$$\mathbf{U}_1^t = \begin{pmatrix} 1.0243 & 0.0580 & 0.0427 \\ 0.0580 & 1.0243 & 0.0427 \\ 0.0427 & 0.0427 & 0.9563 \end{pmatrix} \quad (\text{A.10})$$

$$\mathbf{U}_2^t = \begin{pmatrix} 1.0243 & 0.0580 & -0.0427 \\ 0.0580 & 1.0243 & -0.0427 \\ -0.0427 & -0.0427 & 0.9563 \end{pmatrix} \quad (\text{A.11})$$

$$\mathbf{U}_3^t = \begin{pmatrix} 1.0243 & -0.0580 & -0.0427 \\ -0.0580 & 1.0243 & 0.0427 \\ -0.0427 & 0.0427 & 0.9563 \end{pmatrix} \quad (\text{A.12})$$

$$\mathbf{U}_4^t = \begin{pmatrix} 1.0243 & -0.0580 & 0.0427 \\ -0.0580 & 1.0243 & -0.0427 \\ 0.0427 & -0.0427 & 0.9563 \end{pmatrix} \quad (\text{A.13})$$

$$\mathbf{U}_5^t = \begin{pmatrix} 1.0243 & 0.0427 & 0.0580 \\ 0.0427 & 0.9563 & 0.0427 \\ 0.0580 & 0.0427 & 1.0243 \end{pmatrix} \quad (\text{A.14})$$

$$\mathbf{U}_6^t = \begin{pmatrix} 1.0243 & -0.0427 & 0.0580 \\ -0.0427 & 0.9563 & -0.0427 \\ 0.0580 & -0.0427 & 1.0243 \end{pmatrix} \quad (\text{A.15})$$

$$\mathbf{U}_7^t = \begin{pmatrix} 1.0243 & -0.0427 & -0.0580 \\ -0.0427 & 0.9563 & 0.0427 \\ -0.0580 & 0.0427 & 1.0243 \end{pmatrix} \quad (\text{A.16})$$

$$\mathbf{U}_8^t = \begin{pmatrix} 1.0243 & 0.0427 & -0.0580 \\ 0.0427 & 0.9563 & -0.0427 \\ -0.0580 & -0.0427 & 1.0243 \end{pmatrix} \quad (\text{A.17})$$

$$\mathbf{U}_9^t = \begin{pmatrix} 0.9563 & 0.0427 & 0.0427 \\ 0.0427 & 1.0243 & 0.0580 \\ 0.0427 & 0.0580 & 1.0243 \end{pmatrix} \quad (\text{A.18})$$

$$\mathbf{U}_{10}^t = \begin{pmatrix} 0.9563 & -0.0427 & -0.0427 \\ -0.0427 & 1.0243 & 0.0580 \\ -0.0427 & 0.0580 & 1.0243 \end{pmatrix} \quad (\text{A.19})$$

$$\mathbf{U}_{11}^t = \begin{pmatrix} 0.9563 & -0.0427 & 0.0427 \\ -0.0427 & 1.0243 & -0.0580 \\ 0.0427 & -0.0580 & 1.0243 \end{pmatrix} \quad (\text{A.20})$$

$$\mathbf{U}_{12}^t = \begin{pmatrix} 0.9563 & 0.0427 & -0.0427 \\ 0.0427 & 1.0243 & -0.0580 \\ -0.0427 & -0.0580 & 1.0243 \end{pmatrix} \quad (\text{A.21})$$

Literaturverzeichnis

- Antman, S. S. (1970). Existence of solutions of the equilibrium equations for nonlinearly elastic rings and arches. *Indiana University Mathematics Journal* 20, 281–302.
- Auricchio, F. and R. Taylor (1997). Shape-memory alloys: modelling and numerical simulations of the finite-strain superelastic behavior. *Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg.* 143, 175–194.
- Bain, E. C. (1924). *Trans. AIME* 70, 25.
- Balandraud, X. and G. Zanzotto (2006). Stressed microstructures in thermally induced M9R–M18R martensites. *J. Mech. Phys. Sol.* 55, 194–224.
- Ball, J. (1977). Convexity conditions and existence theorems in nonlinear elasticity. *Arch. Rat. Mech. Anal.* 63, 337–403.
- Ball, J. and R. James (1987). Fine phase mixtures as minimizers of energy. *Arch. Rat. Mech. Anal.* 100, 13–52.
- Ball, J. and J. Marsden (1984). Quasiconvexity at the boundary, positivity of the second variation, and elastic stability. *Arch. Rat. Mech. Anal.* 86, 251–277.
- Bartels, S., C. Carstensen, K. Hackl, and U. Hoppe (2004). Effective relaxation for microstructure simulations: algorithms and applications. *Comp. Methods Appl. Mech. Engrg.* 193, 5143–5175.
- Bataillard, L., J.-E. Bidaux, and R. Gotthardt (1998). Interaction between microstructure and multiple-step transformation in binary NiTi alloys using *in-situ* transmission electron microscopy observations. *Phil. Mag. A* 78, 327–344.
- Bathe, K. J. (1990). *Finite-Elemente-Methoden*. Berlin: Springer Verlag.
- Betten, J. (2001). *Kontinuumsmechanik* (2 ed.). Springer.
- Bhattacharya, K. (2003). *Microstructure of Martensite - Why it forms and how it gives rise to the shape-memory effect*. New York: Oxford University Press.
- Carstensen, C., K. Hackl, and A. Mielke (2002). Nonconvex potentials and microstructures in finite-strain plasticity. *Proc. Roy. Soc. London A* 458, 299–317.
- Castaneda, P. P. and P. M. Suquet (1998). Nonlinear composites. *Adv. Appl. Mech.* 34, 171–303.
- Ciarlet, P. G. (1993). *Mathematical Elasticity*, Volume 1. Amsterdam: Elsevier Science Publisher.
- Coleman, B. D. and W. Noll (1959). On the thermostatics of continuous media. *Arch. Rational Mech. Anal.* 4, 97–128.

- Conti, S. (2000). Branched microstructures: Scaling and asymptotic self-similarity. *Comm. Pure Appl. Mech.* 53, 1448–1474.
- Crisfield, M. A. (1991). *Non-Linear Finite Element Analysis of Solids and Structures*, Volume 1. John Wiley & Sons Ltd.
- Cui, J., Y. Chu, O. Famodu, Y. Furuya, J. Hattrick-Simpers, R. James, A. Ludwig, S. Thienhaus, M. Wuttig, Z. Zhang, and I. Takeuchi (2006). Combinatorial search of thermoelastic shape memory alloys with extremely small hysteresis width. *Nature Materials* 5, 286–290.
- Dacorogna, B. (1982). Quasiconvexity and relaxation of the nonconvex problems in the calculus of variations. *J. Func. Anal.* 46, 102–118.
- Deuffhard, P. and F. Bornemann (1994). *Numerische Mathematik II*. Berlin: de Gruyter.
- Dlouhý, A., J. Khalil-Allafi, and G. Eggeler (2004). On the determination of the volume fraction of Ni_4Ti_3 precipitates in binary Ni-rich NiTi shape memory alloys. *Z. Metallkd.* 95, 518–524.
- Drugan, W. J. (2007). Elastic composite materials having a negative stiffness phase can be stable. *Physical Review Letters* 98.
- Eshelby, J. D. (1957). The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems. *Proc. Roy. Soc.* 241, 376–396.
- Eshelby, J. D. (1959). The elastic field outside an ellipsoidal inclusion, and related problems. *Proc. Roy. Soc.* 252, 561–569.
- Eshelby, J. D. (1961). *Elastic inclusions and inhomogeneities*. Progress in Solid Mechanics 2. Amsterdam: North-Holland.
- Fechte-Heinen, R. (2007). Mikromechanische modellierung von formgedächtnismaterialien. Dissertation, Ruhr-Universität Bochum. Mitteilungen aus dem Institut für Mechanik Nr. 141.
- Feyel, F. and J. L. Chaboche (2000). FE^2 multiscale approach for modelling the elastoviscoplastic behaviour of long fibre sic/ti composite materials. *Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg.* 183, 215–232.
- Frémond, M. (1987). Matériaux a memoire de forme. *C. R. Acad. Sci.* 34(2), 239–244.
- Gao, X. Y. and W. M. Huang (2002). Transformation start stress in non-textured shape memory alloys. *Smart Mater. Struct.* 11, 256–268.
- Gold, C. (2008). The voronoi web site. World Wide Web, <http://voronoi.com>.
- Govindjee, S., K. Hackl, and R. Heinen (2007). An upper bound to the free energy of mixing by twin-compatible lamination for n -variant martensitic phase transformations. *Continuum Mech. Thermodyn.* 18, 443–453.
- Govindjee, S. and G. Hall (2000). A computational model for shape memory alloys. *Int. J. Sol. Struct.* 37, 735–760.

- Govindjee, S. and C. Miehe (2001). A multi-variant martensitic phase transformation model: formulation and numerical implementation. *Comp. Methods Appl. Mech. Engrg.* 191, 215–238.
- Grabe, C. (2007). Experimental testing and parameter identification on the multidimensional material behavior of shape memory alloys. Dissertation, Ruhr-Universität Bochum. Mitteilungen aus dem Institut für Mechanik Nr. 142.
- Guempel, P. (2004). *Formgedächtnislegierungen*. Renningen: expert verlag.
- Gurtin, M. E. (1972). The linear theory of elasticity. In *Handbuch der Physik*. Berlin: Springer.
- Hackl, K. (1997). Generalized standard media and variational principles in classical and finite strain elastoplasticity. *J. Mech. Phys. Sol.* 45, 667–688.
- Hackl, K. and F. D. Fischer (2008). On the relation between the principle of maximum dissipation and inelastic evolution given by dissipation potentials. *Proc. R. Soc. A* 464, 117–132.
- Hackl, K. and R. Heinen (2008). A micromechanical model for pretextured polycrystalline shape-memory alloys including elastic anisotropy. *Continuum Mech. Thermodyn.* 19, 499–510.
- Hackl, K. and M. Schmidt-Baldassari (2004). A micromechanical model for polycrystalline shape-memory alloys. *Mat. Sc. Eng. A* 378, 503–506.
- Halphen, B. and Q. S. Nguyen (1975). Sur les matériaux standards généralisés. *J. Mécanique* 14, 39–63.
- Hashin, Z. (1983). Analysis of composite materials – a survey. *J. Appl. Mech.* 50, 481–505.
- Hashin, Z. and S. Shtrikman (1962a). On some variational principles in anisotropic and nonhomogeneous elasticity. *J. Mech. Phys. Sol.* 10, 335–342.
- Hashin, Z. and S. Shtrikman (1962b). A variational approach to the theory of the elastic behaviour of multiphase materials. *J. Mech. Phys. Sol.* 11, 127–140.
- Hashin, Z. and S. Shtrikman (1962c). A variational approach to the theory of the elastic behaviour of polycrystals. *J. Mech. Phys. Sol.* 10, 343–352.
- Helm, D. and P. Haupt (2003). Shape memory behaviour: modelling within continuum mechanics. *Int. J. Sol. Struct.* 40, 827–849.
- Hill, R. (1962). Acceleration waves in solids. *J. Mech. Phys. Sol.* 16, 1–16.
- Hill, R. (1972). On constitutive macro-variables for heterogeneous solids at finite strain. *Proc. R. Soc. London A* 326, 131–147.
- Huo, Y. and I. Mueller (1993). Nonequilibrium thermodynamics of pseudoelasticity. *Cont. Mech. Thermodyn.* 5, 163–204.
- Jaglinski, T., D. Kochmann, D. Stone, and R. S. Lakes (2007). Composite materials with viscoelastic stiffness greater than diamond. *Science* 315, 620–622.

- James, R. and K. Hane (2000). Martensitic transformations and shape memory materials. *Acta mater.* 48, 197–222.
- James, R. and Z. Zhang (2005). A way to search for multiferroic materials with 'unlikely' combinations of physical properties. *Magnetism and Structure in Functional Materials* 79.
- Khalil-Allafi, J., A. Dlouhý, and G. Eggeler (2002). Ni_4Ti_3 -precipitation during aging of NiTi shape memory alloys and its influence on martensitic phase transformations. *Acta Materialia* 50, 4255–4274.
- Kochmann, D. (2006). Master's thesis, University of Wisconsin–Madison.
- Kohn, R. V. and S. Müller (1992). Branching of twins near an austenite–twinned–martensite interface. *Phil. Mag. A* 66, 697–715.
- Kohn, R. V. and S. Müller (1994). Surface energy and microstructure in coherent phase transitions. *Comm. Pure Appl. Mech.* 47, 405–435.
- Kohn, R. V. and G. Strang (1983). Explicit relaxation of a variational problem in optimal design. *Bull. Am. Math. Soc.* 9, 211–214.
- Kohn, R. V. and G. Strang (1986). Optimal design and relaxation of variational problem i, ii, iii. *Comm. Pure Appl. Mech.* 39, 113–137, 139–182, 353–377.
- Krawietz, A. (1986). *Materialtheorie: Mathematische Beschreibung des phänomenologischen thermomechanischen Verhaltens*. Berlin: Springer–Verlag.
- Kuhl, D. and G. Meschke (2001). *Finite Elemente Methoden I* (4 ed.). Ruhr–Universität Bochum: Lehrstuhl für Statik und Dynamik.
- L. C. Brinson, I. Schmidt, R. L. (2004). Stress–induced transformation behavior of a polycrystalline NiTi shape memory alloy: micro and macromechanical investigations via in situ optical microscopy. *J. Mech. Phys. Sol.* 52, 1549–1571.
- Leonhardt, A. (2007). Master's thesis, Ruhr–Universitaet Bochum.
- Lexcellant, C., A. Vivet, C. Bouvet, S. Calloch, and P. Blanc (2001). Experimental and numerical determinations of the initial surface of phase transformation under biaxial loading in some polycrystalline shape–memory alloys. *J. Mech. Phys. Sol.* 50, 2717–2735.
- Li, S., R. Sauer, and G. Wang (2005a). A circular inclusion in a finite domain i. the dirichlet–eshelby problem. *Acta Mechanica* 179, 67–90.
- Li, S., R. Sauer, and G. Wang (2005b). A circular inclusion in a finite domain ii. the neumann–eshelby problem. *Acta Mechanica* 179, 91–110.
- Marsden, J. and T. Hughes (1983). *Mathematical Foundation Of Elasticity*. Prentice–Hall.
- Maugin, G. A. (1992). *The Thermomechanics of Plasticity and Fracture*, Volume 1. Cambridge University Press.
- Johnson Matthey Inc. (2008). Selected Properties of NiTi. World Wide Web, http://www.jmmedical.com/html/selected_properties.html.

- Molecular Expressions™, Science, Optics & You (2008). Interactive Java Tutorial. World Wide Web, <http://micro.magnet.fsu.edu/primer/java/scienceopticsu/powersof10/>.
- Meyers, N. G. (1965). Quasi-convexity and lower semicontinuity of multiple variational integrals of any order. *Trans. Amer. Math. Soc.* 119, 225–249.
- Michutta, J. and C. Somsen (2006). Elementary martensitic transformation processes in ni-rich NiTi single crystals with Ni₄Ti₃ precipitates. *Acta Materialia* 54, 3525–3542.
- Miehe, C. (1994). On the representation of prandtl-reuss tensors within the framework of multiplicative elastoplasticity. *Int. J. Plast.* 10, 609–621.
- Miehe, C. (1998). A theoretical and computational model for isotropic elastoplastic stress analysis in shells at large strains. *Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg.* 155, 193–233.
- Miehe, C. (2003). Computational micro-to-macro transitions for discretized micro-structures of heterogeneous materials at finite strains based on the minimization of averaged incremental energy. *Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg.* 192, 559–591.
- Miehe, C. and N. Apel (2004). Anisotropic elastic-plastic analysis of shells at large strains. a comparison of multiplicative and additive approaches to enhanced finite element design and constitutive modelling. *Int. J. Num. Meth. Engrg.* 61, 2067—2113.
- Miehe, C. and J. Dettmar (2004). A framework for micro-macro transitions in periodic particle aggregates of granular materials. *Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg.* 193, 225–256.
- Miehe, C., J. Schotte, and M. Lambrecht (2002). Homogenization of inelastic solid materials at finite strains based on incremental minimization principles. application to the texture analysis of polycrystals. *J. Mech. Phys. Sol.* 50, 2123–2167.
- Miehe, C., J. Schröder, and M. Becker (2002). Computational homogenization analysis in finite elasticity: material and structural instabilities on the micro- and macro-scales of periodic composites and their interaction. *Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg.* 191, 4971–5005.
- Mielke, A., F. Theil, and V. Levitas (2002). A variational formulation of rate-independent phase transformations using an extremum principle. *Arch. Rat. Mech. Anal.* 162 (2), 137–177.
- Miyazaki, S., Y. Igo, and K. Otsuka (1986). *Acta Metall.* 34, 2045.
- Miyazaki, S., T. Imai, Y. Igo, and K. Otsuka (1986). *Metall. Trans. A* 17A, 115.
- Miyazaki, S., Y. Ohmi, K. Otsuka, and Y. Suzuki (1982). *J. de Phys.* 43, C4–255.
- Morrey, C. B. (1952). Quasi-convexity and the lower semicontinuity of multiple integrals. *Pacific J. Math.* 2, 25–53.
- Mura, T. (1987). *Micromechanics of defects in solids* (2 ed.). Dordrecht: Kluwer Academic Publishers.
- Nemat-Nasser, S. and M. Hori (1993). *Micromechanics: Overall Properties of Heterogeneous Materials*, Volume 37 of *Applied Mathematics and Mechanics*. Amsterdam: North-Holland.

- Ogden, R. (1984). *Non-Linear Elastic Deformations*. Dover Publications.
- Ortiz, M. and E. Repetto (1999). Nonconvex energy minimization and dislocation structures in ductile single crystals. *J. Mech. Phys. Sol.* 47, 397–462.
- Ortiz, M. and L. Stainier (1999). The variational formulation of viscoplastic constitutive updates. *Comp. Methods Appl. Mech. Engrg.* 171, 419–444.
- Otsuka, K. and C. M. Wayman (1999). *Shape Memory Materials*. Cambridge University Press.
- Pagano, S., P. Alart, and O. Maissenueve (1998). Solid-solid phase transition modelling. local and global minimizations of non-convex and relaxed potentials. isothermal case for shape memory alloys. *Int. J. Eng. Sci.* 36, 1143–1172.
- Perzyna, P. (1998). *Localization and Fracture Phenomena in Inelastic Solids*, Volume 386 of *CISM Courses and Lectures*. Wien: Springer.
- Raniecki, B., C. LExcellent, and K. Tanaka (1992). Thermodynamic models of pseudoelastic behaviour of shape memory alloys. *Arch. Mech.* 44, 261–284.
- Reuss, A. (1929). Berechnung der Fließgrenze von Mischkristallen auf Grund der Plastizitätsbedingung für Einkristalle. *Z. angew. Math. Mech.* 9, 49–58.
- Saburi, T., S. Nenno, Y. Nishimoto, and M. Zeniya (1986). *J. Iron and Steel Inst. Japan* 72, 571.
- Saburi, T. (1989). *Proc. MRS Int. Mtg. on Adv. Mat.* 9, 77.
- Saburi, T., T. Tatsumi, and S. Nenno (1982). *J. de Phys.* 43, C4–261.
- Schmidt-Baldassari, M. (2003). Numerical concepts for rate-independent single crystal plasticity. *Comp. Methods Appl. Mech. Engrg.* 192, 1261–1280.
- Schmidt-Baldassari, M. and K. Hackl (2003). Incremental variational principles in damage mechanics. *Proc. Appl. Math. Mech.* 2, 216–217.
- Schwane, M. (2008). Master's thesis, Ruhr-Universität Bochum.
- Sedláč, P., H. Seiner, M. Landa, V. Novák, P. Sittner, and L. Manosa (2005). Elastic constants of bcc austenite and 2H orthorhombic martensite in CuAlNi shape memory alloy. *Acta Materialia* 53, 3643–3661.
- Šilhavý, M. (1997). *The Mechanics and Thermodynamics of Continuous Media*, Volume 1. Springer.
- Simo, J. C. and T. J. R. Hughes (1998). *Computational Inelasticity*. New York: Springer-Verlag.
- Somsen, C. (2002). Mikrostrukturelle untersuchungen an Ni-reichen Ni-Ti formgedächtnislegierungen. Dissertation, Gerhard-Mercator-Universität Duisburg.
- Stumpf, H. and K. C. Le (1990). Variational principles of nonlinear fracture mechanics. *Acta Mechanica* 83, 25–37.

- Stupkiewicz, S. and H. Petryk (2002). Modelling of laminated microstructures in stress-induced martensitic transformations. *J. Mech. Phys. Sol.* 50, 2303–2331.
- Suquet, P. M. (1987). *Elements of Homogenization for Inelastic Solid Mechanics* (Homogenization Techniques for Composite Materials ed.), pp. 193–278. Number 272 in Lecture Notes in Physics. Berlin: Springer–Verlag.
- Tadaki, T., Y. Nakata, K. Shimizu, and K. Otsuka (1986). Crystal structure, composition and morphology of a precipitate in an aged Ti–51 at%Ni shape memory alloy. *Transactions of the Japan Institute of Metals* 27, 731–740.
- Tirry, W. (2007). Strains on the nano– and microscale in NiTi: an advanced TEM study. Dissertation, Universiteit Antwerpen.
- Tirry, W. and D. Schryvers (2005). Quantitative determination of strain fields around Ni_4Ti_3 precipitates in niti. *Acta Materialia* 53, 1041–1049.
- Truesdell, C. and W. Noll (1965). The non-linear field theories of mechanics. In *Handbuch der Physik*. Berlin: Springer.
- Turteltaub, S. and A. S. J. Suiker (2005). Transformation-induced plasticity in ferrous alloys. *J. Mech. Phys. Sol.* 53, 1747–1788.
- Turteltaub, S. and A. S. J. Suiker (2006). A multiscale thermomechanical model for cubic to tetragonal martensitic phase transformations. *Int. J. Sol. Struc.* 43, 4509–4545.
- Voigt, W. (1889). Über die Beziehung zwischen den beiden Elastizitätskonstanten isotroper Körper. *Wied. Ann.* 38, 573–587.
- Wagner, M. (2005). Ein Beitrag zur strukturellen und funktionalen Ermüdung von Drähten und Federn aus NiTi-Formgedächtnislegierungen. Dissertation, Ruhr–Universität Bochum.
- Wechsler, M., D. Liebermann, and T. Read (1953). *Trans. AIME* 197, 1503–1515.
- Willis, J. R. (1981). Variational and related methods for the overall properties of composites. *Adv. Appl. Mech.* 21, 1–78.
- Zienkiewicz, O. C. and R. L. Taylor (2005). *The Finite Element Method* (6 ed.). Butterworth–Heinemann.
- Zohdi, T. and P. Wriggers (2005). Lecture notes in applied and computational mechanics. In *Introduction to Computational Micromechanics*. Berlin: Springer.

Mitteilungen aus dem Institut für Mechanik

- | | | |
|--------|--|---------------|
| Nr. 1 | Theodor Lehmann:
Große elasto-plastische Formänderungen | Dezember 1976 |
| Nr. 2 | Bogdan Raniecki/Klaus Thermann:
Infinitesimal Thermoplasticity and Kinematics of Finite Elastic-Plastic Deformations. Basic Concepts | Juni 1978 |
| Nr. 3 | Wolfgang Krings:
Beitrag zur Finiten Element Methode bei linearem, viskoelastischem Stoffverhalten | Januar 1976 |
| Nr. 4 | Burkhard Lücke:
Theoretische und experimentelle Untersuchungen der zyklischen elastoplastischen Blechbiegung bei endlichen Verzerrungen | Januar 1976 |
| Nr. 5 | Knut Schwarze:
Einfluß von Querschnittsverformungen bei dünnwandigen Stäben mit stetig gekrümmter Profilmitte | Februar 1976 |
| Nr. 6 | Hubert Sommer:
Ein Beitrag zur Theorie des ebenen elastischen Verzerrungszustandes bei endlichen Formänderungen | Januar 1977 |
| Nr. 7 | H. Stumpf/F. J. Biehl:
Die Methode der orthogonalen Projektionen und ihre Anwendungen zur Berechnung orthotroper Platten | März 1977 |
| Nr. 8 | Albert Meyers:
Ein Beitrag zum optimalen Entwurf von schnellaufenden Zentrifugenschalen | April 1977 |
| Nr. 9 | Berend Fischer:
Zur zyklischen, elastoplastischen Beanspruchung eines dickwandigen Zylinders bei endlichen Verzerrungen | April 1977 |
| Nr. 10 | Wojciech Pietraszkiewicz:
Introduction to the Non-Linear Theory of Shells | Mai 1977 |
| Nr. 11 | Wilfried Ullenboom:
Optimierung von Stäben unter nichtperiodischer dynamischer Belastung | Juni 1977 |
| Nr. 12 | Jürgen Güldenpfennig:
Anwendung eines Modells der Vielkristallplastizität auf ein Problem gekoppelter elastoplastischer Wellen | Juli 1977 |
| Nr. 13 | Paweł Rafalski:
Minimum Principles in Plasticity | März 1978 |
| Nr. 14 | Peter Hilgers:
Der Einsatz eines Mikrorechners zur hybriden Optimierung und Schwingungsanalyse | Juli 1978 |
| Nr. 15 | Hans-Albert Lauert:
Optimierung von Stäben unter dynamischer periodischer Beanspruchung bei Beachtung von Spannungsrestriktionen | August 1979 |
| Nr. 16 | Martin Fritz:
Berechnung der Auflagerkräfte und der Muskelkräfte des Menschen bei ebenen Bewegungen aufgrund von kinematographischen Aufnahmen | Juli 1979 |
| Nr. 17 | H. Stumpf/F. J. Biehl:
Approximations and Error Estimates in Eigenvalue Problems of Elastic Systems with Application to Eigenvibrations of Orthotropic Plates | Dezember 1979 |

- Nr. 18 Uwe Kohlberg: Juli 1979
Variational Principles and their Numerical Application to Geometrically Nonlinear v. Karman Plates
- Nr. 19 Heinz Antes: Januar 1980
Über Fehler und Möglichkeiten ihrer Abschätzung bei numerischen Berechnungen von Schalenträgwerken
- Nr. 20 Czeslaw Wozniak: März 1980
Large Deformations of Elastic and Non-Elastic Plates, Shells and Rods
- Nr. 21 Maria K. Duszek: Juni 1980
Problems of Geometrically Non-Linear Theory of Plasticity
- Nr. 22 Burkhard von Bredow: Dezember 1980
Optimierung von Stäben unter stochastischer Erregung
- Nr. 23 Jürgen Preuss: Februar 1981
Optimaler Entwurf von Tragwerken mit Hilfe der Mehrzielmethode
- Nr. 24 Ekkehard Großmann: Februar 1981
Kovarianzanalyse mechanischer Zufallsschwingungen bei Darstellung der mehrfachkorrelierten Erregungen durch stochastische Differentialgleichungen
- Nr. 25 Dieter Weichert: März 1981
Variational Formulation and Solution of Boundary-Value Problems in the Theory of Plasticity and Application to Plate Problems
- Nr. 26 Wojciech Pietraszkiewicz: Juni 1981
On Consistent Approximations in the Geometrically Non-Linear Theory of Shells
- Nr. 27 Georg Zander: September 1981
Zur Bestimmung von Verzweigungslasten dünnwandiger Kreiszylinder unter kombinierter Längs- und Torsionslast
- Nr. 28 Pawel Rafalski: September 1981
An Alternative Approach to the Elastic-Viscoplastic Initial-Boundary Value Problem
- Nr. 29 Heinrich Oeynhausen: November 1981
Verzweigungslasten elastoplastisch deformierter, dickwandiger Kreiszylinder unter Innendruck und Axialkraft
- Nr. 30 F.-J. Biehl: Dezember 1981
Zweiseitige Eingrenzung von Feldgrößen beim einseitigen Kontaktproblem
- Nr. 31 Maria K. Duszek: Juni 1982
Foundations of the Non-Linear Plastic Shell Theory
- Nr. 32 Reinhard Piltner: Juli 1982
Spezielle finite Elemente mit Löchern, Ecken und Rissen unter Verwendung von analytischen Teillösungen
- Nr. 33 Petrisor Mazilu: Dezember 1982
Variationsprinzip der Thermoplastizität I. Wärmeausbreitung und Plastizität
- Nr. 34 Helmut Stumpf: Dezember 1982
Unified Operator Description, Nonlinear Buckling and Post-Buckling Analysis of Thin Elastic Shells
- Nr. 35 Bernd Kaempf: März 1983
Ein Exremal-Variationsprinzip für die instationäre Wärmeleitung mit einer Anwendung auf thermoelastische Probleme unter Verwendung der finiten Elemente

- Nr. 36 Alfred Kraft: Juli 1983
Zum methodischen Entwurf mechanischer Systeme im Hinblick auf optimales Schwingungsverhalten
- Nr. 37 Petrisor Mazilu: August 1983
Variationsprinzip der Thermoplastizität II. Gekoppelte thermomechanische Prozesse
- Nr. 38 Klaus-Detlef Mickley: November 1983
Punktweise Eingrenzung von Feldgrößen in der Elastomechanik und ihre numerische Realisierung mit Fundamental-Splinefunktionen
- Nr. 39 Lutz-Peter Nolte: Dezember 1983
Beitrag zur Herleitung und vergleichende Untersuchung geometrisch nichtlinearer Schalentheorien unter Berücksichtigung großer Rotationen
- Nr. 40 Ulrich Blix: Dezember 1983
Zur Berechnung der Einschnürung von Zugstäben unter Berücksichtigung thermischer Einflüsse mit Hilfe der Finite-Element-Methode
- Nr. 41 Peter Becker: Februar 1984
Zur Berechnung von Schallfeldern mit Elementmethoden
- Nr. 42 Diemar Bouchard: Februar 1984
Entwicklung und Anwendung eines an die Diskrete-Fourier-Transformation angepaßten direkten Algorithmus zur Bestimmung der modalen Parameter linearer Schwingungssysteme
- Nr. 43 Uwe Zdebel: Dezember 1984
Theoretische und experimentelle Untersuchungen zu einem thermo-plastischen Stoffgesetz
- Nr. 44 Jan Kubik: April 1985
Thermosdiffusion Flows in a Solid with a Dominant Constituent
- Nr. 45 Horst J. Klepp: Juni 1985
Über die Gleichgewichtslagen und Gleichgewichtsbereiche nichtlinearer autonomer Systeme
- Nr. 46 J. Makowski/L.-P. Nolte/H. Stumpf: Juli 1985
Finite In-Plane Deformations of Flexible Rods - Insight into Nonlinear Shell Problems
- Nr. 47 Franz Karl Labisch: August 1985
Grundlagen einer Analyse mehrdeutiger Lösungen nichtlinearer Randwertprobleme der Elastostatik mit Hilfe von Variationsverfahren
- Nr. 48 J. Chroscielewski/L.-P. Nolte: Oktober 1985
Strategien zur Lösung nichtlinearer Probleme der Strukturmechanik und ihre modulare Aufbereitung im Konzept MESY
- Nr. 49 Karl-Heinz Bürger: Dezember 1985
Gewichtsoptimierung rotationssymmetrischer Platten unter instationärer Erregung
- Nr. 50 Ulrich Schmid: Februar 1987
Zur Berechnung des plastischen Setzens von Schraubenfedern
- Nr. 51 Jörg Frischbier: März 1987
Theorie der Stoßbelastung ortotroper Platten und ihr experimentelle Überprüfung am Beispiel einer unidirektional verstärkten CFK-Verbundplatte
- Nr. 52 W. Tampczynski: Juli 1987
Strain history effect in cyclic plasticity
- Nr. 53 Dieter Weichert: Dezember 1987
Zum Problem geometrischer Nichtlinearitäten in der Plastizitätstheorie

- Nr. 54 Heinz Antes/Thomas Meise/Thomas Wiebe: Januar 1988
Wellenausbreitung in akustischen Medien Randelement-Prozeduren im 2-D Frequenzraum und im 3-D Zeitbereich
- Nr. 55 Wojciech Pietraszkiewicz: März 1988
Geometrically non-linear theories of thin elastic shells
- Nr. 56 Jerzy Makowski/Helmut Stumpf: April 1988
Finite strain theory of rods
- Nr. 57 Andreas Pape: Mai 1988
Zur Beschreibung des transienten und stationären Verfestigungsverhaltens von Stahl mit Hilfe eines nichtlinearen Grenzflächenmodells
- Nr. 58 Johannes Groß-Weege: Juni 1988
Zum Einspielverhalten von Flächentragwerken
- Nr. 59 Peihua LIU: Juli 1988
Optimierung von Kreisplatten unter dynamischer nicht rotationssymmetrischer Last
- Nr. 60 Reinhard Schmidt: August 1988
Die Anwendung von Zustandsbeobachtern zur Schwingungsüberwachung und Schadensfrüherkennung auf mechanische Konstruktionen
- Nr. 61 Martin Pitzer: Juli 1988
Vergleich einiger FE-Formulierungen auf der Basis eines inelastischen Stoffgesetzes
- Nr. 62 Jerzy Makowski/Helmut Stumpf: Dezember 1988
Geometric structure of fully nonlinear and linearized Cosserat type shell theory
- Nr. 63 O. T. Bruhns: Januar 1989
Große plastische Formänderungen - Bad Honnef 1988
- Nr. 64 Khanh Chau Le/Helmut Stumpf/Dieter Weichert: Juli 1989
Variational principles of fracture mechanics
- Nr. 65 Guido Obermüller: Juni 1989
Ein Beitrag zur Strukturoptimierung unter stochastischen Lasten
- Nr. 66 Herbert Diehl: Juni 1989
Ein Materialmodell zur Berechnung von Hochgeschwindigkeitsdeformationen metallischer Werkstoffe unter besonderer Berücksichtigung der Schädigung durch Scherbänder
- Nr. 67 Michael Geis: November 1989
Zur Berechnung ebener, elastodynamischer Rißprobleme mit der Randelementmethode
- Nr. 68 Günter Renker: November 1989
Zur Identifikation nichtlinearer struktureller Systeme
- Nr. 69 Berthold Schieck: November 1989
Große elastische Dehnungen in Schalen aus hyperelastischen inkompressiblen Materialien
- Nr. 70 Frank Szepan: Dezember 1989
Ein elastisch-viskoplastisches Stoffgesetz zur Beschreibung großer Formänderungen unter Berücksichtigung der thermomechanischen Kopplung
- Nr. 71 Christian Scholz: Dezember 1989
Ein Beitrag zur Gestaltsoptimierung druckbelasteter Rotationsschalen
- Nr. 72 J. Badur/H. Stumpf: Dezember 1989
On the influence of E. and F. Cosserat on modern continuum mechanics and field theory

- Nr. 73 Werner Fornefeld: Januar 1990
Zur Parameteridentifikation und Berechnung von Hochgeschwindigkeitsdeformationen metallischer Werkstoffe anhand eines Kontinuums-Damage-Modells
- Nr. 74 J. Sączuk/H. Stumpf: April 1990
On statical shakedown theorems for non-linear problems
- Nr. 75 Andreas Feldmüller: April 1991
Ein thermoplastisches Stoffgesetz isotrop geschädigter Kontinua
- Nr. 76 Ulfert Rott: April 1991
Ein neues Konzept zur Berechnung viskoplastischer Strukturen
- Nr. 77 Thomas Heinrich Pingel: Juli 1991
Beitrag zur Herleitung und numerischen Realisierung eines mathematischen Modells der menschlichen Wirbelsäule
- Nr. 78 O. T. Bruhns: Dezember 1991
Große plastische Formänderungen - Bad Honnef 1991
- Nr. 79 J. Makowski/J. Chrosielewski/H. Stumpf:
Computational Analysis of Shells Undergoing Large Elastic Deformation Part I: Theoretical Foundations
- Nr. 80 J. Chrosielewski/J. Makowski/H. Stumpf:
Computational Analysis of Shells Undergoing Large Elastic Deformation Part II: Finite Element Implementation
- Nr. 81 R. H. Frania/H. Waller: Mai 1992
Entwicklung und Anwendung spezieller finiter Elemente für Kerbspannungsprobleme im Maschinenbau
- Nr. 82 B. Bischoff-Beiermann: Juli 1992
Zur selbstkonsistenten Berechnung von Eigenspannungen in polykristallinem Eis unter Berücksichtigung der Monokristallanisotropie
- Nr. 83 J. Pohé: Februar 1993
Ein Beitrag zur Stoffgesetzentwicklung für polykristallines Eis
- Nr. 84 U. Kikillus: Mai 1993
Ein Beitrag zum zyklischen Kriechverhalten von Ck 15
- Nr. 85 T. Guo: Juni 1993
Untersuchung des singulären Rißspitzenfeldes bei stationärem Rißwachstum in verfestigendem Material
- Nr. 86 Achim Menne: Januar 1994
Identifikation der dynamischen Eigenschaften von hydrodynamischen Wandlern
- Nr. 87 Uwe Folchert: Januar 1994
Identifikation der dynamischen Eigenschaften Hydrodynamischer Kopplungen
- Nr. 88 Jörg Körber: April 1994
Ein verallgemeinertes Finite-Element-Verfahren mit asymptotischer Stabilisierung angewendet auf viskoplastische Materialmodelle
- Nr. 89 Peer Schieße: April 1994
Ein Beitrag zur Berechnung des Deformationsverhaltens anisotrop geschädigter Kontinua unter Berücksichtigung der thermoplastischen Kopplung
- Nr. 90 Egbert Schopphoff: Juli 1994
Dreidimensionale mechanische Analyse der menschlichen Wirbelsäule

- | | | |
|---------|--|---------------|
| Nr. 91 | Christoph Beerens:
Zur Modellierung nichtlinearer Dämpfungsphänomene in der Strukturmechanik | Juli 1994 |
| Nr. 92 | K. C. Le/H. Stumpf:
Finte elastoplasticity with microstructure | November 1994 |
| Nr. 93 | O. T. Bruhns:
Große plastische Formänderungen - Bad Honnef 1994 | Dezember 1994 |
| Nr. 94 | Armin Lenzen:
Untersuchung von dynamischen Systemen mit der Singulärwertzerlegung - Erfassung von Strukturveränderungen | Dezember 1994 |
| Nr. 95 | J. Makowski/H. Stumpf:
Mechanics of Irregular Shell Structures | Dezember 1994 |
| Nr. 96 | J. Chrosielewski/J. Makowski/H. Stumpf:
Finte Elements for Irregular Nonlinear Shells | Dezember 1994 |
| Nr. 97 | W. Krings/A. Lenzen/u. a.:
Festschrift zum 60. Geburtstag von Heinz Waller | Februar 1995 |
| Nr. 98 | Ralf Podleschny:
Untersuchung zum Instabilitätsverhalten scherbeanspruchter Risse | April 1995 |
| Nr. 99 | Bernd Westerhoff:
Eine Untersuchung zum geschwindigkeitsabhängigen Verhalten von Stahl | Juli 1995 |
| Nr. 100 | Marc Mittelbach:
Simulation des Deformations- und Schädigungsverhaltens beim Stoßversuch mit einem Kontinuums-Damage-Modell | Dezember 1995 |
| Nr. 101 | Ulrich Hoppe:
Über grundlegende Konzepte der nichtlinearen Kontinuumsmechanik und Schalentheorie | Mai 1996 |
| Nr. 102 | Marcus Otto:
Erweiterung des Kaustikenverfahrens zur Analyse räumlicher Spannungskonzentrationen | Juni 1996 |
| Nr. 103 | Horst Lanzerath:
Zur Modalanalyse unter Verwendung der Randelementemethode | Juli 1996 |
| Nr. 104 | Andreas Wichtmann:
Entwicklung eines thermodynamisch konsistenten Stoffgesetzes zur Beschreibung der Reckalterung | August 1996 |
| Nr. 105 | Bjarne Fossa:
Ein Beitrag zur Fließflächenmessung bei vorgedehnten Stoffen | Oktober 1996 |
| Nr. 106 | Khanh Chau Le:
Kontinuumsmechanisches Modellieren von Medien mit veränderlicher Mikrostruktur | Dezember 1996 |
| Nr. 107 | Holger Behrens:
Nichtlineare Modellierung und Identifikation hydrodynamischer Kupplungen mit allgemeinen diskreten Modellansätzen | Januar 1997 |
| Nr. 108 | Johannes Moosheimer:
Gesteuerte Schwingungsdämpfung mit Elektrorheologischen Fluiden | Juli 1997 |
| Nr. 109 | Dirk Klaus Anding:
Zur simultanen Bestimmung materialabhängiger Koeffizienten inelastischer Stoffgesetze | Oktober 1997 |
| Nr. 110 | Stephan Weng:
Ein Evolutionsmodell zur mechanischen Analyse biologischer Strukturen | Dezember 1997 |

- Nr. 111 Michael Straßberger: Dezember 1997
Aktive Schallreduktion durch digitale Zustandsregelung der Strukturschwingungen mit Hilfe piezokeramischer Aktoren
- Nr. 112 Hans-Jörg Becker: Dezember 1997
Simulation des Deformationsverhaltens polykristallinen Eises auf der Basis eines monokristallinen Stoffgesetzes
- Nr. 113 Thomas Nerzak: Dezember 1997
Modellierung und Simulation der Ausbreitung adiabatischer Scherbänder in metallischen Werkstoffen bei Hochgeschwindigkeitsdeformationen
- Nr. 114 O. T. Bruhns: März 1998
Große plastische Formänderungen
- Nr. 115 Jan Steinhausen: August 1998
Die Beschreibung der Dynamik von Antriebssträngen durch Black-Box-Modelle hydrodynamischer Kupplungen
- Nr. 116 Thomas Pandorf: August 1998
Experimentelle und numerische Untersuchungen zur Kerbspitzenbeanspruchung bei schlagbelasteten Biegeproben
- Nr. 117 Claus Oberste-Brandenburg: Juni 1999
Ein Materialmodell zur Beschreibung der Austenit-Martensit Phasentransformation unter Berücksichtigung der transformationsinduzierten Plastizität
- Nr. 118 Michael Märtens: Dezember 1999
Regelung mechanischer Strukturen mit Hilfe piezokeramischer Stapelaktoren
- Nr. 119 Dirk Kamarys: Dezember 1999
Detektion von Systemveränderungen durch neue Identifikationsverfahren in der experimentellen Modalanalyse
- Nr. 120 Wolfgang Hiese: Januar 2000
Gültigkeitskriterien zur Bestimmung von Scherbruchzähigkeiten
- Nr. 121 Peter Jaschke: Februar 2000
Mathematische Modellierung des Betriebsverhaltens hydrodynamischer Kupplungen mit hybriden Modellansätzen
- Nr. 122 Stefan Müller: Februar 2000
Zum Einsatz von semi-aktiven Aktoren zur optimalen Schwingungsreduktion in Tragwerken
- Nr. 123 Dirk Eichel: Juni 2000
Zur Kondensation strukturdynamischer Aufgaben mit Hilfe von Polynommatrizen
- Nr. 124 Andreas Bürgel: August 2000
Bruchmechanische Kennwerte beim Wechsel im Versagensverhalten dynamisch scherbeanspruchter Risse
- Nr. 125 Daniela Lürding: März 2001
Modellierung großer Deformationen in orthotropen, hyperelastischen Schalenstrukturen
- Nr. 126 Thorsten Quent: Mai 2001
Ein mikromechanisch begründetes Modell zur Beschreibung des duktilen Verhaltens metallischer Werkstoffe bei endlichen Deformationen unter Berücksichtigung von Porenschädigung
- Nr. 127 Ndzi C. Bongmba: Mai 2001
Ein finites anisotropes Materialmodell auf der Basis der Hencky-Dehnung und der logarithmischen Rate zur Beschreibung duktiler Schädigung

- Nr. 128 Henning Schütte: August 2001
Ein finites Modell für spröde Schädigung basierend auf der Ausbreitung von Mikrorissen
- Nr. 129 Henner Vogelsang: Dezember 2001
Parameteridentifikation für ein selbstkonsistentes Stoffmodell unter Berücksichtigung von Phasentransformationen
- Nr. 130 Jörn Mosler: Dezember 2002
Finite Elemente mit sprungstetigen Abbildungen des Verschiebungsfeldes für numerische Analysen lokalisierter Versagenszustände
- Nr. 131 Karin Preusch: Mai 2003
Hierarchische Schalenmodelle für nichtlineare Kontinua mit der p-Version der Finite-Element Methode
- Nr. 132 Christoph Müller: August 2003
Thermodynamic modeling of polycrystalline shape memory alloys at finite strains
- Nr. 133 Martin Heiderich: Juni 2004
Ein Beitrag zur zerstörungsfreien Schädigungsanalyse
- Nr. 134 Raoul Costamagna: Juli 2004
Globale Materialbeziehungen für das geklüftete Gebirge
- Nr. 135 Markus Böl: Januar 2005
Numerische Simulation von Polymernetzwerken mit Hilfe der Finite-Elemente-Methode
- Nr. 136 Gregor Kotucha: August 2005
Regularisierung von Problemen der Topologieoptimierung unter Einbeziehung von Dichtegradienten
- Nr. 137 Michael Steiner: Februar 2006
Deformations- und Versagensverhalten innendruckbeanspruchter Stahlrohre durch Stoßbelastung
- Nr. 138 Dirk Bergmannshoff: Dezember 2006
Das Instabilitätsverhalten zug-/scherbeanspruchter Risse bei Variation des Belastungspfades
- Nr. 139 Olaf Schilling: Januar 2007
Über eine implizite Partikelmethode zur Simulation von Umformprozessen
- Nr. 140 Jörn Mosler: Mai 2007
On the numerical modeling of localized material failure at finite strains by means of variational mesh adaption and cohesive elements
- Nr. 141 Rainer Fechte-Heinen: Juni 2007
Mikromechanische Modellierung von Formgedächtnismaterialien
- Nr. 142 Christian Grabe: Juni 2007
Experimental testing and parameter identification on the multidimensional material behavior of shape memory alloys
- Nr. 143 Markus Peters: Juli 2007
Modellierung von Rissausbreitung unter Verwendung der p-Version der XFEM mit einer adaptiven Integrationsmethode
- Nr. 144 Claus Oberste-Brandenburg: Juli 2007
Thermomechanical modeling of shape memory alloys at different length scales
- Nr. 145 Stefan Reichling: Juli 2007
Das inverse Problem der quantitativen Ultraschallelastografie unter Berücksichtigung großer Deformationen

- Nr. 146 Kianoush Molla-Abbasi: Januar 2008
A Consistent Anisotropic Brittle Damage Model Based on the Concept of Growing Elliptical Cracks
- Nr. 147 Sandra Ilic: August 2008
Application of the multiscale FEM to the modeling of composite materials
- Nr. 148 Patrick Luig: Oktober 2008
A consistent Eulerian rate model for shape memory alloys
- Nr. 149 Lidija Stanković: Februar 2009
Describing multiple surface localised failure by means of strong discontinuities at finite strains
- Nr. 150 Thorsten Bartel: März 2009
Multiskalenmodellierung martensitischer Phasentransformationen in Formgedächtnislegierungen unter Verwendung relaxierter Energiepotenziale

**Mitteilungen aus dem Institut für Mechanik
RUHR-UNIVERSITÄT BOCHUM
Nr. 150**

978-3-935892-28-5