Numerische Umsetzung einer Fließeckentheorie metallischer Vielkristalle und ihre Anwendung auf die Scherbandanalyse mittels inkrementeller Energieminimierung

Der Fakultät Maschinenbau der Universität Dortmund zur Erlangung des Grades Doktor-Ingenieurin (Dr.-Ing.) vorgelegte Dissertation

> von Andrea Schütze aus Köln

2006

Dissertation eingereicht am:	9. August 2006
Tag der mündlichen Prüfung:	31. Oktober 2006
Referent :	Prof. DrIng. K. Thermann
Korreferent:	Prof. Dr. rer. nat. B. Svendsen

Vorwort

Die vorliegende Dissertation entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftliche Mitarbeiterin am Fachgebiet Mechanik, insbesondere Maschinendynamik der Fakultät Maschinenbau der Universität Dortmund.

Mein besonderer Dank gilt Herrn Prof. Dr.-Ing. Klaus Thermann für die Betreuung und Förderung dieser Arbeit, deren Fortgang er mit hohem persönlichen Engagement unterstützt hat. In zahllosen Diskussionen habe ich von seinem fachlichen Wissen und seiner Offenheit gegenüber jeglichen Fragestellungen profitieren dürfen.

Herrn Prof. rer. nat. Bob Svendsen möchte ich für sein Interesse an der Arbeit und die Übernahme des Korreferates danken.

Meine langjährigen Kollegen Christian Lulla und Vadim Palnau haben mir große Unterstützung entgegengebracht und viele produktive Anregungen gegeben. Ihnen danke ich für die schöne gemeinsame Zeit und ihre Freundschaft.

Gerade auch während der Entstehung dieser Arbeit konnte ich mich immer auf den Beistand meiner Familie und meiner Freunde verlassen. Sorgfältiges Korrekturlesen, organisatorische Hilfe und fortwährende Motivation haben sehr zum Gelingen der Arbeit beigetragen. Vielen Dank an Alle.

Mein herzlichster Dank gilt meinen Eltern Bärbel und Wolfgang Schütze für ihre vorbehaltlose Unterstützung und Liebe. Ihnen widme ich diese Arbeit.

Dortmund, 28. Dezember 2006

Andrea Schütze

Kurzfassung

Die vorliegende Arbeit basiert auf einem phänomenologischen Modell des elastoplastischen Verhaltens metallischer Vielkristalle (Petryk und Thermann, 1997). In Übereinstimmung mit mikromechanischen Befunden geht dieses Zwei-Flächen-Modell von der Ausbildung einer Ecke der Fließfläche im aktuellen Belastungspunkt aus. Es beschränkt erreichbare Spannungszustände durch eine zusätzliche, extremale Fläche. Diese beiden Eigenschaften ermöglichen indirekt die Modellierung kristallographischer Effekte, partielle Entlastung und Verfestigung, durch unabhängige konstitutive Funktionen. Die zeitunabhängigen, inkrementell nichtlinearen Ratengleichungen werden für endliche Verzerrungen numerisch umgesetzt und verifiziert. Besondere Beachtung erfährt dabei ein mit zweiter Ordnung genaues Zeitintegrationsverfahren.

Es wird gezeigt, dass das Materialmodell für die Simulation von Deformationsprozessen, die mit materiellen Instabilitäten verbunden sind, geeignet ist. Zu diesem Zweck werden ebene Prozesse der isochoren Stauchung mit überlagerter Scherung mit Hilfe der Methode der Finiten Elemente numerisch analysiert. Hierbei erfolgt in jedem Zeitschritt eine automatische Auswahl des stabilen Deformationspfades durch Minimierung der inkrementellen Energie (Petryk, 1982, Petryk und Thermann, 1992). Die erstmalige Ausbildung und Entwicklung mehrfacher makroskopischer Scherbänder wird dokumentiert und diskutiert. Die Vorhersagen stimmen teilweise sehr gut mit experimentellen Ergebnissen überein. Mögliche Richtungen zur Weiterentwicklung der benutzten Methode werden aufgezeigt.

Abstract

The present work is based on a phenomenological model of elastoplastic behaviour of metal polycrystals (Petryk and Thermann, 1997). In agreement with micromechanical obsevations, this two-surface model predicts a vertex on the yield-surface at the current loading point and restricts the stress states by an additional extremal surface. These two features allow the modelling of crystallographic effects, partial unloading and hardening, by separate constitutive functions. A finite strain version of the time-independent, incrementally non-linear rate equations is implemented and verified with emphasis on a second order accurate time integration scheme.

It is shown that the material model is suited for the analysis of material instability problems. For this purpose plane deformation processes of isochoric compression and superimposed shear have been numerically analyzed by the Finite-Element method. In these applications the stable deformation path is automatically selected by incremental energy minimization as proposed by Petryk (1982) and Petryk and Thermann (1992). The formation and development of multiple macroscopic shear bands is documented and discussed. Predictions of the theory are in partial agreement with experimental observations. Directions in which the employed method may be extended are indicated.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung			1
2	Sto	ffunabl	hängige Grundlagen	3
	2.1	Kinerr	atische Größen	3
		2.1.1	Deformationsgradient	3
		2.1.2	Verzerrungen	4
	2.2	Zeitab	leitungen kinematischer Größen	5
		2.2.1	Spin der Eulerschen Basis	5
		2.2.2	Spin der Lagrangeschen Basis	6
		2.2.3	Zeitableitung Lagrangescher Verzerrungsmaße	6
	2.3	Spann	ungen	7
		2.3.1	Cauchy-, Kirchhoff- und nominelle Spannung	7
		2.3.2	Konjugierte Spannungen	7
	2.4	Zeitab	leitungen statischer Größen	8
		2.4.1	Jaumann Ableitung	8
		2.4.2	Zeitableitungen der ersten Piola-Kirchhoff-Spannung	9
		2.4.3	Zeitableitungen der zweiten Piola-Kirchhoff-Spannung	9
3	Elas	stische	Ratengleichungen und Transformationsgesetze	11
	3.1	Isotro	pes elastisches Materialverhalten	11
		3.1.1	Konstitutive Gleichungen	11
		3.1.2	Inkrementelle Moduli und Nachgiebigkeiten	14
		3.1.3	Inkrementelle Größen zweiter Ordnung	16
	3.2	Transf	formationsgesetze	19
		3.2.1	Wechsel der Referenzkonfiguaration	19
		3.2.2	Ratengleichungen erster Ordnung	20
		3.2.3	Ratengleichungen zweiter Ordnung	21
	3.3	Implei	mentierung konstitutiver Beziehungen	23
		3.3.1	Matrix-Vektor-Darstellungen	23
		3.3.2	Wechsel der Basis	24
		3.3.3	Elastische Volumenänderung und Kirchhoff-Spannung	25
		3.3.4	Berechnung der $\overline{\mathbf{C}}$ -Moduli aus den \mathcal{L} -Moduli	26
		3.3.5	Struktur der Materialroutinen	27
	3.4	Test d	er Implementierung	32
		3.4.1	Transformationsroutinen für Jaumann-Moduli	32
		3.4.2	Reine Volumenänderung	34
		3.4.3	Einfache Scherung	36
		3.4.4	Starrkörperrotation	39
		3.4.5	Einachsiger Zug	41
		3.4.6	Zusammenfassung der Testergebnisse	41

4	Elas	Elastoplastische Ratengleichungen eines phänomenologischen Fließecken-				
	moo	dells m	etallischer Vielkristalle	43		
	4.1	Konsti	tutive Ratengleichungen	. 43		
	4.2	Zwei-F	lächen-Modell mit innerer Fließecke	. 43		
		4.2.1	Grundgleichungen	. 43		
		4.2.2	Plastischer Nachgiebigkeitstensor	. 47		
		4.2.3	Modellparameter	. 51		
		4.2.4	Vergleich mit mikromechanischen Vorhersagen	. 55		
		4.2.5	Nachgiebigkeiten bei kombinierter Zug- und Schubbeanspruchung	. 59		
	4.3	Verfest	tigung	. 62		
		4.3.1	Kombinierte isotrope und kinematische Verfestigung	. 62		
		4.3.2	Isotrope Verfestigung	. 64		
5	Ink	rement	elle Energieminimierung	65		
0	5.1	Stabili	tätskriterium für quasistatische Deformationsprozesse	65		
	5.2	Finite-	Element-Implementierung des Energiekriteriums	. 66		
	5.3	Räuml	iche Diskretisierung und Bandbedingungen	. 00 68		
	5.4	Semia	nalytische Lösungen auf der Grundlage des Energiekriteriums	. 69		
	0.1	5.4.1	Instabilität des homogenen Prozesses	. 69		
		5.4.2	Abschätzung des nachkritischen Verhaltens	. 70		
G	Val	dianun	a den Einite Element Implementienung	79		
U	6 1		rana Deformationsprozesse und Zeitintegration	72		
	0.1 6 9	Deferr	pationsmuster sum Zeitnunkt der ersten Bifurkation	· 12		
	0.2 6.3	Erstell	Phase des nachkritischen Verhaltens	. 70		
	0.5	LISUE 1				
7	Nui	merisch	ne Analyse des nachkritischen Deformationsverhaltens	80		
	7.1	Isocho	re Stauchung	. 80		
	7.2	Isocho	re Stauchung mit überlagerter Scherung	. 87		
	7.3	Kritise	che Würdigung der Ergebnisse	. 94		
		7.3.1	Vergleich mit Experimenten	. 94		
		7.3.2	Einfluss der anfänglichen Scherbandverteilung	. 95		
		7.3.3	Einfluss der Zeitintegration	. 96		
		7.3.4	Einfluss der Netzdichte	. 99		
		7.3.5	Schwächen der Optimierungsstrategie	. 100		
8	8 Ausblick					
9	\mathbf{Zus}	ammer	ıfassung	110		
Li	Literaturverzeichnis					

1 Einleitung

Phänomenologische Beschreibungen des Formänderungsverhaltens polykristalliner Metalle erzielen bei Simulationen genaue Ergebnisse mit vertretbarem zeitlichen Aufwand. Die klassische Plastizitätstheorie, die durch die Normalenregel und Annahme einer glatten Fließfläche gekennzeichnet ist, stößt jedoch bei großen Deformationen mit möglichen Verzweigungen des Deformationspfades an ihre Grenzen. Ein Beispiel hierfür ist die seit langem bekannte Diskrepanz zwischen ihren Vorhersagen und experimentellen Befunden in Bifurkationsuntersuchungen.

Auch die Behandlung materieller Instabilitäten erfordert ein realitätsnäheres Materialmodell, dass die kristallographische Natur des Werkstoffs berücksichtigt. Eine Möglichkeit besteht darin, den Vielkristall als Aggregat von Einkristallen zu betrachten, wobei man sich auf die seit Rice (1971) und Hill und Rice (1972) kontinuierlich erforschte Theorie der Einkristallplastizität stützen kann. Die hohen Rechenzeiten entsprechender Simulationen – auch bei moderner Rechnerleistung – und Unsicherheiten in der Bestimmung der Kristalldaten lassen aber weiterhin Raum für alternative, mikromechanisch begründete phänomenologische Ansätze.

So wird in der vorliegenden Arbeit eine Fließtheorie verwendet, die die Ausbildung einer scharfen Ecke in der Begrenzung des elastischen Bereichs am aktuellen Punkt des Spannungsraums vorsieht. Diese ermöglicht realistisch niedrige inkrementelle Steifigkeiten bei plötzlichem Wechsel der Belastungsrichtung, die die hier untersuchten materiellen Instabilitäten in Form von makroskopischen Scherbändern begünstigen. Die Stoffgleichung ist inkrementell nichtlinear.

Dieses Konzept hat seinen Ursprung in den Untersuchungen von Batdorf und Budiansky (1949) und Sanders (1954), die sich an Gleitvorgängen im Einkristall orientieren. Sie sagen erstmals die Existenz einer nichtglatten Fließfläche voraus. Die genauere theoretische Behandlung der Struktur von Fließflächen multipler Gleitsysteme in Einkristallen von Koiter (1953), Mandel (1965) und Hill (1966) motivieren Sewell (1974) und Christoffersen und Hutchinson (1979) zu phänomenologischen Ansätzen mit der Fließecke als konstitutivem Element. Sie interpretieren die Fließfläche als Einhüllende der auf den makroskopischen Spannungsraum projizierten glatten Fließkurven vieler einzelner kristallographischer Gleitmechanismen.

Auf dieser Grundlage entwickeln Petryk und Thermann (1997) ein Modell, das eine Kombination aus den Konzepten der Fließeckentheorie und der klassischen Plastizitätstheorie darstellt. Sie weisen der von Huber und v.Mises formulierten Fließfläche die Aufgabe einer extremalen Begrenzung zu, die der aktuelle Spannungsvektor nie erreicht. So können die physikalischen Effekte kinematischer und isotroper Verfestigung in gewohnter Form für die äußere Fläche formuliert werden. Die zu Grunde liegende Fließeckentheorie formuliert die Moduli der Spannungs-Dehnungs-Beziehung in Abhängigkeit von der aktuellen Spannungsrate. Sie sieht zwischen den Bereichen vollständiger plastischer Belastung und elastischer Entlastung eine stetige Übergangszone vor, die partielle Entlastungen von Gleitsystemen berücksichtigt.

Die vorliegende Arbeit beschreibt eine einfache Implementierung des Modells von Petryk und Thermann (1997) unter Erweiterung auf endliche Verzerrungen. Die gegenseitige Beeinflussung der Gleitmechanismen, wie die Verfestigung, ist nicht direkt in der inkrementellen Formulierung des Materialverhaltens enthalten. Sie fließt lediglich über einen Parameter ein, der durch den relativen Abstand der aktuellen Spannung von der äußeren Fläche bestimmt ist. Die Evolution der extremalen Fläche ist in den Anwendungen gemäß eines üblichen Potenzverfestigungsgesetzes festgelegt. Die Übereinstimmung der Spannungs-Dehnungs-Beziehung bei einachsiger Belastung mit denen gebräuchlicher mikromechanischer Theorien wird aufgezeigt. Die Beschreibung der plastischen Abläufe wird durch ein isotropes hyperelastisches Materialgesetz ergänzt.

Das Lösungsverfahren für das entstandene Ratenproblem fußt auf dem von Petryk (1982, 1985) eingeführten Energiekriterium für Deformationsprozesse. Der Algorithmus wählt bei nicht eindeutiger Lösungsmenge physikalisch begründet den stabilen Deformationspfad durch Minimierung eines Energiefunktionals aus.

Bei der Auswertung der Ergebnisse konzentriert sich die vorliegende Arbeit auf die Beschreibung und Analyse des nachkritischen Verhaltens des implementierten Werkstoffmodells. Da die Frage, welche Faktoren das langfristige Ergebnis beeinflussen, von besonderem Interesse ist, ist der Betrachtungszeitraum auf die Entstehung multipler Scherbänder ausgelegt. Die systematische Suche nach Einflussfaktoren umfasst im Besonderen die Verbesserung durch höhere Genauigkeit des Zeitintegrationsverfahrens. Da im Zuge der Untersuchungen Zweifel an der Reichweite der verwendeten Minimierungsstrategie aufkamen, enthält der Ausblick unter anderem erste Testrechnungen einer weiterführenden Strategie.

Die Notation der Formeln dieser Arbeit folgt der Schreibweise von Gurtin (1972). Buchstaben in Fettdruck sind für Vektoren und Tensoren reserviert, Tensoren 4. Stufe werden durch die Verwendung kalligraphischer oder serifenloser Lettern herausgestellt. Die Indizes der Komponentendarstellungen gelten bezüglich einer kartesischen Basis unter Berücksichtigung der Summationskonvention. Die Zuordnung eines Skalars ist durch einen Punkt gekennzeichent, z.B. $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = A_{ij}B_{ij}$, während das Produkt \mathbf{AB} einen Tensor mit den Elementen $(\mathbf{AB})_{ij} = A_{ik}B_{kj}$ beschreibt. $\mathbf{A} = \mathbf{CB}$ bildet mit $A_{ij} = C_{ijkl}B_{kl}$ einen zweistufigen Tensor \mathbf{A} linear auf einen ebenfalls zweistufigen Tensor \mathbf{B} ab.

2 Stoffunabhängige Grundlagen

2.1 Kinematische Größen

2.1.1 Deformationsgradient

Ein materieller Punkt eines deformierbaren Körpers hat in einer Referenzkonfiguration die kartesischen Koordinaten (X_1, X_2, X_3) . Diese dienen zur Identifikation im folgenden Deformationsprozess. Der Ort dieses Punktes kann nun zu einer beliebigen Zeit t mit

$$x_i(X_1, X_2, X_3, t)$$
 (1)

eindeutig beschrieben werden. Der Gradiententensor des Ortsvektorfeldes, der Deformationsgradient **F** mit den Komponenten $F_{ij} = \partial x_i / \partial X_j$, bildet somit ein materielles Linienelement linear von der Referenz- auf die aktuelle Konfiguration ab.

$$d\mathbf{x} = \mathbf{F} \, d\mathbf{X} \tag{2}$$

Dies ist die Lagrangesche Darstellung, die auch für die folgenden Tranformationsregeln verwendet werden soll. Drückt man hingegen Größen der Referenzkonfiguration über solche des verformten Kontinuums aus, so entspricht das der Eulerschen Beschreibungsweise.

Eine Abbildung materieller Flächen- und Volumenelemente von der Ausgangslage in die Momentankonfiguration mit Hilfe des Deformationsgradienten läßt sich mit $J \equiv \det(\mathbf{F})$ zu

$$d\mathbf{a} = J \, \mathbf{F}^{-T} \, d\mathbf{A} \tag{3}$$

$$dv = J \, dV \tag{4}$$

bestimmen. Hier zeigt sich, dass die Beschränkung auf Deformationsgradienten mit einer positiven Determinante vorausgesetzt werden kann, so dass Invertierbarkeit gewährleistet und Selbstdurchdringung ausgeschlossen ist.

Damit ist die multiplikative Zerlegung des Deformationsgradienten in einen symmetrischen, positiv definiten und einen orthogonalen Tensor in eindeutiger Weise möglich. Diese Polarzerlegung interpretiert jede Deformation als Überlagerung reiner Streckung des Elementes in der Referenzkonfiguration und nachfolgender Starrkörperrotation, bzw. in umgekehrter Folge als lokale Drehung mit anschließender Streckung

$$\mathbf{F} = \mathbf{R}\mathbf{U} = \mathbf{V}\mathbf{R}.\tag{5}$$

Die Bezeichnung von \mathbf{U} und \mathbf{V} als Rechts- bzw. Linksstrecktensor leitet sich aus der jeweiligen Stellung rechts oder links vom Rotationstensor \mathbf{R} ab. Aufgrund der Voraussetzungen haben die Strecktensoren die gleichen positiven reellen Eigenwerte und die Eigenvektoren bilden jeweils eine orthogonale Basis.

$$\mathbf{U} = \sum_{i=1}^{3} \lambda_i \, \mathbf{N}_i \otimes \mathbf{N}_i \tag{6}$$

$$\mathbf{V} = \sum_{i=1}^{3} \lambda_i \, \mathbf{n}_i \otimes \mathbf{n}_i \tag{7}$$

Wie aus (5) direkt ersichtlich, sind die normierten Hauptrichtungen N_i in der Ausgangslage und n_i in der aktuellen Lage um den Rotationstensor gegeneinander verdreht

$$\mathbf{n}_i = \mathbf{R} \mathbf{N}_i. \tag{8}$$

Man bezeichnet sie auch als Lagrangesche bzw. Eulersche Achsen.

Die aktuelle Länge eines materiellen Linienelementes

$$\sqrt{d\mathbf{x} \cdot d\mathbf{x}} = \sqrt{\mathbf{F}d\mathbf{X} \cdot \mathbf{F}d\mathbf{X}} = \sqrt{d\mathbf{X} \cdot \mathbf{F}^T \mathbf{F}d\mathbf{X}}$$
(9)

hängt über $\mathbf{F}^T \mathbf{F}$ mit der Ausgangslänge zusammen. Dies motiviert den Hinweis auf die Quadrate der Strecktensoren, den rechten und linken Cauchy-Green-Tensor

$$\mathbf{U}^2 = \mathbf{F}^T \mathbf{F} = \sum_{i=1}^3 \lambda_i^2 \, \mathbf{N}_i \otimes \mathbf{N}_i \tag{10}$$

$$\mathbf{V}^2 = \mathbf{F}\mathbf{F}^T = \sum_{i=1}^3 \lambda_i^2 \,\mathbf{n}_i \otimes \mathbf{n}_i,\tag{11}$$

als deren Eigenrichtungen N_i und n_i auch gedeutet werden können.

2.1.2 Verzerrungen

Mit **U** ist ein Tensor eingeführt worden, der nur Längen- und Winkeländerungen, nicht aber die Rotation der Basis beschreibt. Mit einer beliebigen glatten, monoton zunehmenden Funktion $e(\lambda)$ läßt sich nun ein tensorielles Verzerrungsmaß

$$\mathbf{E} = \sum_{i=1}^{3} e(\lambda_i) \mathbf{N}_i \otimes \mathbf{N}_i$$

definieren (Hill, 1968). Es sollte sinnvollerweise verschwinden, wenn keine Verzerrungen vorliegen und bei kleinen Verzerrungen in das übliche Maß der linearisierten Theorie übergehen. Daher unterwirft man die Skalierungsfunktion den Bedingungen

$$e(1) = 0$$
 und $e'(1) = 1.$ (12)

Diese Forderung erfüllt beispielsweise die Familie der Tensoren (Doyle und Ericksen, 1956)

$$\mathbf{E}^{(n)} = \frac{1}{n} (\mathbf{U}^n - \mathbf{I}) \qquad \text{mit} \qquad \mathbf{e}^{(n)} = \frac{1}{n} (\lambda^n - 1), \tag{13}$$

der auch die in der Literatur häufig verwendeten Verzerrungsmaße

$$\begin{aligned}
 E^{(0)} &= \ln{(\mathbf{U})} & (\text{Hencky}) \\
 E^{(1)} &= \mathbf{U} - \mathbf{I} & (\text{Biot}) \\
 E^{(2)} &= \frac{1}{2}(\mathbf{U}^2 - \mathbf{I}) & (\text{Green}) \\
 E^{(-2)} &= \frac{1}{2}(\mathbf{I} - \mathbf{U}^{-2}) & (\text{Almansi}).
 \end{aligned}$$
(14)

angehören.

2.2 Zeitableitungen kinematischer Größen

2.2.1 Spin der Eulerschen Basis

Die Eulersche Basis $\{\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2, \mathbf{n}_3\}$ ist durch das Eigenwertproblem

$$(\mathbf{F}\mathbf{F}^T - \lambda_j^2 \mathbf{I}) \mathbf{n}_j = \mathbf{0}$$
(15)

festgelegt. Mit Hilfe des räumlichen Geschwindigkeitsgradienten

$$\mathbf{L} = \mathbf{\dot{F}}\mathbf{F}^{-1}$$

kann die Zeitableitung der Gleichung (15) in der Form

$$(\mathbf{L}\mathbf{F}\mathbf{F}^{T} + \mathbf{F}\mathbf{F}^{T}\mathbf{L}^{T} - 2\lambda_{j}\dot{\lambda}_{j}\mathbf{I})\mathbf{n}_{j} + (\mathbf{F}\mathbf{F}^{T} - \lambda_{j}^{2}\mathbf{I})\dot{\mathbf{n}}_{j} = \mathbf{0}$$

dargestellt werden. Skalarmultiplikation mit \mathbf{n}_i ergibt

$$\lambda_j^2 \mathbf{n}_i \cdot \mathbf{L} \mathbf{n}_j + \lambda_i^2 \mathbf{n}_i \cdot \mathbf{L}^T \mathbf{n}_j - 2\lambda_j \dot{\lambda}_j \,\delta_{ij} + (\lambda_i^2 - \lambda_j^2) \,\mathbf{n}_i \cdot \dot{\mathbf{n}}_j = 0, \tag{16}$$

wenn man (15) beachtet. Für $i \neq j$ folgt das auf Biot (1965) und Hill (1969, 1970) zurückgehende Ergebnis über den Spin der Eulerschen Basis:

• Die Zeitableitung der Eulerschen Basisvektoren $\{\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2, \mathbf{n}_3\}$ ist im Falle paarweise verschiedener Hauptstreckungen in der Form

$$\dot{\mathbf{n}}_i = \mathbf{W}^E \, \mathbf{n}_i \tag{17}$$

darstellbar, wobei die Komponenten des antimetrischen Spintensors $\mathbf{W}^{\!E}$ durch

$$W_{ij}^E = \mathbf{n}_i \cdot \mathbf{W}^E \mathbf{n}_j = \mathbf{n}_i \cdot \dot{\mathbf{n}}_j = \frac{\lambda_j^2 L_{ij} + \lambda_i^2 L_{ji}}{\lambda_j^2 - \lambda_i^2} = W_{ij} - \frac{\lambda_i^2 + \lambda_j^2}{\lambda_i^2 - \lambda_j^2} D_{ij} \qquad (i \neq j) \quad (18)$$

gegeben sind und

$$L_{ij} = \mathbf{n}_i \cdot \mathbf{L} \mathbf{n}_j,$$

$$W_{ij} = \mathbf{n}_i \cdot \mathbf{W} \mathbf{n}_j,$$

$$D_{ij} = \mathbf{n}_i \cdot \mathbf{D} \mathbf{n}_j$$
(19)

die Komponenten des räumlichen Geschwindigkeitsgradienten **L**, des materiellen Spins $\mathbf{W} = \frac{1}{2} (\mathbf{L} - \mathbf{L}^T)$ bzw. der Eulerschen Verzerrungsgeschwindigkeit $\mathbf{D} = \frac{1}{2} (\mathbf{L} + \mathbf{L}^T)$ auf den Eulerschen Achsen bezeichnen.

Als weiteres nützliches Ergebnis (vgl. Hill (1978)) folgt aus (16) im Falle i = j:

• Die Normalkomponenten der Eulerschen Verzerrungsgeschwindigkeit auf den Eulerschen Achsen stimmen mit der Zeitableitung der logarithmischen Hauptdehnung überein, d.h.

$$\frac{\dot{\lambda}_i}{\lambda_i} = (\ln \lambda_i)^{\bullet} = L_{ii} = D_{ii}.$$
(20)

2.2.2 Spin der Lagrangeschen Basis

Den Spin der Lagrangeschen Basis erhält man nach dem gleichen Muster in einfacher Weise durch Zeitableitung der Eigenwertgleichung

$$\left(\mathbf{F}^T \mathbf{F} - \lambda_j^2 \mathbf{I}\right) \mathbf{N}_j = 0 \tag{21}$$

und nachfolgende Skalarmultiplikation mit N_i , wenn man den aus der Abbildung materieller Linienelemente folgenden Zusammenhang

$$\mathbf{F}\,\mathbf{N}_i = \lambda_i\,\mathbf{n}_i$$

berücksichtigt:

• Die Zeitableitung der Lagrangeschen Basisvektoren $\{N_1, N_2, N_3\}$ ist im Falle paarweise verschiedener Hauptstreckungen in der Form

$$\dot{\mathbf{N}}_i = \mathbf{W}^L \,\mathbf{N}_i \tag{22}$$

darstellbar mit

$$W_{ij}^{L} = \mathbf{N}_{i} \cdot \mathbf{W}^{L} \mathbf{N}_{j} = \mathbf{N}_{i} \cdot \dot{\mathbf{N}}_{j} = \frac{2\lambda_{i}\lambda_{j}}{\lambda_{j}^{2} - \lambda_{i}^{2}} D_{ij} \qquad (i \neq j)$$
(23)

als Komponenten des antimetrischen Spintensors \mathbf{W}^{L} auf den Lagrangeschen Achsen und D_{ij} als Komponenten der Eulerschen Verzerrungsgeschwindigkeit auf den Eulerschen Achsen. (Hill, 1969, 1978, siehe auch Ogden, 1984)

Im Fall i = j folgt auch hier das aus (20) bekannte Ergebnis.

2.2.3 Zeitableitung Lagrangescher Verzerrungsmaße

Mit Hilfe des Spins der Lagrangeschen Basis lässt sich die Zeitableitung eines allgemeinen Lagrangeschen Verzerrungstensors direkt ausrechnen.

• Die Zeitableitung des Lagrangeschen Verzerrungstensors

$$\mathbf{E} = \sum_{i=1}^{3} e(\lambda_i) \, \mathbf{N}_i \otimes \mathbf{N}_i \tag{24}$$

mit der Skalierungsfunktion $e(\lambda)$ hat auf den Lagrangeschen Achsen die Komponenten

$$(\dot{\mathbf{E}})_{ij} = \mathbf{N}_i \cdot \dot{\mathbf{E}} \, \mathbf{N}_j = \begin{cases} e'(\lambda_i) \dot{\lambda}_i, & (i = 1, 2, 3) \\ W_{ij}^L \left(e(\lambda_j) - e(\lambda_i) \right) & (i \neq j). \end{cases}$$
(25)

Hierin bezeichnet

$$e'(\lambda) = \frac{\mathrm{d}e(\lambda)}{\mathrm{d}\lambda}$$

die Ableitung der Skalierungsfunktion nach dem Argument.

2.3 Spannungen

2.3.1 Cauchy-, Kirchhoff- und nominelle Spannung

Es sei $d\mathbf{f}$ der Schnittkraftvektor auf einem infinitesimalen Flächenelement $d\mathbf{a}$ in der aktuellen Konfiguration. Dieser kann durch lineare Abbildung des Flächenelementes sowohl in der momentanen als auch in der Ausgangskonfiguration ermittelt werden.

$$d\mathbf{f} = \boldsymbol{\sigma} d\mathbf{a} = J \boldsymbol{\sigma} \mathbf{F}^{-T} d\mathbf{A}$$
(26)

 σ wird Cauchy-Spannungstensor genannt. Die Überführung in die zweite Darstellung mit (3) bringt den 1. Piola-Kirchhoff Tensor

$$\mathbf{S} = J\boldsymbol{\sigma}\mathbf{F}^{-T} = \boldsymbol{\tau}\mathbf{F}^{-T} \tag{27}$$

hervor, dessen Transponierte als nominelle Spannung bezeichnet wird. Die Einführung des Kirchhoff-Spannungstensors

$$\boldsymbol{\tau} = J\boldsymbol{\sigma} \tag{28}$$

ermöglicht im Folgenden eine günstigere Formulierung.

2.3.2 Konjugierte Spannungen

Die der Lagrangeschen Verzerrung \mathbf{E} zugeordnete konjugierte Spannung \mathbf{T} ist durch

$$\mathbf{T} \cdot \dot{\mathbf{E}} = \dot{w} = \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{D} \tag{29}$$

energetisch über die spezifische, auf das Referenzvolumen bezogene, Spannungsleistung \dot{w} definiert (Hill, 1968). Eine statische Interpretation der konjugierten Spannung als flächenbezogene Kraft ist i. Allg. schwierig (vgl. hierzu etwa Hill (1968) und McVean (1968)). Den allgemeinen Zusammenhang zwischen **T** und der Kirchhoff-Spannung τ findet man leicht mit Hilfe der Hillschen (1970) Hauptachsenmethode:

• Die Komponenten der zur Verzerrung

$$\mathbf{E} = \sum_{i=1}^{3} e(\lambda_i) \, \mathbf{N}_i \otimes \mathbf{N}_i$$

konjugierten Spannung

$$\mathbf{T} = T_{ij} \, \mathbf{N}_i \otimes \mathbf{N}_j \tag{30}$$

sind auf den Lagrangeschen Achsen durch

$$T_{ij} = \mathbf{N}_i \cdot \mathbf{T} \mathbf{N}_j = \begin{cases} \frac{\tau_{ii}}{\lambda_i e'(\lambda_i)} & (i=j) \\ \frac{\lambda_i + \lambda_j}{2\lambda_i \lambda_j} \frac{\lambda_i - \lambda_j}{e(\lambda_i) - e(\lambda_j)} \tau_{ij} & (i \neq j, \ \lambda_i \neq \lambda_j) \\ \frac{\tau_{ij}}{\lambda_i e'(\lambda_i)} & (i \neq j, \ \lambda_i = \lambda_j) \end{cases}$$
(31)

gegeben. Hierbei sind

$$\tau_{ij} = \mathbf{n}_i \cdot \boldsymbol{\tau} \, \mathbf{n}_j \tag{32}$$

die Komponenten der Kirchhoff Spannung au auf den Eulerschen Achsen.

Man hat hierzu nur die linke und rechte Seite der Definitionsgleichung (29) auf den Lagrangeschen bzw. Eulerschen Achsen unter Berücksichtigung von (20) und (25) anzuschreiben:

$$\begin{aligned} \mathbf{T} \cdot \mathbf{E} &= T_{ij}(\mathbf{E})_{ij} \\ &= T_{11}e'(\lambda_1)\dot{\lambda}_1 + T_{12}W_{12}^L \left\{ e(\lambda_2) - e(\lambda_1) \right\} + T_{21}W_{21}^L \left\{ e(\lambda_1) - e(\lambda_2) \right\} + \cdots \\ &= T_{11}e'(\lambda_1)\dot{\lambda}_1 + 2 T_{12}W_{12}^L \left\{ e(\lambda_2) - e(\lambda_1) \right\} + \cdots \\ &= T_{11}e'(\lambda_1)\lambda_1 D_{11} + 2 T_{12} \left\{ e(\lambda_2) - e(\lambda_1) \right\} \frac{2\lambda_1\lambda_2}{\lambda_2^2 - \lambda_1^2} D_{12} + \cdots \\ \mathbf{\tau} \cdot \mathbf{D} &= \tau_{ij}D_{ij} \\ &= \tau_{11}D_{11} + 2\tau_{12}D_{12} + \cdots \end{aligned}$$

Vergleich der Koeffizienten der D_{ij} liefert dann das behauptete Ergebnis. Für die Greensche Verzerrung $\mathbf{E}^{(2)}$ mit der Skalierungsfunktion $e(\lambda) = \frac{1}{2} (\lambda^2 - 1)$ liefert (31) mit (32) als konjugierte Spannung den bekannten 2. Piola-Kirchhoff Spannungstensor

$$\mathbf{T}^{(2)} = T_{ij}^{(2)} \mathbf{N}_i \otimes \mathbf{N}_j = \sum_{i,j} \frac{\tau_{ij}}{\lambda_i \lambda_j} \mathbf{N}_i \otimes \mathbf{N}_j = \sum_{i,j} \frac{\tau_{ij}}{\lambda_i \lambda_j} (\lambda_i \mathbf{F}^{-1} \mathbf{n}_i) \otimes (\lambda_j \mathbf{F}^{-1} \mathbf{n}_j) = \mathbf{F}^{-1} \boldsymbol{\tau} \mathbf{F}^{-T}.$$

Der Zusammenhang

.

$$\boldsymbol{\tau} = \mathbf{F} \mathbf{T}^{(2)} \mathbf{F}^T \tag{33}$$

folgt auch direkt ohne Rückgriff auf die Hauptachsendarstellung mit

$$\mathbf{E}^{(2)} = \frac{1}{2} \left(\mathbf{F}^T \mathbf{F} - \mathbf{I} \right)$$
$$\dot{\mathbf{E}}^{(2)} = \mathbf{F}^T \mathbf{D} \mathbf{F}$$

aus (29):

$$\mathbf{T}^{(2)} \cdot \dot{\mathbf{E}}^{(2)} = \mathbf{T}^{(2)} \cdot \mathbf{F}^T \mathbf{D} \mathbf{F} = \mathbf{F} \mathbf{T}^{(2)} \mathbf{F}^T \cdot \mathbf{D} = \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{D}$$
 für alle \mathbf{D} .

2.4Zeitableitungen statischer Größen

Die Formulierung konstitutiver Beziehungen sollte unabhängig vom jeweils gewählten Bezugssystem erfolgen. Man verwendet also nur sogenannte objektive Maße, die diese Forderung erfüllen.

2.4.1Jaumann Ableitung

Die materielle Zeitableitung Eulerscher Spannungsmaße beinhaltet die Änderung der Basis. In der aktuellen Konfiguration muss also eine objektive Spannungsrate definiert werden. Hier wird die Jaumann Ableitung verwendet, deren Basis sich mit dem materiellen Spin W verändert. Am Beispiel der Kirchhoffspannung ist sie als

$$\dot{\boldsymbol{\tau}} = \dot{\boldsymbol{\tau}} + \boldsymbol{\tau} \mathbf{W} - \mathbf{W} \boldsymbol{\tau} \tag{34}$$

definiert. Durch die Cauchy-Spannung ausgedrückt ergibt sich der Ausdruck

$$\overset{\mathbf{\nabla}}{\boldsymbol{\tau}} = J\left(\overset{\mathbf{\nabla}}{\boldsymbol{\sigma}} + \boldsymbol{\sigma} \operatorname{tr} \mathbf{D}\right) \tag{35}$$

und

$$\left(\overset{\mathbf{\nabla}}{\boldsymbol{\tau}}\right)^{\cdot} = J\left\{\left(\overset{\mathbf{\nabla}}{\boldsymbol{\sigma}} + \boldsymbol{\sigma}\operatorname{tr}\mathbf{D}\right)^{\cdot} + \left(\overset{\mathbf{\nabla}}{\boldsymbol{\sigma}} + \boldsymbol{\sigma}\operatorname{tr}\mathbf{D}\right)\operatorname{tr}\mathbf{D}\right\}$$
(36)

als dessen zweite Ableitung.

2.4.2 Zeitableitungen der ersten Piola-Kirchhoff-Spannung

Aus der Gleichung

$$\mathbf{SF}^T = \boldsymbol{\tau} \tag{37}$$

ergibt sich für die erste Zeitableitung des ersten Piola-Kirchhoff Tensors

$$\dot{\mathbf{S}}\mathbf{F}^{T} = \dot{\boldsymbol{\tau}} - \mathbf{S}\dot{\mathbf{F}}^{T}.$$
(38)

Nach Elimination von S und $\dot{\boldsymbol{ au}}$ nimmt der Ausdruck die Form

$$\dot{\mathbf{S}}\mathbf{F}^T = \ddot{\boldsymbol{\tau}} + \mathbf{W}\boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau}\mathbf{D}$$
(39)

an. Für die zweite Zeitableitung ergibt sich der Zusammenhang

$$\ddot{\mathbf{S}}\mathbf{F}^{T} = (\ddot{\boldsymbol{ au}} + \mathbf{W}\boldsymbol{ au} - \boldsymbol{ au}\mathbf{D})^{'} - \dot{\mathbf{S}}\dot{\mathbf{F}}^{T}$$

= $(\ddot{\boldsymbol{ au}})^{'} + \dot{\mathbf{W}}\boldsymbol{ au} - \boldsymbol{ au}\dot{\mathbf{D}} + \mathbf{W}\dot{\boldsymbol{ au}} - \dot{\boldsymbol{ au}}\mathbf{D} - \dot{\mathbf{S}}\dot{\mathbf{F}}^{T},$

dessen rechte Seite durch die objektiven Maße $au, \ddot{ au}$ und $(\ddot{ au})$

$$\ddot{\mathbf{S}}\mathbf{F}^{T} = (\overset{\mathbf{\nabla}}{\boldsymbol{\tau}}) + \dot{\mathbf{W}}\boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau}\dot{\mathbf{D}} + \mathbf{W}\overset{\mathbf{\nabla}}{\boldsymbol{\tau}} + \overset{\mathbf{\nabla}}{\boldsymbol{\tau}}(\mathbf{W} - 2\mathbf{D}) + \boldsymbol{\tau}(\mathbf{D}\mathbf{D} + \mathbf{W}\mathbf{D} - \mathbf{D}\mathbf{W}) - 2\mathbf{W}\boldsymbol{\tau}\mathbf{D} + \mathbf{W}\boldsymbol{\tau}$$
(40)

ausgedrückt werden kann. Aus $\boldsymbol{\tau} = J\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{SF}^T$ folgen zwischen den Zeitableitungen der Cauchy-Spannung und der ersten Piola-Kirchhoff-Spannung die Beziehungen

$$J\dot{\boldsymbol{\sigma}} = \dot{\mathbf{S}}\mathbf{F}^T + \mathbf{S}\dot{\mathbf{F}}^T - J\boldsymbol{\cdot}\boldsymbol{\sigma}$$
(41)

$$J\ddot{\boldsymbol{\sigma}} = \ddot{\mathbf{S}}\mathbf{F}^T + 2\dot{\mathbf{S}}\dot{\mathbf{F}}^T + \mathbf{S}\ddot{\mathbf{F}}^T - 2J\dot{\boldsymbol{\sigma}} - J\ddot{\boldsymbol{\sigma}}$$
(42)

 mit

$$J^{\bullet} = J \operatorname{tr}(\dot{\mathbf{F}}\mathbf{F}^{-1}) \tag{43}$$

$$J^{\bullet} = J\left(\operatorname{tr}(\dot{\mathbf{F}}\mathbf{F}^{-1})\right)^{2} + J\operatorname{tr}(\ddot{\mathbf{F}}\mathbf{F}^{-1}) - J\operatorname{tr}(\dot{\mathbf{F}}\mathbf{F}^{-1}\dot{\mathbf{F}}\mathbf{F}^{-1}).$$
(44)

2.4.3 Zeitableitungen der zweiten Piola-Kirchhoff-Spannung

Analog errechnen wir aus der Ausgangsgleichung (33)

$$\mathbf{F}\mathbf{T}\mathbf{F}^T = \boldsymbol{\tau}$$

- Superskript (2) weggelassen – die Zeitableitung des zweiten Piola-Kirchhoff-Tensors

$$\dot{\mathbf{F}}\dot{\mathbf{T}}\mathbf{F}^{T} = \dot{\boldsymbol{\tau}} - \dot{\mathbf{F}}\mathbf{T}\mathbf{F}^{T} - \mathbf{F}\mathbf{T}\dot{\mathbf{F}}^{T}.$$

Die Elimination von $\dot{\mathbf{T}}$ und $\dot{\boldsymbol{\tau}}$ liefert dann

$$\mathbf{F}\dot{\mathbf{T}}\mathbf{F}^{T}=oldsymbol{\ddot{ au}}-\mathbf{D}oldsymbol{ au}-oldsymbol{ au}\mathbf{D}$$
 .

Der Zusammenhang zwischen der zweiten Zeitableitung

$$\mathbf{F}\ddot{\mathbf{T}}\mathbf{F}^{T} = (\mathbf{\nabla} - \mathbf{D}\mathbf{\tau} - \mathbf{\tau}\mathbf{D})\mathbf{\dot{f}} - \mathbf{\dot{F}}\mathbf{\dot{T}}\mathbf{F}^{T} - \mathbf{F}\mathbf{\dot{T}}\mathbf{\dot{F}}^{T}$$

und den Maßen au, $\overset{\nabla}{ au}$ und $(\overset{\nabla}{ au})$ sieht dann wie folgt aus:

$$\begin{split} \mathbf{F}\ddot{\mathbf{T}}\mathbf{F}^T &= (\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}})\dot{\mathbf{D}} - \dot{\mathbf{D}}\boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau}\dot{\mathbf{D}} - \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}(2\mathbf{D} - \mathbf{W}) - (2\mathbf{D} + \mathbf{W})\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} \\ &+ \boldsymbol{\tau}(\mathbf{D}\mathbf{D} + \mathbf{W}\mathbf{D} - \mathbf{D}\mathbf{W}) + (\mathbf{D}\mathbf{D} + \mathbf{W}\mathbf{D} - \mathbf{D}\mathbf{W})\boldsymbol{\tau} + 2\mathbf{D}\boldsymbol{\tau}\mathbf{D}. \end{split}$$

3 Elastische Ratengleichungen und Transformationsgesetze

3.1 Isotropes elastisches Materialverhalten

3.1.1 Konstitutive Gleichungen

Allgemeines. Für die elastischen Deformationen der betrachteten vielkristallinen metallischen Werkstoffe setzen wir hyperelastisches Materialverhalten und Isotropie bezüglich eines spannungsfreien Referenzzustandes voraus.

• Konjugierte Spannungen \mathbf{T} und Verzerrungen \mathbf{E} eines isotropen hyperelastischen Werkstoffs sind durch das Materialgesetz

$$\mathbf{T} = \frac{\partial w(\mathbf{E})}{\partial \mathbf{E}} \tag{45}$$

miteinander verknüpft, wobei die spezifische, auf das Referenzvolumen bezogene, Verzerrungsenergiedichte $w(\mathbf{E})$ der Bedingung

$$w(\mathbf{E}) = w(\mathbf{Q}\mathbf{E}\mathbf{Q}^T) \tag{46}$$

für alle **E** und alle orthogonalen Tensoren **Q** genügt. D.h. w kann als skalarwertige isotrope Funktion der Tensorvariablen **E** als symmetrische Funktion der Hauptdehnungen $e_i = e(\lambda_i)$ äquivalent dargestellt werden:

$$w(\mathbf{E}) = \hat{w}(e_1, e_2, e_3) = \hat{w}(e_1, e_3, e_2) = \hat{w}(e_2, e_1, e_3).$$
(47)

Konjugierte Spannung

$$\mathbf{T} = \frac{\partial \hat{w}}{\partial e_i} \frac{\partial e_i}{\partial \mathbf{E}} = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial \hat{w}}{\partial e_i} \mathbf{N}_i \otimes \mathbf{N}_i$$
(48)

und Verzerrung sind koaxial. Ihre gemeinsamen Hauptachsen sind die Lagrangeschen Achsen N_i .

Die Einschränkung (46) resultiert aus den Forderungen nach materieller Objektivität $(w(\mathbf{F}) = w(\mathbf{QF}))$ und Isotropie $(w(\mathbf{F}) = w(\mathbf{FQ}))$. Die Form (45) der hyperelastischen Materialgleichung folgt unmittelbar aus der Definitionsgleichung (29) für die konjugierte Spannung:

$$\dot{w}(\mathbf{E}) = rac{\partial w(\mathbf{E})}{\partial \mathbf{E}} \cdot \dot{\mathbf{E}} = \mathbf{T} \cdot \dot{\mathbf{E}}$$
 für alle $\dot{\mathbf{E}}$.

Die Hauptachsendarstellung

$$\mathbf{E} = \sum_{i=1}^{3} e_i \, \mathbf{N}_i \otimes \mathbf{N}_i$$
$$\mathbf{Q} \mathbf{E} \mathbf{Q}^T = \sum_{i=1}^{3} e_i \, (\mathbf{Q} \mathbf{N}_i) \otimes (\mathbf{Q} \mathbf{N}_i),$$

zeigt, dass die Verzerrungsenergiedichte wegen (46) nicht von den Hauptrichtungen N_i der Verzerrung abhängen kann. Die Symmetrie (47) der Funktion $\hat{w}(e_1, e_2, e_3)$ ist auf Grund der Isotropie anschaulich klar, kann aber auch leicht formal nachgewiesen werden (vgl. Ogden, 1984). Schließlich ergibt sich (48) aus Anwendung der Kettenregel und der folgenden Aussage:

• Ist e ein Eigenwert des symmetrischen Tensors \mathbf{E} und \mathbf{N} der zugehörige normierte Eigenvektor, so gilt

$$\frac{\partial e}{\partial \mathbf{E}} = \mathbf{N} \otimes \mathbf{N}. \tag{49}$$

Zum Beweis betrachtet man die nach Voraussetzung geltende Eigenwertgleichung

$$(\mathbf{E} - e\,\mathbf{I})\,\mathbf{N} = \mathbf{0}$$

mit dem Differential

$$(\mathbf{dE} - \mathbf{d}e\,\mathbf{I})\,\mathbf{N} + (\mathbf{E} - e\,\mathbf{I})\,\mathbf{dN} = \mathbf{0}.$$

Skalarmultiplikation mit \mathbf{N} ergibt

$$\mathbf{N} \cdot (\mathbf{dE}) \, \mathbf{N} - \mathbf{d}e + \mathbf{N} \cdot (\mathbf{E} - e \, \mathbf{I}) \, \mathbf{dN} = 0.$$

Da E symmetrisch ist, verschwindet hierin der letzte Summand,

$$\mathbf{N} \cdot (\mathbf{E} - e \mathbf{I}) \, \mathrm{d}\mathbf{N} = (\mathbf{E} - e \mathbf{I}) \, \mathbf{N} \cdot \mathrm{d}\mathbf{N} = 0,$$

und es verbleibt

$$\mathrm{d} e = \frac{\partial e}{\partial \mathbf{E}} \cdot \mathrm{d} \mathbf{E} = \mathbf{N} \cdot (\mathrm{d} \mathbf{E}) \, \mathbf{N} = (\mathbf{N} \otimes \mathbf{N}) \cdot \mathrm{d} \mathbf{E}.$$

Diese für alle symmetrischen Tensoren dE bestehende Gleichung impliziert (49). Es sei angemerkt, dass sich (49) auch direkt aus $(25)_1$ ergibt:

$$\dot{e}_i = rac{\partial e_i}{\partial \mathbf{E}} \cdot \dot{\mathbf{E}} = \mathbf{N}_i \cdot \dot{\mathbf{E}} \mathbf{N}_i = (\mathbf{N}_i \otimes \mathbf{N}_i) \cdot \dot{\mathbf{E}}.$$

Eine alternative Darstellung der Materialgleichung unter Verwendung der Kirchhoff-Spannung lässt sich mit Hilfe der Gleichungen (30) bis (32) sofort anschreiben.

• Für isotrope hyperelastische Werkstoffe ergibt sich die Kirchhoff-Spannung aus der Verzerrungsenergiedichte $\hat{w}(e_1, e_2, e_3)$ zu

$$\boldsymbol{\tau} = \sum_{i=1}^{3} \lambda_i e'(\lambda_i) \frac{\partial \hat{w}}{\partial e_i} \mathbf{n}_i \otimes \mathbf{n}_i.$$
(50)

Linke Streckung

$$\mathbf{V} = \sum_{i=1}^{3} \lambda_i \, \mathbf{n}_i \otimes \mathbf{n}_i \tag{51}$$

und Kirchhoff-Spannung sind koaxial. Ihre Hauptachsen stimmen mit den Eulerschen Achsen \mathbf{n}_i überein. Bei Wahl des logarithmischen Verzerrungsmaßes

$$\mathbf{E}^{(0)} = \sum_{i=1}^{3} \ln(\lambda_i) \mathbf{N}_i \otimes \mathbf{N}_i \quad \text{mit} \quad e_i^{(0)} = \ln(\lambda_i)$$
(52)

vereinfacht sich (50) zu

$$\boldsymbol{\tau} = \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial \hat{w}}{\partial e_i^{(0)}} \mathbf{n}_i \otimes \mathbf{n}_i, \tag{53}$$

d.h. zwischen den Kirchhoff-Hauptspannungen und den logarithmischen Hauptdehnungen besteht der einfache Zusammenhang

$$\tau_i = \frac{\partial \hat{w}}{\partial e_i^{(0)}}.\tag{54}$$

Unter Annahme der Koaxialität von Cauchy- bzw. Kirchhoff-Spannung und Eulerscher Verzerrungsgeschwindigkeit lässt sich (54) auf anschaulichem Wege herleiten. Ein ursprünglich quaderförmiger Körper mit den Kantenlängen L_i in Richtung der Lagrangeschen Achsen geht bei homogener Deformation in einen Quader mit den Kantenlängen $l_i = \lambda_i L_i$ in Richtung der Eulerschen Achsen \mathbf{n}_i über. Die auf das Ausgangsvolumen bezogene inkrementelle Arbeit der angreifenden Kräfte ergibt sich aus den Cauchy-Hauptspannungen σ_i zu

$$d\hat{w} = \frac{(\sigma_1 l_2 l_3) dl_1 + (\sigma_2 l_3 l_1) dl_2 + (\sigma_3 l_1 l_2) dl_3}{L_1 L_2 L_3}$$

= $\frac{l_1 l_2 l_3}{L_1 L_2 L_3} \left(\sigma_1 \frac{d\lambda_1}{\lambda_1} + \sigma_2 \frac{d\lambda_2}{\lambda_2} + \sigma_3 \frac{d\lambda_3}{\lambda_3} \right)$
= $J \left\{ \sigma_1 (d \ln \lambda_1) + \sigma_2 (d \ln \lambda_2) + \sigma_3 (d \ln \lambda_3) \right\}$
= $\tau_1 de_1^{(0)} + \tau_2 de_2^{(0)} + \tau_3 de_3^{(0)}.$

Andererseits ist das Differential der Verzerrungsenergiedichte $\hat{w}(e_1^{(0)}, e_2^{(0)}, e_2^{(0)})$

$$d\hat{w} = \frac{\partial \hat{w}}{\partial e_1^{(0)}} de_1^{(0)} + \frac{\partial \hat{w}}{\partial e_2^{(0)}} de_2^{(0)} + \frac{\partial \hat{w}}{\partial e_3^{(0)}} de_3^{(0)}$$

und der Koeffizientenvergleich zeigt, dass die Kirchhoff-Spannung gemäß (54) durch partielle Ableitung der Verzerrungsenergiedichte nach den logarithmischen Dehnungen erhalten wird.

Spezialisierung des elastischen Materialgesetzes. Die wichtige Beziehung (54) zeigt, dass man eine für endliche Verzerrungen korrekte Verallgemeinerung des isotropen hyperelastischen Materialgesetzes der linearen Elastizitätstheorie für infinitesimal kleine Verzerrungen erhält, indem man dort den linearisierten Verzerrungstensor durch das logarithmische Verzerrungsmaß und die Cauchy-Spannung durch die Kirchhoff-Spannung ersetzt. Da die elastischen Deformationen metallischer Vielkristalle klein bleiben, setzen wir deshalb die Verzerrungsenergiedichte mit

$$\varepsilon_i \equiv e_i^{(0)} = \ln(\lambda_i) \tag{55}$$

in der Form

$$\hat{w} = \frac{E}{2(1+\nu)} \left\{ \varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2 + \varepsilon_3^2 + \frac{\nu}{1-\nu} (\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3)^2 \right\}$$
(56)

an. Eist der Elastizitätsmodul, ν die Querkontraktionszahl. Die Kirchhoff-Hauptspannungen (54)

$$\tau_{i} = \frac{E}{1+\nu} \left\{ \varepsilon_{i} + \frac{\nu}{1-2\nu} \operatorname{tr} \boldsymbol{\varepsilon} \right\}$$
$$= 2G\varepsilon_{i}' + \kappa \operatorname{tr} \boldsymbol{\varepsilon}$$
(57)

hängen dann in der gleichen Weise von den logarithmischen Hauptdehnungen ab wie die Cauchy-Spannungen von den linearisierten Dehnungen in der Theorie kleiner elastischer Verzerrungen. In (57) ist

$$G = \frac{E}{2(1+\nu)} \tag{58}$$

der Schubmodul,

$$\kappa = \frac{E}{3(1-2\nu)} \tag{59}$$

der Kompressionsmodul und

$$\varepsilon_i' = \varepsilon_i - \frac{1}{3} \operatorname{tr} \boldsymbol{\varepsilon}$$

der Deviator der logarithmischen Hauptdehnungen. Natürlich lässt sich (53) auch in der tensoriellen Form

$$\boldsymbol{\tau} = \frac{E}{1+\nu} \left\{ \boldsymbol{\varepsilon} + \frac{\nu}{1-2\nu} \operatorname{tr} \boldsymbol{\varepsilon} \,\mathbf{I} \right\} = 2G\boldsymbol{\varepsilon}' + \kappa \operatorname{tr} \boldsymbol{\varepsilon} \,\mathbf{I}$$
(60)

schreiben. Bei Aufspaltung in deviatorische und sphärische Anteile erhält man die äquivalente Darstellung

$$\tau' = 2G\varepsilon' \tag{61}$$

$$\operatorname{tr} \boldsymbol{\tau} = 3\kappa \operatorname{tr} \boldsymbol{\varepsilon}. \tag{62}$$

Man beachte jedoch, dass die logarithmische Dehnung

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \ln \mathbf{V} = \sum_{i=1}^{3} \ln \lambda_i \, \mathbf{n}_i \otimes \mathbf{n}_i \tag{63}$$

über die Hauptwerte des linken Strecktensors definiert ist.

3.1.2 Inkrementelle Moduli und Nachgiebigkeiten

Zur Ermittlung der elastischen Moduli, die die Spannungs- und Verzerrungsinkremente miteinander verknüpfen, bilden wir die Zeitableitung des Elastizitätsgesetzes (54). Sie ergibt sich bei Berücksichtigung des Spins (17) der Eulerschen Achsen und der vereinfachten Schreibweise (55) für die logarithmischen Hauptdehnungen zu

$$\dot{\boldsymbol{\tau}} = \sum_{i=1}^{3} rac{\partial^2 \hat{w}}{\partial arepsilon_i \partial arepsilon_j} \dot{arepsilon}_j \mathbf{n}_i \otimes \mathbf{n}_j + \mathbf{W}^E \boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau} \mathbf{W}^E.$$

Mit (18)–(19) folgt hieraus:

• Die Jaumann Ableitung der Kirchhoff-Spannung

$$\overset{\mathbf{\nabla}}{\boldsymbol{\tau}} = \dot{\boldsymbol{\tau}} + \boldsymbol{\tau} \mathbf{W} - \mathbf{W} \boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\mathcal{L}} \mathbf{D}$$
 (64)

ist eine lineare Funktion der Eulerschen Verzerrungsgeschwindigkeit **D**. Ihre Komponenten auf den Eulerschen Achsen n_i sind

$$\bar{\tau}_{ij} = \mathbf{n}_i \cdot \bar{\boldsymbol{\tau}} \mathbf{n}_j = \begin{cases} \frac{\partial \tau_i}{\partial \varepsilon_1} D_{11} + \frac{\partial \tau_i}{\partial \varepsilon_2} D_{22} + \frac{\partial \tau_i}{\partial \varepsilon_3} D_{33} & (i = j = 1, 2, 3) \\ \operatorname{coth}(\varepsilon_i - \varepsilon_j) \left(\tau_i - \tau_j\right) D_{ij} & (i \neq j), \end{cases}$$
(65)

so dass die von Null verschiedenen Komponenten der inkrementellen Moduli \mathcal{L} auf diesen Achsen für das Elastizitätsgesetz (57) durch

$$\mathcal{L}_{iiii} = \frac{\partial \tau_i}{\partial \varepsilon_i} = 2G \frac{1-\nu}{1-2\nu}$$

$$\mathcal{L}_{iijj} = \frac{\partial \tau_i}{\partial \varepsilon_j} = 2G \frac{\nu}{1-2\nu} \qquad (i \neq j) \qquad (66)$$

$$\mathcal{L}_{ijij} = \frac{1}{2} \frac{\tau_i - \tau_j}{\tanh(\varepsilon_i - \varepsilon_j)} = G \frac{\varepsilon_i - \varepsilon_j}{\tanh(\varepsilon_i - \varepsilon_j)} \qquad (i \neq j)$$

gegeben sind.

In Gleichung $(65)_2$ wurde die Identität

$$\frac{\lambda_i^2 + \lambda_j^2}{\lambda_i^2 - \lambda_j^2} = \frac{e^{2\varepsilon_i} + e^{2\varepsilon_j}}{e^{2\varepsilon_i} - e^{2\varepsilon_j}} = \frac{(e^{2\varepsilon_i} + e^{2\varepsilon_j})e^{-\varepsilon_i - \varepsilon_j}}{(e^{2\varepsilon_i} - e^{2\varepsilon_j})e^{-\varepsilon_i - \varepsilon_j}} = \frac{e^{\varepsilon_i - \varepsilon_j} + e^{-(\varepsilon_i - \varepsilon_j)}}{e^{\varepsilon_i - \varepsilon_j} - e^{-(\varepsilon_i - \varepsilon_j)}} = \coth(\varepsilon_i - \varepsilon_j)$$

benutzt. Damit und mit (65_2) ergibt sich für den Spin der Eulerschen Basis (in Komponenten auf dieser Basis) ausgehend von (18) die Darstellung

$$W_{ij}^E = W_{ij} - \frac{\lambda_i^2 + \lambda_j^2}{\lambda_i^2 - \lambda_j^2} D_{ij} = W_{ij} - \frac{\overline{\tau}_{ij}}{\tau_i - \tau_j},$$
(67)

auf die wir später zurückgreifen werden. Aus den für die deviatorischen und sphärischen Anteile in (64) folgenden Beziehungen

$$(\tilde{\boldsymbol{\tau}})'_{ij} = \begin{cases} 2G D'_{ij} & (i=j) \\ 2G \frac{\varepsilon_i - \varepsilon_j}{\tanh(\varepsilon_i - \varepsilon_j)} D'_{ij} & (i\neq j) \end{cases}$$
(68)

$$\operatorname{tr} \overset{\mathbf{\nabla}}{\boldsymbol{\tau}} = 3\kappa \operatorname{tr} \mathbf{D} \tag{69}$$

findet man leicht den inversen Zusammenhang zwischen der Eulerschen Verzerrungsgeschwindigkeit und der Jaumann Ableitung der Kirchhoff-Spannung.

$$D_{ij} = \begin{cases} \frac{1}{E} \left((1+\nu) \vec{\tau}_{ij} - \nu \left(\vec{\tau}_{11} + \vec{\tau}_{22} + \vec{\tau}_{33} \right) \right) & (i=j) \\ \frac{1}{2G} \frac{\tanh(\varepsilon_i - \varepsilon_j)}{\varepsilon_i - \varepsilon_j} \vec{\tau}_{ij} & (i\neq j) \end{cases}$$
(70)

• Die durch

$$\mathbf{D} = \mathcal{M} \boldsymbol{\tilde{\tau}}$$
(71)

definierten inkrementellen Nachgiebigkeiten \mathcal{M} haben auf den Eulerschen Achsen die von Null verschiedenen Komponenten

$$\mathcal{M}_{iiii} = \frac{1}{E}$$

$$\mathcal{M}_{iijj} = -\frac{\nu}{E} \qquad (i \neq j)$$

$$\mathcal{M}_{ijij} = \frac{1}{4G} \frac{\tanh(\varepsilon_i - \varepsilon_j)}{\varepsilon_i - \varepsilon_j} \qquad (i \neq j).$$
(72)

Die Tensoren 4. Stufe \mathcal{M} und \mathcal{L} sind also im Gegensatz zum Elastizitätstensor der linearen Theorie kleiner Verzerrungen weder konstant noch isotrop. Sie hängen wegen der Faktoren

$$q_{ij} \equiv \frac{\varepsilon_i - \varepsilon_j}{\tanh(\varepsilon_i - \varepsilon_j)} = \frac{\frac{\tau_i - \tau_j}{2G}}{\tanh\left(\frac{\tau_i - \tau_j}{2G}\right)}$$
(73)

bzw. ihrer Kehrwerte in (66) und (72) noch vom aktuellen Spannungszustand ab. Die numerischen Auswirkungen bei metallischen Werkstoffen sind jedoch gering, da die auf 2G bezogenen Hauptspannungsdifferenzen klein bleiben und die q_{ij} deshalb näherungsweise gleich Eins sind. Man beachte, dass die Beziehung

$$\mathcal{M}\,\boldsymbol{\tau}' = \frac{1}{2G}\boldsymbol{\tau}' \tag{74}$$

sogar exakt gilt, wie man an der Hauptachsendarstellung

$$(\mathcal{M} \tau')_{ij} = \begin{cases} \frac{1}{E} (\tau'_1 - \nu(\tau'_2 + \tau'_3)), & (i = j = 1) \\ \frac{1}{E} (\tau'_2 - \nu(\tau'_3 + \tau'_1)), & (i = j = 2) \\ \frac{1}{E} (\tau'_3 - \nu(\tau'_1 + \tau'_2)), & (i = j = 3) \\ 0 & (\text{sonst}) \end{cases}$$

abliest.

3.1.3 Inkrementelle Größen zweiter Ordnung

Zur Berechnung von Inkrementen, die bis zur zweiten Ordnung genau sind, werden die Zeitableitungen der Ratengleichungen (64) und (71) benötigt.

Zeitableitung der Moduli. Die Differenziation der Gleichung (64) nach der Zeit ergibt

$$(\stackrel{\nabla}{\tau})^{\cdot} = \dot{\mathcal{L}} \mathbf{D} + \mathcal{L} \dot{\mathbf{D}}.$$
 (75)

Bei der Auswertung des ersten Summanden ist zu beachten, dass \mathcal{L} bezüglich der Eulerschen Basis durch

$${oldsymbol {\cal L}} = {oldsymbol {\cal L}}_{ijkl} \, {f n}_i \otimes {f n}_j \otimes {f n}_k \otimes {f n}_l$$

definiert ist, so dass in $\dot{\mathcal{L}}$ nicht nur die Ableitung der Maßzahlen \mathcal{L}_{ijkl} , sondern auch die der zeitlich veränderlichen Basisvektoren \mathbf{n}_i zu berücksichtigen ist. Mit

$$\mathbf{\dot{n}}_r = W_{ir}^E \mathbf{n}_i$$

erhält man

$$\begin{split} \dot{\boldsymbol{\mathcal{L}}} &= \dot{\mathcal{L}}_{ijkl} \, \mathbf{n}_i \otimes \mathbf{n}_j \otimes \mathbf{n}_k \otimes \mathbf{n}_l \\ &+ \mathcal{L}_{rjkl} \, \dot{\mathbf{n}}_r \otimes \mathbf{n}_j \otimes \mathbf{n}_k \otimes \mathbf{n}_l + \mathcal{L}_{irkl} \, \mathbf{n}_i \otimes \dot{\mathbf{n}}_r \otimes \mathbf{n}_k \otimes \mathbf{n}_l \\ &+ \mathcal{L}_{ijrl} \, \mathbf{n}_i \otimes \mathbf{n}_j \otimes \dot{\mathbf{n}}_r \otimes \mathbf{n}_l + \mathcal{L}_{ijkr} \, \mathbf{n}_i \otimes \mathbf{n}_j \otimes \mathbf{n}_k \otimes \dot{\mathbf{n}}_r \\ &= \left(\dot{\mathcal{L}}_{ijkl} + \mathcal{L}_{rjkl} \, W_{ir}^E + \mathcal{L}_{irkl} \, W_{jr}^E + \mathcal{L}_{ijrl} \, W_{kr}^E + \mathcal{L}_{ijkr} \, W_{lr}^E \right) \, \mathbf{n}_i \otimes \mathbf{n}_j \otimes \mathbf{n}_k \otimes \mathbf{n}_l \end{split}$$

und

$$\dot{\mathcal{L}} \mathbf{D} = \left(\dot{\mathcal{L}}_{ijkl} D_{kl} + \mathcal{L}_{rjkl} W_{ir}^{E} D_{kl} + \mathcal{L}_{irkl} W_{jr}^{E} D_{kl} + \mathcal{L}_{ijrl} W_{kr}^{E} D_{kl} + \mathcal{L}_{ijkr} W_{lr}^{E} D_{kl} \right) \mathbf{n}_{i} \otimes \mathbf{n}_{j} \otimes \mathbf{n}_{k} \otimes \mathbf{n}_{l}$$
$$= \dot{\mathcal{L}}_{ijkl} D_{kl} \mathbf{n}_{i} \otimes \mathbf{n}_{j} + \mathbf{W}^{E} \overleftarrow{\boldsymbol{\tau}} - \overleftarrow{\boldsymbol{\tau}} \mathbf{W}^{E} + \mathcal{L} \left[\mathbf{D} \mathbf{W}^{E} - \mathbf{W}^{E} \mathbf{D} \right].$$
(76)

Von der Zeitableitung der Maßzahlen (66) verbleiben auf den Eulerschen Achsen nur die Komponenten

$$\dot{\mathcal{L}}_{ijij} = G(D_{ii} - D_{jj}) \left\{ \coth(\varepsilon_i - \varepsilon_j) - \frac{\varepsilon_i - \varepsilon_j}{\sinh^2(\varepsilon_i - \varepsilon_j)} \right\} \qquad (i \neq j).$$
(77)

Zeitableitung der Nachgiebigkeiten. In analoger Weise folgt aus (71)

$$\dot{\mathbf{D}} = \dot{\boldsymbol{\mathcal{M}}} \, \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} + \boldsymbol{\mathcal{M}} \, (\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}})^{\boldsymbol{\cdot}}$$
(78)

 mit

$$\dot{\boldsymbol{\mathcal{M}}} \, \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} = \dot{\boldsymbol{\mathcal{M}}}_{ijkl} \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}_{kl} \, \mathbf{n}_i \otimes \mathbf{n}_j + \mathbf{W}^E \mathbf{D} - \mathbf{D} \mathbf{W}^E + \boldsymbol{\mathcal{M}} \left[\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} \mathbf{W}^E - \mathbf{W}^E \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} \right]$$
(79)

und

$$\dot{\mathcal{M}}_{ijkl} = \frac{D_{ii} - D_{jj}}{4G} \left\{ \frac{1}{(\varepsilon_i - \varepsilon_j) \cosh^2(\varepsilon_i - \varepsilon_j)} - \frac{\tanh(\varepsilon_i - \varepsilon_j)}{\varepsilon_i - \varepsilon_j} \right\} \qquad (i \neq j).$$
(80)

Zur Kontrolle der Gleichungen (76) und (79) kann der Sachverhalt verwendet werden, dass beide Ausdrücke verschwinden müssen, wenn man \mathcal{L} bzw. \mathcal{M} mit der Forderung

 $q_{ij} = 1$ durch isotrope Tensoren annähert. Dann sind nicht nur die Zeitableitungen der konstanten Maßzahlen Null, sondern auch die restlichen Terme. Zum Beispiel lassen sich dann die Ausdrücke in (79) umschreiben in

$$\mathbf{W}^{E}\mathbf{D} - \mathbf{D}\mathbf{W}^{E} = \mathbf{W}^{E}\mathbf{D}' - \mathbf{D}'\mathbf{W}^{E} = \frac{\mathbf{W}^{E}\overleftarrow{\boldsymbol{\tau}} - \overleftarrow{\boldsymbol{\tau}}\mathbf{W}^{E}}{2G},$$

da die sphärischen Anteile von ${f D}$ bzw. ${m {ar au}}$ herausfallen, und in

$$\mathcal{M}\left[oldsymbol{arphi}\mathbf{W}^{E}-\mathbf{W}^{E}oldsymbol{arphi}
ight]=rac{oldsymbol{arphi}\mathbf{W}^{E}-\mathbf{W}^{E}oldsymbol{arphi}}{2G}$$

da \mathcal{M} auf den Deviator $\overset{\nabla}{\tau} \mathbf{W}^{E} - \mathbf{W}^{E} \overset{\nabla}{\tau}$ angewandt wird. Für den Spezialfall isotroper Nachgiebigkeiten liefert (79) also das richtige Ergebnis $\dot{\mathcal{M}} \overset{\nabla}{\tau} = \mathbf{0}$.

Eine weitere Überprüfung der Gleichungen (76) bis (79) basiert auf der Identität

 $\mathcal{LM}=\mathcal{I}$

mit \mathcal{I} als Einheitstensor im Raum der symmetrischen Tensoren 2. Stufe. Aus der Zeitableitung dieser Gleichung folgt

$$\dot{\mathcal{L}}\mathcal{M}+\mathcal{L}\dot{\mathrm{M}}=\mathbf{0},$$

,

so dass die Beziehungen

$$\dot{\mathcal{L}}=-\mathcal{L}\dot{\mathcal{M}}\mathcal{L}$$

und

$$\dot{\mathcal{L}}\mathrm{D}=-\mathcal{L}\dot{\mathcal{M}}\mathcal{L}\mathrm{D}=-\mathcal{L}\dot{\mathcal{M}}\overset{
abla}{ au}$$

bestehen. Einsetzen von (79) liefert

$$\begin{split} \boldsymbol{\mathcal{L}}\mathbf{D} &= \underbrace{\mathcal{L}_{ijpq} \dot{\mathcal{M}}_{pqrs} \mathcal{L}_{rskl}}_{\dot{\mathcal{L}}_{ijkl}} D_{kl} \, \mathbf{n}_i \otimes \mathbf{n}_j - \boldsymbol{\mathcal{L}} \left[\mathbf{W}^E \mathbf{D} - \mathbf{D} \mathbf{W}^E \right] - \boldsymbol{\mathcal{L}} \mathcal{M} \left[\boldsymbol{\vec{\tau}} \mathbf{W}^E - \mathbf{W}^E \boldsymbol{\vec{\tau}} \right] \\ &= \dot{\mathcal{L}}_{ijkl} D_{kl} \, \mathbf{n}_i \otimes \mathbf{n}_j + \boldsymbol{\mathcal{L}} \left[\mathbf{D} \mathbf{W}^E - \mathbf{W}^E \mathbf{D} \right] + \mathbf{W}^E \boldsymbol{\vec{\tau}} - \boldsymbol{\vec{\tau}} \mathbf{W}^E \end{split}$$

in Übereinstimmung mit (76), da zwischen den nicht verschwindenden Komponenten der $\dot{\mathcal{L}}_{ijkl}$ und $\dot{\mathcal{M}}_{ijkl}$ in der Tat der Zusammenhang

$$\dot{\mathcal{L}}_{ijij} = -\mathcal{L}_{ijij}^2 \,\dot{\mathcal{M}}_{ijij} \qquad (i \neq j)$$

besteht, wie man mit (77), (80) und $(66)_3$ nachrechnet.

3.2 Transformationsgesetze

3.2.1 Wechsel der Referenzkonfiguaration

Die Darstellungen der Gleichungen (28) und (35)-(36) in der Form

$$J^{-1} \boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\sigma}$$

$$J^{-1} \boldsymbol{\tilde{\tau}} = \boldsymbol{\tilde{\sigma}} + \boldsymbol{\sigma} \operatorname{tr} \mathbf{D}$$

$$J^{-1} (\boldsymbol{\tilde{\tau}})^{\cdot} = (\boldsymbol{\tilde{\sigma}} + \boldsymbol{\sigma} \operatorname{tr} \mathbf{D})^{\cdot} + (\boldsymbol{\tilde{\sigma}} + \boldsymbol{\sigma} \operatorname{tr} \mathbf{D}) \operatorname{tr} \mathbf{D}$$
(81)

zeigen, dass die linken Seiten von der Wahl der Referenzkonfiguration unabhängig sind, da sich die Cauchy-Spannung sowie der räumliche Geschwindigkeitsgradient, die nebst ihren Zeitableitungen auf den rechten Seiten erscheinen, bei einem Wechsel der Referenzkonfiguration nicht ändern. Mit dem gleichen Argument folgen nach Umschreiben der Beziehungen (37) und (39)-(40) invariante Ausdrücke, die den ersten Piola-Kirchhoff-Spannungstensor und seine Zeitableitungen enthalten:

$$J^{-1}\mathbf{S}\mathbf{F}^{T} = \boldsymbol{\sigma}$$

$$J^{-1}\dot{\mathbf{S}}\mathbf{F}^{T} = \ddot{\boldsymbol{\sigma}} + \boldsymbol{\sigma}\operatorname{tr}\mathbf{D} + \mathbf{W}\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}\mathbf{D}$$

$$J^{-1}\ddot{\mathbf{S}}\mathbf{F}^{T} = (\ddot{\boldsymbol{\sigma}} + \boldsymbol{\sigma}\operatorname{tr}\mathbf{D}) \cdot (\ddot{\boldsymbol{\sigma}} + \boldsymbol{\sigma}\operatorname{tr}\mathbf{D})\operatorname{tr}\mathbf{D} + \dot{\mathbf{W}}\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}\dot{\mathbf{D}}$$

$$+ \mathbf{W}(\ddot{\boldsymbol{\sigma}} + \boldsymbol{\sigma}\operatorname{tr}\mathbf{D}) + (\ddot{\boldsymbol{\sigma}} + \boldsymbol{\sigma}\operatorname{tr}\mathbf{D})(\mathbf{W} - 2\mathbf{D})$$

$$+ \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{D}\mathbf{D} + \mathbf{W}\mathbf{D} - \mathbf{D}\mathbf{W}) - 2\mathbf{W}\boldsymbol{\sigma}\mathbf{D} + \mathbf{W}\mathbf{W}\boldsymbol{\sigma}.$$
(82)
(82)
(82)

Wählt man insbesondere die aktuelle Konfiguration als Referenzkonfiguration und kennzeichnet hierauf bezogene Größen durch Überstreichen, so gehen die Gleichungen (81) und (82) mit den momentan geltenden Beziehungen

$$\mathbf{\bar{F}} = \mathbf{I}, \qquad \bar{J} = \det \mathbf{\bar{F}} = 1$$
(84)

über in

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\tau}|_{\bar{\mathbf{F}}=\mathbf{I}} &= \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\bar{\mathbf{v}}}|_{\bar{\mathbf{F}}=\mathbf{I}} &= \boldsymbol{\bar{\mathbf{v}}} + \boldsymbol{\sigma} \operatorname{tr} \mathbf{D} \\ (\boldsymbol{\bar{\tau}})'|_{\bar{\mathbf{F}}=\mathbf{I}} &= (\boldsymbol{\bar{\sigma}} + \boldsymbol{\sigma} \operatorname{tr} \mathbf{D})' + (\boldsymbol{\bar{\sigma}} + \boldsymbol{\sigma} \operatorname{tr} \mathbf{D}) \operatorname{tr} \mathbf{D} \\ \mathbf{S}|_{\bar{\mathbf{F}}=\mathbf{I}} &= \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\bar{\mathbf{S}}}|_{\bar{\mathbf{F}}=\mathbf{I}} &= \boldsymbol{\bar{\sigma}} \\ \boldsymbol{\bar{\mathbf{S}}}|_{\bar{\mathbf{F}}=\mathbf{I}} &= \boldsymbol{\bar{\sigma}} + \boldsymbol{\sigma} \operatorname{tr} \mathbf{D} + \mathbf{W}\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma} \mathbf{D} \\ \boldsymbol{\bar{\mathbf{S}}}|_{\bar{\mathbf{F}}=\mathbf{I}} &= (\boldsymbol{\bar{\sigma}} + \boldsymbol{\sigma} \operatorname{tr} \mathbf{D})' + (\boldsymbol{\bar{\sigma}} + \boldsymbol{\sigma} \operatorname{tr} \mathbf{D}) \operatorname{tr} \mathbf{D} + \boldsymbol{\dot{W}}\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma} \boldsymbol{\dot{\mathbf{D}}} \\ &+ \mathbf{W}(\boldsymbol{\bar{\sigma}} + \boldsymbol{\sigma} \operatorname{tr} \mathbf{D}) + (\boldsymbol{\bar{\sigma}} + \boldsymbol{\sigma} \operatorname{tr} \mathbf{D})(\mathbf{W} - 2\mathbf{D}) \\ &+ \boldsymbol{\sigma} (\mathbf{D}\mathbf{D} + \mathbf{W}\mathbf{D} - \mathbf{D}\mathbf{W}) - 2\mathbf{W}\boldsymbol{\sigma}\mathbf{D} + \mathbf{W}\mathbf{W}\boldsymbol{\sigma}. \end{aligned}$$
(85)

Die auf die aktuelle Konfiguration bezogene Kirchhoff- und erste Piola-Kirchhoff-Spannung stimmen also momentan mit der Cauchy-Spannung überein. Ihre Zeitableitungen sind jedoch im Allgemeinen verschieden. Für den Geschwindigkeitsgradienten und seine Zeitableitung

$$\begin{split} \mathbf{L} &= \dot{\mathbf{F}} \, \mathbf{F}^{-1} \\ \dot{\mathbf{L}} &= \ddot{\mathbf{F}} \, \mathbf{F}^{-1} + \dot{\mathbf{F}} (\mathbf{F}^{-1}) \dot{\mathbf{I}} = \ddot{\mathbf{F}} - \mathbf{L}^2 \end{split}$$

erhält man bei Wahl der Referenzkonfiguration (84)

$$\mathbf{L} = \dot{\mathbf{F}}$$

 $\dot{\mathbf{L}} = \ddot{\mathbf{F}} - \dot{\mathbf{F}}^2$

so dass sich für die symmetrischen und schiefsymmetrischen Anteile die vereinfachten Ausdrücke

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2} \left(\dot{\mathbf{F}} + \dot{\mathbf{F}}^T \right) \tag{86}$$

$$\mathbf{W} = \frac{1}{2} \left(\dot{\mathbf{F}} - \dot{\mathbf{F}}^T \right) \tag{87}$$

$$\dot{\mathbf{D}} = \frac{1}{2} \left(\ddot{\mathbf{F}} + \ddot{\mathbf{F}}^T \right) - \left(\mathbf{D}\mathbf{D} + \mathbf{W}\mathbf{W} \right)$$
(88)

$$\dot{\mathbf{W}} = \frac{1}{2} \left(\dot{\mathbf{F}} - \dot{\mathbf{F}}^T \right) - \left(\mathbf{D}\mathbf{W} + \mathbf{W}\mathbf{D} \right)$$
(89)

ergeben.

3.2.2 Ratengleichungen erster Ordnung

Die für die spannungsfreie Referenzkonfiguration formulierte Ratengleichung

$$\overset{\nabla}{\tau} = \mathcal{L} \mathbf{D} \tag{90}$$

kann mit $(81)_2$ in

$$\ddot{\boldsymbol{\sigma}} + \sigma \operatorname{tr} \mathbf{D} = J^{-1} \mathcal{L} \mathbf{D}$$

umgeschrieben werden. Diese Darstellung macht deutlich, dass die Moduli

$$\bar{\mathcal{L}} = J^{-1} \mathcal{L} \tag{91}$$

von der Referenzkonfiguration unabhängig sind. Ihr invarianter Wert verknüpft die auf die aktuelle Konfiguration bezogene Jaumann Ableitung der Kirchhoff-Spannung mit der Eulerschen Verzerrungsgeschwindigkeit:

$$\mathbf{\nabla} + \sigma \operatorname{tr} \mathbf{D} = \mathbf{\nabla} |_{\mathbf{\bar{F}} = \mathbf{I}} = \mathbf{\bar{\mathcal{L}}} \mathbf{D}.$$
 (92)

Aus $(85)_5$ folgt damit für die Rate des ersten Piola-Kirchhoff-Tensors

$$\dot{\mathbf{S}}|_{\bar{\mathbf{F}}=\mathbf{I}} = \bar{\boldsymbol{\mathcal{L}}} \mathbf{D} - \boldsymbol{\sigma} \mathbf{D} + \mathbf{W} \boldsymbol{\sigma},$$
(93)

so dass die Pseudomoduli

$$C \equiv C|_{ar{F}=I}$$

in der Ratengleichung

$$\dot{\mathbf{S}}|_{\bar{\mathbf{F}}=\mathbf{I}} = \bar{\mathbf{C}}\dot{\bar{\mathbf{F}}} \tag{94}$$

 durch

$$\bar{\mathbf{C}}\,\dot{\bar{\mathbf{F}}} = \bar{\boldsymbol{\mathcal{L}}}\left[\frac{1}{2}\left(\dot{\bar{\mathbf{F}}} + \dot{\bar{\mathbf{F}}}^{T}\right] - \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{\sigma}\dot{\bar{\mathbf{F}}} + \boldsymbol{\sigma}\dot{\bar{\mathbf{F}}}^{T} - \dot{\bar{\mathbf{F}}}\boldsymbol{\sigma} + \dot{\bar{\mathbf{F}}}^{T}\boldsymbol{\sigma}\right)$$
(95)

festgelegt sind. Mit Hilfe der Darstellung

$$\bar{C}_{ijkl}\,\dot{\bar{F}}_{kl} = \bar{\mathcal{L}}_{ijkl}\,\dot{\bar{F}}_{kl} - \frac{1}{2}\left(\sigma_{ik}\dot{\bar{F}}_{kj} + \sigma_{il}\dot{\bar{F}}_{jl} - \dot{\bar{F}}_{il}\sigma_{lj} + \dot{\bar{F}}_{ki}\sigma_{kj}\right)$$

lassen sich die Komponenten des Modultensors \overline{C} leicht explizit anschreiben:

$$\bar{C}_{ijkl} = \bar{\mathcal{L}}_{ijkl} - \frac{1}{2} \left(\sigma_{ik} \delta_{jl} + \sigma_{il} \delta_{jk} - \sigma_{jl} \delta_{ik} + \sigma_{jk} \delta_{il} \right).$$
(96)

Die Rate der Cauchy-Spannung folgt aus (92) und (93) zu

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}} = \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}|_{\bar{\mathbf{F}}=\mathbf{I}} - \boldsymbol{\sigma}\mathbf{W} + \mathbf{W}\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}\operatorname{tr}\mathbf{D} = \dot{\mathbf{S}}|_{\bar{\mathbf{F}}=\mathbf{I}} + \boldsymbol{\sigma}\dot{\bar{\mathbf{F}}}^T - \boldsymbol{\sigma}\operatorname{tr}\mathbf{D}.$$
(97)

3.2.3 Ratengleichungen zweiter Ordnung

Mit Hilfe der nach der Zeit differenzierten Gleichungen (91) und (92),

$$\dot{\bar{\mathcal{L}}} = J^{-1} \left(\dot{\mathcal{L}} - \mathcal{L} \operatorname{tr} \mathbf{D} \right)$$
(98)

$$\left(\overset{\mathbf{\nabla}}{\boldsymbol{\sigma}} + \sigma \operatorname{tr} \mathbf{D}\right)^{\cdot} = \bar{\boldsymbol{\mathcal{L}}} \, \dot{\mathbf{D}} + \dot{\bar{\boldsymbol{\mathcal{L}}}} \, \mathbf{D}, \tag{99}$$

ergibt sich die zweite Zeitableitung der ersten Piola-Kirchhoff-Spannung aus (85)₆ in Abhängigkeit von $\bar{\mathcal{L}}, \dot{\bar{\mathcal{L}}}, \dot{\bar{\mathbf{F}}}, \ddot{\bar{\mathbf{F}}}$ sowie dem aktuellen Spannungszustand $\boldsymbol{\sigma}$ zu

$$\begin{split} \ddot{\mathbf{S}}|_{\bar{\mathbf{F}}=\mathbf{I}} &= \bar{\boldsymbol{\mathcal{L}}} \, \dot{\mathbf{D}} + \dot{\mathbf{W}} \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma} \dot{\mathbf{D}} \\ &+ \dot{\bar{\boldsymbol{\mathcal{L}}}} \, \mathbf{D} + \mathbf{W} \bar{\boldsymbol{\mathcal{L}}} \, [\mathbf{D}] + \bar{\boldsymbol{\mathcal{L}}} \, [\mathbf{D}] (\mathbf{W} - 2\mathbf{D}) + \bar{\boldsymbol{\mathcal{L}}} \, [\mathbf{D}] \, \mathrm{tr} \, \mathbf{D} \\ &+ \, \boldsymbol{\sigma} (\mathbf{D} \mathbf{D} + \mathbf{W} \mathbf{D} - \mathbf{D} \mathbf{W}) - 2\mathbf{W} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{D} + \mathbf{W} \mathbf{W} \boldsymbol{\sigma}, \end{split}$$

wenn man beachtet, dass mit der Wahl der aktuellen Konfiguration als Referenzkonfiguration die Ausdrücke (86) bis (88) für \mathbf{D} , \mathbf{W} , $\dot{\mathbf{D}}$ und $\dot{\mathbf{W}}$ substituiert werden dürfen. Einsetzen von $\dot{\mathbf{D}}$ und $\dot{\mathbf{W}}$ ergibt

$$\ddot{\mathbf{S}}|_{\bar{\mathbf{F}}=\mathbf{I}} = \bar{\boldsymbol{\mathcal{L}}} \left[\frac{1}{2} \left(\ddot{\bar{\mathbf{F}}} + \ddot{\bar{\mathbf{F}}}^T \right) \right] + \frac{1}{2} \left(\ddot{\bar{\mathbf{F}}} - \ddot{\bar{\mathbf{F}}}^T \right) \boldsymbol{\sigma} - \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} \left(\ddot{\bar{\mathbf{F}}} + \ddot{\bar{\mathbf{F}}}^T \right) - \bar{\boldsymbol{\mathcal{L}}} [\mathbf{D}\mathbf{D} + \mathbf{W}\mathbf{W}] - (\mathbf{D}\mathbf{W} + \mathbf{W}\mathbf{D})\boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{D}\mathbf{D} + \mathbf{W}\mathbf{W}) + \dot{\boldsymbol{\mathcal{L}}} \mathbf{D} + \mathbf{W}\bar{\boldsymbol{\mathcal{L}}} [\mathbf{D}] + \bar{\boldsymbol{\mathcal{L}}} [\mathbf{D}] (\mathbf{W} - 2\mathbf{D}) + \bar{\boldsymbol{\mathcal{L}}} [\mathbf{D}] \operatorname{tr} \mathbf{D} + \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{D}\mathbf{D} + \mathbf{W}\mathbf{D} - \mathbf{D}\mathbf{W}) - 2\mathbf{W}\boldsymbol{\sigma}\mathbf{D} + \mathbf{W}\mathbf{W}\boldsymbol{\sigma}.$$
(100)

Andererseits erhält man aus den Ratengleichungen

$$\begin{split} \dot{\mathbf{S}} &= \mathbf{C}\dot{\mathbf{F}} \\ \dot{\mathbf{S}} &= \dot{\mathbf{C}}\,\dot{\mathbf{F}} + \mathbf{C}\,\ddot{\mathbf{F}} \end{split}$$

für das konjugierte Paar (\mathbf{F}, \mathbf{S}) bei Wahl der aktuellen Konfiguration als Referenzkonfiguration

$$\dot{\mathbf{S}}|_{\bar{\mathbf{F}}=\mathbf{I}} = \mathbf{C}|_{\bar{\mathbf{F}}=\mathbf{I}}\dot{\bar{\mathbf{F}}}$$
(101)

$$\ddot{\mathbf{S}}|_{\bar{\mathbf{F}}=\mathbf{I}} = \dot{\mathbf{C}}|_{\bar{\mathbf{F}}=\mathbf{I}} \, \dot{\bar{\mathbf{F}}} + \mathbf{C}|_{\bar{\mathbf{F}}=\mathbf{I}} \, \ddot{\bar{\mathbf{F}}}.$$
(102)

Die beiden Anteile in der Ratengleichung zweiter Ordnung folgen durch Vergleich mit (100)zu

$$\bar{\mathbf{C}}\ddot{\mathbf{F}} = \bar{\boldsymbol{\mathcal{L}}}\left[\frac{1}{2}\left(\ddot{\mathbf{F}} + \ddot{\mathbf{F}}^{T}\right)\right] - \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{\sigma}\ddot{\mathbf{F}} + \boldsymbol{\sigma}\ddot{\mathbf{F}}^{T} - \ddot{\mathbf{F}}\boldsymbol{\sigma} + \ddot{\mathbf{F}}^{T}\boldsymbol{\sigma}\right)$$
(103)

$$\dot{\mathbf{C}}|_{\bar{\mathbf{F}}=\mathbf{I}}\dot{\bar{\mathbf{F}}} = \dot{\bar{\boldsymbol{\mathcal{L}}}}\mathbf{D} - \bar{\boldsymbol{\mathcal{L}}}[\mathbf{D}\mathbf{D} + \mathbf{W}\mathbf{W}] + \mathbf{W}\bar{\boldsymbol{\mathcal{L}}}[\mathbf{D}] + \bar{\boldsymbol{\mathcal{L}}}[\mathbf{D}](\mathbf{W} - 2\mathbf{D}) + \bar{\boldsymbol{\mathcal{L}}}[\mathbf{D}]\operatorname{tr}\mathbf{D}$$

$$+ \boldsymbol{\sigma}(2\mathbf{D}\mathbf{D} + \mathbf{W}\mathbf{D} - \mathbf{D}\mathbf{W} + \mathbf{W}\mathbf{W}) + (\mathbf{W}\mathbf{W} - \mathbf{D}\mathbf{W} - \mathbf{W}\mathbf{D})\boldsymbol{\sigma}$$

$$- 2\mathbf{W}\boldsymbol{\sigma}\mathbf{D}.$$
(104)

Als Rechenkontrolle kann benutzt werden, dass $\overline{\mathbf{C}}\mathbf{\ddot{F}}$ aus $\overline{\mathbf{C}}\mathbf{\dot{F}}$ richtig hervorgeht, wenn man in (95) $\mathbf{\dot{F}}$ durch $\mathbf{\ddot{F}}$ ersetzt.

3.3 Implementierung konstitutiver Beziehungen

3.3.1 Matrix-Vektor-Darstellungen

Die hier eingeführten tensoriellen Maße enthalten auf Grund ihrer speziellen Eigenschaften eine verringerte Anzahl unabhängiger Komponenten. Zur effizienten Umsetzung werden die Maße reduziert dargestellt, indem die relevanten Komponenten zu Vektoren bzw. Tensoren niedrigerer Stufe angeordnet werden. Wählt man die Einträge beispielsweise wie folgt, bleibt die symbolische Notation der Beziehungen erhalten.

Abbildungen im 6-dimensionalen Raum symmetrischer Tensoren 2. Stufe

$$\mathbf{T} = \mathbf{L} \mathbf{E}, \qquad \mathbf{L} = \mathbf{L}^T$$

mit den Komponenten

$$T_{ij} = L_{ijkl} E_{kl}$$

können auch durch die Vektor-Matrix-Operationen

$$\underbrace{\begin{pmatrix} T_{11} \\ T_{22} \\ T_{33} \\ T_{12} \\ T_{23} \\ T_{31} \end{pmatrix}}_{\mathbf{t}} = \underbrace{\begin{pmatrix} L_{1111} & L_{1122} & L_{1133} & L_{1112} & L_{1123} & L_{1131} \\ L_{2211} & L_{2222} & L_{2233} & L_{2212} & L_{2223} & L_{2231} \\ L_{3311} & L_{3322} & L_{3333} & L_{3312} & L_{3323} & L_{3331} \\ L_{1211} & L_{1222} & L_{1233} & L_{1212} & L_{1223} & L_{1231} \\ L_{2311} & L_{2322} & L_{2333} & L_{2312} & L_{2323} & L_{2311} \\ L_{3111} & L_{3122} & L_{3133} & L_{3112} & L_{3123} & L_{3131} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{11} \\ E_{22} \\ E_{33} \\ 2E_{12} \\ 2E_{23} \\ 2E_{33} \end{pmatrix}}_{\mathbf{e}}$$

beschrieben werden, die symbolisch die gleiche Form

$$t = Le, \qquad L = L^T$$

aufweist. Auch das innere Produkt der Tensoren 2. Stufe kann als Skalarprodukt der zugeordneten Vektoren berechnet werden.

$$\mathbf{T} \cdot \mathbf{E} = T_{ij} E_{ij} = \sum_{i=1}^{6} t_i e_i = \mathbf{t} \cdot \mathbf{e}$$

Analog wird die inverse Abbildung als Vektor-Matrix-Beziehung formuliert.

$$\begin{split} \mathbf{E} &= \mathbf{M} \, \mathbf{T}, & \mathbf{M} &= \mathbf{M}^T = \mathbf{L}^{-1} \\ E_{ij} &= M_{ijkl} \, T_{kl}, & M_{ijkl} &= M_{klij} \\ \mathbf{e} &= \mathbf{M} \, \mathbf{t}, & \mathbf{M} &= \mathbf{M}^T = \mathbf{L}^{-1} \end{split}$$

Die Komponenten des Abbildungstensors M ergeben sich daraus zu

$$\underbrace{\begin{pmatrix} E_{11} \\ E_{22} \\ E_{33} \\ 2E_{12} \\ 2E_{23} \\ 2E_{31} \end{pmatrix}}_{\mathbf{e}} = \underbrace{\begin{pmatrix} M_{1111} & M_{1122} & M_{1133} & 2M_{1112} & 2M_{1123} & 2M_{1131} \\ M_{2211} & M_{2222} & M_{2233} & 2M_{2212} & 2M_{2233} & 2M_{2231} \\ M_{3311} & M_{3322} & M_{3333} & 2M_{3312} & 2M_{3323} & 2M_{3331} \\ 2M_{1211} & 2M_{1222} & 2M_{1233} & 4M_{1212} & 4M_{1223} & 4M_{1231} \\ 2M_{2311} & 2M_{2322} & 2M_{2333} & 4M_{2312} & 4M_{2323} & 4M_{2331} \\ 2M_{3111} & 2M_{3122} & 2M_{3133} & 4M_{3112} & 4M_{3123} & 4M_{3131} \end{pmatrix} \underbrace{\begin{pmatrix} T_{11} \\ T_{22} \\ T_{33} \\ T_{12} \\ T_{23} \\ T_{31} \end{pmatrix}}_{\mathbf{t}}.$$

Abbildungen im 9-dimensionalen Raum allgemeiner Tensoren 2. Stufe

$$\mathbf{S} = \mathbf{C}\mathbf{F}, \qquad \mathbf{C} = \mathbf{C}^T$$

können auf die Darstellung

$$\underbrace{\begin{pmatrix} S_{11} \\ S_{22} \\ S_{33} \\ S_{12} \\ S_{23} \\ S_{32} \\ S_{31} \\ S_{31} \end{pmatrix}_{\mathbf{S}_{12}} = \underbrace{\begin{pmatrix} C_{1111} & C_{1122} & C_{1133} & C_{1112} & C_{1121} & C_{1123} & C_{1132} & C_{1131} \\ C_{2211} & C_{2222} & C_{2233} & C_{2212} & C_{2223} & C_{2232} & C_{2231} \\ C_{3311} & C_{3322} & C_{3333} & C_{3312} & C_{3321} & C_{3323} & C_{3332} & C_{3333} \\ C_{1211} & C_{1222} & C_{1233} & C_{1212} & C_{1223} & C_{1232} & C_{1213} & C_{1231} \\ C_{2111} & C_{2122} & C_{2133} & C_{2112} & C_{2121} & C_{2123} & C_{2132} & C_{2131} \\ C_{2311} & C_{2322} & C_{2333} & C_{2312} & C_{2321} & C_{2323} & C_{2313} & C_{2331} \\ C_{3211} & C_{3222} & C_{3233} & C_{3212} & C_{3221} & C_{3223} & C_{3232} & C_{3231} \\ C_{3111} & C_{1322} & C_{1333} & C_{1312} & C_{1321} & C_{1323} & C_{1332} & C_{1313} \\ C_{3111} & C_{3122} & C_{3133} & C_{3112} & C_{3121} & C_{3123} & C_{3132} & C_{3113} & C_{3131} \\ \end{bmatrix} \underbrace{ \mathbf{F}_{12} \\ \mathbf{F}_{23} \\ \mathbf{F}_{33} \\ \mathbf{F}_{12} \\ \mathbf{F}_{24} \\ \mathbf{F}_{25} \\ \mathbf{F}_{33} \\ \mathbf{F}_{12} \\ \mathbf{F}_{21} \\ \mathbf{F}_{23} \\ \mathbf{F}_{32} \\ \mathbf{F}_{32} \\ \mathbf{F}_{32} \\ \mathbf{F}_{32} \\ \mathbf{F}_{33} \\$$

$$s = C f, \qquad C = C^T$$

reduziert werden.

3.3.2 Wechsel der Basis

Ein Wechsel zwischen zu Grunde liegenden Basen $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3\}$ und $\{\mathbf{e}_1^*, \mathbf{e}_2^*, \mathbf{e}_3^*\}$ ändert die Koordinanten von Vektoren, Tensoren 2. Stufe bzw. symmetrischer Tensoren 4. Stufe in der unten beschriebenen Weise. Die orthogonale Matrix **Q** drückt dabei die Basisvektoren \mathbf{e}_i durch das Tripel \mathbf{e}_j^* aus.

$$\begin{aligned}
\mathbf{e}_{i}^{*} &= Q_{ji}\mathbf{e}_{j} \\
v_{i}^{*} &= Q_{ji}v_{j} \\
T_{ij}^{*} &= Q_{ki}Q_{lj}T_{kl} \\
L_{ijkl}^{*} &= Q_{ki}Q_{lj}Q_{mk}Q_{nl}L_{klmn}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{e}_{i} &= Q_{ij}\mathbf{e}_{j}^{*} \\
v_{i} &= Q_{ij}v_{j}^{*} \\
T_{ij} &= Q_{ik}Q_{jl}T_{kl}^{*} \\
L_{ijkl} &= Q_{ik}Q_{jl}Q_{km}Q_{ln}L_{klmn}
\end{aligned}$$

$$(105)$$

Die eingeführte Vektordarstellung eines Tensors 2. Stufe bezüglich der Basis $\{e_1, e_2, e_3\}$ kann mit Hilfe der Abbildung

$$\mathbf{t} = \mathsf{P} \, \mathbf{t}^* \qquad \Longleftrightarrow \qquad T_{ij} = Q_{ik} Q_{jl} T_{kl}^* \tag{106}$$

in die Basis $\mathbf{e}_1^*, \mathbf{e}_2^*, \mathbf{e}_3^*$ überführt werden. Im Falle eines symmetrischen Tensors nimmt die Abbildungsmatrix P die Form

$$\mathsf{P} = \begin{pmatrix} Q_{11}Q_{11} & Q_{12}Q_{12} & Q_{13}Q_{13} & 2Q_{11}Q_{12} & 2Q_{12}Q_{13} & 2Q_{13}Q_{11} \\ Q_{21}Q_{21} & Q_{22}Q_{22} & Q_{23}Q_{23} & 2Q_{21}Q_{22} & 2Q_{22}Q_{23} & 2Q_{23}Q_{21} \\ Q_{31}Q_{31} & Q_{32}Q_{32} & Q_{33}Q_{33} & 2Q_{31}Q_{32} & 2Q_{32}Q_{33} & 2Q_{33}Q_{31} \\ \hline Q_{11}Q_{21} & Q_{12}Q_{22} & Q_{13}Q_{23} & Q_{11}Q_{22} + Q_{12}Q_{21} & Q_{12}Q_{23} + Q_{13}Q_{22} & Q_{13}Q_{21} + Q_{11}Q_{23} \\ Q_{21}Q_{31} & Q_{22}Q_{32} & Q_{23}Q_{33} & Q_{21}Q_{32} + Q_{22}Q_{31} & Q_{22}Q_{33} + Q_{23}Q_{32} & Q_{23}Q_{31} + Q_{21}Q_{33} \\ Q_{21}Q_{31} & Q_{22}Q_{32} & Q_{23}Q_{33} & Q_{21}Q_{32} + Q_{22}Q_{31} & Q_{22}Q_{33} + Q_{23}Q_{32} & Q_{23}Q_{31} + Q_{21}Q_{33} \\ Q_{31}Q_{11} & Q_{32}Q_{12} & Q_{33}Q_{13} & Q_{31}Q_{12} + Q_{32}Q_{11} & Q_{32}Q_{13} + Q_{33}Q_{12} & Q_{33}Q_{11} + Q_{31}Q_{13} \end{pmatrix}$$

$$(107)$$

an. Die zu (106) inversen Beziehungen

$$\mathbf{t}^* = \mathbf{P}^{-1} \mathbf{t} \qquad \Longleftrightarrow \qquad T_{ij}^* = Q_{ki} Q_{lj} T_{kl} \tag{108}$$

zeigen, dass man die Matrix P^{-1} aus P erhält, indem man die Indices aller Q_{ik} in (107) vertauscht. Mit der Partitionierung

$$\mathsf{P} = \begin{pmatrix} \mathsf{A} \ \mathsf{B} \\ \mathsf{C} \ \mathsf{D} \end{pmatrix} \tag{109}$$

findet man

$$\mathsf{P}^{-1} = \begin{pmatrix} \mathsf{A}^T \ 2\mathsf{C}^T \\ \frac{1}{2} \ \mathsf{B}^T \ \mathsf{D}^T \end{pmatrix}.$$

 ${\sf P}$ ist also im Gegensatz zu ${\bf Q}$ nicht mehr orthogonal, jedoch lässt sich die inverse transponierte Matrix

$$\mathsf{P}^{-T} = \begin{pmatrix} \mathsf{A} \ \frac{1}{2} \ \mathsf{B} \\ 2\mathsf{C} \ \mathsf{D} \end{pmatrix} \tag{110}$$

einfach aus P ermitteln. Bei der Transformation der verzerrungsartigen Größe e hat man zu beachten, dass die Schubkomponenten des Verzerrungstensors mit dem Faktor 2 in die Vektordarstellung e eingehen. In der P-Matrix zur Transformation der Spannungsgröße sind also die Spalten 4 bis 6 mit dem Faktor 1/2 und die Zeilen 4 bis 6 mit dem Faktor 2 zu multiplizieren um die Transformationsmatrix für die Verzerrungsgröße zu erhalten. Das ist aber gerade die Matrix P^{-T} .

Für die gewählte Vektordarstellung von Tensoren 2. Stufe und die Matrixdarstellung symmetrischer Tensoren 4. Stufe bestehen bei Wechsel des Bezugssystems die Transformationsbeziehungen

3.3.3 Elastische Volumenänderung und Kirchhoff-Spannung

Aus

$$\boldsymbol{\tau} = J\boldsymbol{\sigma}$$

und der konstitutiven Gleichung (62) für die elastische Volumenänderung,

$$\operatorname{tr} \boldsymbol{\tau} = \frac{E}{1 - 2\nu} \ln J = 3\kappa \ln J,$$

folgt die nichtlineare Gleichung

$$J = \exp\left(\frac{\operatorname{tr} \boldsymbol{\sigma}}{3\kappa} J\right) \tag{112}$$

zur Bestimmung von J. Sie kann bei bekannter Cauchy-Spannung iterativ mit Hilfe des Newton-Verfahrens

$$J := J - \frac{J - \exp(aJ)}{1 - a\exp(aJ)}$$

gelöst werden. Da die auf den Kompressionsmodul bezogene Cauchy-Spannung eine kleine Zahl darstellt, ist auch der zur Abkürzung eingeführte Parameter

$$a = \frac{\operatorname{tr} \boldsymbol{\sigma}}{3\kappa}$$

klein und das Verfahren konvergiert in wenigen Schritten. Als Startwert kann die aus der Linearisierung der Exponentialfunktion folgende Näherung

$$J = \frac{1}{1-a}$$

benutzt werden.

3.3.4 Berechnung der \overline{C} -Moduli aus den \mathcal{L} -Moduli

Die Beziehung zwischen den mit der Ratengleichung (94) eingeführten Pseudomoduli $\overline{\mathbf{C}}$ und den Jaumann-Moduli \mathcal{L} beschreibt (96) explizit. Daraus ergibt sich die folgende Matrixform.

$$\bar{C} = \frac{1}{J} \begin{pmatrix} \mathcal{L}_{1111} & \mathcal{L}_{1122} & \mathcal{L}_{1133} & \mathcal{L}_{1112} & \mathcal{L}_{1121} & \mathcal{L}_{1123} & \mathcal{L}_{1132} & \mathcal{L}_{1113} & \mathcal{L}_{1131} \\ \mathcal{L}_{2211} & \mathcal{L}_{2222} & \mathcal{L}_{2233} & \mathcal{L}_{2212} & \mathcal{L}_{2223} & \mathcal{L}_{2232} & \mathcal{L}_{2231} & \mathcal{L}_{2231} \\ \mathcal{L}_{3311} & \mathcal{L}_{3322} & \mathcal{L}_{3333} & \mathcal{L}_{3312} & \mathcal{L}_{3321} & \mathcal{L}_{3323} & \mathcal{L}_{3332} & \mathcal{L}_{3333} & \mathcal{L}_{3331} \\ \mathcal{L}_{1211} & \mathcal{L}_{1222} & \mathcal{L}_{1233} & \mathcal{L}_{1212} & \mathcal{L}_{1221} & \mathcal{L}_{1223} & \mathcal{L}_{1232} & \mathcal{L}_{1213} & \mathcal{L}_{1231} \\ \mathcal{L}_{2311} & \mathcal{L}_{2322} & \mathcal{L}_{2333} & \mathcal{L}_{2312} & \mathcal{L}_{2321} & \mathcal{L}_{2323} & \mathcal{L}_{2332} & \mathcal{L}_{2313} & \mathcal{L}_{2331} \\ \mathcal{L}_{3211} & \mathcal{L}_{3222} & \mathcal{L}_{3233} & \mathcal{L}_{3122} & \mathcal{L}_{3221} & \mathcal{L}_{3223} & \mathcal{L}_{2323} & \mathcal{L}_{2331} \\ \mathcal{L}_{3111} & \mathcal{L}_{1322} & \mathcal{L}_{1333} & \mathcal{L}_{1312} & \mathcal{L}_{1321} & \mathcal{L}_{1323} & \mathcal{L}_{1313} & \mathcal{L}_{1331} \\ \mathcal{L}_{3111} & \mathcal{L}_{1322} & \mathcal{L}_{3133} & \mathcal{L}_{3112} & \mathcal{L}_{3121} & \mathcal{L}_{3123} & \mathcal{L}_{3132} & \mathcal{L}_{3113} & \mathcal{L}_{3131} \\ \mathcal{L}_{3111} & \mathcal{L}_{1322} & \mathcal{L}_{3133} & \mathcal{L}_{3112} & \mathcal{L}_{3121} & \mathcal{L}_{3123} & \mathcal{L}_{3123} & \mathcal{L}_{3133} & \mathcal{L}_{3131} \\ \mathcal{L}_{3111} & \mathcal{L}_{1322} & \mathcal{L}_{3133} & \mathcal{L}_{3112} & \mathcal{L}_{3121} & \mathcal{L}_{3123} & \mathcal{L}_{3132} & \mathcal{L}_{3113} & \mathcal{L}_{3131} \\ \mathcal{L}_{3111} & \mathcal{L}_{3122} & \mathcal{L}_{3133} & \mathcal{L}_{3121} & \mathcal{L}_{3123} & \mathcal{L}_{3132} & \mathcal{L}_{3133} & \mathcal{L}_{3131} \\ \mathcal{L}_{3111} & \mathcal{L}_{3122} & \mathcal{L}_{3133} & \mathcal{L}_{312} & \mathcal{L}_{3123} & \mathcal{L}_{3123} & \mathcal{L}_{3132} & \mathcal{L}_{3133} & \mathcal{L}_{3131} \\ \mathcal{L}_{3111} & \mathcal{L}_{3122} & \mathcal{L}_{3133} & \mathcal{L}_{312} & \mathcal{L}_{3123} & \mathcal{L}_{3132} & \mathcal{L}_{313} & \mathcal{L}_{3131} \\ \mathcal{L}_{312} & \mathcal{L}_{313} & \mathcal{L}_{313} & \mathcal{L}_{313} & \mathcal{L}_{313} & \mathcal{L}_{313} & \mathcal{L}_{313} \\ \mathcal{L}_{311} & \mathcal{L}_{312} & \mathcal{L}_{313} & \mathcal{L}_{313} & \mathcal{L}_{313} & \mathcal{L}_{313} & \mathcal{L}_{313} \\ \mathcal{L}_{311} & \mathcal{L}_{312} & \mathcal{L}_{313} & \mathcal{L}_{3$$

3.3.5 Struktur der Materialroutinen

Tabelle 1 fasst den grundsätzlichen Aufbau eines Unterprogramms zur Spezifizierung der konstitutiven Ratengleichungen zusammen. Neben einer stichwortartigen Beschreibung der aufeinander folgenden Programmteile sind die Unterprogrammnamen und die Formelnummern der implementierten Gleichungen aufgelistet. Abgesehen von den Modulen 3 und 8, die das jeweils betrachtete Materialmodell festlegen, sind die übrigen Programmblöcke allen Materialroutinen gemeinsam. Über eine Eingabevariable kann gesteuert werden, dass die Programmteile 7 bis 10 nur durchlaufen werden, wenn für Näherungen zweiter Ordnung die zweiten Zeitableitungen der Cauchy-Spannungen benötigt werden.

Mit der aktuellen Konfiguration als Referenzkonfiguration berechnet das Unterprogramm Mx zu gegebenen Eingangsgrößen

- Cauchy-Spannung σ
- räumlicher Geschwindigkeitsgradient $\bar{\mathbf{F}}$
- räumlicher Beschleunigungsgradient $\ddot{\mathbf{F}}$ (optional)
- Materialparameter

die Ausgangsgrößen

- Pseudomoduli **Č**
- Zeitableitung der Cauchy-Spannung $\dot{\sigma}$
- zweite Zeitableitung der Cauchy-Spannung $\ddot{\sigma}$ (optional).

Das in den vorangegangenen Abschnitten besprochene Materialmodell des isotropen hyperelastischen Werkstoffs ist als Unterprogramm M1 implementiert. Die wesentlichen Formeln der materialspezifischen Kernroutinen M1L und M1L1D sind in Tabelle 2 bzw. Tabelle 3 zusammengestellt. Es ist noch anzumerken, dass sich die letzte Gleichung in Tabelle 3 aus (98) in Verbindung mit (76) und (91) ergibt.

Die analytische Berechnung der Größe $\bar{\mathcal{L}} \mathbf{D}$, die das Unterprogramm MxL1D als Ausgabe bereitzustellen hat, ist für das einfache elastische Materialmodell möglich, aber bereits recht aufwändig. Bei komplexeren Werkstoffmodellen kann man $\dot{\bar{\mathcal{L}}} \mathbf{D}$ näherungsweise numerisch durch den Differenzenquotienten berechnen. Aus $\boldsymbol{\tau}, \boldsymbol{\check{\tau}}, \boldsymbol{\check{\tau}}, \mathbf{W}$ zum Zeitpunkt tergibt sich die Kirchhoff-Spannung zum Zeitpunkt $t + \Delta t$ zu

$$\boldsymbol{\tau}(t + \Delta t) \approx \boldsymbol{\tau} + \dot{\boldsymbol{\tau}} \Delta t = \boldsymbol{\tau} + (\overset{\mathbf{v}}{\boldsymbol{\tau}} - \boldsymbol{\tau} \mathbf{W} + \mathbf{W} \boldsymbol{\tau}) \Delta t,$$

so dass sich hierfür bei unverändertem Geschwindigkeitsgradienten $\mathbf{\dot{F}}$ mit Hilfe des Unterprogramms MxL Näherungen für $\mathcal{L}(t + \Delta t)$ sowie die Jaumann Ableitung $\mathbf{\ddot{\tau}}(t + \Delta t)$ gewinnen lassen. Aus dem Differenzenquotienten

$$\dot{\mathcal{L}} \mathbf{D} \approx \frac{\overleftarrow{\boldsymbol{\tau}}(t + \Delta t) - \overleftarrow{\boldsymbol{\tau}}}{\Delta t}$$

erhält man sodann mit der Transformation (98) die gesuchte Näherung

$$\dot{\bar{\mathcal{L}}} \mathbf{D} = J^{-1} \left(\dot{\mathcal{L}} - \mathcal{L} \operatorname{tr} \mathbf{D} \right) \mathbf{D}.$$

Die Testschrittweite Δt sollte dabei hinreichend klein gewählt werden, damit der Differenzenquotient eine gute Näherung des Differentialquotienten darstellt. Andererseits darf Δt nicht zu klein sein, da sonst Rundungsfehler bei der Berechnung von $\overleftarrow{\tau}(t + \Delta t)$ das Ergebnis verfälschen. Hinweise für eine günstige Schrittweite erhält man bei Betrachtung des elastischen Werkstoffs, für den das Ergebnis der analytischen Rechnung mit der numerischen Näherung verglichen werden kann. Bild 1 zeigt den relativen Fehler

$$\frac{|(\dot{\mathcal{L}}\,\mathbf{D})_{\text{numerisch}} - (\dot{\mathcal{L}}\,\mathbf{D})_{\text{analytisch}}|}{|(\dot{\bar{\mathcal{L}}}\,\mathbf{D})_{\text{analytisch}}|}$$

für 5000 Vergleichsrechnungen mit Zufallswerten der Testschrittweite Δt . Die Streuung des Fehlers ist auf die Wahl von Zufallswerten der Cauchy-Spannung σ und des räumlichen Geschwindigkeitsgradienten $\dot{\mathbf{F}}$ in jeder Vergleichsrechnung zurückzuführen. Wie man der doppelt logarithmischen Darstellung entnimmt, fällt der Approximationsfehler mit Δt bei kleiner werdender Schrittweite ab, während der Rundungsfehler mit $1/\Delta t$ wächst. Schrittweiten Δt in der Größenordnung von 10^{-6} liefern das günstigste Ergebnis im Hinblick auf den Gesamtfehler.



Bild 1: Relativer Fehler der numerischen Approximation von $\dot{\mathcal{L}}$ D durch Differenzenquotienten für das elastische Materialmodell

1. M1REFC Berechne die Determinante J des Deformationsgradienten, der die spannungsfreie Konfiguration auf die aktuelle Konfiguration abbildet: $J = \exp\left\{\frac{\operatorname{tr} \boldsymbol{\sigma}}{3\kappa} J\right\}$ (112)2. Berechne die Eulersche Verzerrungsgeschwindigkeit und den materiellen Spin: $\mathbf{D} = \frac{1}{2} \left(\mathbf{\dot{\bar{F}}} + \mathbf{\dot{\bar{F}}}^T \right)$ (86) $\mathbf{W} = \frac{1}{2} \left(\dot{\mathbf{F}} - \dot{\mathbf{F}}^T \right)$ (87)3. |MxL Spezifiziere die auf die spannungsfreie Konfiguration bezogenen Jaumann-Moduli \mathcal{L} in der Ratengleichung (90) Transformiere Jaumann-Moduli $\bar{\mathcal{L}} = J^{-1}\mathcal{L}$ auf Pseudomoduli 4. | TRLJC $\overline{\mathbf{C}}$ der aktuellen Konfiguration: $\bar{C}_{ijkl} = \bar{\mathcal{L}}_{ijkl} - \frac{1}{2} \left(\sigma_{ik} \delta_{jl} + \sigma_{il} \delta_{jk} - \sigma_{jl} \delta_{ik} + \sigma_{jk} \delta_{il} \right)$ (96)Berechne die Zeitableitung der ersten Piola-Kirchhoff-5. VOILLK Spannung: $\dot{\mathbf{S}}|_{ar{\mathbf{F}}-\mathbf{I}}=ar{\mathbf{C}}\dot{ar{\mathbf{F}}}$ (94)Berechne die Zeitableitung der Cauchy-Spannung: 6. |SIGMA1 $\dot{\boldsymbol{\sigma}} = \dot{\mathbf{S}}|_{\bar{\mathbf{F}}-\mathbf{I}} + \boldsymbol{\sigma}\dot{\bar{\mathbf{F}}}^T - \boldsymbol{\sigma}\operatorname{tr}\mathbf{D}$ (97)Berechne das Produkt $\bar{\mathcal{L}}\mathbf{D}$ der Zeitableitung der Jaumann-7. MxL1D Moduli und der Eulerschen Verzerrungsgeschwindigkeit Transformiere $\dot{\bar{\mathcal{L}}} \mathbf{D}$ auf $\dot{\bar{\mathbf{C}}} \dot{\bar{\mathbf{F}}}$: TRC1F1 8. siehe Gleichung (104)9. VOILLK Berechne die zweite Zeitableitung der ersten Piola-Kirchhoff-Spannung: $\ddot{\mathbf{S}}|_{\bar{\mathbf{F}}-\mathbf{I}} = \dot{\mathbf{C}}|_{\bar{\mathbf{F}}-\mathbf{I}} \, \dot{\bar{\mathbf{F}}} + \bar{\mathbf{C}} \, \ddot{\bar{\mathbf{F}}}$ (102)10. |SIGMA2 Berechne die zweite Zeitableitung der Cauchy-Spannung: $\ddot{\boldsymbol{\sigma}} = \ddot{\mathbf{S}}|_{\bar{\mathbf{F}}-\mathbf{I}} + 2\dot{\mathbf{S}}|_{\bar{\mathbf{F}}-\mathbf{I}}\dot{\bar{\mathbf{F}}}^T + \boldsymbol{\sigma}\ddot{\bar{\mathbf{F}}}^T - 2\dot{\boldsymbol{\sigma}}\operatorname{tr}\mathbf{D} - \bar{J}\cdot\boldsymbol{\sigma}$ (42) $\bar{J} = (\operatorname{tr} \dot{\bar{\mathbf{F}}})^2 + \operatorname{tr} \ddot{\bar{\mathbf{F}}} - \operatorname{tr} (\dot{\bar{\mathbf{F}}}^2)$ (44)

Tabelle 1: Aufbau der Materialroutine Mx

1. TRPRAX Berechne die Hauptachsen \mathbf{n}_i und Hauptwerte τ_i der auf die spannungsfreie Referenzkonfiguration bezogenen Kirchhoff-Spannung $\boldsymbol{\tau} = J\boldsymbol{\sigma}$ als Lösung des Eigenwertproblems $(\boldsymbol{\tau} - \tau_i \mathbf{I}) \mathbf{n}_i = 0.$ Die spaltenweise Anordnung der Eulerschen Basisvektoren $\mathbf{n}_i \equiv \mathbf{e}_i^*$ legt die Transformationsmatrix \mathbf{Q} fest: $\mathbf{e}_i^* = Q_{ji}\mathbf{e}_j$ $(105)_1$ Berechne die Matrix P zur Transformation von Tensorkompo-2. TRMXQQ nenten bei einem Wechsel der Basis. siehe Abschnitt 3.3.2, insbesondere Gleichung (107)3. M1LE Berechne die auf die spannungsfreie Referenzkonfiguration bezogenen Jaumann-Moduli \mathcal{L}^* auf der Eulerschen Basis (* kennzeichnet die Eulersche Basis) unter Verwendung der Matrix-Darstellung L^{*} gemäß Abschnitt 3.3.1: $\mathsf{L}^* = \begin{pmatrix} A & B & B \\ B & A & B \\ B & B & A \\ & & & & \\ & & & & & \\ & & & & & \\ & & & & & & \\ & & & & & & \\ & & & & & & \\ & & & & & & \\ & & & & & & & & \\ & & & & & & & & \\ & & & & & & & & \\ & & & & & & &$ (66)mit $A = 2G\frac{1-\nu}{1-2\nu}$ $B = 2G \frac{\nu}{1 - 2\nu}$ $q_{ij} = \frac{\varepsilon_i - \varepsilon_j}{\tanh(\varepsilon_i - \varepsilon_j)}$ (73) $\varepsilon_i - \varepsilon_j = \frac{\tau_i - \tau_j}{2G}$ 4. Transformiere L^{*} auf das kartesische Basissystem mit der aktuellen Konfiguration als Referenzkonfiguration: $I = P I^* P^T$ (111) $\bar{\mathsf{L}} = J^{-1}\mathsf{L}$ (91)

Tabelle 2: Aufbau des Unterprogramms M1L für elastisch isotropes Material
1. **VOILLK** Berechne die Komponenten
$$D_{ik}^{*}$$
 der Eulerschen Verzerrungsgeschwindigkeit auf den Eulerschen Achsen aus den Komponenten D_{ik} im kartesischen Basissystem unter Verwendung der Vektordarstellungen
 $\mathbf{D} = (D_{11}, D_{22}, D_{33}, 2D_{12}, 2D_{23}, 2D_{13})^{T}$
 $\mathbf{D}^{*} = (D_{11}^{*}, D_{22}^{*}, D_{33}^{*}, 2D_{12}^{*}, 2D_{23}^{*}, 2D_{13}^{*})^{T}$
gemäß Abschnitt 3.3.2:
 $\mathbf{D}^{*} = \mathbf{P}^{T}\mathbf{D}$ (111)
2. **MILIDE** Berechne das Produkt ($\dot{\mathbf{L}}\mathbf{D}$)* der Zeitableitung der auf die spannungsfreie Konfiguration bezogenen Jaumann-Moduli und der Eulerschen Verzerrungsgeschwindigkeit auf den Eulerschen Achsen:
($\dot{\mathbf{L}}\mathbf{D}$)* $= \begin{pmatrix} 0 & 2GD_{12}^{*}\dot{q}_{12} & 2GD_{13}^{*}\dot{q}_{13} \\ 0 & 2GD_{23}^{*}\dot{q}_{23} \\ \text{sym} & 0 \end{pmatrix}$ (77)
mit
 $\dot{q}_{ij} = (D_{ii}^{*} - D_{jj}^{*}) \left\{ \operatorname{coth}(\varepsilon_{i} - \varepsilon_{j}) - \frac{\varepsilon_{i} - \varepsilon_{j}}{\sinh^{2}(\varepsilon_{i} - \varepsilon_{j})} \right\}$
3. **TRL1D** Berechne das Produkt $\dot{\mathbf{L}}\mathbf{D}$ der Zeitableitung der auf die aktuelle Konfiguration bezogenen Jaumann-Moduli und der Eulerschen Verzerrungsgeschwindigkeit auf den Basisachsen:
 $W_{ij}^{E*} = W_{ij}^{*} - \frac{\bar{\Sigma}_{ij}^{*}}{\tau_{i} - \tau_{j}},$ (67)
 $\mathbf{W}^{E} = Q_{ir}Q_{js}W_{r}^{E*}\mathbf{e}_{i} \otimes \mathbf{e}_{j}$
 $\tilde{\mathbf{Y}}|_{\mathbf{F}=\mathbf{I}} = \mathbf{L} \mathbf{D}.$ (92)
 $\dot{\mathbf{L}} \mathbf{D} = Q_{ir}Q_{js}(\dot{\mathbf{L}}\mathbf{D})_{rs}^{*}\mathbf{e}_{i} \otimes \mathbf{e}_{j} - \overline{\mathbf{Y}}|_{\mathbf{F}=\mathbf{I}} \operatorname{tr} \mathbf{D}$
 $+ \mathbf{W}^{E} \overline{\mathbf{Y}}|_{\mathbf{F}=\mathbf{I}} - \overline{\mathbf{Y}}|_{\mathbf{F}=\mathbf{I}} \mathbf{W}^{E}$
 $+ \bar{\mathcal{L}}[\mathbf{DW}^{E} - \mathbf{W}^{E}\mathbf{D}]$ (98, 76, 91)

 ${\bf Tabelle \ 3:} \ {\rm Aufbau \ des \ Unterprogramms \ M1L1D \ für \ elastisch \ isotropes \ Material}$

3.4 Test der Implementierung

3.4.1 Transformationsroutinen für Jaumann-Moduli

Zu den beiden Transformationsmodulen 4 und 8 der Materialroutinen existieren bereits verifizierte, alternative Implementierungen. Diese greifen zur Bestimmung der Pseudomoduli auf die Greenmoduli aus $\dot{\mathbf{T}}^{(2)} = \mathbf{L}^{(2)} \mathbf{E}^{(2)}$ zurück. Der Zusammenhang ergibt sich direkt durch Einsetzen von (27) und (33) in die Ratengleichung

$$\dot{\mathbf{S}} = \mathbf{C}\dot{\mathbf{F}} \tag{113}$$

$$= (\boldsymbol{\tau} \mathbf{F}^{-T}) = (\mathbf{F} \mathbf{T}^{(2)}) .$$
(114)

date: 24.08.2004 22.21

So transformieren die Vergleichsroutinen zu TRLJC den Modultensor \mathcal{L} zunächst auf $\mathbf{L}^{(2)}$ (Herleitung siehe Lulla, 2003) und nachfolgend auf \mathbf{C} . Das Testprogramm, dessen Ergebnisdatei in Tabelle 4 abgedruckt ist, ermittelt eine exakte Übereinstimmung der Ausgabewerte sowohl für das ebene als auch für das räumliche System.

```
Program XTRLJC
```

cnorm,absolute/relative	error:	2.82	28427	712	0.	0.
cnorm, absolute/relative	error:	2.82	28427	712	0.	0.
cnorm,absolute/relative	error:	2.	0.	0.		
cnorm,absolute/relative	error:	4.	0.	0.		

```
Systematic test, 3-dim analysis
```

cnorm, absolute/relative	error:	128.685664	0.	0.
cnorm, absolute/relative	error:	3.46410162	0.	0.
cnorm, absolute/relative	error:	3.46410162	0.	0.
cnorm, absolute/relative	error:	3.46410162	0.	0.
cnorm, absolute/relative	error:	4.89897949	0.	0.
cnorm, absolute/relative	error:	4.89897949	0.	0.
cnorm,absolute/relative	error:	4.89897949	0.	0.

Timing data for random tests, 2-dim analysis

```
cpu-time gen = 3.21205678E-06
cpu-time old = 8.25948933E-07
cpu-time = 4.45507432E-07
ratio old/new = 1.85395096
```

Timing data for random tests, 3-dim analysis cpu-time gen = 5.26041694E-06 cpu-time old = 2.49500798E-06 cpu-time = 1.38984574E-06 ratio old/new = 1.79516899

Tabelle 4: Programmausgabe beim Test der Transformation der Moduli $\mathcal L$ auf C

Hier wird ein fester Modultensor \mathcal{L} bei verschiedenen Spannungszuständen transformiert. Die regelmäßigen Ergebnisse kommen zustande, weil in jeder Rechnung ein weiterer Eintrag des Spannungsvektors von Null auf einen endlichen Wert gesetzt wird. Anschließend erfolgt der Geschwindigkeitsvergleich über die Anzahl der in 10 Sekunden ausführbaren Transformationen mit zufällig gewählten Eingangsgrößen. Die zur Generierung der Zufallszahlen benötigte Zeit (cpu-time gen) wird herausgerechnet, so dass ein objektiver Vergleich der mittleren Bearbeitungszeit möglich ist. Die direkte Rechnung ist demnach rund 1.8 mal schneller.

```
_____
                                   date: 24.08.2004 16.02
Program XTRC1F1
_____
Random tests, two-dimensional analysis
-----
number of tests performed = 1057832
max relative error
                   = 7.62289263E-15
cpu-time gen + old + new = 9.45329693E-06
cpu-time gen + old = 8.02807256E-06
                   = 4.54238018E-06
cpu-time gen
                   = 1.42522437E-06
cpu-time new
cpu-time old
                   = 3.48569238E-06
cpu-time ratio old/new =
                       2.44571484
Random tests, three-dimensional analysis
_____
number of tests performed = 586392
                    = 3.2476883E-15
max relative error
cpu-time gen + old + new = 1.70534387E-05
cpu-time gen + old = 1.36692506E-05
cpu-time gen
                   = 7.42543196E-06
cpu-time new
                   =
                       3.38418804E-06
cpu-time old
                       6.24381865E-06
                   =
cpu-time ratio old/new =
                       1.84499755
```

Tabelle 5: Programmausgabe beim Test der Transformation der Größe $\dot{\mathcal{L}}\mathbf{D}$ auf $\dot{\mathbf{C}}\dot{\mathbf{F}}$

Auch die Vergleichsroutine zu TRC1F1 macht bei der Berechnung der Größe $\dot{\mathbf{C}}\dot{\mathbf{F}}$ aus $\dot{\mathbf{\mathcal{L}}}\mathbf{D}$ den Umweg über die Green-Moduli $\mathbf{L}^{(2)}$. Die nötigen Beziehungen können aus den Gleichungen (113) sowie deren Zeitableitungen hergeleitet werden. Im Test werden 10 Sekunden lang zufällig generierte Eingangsgrößen jeweils mit Hilfe beider Verfahren umgerechnet. Die Programmausgabe (Tabelle 5) zeigt, dass im zweidimensionalen Fall bei 10⁶ Testdurchläufen der maximale relative Fehler in der Größenordnung der Maschinengenauigkeit liegt. Das Verhältnis der mittleren Bearbeitungszeit für die Transformationen liegt hier bei 2.4. Die Ergebnisse der dreidimensionalen Rechnungen stimmen ebenso überein. Die direkte Umrechnung erzielt allerdings einen etwas geringeren Zeitvorteil.

3.4.2 Reine Volumenänderung

Im Folgenden wird die aktuelle Cauchy-Spannung durch Integration ihrer von den Materialroutinen ausgegebenen Zeitableitungen ermittelt. Dazu werden Einschrittverfahren erster und zweiter Ordnung verwendet. Bei einfachen, homogenen Deformationsprozessen und für das zuvor eingeführte nichtlineare elastische Material ist der Spannungszustand durch Auswertung von (60) leicht analytisch zu bestimmen. Den Fortgang des Prozesses beschreibt der Parameter t. Dieser wird hier zur Vereinfachung "Zeit" genannt, auch wenn der Prozess nicht von der natürlichen Zeit abhängt.

Bei einheitlicher Ausdehnung in alle Raumrichtungen ist die Bewegung eines materiellen Punktes mit den Referenzkoordinaten (X_1, X_2, X_3)

$$x_1 = (1+t)X_1,$$
 $x_2 = (1+t)X_2,$ $x_3 = (1+t)X_3$

und somit der Deformationsgradient

$$\mathbf{F} = (1+t)\,\mathbf{I}$$

gegeben. Daraus leiten sich der räumliche Geschwindigkeits-

$$\dot{\mathbf{F}}\mathbf{F}^{-1} = (1+t)^{-1}\,\mathbf{I}$$

und der Beschleunigungsgradient

$$\ddot{\mathbf{F}}\mathbf{F}^{-1} = \mathbf{0}$$

ab. Auf Grund der Diagonalform des Deformationsgradienten sind die für die logarithmische Dehnung maßgeblichen Hauptwerte des linken Strecktensors direkt abzulesen. Mit Hilfe der vorher für das einfache hyperelastische Material hergeleiteten Beziehung (60) ergibt sich die Cauchy-Spannung

$$\boldsymbol{\sigma} = 3\kappa (1+t)^{-3} \,\ln(1+t) \,\mathbf{I}.$$

Das zum Anfangszeitpunkt spannungsfreie Material wird auf ca. 9% seines Ausgangsvolumens gestaucht. Das obere Diagramm in Bild 2 zeigt die Hauptwerte der Cauchyspannung bei fortschreitender Deformation als Ergebnis exakter sowie numerischer Rechnungen.



Bild 2: Reine Volumenänderung eines nichtlinear elastischen Materials. Verlauf der Cauchy-Hauptspannungen (oberes Bild) und relativer Fehler der numerischen Rechnungen mit verschiedenen Integrationsschrittweiten bis zu einem vorgegebenen Endwert $t_E = 0.55$ (unteres Bild).

Die recht grobe Integrationsschrittweite von $\Delta t = 0.05$ lässt die Abweichungen von der exakten Lösung sehr groß werden, zeigt allerdings auch deutlich die Verbesserung durch das genauere Approximationsverfahren. Im unteren Schaubild ist bei einem festen Wert für t der auf den exakten Spannungswert bezogene Fehler in Abhängigkeit von der Diskretisierung aufgetragen. Die Verschlechterung der Ergebnisse erfolgt in der Größenordnung der Schrittweite Δt bzw. ihres Quadrates $(\Delta t)^2$.

3.4.3 Einfache Scherung

Mit t als konstantem Betrag der Scherung folgt aus dem Verhalten

$$x_1 = X_1 + tX_2, \qquad x_2 = X_2, \qquad x_3 = X_3$$

eines Linienelements der Deformationsgradient

$$\mathbf{F} = \begin{pmatrix} 1 & t & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Somit ist der räumliche Geschwindigkeitsgradient

$$\dot{\mathbf{F}}\mathbf{F}^{-1} = \begin{pmatrix} 0 \ 1 \ 0 \\ 0 \ 0 \ 0 \\ 0 \ 0 \ 0 \end{pmatrix}$$

konstant und der räumliche Beschleunigungsgradient

$$\ddot{\mathbf{F}}\mathbf{F}^{-1} = \mathbf{0}$$

verschwindet. Die Analyse des Eigenwertproblems für den linken Cauchy-Green-Tensor $\mathbf{V}^2 = \mathbf{F}\mathbf{F}^{\mathrm{T}}$ (15) liefert die Hauptstreckungen

$$\lambda_1 = \sqrt{1 + \frac{1}{2}t^2 + t\sqrt{1 + \frac{1}{4}t^2}}$$
$$\lambda_2 = \sqrt{1 + \frac{1}{2}t^2 - t\sqrt{1 + \frac{1}{4}t^2}} = 1/\lambda_1$$
$$\lambda_3 = 1$$

und den Winkel φ zwischen der Eulerschen Achse \mathbf{n}_1 und der Scherrichtung

$$\tan \varphi = \sqrt{1 + \frac{1}{4}t^2} - \frac{1}{2}t$$
$$\tan(2\varphi) = \frac{2}{t}$$
$$\sin(2\varphi) = \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{1}{4}t^2}}$$
$$\cos(2\varphi) = \frac{\frac{1}{2}t}{\sqrt{1 + \frac{1}{4}t^2}}$$

zur Bestimmung der logarithmischen Dehnung $\boldsymbol{\varepsilon}$. Der Übergang zum Winkel 2 φ ermöglicht die übersichtliche Herleitung der Cauchy-Spannung aus (60)

$$\boldsymbol{\sigma} = 2G \ln(\lambda_1) \begin{pmatrix} \cos(2\varphi) & \sin(2\varphi) & 0\\ \sin(2\varphi) & -\cos(2\varphi) & 0\\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$
$$= G \frac{\ln\left(1 + \frac{1}{2}t^2 + t\sqrt{1 + \frac{1}{4}t^2}\right)}{\sqrt{1 + \frac{1}{4}t^2}} \begin{pmatrix} \frac{1}{2}t & 1 & 0\\ 1 & -\frac{1}{2}t & 0\\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Die hieran ablesbare Beziehung

$$\sigma_{11} - \sigma_{22} = t\sigma_{12}$$

gilt bekanntlich universell, d.h. unabhängig von der speziellen Form des elastisch isotropen Materialgesetzes (Truesdell und Noll, 1965, Gleichung (54.16)).

Der Betrag der relevanten Cauchyschen Hauptspannungen sowie die Schubkomponente verhalten sich bei einer Scherung bis t = 5.5 aus einem spannungsfreien Zustand heraus wie in Bild 3 dargestellt. Die numerischen Rechnungen erfolgen in Schritten von $\Delta t = 0.5$. Wie der untere Bildteil belegt, verhält sich der relative Fehler bei steigender Schrittweite gemäß der Konvergenzordnung der Approximationsverfahren.



Bild 3: Einfache Scherung eines nichtlinear elastischen Materials. Verlauf von Normal- und Schubkomponente der Cauchyspannung (oberes Bild) und relativer Fehler der numerischen Rechnungen mit verschiedenen Integrationsschrittweiten bis zu einem vorgegebenen Endwert $t_E = 5.5$ (unteres Bild).

3.4.4 Starrkörperrotation

Nach einer einheitlichen Verdrehung des gesamten Körpers um den Winkel t um die x_3 -Achse nimmt ein materieller Punkt den Platz

$$x_1 = \cos(t)X_1 - \sin(t)X_2$$

$$x_2 = \sin(t)X_2 + \cos(t)X_2$$

$$x_3 = X_3$$

relativ zur Ausgangskonfiguration ein mit

$$\mathbf{F} = \begin{pmatrix} \cos(t) - \sin(t) & 0\\ \sin(t) & \cos(t) & 0\\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

als Deformationsgradienten und den konstanten räumlichen Geschwindigkeits- und Beschleunigungsgradienten

$$\dot{\mathbf{F}}\mathbf{F}^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$
$$\ddot{\mathbf{F}}\mathbf{F}^{-1} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Ein während der Rotation aufrecht erhaltener Spannungszustand mit unveränderlichen Komponenten σ_{ij}^0 bezüglich einer mitbewegten Basis wird mit

$$\sigma_{11} = \frac{1}{2} \left(\sigma_{11}^0 + \sigma_{22}^0 \right) + \frac{1}{2} \left(\sigma_{11}^0 - \sigma_{22}^0 \right) \cos(2t) - \sigma_{12}^0 \sin(2t)$$

$$\sigma_{22} = \frac{1}{2} \left(\sigma_{11}^0 + \sigma_{22}^0 \right) - \frac{1}{2} \left(\sigma_{11}^0 - \sigma_{22}^0 \right) \cos(2t) + \sigma_{12}^0 \sin(2t)$$

$$\sigma_{12} = \frac{1}{2} \left(\sigma_{11}^0 - \sigma_{22}^0 \right) \sin(2t) + \sigma_{12}^0 \cos(2t)$$

in die raumfeste Darstellung überführt.

Die Entwicklung des ersten Hauptwertes bei konstanter einachsiger Zugbelastung mit σ_{11}^0 ist in Bild 4 für eine vollständige Umdrehung aufgetragen. Den Näherungsrechnungen liegt eine Schrittweite von $\Delta t = \pi/50$ zu Grunde.



Bild 4: Starrkörperrotation eines nichtlinear elastischen Materials bei einachsiger Zugbelastung mit σ_{11}^0 . Verlauf der Hauptkomponente der Cauchy-Spannung in der raumfester Basis (oberes Bild) und relativer Fehler der numerischen Rechnungen mit verschiedenen Integrationsschrittweiten bis zu einem vorgegebenen Endwert $t_E = 2\pi$ (unteres Bild).

3.4.5 Einachsiger Zug

Aus der Beschreibung der Bewegung

$$x_1 = (1+t)X_1,$$
 $x_2 = (1+t)^{-\nu}X_2,$ $x_3 = (1+t)^{-\nu}X_3$

bzw. dem Deformationsgradienten

$$\mathbf{F} = \begin{pmatrix} 1+t & & \\ & (1+t)^{-\nu} & \\ & & (1+t)^{-\nu} \end{pmatrix}$$

sind der räumliche Geschwindigkeitsgradient

$$\dot{\mathbf{F}}\mathbf{F}^{-1} = (1+t)^{-1} \begin{pmatrix} 1 & \\ & -\nu \\ & & -\nu \end{pmatrix}$$

und der räumliche Beschleunigungsgradient

$$\ddot{\mathbf{F}}\mathbf{F}^{-1} = (1+t)^{-2} \begin{pmatrix} 0 & \\ \nu(1+\nu) & \\ \nu(1+\nu) \end{pmatrix}$$

leicht zu ermitteln. Die exakte Normalspannungsfunktion

$$\sigma_{11}(t) = E \frac{\ln(1+t)}{(1+t)^{1-2\nu}}$$

sowie die numerischen Näherungen erster und zweiter Ordnung für die Integrationschrittweite $\Delta t = 1/5$ zeigt Bild 5.

3.4.6 Zusammenfassung der Testergebnisse

Fasst man die Ergebnisse der vier Testrechnungen zusammen, bilden die numerisch ermittelten Werte die wahre Spannungs-Dehnungsbeziehung qualitativ gut ab. Auch die Steigerung der Genauigkeit bei gleicher Schrittweite durch Verwendung der Methode höherer Ordnung ist in allen Fällen deutlich zu sehen. Die auftretenden Abweichungen weisen das Verhalten des systematischen Fehlers des jeweiligen Näherungsverfahrens auf. Daraus ist zu schließen, dass die Materialroutine die korrekten Werte für $\dot{\sigma}$ und $\ddot{\sigma}$ liefert.



Bild 5: Einachsige Zugbelastung eines nichtlinear elastischen Materials. Verlauf der Cauchy-Normalspannung (oberes Bild) und relativer Fehler der numerischen Rechnungen mit verschiedenen Integrationsschrittweiten bis zu einem vorgegebenen Endwert $t_E = 2.5$ (unteres Bild).

4 Elastoplastische Ratengleichungen eines phänomenologischen Fließeckenmodells metallischer Vielkristalle

4.1 Konstitutive Ratengleichungen

Wir setzen durchgängig voraus, dass das Materialverhalten (1) wie in der klassichen Plastizitätstheorie einfacher, zeitunabhängiger Materialien bei isothermen Deformationen durch konstitutive Ratengleichungen der Form

$$\dot{\mathbf{S}} = \dot{\mathbf{S}}(\dot{\mathbf{F}}, \mathcal{G}) = \mathbf{C}(\dot{\mathbf{F}}, \mathcal{G}) \, \dot{\mathbf{F}} \quad \text{mit} \quad \mathbf{C} = \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \dot{\mathbf{F}}}$$
(115)

beschrieben werden kann und dass (2) der inkrementelle Steifigkeitstensor

$$\mathbf{C} = \mathbf{C}^T \qquad \Longleftrightarrow \qquad C_{ijkl} = C_{klij} \tag{116}$$

symmetrisch ist. $\mathcal{G} = \{\mathbf{F}, \mathcal{H}\}$ beschreibt den aktuellen Zustand des Werkstoffs und enthält neben dem aktuellen Deformationsgradienten \mathbf{F} auch innere Zustandsvariablen, die kollektiv in \mathcal{H} zusammengefasst sind. Äquivalent mit der Hauptsymmetrie der inkrementellen Steifigkeit (116) ist die Existenz eines konstitutiven Potentials $U(\dot{\mathbf{F}}, \mathcal{G})$, so dass die Ratengleichungen (115) in die Darstellung (Hill, 1959)

$$\dot{\mathbf{S}} = \frac{\partial U(\dot{\mathbf{F}}, \mathcal{G})}{\partial \dot{\mathbf{F}}}, \qquad \mathbf{C} = \frac{\partial^2 U}{\partial \dot{\mathbf{F}} \partial \dot{\mathbf{F}}}, \qquad U = \frac{1}{2} \, \dot{\mathbf{S}} \cdot \dot{\mathbf{F}}$$
(117)

übergehen. (117) beschreibt einerseits eine breite Klasse von Materialien und ist andererseits soweit eingeschränkt, dass Petryks Theorie stabiler Deformationsprozesse (siehe hierzu Kapitel 5) darauf anwendbar ist.

Die nachfolgende Spezialisierung des konstitutiven Potentials benutzt zur Sicherstellung der materiellen Objektivität die Jaumann-Ableitung der Kirchhoff-Spannung und die Eulersche Verzerrungsgeschwindigkeit als spinunempfindliche Größen,

$$\widetilde{\boldsymbol{\tau}} = \widetilde{\boldsymbol{\tau}}(\mathbf{D}, \mathcal{G}) = \boldsymbol{\mathcal{L}}(\mathbf{D}, \mathcal{G}) \mathbf{D} \quad \text{mit} \quad \boldsymbol{\mathcal{L}} = \frac{\partial \widetilde{\boldsymbol{\tau}}}{\partial \mathbf{D}},$$
(118)

und geht von der inversen Form dieser Beziehung aus:

$$\mathbf{D} = \mathbf{D}^{e} + \mathbf{D}^{p}, \qquad \mathbf{D}^{e} = \mathcal{M}^{e} \,\, \overline{\boldsymbol{\tau}}, \qquad \mathbf{D}^{p} = \frac{\partial \Psi^{p}(\overline{\boldsymbol{\tau}}, \mathcal{G})}{\partial \overline{\boldsymbol{\tau}}}$$
(119)

Hierbei ist \mathcal{M}^{e} der symmetrische, positiv definite elastische Nachgiebigkeitstensor und Ψ^{p} das plastische Potential.

4.2 Zwei-Flächen-Modell mit innerer Fließecke

4.2.1 Grundgleichungen

Das phänomenologische Materialmodell von Petryk und Thermann (1997) beruht auf zwei klassischen Konzepten zur Beschreibung zeitunabhängigen elasto-plastischen Verhaltens

metallischer Werkstoffe. Nach der Fließtheorie begrenzt eine glatte Fläche den elastischen Bereich des Spannungsraums. Die Entwicklung der plastischen Verzerrung wird über eine Fließregel abgeschätzt, die die Fließrichtung vorgibt. Fließeckentheorien, wie die von Christoffersen und Hutchinson (1979), beschreiben das inkrementelle Verhalten des Materials an einer scharfen Ecke der Fließfläche. Diese Ansätze orientieren sich an der physikalischen Theorie des kristallographischen Gleitens. Die Ausbildung der Fließecke kann als Schnittpunkt der Fließkurven vieler einzelner Gleitmechanismen interpretiert werden. Weil die Richtung der plastischen Verzerrungsrate nicht begrenzt ist, werden bifurkationsbezogene Wechsel wesentlich realistischer eingeschätzt.

Hill (1967) beschreibt, dass der Offnungswinkel einer Fließecke auf Grund von physikalischen Verfestigungsmechanismen eingegrenzt werden kann. Diese Begrenzung könnte auch durch eine äußere Fläche im Spannungsraum dargestellt werden, die der Punkt der aktuellen Spannung nicht erreichen kann. Im vorliegenden Modell wird die klassische Fließbedingung zur Gleichung für die extremale Fläche modifiziert. Das inkrementelle Stoffgesetz wird an der scharfen Ecke der inneren Fließfläche formuliert. Bei der Darstellung des Modells folgen wir Petryk und Thermann (1997), berücksichtigen aber überdies endliche Verzerrungen.

Die Formulierung der extremalen Fläche erfolgt nach Huber und v.Mises in Abhängigkeit von der Fließspannung k und dem deviatorischen "back stress" $\boldsymbol{\alpha}$, von der Deformationsgeschichte abhängigen Zustandsgrößen, die isotrope und kinematische Verfestigung in den Körnern des Vielkristalls beschreiben. Deren Evolutionsgleichungen können aber während der folgenden Herleitung offen bleiben. Mit $\boldsymbol{\tau}'$ als Deviator der Kirchhoff-Spannung gilt dann für die Punkte auf der äußeren Fläche

$$\bar{\tau} = \sqrt{\frac{1}{2} \left(\boldsymbol{\tau}' - \boldsymbol{\alpha} \right) \cdot \left(\boldsymbol{\tau}' - \boldsymbol{\alpha} \right)}, \qquad \bar{\tau} = k.$$

Das Modell sieht am aktuellen Belastungspunkt eine kegelförmige Begrenzung des elastischen Bereichs vor, die sich tangential an eine Kugel um α anschmiegt. Die Gestaltung der beiden Flächen und die Situation an der Fließecke sind in Bild 6 skizziert. Die Reduzierung auf den deviatorischen Spannungsraum wird durch die Einschränkung auf inkompressible plastische Deformation ermöglicht, die für viele metallische Werkstoffe gerechtfertigt ist.

Für variierende Orientierung der Spannungsrate legt das Modell eine Klassifizierung der Belastung fest, die sich an den mikromechanischen Vorgängen in einem Polykristall orientiert. Weist die aktuelle Spannungsrate $\overline{\tau}'$ in den elastischen Bereich zurück, beschreibt dies eine Entlastung der Gitter in allen Körnern. Die Verzerrungsgeschwindigkeit ist über die elastischen Nachgiebigkeiten (71)–(72) zu bestimmen. Spannungsraten im komplementären Halbraum führen zur Aktivierung plastischer Deformationsmechanismen. Werden die Gleitsysteme aller Körner vollständig aktiv, spricht man von totaler Belastung. Das zugeordnete Gebiet im Spannungsraum hat eine kegelförmige Begrenzung, deren Geometrie vom Grad der gegenseitigen Beeinflussung der Gleitvorgänge der Körner abhängt. Vernachlässigt man diesen Effekt, findet sich der Rand in der Verlängerung des Entlastungskegels. Das Modell, siehe Bild 6, ist gerade für diesen Grenzfall formuliert. Die Wechselwirkungen zwischen den mikroskopischen Gleitvorgängen werden indirekt an anderer Stelle berücksichtigt. Bei Spannungsraten außerhalb des Bereichs totaler Belastung



Bild 6: Konstruktion des elastischen Entlastungskegels für das Zwei-Flächen-Modell mit innerer Fließecke

verhält sich eine zunehmende Anzahl der plastischen Deformationsmechanismen neutral bis hin zur vollkommenen Entlastung am Übergang zum elastischen Bereich.

Die Beziehung (119) zwischen plastischer Verzerrungsgeschwindigkeit und Spannungsrate an der Fließecke

$$\mathbf{D}^{\mathrm{p}} = \frac{\partial \Psi^{\mathrm{p}}}{\partial \boldsymbol{\tau}} \tag{120}$$

ist gemäß den vorangegangenen Erläuterungen über ein abschnittweise definiertes Potential gegeben. Das plastische Potential

$$\Psi^{\mathrm{p}} = \frac{1}{2} \, \bar{M} F(\beta) \, |\vec{\boldsymbol{\tau}}'|^2 \tag{121}$$

erfüllt mit

$$F(\beta) = \begin{cases} \pi - 2\kappa + \sin 2\kappa \cos 2\beta & \text{für } 0 \le \beta \le \kappa & \text{(totale Belastung)} \\ \pi - (\beta + \kappa) + \frac{1}{2} \sin 2(\beta + \kappa) & \text{für } \kappa \le \beta \le \pi - \kappa & \text{(particle Entlastung)} \\ 0 & \text{für } \pi - \kappa \le \beta \le \pi & \text{(totale Entlastung)} \\ \end{cases}$$

$$(122)$$

die Forderung nach Stetigkeit der Verzerrungsraten. Darin wird die Orientierung der Spannungsrate durch den Winkel β bezüglich der Kegelachse ${\bf n}$

$$\cos\beta = \frac{\overleftarrow{\tau}' \cdot \mathbf{n}}{|\overleftarrow{\tau}'|} \tag{123}$$

ausgedrückt, der aus Symmetriegründen im Interval $[0,\pi]$ ihr gesamtes Spektrum abdeckt. So stellen die Werte $\beta = \kappa$ und $\beta = \pi - \kappa$ mit κ als Kegelöffnungswinkel die Bereichsgrenzen dar. Durch die einfache Formulierung des Entlastungskegels fällt seine Symmetrieachse immer mit der Richtung von $\tau' - \alpha$ zusammen,

$$\mathbf{n} = \frac{\boldsymbol{\tau}' - \boldsymbol{\alpha}}{|\boldsymbol{\tau}' - \boldsymbol{\alpha}|}.\tag{124}$$

Dieser Zusammenhang gilt allerdings nicht für beliebige Deformationspfade. Erneute Belastung ist nicht mehr zulässig, wenn der Spannugsdeviator die Fließfläche durch Entlastung verlassen hat.

 \overline{M} ist eine von der Spannungsrate unabhängige skalare Funktion, die die aktuelle Antwort des Materials auf Belastung beschreibt. Die explizite Form der Ratengleichung nimmt so die Form

$$\mathbf{D}^{\mathbf{p}} = \bar{M} \left\{ A(\beta) | \mathbf{\tilde{\tau}}' | \mathbf{n} + B(\beta) \mathbf{\tilde{\tau}}' \right\}$$
(125)

 mit

$$A(\beta) = \begin{cases} 2\cos\beta\,\sin(2\kappa) & \text{für } 0 \le \beta \le \kappa \\ \frac{\sin^2(\beta + \kappa)}{\sin\beta} & \text{für } \kappa \le \beta \le \pi - \kappa \\ 0 & \text{für } \pi - \kappa \le \beta \le \pi \end{cases}$$
(126)

und

$$B(\beta) = \begin{cases} \pi - 2\kappa - \sin(2\kappa) & \text{für } 0 \le \beta \le \kappa \\ \pi - (\beta + \kappa) - \frac{\sin \kappa \sin(\beta + \kappa)}{\sin \beta} & \text{für } \kappa \le \beta \le \pi - \kappa \\ 0 & \text{für } \pi - \kappa \le \beta \le \pi \end{cases}$$
(127)

an. Zur Herleitung der Beziehung (125) und zur Berechnung der plastischen Nachgiebigkeiten werden die partiellen Ableitungen $\partial |\vec{\tau}'| / \partial \vec{\tau}$ und $\partial \beta / \partial \vec{\tau}$ benötigt. Aus $|\vec{\tau}'|^2 = \vec{\tau}' \cdot \vec{\tau}'$ erhalten wir zunächst

$$\frac{\partial |\vec{\tau}'|}{\partial \vec{\tau}} = \frac{\vec{\tau}'}{|\vec{\tau}'|}$$
(128)

und sodann durch Differenziation der β definierenden Gleichung $|\mathbf{\tilde{\tau}}'| \cos \beta = \mathbf{\tilde{\tau}}' \cdot \mathbf{n}$ nach $\mathbf{\tilde{\tau}}$

$$|\mathbf{\tilde{\tau}}'|^2 \frac{\partial \beta}{\partial \mathbf{\tilde{\tau}}} = \frac{\mathbf{\tilde{\tau}}' \cos \beta - |\mathbf{\tilde{\tau}}'|\mathbf{n}}{\sin \beta}.$$
 (129)

Damit läßt sich nun die plastische Verzerrungsrate einfach anschreiben:

$$\begin{aligned} \mathbf{D}^{\mathbf{p}} &= \frac{\partial \Psi^{\mathbf{p}}}{\partial \overline{\boldsymbol{\tau}}} \\ &= \frac{1}{2} \, \bar{M} \left\{ \frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}\beta} \frac{\partial \beta}{\partial \overline{\boldsymbol{\tau}}} |\overline{\boldsymbol{\tau}}'|^2 + 2F |\overline{\boldsymbol{\tau}}'| \frac{\partial |\overline{\boldsymbol{\tau}}'|}{\partial \overline{\boldsymbol{\tau}}} \right\} \\ &= \frac{1}{2} \, \bar{M} \left\{ \frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}\beta} \frac{\overline{\boldsymbol{\tau}}' \cos \beta - |\overline{\boldsymbol{\tau}}'| \mathbf{n}}{\sin \beta} + 2F \overline{\boldsymbol{\tau}}' \right\} \\ &= \bar{M} \left\{ -\frac{1}{2} \, \frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}\beta} \frac{|\overline{\boldsymbol{\tau}}'|}{\sin \beta} \, \mathbf{n} + \left(\frac{1}{2} \, \frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}\beta} \cot \beta + F \right) \, \overline{\boldsymbol{\tau}}' \right\} \\ &= \bar{M} \left\{ A(\beta) |\overline{\boldsymbol{\tau}}'| \, \mathbf{n} + B(\beta) \, \overline{\boldsymbol{\tau}}' \right\}. \end{aligned}$$

Wertet man die Funktionen

$$A(\beta) = -\frac{1}{2} \frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}\beta} \frac{1}{\sin\beta} \tag{130}$$

$$B(\beta) = \frac{1}{2} \frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}\beta} \cot\beta + F \tag{131}$$

für $F(\beta)$ gemäß (122) mit

$$\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}\beta} = \begin{cases} -2\sin 2\kappa \sin 2\beta & \text{für } 0 \le \beta \le \kappa \\ -1 + \cos 2(\beta + \kappa) & \text{für } \kappa \le \beta \le \pi - \kappa \\ 0 & \text{für } \pi - \kappa \le \beta \le \pi \end{cases}$$
(132)

aus, so ergibt sich das in (126) und (127) behauptete Endergebnis.

4.2.2 Plastischer Nachgiebigkeitstensor

Zur Ermittlung der plastischen Nachgiebigkeit ist die Verzerrungsrate nach der Spannungsrate partiell abzuleiten. Mit Hilfe der Gleichungen (128) und (129) ergibt sich durch direkte Rechnung

$$\begin{split} \boldsymbol{\mathcal{M}}^{\mathbf{p}} &= \frac{\partial \mathbf{D}^{\mathbf{p}}}{\partial \boldsymbol{\bar{\tau}}} \\ &= \bar{M} \left\{ A'(\beta) |\boldsymbol{\bar{\tau}}'| \, \mathbf{n} \otimes \frac{\partial \beta}{\partial \boldsymbol{\bar{\tau}}} + A(\beta) \, \mathbf{n} \otimes \frac{\partial |\boldsymbol{\bar{\tau}}'|}{\partial \boldsymbol{\bar{\tau}}} + B'(\beta) \, \boldsymbol{\bar{\tau}}' \otimes \frac{\partial \beta}{\partial \boldsymbol{\bar{\tau}}} + B(\beta) \, \frac{\partial \boldsymbol{\bar{\tau}}'}{\partial \boldsymbol{\bar{\tau}}'} \right\} \\ &= \bar{M} \left\{ A'(\beta) \, \mathbf{n} \otimes \frac{\boldsymbol{\bar{\tau}}' \cos \beta - |\boldsymbol{\bar{\tau}}'| \mathbf{n}}{|\boldsymbol{\bar{\tau}}'| \sin \beta} + A(\beta) \, \mathbf{n} \otimes \frac{\boldsymbol{\bar{\tau}}'}{|\boldsymbol{\bar{\tau}}'|} \\ &+ B'(\beta) \, \boldsymbol{\bar{\tau}}' \otimes \frac{\boldsymbol{\bar{\tau}}' \cos \beta - |\boldsymbol{\bar{\tau}}'| \mathbf{n}}{|\boldsymbol{\bar{\tau}}'|^2 \sin \beta} + B(\beta) \boldsymbol{\mathcal{I}}' \right\} \\ &= \bar{M} \left\{ -\frac{A'(\beta)}{\sin \beta} \, \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} + [A(\beta) + A'(\beta) \cot \beta] \, \mathbf{n} \otimes \frac{\boldsymbol{\bar{\tau}}'}{|\boldsymbol{\bar{\tau}}'|} \\ &- \frac{B'(\beta)}{\sin \beta} \, \frac{\boldsymbol{\bar{\tau}}'}{|\boldsymbol{\bar{\tau}}'|} \otimes \mathbf{n} + B'(\beta) \cot \beta \, \frac{\boldsymbol{\bar{\tau}}'}{|\boldsymbol{\bar{\tau}}'|} \otimes \frac{\boldsymbol{\bar{\tau}}'}{|\boldsymbol{\bar{\tau}}'|} + B(\beta) \boldsymbol{\mathcal{I}}' \right\}. \end{split}$$

 \mathcal{I}' ist hierbei der Einheitstensor vierter Stufe im Raum der deviatorischen Tensoren zweiter Stufe, der jedem Tensor zweiter Stufe seinen symmetrischen Deviator zuordnet. Die Komponentendarstellung in einer kartesischen Basis lautet

$$\mathcal{I}'_{ijkl} = \frac{1}{2} \left(\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk} \right) - \frac{1}{3} \delta_{ij} \delta_{kl}.$$

Führen wir zur Abkürzung die Größen

$$\mathbf{p} = \frac{\mathbf{\bar{\tau}}'}{|\mathbf{\bar{\tau}}'|} \tag{133}$$

$$M_{nn} = -\frac{A'(\beta)}{\sin\beta} \tag{134}$$

$$M_{np} = A(\beta) + A'(\beta) \cot \beta$$
(135)

$$M_{pn} = -\frac{B'(\beta)}{\sin\beta} \tag{136}$$

$$M_{pp} = B'(\beta) \cot \beta \tag{137}$$

ein, so nimmt der plastische Nachgiebigkeitstensor die Form

$$\mathcal{M}^{\mathbf{p}} = \bar{M} \left\{ M_{nn} \, \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} + M_{np} \, \mathbf{n} \otimes \mathbf{p} + M_{pn} \, \mathbf{p} \otimes \mathbf{n} + M_{pp} \, \mathbf{p} \otimes \mathbf{p} + B(\beta) \, \mathcal{I}' \right\}$$
(138)

an. Die Darstellung der Koeffizienten

$$M_{nn} = \frac{1}{2} \sin^{-2} \beta \left(\frac{\mathrm{d}^2 F}{\mathrm{d}\beta^2} - \frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}\beta} \cot \beta \right)$$
$$M_{np} = M_{pn} = -\frac{1}{2} \sin^{-1} \beta \left(\frac{\mathrm{d}^2 F}{\mathrm{d}\beta^2} \cot \beta + \frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}\beta} (1 - \cot^2 \beta) \right)$$
$$M_{pp} = \frac{1}{2} \cot \beta \left(\frac{\mathrm{d}^2 F}{\mathrm{d}\beta^2} \cot \beta + \frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}\beta} (1 - \cot^2 \beta) \right)$$

in Abhängigkeit von $F(\beta)$ unter Benutzung der Gleichungen (130) und (131) bestätigt die Symmetrie des Nachgiebigkeitstensors. Für die weitere Auswertung ist die bereichsweise definierte Funktion $F(\beta)$ für die Fälle der totalen und partiellen Belastung getrennt zu betrachten.

a) Totale Belastung. Besonders einfach sind die Verhältnisse bei vollständiger Belastung, also für $0 \le \beta \le \kappa$. Aus

$$A'(\beta) = -2\sin\beta\sin 2\kappa$$
$$B'(\beta) = 0$$
$$M_{nn} = 2\sin 2\kappa$$
$$M_{np} = M_{pn} = 0$$
$$M_{pp} = 0$$

ergibt sich

$$\mathcal{M}^{\mathrm{p}} = \bar{M} \left\{ 2\sin(2\kappa) \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} + (\pi - 2\kappa - \sin(2\kappa)) \mathcal{I}' \right\}$$

= $M_1 \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} + M_2 \left(\mathcal{I}' - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} \right)$ (139)

in spektraler Form mit den plastischen Hauptnachgiebigkeiten

$$M_1 = \bar{M} \left(\pi - 2\kappa + \sin(2\kappa) \right) \tag{140}$$

$$M_2 = \bar{M} \left(\pi - 2\kappa - \sin(2\kappa) \right). \tag{141}$$

In Richtung der Kegelachse **n** ist die Nachgiebigkeit M_1 am größten. In den Richtungen senkrecht dazu nimmt sie den kleineren Wert M_2 an. Der Nachgiebigkeitstensor ist im Bereich vollständiger Belastung eine von der Belastungsrichtung β unabhängige Konstante.

b) Partielle Belastung. Für $\kappa \leq \beta \leq \beta_c = \pi - \kappa$ ist die Rechnung insgesamt aufwendiger:

$$A'(\beta) = \frac{\sin(\beta + \kappa) \left\{ 2\sin\beta\cos(\beta + \kappa) - \cos\beta\sin(\beta + \kappa) \right\}}{\sin^2\beta}$$
$$B'(\beta) = -\frac{\sin^2\beta - \sin^2\kappa}{\sin^2\beta}$$
$$M_{nn} = -\frac{\sin(\beta + \kappa) \left\{ 2\sin\beta\cos(\beta + \kappa) - \cos\beta\sin(\beta + \kappa) \right\}}{\sin^3\beta}$$
(142)

$$M_{np} = M_{pn} = \frac{\sin^2 \beta - \sin^2 \kappa}{\sin^3 \beta}$$
(143)

$$M_{pp} = -\frac{\cos\beta(\sin^2\beta - \sin^2\kappa)}{\sin^3\beta}.$$
(144)

Wir zeigen jetzt, dass auch in diesem Falle eine Spektraldarstellung der Nachgiebigkeiten möglich ist. Hierzu betrachten wir zwei orthonormale deviatorische Tensoren \mathbf{a}_1 und \mathbf{a}_2 ,

$$\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 = 0, \qquad |\mathbf{a}_1| = 1, \qquad |\mathbf{a}_2| = 1,$$

in dem von ${f {ar au }}'$ und ${f n}$ aufgespannten Teilraum.

$$\psi = \frac{1}{2} \left(\beta + \kappa\right) \tag{145}$$

sei der von \mathbf{a}_1 und $\overleftarrow{\boldsymbol{\tau}}'$ eingeschlossene Winkel und

$$\varphi = \frac{1}{2} \left(\beta - \kappa\right) \tag{146}$$

der Winkel zwischen \mathbf{a}_1 und \mathbf{n} (siehe Bild 7).



Bild 7: Orthonormale Tensoren \mathbf{a}_1 und \mathbf{a}_2 des von der Spannungsrate $\breve{\tau}'$ und der Kegelachse \mathbf{n} aufgespannten Teilraums

In der Basis $\{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2\}$ erhalten wir aus

$$\frac{\boldsymbol{\bar{\tau}}'}{|\boldsymbol{\bar{\tau}}'|} = \cos\psi\,\mathbf{a}_1 + \sin\psi\,\mathbf{a}_2$$
$$\mathbf{n} = \cos\varphi\,\mathbf{a}_1 - \sin\varphi\,\mathbf{a}_2$$

und (138) die Darstellung

$$\mathcal{M}^{\mathrm{p}} = \bar{M} \left\{ M_{11} \mathbf{a}_1 \otimes \mathbf{a}_1 + M_{12} \mathbf{a}_1 \otimes \mathbf{a}_2 + M_{21} \mathbf{a}_2 \otimes \mathbf{a}_1 + M_{22} \mathbf{a}_2 \otimes \mathbf{a}_2 + B \mathcal{I}' \right\}$$

 mit

$$M_{11} = M_{nn} \cos^2 \varphi + M_{pp} \cos^2 \psi + 2M_{np} \cos \varphi \cos \psi$$
$$M_{22} = M_{nn} \sin^2 \varphi + M_{pp} \sin^2 \psi - 2M_{np} \sin \varphi \sin \psi$$
$$M_{12} = M_{21} = -M_{nn} \cos \varphi \sin \varphi + M_{pp} \cos \psi \sin \psi + M_{np} (\cos \varphi \sin \psi - \cos \psi \sin \varphi).$$

Nach längerer Rechnung ergibt sich

$$M_{11} = \frac{\sin(\beta + \kappa)(\sin \kappa + \sin \beta)}{\sin \beta}$$
$$M_{22} = \frac{\sin(\beta + \kappa)(\sin \kappa - \sin \beta)}{\sin \beta}$$
$$M_{12} = M_{21} = 0,$$

so dass \mathcal{M}^{p} in der Form

$$\mathcal{M}^{\mathrm{p}} = M_1 \,\mathbf{a}_1 \otimes \mathbf{a}_1 + M_2 \,\mathbf{a}_2 \otimes \mathbf{a}_2 + M_3 (\mathcal{I}' - \mathbf{a}_1 \otimes \mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2 \otimes \mathbf{a}_2)$$
(147)

 mit

$$M_1 = \bar{M} (M_{11} + B) = \bar{M} \{ \pi - (\beta + \kappa) + \sin(\beta + \kappa) \}$$
(148)

$$M_2 = \bar{M} (M_{22} + B) = \bar{M} \{ \pi - (\beta + \kappa) - \sin(\beta + \kappa) \}$$
(149)

$$M_3 = \bar{M}B = \bar{M}\left\{\pi - (\beta + \kappa) - \frac{\sin\kappa\sin(\beta + \kappa)}{\sin\beta}\right\}$$
(150)

als Hauptwerten der plastischen Nachgiebigkeit spektral dargestellt werden kann. Beim Übergang von vollständiger zu partieller Belastung, d.h. für $\beta = \kappa$, stimmen M_2 und M_3 überein und die Hauptnachgiebigkeiten (148)–(149) gehen stetig in die Werte (140)– (141) für totale Belastung über. An der Grenze zum elastischen Entlastungskegel für $\beta = \beta_c = \pi - \kappa$ verschwindet $\mathcal{M}^{\rm p}$, was man mit $\beta + \kappa = \pi$ wieder direkt an den Formeln abliest.

c) Zusammenfassung. Unabhängig von der Belastungsrichtung kann \mathcal{M}^{p} stets in der Hauptachsendarstellung

$$\mathcal{M}^{\mathrm{p}} = M_{1}(\beta, \kappa, \mathbf{n}) \, \mathbf{a}_{1} \otimes \mathbf{a}_{1} + M_{2}(\beta, \kappa, \mathbf{n}) \, \mathbf{a}_{2} \otimes \mathbf{a}_{2} + M_{3}(\beta, \kappa, \mathbf{n}) \, (\mathcal{I}' - \mathbf{a}_{1} \otimes \mathbf{a}_{1} - \mathbf{a}_{2} \otimes \mathbf{a}_{2})$$

geschrieben werden. Bezeichnet

$$\mathbf{m} = \sin^{-1}\beta \,\mathbf{p} - \cot\beta \,\mathbf{n}$$

den zur Achse \mathbf{n} des elastischen Entlastungskegels orthonormalen Tensor in der Belastungsebene, so gilt für die Hauptrichtungen

$$\mathbf{a}_1 = \cos \varphi \, \mathbf{n} + \sin \varphi \, \mathbf{m}$$
$$\mathbf{a}_2 = -\sin \varphi \, \mathbf{n} + \cos \varphi \, \mathbf{m}.$$

Für die Hauptnachgiebigkeiten M_1, M_2 und M_3 und den Winkel φ zwischen \mathbf{a}_1 und \mathbf{n} sind jedoch die Fälle der vollständigen und partiellen Belastung zu unterscheiden:

Totale Belastung $0 \le \beta \le \kappa$:

$$M_1(\beta, \kappa, \mathbf{n}) = \bar{M} (\pi - 2\kappa + \sin(2\kappa))$$
$$M_2(\beta, \kappa, \mathbf{n}) = M_3(\beta, \kappa, \mathbf{n}) = \bar{M} (\pi - 2\kappa - \sin(2\kappa))$$
$$\varphi = 0$$

 $\text{Partielle Belastung} \quad \kappa \leq \beta \leq \pi - \kappa = \beta_c :$

$$M_{1}(\beta, \kappa, \mathbf{n}) = \bar{M} \left\{ \pi - (\beta + \kappa) + \sin(\beta + \kappa) \right\}$$
$$M_{2}(\beta, \kappa, \mathbf{n}) = \bar{M} \left\{ \pi - (\beta + \kappa) - \sin(\beta + \kappa) \right\}$$
$$M_{3}(\beta, \kappa, \mathbf{n}) = \bar{M} \left\{ \pi - (\beta + \kappa) - \frac{\sin\kappa\sin(\beta + \kappa)}{\sin\beta} \right\}$$
$$\varphi = \frac{1}{2} \left(\beta - \kappa \right)$$

Den Verlauf der auf M bezogenen Hauptnachgiebigkeiten über β illustriert Bild 8. Man beachte, dass hier die Funktionen M_2/\bar{M} und M_3/\bar{M} zur besseren Visualisierung fünffach überhöht dargestellt sind.



Bild 8: Bezogene Hauptnachgiebigkeiten als Funktion des Winkels β zwischen der Kegelachse und der Spannungsrate für $\beta_c = \pi - \kappa = 120^{\circ}$

4.2.3 Modellparameter

Zur Vervollständigung des Modells sind noch die von der Spannungsrate unabhängigen Größen κ und \overline{M} festzulegen. Sie stellen zustandsabhängige Funktionen dar, die von den aktuellen Werten τ , α und k abhängen.

Festlegung des Parameters κ . Konstruiert man den elastischen Entlastungskegel wie in Bild 6, so folgt κ aus der geometrischen Beziehung

$$k\sqrt{2}\sin\beta_c^{\max} = |\boldsymbol{\tau}' - \boldsymbol{\alpha}|\sin\kappa \equiv \bar{\tau}\sqrt{2}\sin\kappa$$

 $\mathbf{z}\mathbf{u}$

$$\kappa = \arcsin \frac{\sin \beta_c^{\max}}{\bar{\tau}/k}.$$
(151)

 κ ist also eine Funktion des relativen Abstands

$$\bar{\tau}/k \in (\sin \beta_c^{\max}, 1)$$

von der extremalen Fläche und der Materialkonstanten

$$\beta_c^{\max} \in (\pi/2, \pi).$$

 β_c^{\max} ist der maximale Wert, den der Außenwinkel des elastischen Entlastungskegel annehmen kann. Dem entspricht ein kleinster Wert des Innenwinkels

$$\kappa_{\min} = \pi - \beta_c^{\max}.$$
 (152)

Festlegung der Funktion \overline{M} . Die Funktion \overline{M} bestimmen wir so, dass mikromechanische Vorhersagen der Spannungs-Dehnungs-Kurve metallischer Vielkristalle unter Zugbeanspruchung gut approximiert werden. \overline{M} modelliert den Effekt einer im Vielkristall auch dann beobachteten Verfestigung, wenn die Einkristalle bei unveränderlicher kritischer Schmidt-Spannung abgleiten (,constraint hardening'). Da das Anwachsen der makroskopischen Spannungs-Dehnungskurve hierbei auf einen Bereich kleiner plastischer Dehnungen in der Größenordnung der elastischen Dehnungen beschränkt ist, können wir die infinitesimale Theorie zu Grunde legen und geometrische Effekte vernachlässigen ($\tau \to \sigma, \tilde{\tau} \to \dot{\sigma}$). Im Zwei-Flächen-Modell kann die durch Zwängungen bewirkte Verfestigung durch eine festgehaltene extremale Fläche beschrieben werden.

Bei unveränderlicher extremaler Fläche, d.h. für

$$k = k_0 = \text{const}, \qquad \boldsymbol{\alpha} = \mathbf{0}$$

folgt aus (151)

$$\mathrm{d}\bar{\tau} = -\bar{\tau} \frac{\cos\kappa}{\sin\kappa} \,\mathrm{d}\kappa.$$

Im Bereich vollständiger Belastung erhält man für die Differenz der Hauptnachgiebigkeiten aus (140) und (141) die einfache Beziehung

$$\frac{M_1 - M_2}{\bar{M}} = 2\sin(2\kappa)$$

und damit

$$\frac{M_1 - M_2}{\bar{M}} \,\mathrm{d}\bar{\tau} = -4\bar{\tau}\cos^2\kappa\,\mathrm{d}\kappa.$$

Nun zeigt das Differential der Gleichung (141),

$$d\left(\frac{M_2}{\bar{M}}\right) = -2(1+\cos 2\kappa) d\kappa = -4\cos^2\kappa d\kappa,$$

dass auch

$$\frac{M_1 - M_2}{\bar{M}} \,\mathrm{d}\bar{\tau} = \bar{\tau} \,\mathrm{d}\left(\frac{M_2}{\bar{M}}\right)$$

gilt. Dies begründet die nützliche Beziehung

$$\frac{M_1}{\bar{M}} \,\mathrm{d}\bar{\tau} = \mathrm{d}\left(\frac{M_2}{\bar{M}}\bar{\tau}\right) \tag{153}$$

 mit

$$\frac{M_2}{\bar{M}}\bar{\tau} = k_0 \sin\beta_c^{\max}\chi(\kappa) \tag{154}$$

und

$$\chi(\kappa) = \frac{\pi - 2\kappa - \sin(2\kappa)}{\sin\kappa}.$$
(155)

Bei proportionaler Belastung in Richtung von n,

$$\boldsymbol{\sigma}' = \sqrt{2}\,\bar{\tau}\,\mathbf{n} \tag{156}$$
$$\mathrm{d}\boldsymbol{\sigma}' = \sqrt{2}\,\mathrm{d}\bar{\tau}\,\mathbf{n},$$

ergibt sich daraus für das plastische Verzerrungsinkrement

$$d\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{p}} = \boldsymbol{\mathcal{M}}^{\mathrm{p}} \, \mathrm{d}\boldsymbol{\sigma}' = \sqrt{2} \, \mathbf{n} \, M_1 \, \mathrm{d}\bar{\tau} = \sqrt{2} \, \mathbf{n} \, \bar{M} \, \mathrm{d} \left(\frac{M_2}{\bar{M}} \bar{\tau}\right) = \sqrt{2} \, k_0 \sin \beta_c^{\mathrm{max}} \, \mathbf{n} \, \bar{M} \, \mathrm{d}\chi.$$

Betrachtet man \overline{M} als Funktion von χ , so lautet die plastische Verzerrung

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{p}} = \sqrt{2} \, k_0 \sin\beta_c^{\mathrm{max}} \, \mathbf{n} \int_0^{\chi} \bar{M}(\bar{\chi}) \, \mathrm{d}\bar{\chi}. \tag{157}$$

Der Ansatz

$$\bar{M}(\chi) = \frac{1}{E} \frac{c}{\left\{1 - \chi(\kappa) / \chi(\kappa_{\min})\right\}^m}$$
(158)

mit E als Elastizitätsmodul und zwei weiteren Konstanten c und m stellt sicher, dass \overline{M} über alle Grenzen wächst, wenn sich $\overline{\tau}$ der festgehaltenen extremalen Fläche nähert, also $\overline{\tau}/k_0$ gegen Eins und damit wegen (151),

$$\frac{\bar{\tau}}{k_0} = \frac{\sin \kappa_{\min}}{\sin \kappa}$$

 κ gegen κ_{\min} geht. Die inverse Funktion ist in Bild 9 für verschiedene Werte der Konstanten c und m dargestellt. Für c = 2 und m = 1 enthält der Ansatz (158) die von Petryk und Thermann (1997) vorgeschlagene Funktion \overline{M} .



Bild 9: Verlauf der auf *E* bezogenen inversen Funktion $\overline{M}(\kappa)$ für $\beta_c^{\max} = 140^{\circ}$

Die Festlegung von \overline{M} in der Form (158) hat den Vorteil, dass sich das Integral in (157) analytisch berechnen lässt. Nach Integration erhält man die plastische Dehnung bei proportionaler Belastung in geschlossener Form zu

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{p}} = \mathbf{n} \sqrt{2} k_{0} \frac{c}{E} \sin(\kappa_{\mathrm{min}}) \chi(\kappa_{\mathrm{min}}) \begin{cases} \ln \frac{1}{1 - \chi(\kappa) / \chi(\kappa_{\mathrm{min}})} & \text{für } m = 1\\ \frac{\{1 - \chi(\kappa) / \chi(\kappa_{\mathrm{min}})\}^{-m+1} - 1}{m-1} & \text{für } m \neq 1. \end{cases}$$
(159)

Hieraus ergibt sich speziell bei einachsiger Beanspruchung mit der Spannung σ die zugehörige plastische Dehnung ε^p

$$E\varepsilon^{\mathbf{p}}/\sigma_{0} = \frac{2}{3}c\sin(\kappa_{\min})\chi(\kappa_{\min}) \begin{cases} \ln\frac{1}{1-\chi(\kappa)/\chi(\kappa_{\min})} & \text{für } m=1\\ \frac{\{1-\chi(\kappa)/\chi(\kappa_{\min})\}^{-m+1}-1}{m-1} & \text{für } m\neq 1, \end{cases}$$
(160)

so dass mit

$$\frac{\sigma}{\sigma_0} = \frac{\sin \kappa_{\min}}{\sin \kappa} \tag{161}$$

das normierte Spannungs-Dehnungs-Gesetz in Parameterdarstellung gefunden ist. Zur Normierung dienen E und $\sigma_0 = k_0 \sqrt{3}$.

4.2.4 Vergleich mit mikromechanischen Vorhersagen

Einachsige Spannungs-Dehnungs-Kurve. Theoretische Vorhersagen des Verlaufs der Spannungs-Dehnungs-Kurve eines aus nicht verfestigenden kubisch-flächenzentrierten Einkristallen in zufälliger Orientierung aufgebauten Metalls zeigt Bild 10 an Hand von Ergebnissen aus der Literatur.

Aus den Modellvorstellungen von Sachs (1928) bzw. Taylor (1938) folgen obere und untere Grenzen unter der Annahme einer in allen Kristalliten gleichen Spannung bzw. gleichen plastischen Dehnung, die mit dem jeweiligen makroskopischen Wert übereinstimmt. Bishop und Hill (1951b, 1951a) haben für den oberen Grenzwert das 1.53-fache der anfänglichen Zugfließspannung σ_Y gefunden. Rechnungen von Hutchinson (1964) bestätigen diesen Wert. Seinen Untersuchungen liegen die äquivalenten selbstkonsistenten Modelle von Kröner (1961) und Budiansky und Wu (1962) zu Grunde (KBW-Modell), die von einer Einbettung des Einkristalls in eine umgebende elastische Matrix ausgehen und durch nachfolgende Mittelung der Einkristallzustände zur makroskopischen Spannung und Dehnung führen. Auch die allgemeinere und realitätsnähere selbstkonsistente Theorie Hills (1965) wurde später von Hutchinson (1970) numerisch ausgewertet. Da Hill für die Matrix die a priori unbekannten Steifigkeiten des vielkristallinen Aggregats ansetzt, ist der Rechenaufwand im Vergleich zum KBW-Modell größer. Berveiller und Zaoui (1979) haben gezeigt, wie man durch eine explizite elasto-plastische Anpassung über eine einfache skalare Funktion das KBW-Modell verbessern kann. Die entsprechende Kurve in Bild 10, die dem Hillschen Ergebnis nahe kommt, kann im Endergebnis durch Reskalierung der KBW-Kurve gewonnen werden. Wie Hutchinson (1964) bemerkt hat, gilt dies auch für die (nicht konsistente) Rechnung nach Lin (1957), bei der die plastischen Dehnungen um



Bild 10: Vergleich theoretischer Spannungs-Dehnungs-Kurven kubisch flächenzentrierter metallischer Vielkristalle unter Zugbeanspruchung für verschiedene mikromechanische Modelle. Isotrope, nicht verfestigende Einkristalle in regelloser Orientierung, $\nu = 1/3$.

den Faktor 8/15 (für die Querkontraktionszahl $\nu = 1/3$) kleiner sind als im KBW-Modell.

Bild 7 zeigt, dass das Zwei-Flächen-Modell mit geeigneten Konstanten in der durch (158) bestimmten Funktion \overline{M} die besprochenen mikromechanischen Ergebnisse sehr gut approximiert. Für die Auswertung der Parameterdarstellung (160)-(161) der Spannungs-Dehnungs-Kurve des Zwei-Flächen-Modells wurde der maximal zulässige externe Winkel des elastischen Entlastungskegels mit

$$\beta_c^{\max} = \arcsin \frac{\sigma_Y}{\sigma_0} = \arcsin \frac{1}{1.53} = 139.2^{\circ}$$

gewählt, was dem oberen Grenzwert des "constraint hardening" für das KBW-Modell entspricht. Da in Bild 11 auf die Zugfließspannung σ_0 der asymptotischen Grenzfläche bezogen wurde, sind für den Vergleich die Kurven der mikromechanischen Ergebnisse auf beiden Achsen mit dem Faktor 1/1.53 zu skalieren. Die Ergebnisse der selbstkonsistenten Theorie Hills werden mit m = 3 und c = 2 wiedergegeben, während m = 1 mit c = 2 oder 2.5 die vom KBW-Modell vorhergesagte Kurve approximiert.



Bild 11: Vergleich angepasster Spannungs-Dehnungs-Kurven des Zwei-Flächen-Modells mit den theoretischen Vorhersagen selbstkonsistenter mikromechanischer Modelle nach Kröner (1961), Budiansky und Wu (1962) und Hill (1965) aus Rechnungen von Hutchinson (1970)

Effektiver Schubmodul nach einachsiger Zugbeanspruchung. Um den Effekt der sich ausbildenden Fließecke zu analysieren, betrachten wir eine einachsige Dehnungsgeschichte bis zu einer vorgegebenen Zugspannung $\sigma_{11} = \sigma$. Für den Spannungszustand

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{mit dem Deviator} \quad \boldsymbol{\sigma}' = \begin{pmatrix} \frac{2}{3}\sigma & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{3}\sigma & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{3}\sigma \end{pmatrix}$$

und die kombinierte Zug- und Schubbelastung

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}} = \begin{pmatrix} \dot{\sigma} \ \dot{\tau} \ 0 \\ \dot{\tau} \ 0 \ 0 \\ 0 \ 0 \ 0 \end{pmatrix} \quad \text{mit dem Deviator} \quad \dot{\boldsymbol{\sigma}}' = \begin{pmatrix} \frac{2}{3} \dot{\sigma} & \dot{\tau} & 0 \\ \dot{\tau} & -\frac{1}{3} \dot{\sigma} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{3} \dot{\sigma} \end{pmatrix}$$

berechnen wir den effektiven Schubmodul

$$G_{\text{eff}} = \frac{\dot{\sigma}_{12}}{2\dot{\varepsilon}_{12}}.$$

Aus (125),

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathrm{p}} = \bar{M} \left\{ A(\beta) |\dot{\boldsymbol{\sigma}}'| \, \mathbf{n} + B(\beta) \, \dot{\boldsymbol{\sigma}}' \right\},\$$

ergibt sich die Schubkomponente der plastischen Verzerrungsrate zu

$$\dot{\varepsilon}_{12}^{\mathrm{p}} = \bar{M}B(\beta)\dot{\sigma}_{12},$$

da **n** in Richtung von σ' weist und somit $n_{12} = 0$ ist. Mit dem elastischen Anteil

$$\dot{\varepsilon}_{12}^{\rm e} = \frac{\dot{\sigma}_{12}}{2G}$$

folgt für den effektiven Schubmodul die einfache Formel

$$G_{\text{eff}} = \frac{1}{2\bar{M}\,B(\beta) + 1/G},$$

wobei β durch (123) gegeben ist:

$$\cos\beta = \frac{\dot{\sigma}}{\sqrt{\dot{\sigma}^2 + 3\dot{\tau}^2}}.$$

Die äquivalente Darstellung

$$\tan\beta = \frac{\sqrt{3}\dot{\tau}}{\dot{\sigma}} = \sqrt{3}\,\tan\Theta$$

zeigt den Zusammenhang mit dem von Hutchinson (1970) benutzten Winkel Θ (vgl. Bild 12).

Der effektive Schubmodul in Abhängigkeit von der Belastungsrichtung ist in Bild 13 für verschiedene Funktionen \overline{M} der Familie (158) dargestellt. Als Daten liegen ein maximaler Öffnungswinkel des elastischen Entlastungskegels

$$\beta_c^{\max} = 139.2^{\circ}$$

und die Zugspannung

$$\sigma = \frac{1.3}{1.53} \, \sigma_0 = 0.85 \, \sigma_0$$



Bild 12: Kombinierte Zug- und Schubbelastung nach einachsiger Zugbeanspruchung bis zur Spannung σ



Bild 13: Variation des effektiven Schubmoduls mit der Belastungsrichtung nach vorangegangener Zugbelastung. $\sigma = 0.85 \sigma_0, \beta_c^{\text{max}} = 139.2^{\circ}$

zu Grunde, so dass ein Vergleich mit Fig. 7 in Hutchinson (1970) möglich ist. Die auf dem KBW-Modell basierenden Ergebnisse der selbstkonsistenten Rechnung sind als markierte Punkte übernommen.

Die Darstellung unterstreicht die ausgeprägte Reduzierung des effektiven Schubmoduls im plastischen Bereich als wesentlichen Effekt der Fließecke. Bei glatter Fließfläche tritt dieses Phänomen nicht auf. Vielmehr erhält man für die Fließtheorie $G_{\text{eff}} = G$. Diese Überschätzung der Schubsteifigkeit hat entscheidenden Einfluß auf das Stabilitätsverhalten und den kritischen Zustand, für den sich Scherbänder ausbilden können. Qualitativ gibt das Zwei-Flächen-Modell den von Hutchinson (1970) für das selbstkonsistente Modell von Kröner (1961) oder Budiansky und Wu (1962) berechneten Verlauf von G_{eff} über β richtig wieder. Das in Bild 13 dargestellte Ergebnis für die Deformationstheorie,

$$G_{\text{eff}} = \frac{G}{1 + 3G(1/E_s - 1/E)}, \qquad E_s = \frac{\sigma}{\varepsilon}$$

die ebenfalls eine deutliche Reduzierung des effektiven Schubmoduls liefert, wurde für ein Spannungs-Dehnungs-Gesetz mit den Parametern c = 2 und m = 1 berechnet.

4.2.5 Nachgiebigkeiten bei kombinierter Zug- und Schubbeanspruchung

Bei Vernachlässigung physikalischer Verfestigungsmechanismen gilt im Zustand einachsiger Zugspannung

$$\mathbf{n} = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{m} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0\\ 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$
 (162)

Mit den beiden orthogonalen Tensoren als Basis notieren wir die kombinierte Belastung

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}}' = \sqrt{\frac{2}{3}} \left(\dot{\sigma} \, \mathbf{n} + \sqrt{3} \dot{\tau} \, \mathbf{m} \right)$$

und die zugehörigen Hauptrichtungen

$$\mathbf{a}_1 = \cos \varphi \, \mathbf{n} + \sin \varphi \, \mathbf{m} = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 2\cos \varphi & \sqrt{3}\sin \varphi & 0\\ \sqrt{3}\sin \varphi & -\cos \varphi & 0\\ 0 & 0 & -\cos \varphi \end{pmatrix}$$
$$\mathbf{a}_2 = -\sin \varphi \, \mathbf{n} + \cos \varphi \, \mathbf{m} = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} -2\sin \varphi & \sqrt{3}\cos \varphi & 0\\ \sqrt{3}\cos \varphi & \sin \varphi & 0\\ 0 & 0 & \sin \varphi \end{pmatrix},$$

die abhängig von der Belastungsrichtung um den Winkel

$$\varphi = 0$$
 (totale Belastung)
 $\varphi = \frac{1}{2}\beta - \kappa$ (partielle Belastung)

relativ zur Basis gedreht sind. Mit den Abkürzungen $c=\cos\varphi$ und $s=\sin\varphi$ lauten die Tensoren 4. Stufe

$$\mathbf{a}_{1} \otimes \mathbf{a}_{1} = \frac{1}{6} \begin{pmatrix} 4c^{2} & -2c^{2} & -2c^{2} & 4\sqrt{3}cs & 0 & 0 \\ -2c^{2} & c^{2} & c^{2} & -2\sqrt{3}cs & 0 & 0 \\ -2c^{2} & c^{2} & c^{2} & -2\sqrt{3}cs & 0 & 0 \\ \hline -2c^{2} & c^{2} & c^{2} & -2\sqrt{3}cs & 0 & 0 \\ \hline 4\sqrt{3}cs & -2\sqrt{3}cs & -2\sqrt{3}cs & 12s^{2} & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline -2s^{2} & s^{2} & s^{2} & 2\sqrt{3}sc & 0 & 0 \\ \hline -2s^{2} & s^{2} & s^{2} & 2\sqrt{3}sc & 0 & 0 \\ \hline -4\sqrt{3}sc & 2\sqrt{3}sc & 2\sqrt{3}sc & 12c^{2} & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline -4\sqrt{3}sc & 2\sqrt{3}sc & 2\sqrt{3}sc & 12c^{2} & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline -2 & 4 & -2 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 12 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 & 12 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 12 \end{pmatrix},$$
(163)

deren Matrixdarstellung der in Kapitel 3.3.1 eingeführten Konvention folgt. Die plastische Nachgiebigkeit

$$\mathcal{M}^{\mathrm{p}} = M_1 \, \mathbf{a}_1 \otimes \mathbf{a}_1 + M_2 \, \mathbf{a}_2 \otimes \mathbf{a}_2 + M_3 \left(\mathcal{I}' - \mathbf{a}_1 \otimes \mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2 \otimes \mathbf{a}_2 \right)$$

besteht dann im Wesentlichen aus Komponenten der Formen

$$M_{11}^{\rm p} = \frac{2}{3} \left(M_1 \cos^2 \varphi + M_2 \sin^2 \varphi \right)$$
$$M_{41}^{\rm p} = \frac{2}{3} \sqrt{3} \cos \varphi \sin \varphi \left(M_1 - M_2 \right)$$
$$M_{44}^{\rm p} = 2 \left(M_1 \sin^2 \varphi + M_2 \cos^2 \varphi \right),$$

die durch den Übergang zum Winkel 2φ in der Schreibweise

$$M_{11}^{\rm p} = \frac{2}{3} \left(M_1 + M_2 \right) + \frac{1}{3} (M_1 - M_2) \cos 2\varphi$$

$$M_{41}^{\rm p} = \frac{1}{3} \sqrt{3} \left(M_1 - M_2 \right) \sin 2\varphi$$

$$M_{44}^{\rm p} = \left(M_1 + M_2 \right) - \left(M_1 - M_2 \right) \cos 2\varphi$$

mit den übersichtlichen Koeffizienten

$$M_1 - M_2 = 2\bar{M} \begin{cases} \sin(2\kappa) & \text{(totale Belastung)}\\ \sin(\beta + \kappa) & \text{(partielle Belastung)} \end{cases}$$
$$M_1 + M_2 = 2\bar{M} \begin{cases} \pi - 2\kappa & \text{(totale Belastung)}\\ \pi - (\beta + \kappa) & \text{(partielle Belastung)} \end{cases}$$

notiert werden können. In Bild 14 ist der Verlauf der Nachgiebigkeiten über β dargestellt.

Über die Schubkomponente der plastischen Verzerrungsrate

$$2\dot{\varepsilon}_{12}^{\rm p} = M_{41}^{\rm p}\dot{\sigma}_{11}' + M_{42}^{\rm p}\dot{\sigma}_{22}' + M_{43}^{\rm p}\dot{\sigma}_{33}' + M_{44}^{\rm p}\dot{\sigma}_{12} = M_{41}^{\rm p}\dot{\sigma} + M_{44}^{\rm p}\dot{\tau}$$

berechnet sich aus den $M_{ik}^{\mathbf{p}}$ der effektive Schubmodul.

$$\frac{1}{G_{\text{eff}}} = \frac{2\dot{\varepsilon}_{12}}{\dot{\tau}} = M_{41}^{\text{p}}\sqrt{3}\cot\beta + M_{44}^{\text{p}} + 1/G$$

$$= (M_1 - M_2)(\cot\beta\sin2\varphi - \cos2\varphi) + M_1 + M_2 + 1/G$$

$$= (M_1 - M_2)\frac{\sin(2\varphi - \beta)}{\sin\beta} + M_1 + M_2 + 1/G$$

$$= 1/G + 2\bar{M} \begin{cases} \pi - 2\kappa - \sin(2\kappa) & (\text{totale Belastung}) \\ \pi - (\beta + \kappa) - \frac{\sin\kappa}{\sin\beta}\sin(\beta + \kappa) & (\text{partielle Belastung}) \end{cases}$$

$$\frac{G}{G_{\text{eff}}} = 1 + 2\bar{M}G \begin{cases} \pi - 2\kappa - \sin(2\kappa) & \text{(totale Belastung)} \\ \pi - (\beta + \kappa) - \frac{\sin\kappa}{\sin\beta}\sin(\beta + \kappa) & \text{(particle Belastung)} \end{cases}$$



Bild 14: Nachgiebigkeiten in Abhängigkeit von der Belastungsrichtung nach einachsiger Zugbelastung mit $\sigma = 1.3 \sigma_Y = 0.85 \sigma_0$

4.3 Verfestigung

4.3.1 Kombinierte isotrope und kinematische Verfestigung

Die Gleichung der *extremalen* Fläche im Spannungsraum wird wie in der klassischen Plastizitätstheorie in der Huber-Mises-Form

$$\tau \equiv \sqrt{\frac{3}{2}(\tau' - \alpha) \cdot (\tau' - \alpha)} = \tau^{\mathrm{x}}(e^{\mathrm{p}})$$
(166)

angenommen. Der deviatorische Rückspannungstensor α bewirkt eine Translation und der skalare Parameter τ^x eine Aufweitung der Fläche im deviatorischen Raum τ' der Kirchhoff-Spannung. α und τ^x beschreiben also in der üblichen Weise kinematische bzw. isotrope Verfestigung. Beide Größen hängen von der plastischen Verzerrungsgeschichte ab. Die Veränderung von τ^x mit der äquivalenten plastischen Dehnung e^p spezifizieren wir durch das Potenzverfestigungsgesetz

$$\tau^{\mathbf{x}} = \tau_0^{\mathbf{x}} \left(1 + \frac{Ee^p}{\tau_0^x} \right)^{h_e}.$$
(167)

 $\tau_0^{\mathbf{x}}$ legt den Anfangsradius der externen Fläche fest, h_e ist der Verfestigungsexponent. Der Elastizitätsmodul E wird zur Normierung benutzt.

Die Beschreibung der extremalen Fläche wird vervollständigt durch Evolutionsgleichungen für die äquivalente plastische Dehnung

$$\dot{e}^{\mathrm{p}} = \frac{(\tau' - \alpha) \cdot \mathbf{D}^{\mathrm{p}}}{\tau}$$
(168)

und die Rückspannung

$$\dot{\boldsymbol{\alpha}} = h_1 \, \mathbf{D}^p - h_2 \, \dot{\boldsymbol{e}}^{\mathrm{p}} \, \boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{\alpha} \mathbf{W} + \mathbf{W} \boldsymbol{\alpha}. \tag{169}$$

 h_1 und h_2 sind zwei weitere Materialkonstanten. Für $h_2 = 0$ erhalten wir die lineare kinematische Verfestigung nach Melan (1938) und Prager (1955) und für h_1 und h_2 ungleich Null die auf Armstrong und Frederick (1966) zurückgehende Erweiterung zu einem nichtlinearen kinematischen Verfestigungsgesetz. In diesen, ursprünglich für kleine plastische Verzerrungen formulierten Ansätzen muss jedoch $\dot{\boldsymbol{\alpha}}$ durch die Jaumann Ableitung der Rückspannung

$$\overset{\mathbf{
abla}}{lpha}=\dot{lpha}+lpha\mathbf{W}-\mathbf{W}lpha$$

ersetzt werden, um bei endlichen Verzerrungen die Rotationsinvarianz bei Starrkörperdrehungen sicherzustellen. Hieraus resultieren die den materiellen Spin \mathbf{W} enthaltenden Terme in (169).

Der plastische Anteil der Eulerschen Verzerrungsgeschwindigkeit

$$\mathbf{D}^{\mathrm{p}} = \mathbf{D} - \mathbf{D}^{\mathrm{e}} \tag{170}$$

ergibt sich aus \mathbf{D} und dem elastischen Anteil

$$\mathbf{D}^{\mathrm{e}} = \boldsymbol{\mathcal{M}}^{\mathrm{e}} \boldsymbol{\bar{\tau}}$$
(171)

gemäß Gleichung (71). Die Berechnung erfordert eine Hauptachsentransformation der Kirchhoff-Spannung, da die elastischen Nachgiebigkeiten \mathcal{M}^{e} durch (72) auf den Eulerschen Achsen definiert sind.

Die Inkremente

$$\Delta e_p = \dot{e}_p \cdot \Delta t \tag{172}$$

$$\Delta \boldsymbol{\alpha} = \dot{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \Delta t \tag{173}$$

lassen sich aus den aktuellen Raten der plastischen Vergleichsdehnung und der Rückspannung berechnen. Eine verbesserte Näherung mit einer Genauigkeit bis zur zweiten Ordnung

$$\Delta e_{p} = \dot{e}_{p} \cdot \Delta t + \frac{1}{2} \ddot{e}^{p} \cdot (\Delta t)^{2}$$
(174)

$$\Delta \boldsymbol{\alpha} = \dot{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \Delta t + \frac{1}{2} \, \ddot{\boldsymbol{\alpha}} \cdot (\Delta t)^2 \tag{175}$$

erfordert die Kenntnis der zweiten Ableitungen, die wir jetzt zusammenstellen. Die Zeitableitung der Gleichungen (168) und (169) ergeben

$$\ddot{e}^{\mathrm{p}} = \frac{1}{\tau} \left\{ (\dot{\boldsymbol{\tau}}' - \dot{\boldsymbol{\alpha}}) \cdot \mathbf{D}^{\mathrm{p}} + (\boldsymbol{\tau}' - \boldsymbol{\alpha}) \cdot \dot{\mathbf{D}}^{\mathrm{p}} - \dot{\boldsymbol{\tau}} \, \dot{e}^{\mathrm{p}} \right\}$$
(176)

$$\ddot{\boldsymbol{\alpha}} = h_1 \, \dot{\mathbf{D}}^{\mathrm{p}} - h_2 \, \ddot{e}^{\mathrm{p}} \, \boldsymbol{\alpha} - h_2 \, \dot{e}_{\mathrm{p}} \, \dot{\boldsymbol{\alpha}} - \dot{\boldsymbol{\alpha}} \mathbf{W} - \boldsymbol{\alpha} \, \dot{\mathbf{W}} + \dot{\mathbf{W}} \boldsymbol{\alpha} + \mathbf{W} \dot{\boldsymbol{\alpha}}, \tag{177}$$

wobei die Raten des plastischen Anteils der Eulerschen Verzerrungsgeschwindigkeit sowie der äquivalenten Kirchhoff-Spannung

$$\dot{\tau} = \frac{3}{2\tau} (\dot{\tau}' - \dot{\alpha}) \cdot (\tau' - \alpha)$$
(178)

$$\dot{\mathbf{D}}^{\mathrm{p}} = \dot{\mathbf{D}} - \dot{\mathbf{D}}^{\mathrm{e}} \tag{179}$$

aus (166) und (170) folgen. Die jetzt noch benötigte Ableitung der Gleichung (171) zur Ermittlung des elastischen Beitrags $\dot{\mathbf{D}}^{e}$ ist etwas aufwändiger. Wir können aber auf das bereits hergeleitete Resultat (78) und (79) zurückgreifen und erhalten

$$\dot{\mathbf{D}}^{e} = \dot{\mathcal{M}}^{e} \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} + \mathcal{M}^{e} (\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}})^{\cdot} = \dot{\mathcal{M}}^{e}_{ijkl} \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}_{kl} \mathbf{n}_{i} \otimes \mathbf{n}_{j} + \mathbf{W}^{E} \mathbf{D}^{e} - \mathbf{D}^{e} \mathbf{W}^{E} + \mathcal{M}^{e} \left[(\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}})^{\cdot} + \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} \mathbf{W}^{E} - \mathbf{W}^{E} \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} \right], \quad (180)$$

wenn wir dort \mathcal{M} durch \mathcal{M}^{e} und \mathbf{D} durch \mathbf{D}^{e} ersetzen.

Eine näherungsweise Bestimmung der elastischen Verzerrungsraten erhält man, wenn man in $(72)_3$ mit konstantem Schubmodul rechnet, d.h. \mathcal{M}^{e} als isotropen Tensor ansetzt:

$$\mathbf{D}^{\mathrm{e}} \approx \frac{1}{E} \left\{ (1+\nu) \mathbf{\tilde{\tau}} - \nu \operatorname{tr} \mathbf{\tilde{\tau}} \mathbf{I} \right\} = \frac{\mathbf{\tilde{\tau}}}{2G} - \frac{\nu}{E} \operatorname{tr}(\mathbf{\tilde{\tau}}) \mathbf{I} = \frac{\mathbf{\tilde{\tau}}}{2G} - \frac{\nu}{1-2\nu} \operatorname{tr}(\mathbf{D}) \mathbf{I}.$$
(181)

Dies ist numerisch vorteilhaft, da die Hauptachsentransformation der Kirchhoff-Spannung dann entfällt. Insbesondere ergibt sich anstelle von (180) die wesentlich einfacher auszuwertende Näherung

$$\dot{\mathbf{D}}^{e} \approx \frac{\left(\mathbf{\tilde{\boldsymbol{\tau}}}\right)}{2G} - \frac{\nu}{1 - 2\nu} \operatorname{tr}\left(\mathbf{\dot{D}}\right) \mathbf{I}.$$
(182)

4.3.2 Isotrope Verfestigung

Im Falle der rein isotropen Verfestigung können wir in den obenstehenden Beziehungen

$$\boldsymbol{\alpha} \equiv \boldsymbol{0} \tag{183}$$

setzen, so dass nur die Evolutionsgleichung (168) verbleibt. Die Berechnung der plastischen Vergleichsdehnungsrate vereinfacht sich dann, da auf Grund der Symmetrie $\mathcal{M}^{e} = \mathcal{M}^{eT}$ der elastischen Nachgiebigkeiten

$$oldsymbol{ au}'oldsymbol{\cdot}\mathcal{M}^{ ext{e}} oldsymbol{ au} = \mathcal{M}^{ ext{e}} oldsymbol{ au}'oldsymbol{\cdot} oldsymbol{ au}$$

gilt. Mit (74)

$$\mathcal{M}^{\mathrm{e}} \boldsymbol{\tau}' = \frac{1}{2G} \boldsymbol{\tau}'$$

und der Identität

$$oldsymbol{ au}'oldsymbol{\cdot}ec{oldsymbol{ au}}=oldsymbol{ au}'oldsymbol{\cdot}\dot{oldsymbol{ au}}$$

ergibt sich die äquivalente plastische Verzerrungsrate zu

$$\dot{e}^{\rm p} = \frac{\boldsymbol{\tau}'}{\tau} \cdot \left(\mathbf{D} - \frac{\dot{\boldsymbol{\tau}}}{2G} \right). \tag{184}$$

Dieses Ergebnis gilt exakt und greift nicht auf die Näherung (181) zurück. Die zweite Zeitableitung lautet:

$$\ddot{e}^{\mathrm{p}} = \frac{1}{\tau} \left\{ \dot{\boldsymbol{\tau}}' \cdot \left(\mathbf{D} - \frac{\dot{\boldsymbol{\tau}}}{2G} \right) + \boldsymbol{\tau}' \cdot \left(\dot{\mathbf{D}} - \frac{\ddot{\boldsymbol{\tau}}}{2G} \right) - \dot{\boldsymbol{\tau}} \, \dot{e}^{\mathrm{p}} \right\}.$$
(185)

5 Inkrementelle Energieminimierung

5.1 Stabilitätskriterium für quasistatische Deformationsprozesse

Ein Körper aus elasto-plastischem, zeitunabhängigem Werkstoff, der sich in der Referenzkonfiguration über das Gebiet V erstreckt und von der Fläche S mit den Normaleneinheitsvektoren **N** begrenzt ist, soll einen isothermen quasistatischen Deformationsprozess durchlaufen. Auftretende Volumenkräfte, Verschiebungsrandbedingungen und Oberflächenspannungen können von t abhängig sein. Sie sind bekannt und werden unter dem Begriff Belastungseinrichtung zusammengefasst.

Unterwirft man einen solchen Körper einem Belastungsprogramm, kann die anfänglich homogene Verformung abrupt von einer gänzlich anderen Art der Deformation abgelöst werden, bespielsweise lokalisierter Verformung in Scherbändern. In der Simulation verzweigt in diesem Fall der mögliche Deformationspfad (Bifurkation) und man erhält nicht eindeutige Lösungsmengen für das vorliegende Randwertproblem. Die Forderung nach Stabilität des Deformationsprozesses kann zur Auswahl der nach physikalischen Gesichtspunkten realistischen Lösung dienen. Petryk (1982, 1985) hat dafür ein Energiekriterium formuliert.

Es wird vorausgesetzt, dass alle Lasten konservativ sind, so dass mit Ω die potentielle Energie der Belastungseinrichtung eingeführt werden kann.

Wir gehen von einer Menge kinematisch zulässiger Deformationspfade aus, über die der Prozess realisiert werden kann. Die dazu jeweils benötigte Deformationsarbeit W im Körper erhält man durch Integration der spezifischen Spannungsleistung (29)

$$W = \int_{0}^{t} \int_{V} \dot{w} \, dV d\tau.$$
(186)

Das auf dieser Menge definierte Energiefunktional

$$E = W + \Omega \tag{187}$$

weist somit jedem Pfad einen von der Deformationsgeschichte abhängigen Wert zu. Anhand des Inkrementes ΔE in der Genauigkeit zweiter Ordnung

$$\Delta E(\mathbf{v}) = \dot{E} \,\Delta t + \frac{1}{2} \,\ddot{E} \,(\Delta t)^2 \tag{188}$$

kann die Stabilität des Deformationsprozesses bewertet werden.

"In einem stabilen quasi-statischen Deformationsprozess wird das Inkrement des Energiefunktionals E auf der Menge der kinematisch zulässigen Deformationsinkremente minimiert."

Dieses Kriterium wurde von Petryk (1982, 1985) eingeführt und begründet. Petryk (1991, 1992b, 1993b, 1999a) sowie Petryk und Thermann (1992, 1995 und 2002) stellen ein Auswahl weiterführender Veröffentlichungen dar, die die Rechtfertigung des Kriteriums und seine Anwendung vertiefen. Diese Arbeiten dienen als Vorlage für die folgenden Ausführungen.

5.2 Finite-Element-Implementierung des Energiekriteriums

Der Rand S des Körpers wird aufgeteilt in S_u mit gegebenen Verschiebungsrandbedingungen $\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}}$ und S_t , auf denen Randspannungen $\mathbf{SN} = \mathbf{t}$ bekannt sind. Spezifische Volumenkräfte werden mit **b** berücksichtigt. Die Ratenformulierung des Prinzips der virtuellen Arbeit lautet dann

$$\int_{V} \dot{\mathbf{S}} \cdot \delta(\nabla \mathbf{v}) \, dV = \int_{V} \dot{\mathbf{b}} \cdot \delta \mathbf{v} \, dV + \int_{S_t} \dot{\mathbf{t}} \cdot \delta \mathbf{v} \, dS, \tag{189}$$

für kinematisch zulässige Variationen $\delta \mathbf{v}$ des Geschwindigkeitsfeldes $\mathbf{v}(\mathbf{X}, t)$. Der Operator ∇ beschreibt dabei den Gradienten bezüglich der als fest angenommenen Referenzkonfiguration.

Das diskrete Geschwindigkeitsfeld wird in der üblichen Weise

$$\mathbf{v} = v_{\alpha} \mathbf{\Phi}_{\alpha} + \hat{\mathbf{v}}$$

mit den M unbekannten Koeffizienten $v_{\alpha}(t)$ eingeführt. Der Ansatz erfüllt die kinematischen Randbedingungen, indem den ansonsten frei wählbaren Funktionen $\Phi_{\alpha}(\mathbf{X})$ und $\hat{\mathbf{v}}(\mathbf{X}, t)$ auf S_u die Werte $\hat{\mathbf{v}} = \mathbf{\dot{u}}$ und $\Phi_{\alpha} = \mathbf{0}$ vorgegeben werden. Wendet man zur Diskretisierung die Methode der Finiten Elemente (FE) an, haben die Parameter v_{α} als Knotenpunktgeschwindigkeiten eine physikalische Bedeutung.

Für die Formulierung des Randwertproblems wird das Stoffgesetz in der Form (117),

$$\dot{\mathbf{S}} = \frac{\partial U(\mathbf{F})}{\partial \dot{\mathbf{F}}} = \mathbf{C}(\dot{\mathbf{F}}) \, \dot{\mathbf{F}}, \quad \mathbf{C} = \frac{\partial^2 U}{\partial \dot{\mathbf{F}} \partial \dot{\mathbf{F}}}, \quad U = \frac{1}{2} \, \dot{\mathbf{S}} \cdot \dot{\mathbf{F}},$$

verwendet, in der die Abhängigkeit vom Geschwindigkeitsfeld durch $(\dot{\mathbf{F}})_{ij} = \partial v_i / \partial X_j$ direkt ersichtlich ist. Die Potentialform in arbeitskonjugierten Größen (\mathbf{S}, \mathbf{F}) sichert die Hauptsymmetrie der Moduli. Auf Grund dessen kann das Ratenproblem mit Hilfe des Variationsprinzips (Hill, 1959, Petryk und Thermann, 1992) gelöst werden. Auf der Menge der Geschwindigkeitsfelder \mathbf{v} , die die kinematischen Bedingungen auf S_u erfüllen, muss das Geschwindigkeitsfunktional

$$J(\mathbf{v}) = \int_{V} U(\nabla \mathbf{v}) \, dV - \int_{S_t} \mathbf{\dot{t}} \cdot \mathbf{v} \, dS - \int_{V} \mathbf{\dot{b}} \cdot \mathbf{v} \, dV \tag{190}$$

stationär werden, also gilt für das diskrete Geschwindigkeitsfeld die Forderung

$$\frac{\partial J(\tilde{\mathbf{v}})}{\partial v_{\alpha}} = 0, \quad \alpha = 1, \dots, M, \tag{191}$$

mit $\tilde{\mathbf{v}} = (v_1, \dots, v_M).$

Damit eine Lösung für (191) auch eine stabile Fortsetzung des Prozesses gewährleistet, muss sie außerdem das Inkrement (188) des Geschwindigkeitsfunktionals E mit den Anteilen

$$W = \int_{0}^{t} \int_{V} \mathbf{S} \cdot \Delta \mathbf{v} \, dV d\tau$$
$$\Omega = -\int_{V} \mathbf{b} \cdot \mathbf{u} \, dV - \int_{S_{t}} \mathbf{t} \cdot \mathbf{u} \, dS$$
minimieren. Die Herleitungen der Ausdrücke \dot{E} und \ddot{E} sind beispielsweise bei Petryk (1985) zu finden. Da im Gleichgewichtsfall die erste Zeitableitung des Energiefunktionals für alle kinematisch zulässigen Deformationspfade gleich ist, ist lediglich die Betrachtung des Terms zweiter Ordnung erforderlich. Für diesen gilt die Beziehung

$$\tilde{E}(\tilde{\mathbf{v}}) = 2J(\tilde{\mathbf{v}}) + \text{const},$$

die das Problem auf die Auswertung von J reduziert. Demnach erweisen sich alle jene Deformationspfade als instabil, auf denen das Geschwindigkeitsfunktional nicht in jedem Punkt ein absolutes Minimum aufweist. Für das entsprechende Geschwindigkeitsfeld muss also (191) und

$$\frac{\partial^2 J(\tilde{\mathbf{v}})}{\partial v_\alpha \partial v_\beta} \ge 0 \quad \alpha, \, \beta = 1, \dots, \, M \tag{192}$$

gelten.

Die numerische Lösung des diskretisierten Randwertproblems unter der Bedingung der Stabilität der *Gleichgewichtslage* erfordert also zur Sicherstellung der Stabilität des *Deformationsprozesses* in jedem Zeitschritt die Minimierung des Geschwindigkeitsfunktionals (190). J kann auch als inkrementellen Energie interpretiert werden und stellt eine Funktion von M Veränderlichen dar, wobei M bei einer Finite-Element-Diskretisierung i. Allg. groß ist. Die Forderung einer sicheren Konvergenz zum absoluten Minimum ist praktisch nicht zu erfüllen. Das Optimierungsverfahren sollte aber mindestens die Konvergenz zu einem lokalen Minimum mit vertretbarem Aufwand sichern. Eine "wirtschaftlich" geeignete Wahl ist die Trust-Region-Methode. Moré und Sorensen (1983), und Fletcher (1987) geben allgemeine Beschreibungen des Verfahrens. Implementierungen mit vollständigem Code findet man bei Gay (1981, 1983). Ein besonderer Vorteil dieser Optimierungsstrategie besteht darin, dass nahe am gesuchten Minimum die quadratische Konvergenzgeschwindigkeit des Newton-Verfahrens erhalten bleibt.

Die Komponenten der für die Iteration benötigten tangentialen Steifigkeitsmatrix leitet man aus den Raten der inneren Knotenkräfte ab, als die die linken Seiten von (189) bei einer FE-Diskretisierung gedeutet werden können. Das Einsetzen von (117)

$$K_{\alpha\beta} = \frac{\partial}{\partial v_{\beta}} \int_{V} \dot{\mathbf{S}}(\nabla \mathbf{v}) \cdot \nabla \Phi_{\alpha} \, dV = \int_{V} \nabla \Phi_{\alpha} \mathbf{C}(\nabla \mathbf{v}) \nabla \Phi_{\beta} \, dV, \quad \alpha, \, \beta = 1, ..., \, M$$

zeigt, dass K die Symmetrieeigenschaften von C übernimmt. Die Identität

$$K_{\alpha\beta} = \frac{\partial^2 J(\tilde{\mathbf{v}})}{\partial v_\alpha \partial v_\beta}$$

ist aus (190) leicht herzuleiten, sodass die Einträge der Steifigkeitsmatrix direkt aus dem Geschwindigkeitsfunktional bestimmt werden können.

Für die im Rahmen der Arbeit durchgeführten FE-Berechnungen stellte K. Thermann ein Programmpaket in Fortran77 zur Verfügung, in dem die Lösung des Randwertproblems mit Hilfe des Energiekriteriums wie oben beschrieben realisiert wurde.

5.3 Räumliche Diskretisierung und Randbedingungen

Einer homogenen Probe wird ein ebener Verzerrungszustand aufgezwungen. Die Diskretisierung des Gebiets soll mit Hilfe von Dreieckelementen mit linearem Verschiebungsfeld erfolgen. Mit einer Vernetzungsmethode von Nagtegaal et al. (1974) lassen sich die bekannten Locking-Probleme einfacher Elementtypen bei nahezu inkompressiblen Materialien umgehen. Zunächst wird das Ausgangsgebiet, wie in Bild 15 dargestellt, in jeweils n regelmäßige Rechtecke entlang der Probenkanten gegliedert. In jedem Zeitschritt werden die deformierten Viereckelemente diagonal in jeweils vier Dreieckelemente unterteilt. Durch die dauerhafte Anordnung je zweier Elementgrenzen in der Flucht sinkt die Anzahl von Inkompressibilitätsbedingungen.



Bild 15: Diskretisierung einer Rechteckprobe durch Dreieckselemente. Umsetzung periodischer Randbedingungen.

Die auf Grund der linearen Ansatzfunktionen konstante Spannungs- und Verzerrungsverteilung im Element führt zu ungünstigen Approximationseigenschaften. Die Scherbänder müssen sich an den Elementgrenzen orientieren, sodass bei unvorteilhafter Netzgestaltung ihre Entstehung behindert wird. Wie bei Tvergaard et al. (1981) zur Optimierung des Netzes vorgeschlagen, wird der Diagonalenwinkel in der Ausgangskonfiguration φ_0 so eingestellt, dass er zum ersten Bifurkationszeitpunkt der erwarteten Neigung des Scherbandes entspricht. Diese Vorgehensweise wurde auch in den Arbeiten Petryk und Thermann (1992) und Lulla (2003) umgesetzt.

Der Probe wird eine äußere Verzerrung mit dem mittleren Deformationsgradienten $\overline{\mathbf{F}}$ aufgezwungen. Die vollständige kinematische Festlegung der Ränder wird somit über die Verschiebungen der äußeren Knotenpunkte

$$\bar{\mathbf{u}} = (\bar{\mathbf{F}} - \mathbf{I})\mathbf{X}$$

erreicht. Um allerdings das Materialverhalten ohne den Einfuss der Lagerung der Probe studieren zu können, betrachten wir ein unendlich ausgedehntes System. Dies kann an Hand einer Einheitszelle simuliert werden, die einen beliebig angeordneten Ausschnitt darstellt. Über Kopplungsbedingungen an parallelen Rändern wird gewährleistet, dass die Zelle sich selbst in beiden Raumrichtungen fortsetzt. Die Verschiebungen der äußeren Knoten setzen sich aus dem Anteil aus der vorgegebenen mittleren Deformation $\bar{\mathbf{u}}$ und einem unbekannten periodischen Part \mathbf{u} zusammen.

In Bild 15 sind die periodischen Randbedingungen bei isochorer Stauchung mit überlagerter Scherung eines Rechtecknetzes illustriert. \bar{u}_x, \bar{u}_y und \bar{u}_s sind vorgegebene Verschiebungen, die aus der mittleren Stauchung bzw. der mittleren Scherung in vertikaler Richtung resultieren. Man beachte, dass die Verschiebungen des oberen und rechten Randes durch diese Größen und die Verschiebungen am gegenüberliegenden Rand vollständig festgelegt sind.

5.4 Semianalytische Lösungen auf der Grundlage des Energiekriteriums

5.4.1 Instabilität des homogenen Prozesses

Die lokale Auswertung des Energiekriteriums führt auf die Forderung nach Quasi-Konvexität der Potentialfunktion $U(\dot{\mathbf{F}})$ (117) für die fundamentale Lösung $\dot{\mathbf{F}}^0$ (Petryk, 1982, 1985). Angewendet auf die homogene Deformation $\bar{\mathbf{F}}$, vereinfacht sich die Bedingung auf Rank-1-Konvexität (Petryk, 1991). Geht man von den experimentellen Befunden aus und erlaubt lokal – in bandförmigen Gebieten mit der Normalen \mathbf{n} – kleine Störungen $\mathbf{g} \otimes \mathbf{n}$, ergibt sich als notwendige Stabilitätsbedingung für den homogenen Prozess die Wahrung der Elliptizität des aktuellen Tangentenmoduls

$$(\mathbf{g} \otimes \mathbf{n}) \cdot \mathbf{C}(\bar{\mathbf{F}})(\mathbf{g} \otimes \mathbf{n}) \ge 0$$
 für alle Vektoren \mathbf{g}, \mathbf{n} (193)

(Petryk, 1992a). Dieses Ergebnis entspricht der fundamentalen Bifurkationstheorie in elasto-plastischen Festkörpern von Hill (1958, 1962). Bei ebenem Verzerrungszustand hat der Modultensor C für den homogenen Prozess eine besonders einfache Form. Das Kriterium für den Elliptizitätsverlust führt auf numerisch leicht auszuwertende Beziehungen für den kritischen Zeitpunkt t^* und die Ausrichtung des Scherbandes φ^* .

Obwohl somit zum kritischen Zeitpunkt t^* die Eindeutigkeit der Lösung verloren geht, erlaubt die Auswertung von (193) weitere Aussagen über wichtige Eigenschaften des Geschwindigkeitsfeldes. Vorausgesetzt wird die lokale Beschreibung des räumlichen Geschwindigkeitsgradienten als Überlagerung der vorgegebenen, mittleren Größe $\mathbf{\bar{L}} = \mathbf{\bar{F}}\mathbf{\bar{F}}^{-1}$ und einem unbekannten Anteil

$$\mathbf{L} = \bar{\mathbf{L}} + g \mathbf{g}^* \otimes \mathbf{n}^*, \qquad \text{mit } |\mathbf{g}^*| = |\mathbf{n}^*| = 1.$$
(194)

Petryk (1997) hat nachgewiesen, dass dieser Ansatz die Stabilitätsbedingung zum Zeitpunkt t^* mit genau zwei verschiedenen Werten g^+ und g^- erfüllt. Das unendliche Kontinuum kann somit als Schichtung zweier in sich homogener Bereiche interpretiert werden, deren Ausrichtung der Vektor **g** bzw. die Normale **n** beschreiben. Weisen wir den Volumenanteil der Zone, die die Scherrate g^+ annimmt, mit η^+ aus, lässt sich die kinematische Bedingung für das gesamte System

$$\eta^+ g^+ + (1 - \eta^+)g^- = 0$$

formulieren. Daraus ist ersichtlich, dass der Volumenanteil der Lokalisierungszone ausschließlich durch das Verhältnis g^+/g^- bestimmt. Für die Scherraten ergeben sich implizite Gleichungen, die mit Hilfe des um die Zwei-Flächen-Theorie erweiterten vorhandenen Programms XHOM numerisch einfach berechnet werden können.

Die nachfolgende Tabelle enthält eine solche Auswertung, wobei zum Vergleich auch die Ergebnisse der J_2 -Fließeckentheorie mit aufgenommen sind. Neben dem Bifurkationszeitpunkt t^* , sind die Winkel φ_n und φ_g aufgelistet, die die Vektoren **n** bzw. **g** mit der Druckachse einschließen. φ_{n0} kennzeichnet den Normalenwinkel in der undeformierten Ausgangskonfiguration und η ist der Volumenteil der Lokalisierungszone. Dem Zwei-Flächen-Modell liegt dabei die konstitutive Funktion \overline{M} in der Form (158) mit den Parametern c = 2 und m = 2 zu Grunde. Petryk und Thermann (2002) haben bei sonst gleichen Daten mit m = 1 gerechnet, wodurch sich kleine Abweichungen von den dort mitgeteilten Resultaten ergeben. Die hier getroffene Parameterwahl hat den Vorteil, dass sie zum einen näher an den mikromechanischen Vorhersagen des generell als realistischer angesehen Hill-Modells liegt (vgl. Bild 11) und zum anderen numerisch stabiler ist, so dass größere Zeitschrittweiten gewählt werden können. Die Frage numerischer Instabilitäten wird in Kapitel 6.1 noch eingehender behandelt.

Materialmodell	β_c^{\max}	t^{\star}	φ_n	φ_g	φ_{n_0}	η
J_2 corner theory	110°					0.2918
(Christofferson und	115°					0.2579
Hutchinson, 1979)	120°	0.2744	36.00°	125.93°	54.07°	0.2294
$E = 500 \ \tau_0$	125°					0.2051
$\nu = 0.3$	126.158°					0.2
N = 0.1	130°					0.1841
wie oben	110°	0.2750	35.94°	125.94°	54.06°	0.2921
jedoch für $\nu = 0.499$	130°					0.1846
Two-surface model	110°	0.3853	39.10°	129.03°	65.06°	0.2296
(Petryk und Thermann, 1997)	115°	0.3211	37.48°	127.41°	58.99°	0.2420
$E = 500 \ \tau_0$	117.778°	0.2835	36.54°	126.47°	56.04°	0.25
$\nu = 0.3$	120°	0.2742	35.76°	125.69°	53.82°	0.2570
N = 0.1	125°	0.2387	33.88°	123.81°	49.21°	0.2745
	130°	0.2110	31.80°	121.73°	44.89°	0.2949
	131.157°	0.2054	31.29°	121.21°	43.91°	0.3
wie oben	110°	0.3861	39.04°	129.04°	65.07°	0.2303
jedoch für $\nu = 0.499$	130°	0.2114	31.73°	121.73°	44.84°	0.2953

 Tabelle 6: Elliptizitätsverlust bei isochorer Stauchung

5.4.2 Abschätzung des nachkritischen Verhaltens

Der nachfolgende Ansatz wurde in Petryk (1997) eingeführt und jeweils mit weiterführenden Überlegungen in Petryk und Thermann (2002) sowie Lulla (2003) näher erläutert. Er basiert auf der Annahme, dass die geschichtete Struktur homogener Bereiche zunächst erhalten bleibt, wobei die Lokalisierungszone im Folgenden mit (b), die Umgebung mit

(a) ausgewiesen ist. Ausgehend von der Beschreibung der lokalen Deformationsgradienten als Überlagerung der vorgegebenen, mittleren Größe $\overline{\mathbf{F}}$ und einer a priori unbekannten Schub-Deformation, kann für die Geschwindigkeitsgradienten die Form

$$\mathbf{L}^{(a)} = \bar{\mathbf{L}} + g^{(a)} \mathbf{g} \otimes \mathbf{n}$$

$$\mathbf{L}^{(b)} = \bar{\mathbf{L}} + g^{(b)} \mathbf{g} \otimes \mathbf{n}.$$
(195)

mit $\mathbf{\bar{L}} = \mathbf{\dot{F}}\mathbf{\bar{F}}^{-1}$ nachgewiesen werden. Analog zu (194) bezeichnet **n** den Bandnormaleneinheitsvektor, allerdings ist der Einheitsvektor **g** im allgemeinen (kompressiblen) Fall unbekannt. Zusätzlich sind für die beiden Bereiche Spannungszustand und Scherrate zu berechnen. Die Bestimmungsgleichungen liefern die Bedingungen für Stabilität des Prozesses, statisches Gleichgewicht und kinematische Verträglichkeit. Es verbleibt die Lösung eines Systems gewöhnlicher Differentialgleichungen, die mit Standardmethoden erfolgen kann. Hierfür liegt das Rechenprogramm XPSSBN vor, das eine sehr genaue Integration mit Hilfe eines Prediktor-Korrektor-Verfahrens bei gleichzeitiger Auswertung der relevanten Stabilitätsbedingungen erlaubt. Die Theorie zeigt, dass der Volumenanteil $\eta^{(b)}$ der Lokalisierungszone, der zum Zeitpunkt des Elliptizitätsverlust den Wert $\eta^{(b)}(t^*) = \eta^+$ annimmt, im Zeitverlauf sowohl konstant als auch veränderlich sein kann.

Durch dieses einfache semianalytische Modell können die FE-Ergebnisse in der Anfangsphase des nachkritischen Deformationsbereichs verifiziert werden. Die Gültigkeit der Vergleichsrechnungen ist nach Petryk und Thermann (2002) durch

$$C_{gn}^{\min(a/b)} \equiv \min_{|\mathbf{n}| = |\mathbf{g}| = 1} (\mathbf{g} \otimes \mathbf{n}) \cdot \left(\eta^{(b)} \mathbf{C}(\mathbf{L}^{(b)}) + (1 - \eta^{(b)}) \mathbf{C}(\mathbf{L}^{(a)}) \right) (\mathbf{g} \otimes \mathbf{n}) > 0$$
(196)

begrenzt. Die Ungleichung (196) ist in Analogie zu (193) eine angenäherte Stabilitätsbedingung für den Deformationsprozess der fein geschichteten Struktur mit zwei Zonen, die sich zum ersten Bifurkationszeitpunkt gebildet hat.

6 Validierung der Finite-Element-Implementierung

6.1 Homogene Deformationsprozesse und Zeitintegration

Eine Referenzlösung für gleichförmige homogene Deformationsprozesse kann mit Hilfe des Programms XHOM numerisch beliebig genau berechnet werden. Wir vergleichen zunächst die Ergebnisse der zweidimensionalen Finite-Element-Rechnung (XPSSBT) für den Prozess der isochoren Stauchung

$$\bar{\mathbf{F}} = \begin{pmatrix} 1-t & 0 & 0\\ 0 & (1-t)^{-1} & 0\\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

mit dieser Referenzlösung. Es liegt das Zwei-Flächen-Modell mit isotroper Verfestigung und den Materialdaten

$$E = 500 \ \tau_0^x \\ \nu = 0.3 \\ \beta_c^{\text{max}} = 117.772^{\circ} \\ h_e = 0.1 \\ h_1 = 0 \\ h_2 = 0$$

zu Grunde. Die skalare Materialfunktion \overline{M} ist hier und im folgenden stets durch (158) mit c = 2 und m = 2 spezifiziert.

Die Integration beginnt bei 1% zusätzlicher Stauchung nach Fließbeginn und endet bei etwa 30% Stauchung zum Zeitpunkt des Elliptizitätsverlustes. Für die fest gewählte Schrittweite $\Delta t = 3 \cdot 10^{-3}$ liefert der direkte Vergleich der Druckspannungen in Stauchrichtung eine gute Übereinstimmung zwischen FE- und Referenzlösung (Bild 16a). Allerdings weist das Ergebnis der FE-Rechnung im Bereich t < 0.05 eine schwach erkennbare Rauhigkeit auf. Berechnet man aus der Differenz beider Lösungen einen relativen Fehler der



Bild 16: Vergleich der zweidimensionalen FE-Rechnung für isochore Stauchung mit einer semianalytischen Referenzlösung. Zwei-Flächen-Modell mit isotroper Verfestigung. Verfahren 1. Ordnung mit der Integrationsschrittweite $\Delta t = 3 \cdot 10^{-3}$. a) Druckspannung in Stauchrichtung, b) Relativer Fehler

FE-Lösung, so werden die Mängel des Integrationsverfahrens deutlich sichtbar. Sie führen im Anfangsbereich zu merklich größeren Fehlern (von etwa 0.4%) als im restlichen Bereich des Integrationsintervalls (Bild 16b). Dies deutet auf eine numerische Instabilität hin, die bekanntlich bei dem benutzten expliziten Euler-Verfahren zu befürchten ist. Durch Verkleinerung der Schrittweite kann das Verfahren aber numerisch stabilisiert werden, wie Bild 17 zeigt. Dargestellt ist hier nur noch der kritische Bereich t < 0.05, die Werte sind zur besseren Lesbarkeit durch Geraden verbunden. Man erkennt, dass die störenden Oszillationen bei Verkleinerung der Schrittweite abnehmen und für $\Delta t = 10^{-3}$ praktisch verschwunden sind.



Bild 17: Einfluss der Schrittweite auf die numerische Stabilität der Integration. Verfahren 1. Ordnung.

Für Rechnungen mit kleineren Schrittweiten, die Bild 18 zu Grunde liegen, stellt sich das zu erwartende Fehlerverhalten ein. Wie man an Bild 18a abliest, gehen die relativen Fehler für das Verfahren 1. Ordnung linear mit der Schrittweite zurück und bleiben kleiner als 0.27 Δt . Bei gleicher Schrittweite liefert das implementierte Integrationsverfahren 2. Ordnung um ein bis zwei Zehnerpotenzen bessere Ergebnisse (Bild 18b). Die relativen Fehler gehen hier quadratisch mit der Schrittweite zurück und bleiben dem Betrag nach kleiner als 18 (Δt)².



Bild 18: Einfluss der Schrittweite auf die Genauigkeit der Integration. a) Verfahren 1. Ordnung, b) Verfahren 2. Ordnung

Die Zeitintegration mit fest gewählter Schrittweite ist ungünstig, wenn die zum Erzielen einer vorgegebenen Genauigkeit erforderlichen Schrittweiten über dem Integrationsintervall beträchtlich schwanken. Das ist in dem betrachteten Beispiel der Fall, wenn die Integration unmittelbar an der Fließgrenze beginnt. Wie Bild 19b zeigt, verändern sich die Schrittweiten des Prediktor-Korrektor-Verfahrens (das der Referenzlösung zu Grunde liegt) über sechs Zehnerpotenzen von 10^{-9} bis 10^{-3} . Für die Finite-Element-Lösung wurde deshalb eine einfache Schrittweitenadaption implementiert.

Als Kontrollgröße wird dabei die über alle Gaußpunkte gemittelte Norm der Cauchy-Spannung benutzt. In der Taylorentwicklung dieser Mittelspannung σ

$$\sigma(t_{i+1}) = \sigma(t_i) + \dot{\sigma}(t_i) \ \Delta t + \frac{1}{2} \ddot{\sigma}(t_i) \ (\Delta t)^2 + \frac{1}{6} \sigma^{(3)}(t_i) \ (\Delta t)^3 + \cdots$$

 mit

$$\Delta t = t_{i+1} - t_i$$

stellt der letzte ausgeschriebene Summand eine Korrektur dar, die bei dem Verfahren 2. Ordnung nicht mehr berücksichtigt wird. Eine Abschätzung für eine vernünftig gewählte Schrittweite Δt ergibt sich aus der Forderung, diesen Korrekturterm nicht zu groß werden zu lassen, so dass sein Betrag den kleinen Bruchteil η_2 der aktuellen Spannungsnorm $\sigma(t_i)$ nicht übersteigt. Mit einer analogen Überlegung für das Verfahren 1. Ordnung ergibt dies



Bild 19: Integration mit automatischer Schrittweitensteuerung. Vergleich a) der Druckspannungen in Stauchrichtung und b) der Schrittweiten der Referenzlösung (XHOM) und der FE-Rechnung (XPSSBT). Relativer Fehler der Druckspannungen der FE-Lösung mit den Schrittweiten gemäß b) für c) das Verfahren 1. Ordnung und d) das Verfahren 2. Ordnung.

als obere Grenze für die Schrittweite die Abschätzungen

$$\Delta t \approx \begin{cases} \sqrt{\frac{2\sigma(t_i)}{|\ddot{\sigma}(t_i)|}\eta_1} , & \text{Verfahren 1. Ordnung} \\ \\ \sqrt[3]{\frac{6\sigma(t_i)}{|\sigma^{(3)}(t_i)|}\eta_2} , & \text{Verfahren 2. Ordnung.} \end{cases}$$

Neben den beiden Toleranzen η_1 und η_2 benutzt die Implementierung die weiteren Verfahrensparameter min Δt und max Δt und stellt sicher, dass die gewählten Schrittweiten im Intervall [min Δt , max Δt] liegen. Im ersten Integrationsschritt wird stets die minimale Schrittweite benutzt. Danach können die zweiten bzw. dritten Raten der Mittelspannung aus den dann vorliegenden ersten bzw. zweiten Raten der Cauchy-Spannung zu den Zeitpunkten t_{i-1} und t_i näherungsweise durch finite Differenzen berechnet werden.

Für die Verfahrensparameter

min
$$\Delta t = 10^{-8}$$
, max $\Delta t = 5 \cdot 10^{-3}$, $\eta_1 = 10^{-5}$, $\eta_2 = 10^{-7}$

illustriert Bild 19 die Brauchbarkeit dieser einfachen Technik zur automatischen Schrittweitenanpassung.

6.2 Deformationsmuster zum Zeitpunkt der ersten Bifurkation

Für den eben gewählten Parametersatz verletzt der homogene Prozess zum Zeitpunkt t = 0.2935 die Stabilitätsbedingungen (192). Geschwindigkeitsfelder, die nun das Energiefunktional minimieren, weisen zwei scharf von einander abgegrenzte Zonen in Form von parallelen Bändern auf, innerhalb derer die Feldgrößen konstant sind. Die Struktur der Lösungen, wie sie für zwei verschieden große Netze in Bild 20 dargestellt sind, entsprechen demnach den theoretischen Überlegungen von Petryk (1992a). Die analytische Auswertung bestätigt mit den Ergebnissen $g^+ = 2.9598$ und $g^- = -0.9866$ für die Scherraten, die durch Umstellen der Beziehung (194) leicht in das Maß $\mathbf{g} \cdot \mathbf{Ln} = 4.3139$ bzw. $\mathbf{g} \cdot \mathbf{Ln} = 0.3675$ zu überführen sind, die FE-Rechnung auch quantitativ.

Die Lokalisierungszone, die hier schwarz gefärbt ist, nimmt einen Anteil von $\eta = 25\%$ des Gesamtvolumens ein. Da das Volumenverhältnis nur schrittweise, abhängig von der Netzeinteilung, wiedergegeben werden kann, ist ein solch optimales Ergebnis nur bei passend gewählter Elementzahl zu erreichen. Da diese Information genauso wie die Orientierung der Bänder aus der analytischen Rechnung bekannt ist, kann man sie in in die Netzgestaltung einfließen lassen. Lösungen zu nicht optimierten Netzen weisen ebenfalls zwei Zonen auf, deren Scherraten die oben notierten Werte annehmen. Auch das Volumenverhältnis untereinander stellt sich korrekt ein, der Fehler wird gegebenenfalls durch die Entstehung eines zusätzlichen Bandes kompensiert.



Bild 20: Verteilung der Scherkomponente des räumlichen Geschwindigkeitsgradienten $\mathbf{g} \cdot \mathbf{Ln}$ zum ersten Bifurkationszeitpunkt. FE-Netze 16 × 16 bzw. 60 × 60 mit periodischen Randbedingungen. Zwei-Flächen-Modell mit $E = 500\tau_0^x$, $\nu = 0.3$, $\beta_c^{\max} = 117.772^{\circ}$

Die Lösungsmenge des Randwertproblems ist nach dessen Elliptizitätsverlust nicht mehr eindeutig. Durch die Wahl homogener Materialeigenschaften gehören alle Elemente der Einheitszelle mit der gleichen Wahrscheinlichkeit zur Lokalisierungszone. Die Anordnungen der Einzelbänder in Bild 20 stellen lediglich die Auswahl dar, die der Optimierungsalgorithmus zufällig auf Grund der Startwerte aus einer Anzahl gleichberechtigter Muster ausgewählt hat. Deutlich sind die Vorgaben der periodischen Randbedingungen zu erkennen, die den Eintritt eines Bandes an der Stelle erzwingen, an der es die Zelle am gegenüberliegenden Rand verlassen hat.

Die Struktur der zum kritischen Zeitpunkt entstandenen Deformationsmuster zeichnet sich durch die Möglichkeit aus, sie als eindimensional zu behandeln. Als Ersatzsystem



Bild 21: Verteilung der Scherkomponente des räumlichen Geschwindigkeitsgradienten zum ersten Bifurkationszeitpunkt, eindimensionale FE-Netze (4 bzw. 120 Elemente) mit periodischen Randbedingungen. Zwei-Flächen-Modell mit $E = 500\tau_0^x$, $\nu = 0.3$, $\beta_c^{\max} = 117.772^{\circ}$.

betrachtet man dann lediglich ein Netz aus n Elementen entlang einer der Netzkanten. Nähere Erleuterungen zu diesem Elementtyp und seiner Beschreibung finden sich in Lulla (2003). Die Gegenrechnung mit dem so gestalteten Modell liefert ein korrespondierendes Ergebnis (Bild 21). Dass die Elementzahlen entsprechend gewählt wurden, ermöglicht auch hier die exakte Darstellung des Volumenanteils von 25% der Lokalisierungszone. Die Scherraten g = 2.9632 und g = -0.9877 beider Zonen, mit 194 in $\mathbf{g} \cdot \mathbf{Ln} = 4.3173$ bzw. $\mathbf{g} \cdot \mathbf{Ln} = 0.3664$ umgerechnet, zeigen eine gute Übereinstimmung mit den Ergebnissen der anderen Rechnungen.

6.3 Erste Phase des nachkritischen Verhaltens

Die Entwicklung der Deformationsmuster jenseits des ersten Bifurkationszeitpunkts begünstigt weitere Vergleichsrechnungen auf der Basis der einfacheren Modelle. Wie die Bilderfolge 22 belegt, bleibt die Anordnung der Scherbänder über einen langen Zeitraum unverändert. So behält einerseits das eindimensionale FE-Modell seine Gültigkeit, zum anderen ist dieses Verhalten analytisch beschrieben worden (siehe Kapitel 5.4).



Bild 22: Nachkritische Entwicklung der Scherrate $\mathbf{g} \cdot \mathbf{Ln}$. FE-Netz 16 × 16 mit periodischen Randbedingungen. 2BZwei-Flächen-Modell mit $E = 500\tau_0^x$, $\nu = 0.3$, $\beta_c^{\text{max}} = 117.772^\circ$.

Die Ergebnisse von Vergleichsrechnungen auf der Basis aller drei Modelle sind in Bild 23 zusammengestellt. Die Darstellung beginnt zum ersten kritischen Zeitpunkt und bricht ab, bevor die Gültigkeit der einfacheren Modelle verletzt wird. Wie auch schon an den Ergebnissen der zweidimensionalen FE-Rechnung abzulesen ist, bleibt die Bandbreite in diesem Zeitraum konstant. Die Scherratenverläufe stimmen gut überein, und auch die unterschiedlich feinen Netze haben dabei keinen Einfluss auf die Genauigkeit der Ergebnisse.



Bild 23: Vergleich der nachkritischen Entwicklung der Scherraten $g^{(a)}$ und $g^{(b)}$ sowie des Volumenanteils $\eta^{(b)}$ aus der zweidimensionalen FE-Rechnung (16 × 16, 60 × 60), der eindimensionalen FE-Rechnung (n = 4, n = 120) und der semianalytischen Lösung. Zwei-Flächen-Modell mit $E = 500\tau_0, \nu = 0.3, \beta_c^{\max} = 117.77^{\circ}$.

7 Numerische Analyse des nachkritischen Deformationsverhaltens

7.1 Isochore Stauchung

Mit der Aufgabe des eindimensionalen Deformationsmusters erlischt auch die Grundlage für den Gebrauch der Maße g und $\mathbf{g} \cdot \mathbf{Ln}$. Darüber hinaus bietet sich die Eulersche Verzerrungsgeschwindigkeit als aussagekräftige Größe an, wir verfolgen die Verteilung ihres größten Hauptwertes $|D| = \max\{D_1, D_2\}$. Bild 25 zeigt ihre Entwicklung im Verlauf der im vorigen Kapitel begonnenen Stauchung eines Netzes mit n = 60 Elementen entlang jeder Kante. Innerhalb des Beobachtungszeitraums entstehen vier verschiedene Sets von Scherbändern. Das anfängliche, eindimensionale Muster und der Zeitraum 0.2935 $\leq t \leq 0.3750$, in dem es den theoretischen Voraussagen nach unverändert stabil ist, wurden zuvor ausführlich diskutiert. Der Minimierungsalgorithmus ersetzt diese Struktur zum Zeitpunkt t = 0.3810 durch ein neues Set von vier Scherbändern, die erheblich breiter und bezüglich der Druckachse stärker geneigt sind. Weitere Umbauten, die mit der Reduzierung auf drei und zwei Bänder verbunden sind, erfolgen bei t = 0.3929 bzw. t = 0.4505. Zwischenzeitlich bleiben die Muster stabil, häufig bei wachsender Lokalisierungszone.

Die Entwicklung der vier Bandtypen ist ebenfalls im Verlauf der Verzerrungen zu beobachten. In Bild 26 ist die Verteilung der größten logarithmische Hauptdehnung $|\varepsilon| = \max\{\ln \lambda_1, \ln \lambda_2\}$ aufgetragen. Durch das einheitliche Zeitraster für die Bildfolgen 25 und 26 wird die Verzögerung deutlich sichtbar, mit der sich ein von den Raten erfasster Umbau auch in den Verzerrungen bemerkbar macht.

Da die Netzgeometrie zu Gunsten der primären Scherbänder ausgelegt wird, ist von Schwierigkeiten bei der Erzeugung anders orientierter Bänder auszugehen. In Bild 29 zeigt sich, dass das Netz mit je n = 16 Randknoten die Entstehung sekundärer Bänder nicht darstellen kann und die Beibehaltung der eindimensionalen Struktur erzwingt. In diesem Fall kann sich das seit dem Elliptizitätsverlust bestehende Muster lediglich durch Überwechseln einzelner Bänder zwischen Lokalisierungszone und Umgebung verändern. Das zum Zeitpunkt t = 0.4180 zu beobachtende Anwachsen der Lokalisierungszone wird durch die semianalytische Rechnung bestätigt. Bild 24 zeigt die Bandbreite bei der eindimensionalen Struktur, deren Gültigkeitsbereich durch grüne Linien gekennzeichnet ist. Sie markieren die Zeitpunkte des Elliptizitätsverlustes sowie der erstmaligen Verletzung der genäherten Stabilitätsbedingung (196) für den Deformationsprozess des geschichteten Materials. Die Entstehung des zusätzlichen Bandes im grob diskretisierten Netz fällt exakt mit dem Verschwinden des momentanen Schermoduls $C_{gn}^{(a)}$ zusammen, das in rot angezeigt wird. Zur Erfüllung der lokalen Stabilitätsbedingungen steigt die Bandbreite nachfolgend an.

Der Zeitpunkt, zu dem der Algorithmus das Eingangsmuster des Netzes mit n = 60 verwirft, weist zwar eine deutliche Verzögerung hinsichtlich der theoretischen Verhersage durch $C_{gn}^{\min(a/b)}$ auf, liegt aber deutlich vor der roten Linie. Die gröbere Diskretisierung mit 32 Elementen pro Kante hemmt die Entstehung sekundärer Bänder länger, bietet aber offensichtlich eine hinreichende Anzahl von Freiheitsgraden zur Darstellung eines zweidimensionalen Musters (Bilder 27 und 28). Die Verteilung der Scherraten weist allerdings zunächst nur zum Teil deutliche Bandstrukturen auf, sodass erst ab dem Umbau auf drei



Bild 24: Volumenanteil der Lokalisierungszone $\eta^{(b)}$ im Verlauf eines Stauchungsprozesses. Semianalytische Rechnung, Zwei-Flächen-Modell mit $E = 500\tau_0^x$, $\nu = 0.3$, $\beta_c^{\max} = 117.772^{\circ}$.

Bänder bei t = 0.4305 ein Vergleich mit Bild 25 sinnvoll erscheint. Nachdem diese Veränderung des Musters mit merklichem Aufschub beginnt, läuft die weitere Entwicklung in beiden Rechnungen hin zu zwei Bändern synchron ab. So kommen beide nach 52% Stauchung zu einem übereinstimmenden Endergebnis.



Bild 25: Verteilung der Eulerschen Verzerrungsgeschwindigkeiten |D| in der nachkritischen Phase eines isochoren Stauchungsprozesses. FE-Netz 60×60 mit periodischen Randbedingungen. Zwei-Flächen-Modell mit $E = 500\tau_0^x$, $\nu = 0.3$, $\beta_c^{\text{max}} = 117.772^{\circ}$.



Bild 26: Verteilung der logarithmischen Verzerrungen $|\varepsilon|$ in der nachkritischen Phase eines isochoren Stauchungsprozesses. FE-Netz 60×60 mit periodischen Randbedingungen. Zwei-Flächen-Modell mit $E = 500\tau_0^x$, $\nu = 0.3$, $\beta_c^{\max} = 117.772^{\circ}$.



Bild 27: Verteilung der Eulerschen Verzerrungsgeschwindigkeiten |D| in der nachkritischen Phase eines isochoren Stauchungsprozesses. FE-Netz 32×32 mit periodischen Randbedingungen. Zwei-Flächen-Modell mit $E = 500\tau_0^x$, $\nu = 0.3$, $\beta_c^{\text{max}} = 117.772^{\circ}$.



Bild 28: Verteilung der logarithmischen Verzerrungen $|\varepsilon|$ in der nachkritischen Phase eines isochoren Stauchungsprozesses. FE-Netz 32 × 32) mit periodischen Randbedingungen. Zwei-Flächen-Modell mit $E = 500\tau_0^x$, $\nu = 0.3$, $\beta_c^{\text{max}} = 117.772^{\circ}$.



Bild 29: Verteilung der Eulerschen Verzerrungsgeschwindigkeiten |D| in der nachkritischen Phase eines isochoren Stauchungsprozesses. FE-Netz 16×16 mit periodischen Randbedingungen. Zwei-Flächen-Modell mit $E = 500\tau_0^x$, $\nu = 0.3$, $\beta_c^{\text{max}} = 117.772^{\circ}$.



Bild 30: Verteilung der logarithmischen Verzerrungen $|\varepsilon|$ in der nachkritischen Phase eines isochoren Stauchungsprozesses. FE-Netz 16 × 16) mit periodischen Randbedingungen. Zwei-Flächen-Modell mit $E = 500\tau_0^x$, $\nu = 0.3$, $\beta_c^{\text{max}} = 117.772^{\circ}$.

7.2 Isochore Stauchung mit überlagerter Scherung

Der zuvor betrachteten isochoren Stauchung überlagern wir ab dem Zeitpunkt t_{ρ} eine Scherung mit der Intensität ρ , so dass der mittlere Gradient des ebenen Deformationsprozesses in der x_1x_2 -Ebene durch

$$\bar{F}_{11} = \begin{cases} 1-t & ; t \leq t_{\rho} \\ 1-t_{\rho} - (1-\rho)(t-t_{\rho}) & ; t > t_{\rho} \end{cases}$$

$$\bar{F}_{22} = \bar{F}_{11}^{-1}$$

$$\bar{F}_{12} = 0 \qquad (197)$$

$$\bar{F}_{21} = \begin{cases} 0 & ; t \leq t_{\rho} \\ -\rho(t-t_{\rho}) & ; t > t_{\rho} \end{cases}$$

$$\bar{F}_{13} = F_{31} = F_{23} = F_{32} = 0$$

$$\bar{F}_{33} = 1$$

gegeben ist.

Die sich entwickelnde Mikrostruktur kann sich dabei unter Umständen drastisch ändern. Dies zeigt sich bereits für den Volumenanteil η der Lokalisierungszone zum Zeitpunkt des Elliptizitätsverlustes, der bei Überlagerung einer moderaten Scherung $\rho = 0.2$ ab dem Zeitpunkt $t_{\rho} = 0.29$ und unveränderten Materialdaten von 25% bei reiner Stauchung auf 3.4% abfällt. So liefert die FE-Rechnung für eine Diskretisierung mit 60 × 60 Rechteckelementen ein Deformationsmuster mit 25% · 60 = 15 bzw. 3.4% · 60 ≈ 2 Scherbändern längs einer Kante (Bild 31).

In der globalen Deformation ist die überlagerte Scherung in Bild 31b noch nicht sichtbar, da der zugehörige Bifurkationszeitpunkt 0.2943 nur unwesentlich größer als t_{ρ} ist.







Bild 31: Veränderung der Mikrostruktur zum ersten Bifurkationszeitpunkt durch überlagerte Scherung. FE-Netze 60 × 60 mit periodischen Randbedingungen. Zwei-Flächen-Modell mit $E = 500\tau_0$, $\nu = 0.3$, $\beta_c^{\text{max}} = 117.77^{\circ}$.

Durch die Zusatzscherung wird die Symmetrie des Stauchprozesses gebrochen, so dass für $\rho \neq 0$ die Orientierung der Scherbänder im Gegensatz zur reinen Stauchung stets eindeutig ist.

Eine Bestätigung dieses numerischen Ergebnisses der Finite-Element-Rechnung liefert das semianalytische Modell, mit dessen Hilfe die Volumenanteile η für verschiedene Prozessparameter t_{ρ} und ρ schnell berechnet werden können. In Bild 32 ist η über der $t_{\rho}\rho$ -Ebene aufgetragen. Zum ersten Bifurkationszeitpunkt ändert sich η natürlich nicht, wenn die Scherung erst *nach* dem Bifurkationszeitpunkt der reinen Stauchung, t = 0.2935, aufgebracht wird. So ergibt sich für $t_{\rho} > 0.2935$ unabhängig von der Intensität der aufgebrachten Scherung ein Volumenanteil der Lokalisierungszone von $\eta = 25\%$, der durch das entsprechende Plateau in Bild 32 abgebildet wird. An der Grenzlinie $t_{\rho} = 0.2935$ fällt η bei Verkleinerung von t_{ρ} sprunghaft ab. Die Sprunghöhe nimmt dabei mit wachsendem ρ zu, so dass für $\rho > 0.2340$ der Volumenanteil an der Grenzlinie vollständig verschwindet. Der Bereich $\eta = 0$ bildet das zweite in Bild 32 sichtbare Plateau.



Bild 32: Volumenanteil η der Lokalisierungszone zum Zeitpunkt des Elliptizitätsverlustes bei isochorer Stauchung mit überlagerter Scherung als Funktion der Prozessparameter ρ und t_{ρ} . Höhenlinien für $\eta = 0.02, 0.04, \ldots, 0.24$. Zwei-Flächen-Modell mit $E = 500\tau_0, \nu = 0.3, \beta_c^{\text{max}} = 117.77^{\circ}$.

Finite-Element-Studien des nachkritischen Verhaltens an 60×60 Netzen mit periodischen Randbedingungen wurden für die Prozessparameter

(a)	$t_{\rho} = 0.29,$	$\rho = 0.20$
(b)	$t_{\rho} = 0.19,$	$\rho = 0.30$
(c)	$t_{\rho} = 0.19,$	$\rho = 0.20$

bis zu Stauchungen von etwa 50% durchgeführt. In der $t_{\rho}\rho$ -Ebene (Bild 33) sind diese Parameter durch rote Punkte markiert. Für die zugehörigen Volumenanteile der Lokalisierungszone zum Zeitpunkt des Elliptizitätsverlustes liest man Werte von $\approx 3\%$ (für die Parametersätze (a) und (b)) bzw. von $\approx 10\%$ ab.



Bild 33: Volumenanteil η der Lokalisierungszone zum Zeitpunkt des Elliptizitätsverlustes bei isochorer Stauchung mit überlagerter Scherung als Funktion der Prozessparameter ρ und t_{ρ} . Höhenlinien für $\eta = 0.02, 0.04, \ldots, 0.24$. Zwei-Flächen-Modell mit $E = 500\tau_0, \nu = 0.3, \beta_c^{\text{max}} = 117.77^{\circ}$.

Bei hinreichend kleinem Volumenanteil kann sich das Material unter dem geänderten Belastungsprogramm in einer Weise verhalten, die bei reiner Stauchung nicht beobachtet wurde. Die Bilder 34 und 35 zeigen die Ergebnisse einer Rechnung mit dem Parametersatz (a), die Petryk und Thermann (2004) vorgestellt haben. Die geringe Anzahl von primären Scherbändern schafft breite Umgebungsbereiche, innerhalb derer zum Zeitpunkt 0.3343 quer ausgerichtete Strukturen auftreten. Diese Übergangskonstellation klappt bei t = 0.3833 in ein neues Muster von Scherbändern um, die die vorherigen kreuzen. Dieser veränderte Orientierungssinn bleibt bei den folgenden Umbauten des Deformationsmusters erhalten. Die Verzerrungen (Bild 35) weisen dementsprechend eine gekreuzte Struktur auf, in der sich markant die Abscherung der ersten Bänder durch die nachfolgenden zeigt.



Bild 34: Verteilung der Eulerschen Verzerrungsgeschwindigkeiten |D| bei isochorer Stauchung mit überlagerter Scherung für den Prozess (a) ($t_{\rho} = 0.29$, $\rho = 0.2$). FE-Netz (60×60) mit periodischen Randbedingungen. Zwei-Flächen-Modell mit $E = 500\tau_0^x$, $\nu = 0.3$ und $\beta_c^{\text{max}} = 117.772^\circ$. Petryk und Thermann (2004)



Bild 35: Verteilung der logarithmischen Verzerrungen $|\varepsilon|$ bei isochorer Stauchung mit überlagerter Scherung für den Prozess (a) ($t_{\rho} = 0.29$, $\rho = 0.2$). FE-Netz (60×60) mit periodischen Randbedingungen. Zwei-Flächen-Modell mit $E = 500\tau_0^x$, $\nu = 0.3$, $\beta_c^{\max} = 117.772^\circ$. Petryk und Thermann (2004)





Bild 36: Vergleich der Eulerschen Verzerrungsgeschwindigkeiten |D| bei isochorer Stauchung mit überlagerter Scherung für die Prozesse (b) und (c). FE-Netze (60 × 60) mit periodischen Randbedingungen. Zwei-Flächen-Modell mit $E = 500\tau_0^x$, $\nu = 0.3$, $\beta_c^{\text{max}} = 117.772^{\circ}$.

Ein ähnlicher Fortgang ist auch in den Ergebnissen der mit (b) bezeichneten Rechnung zu beobachten, die in den Bildern 36 und 37 im direkten Vergleich zu denen der Rechnung (c) dargestellt sind. Für die Darstellung wurden jeweils deutliche Verzweigungspunkte des Prozesses ausgewählt. Die zusätzliche Scherung setzt hier mit t = 0.19 erheblich früher ein, so dass sie zum ersten Bifurkationszeitpunkt auch in der äußeren Deformation augenfällig ist. Die quer verlaufende Struktur, die zum Zeitpunkt 0.3958 im primären Muster erscheint, wandelt sich bis 0.3999 zu einem neuen Set von Scherbändern. Auch an späteren Verzweigungspunkten wird der Prozess mit Geschwindigkeitsfeldern fortgesetzt, die die Ausgangsbänder kreuzen. Die Anordnungen der Bandfamilien zueinander werden wiederum in den Verteilungen der Verzerrungen anschaulich. Obwohl die jüngeren Bänder die früher entstandenen Strukturen überdecken, können die verbliebenen Anteile vier Familien zugeordnet werden. Verdeutlicht wird dies zusätzlich durch den unterschiedlichen Grad der Abscherung, den die ersten Bänder erkennen lassen.

Bei geringerer Scherung erfolgt der Elliptizitätsverlust früher, die Lokalisierungszone nimmt einen deutlich höheren Volumenanteil ein. Im zeitlichen Verlauf weiterer, markanter Bifurkationen und in den zugehörigen Wertebereichen der Verzerrungen gleichen sich Prozess (b) mit $t_{\rho} = 0.19, \ \rho = 0.3$



Bild 37: Vergleich der logarithmischen Verzerrungen $|\varepsilon|$ bei isochorer Stauchung mit überlagerter Scherung für die Prozesse (b) und (c). FE-Netze (60 × 60) mit periodischen Randbedingungen. Zwei-Flächen-Modell mit $E = 500\tau_0^x$, $\nu = 0.3$, $\beta_c^{\text{max}} = 117.772^{\circ}$.

die beiden Prozesse. Eine gekreuzte Anordnung der Scherbandfamilien tritt in der Rechnung (c) aber nicht auf. Zum Bifurkationszeitpunkt 0.4036 löst ein sekundäres Muster unter Beibehaltung des Orientierungssinns die eindimensionale Struktur ab, und auch nachfolgende Bandfamilien richten sich dieser Weise aus.

7.3 Kritische Würdigung der Ergebnisse

7.3.1 Vergleich mit Experimenten

Als positives Resultat kann festgehalten werden, dass das implementierte Werkstoffmodell in Verbindung mit der inkrementellen Energieminimierung als numerischem Lösungsverfahren grundsätzlich geeignet ist, experimentell beobachtete Scherbandentwicklungen in vielkristallinen metallischen Werkstoffen wenigstens qualitativ richtig wiederzugeben. Die schon von Petryk und Thermann (2004) herausgestellte Übereinstimmung der von Piela und Korbel (1996) experimentell bestimmten Mikrostruktur für den Walzprozess einer Aluminiumlegierung mit der numerischen Vorhersage für Stauchen mit überlagerter Scherung ist in der Tat bemerkenswert (Bild 38). Dies gilt um so mehr, als keinerlei Anpassungen der Werkstoffparameter vorgenommen wurden und sich beide Prozesse auf annähernd gleiche Endzustände mit einer Dickenreduktion der Probe (in horizontaler Richtung in Bild 38) von 44% für die numerischen Verzerrung liegen die Daten des in den Bildern 34 und 35 vollständig dargestellten Prozesses zu Grunde.



numerisch FE-Netz 60×60

experimentell Piela und Korbel (1996)



wie nebenstehend, Ausschnitt 4-fach vergrößert



Andererseits darf die Übereinstimmung zwischen Numerik und Experiment nicht überschätzt werden. Die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten zahlreichen numerischen Studien ergeben insgesamt noch kein eindeutiges Bild der zu erwartenden Mikrostrukturen. Zwar entstehen immer multiple Scherbänder — was den in der Literatur vorliegenden experimentellen Befunden entspricht —, jedoch kann kaum vorhergesagt werden, ob sich diese Bänder wie in Bild 38 kreuzen oder den gleichen Orientierungssinn mit unterschiedlichen Richtungen haben. Auf mögliche Ursachen hierfür und auf nicht zu übersehende Schwächen der benutzten numerischen Methode gehen wir in der Folge an Hand einzelner Beispielrechnungen ein.

7.3.2 Einfluss der anfänglichen Scherbandverteilung

Auf Grund der Theorie ist der Volumenanteil der Lokalisierungszone zum Zeitpunkt des Elliptizitätsverlustes eindeutig festgelegt, und alle Verteilungen, die auf diesen Volumenanteil führen, sind völlig äquivalent. Nun kann es aber sein, dass eine unterschiedliche Anfangsverteilung der Scherbänder in der numerischen Lösung für das diskretisierte Problem Auswirkungen auf die weitere Entwicklung der Mikrostruktur im nachkritischen Bereich hat. Dies scheint jedoch nicht der Fall zu sein, wie die dem Bild 39 zu Grunde liegende numerische Studie zeigt.¹



Bild 39: Einfluss der anfänglichen Scherbandverteilung. Verteilung der logarithmischen Verzerrungen $|\varepsilon|$ nach 30% bzw. 52% Stauchung mit überlagerter Scherung ($t_{\rho} = 0.28$, $\rho = 0.2$). FE-Netz 50 × 50 mit periodischen Randbedingungen. Zwei-Flächen-Modell mit $E = 500\tau_0^x$, $\nu = 0.3$, $\beta_c^{\text{max}} = 117.772^\circ$.

Als Prozessparameter wurden $t_{\rho} = 0.28$ und $\rho = 0.2$ benutzt, für die das semianalytische Modell als Volumenanteil der Lokalisierungszone $\eta = 0.040$ liefert. Die FE-Lösung auf dem betrachteten 50×50 Netz beginnt also richtig mit 2 Bändern, die von einer Kante der Einheitszelle ausgehen. Im oberen Bildteil sind sie gleichförmig über die Probe verteilt,

¹Diese Aussage bleibt gültig, auch wenn hier statt des theoretisch günstigsten Bandwinkels 56.24° mit dem Winkel $\varphi_0 = 56.23^{\circ}$ zwischen der Vertikalen und der Diagonalen der Einheitszelle im Ausgangszustand gerechnet wurde.

im unteren Bildteil liegen sie hingegen relativ dicht beieinander. Dennoch unterscheidet sich die Mikrostruktur nach 52% Stauchung sowohl im optischen Gesamteindruck als auch quantitativ hinsichtlich der auftretenden minimalen und maximalen größten Hauptverzerrungen nur unwesentlich.

Es ist nicht überraschend, dass sich die Anfangsverteilung der Lokalisierungszone in Form von vier dünnen Linien auch im dargestellten Endzustand widerspiegelt. Sie sind besonders gut als zwei blaue Linien in der Bildmitte rechts oben zu sehen. Die anderen Bänder der Anfangsverteilung sind nur schwer erkennbar, da sie teilweise überdeckt werden durch neue, breitere Scherbänder, die sich im Verlaufe der nachkritischen Deformation ausgebildet haben.

Da sich in diesem Beispiel die Prozessparameter nur geringfügig durch die etwas früher zum Zeitpunkt $t_{\rho} = 0.28$ einsetzende Scherung $\rho = 0.2$ von denen des zuvor betrachteten Prozesses (a) unterscheiden, hätten wir eigentlich eine Mikrostruktur mit sich kreuzenden Bändern wie in Bild 38 erwartet. Auf Grund der hier durchgeführten Vergleichsrechnung ist es unwahrscheinlich, dass die Ausbildung einer solchen Mikrostruktur durch eine ungünstige Anfangsverteilung der Scherbänder verhindert wird.

7.3.3 Einfluss der Zeitintegration

Alle Rechnungen wurden mit dem expliziten Zeitintegrationsverfahren 1. Ordnung und einer festen Schrittweite $\Delta t = 5 \cdot 10^{-4}$ durchgeführt. Hierbei ist nicht sichergestellt, dass die Gleichgewichtsbedingungen an den Knoten des FE-Netzes exakt erfüllt werden. Die verbleibenden Nicht-Gleichgewichtskräfte wachsen i. a. im Verlaufe des Prozesses an (Bild 40). Um den Einfluss dieser unerwünschten Störungen abzuschätzen, wurde zum Vergleich mit dem Verfahren 2. Ordnung und einer deutlichen reduzierten Schrittweite von



Bild 40: Einfluss der Zeitintegration auf das relative Residuum der Nicht-Gleichgewichtskräfte im Prozessverlauf. Daten wie in Bild 41.

 $\Delta t = 1 \cdot 10^{-5}$ gerechnet, um eine sehr genaue Lösung zu erhalten. Wie Bild 40 zeigt, kann das relative Residuum der Nicht-Gleichgewichtskräfte im Prozessverlauf tatsächlich um mehrere Zehnerpotenzen gegenüber dem Verfahren 1. Ordnung mit maximalen Fehlern in der Größenordnung von 0.1% gesenkt werden. Das im Rahmen dieser Arbeit implementierte Zeitintegrationsverfahren 2. Ordnung stellt somit eine wesentliche Verbesserung dar, die sicherstellt, dass die Gleichgewichtsbedingungen erheblich genauer erfüllt werden.

Für die Vorhersage der sich entwickelnden Mikrostruktur erweist sich jedoch das Verfahren 1. Ordnung selbst bei der größeren Schrittweite als hinreichend genau. Dies zeigt sich sowohl am Vergleich der logarithmischen Verzerrungen nach einer Stauchung von 50% (Bild 41) als auch am gesamten zeitlichen Verlauf des Minimums der inkrementellen Energie (Bild 42).

Dass beide Rechnungen nicht identisch verlaufen, erkennt man in Bild 42 an marginalen Abweichungen im Verlauf der minimierten inkrementellen Energie sowie an den

Schrittweite $\Delta t = 5 \cdot 10^{-4}$, Verfahren 1. Ordnung



Schrittweite $\Delta t = 1 \cdot 10^{-4}$, Verfahren 2. Ordnung



Bild 41: Einfluss des Zeitintegrationsverfahrens und der Schrittweite auf die logarithmischen Verzerrungen $|\varepsilon|$ nach 30% bzw. 50% Stauchung mit überlagerter Scherung ($t_{\rho} = 0.28$, $\rho = 0.2$). FE-Netze 60 × 60 mit periodischen Randbedingungen. Zwei-Flächen-Modell mit $E = 500\tau_0^x$, $\nu = 0.3$, $\beta_c^{\text{max}} = 117.772^{\circ}$.



Bild 42: Einfluss des Integrationsverfahrens und der Zeitschrittweite auf den zeitlichen Verlauf der minimierten inkrementellen Energie. Daten wie in Bild 41.

unterschiedlichen Bifurkationszeitpunkten für t > 0.36, die auf der Zeitachse durch kurze und lange Markierungen für das Verfahren 1. bzw. 2. Ordnung gekennzeichnet sind. Auch die Verteilung der logarithmischen Verzerrungen in Bild 41 weist auf leicht verschobene sekundäre Bänder hin. Sie werden zum Zeitpunkt $t \approx 0.37$ durch voneinander abweichende, aber energetisch gleichwertige Geschwindigkeitsfelder initiiert. Die zugehörigen Verteilungen der Eulerschen Verzerrungsgeschwindigkeit zeigt Bild 43 zum Zeitpunkt t = 0.43 bei voll entwickelten Bändern.

$$\Delta t = 5 \cdot 10^{-4}$$
, Verfahren 1. Ordnung





Bild 43: Verteilung der Eulerschen Verzerrungsgeschwindigkeit bei voll entwickelten sekundären Scherbändern zum Zeitpunkt t = 0.43. Daten wie in Bild 41.

7.3.4 Einfluss der Netzdichte

In den hier besonders interessierenden späteren Phasen des nachkritischen Verhaltens bilden sich zweidimensionale Deformationsmuster aus, die um so besser abgebildet werden können, je höher die Netzdichte ist. Wie stark sich die Netzdichte auf die sich einstellende Mikrostruktur auswirkt, zeigt ein Vergleich der Rechenergebnisse für 60×60 und 32×32 Netze unter sonst gleichen Bedingungen in Bild 44. Die Mikrostruktur bleibt im wesentlichen unverändert, die berechneten Hauptverzerrungen weichen jedoch, wie nicht anders zu erwarten, merklich voneinander ab. So erreicht die größte Hauptverzerrung für das 60×60 Netz den Wert 0.98, während der für das 32×32 Netz nur bis 0.85 anwächst.



Bild 44: Einfluss der Netzdichte auf die logarithmischen Verzerrungen $|\varepsilon|$ nach 30% bzw. 50% Stauchung mit überlagerter Scherung ($t_{\rho} = 0.28$, $\rho = 0.2$). Periodische Randbedingungen. Zwei-Flächen-Modell mit $E = 500\tau_0^x$, $\nu = 0.3$, $\beta_c^{\text{max}} = 117.772^{\circ}$.

FE-Netz 60×60

7.3.5 Schwächen der Optimierungsstrategie

Das Nachrechnen des von Petryk und Thermann (2004) betrachteten Deformationsprozesses mit $t_{\rho} = 0.29$ und $\rho = 0.2$ führt zu einem sehr unbefriedigenden Ergebnis: Bei einer geringfügigen Veränderung des Winkels φ_0 , den die Netzdiagonale in der unverformten Konfiguration mit der Vertikalen bildet, ergibt sich nach einer Stauchung von 50% eine veränderte Mikrostruktur, bei der sich die Lokalisierungszonen nicht mehr kreuzen, sondern den gleichen Orientierungssinn beibehalten (Bild 45).

FE-Netz 60×60 mit $\varphi_0 = 56.0890898635$



FE-Netz 60×60 mit $\varphi_0 = 56.0891$ (Petryk und Thermann, 2004)



Bild 45: Einfluss einer geringfügigen Veränderungen der Netzgeometrie auf die Verteilung der logarithmischen Verzerrungen $|\varepsilon|$ nach 30% bzw. 49% Stauchung mit überlagerter Scherung ($t_{\rho} = 0.29$, $\rho = 0.2$). Periodische Randbedingungen. Zwei-Flächen-Modell mit $E = 500\tau_0^x$, $\nu = 0.3$, $\beta_c^{\max} = 117.772^{\circ}$.

Die Ursache hierfür wird bei Betrachtung des Vergleichs der größten Hauptwerte der Eulerschen Verzerrungsgeschwindigkeit für die beiden Prozesse in Bild 46 deutlich. Während sich in der Anfangsphase der nachkritischen Deformation bis etwa 36% Stauchung keine signifikanten Unterschiede ergeben, sind die Abweichungen der Deformationsmuster und der Verzerrungsraten ab den Bifurkationen bei t = 0.3903 bzw. t = 0.3833 erheblich. Von hier ab ist insbesondere der Orientierungssinn der sich neu ausbildenden Scherbänder FE-Netz 60×60 mit $\varphi_0 = 56.0890898635$



Bild 46: Vergleich der Eulerschen Verzerrungsgeschwindigkeiten und der minimierten inkrementellen Energie bei isochorer Stauchung mit überlagerter Scherung ($t_{\rho} = 0.29$ und $\rho = 0.2$) für unwesentlich veränderte FE-Netze. Periodischen Randbedingungen. Zwei-Flächen-Modell mit $E = 500\tau_0^x$, $\nu = 0.3$ und $\beta_c^{\text{max}} = 117.772^{\circ}$.

für die beiden Rechenläufe verschieden. Der zu den genannten Bifurkationszeitpunkten jeweils gewählte Richtungssinn ändert sich auch bei weiteren Bifurkationen bis zum Ende des Prozesses nicht mehr und manifestiert sich in unterschiedlichen Verteilungen der logarithmischen Verzerrungen (Bild 45).

Die Darstellung der inkrementellen Energie in Bild 46 bestätigt die schon an den Verzerrungsraten festgestellten Phänomene. Auch hier stimmen die ermittelten Minima für die beiden Prozesse bis zu den oben genannten Bifurkationszeitpunkten gut überein und weichen danach drastisch ab. Dies lässt vermuten, dass für bestimmte Prozesszustände mehrere, konkurrierende lokale Minima der inkrementellen Energie existieren. Die benutzte Trust-Region-Methode kann aber nicht sicherstellen, dass stets das beste lokale Minimum gefunden wird. Da das Iterationsverfahren zur Minimierung stets mit dem Geschwindigkeitsfeld des letzten Zeitschrittes beginnt, ist es denkbar, dass das Verfahren bei kleinen Parameteränderungen in ein anderes lokales Minimum hineinläuft.
8 Ausblick

Die am Ende des letzten Kapitels beschriebene Schwäche der Optimierungsstrategie stellt eine gravierende Schwierigkeit dar, die nicht ohne weiteres überwunden werden kann. In diesem Ausblick wollen wir die Problematik noch etwas vertiefen und prinzipielle Lösungsideen skizzieren.

Wir erhärten zunächst die schon ausgesprochene Hypothese, dass zu bestimmten Zeitpunkten des Deformationsprozesses konkurrierende lokale Minima der inkrementellen Energie existieren. Hierzu wurde die Trust-Region-Methode zu einem festen Zeitpunkt (t = 0.4228) bei unverändertem Zustand mit 20 Zufalls-Geschwindigkeitsfeldern gestartet, wobei für jede Knotenpunktsgeschwindigkeit gleichverteilte Zufallszahlen im Intervall [-0.5, 0.5] gewählt wurden. Es ergeben sich hierbei 4 verschiedene Lösungstypen, die zusammen mit dem Wert der zugehörigen inkrementellen Energie J und der Nummer des Zufallsversuchs in der nachfolgenden Tabelle nach J absteigend sortiert dargestellt sind.

Nr.	J	Bemerkungen
14	$0.266\ 668$	
18	$0.266\ 658$	Lösungstyp IV, Bild 47 erste Zeile
7	$0.266\ 658$	
16	$0.266\ 124$	
0	$0.263 \ 013$	Startvektor nicht zufällig, Bild 47 unten rechts
1	0.262 766	Lösungstyp IV, Bild 47 erste Zeile
4	$0.262\ 757$	
20	$0.258\ 249$	
19	$0.258\ 249$	
17	$0.258\ 249$	
13	$0.258\ 249$	Lösungstyp III, Bild 47 zweite Zeile
12	$0.258\ 249$	
11	$0.258\ 249$	
8	$0.258\ 249$	
6	$0.258\ 249$	
3	$0.258\ 249$	
15	$0.258\ 092$	Lösungstyp II, Bild 47 dritte Zeile
2	$0.258\ 092$	
10	$0.256 \ 921$	
9	$0.256 \ 921$	Lösungstyp I, Bild 47 unten links
5	$0.256 \ 921$	

Zusätzlich eingeordnet ist das mit der Nr. 0 bezeichnete Ergebnis, das dem Standardverfahren der Optimierungsstrategie entspricht, bei dem die Trust-Region-Methode mit dem Geschwindigkeitsvektor des letzten Zeitschrittes gestartet wird. Wie man sieht, fällt dies Resultat bezüglich des Minimierungserfolgs in die schlechteste Lösungskategorie IV, die durch das Auftreten sekundären Bänder mit dem Orientierungssinn der primären Bänder gekennzeichnt ist. Die zu den verschiedenen Lösungstypen gehörenden Deformationsmuster sind an Hand der Verteilung der Eulerschen Verzerrungsgeschwindigkeit in Bild 47 veranschaulicht. Beim zweitschlechtesten Lösungstyp III bleiben die primären Bänder er-

Lokale Minima



Bild 47: Konkurrierende lokale Minima der inkrementellen Energie zum Zeitpunkt t = 0.4228 und zugehörige Verteilungen der Eulerschen Verzerrungsgeschwindigkeit. Isochore Stauchung mit überlagerter Scherung $t_{\rho} = 0.28$, $\rho = 0.20$. FE-Netz 16 × 16 mit periodischen Randbedingungen. Zwei-Flächen-Modell mit $E = 500\tau_0^x$, $\nu = 0.3$, $\beta_c^{\text{max}} = 117.772^\circ$.

0.7778

0.5916

J = 0.256921

0.8303

0.6152

J = 0.263013

halten und ändern nur ihren Volumenanteil durch Hinzunahme weiterer primärer Bänder. Dies steht in Übereinstimmung mit den Vorhersagen des semianalytischen Modells, bei dem von vornherein ein geschichtetes Material mit genau zwei unterschiedlichen Zonen angenommen wird. Der zweitbeste Lösungstyp II weist bereits sekundäre Bänder mit geändertem Orientierungssinn auf, die bei einer Anordnung entsprechend Lösungstyp I auf das kleinste der 20 lokalen Minima führen. Lösungstyp I wird bei 20 Zufallsversuchen dreimal gefunden, so dass wir damit vermutlich das globale Minimum der inkrementellen Energie getroffen haben. Es unterscheidet sich merklich von dem lokalen Minimum (Versuch Nr. 0), das die Trust-Rgegion-Methode in der Standardform liefert.

• In zukünftigen Untersuchungen sollte die Trust-Region-Methode deshalb mit Techniken kombiniert werden, die eine größere Chance zum Auffinden des globalen Optimums bieten (genetische Algorithmen, Evolutionsstrategien, simulated annealing, Clustermethoden).

Die Schwierigkeit dieser Aufgabe wird deutlich, wenn man sich vor Augen führt, dass (1) die Anzahl der unabhängigen Variablen der Minimierungsaufgabe groß ist und (2) das globale Minimum streng genommen in jedem Zeitschritt zu bestimmen ist. So beträgt der Freiheitsgrad der analysierten 60×60 FE-Netze 14398. Bei einer Zeitschrittweite von $5 \cdot 10^{-4}$ und den betrachteten Prozessdauern müsste das globale Optimierungsproblem 500 mal gelöst werden und zwar für verschiedene Zielfunktionen, da sich die zustandsabhängige inkrementelle Energie in jedem Prozesschritt ändert. Aus diesem Grunde ist es empfehlenswert, die nach den vorliegenden Erfahrungen sehr effiziente Trust-Region-Methode als Kernalgorithmus beizubehalten und nur durch andere Methoden zu ergänzen.

Eine einfach zu realisierende Variante könnte zum Beispiel darin bestehen, im Verlaufe des Prozesses nur in gewissen zeitlichen Abständen den Lösungsraum von zufälligen Startwerten ausgehend — wie oben beschrieben — nach dem besten lokalen Minimum abzusuchen. Bild 48 zeigt das Ergebnis einer solchen Strategie, bei der an jedem Bifurkationszeitpunkt aus 20 lokalen Minima das Geschwindigkeitsfeld der besten Lösung ausgewählt und für die Fortsetzung des Deformationsprozesses benutzt wurde.² Für den Bifurkationszeitpunkt t = 0.3458 führen alle Zufallsversuche auf das gleiche lokale Minimum, das auch die Standardform der Trust-Region-Methode findet. Erst bei der nachfolgenden Bifurkation zum Zeitpunkt t = 0.4228 ist die Zufallssuche erfolgreich und der modifizierte Algorithmus wählt die beste Lösung aus der in Bild 47 bereits vorgestellten Menge aus. Der geänderte Orientierungssinn der Bandrichtung bleibt bis zum Ende des Prozesses erhalten.

Bemerkenswert ist für dieses Beispiel auch, dass zahlreiche Bifurkationen im Bereich zwischen 46% bis 47% Stauchung, auf die der Standardalgorithmus stösst, jetzt ganz verschwunden sind. Die Bifurkationszeitpunkte sind in Bild 48 für die beiden Lösungsstrategien farblich unterschiedlich markiert. Dicht aufeinander folgende Bifurkationen sind generell ein Anzeichen dafür, dass das vorliegende Netz schlecht angepasst ist und die eigentlich gesuchte Lösung für das Kontinuum nur unzureichend abbilden kann.

 $^{^{2}}$ Zum ersten Bifurkationszeitpunkt existieren bekanntlich energetisch äquivalente Lösungen mit gleichem Minimum der inkrementellen Energie. Um den Einfluss der Anfangsverteilung auszuschließen, wurde dieser Punkt ausgenommen.

 global



Bild 48: Vergleich der logarithmischen Verzerrungen und der minimierten inkrementellen Energie für die Trust-Region-Methode kombiniert mit einer Zufallssuche (global) und in der Standardform (lokal). Isochorer Stauchung mit überlagerter Scherung ($t_{\rho} = 0.28$ und $\rho = 0.2$). FE-Netz 16×16 mit periodischen Randbedingungen. Zwei-Flächen-Modell mit $E = 500\tau_0^x$, $\nu = 0.3$ und $\beta_c^{\max} = 117.772^{\circ}$.

t

Sie äußern sich im Zeitverlauf der inkrementellen Energie durch rauhe Kurvenabschnitte (Bild 48) und in der örtlichen Verteilung der Verzerrungsraten durch unruhige und weniger klar strukturierte Deformationsmuster (Bild 49), die gelegentlich auch rasch wechseln.



Bild 49: Vergleich der Eulerschen Verzerrungsgeschwindigkeit zu zwei Zeitpunkten im Bereich dicht aufeinanderfolgender Bifurkationen für die modifizierte Trust-Region-Methode (global) und das Standardverfahren (lokal). Daten wie in Bild 48

• In Verbindung mit einer verbesserten Optimierungsstrategie sollte deshalb auch die Frage einer flexiblen und effizienten Diskretisierung des Kontinuums untersucht werden. Im Rahmen der Finite-Element-Methode kämen hierfür höherwertige Ansatzfunktionen (p-Adaptivität) in Frage. Aussichtsreicher erscheint der Einsatz netzfreier Methoden (moving least square methods, reproducing kernel particle methods, natural neighbour interpolant), da dann jedenfalls die durch Vernetzung vorgegeben Vorzugsrichtungen für die Ausbildung der Lokalisierungszonen entfallen.

Da im Rahmen dieser Arbeit die Implementierung und Validierung des Werkstoffmodells (Zwei-Flächen-Modell) im Mittelpunkt stand, ist diese Problematik bewusst vollständig ausgeklammert worden. Die benutzten Dreieckselemente mit elementweise konstanten Verzerrungsraten (constant strain triangles), in die ein Rechteckelement durch die sich kreuzenden Diagonalen zerlegt wird, haben den Vorteil, dass sie bei geeignet gewählter Netzgeometrie und bei periodischen Randbedingungen ideal an die zu erwartenden Lokalisierungszonen zum ersten Bifurkationszeitpunkt und die Scherbandentwicklung in der nachfolgenden Anfangsphase der nachkritischen Deformation angepasst sind. Auf diese Weise war eine Kontrolle der Implementierung durch Vergleich mit semianalytischen Lösungen möglich. Nachdem nun eine gesicherte Implementierung des Werkstoffmodells vorliegt, entfällt dieser Vorteil. Er entfällt generell hinsichtlich der späteren Phasen des Deformationsprozesses, für die das semianalytische Modell keine Vorhersagen liefern kann. In diesen Phasen gehen auch die Vorzüge periodischer Randbedingungen verloren, da das Seitenverhältnis der Einheitszelle für die sich dann ausbildenden zweidimensionalen Deformationsmuster vorab unbekannt ist.

• Die systematische Untersuchung der Mikrostrukturentwicklung bei Vorgabe kinematischer Randbedingungen erscheint als eine lohnende zukünftige Aufgabe.

Bezüglich der Implementierung ist eine vollständige Vorgabe des Geschwindigkeitsfeldes auf dem Rand unproblematisch und viel einfacher als die hier vorgenommene Realisierung periodischer Randbedingungen. Vorliegende Testrechnungen zeigen aber, dass der Randeinfluss, vermutlich bedingt durch die Netzstruktur, auf das Ergebnis durchschlägt. Es ist daher sinnvoll, die genannten Aufgaben eines zukünftigen Forschungsprogramms im Zusammenhang zu sehen und parallel zu bearbeiten.

Bild 50 zeigt das Ergebnis einer Rechnung für den Prozess der reinen Stauchung bei vollständiger Vorgabe der Geschwindigkeiten an den Rändern.

Eulersche Verzerrungsgeschwindigkeiten |D|



Bild 50: Entwicklung der Mikrostruktur für den Prozess der isochoren Stauchung bei Vorgabe kinematischer Randbedingungen. 60 × 60 FE-Netz. Zwei-Flächen-Modell mit $E = 500\tau_0^x$, $\nu = 0.3$ und $\beta_c^{\text{max}} = 117.772^{\circ}$.

Die Hauptunterschiede in der Entwicklung der Mikrostruktur im Vergleich mit den in Kapitel 7.1 ausführlich betrachteten periodischen Randbedingungen zeigen sich zu Beginn und am Ende der nachkritischen Deformationsphase.

Auf Grund des Randeinflusses und der endlichen Netzdichte stimmt der erste Bifurkationszeitpunkt (t = 0.2935) nicht mehr exakt mit dem des Kontinnums (t = 0.2945) überein sondern liegt geringfügig später. Die theroretisch zu erwartenden parallelen Scherbänder mit einem Volumenanteil von 25% treten nicht auf, vielmehr ist das Bifurkationsmuster vollständig symmetrisch und spiegelt damit die Symmetrie der Probe und Belastung wider. Zehn Versuche mit zufällig gewählten Startfeldern führten stets auf diese Doppelsymmetrie. Zum Zeitpunkt t = 0.2995, d.h. bei nur geringsfügiger weiterer Stauchung wird die Symmetrie jedoch gebrochen und die Trust-Region-Region Methode in der Standardform findet im Innern der Probe die Mikrostruktur so, wie sie das semianalytische Modell vorhersagt.

Nach etwa 35% Stauchung sind sekundäre Bänder erstmalig ansatzweise in der Verteilung der Verzerrungsraten zu erkennen. Sie bilden sich in der Folge prägnant aus und bleiben bis zum Ende des Prozesses erhalten. Die im Gegensatz dazu bei periodischen Randbedingungen regelmäßig beobachteten tertiären Bänder fehlen. Es ist daher wahrscheinlich, dass das Auftreten tertiärer Lokalisierungszonen ein eher künstlicher Effekt ist, der sich durch die erzwungene periodische Fortsetzung an den Rändern ergibt. Dies unterstreicht die Notwendigkeit, kinematische Randbedingungen in der Zukunft systematisch zu untersuchen.

9 Zusammenfassung

Im Zentrum der vorliegenden Arbeit steht eine Implementierung des phänomenologischen Materialmodells für polykristalline Metalle von Petryk und Thermann (1997). Mit Hilfe eines Lösungsverfahrens durch inkrementelle Energieminimierung wird das Verhalten eines durch Finite-Elemente diskretisierten Kontinuums bei isochorer Stauchung, mehrheitlich mit überlagerter Scherung, numerisch berechnet. Die Ausbildung und Entwicklung einer heterogenen Mikrostruktur in Form multipler makrokopischer Scherbänder wird dokumentiert und untersucht.

Der Einführung der stoffunabhängigen, kinematischen und statischen Größen und ihrer Zeitableitungen in Kapitel 2 folgt in Kapitel 3 die Beschreibung des isotropen hyperelastischen Materialverhaltens. Dazu werden die Ratenprobleme erster und zweiter Ordnung formuliert sowie ein Überblick über deren Implementierung gegeben. Das elastische Materialverhalten wird insbesondere herangezogen, um die numerische Umsetzung der Ratengleichung zweiter Ordnung und die dazu erforderlichen Transformationen zu überprüfen.

Kapitel 4 erläutert das Materialmodell und die daraus abgeleiteten elasto-plastischen Ratengleichungen. Diese setzen das Modell in einfacher Weise um, indem die Möglichkeit der Entlastung einzelner Gleitsysteme und die Verfestigungsregeln unabhängig voneinander formuliert werden. Die Verfestigungsansätze können also wie in der klassischen Plastizitätstheorie beschrieben werden. Den durchgeführten numerischen Anwendungen liegt ein Potenzverfestigungsgesetz zu Grunde, das die Lage der äußeren Grenzfläche bestimmt. Für die Behandlung materieller Instabilitäten ist die mit der Ausbildung einer Fließecke verbundene inkrementelle Nichtlinearität von entscheidender Bedeutung, die bei größeren Änderungen der plastischen Verzerrungsrichtung zu einer reduzierten Steifigkeit führen kann.

Ein numerisches Lösungsverfahren (Petryk und Thermann (1992)) mit Hilfe der Methode der Finiten Elemente auf der Grundlage des Energiekriteriums lag bereits implementiert vor. Bei nicht eindeutigen Lösungsmengen wählt der Algorithmus diejenige aus, mit der nach physikalischen Gesichtspunkten der Prozess stabil fortgesetzt wird. Die theoretischen Hintergründe sind in Kapitel 5 skizziert. Durch eine semianalytische Berechnung des Verhaltens unendlich ausgedehnter Systeme bis in die Anfangsphase der lokalisierten Deformation hinein (nach Petryk, 1997) wird die numerische Lösung in diesem zeitlichen Rahmen bestätigt (Kapitel 6).

Alle für diese Arbeit durchgeführten numerischen Rechenläufe bilden isochore Stauchprozesse mit Dickenreduktionen der ebenen Proben von ca. 50% ab. Zusätzlich wird der Einfluss einer überlagerten Scherung moderater Intensität untersucht. Die Entstehung multipler Scherbänder wird für alle betrachteten Prozesse durchgängig vorhergesagt. Kapitel 7 beginnt mit der Dokumentation und Erläuterung der Ergebnisse einiger repräsentativer Prozesse. Dabei zeigt sich die grundsätzliche Eignung des Werkstoffmodells, die in Experimenten beobachtete Mikrostruktur metallischer Vielkristalle abzubilden. Aus der anschließenden systematischen Suche nach Einflussfaktoren, die das Ergebnis nachhaltig verändern, sind zwei Erkenntnisse besonders hervorzuheben. Zum einen beeinflusst eine genauere Methode der Zeitintegration das Ergebnis nicht wesentlich. Zum anderen muss die effiziente Trust-Region-Methode als Optimierungsverfahren um Strategien zum Auffinden globaler Minima erweitert werden. Daher fließen in den Ausblick auf weitere lohnenswerte Untersuchungsfelder (Kapitel 8) schon erste, vielversprechende Verbesserungen der Optimierungsstrategie ein.

Insgesamt erzielt die vorgestellte Implementierung des Zwei-Flächen-Modells in Verbindung mit der Energieminimierung qualitativ zufriedenstellende Ergebnisse. Der quantitative Abgleich mit experimentellen Befunden eröffnet noch ein weites Forschungsfeld. Für die Weiterführung der numerischen Untersuchungen sollte allerdings neben der schon erwähnten Ergänzung der Optimierungsmethode eine flexiblere räumliche Diskretisierung durchgeführt werden.

Literaturverzeichnis

- Armstrong, P. und Frederick, C. (1966). A mathematical representation of the multiaxial Bauschinger effect. *General Electricity Generating Board, Report No. RD/BN/ 731.*
- Batdorf, S. B. und Budiansky, B. (1949). A mathematical theory of plasticity based on the concept of slip. NACA TN No. 1871.
- Berveiller, M. und Zaoui, A. (1979). An extension of the self-consistent scheme to plastically flowing ploycrystals. J. Mech. Physi. Solids 26:325–344.
- Biot, M. A. (1965). *Mechanics of Incremental Deformations*. New York: Wiley.
- Bishop, J. F. und Hill, R. (1951a). A theoretical derivation of the plastic properties of a ploycrystalline face-centred metal. *Phil. Mag.* 42:1298–1307.
- Bishop, J. F. und Hill, R. (1951b). A theory of the plastic distorsion of a polycrystalline aggregate under combined stresses. *Phil. Mag.* 42:414–427.
- Budiansky, B. und Wu, T. T. (1962). Theoretical prediction of plastic strains of polycrystals. In Rosenberg, R. M., ed., Proceedings of the Fourth U.S. National Congress of Applied mechanics, 1175–1185. New York: ASME.
- Christoffersen, J. und Hutchinson, J. W. (1979). A class of phenomenological corner theories of plasticity. J. Mech. Phys. Solids 27:465–487.
- Doyle, T. C. und Ericksen, J. L. (1956). Non-linear elasticity. Adv. Appl. Mech. 4:53–116.
- Fletcher, R. (1987). Practical Methods for Optimization. Chichester: John Wiley.
- Gay, D. M. (1981). Computing optimally constrained steps. SIAM J. Sci. Stat. Comput. 2:186–197.
- Gay, D. M. (1983). Algorithm 611, subroutines for unconstrained minimization using a model/trust-region approach. ACM Transactions on Mathematical Software 9:503– 524.
- Gurtin, M. E. (1972). The linear theorie of elasticity. In Flügge, S., ed., Encyclopedia of Physics, Volume VIa/2, 1–295. Springer.
- Hill, R. und Rice, J. R. (1972). Constitutive analysis of elastic-plastic crystals at arbitrary strain. J. Mech. Phys. Solids 20:401–413.
- Hill, R. (1958). A general theory of uniqueness and stability in elastic-plastic solids. J. Mech. Phys. Solids 6:236-249.
- Hill, R. (1959). Some basic principles in the mechanics of solids without a natural time. J. Mech. Phys. Solids 7:209-225.
- Hill, R. (1962). Acceleration waves in solids. J. Mech. Solids 10:1–16.

- Hill, R. (1965). Continuum micromechanics of elastoplastic polycrystals. J. Mech. Phys. Solids 13:89–101.
- Hill, R. (1966). Generalized constitutive relations for incremental deformation of metal crystals by multislip. J. Mech. Phys. Solids 14:95–102.
- Hill, R. (1967). The essential structure of constitutive laws for metal composites and polycristals. J. Mech. Phys. Solids 15:79–95.
- Hill, R. (1968). On constitutive inequalities for simple materials I. J. Mech. Phys. Solids 16:229-242.
- Hill, R. (1969). Some aspects of the incremental behaviour of isotropic elastic solids after finite strain. In Problems in Mechanics: Deformation of Solid Bodies. V.V. Novoshilov volume. Leningrad. 459–466.
- Hill, R. (1970). Constitutive inequalities for isotropic elastic solids under finite strain. Proc. Roy. Soc. Lond. A 314:457-472.
- Hill, R. (1978). Aspects of invariance in solid mechanics. Adv. Appl. Mech. 18:1–75.
- Hutchinson, J. W. (1964). Plastic stress-strain relations of fcc polycrystalline metals hardening according to Taylors rule. J. Mech. Phys. Solids 12:11-24.
- Hutchinson, J. W. (1970). Elastic-plastic behaviour of polycristalline metals and composites. *Proc. Roy. Soc. Lond.* A 319:247–272.
- Koiter, W. (1953). Stress-strain relations, uniqueness and variational theorems for elasticplastic materials with a singular yield surface. *Quart. Appl. Math.* 11:350–353.
- Kröner, E. (1961). Zur plastischen Verformung des Vielkristalls. Acta metallurgica 9:155– 161.
- Lin, T. H. (1957). Analysis of elastic and plastic strains of e face centred cubic crystal. J. Mech. Phys. Solids 5:143-149.
- Lulla, C. (2003). Ein Beitrag zur numerischen Scherbandanalyse elasto-plastischer Werkstoffe mit nicht-glatter Fließfläche. Dissertation, Universität Dortmund.
- Mandel, J. (1965). Une generalisation de la theorie de Koiter. Int. J. Solids Struct. 1:273-295.
- McVean, D. (1968). Die Elementararbeit in einem Kontinuum und die Zuordnung von Spannungs- und Verzerrungstensoren. Z. angew. Math. Phys. 19:157–185.
- Melan, E. (1938). Zur Plastizität des räumlichen Kontinuums. Ingenieur-Archiv 9:116– 126.
- Moré, J. J. und Sorensen, D. C. (1983). Computing a trust region step. SIAM J. Sci. Stat. Comput. 4:553–572.

- Nagtegaal, J. C., Parks, D. M. und Rice, J. R. (1974). On numerically accurate finite element solutions in the fully plastic range. *Comp. Meth. Appl. Mech. Engng* 4:153– 177.
- Ogden, R. W. (1984). Non-linear elastic deformations. Chichester: Ellis Harwood.
- Petryk, H. und Thermann, K. (1992). On discretized plasticity problems with bifurcations. Int. J. Solids Structures 29:745–765.
- Petryk, H. und Thermann, K. (1995). On plastic strain localisation in the non-elliptic range under plane stress. In Owen, D. und Onate, E., eds., *Computational Plasticity: Fundamentals and Applications*, 647–658. Swansea: Pineridge Press.
- Petryk, H. und Thermann, K. (1997). A yield-vertex modification of two-surface models of metal plasticity. Arch. Mech. 49:847–863.
- Petryk, H. und Thermann, K. (2002). Post-critical plastic deformation in incrementally nonlinear materials. J. Mech. Phys. Solids 50:925–954.
- Petryk, H. und Thermann, K. (2004). Incremental Energy Minimization in Material Instability Problems. Private Mitteilung.
- Petryk, H. (1982). A consistent energy approach to defining stability of plastic deformation processes. In Schroeder, F., ed., Stability in the Mechanics of Continua, Proc. IUTAM Symposium, Nümbrecht 1981, 262–272. Berlin: Springer.
- Petryk, H. (1985). On energy criteria of plastic instability. In *Plastic Instability, Proc.* Considère Memorial, 215–226. Paris: Ecole Nat. Ponts Chauss.
- Petryk, H. (1991). The energy criteria of instability in time-independent inelastic solids. Arch. Mech. 43:519-545.
- Petryk, H. (1992a). Material instability and strain-rate discontinuities in incrementally nonlinear continua. J. Mech. Phys. Solids 40(6):1227–1250.
- Petryk, H. (1992b). On stability of time-independent materials at finite strain. In Besdo, D. und Stein, E., eds., *Finite Inelastic Deformations - Theory and Applications*, 189– 196. Springer.
- Petryk, H. (1993b). Stability and constitutive inequalities in plasticity. In Muschik, W., ed., CISM Courses and Lectures No. 336, 259–329. Wien-New York: Springer.
- Petryk, H. (1997). Instability of plastic deformation processes. In Tatsumi, T. et al., eds., Theoretical and applied mechanics, Proc. XIXth IUTAM Congress, Kyoto 1996, 497-516. Elsevier.
- Petryk, H. (1999a). On the micro-macro transition and hardening moduli in plasticity. In Bruhns, O. T. und Stein, E., eds., Proc. IUTAM Symp. Micro- and Macrostructural Aspects of Thermoplasticity, Bochum 1997, 219–230. Dordrecht: Kluwer.

- Piela, K. und Korbel, A. (1996). The effect of shear banding on spatial arrangement of the second phase particles in the aluminium alloy. *Materials Science Forum* 217-222:1037-1042.
- Prager, W. (1955). *Probleme der Plastizitätstheorie*. Basel und Stuttgart: Birkhäuser Verlag.
- Rice, J. R. (1971). Inelastic constitutive relations for solids: an internal variable theory and its application to metal plasticity. J. Mech. Phys. Solids 19:433–455.
- Sachs, G. (1928). Zur Ableitung einer Fließsbedingung. Zeitschrift des Vereins deutscher Ingenieure 72:734–736.
- Sanders, J. L. (1954). Plastic stress-strain relations based on linear loading functions. In Proc. 2nd U.S. Nat. Congr. Appl. Mech., 455–460. Ann Arbor: ASME.
- Sewell, M. (1974). Plastic flow at a yield vertex. J. Mech. Phys. Solids 22:469–490.
- Taylor, G. I. (1938). Plastic strain in metals. J. Inst. Metals 62:307–324.
- Truesdell, C. A. und Noll, W. (1965). The non-linear field theories of mechanics. In Flügge, S., ed., *Encyclopedia of Physics, Volume III/3*. Berlin, Heidelberg, New York: Springer.
- Tvergaard, V., Needleman, A. und Lo, K. K. (1981). Flow localization in the plane strain tensile test. J. Mech. Phys. Solids 29:115–147.

Lebenslauf

Name: Geburtsdatum: Geburtsort: Familienstand: Staatsangehörigkeit:		Schütze, Andrea 20. Dezember 1975 Köln ledig deutsch
Schulausbildung:	1982 - 1986	Grundschule in Waldbröl
	1986 - 1995	Hollenberg-Gymnasium in Waldbröl, Allgemeine Hochschulreife
Studium:	1995 - 2000	Maschinenbau, Fachrichtung Maschinentechnik an der Universität Dortmund, Diplom am 19. Dezember 2000
	WS 97/98	Auslandssemester an der Danmarks Tekniske Universitet, Lyngby, Dänemark
Berufliche Tätigkeit:	seit 2001	Wissenschaftliche Angestellte am Fachgebiet Mechanik, insb. Maschinendynamik, Fakultät Maschinenbau, Universität Dortmund, Prof. DrIng. K. Thermann