

**Homogenisierungsansätze für
elasto-plastische Festkörper auf Basis
inkrementeller Variationsprinzipien**

Dissertation

zur

Erlangung des akademischen Grades

Doktor-Ingenieur

der

Fakultät für Maschinenbau
der Technischen Universität Dortmund

genehmigte Dissertation

vorgelegt von

Dipl.-Ing. Nikolaus Jeromin

aus München

Dortmund 2013

Summary

In this treatise, a novel hybrid homogenization strategy for elasto-plastic solids at finite strains is proposed. First, a variational consistent algorithm is introduced. This algorithm computes all state variables for models at finite plasticity by minimizing the incremental stress power. The frame of the algorithm is so general that it is applicable for a broad range of constitutive models. An adapted algorithm for fully isotropic material models is also developed. This algorithm is extremely efficient and in many cases it is even more efficient than the corresponding return-mapping algorithm. By numerical examples it is shown that the novel variational consistent algorithm has a comparable precision as the by now classical return-mapping algorithm.

Based on the aforementioned variationally consistent algorithm, a novel hybrid homogenization strategy is presented. This strategy relies on the principle of energy equivalence for the scale coupling. As classical FE^2 methods for scale transformation are numerically very extensive, an efficient approximation is proposed. By this procedure the effective macroscopic material parameters can be computed very efficiently. Several examples demonstrate the potential of the novel homogenization strategy.

Zusammenfassung

In dieser Arbeit wird eine neue hybride Homogenisierungsmethode für elasto-plastische Festkörper vorgeschlagen. Hierzu wird ein variationell konsistenter Algorithmus eingeführt, der alle Zustandsvariablen von Festkörpern unter endlichen plastischen Deformationen durch Minimierung der inkrementellen Spannungsleistung berechnet. Dieser Algorithmus ist so allgemein gehalten, dass er für eine große Klasse an Konstitutivmodellen angewandt werden kann. Ein adaptierter Algorithmus für vollständig isotrope Materialmodelle wird zudem behandelt. Dieser ist äußerst effizient, oftmals effizienter als der vergleichbare Return-Mapping-Algorithmus. Anhand numerischer Beispiele wird gezeigt, dass der neue variationell konsistente Algorithmus eine ähnliche Genauigkeit wie der klassische Return-Mapping-Algorithmus besitzt.

Aufbauend auf dem zuvor skizzierten variationell konsistenten Algorithmus wird eine neue hybride Homogenisierungsmethode vorgestellt. Diese verwendet zur Skalenkopplung das Prinzip der Energieäquivalenz. Da klassische FE^2 -Ansätze zum Skalenübergang numerisch sehr aufwendig sind, wird eine effiziente Approximation vorgeschlagen. Mit dieser lassen sich die effektiven Materialparameter für ein makroskopisches Materialmodell effizient berechnen. Mehrere Beispiele demonstrieren das Potential der neuartigen Homogenisierungsmethode.

Vorwort

Die vorliegende Dissertation entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehrstuhl für Technische Mechanik der Ruhr-Universität Bochum. Sie wurde von der Fakultät für Maschinenbau der Technischen Universität Dortmund als Dissertation angenommen.

Mein besonderer Dank gilt meinen Lehrern Prof. em. Dr.-Ing. O. T. Bruhns und Prof. Dr.-Ing. J. Mosler für die Anregung, wissenschaftliche Betreuung und wohlwollende Unterstützung dieser Arbeit. Ich danke ihnen für das Vertrauen und die mir gewährten Freiräume bei der Gestaltung meiner Forschungsarbeit, die meine wissenschaftliche Qualifikation wesentlich geprägt haben.

Herrn Prof. Dr.-Ing. A. E. Tekkaya und Herrn Prof. Dr.-Ing. F. Walther danke ich für die Übernahme des Koreferats bzw. des Vorsitzes der Prüfungskommission.

Bei allen derzeitigen und ehemaligen Kollegen des Lehrstuhls für Technische Mechanik bedanke ich mich für die angenehme Zusammenarbeit und Arbeitsatmosphäre in den vergangenen Jahren.

Nicht zuletzt danke ich meiner Frau Nadine für ihre Unterstützung und ihren Rückhalt während der letzten Jahre. Durch ihr Verständnis, ihre Geduld und ihre Zuneigung hat sie einen wesentlichen Anteil am Gelingen dieser Arbeit.

Bochum, im August 2013

Nikolaus Jeromin

Referenten: Prof. Dr.-Ing. Jörn Mosler
Prof. em. Dr.-Ing. Otto T. Bruhns

Tag der Einreichung: 17.07.2013
Tag der mündlichen Prüfung: 26.08.2013

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung	1
1.1	Aufbau der Arbeit	2
2	Kinematik	5
2.1	Beobachter und Bezugssysteme	5
2.2	Konfiguration	5
2.3	Bewegungen von Körpern	7
2.4	Deformationen von Körpern	7
2.4.1	Deformationsgradient	7
2.4.2	Transformation von Flächen und Volumina	8
2.4.3	Deformationstensenoren	9
2.4.4	Geschwindigkeitsgradient	11
2.5	Objektivität	11
3	Kinetik	13
3.1	Spannungsvektor und Schnittprinzip	13
3.2	Spannungstensenoren	14
3.3	Spannungsleistung	15
4	Erhaltungssätze	17
4.1	Masse	17
4.2	Impuls	18
4.3	Drehimpuls	19
4.4	Energie	20
4.5	Entropie	21
5	Variationsprinzipien	23
5.1	Das Prinzip der virtuellen Arbeit	23
5.2	Das Prinzip von Hamilton	24
6	Konstitutive Beziehungen	27
6.1	Konstitutive Modelle für elastische Materialien	27
6.2	Konstitutive Modelle für plastische Materialien	30
6.2.1	Kinematik	30

6.2.2	Das Prinzip der maximalen Dissipationsleistung	31
6.2.3	Fließfunktion	33
6.2.4	Dissipation	35
6.2.5	Variationelle Formulierung von Plastizität bei endlichen Deformationen	37
7	Numerische Implementierung von Plastizität endlicher Defor- mationen	39
7.1	Klassischer Return-Mapping-Algorithmus	39
7.2	Variationell konsistenter Algorithmus	42
7.2.1	Direkte Parametrisierung der Fließregel	43
7.2.2	Parametrisierung der Fließregel mit Pseudo-Spannungen	48
7.2.3	Parametrisierung der Fließregel mit Pseudo-Spannungen und Euler-Winkeln	52
7.3	Numerische Beispiele	59
7.3.1	Genauigkeit und Stabilität	59
7.3.2	Lochstreifen	62
8	Homogenisierung	65
8.1	Numerische Homogenisierung mit Hilfe von Energieminimierung	65
8.1.1	Grundlagen: Kinematik und Kinetik	65
8.1.2	Numerische Implementierung	69
8.2	Eine neue variationelle Homogenisierungsmethode	73
8.2.1	Grundlagen	73
8.2.2	Neuartiger hierarchischer Homogenisierungsansatz . . .	75
8.2.3	Ein kongruenter hierarchischer Ansatz	77
8.3	Numerische Beispiele	77
8.3.1	Hyperelastizität	79
8.3.2	Elasto-Plastizität	80
9	Zusammenfassung	85
A	Notation	87
B	Differentiale wichtiger tensorieller Größen	93
B.1	Ausgewählte Differentiale	93

B.2	Ableitungen der freien Helmholtzenergie	94
B.3	Ableitungen der Fließfunktion	94
C	Homogene Funktionen	95
	Literaturverzeichnis	101

1 Einführung

Die natürlichen und künstlichen Gegenstände des Alltags bestehen oftmals aus heterogenen Materialien mit ausgeprägten Mikrostrukturen. In der Vergangenheit wurden diese Materialien häufig stark idealisierend als homogen angenommen. Beispielsweise hat bereits Galilei (1638) Untersuchungen an einem eingemauerten Holzbalken durchgeführt und dabei gewisse Querschnitseigenschaften als konstant betrachtet¹. Zweifellos ist die pragmatische Annahme homogener Materialeigenschaften für viele Werkstoffe häufig noch immer zielführend.

In den letzten Jahren wurden heterogene Materialien zunehmend in Forschung und Industrie eingesetzt. Gleichzeitig wurden in immer stärkerem Maße derartige Materialien in den Naturwissenschaften, wie beispielsweise der Biologie, Geologie oder Medizin, analysiert. Infolgedessen wurden die Eigenschaften heterogener Materialien Gegenstand intensiver Forschung.

Aufgrund der Komplexität heterogener Materialien ist eine direkte Beschreibung der Materialeigenschaften in der Regel nicht möglich. Der damit verbundene numerische Aufwand ist häufig zu groß. Im Gegensatz dazu führen direkte makroskopische Ansätze oft zu sehr komplizierten Gleichungen mit höherstufigen Tensoren, die sich häufig nur unzureichend physikalisch interpretieren und messen lassen, siehe beispielsweise Feigenbaum und Dafalias (2007) oder Göldner (1985, S. 204f.). Aus diesen Gründen hat sich die effiziente Beschreibung eines Skalenübergangs der mikroskopischen Variablen zur Makroskala zu einem wichtigen Forschungszweig entwickelt.

Das Ziel dieser Arbeit ist die effiziente Berechnung von kontinuumsmechanischen Problemen mit ausgeprägten Mikrostrukturen durch Homogenisierungsansätze. Besonderer Wert wird auf die Berücksichtigung dissipativer Prozesse gelegt, die durch elasto-plastische Materialeigenschaften bei endlichen Deformationen hervorgerufen werden.

Im ersten Teil dieser Arbeit wird ein ursprünglich von Ortiz und Stainier (1999) sowie Ortiz und Repetto (1999) entwickelter variationeller Ansatz zur Berechnung elasto-plastischer Materialantworten aufgegriffen. Dieses Verfahren beruht auf der Minimierung der Spannungsleistung und besitzt daher, wie Ortiz und Stainier (1999), Ortiz und Repetto (1999), Miehe u. a. (2002), Carstensen u. a. (2002), Hackl und Fischer (2008) sowie Mosler (2010) zeigen konnten, einige Gemeinsamkeiten mit dem v. Mises (1928) postulierten Prinzip der maximalen Dissipation. Die effiziente numerische Umsetzung dieser Variationsprinzipien ist Gegenstand der vorliegenden Arbeit. Zu diesem Zweck wird für allgemeine Anwendungsfälle eine neue numerische Parametrisierung des Variationsansatzes vorgestellt und analysiert. Es wird gezeigt, dass

¹Sein »Fehler« war, dass er insbesondere auch die Spannung als konstant angenommen hat.

die neue variationelle Implementierung ähnlich robust und effizient ist, wie der klassische Return-Mapping-Algorithmus.

Im zweiten Teil dieser Arbeit wird eine neue hybride Homogenisierungsstrategie für heterogene (elasto-plastische) Materialien aufgezeigt. Diese basiert auf dem Postulat der Energieäquivalenz. Anhand von Beispielen wird dies illustriert und verifiziert. Wie nahezu alle Homogenisierungsstrategien basiert die neue Strategie auf dem Konzept der Repräsentativen Volumenelemente (RVE), siehe beispielsweise Hill (1963) oder Hashin (1983). Bei dieser klassischen Vorgehensweise wird das RVE einem Satz unterschiedlicher Randbedingungen ausgesetzt, der die makroskopische Beanspruchung widerspiegelt. Sodann werden mit der Systemantwort des RVEs die makroskopischen Spannungen und Dehnungen durch Mittelung über das RVE gewonnen, vgl. Nemat-Nasser und Hori (1999) oder Li und Wang (2008). Mit diesen Ergebnissen ist der Übergang von der Mikro- auf die Makroskala durchgeführt.

Eine besonders allgemeine Klasse von Homogenisierungsansätzen sind die so genannten FE^2 -Ansätze. Diese Methoden wurden ursprünglich von Suquet (1985) sowie Guedes und Kikuchi (1990) vorgeschlagen; ein umfassender Überblick ist in Miehe u. a. (2002) zu finden. Bei FE^2 -Ansätzen wird die mechanische Systemantwort auf der Mikroskala numerisch mit Hilfe der Methode der Finiten Elemente berechnet. Dies führt einerseits zu einem sehr allgemeinen Rahmen, der für fast alle Materialmodelle gültig ist. Andererseits bedingt die allgemeine Anwendbarkeit einen hohen numerischen Aufwand.

Hybride Homogenisierungsmethoden erlauben es, die Vorteile von geschlossenen analytischen Lösungen mit der Effizienz und der breiten Anwendungsmöglichkeit numerischer Homogenisierungsmethoden wie der FE^2 -Methode zu kombinieren. Die in dieser Arbeit diskutierte Homogenisierungsstrategie fällt in diese Klasse. Sie eignet sich für viele verschiedene Konstitutivmodelle. Die einzige notwendige Voraussetzung für die Anwendung ist, dass das Problem variationell, d. h. auf Basis einer Energieminimierung, formuliert werden muss.

1.1 Aufbau der Arbeit

- In **Kapitel 2** werden die kinematischen Grundlagen der nichtlinearen Kontinuumsmechanik zusammengestellt. Dazu werden Eulersche und Lagrangesche Verzerrungstensoren eingeführt sowie das Konzept der Objektivität erläutert.
- **Kapitel 3** stellt wesentliche Spannungstensoren vor. Mit diesen wird die Spannungsleistung definiert, welche die zentrale Größe im Rahmen der variationellen Beschreibung elasto-plastischer Festkörper darstellt.
- In **Kapitel 4** werden die physikalischen Bilanzgleichungen eingeführt. Die Erhaltungsgleichungen werden in differentieller Form dargestellt.

- Das **Kapitel 5** beinhaltet die Erhaltungsgleichungen in einer variationellen Form. Damit werden in diesem Kapitel die Grundlagen für die variationelle Modellierung von Plastizität bei endlichen Deformationen bereitgestellt, die im folgenden Kapitel eingeführt wird.
- In **Kapitel 6** wird ein Überblick über elastische und plastische Materialmodelle bei endlichen Deformationen gegeben. Das konstitutive Modell für Plastizität wird außerdem in eine konsistente variationelle Form überführt.
- Die numerische Umsetzung der konstitutiven Modelle wird in Kapitel **Kapitel 7** beschrieben. Zunächst wird einer der am häufigsten angewandten Algorithmen, der sogenannte Return-Mapping-Algorithmus, vorgestellt. Anschließend wird ein neuer variationell konsistenter Algorithmus eingeführt, analysiert und mit dem Return-Mapping-Algorithmus verglichen.
- Das **Kapitel 8** behandelt ein neuartiges Homogenisierungsverfahren. Hierzu wird zunächst gezeigt, wie die mechanischen Größen aus den Kapiteln 2 und 3 von der Mikro- auf die Makroskala übertragen werden können. Im Anschluss daran wird ein auf einem Variationsprinzip basierendes neues Homogenisierungsverfahren vorgeschlagen und anhand von numerischen Beispielen verifiziert.
- In **Kapitel 9** werden die Ergebnisse dieser Arbeit zusammengefasst.

2 Kinematik

Dieser Abschnitt stellt die kinematischen Grundlagen der nichtlinearen Kontinuumsmechanik zusammen. Dabei werden die benötigten lagrangeschen und eulerschen Verzerrungstensoren angegeben und der Begriff der Objektivität erläutert. Für die grundlegenden Tensoren wird die spektrale Zerlegung dargestellt, welche essentiell für die folgenden Kapitel ist. Detailliertere Erläuterungen zu den vorgestellten Konzepten sind in den klassischen Lehrbüchern von Chadwick (1976), Ciralet (1988), Malvern (1969), Marsden und Hughes (1983) oder Ogden (1997) zu finden.

2.1 Beobachter und Bezugssysteme

Nach unserer Wahrnehmung finden die Phänomene, die sich in der uns umgebenden physikalischen Welt ereignen, in einem dreidimensionalen Raum \mathcal{E} zu bestimmten Zeitpunkten t statt. Die mathematische Beschreibung dieser Ereignisse erfolgt in der Mechanik mit Hilfe eines Beobachters. Dieser besitzt die Fähigkeit, physikalische Größen zu ermitteln. Dabei kann er insbesondere räumliche Distanzen messen und das Fortschreiten der Zeit bestimmen. Daher ist es einem Beobachter möglich, ein Ereignis der physikalischen Welt wahrzunehmen und einem Paar (\boldsymbol{x}, t) mit $\boldsymbol{x} \in \mathcal{E}$ und $t \in \mathbb{R}^+$ zuzuweisen.

2.2 Konfiguration

Aus mathematischer Sicht ist ein Körper eine Punktmenge, deren Elemente Materialpunkte genannt werden. Diese Punktmenge wird in eine Raumregion $\mathcal{B} \subset \mathcal{E}$ abgebildet, d. h. der Körper nimmt, wie Abb. 2.1 illustriert, einen gewissen Raum ein. Bewegt sich der Körper, so ändert sich der von ihm eingenommene Raum mit der Zeit kontinuierlich.

Die Kontinuumsmechanik setzt sich insbesondere mit den Deformationen eines Körpers infolge äußerer Belastungen auseinander. Die mathematische Beschreibung des Deformationszustandes basiert auf dem Vergleich zweier *Konfigurationen* \mathcal{B} . Hierzu wird eine willkürlich gewählte Referenzkonfiguration \mathcal{B}_0 gewählt. Diese muss während der Bewegung des Körpers nicht unbedingt eingenommen werden. Oftmals wird jedoch die undeformierte Konfiguration als Referenzkonfiguration gewählt und ihr der Zeitpunkt $t = 0$ zugeordnet.

Wird die *Deformation* als bijektive Abbildung² von der Referenz- auf die Mo-

²Die Abbildung muss nur im Inneren des Körpers bijektiv sein.

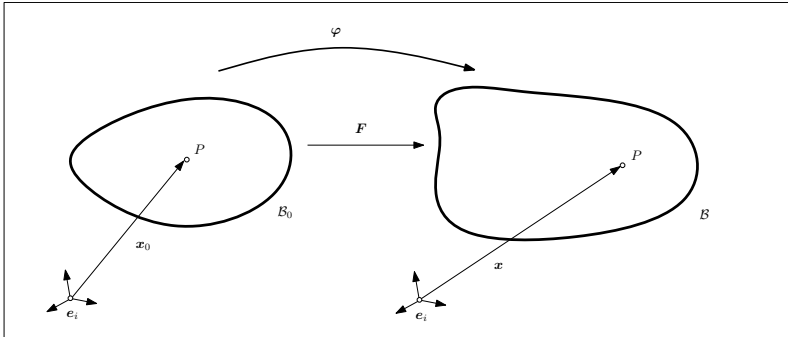


Abb. 2.1: Konfiguration

mentankonfiguration eingeführt

$$\varphi : \mathcal{B}_0 \rightarrow \mathcal{B}, \quad (2.1)$$

so gilt zu jedem beliebigen Zeitpunkt t

$$\mathbf{x} = \varphi(\mathbf{x}_0, t) \quad (2.2)$$

beziehungsweise

$$\mathbf{x}_0 = \varphi^{-1}(\mathbf{x}, t). \quad (2.3)$$

In den beiden vorstehenden Gleichungen wurde mit \mathbf{x} resp. \mathbf{x}_0 die Position eines Materialpunktes in der Momentan- bzw. Referenzkonfiguration bezeichnet. Daher gibt Gleichung (2.2) an, welche Orte \mathbf{x} die Materialpunkte zu einem Zeitpunkt t einnehmen, während Gleichung (2.3) die Information bereitstellt, welche Materialpunkte zu einem Zeitpunkt t den Raumpunkt \mathbf{x}_0 durchlaufen. Werden Probleme, wie in der Gleichung (2.2) dargestellt, als Funktion von \mathbf{x}_0 ausgedrückt, so wird dies *lagrangesche Betrachtungsweise* genannt. Die Formulierung in Abhängigkeit von \mathbf{x} wird als *eulersche Betrachtungsweise* bezeichnet, vgl. Gleichung (2.3).

Aus dem Vergleich der beiden Konfigurationen lässt sich durch

$$\mathbf{u} = \mathbf{x} - \mathbf{x}_0 \quad (2.4)$$

das Verschiebungsfeld quantifizieren.

2.3 Bewegungen von Körpern

Ausgehend von der Bewegung eines Materialpunktes nach Gleichung (2.2), bestimmt sich die Geschwindigkeit \mathbf{v} dieses Punktes in lagrangescher Betrachtungsweise durch Differentiation als

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}_0, t) = \frac{D}{Dt}(\boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}_0, t)). \quad (2.5)$$

Hierin bezeichnet das Symbol $\frac{D}{Dt}$ die *substantielle Zeitableitung*. Analog lässt sich die Beschleunigung durch

$$\mathbf{a}(\mathbf{x}_0, t) = \frac{D}{Dt}(\mathbf{v}(\mathbf{x}_0, t)) \quad (2.6)$$

ermitteln. Die Geschwindigkeit des Materialpunktes in eulerscher Betrachtungsweise berechnet sich mit

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = \frac{D}{Dt}(\boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}, t)). \quad (2.7)$$

Analog zu Gleichung (2.6) gilt für die Beschleunigung eines Materialpunktes in eulerscher Betrachtungsweise

$$\mathbf{a}(\mathbf{x}, t) = \frac{D}{Dt}(\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)) = \dot{\mathbf{v}} + (\text{grad } \mathbf{v}) \cdot \mathbf{v}. \quad (2.8)$$

Hierin bezeichnen $\text{grad } \mathbf{v} = \partial_{\mathbf{x}} \mathbf{v}$ den Gradienten von \mathbf{v} in der Momentankonfiguration. Das Symbol $(\dot{\bullet}) = \partial_t(\bullet)$ kennzeichnet die Zeitableitung.

2.4 Deformationen von Körpern

2.4.1 Deformationsgradient

Die Linearisierung der Beziehung (2.2) bezüglich der Lagrange-Koordinaten liefert

$$d\mathbf{x} = \mathbf{F} \cdot d\mathbf{x}_0, \quad (2.9)$$

wobei

$$\mathbf{F} = \frac{\partial \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}_0, t)}{\partial \mathbf{x}_0} = \text{Grad } \boldsymbol{\varphi} \quad (2.10)$$

den (*materiellen*) *Deformationsgradienten* bezeichnet. Er transformiert Linienelemente $d\mathbf{x}_0$ aus der Referenzkonfiguration in Linienelemente $d\mathbf{x}$ der Momentankonfiguration. Da der Deformationsgradient \mathbf{F} die Referenz- mit der Momentankonfiguration verknüpft, stellt er eine grundlegende kinematische

Größe dar. Im Allgemeinen ist der Deformationsgradient ein Tensor mit un-symmetrischer Koeffizientenmatrix.

Aus der Gleichung (2.9) folgt unmittelbar die inverse Beziehung

$$d\mathbf{x}_0 = \mathbf{F}^{-1} \cdot d\mathbf{x} \quad (2.11)$$

mit dem *räumlichen Deformationsgradienten* \mathbf{F}^{-1} . Da sowohl Gleichung (2.9) als auch Gleichung (2.11) stets existieren, ist \mathbf{F} ein regulärer Tensor mit

$$J = \det \mathbf{F} \neq 0. \quad (2.12)$$

Geometrisch lässt sich J als relative Volumenänderung des aktuellen Volumens, bezogen auf das Volumen der Referenzkonfiguration $\frac{dV}{dV_0}$, interpretieren. Um lokale Durchdringungen des Körpers auszuschließen, muss neben der Bedingung (2.12) die Forderung

$$J > 0 \quad (2.13)$$

gelten. Diese Bedingung ist in der Literatur unter dem Begriff der Orientierungstreue bekannt.

Wird die Verschiebung eines Materialpunktes (2.4) in Gleichung (2.10) eingesetzt, so lässt sich der Deformationsgradient \mathbf{F} durch den Verschiebungsgradienten

$$\mathbf{H} = \text{Grad } \mathbf{u} \quad (2.14)$$

in der Form

$$\mathbf{F} = \mathbf{1} + \mathbf{H} \quad (2.15)$$

ausdrücken.

2.4.2 Transformation von Flächen und Volumina

Das durch die Linienelemente $d\mathbf{x}_0$ und $d\mathbf{y}_0$ aufgespannte infinitesimale Flächenstück $dA_0 = d\mathbf{x}_0 \cdot d\mathbf{y}_0$ mit der Flächennormalen \mathbf{n}_0 wird mit Hilfe der Formel von Nanson

$$\mathbf{n} dA = J \mathbf{F}^{-T} \cdot \mathbf{n}_0 dA_0 \quad (2.16)$$

in die Momentankonfiguration überführt.

Der Zusammenhang der Volumina dV und dV_0 besteht über die Eulersche Formel mit Hilfe der Jacobischen Funktionaldeterminante $J = \det \mathbf{F}$:

$$dV = J dV_0 \quad (2.17)$$

2.4.2.1 Polare Zerlegung des Deformationsgradienten. Nach dem polaren Zerlegungstheorem von Finger (1892) lässt sich der Deformationsgradient \mathbf{F} auf zwei Arten eindeutig multiplikativ zerlegen:

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

In dieser Gleichung tritt mit \mathbf{R} ein echt orthogonaler Tensor auf, der die Starrkörperrotation beschreibt, welche den Übergang von der Referenz- in die Momentankonfiguration charakterisiert. Die durch die Deformation hervorgerufenen Verzerrungen werden durch die symmetrischen und positiv definiten Tensoren

$$\mathbf{V} = \sqrt{\mathbf{F} \cdot \mathbf{F}^T}, \quad \mathbf{U} = \sqrt{\mathbf{F}^T \cdot \mathbf{F}} \quad (2.19)$$

abgebildet. Der Tensor \mathbf{V} ist ein eulerscher Tensor und wird als *linker Strecktensor* bezeichnet, siehe Gleichung (2.18). \mathbf{U} ist hingegen ein lagrangescher Tensor, der *rechter Strecktensor* genannt wird.

2.4.2.2 Spektrale Zerlegung des Deformationsgradienten. Für den Deformationsgradienten lautet die spektrale Zerlegung

$$\mathbf{F} = \sum_{k=1}^3 \lambda_k \mathbf{n}_k \otimes \mathbf{n}_{0k}, \quad \|\mathbf{n}\| = 1, \quad \|\mathbf{n}_0\| = 1, \quad (2.20)$$

wobei λ_k die Eigenwerte und \mathbf{n}_k bzw. \mathbf{n}_{0k} die normierten Rechts- und Links-Eigenvektoren kennzeichnen.

Analog lassen sich andere Tensoren zerlegen. Beispielsweise ist

$$\mathbf{R} = \sum_{k=1}^3 \mathbf{n}_k \otimes \mathbf{n}_{0k} \quad (2.21)$$

die spektrale Darstellung des Rotationstensors.

2.4.3 Deformationstensoren

Anhand der polaren Zerlegung (2.18) ist zu erkennen, dass der Deformationsgradient \mathbf{F} auch Starrkörperrotationen beinhalten kann. Er ist daher für die Beschreibung des reinen Deformationszustandes eines Körpers \mathcal{B} wenig geeignet. Aus diesem Grund haben sich einige aus dem Deformationsgradienten abgeleitete Größen etabliert. Vier dieser Größen werden im Folgenden vorgestellt.

Wird die Längenänderung des Quadrates von Linienelementen $d\mathbf{x}_0$ oder $d\mathbf{x}$ im undeforinierten und deformierten Zustand ermittelt, so liefert das den Ausdruck

$$|d\mathbf{x}|^2 - |d\mathbf{x}_0|^2 = d\mathbf{x} \cdot d\mathbf{x} - d\mathbf{x}_0 \cdot d\mathbf{x}_0. \quad (2.22)$$

Die rechte Seite dieser Gleichung kann sowohl in der Referenz- als auch in der Momentankonfiguration ausgewertet werden.

In der Referenzkonfiguration wird die Differenz der Abstandsquadrate unter Zuhilfenahme von Gleichung (2.9) durch

$$|d\mathbf{x}|^2 - |d\mathbf{x}_0|^2 = d\mathbf{x}_0 \cdot (\mathbf{C} - \mathbf{1}) \cdot d\mathbf{x}_0 \quad (2.23)$$

bestimmt, wobei

$$\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \cdot \mathbf{F} \quad (2.24)$$

den *rechten Cauchy-Green-Tensor* kennzeichnet.

Wird das Quadrat der Linienelemente (2.22) in Bezug auf die Momentankonfiguration ausgewertet, so geht die Beziehung (2.22) mit Gleichung (2.11) hingegen in

$$|d\mathbf{x}|^2 - |d\mathbf{x}_0|^2 = d\mathbf{x} \cdot (\mathbf{1} - \mathbf{B}^{-1}) \cdot d\mathbf{x} \quad (2.25)$$

über. Der Tensor

$$\mathbf{B} = \mathbf{F} \cdot \mathbf{F}^T \quad (2.26)$$

ist als *linker Cauchy-Green-Tensor* bekannt. Beide Cauchy-Green-Tensoren sind symmetrisch und positiv definit. Sie sind bereits in Gleichung (2.19) aufgetreten und, wie dort dargestellt, mit den Strecktensoren gekoppelt. Da die Cauchy-Green-Tensoren aus den Strecktensoren berechnet werden können, enthalten sie keine Starrkörperrotationen. Jedoch haben sie die nachteilige Eigenschaft, bei Abwesenheit von Deformation nicht zu verschwinden. Aus diesem Grund werden häufig auch der *Green-Verzerrungstensor*

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2} (\mathbf{C} - \mathbf{1}) \quad (2.27)$$

und der *Almansi-Verzerrungstensor*

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2} (\mathbf{1} - \mathbf{B}^{-1}) \quad (2.28)$$

betrachtet. Da der Green-Verzerrungstensor auch in der Form

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2} (\mathbf{H}^T + \mathbf{H} + \mathbf{H}^T \cdot \mathbf{H}) \quad (2.29)$$

angeschrieben werden kann, konvergiert dieser für infinitesimale Deformationen gegen die klassischen Ingenieurverzerrungen.

2.4.4 Geschwindigkeitsgradient

Ausgehend von der substantiellen Zeitableitung des Linienelementes in der Momentankonfiguration

$$d\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{L} \cdot d\mathbf{x} \quad (2.30)$$

kann der räumliche Geschwindigkeitsgradient

$$\mathbf{L} = \frac{\partial \mathbf{v}(\mathbf{x}, t)}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial \mathbf{v}(\mathbf{x}_0, t)}{\partial \mathbf{x}_0} \cdot \frac{\partial \mathbf{x}_0}{\partial \mathbf{x}} = \dot{\mathbf{F}} \cdot \mathbf{F}^{-1} \quad (2.31)$$

eingeführt werden. Die additive Zerlegung des Geschwindigkeitsgradienten in einen symmetrischen und einen antimetrischen Teil liefert

$$\mathbf{L} = \mathbf{D} + \mathbf{W}, \quad (2.32)$$

wobei die Tensoren

$$\mathbf{D} = \text{sym } \mathbf{L} \quad \text{und} \quad \mathbf{W} = \text{skw } \mathbf{L} \quad (2.33)$$

Streckgeschwindigkeitstensor (\mathbf{D}) bzw. *Drehgeschwindigkeitstensor* (\mathbf{W}) genannt werden. Der Streckgeschwindigkeitstensor \mathbf{D} beschreibt die Änderungsgeschwindigkeit von Längen und Winkeln materieller Linienelemente des Körpers. Mit dem Drehgeschwindigkeitstensor \mathbf{W} hingegen wird die Änderung der Starrkörperrotation angegeben.

2.5 Objektivität

Wird ein Ereignis von Beobachtern in verschiedenen Inertialsystemen registriert, so lassen sich die Koordinaten dieses Ereignisses mit einer Beobachtertransformation

$$(\mathbf{x}_0, t) \rightarrow (\mathbf{x}_0^*, t^*)$$

ineinander überführen. Diese Beobachtertransformation basiert auf dem Galileischen Relativitätsprinzip, das die Gleichwertigkeit aller Inertialsysteme postuliert. Dies gewährleistet die Galilei-Transformation

$$\mathbf{x}^* = \mathbf{Q} \cdot \mathbf{x} - \mathbf{v}t - \mathbf{c}, \quad t^* = t - a. \quad (2.34)$$

In dieser Gleichung bezeichnet \mathbf{Q} einen nicht näher spezifizierten Rotations-tensor, \mathbf{v} die Relativgeschwindigkeit und \mathbf{c} die translatorische Verschiebung der Bezugssysteme der beteiligten Beobachter zueinander. Entsprechend gibt die Größe a den Zeitunterschied zweier Beobachter an. Mit dieser Transformation sind die Newtonschen Bewegungsgesetze forminvariant, haben also für alle Beobachter die gleiche Struktur.

Lagrangesche Größen	Eulersche Größen
$a_0^* = a_0$	$a^* = a$
$\mathbf{a}_0^* = \mathbf{a}_0$	$\mathbf{a}^* = \mathbf{Q} \cdot \mathbf{a}$
$\mathbf{A}_0^* = \mathbf{A}_0$	$\mathbf{A}^* = \mathbf{Q} \star \mathbf{A}$

Tab. 2.1: Transformationsbeziehungen objektiver Größen

Die Anwendung des Differentialoperators ∂_{x_0} auf Gleichung (2.34₁) führt auf

$$\frac{\partial \mathbf{x}^*}{\partial x_0} = \mathbf{Q} \cdot \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial x_0}. \quad (2.35)$$

Dies ist äquivalent zu

$$\mathbf{F}^* = \mathbf{Q} \cdot \mathbf{F}. \quad (2.36)$$

Infolge der Orthogonalität von \mathbf{Q} lautet die inverse Beziehung $\mathbf{F} = \mathbf{Q}^T \cdot \mathbf{F}^*$.

Allgemein wird ein Zweifeldtensor $\boldsymbol{\alpha}$ dann objektiv genannt, wenn er wie der Deformationsgradient nach Gleichung (2.36) transformiert. Bei anderen Tensoren ist zu unterscheiden, ob es sich um lagrangesche oder eulersche Tensoren handelt. Dann gilt mit der polaren Zerlegung des Deformationsgradienten nach Abschnitt 2.4.2.1 und Gleichung (2.36)

$$\mathbf{F}^* = \mathbf{R}^* \cdot \mathbf{U}^* \quad (2.37)$$

beziehungsweise

$$\mathbf{F}^* = \mathbf{Q} \cdot \mathbf{R} \cdot \mathbf{U}. \quad (2.38)$$

Wegen der Eindeutigkeit der polaren Zerlegung lässt sich daraus

$$\mathbf{R}^* = \mathbf{Q} \cdot \mathbf{R} \quad (2.39)$$

und

$$\mathbf{U}^* = \mathbf{U} \quad (2.40)$$

bestimmen. Andererseits liefert die polare Zerlegung den Ausdruck

$$\mathbf{V}^* = \mathbf{R}^* \cdot \mathbf{U}^* \cdot \mathbf{R}^{*T} = \mathbf{Q} \cdot (\mathbf{R} \cdot \mathbf{U} \mathbf{R}^T) \cdot \mathbf{Q}^T = \mathbf{Q} \cdot \mathbf{V} \cdot \mathbf{Q}^T. \quad (2.41)$$

Demnach transformieren objektive zweistufige eulersche Tensoren (wie beispielsweise \mathbf{V}) mit der in der letzten Gleichung aufgeführten Transformationsregel, während lagrangesche Tensoren zweiter Stufe (wie \mathbf{U}) unverändert bleiben. Einen zusammenfassenden Überblick über die Transformationsregeln tensorwertiger Größen gibt Tabelle 2.1. Darin wurde abkürzend das Rayleigh-Produkt

$$\mathbf{Q} \star \mathbf{A} = \mathbf{Q} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{Q}^T \quad (2.42)$$

eingeführt.

3 Kinetik

Ein wesentliches Konzept, das die Kontinuumsmechanik von der Mechanik einzelner Partikel unterscheidet, ist der Spannungsbegriff. Diese auf Cauchy zurückgehende Idee drückt die Interaktion des Materials in einem Punkt P mit dem ihm umgebenden Material aus.

In diesem Abschnitt werden verschiedene Spannungstensoren und die Spannungsleistung eingeführt.

3.1 Spannungsvektor und Schnittprinzip

Wird, wie in Abbildung 3.1 illustriert, durch einen Körper \mathcal{B} ein gedachter Schnitt gelegt, so werden die inneren Kräfte zu äußeren Kräften und damit einer mathematischen Beschreibung zugänglich. Damit an dem Gesamtkörper weiterhin Gleichgewicht herrscht, müssen die an gegenüberliegenden Schnittufern auftretenden Schnittkräfte (Cauchy-Spannungsvektoren) gleich groß, aber entgegengesetzt gerichtet sein:³

$$\mathbf{t}(\mathbf{x}, t, \mathbf{n}) = -\mathbf{t}(\mathbf{x}, t, -\mathbf{n}) \quad (3.1)$$

Ein grundlegendes Postulat der Kontinuumsmechanik besagt, dass der auf das Flächenelement Δa bezogene Schnittkraftvektor $\frac{\Delta \mathbf{f}_s}{\Delta a}$ (mit Ausnahme von lokalen Singularitäten) gegen einen bestimmten Grenzwert strebt, während das auf das Flächenelement Δa bezogene Schnittmoment $\frac{\Delta \mathbf{m}_s}{\Delta a}$, die Momentenspannung, verschwindet. Mithin gilt

$$\mathbf{t} = \lim_{\Delta A \rightarrow 0} \frac{\Delta \mathbf{f}_s}{\Delta A} = \frac{d\mathbf{f}_s}{dA} \quad (3.2)$$

und

$$\lim_{\Delta A \rightarrow 0} \frac{\Delta \mathbf{m}_s}{\Delta A} = \frac{d\mathbf{m}_s}{dA} = \mathbf{0}, \quad (3.3)$$

vgl. Bařar und Weichert (2000) oder Betten (1993).

³Die Gleichung (3.1) beinhaltet die auf Cauchy zurückgehende Annahme, dass die Cauchy-Spannungsvektoren nur von der Schnittnormalen \mathbf{n} (und nicht von der Krümmung der Schnittfläche) abhängig sind.

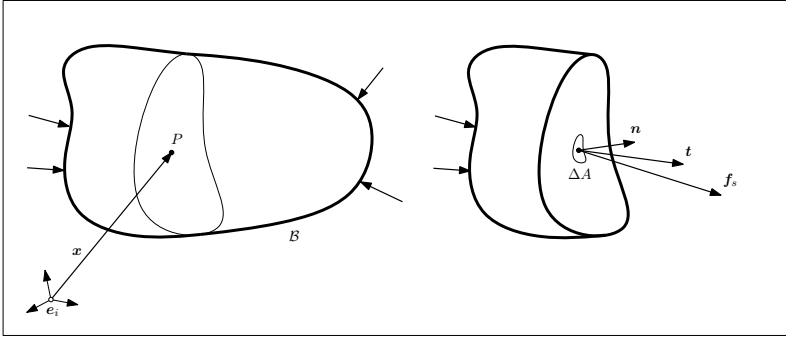


Abb. 3.1: Cauchy-Spannungsvektor

3.2 Spannungstensoren

Die grundsätzliche Existenz des Spannungstensors \mathbf{T} folgt aus dem Cauchy-Postulat $\mathbf{t} = \mathbf{t}(\mathbf{x}, t, \mathbf{n})$.⁴ Dieses Postulat führt letztendlich auf

$$\mathbf{t}(\mathbf{x}, t, \mathbf{n}) = \mathbf{T}(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}). \quad (3.4)$$

Der in Gleichung (3.4) eingeführte Tensor $\mathbf{T} = T_{ij} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j$ heißt *Cauchy-Spannungstensor*. Im Kapitel 4.3 wird gezeigt, dass der Cauchy-Spannungstensor auf Grund der Annahme (3.2) ein symmetrisches Koeffizientenschema besitzt, also $T_{ij} = T_{ji}$ gilt.

Der Cauchy-Spannungstensor, auch Tensor der wahren Spannungen genannt, ist auf der verformten Konfiguration definiert. Zusätzlich zu diesem Tensor werden im Rahmen der Materialmodellierung oftmals auch weitere Spannungstensoren verwendet.

Mit der Gleichung (2.16) und dem Theorem (3.4) folgt beispielsweise der Ausdruck $\mathbf{t}_0 dA_0 = \mathbf{P} \cdot \mathbf{n}_0 dA_0$. Der hier auftretende Tensor

$$\mathbf{P} = \mathbf{J} \mathbf{T} \cdot \mathbf{F}^{-T} \quad (3.5)$$

wird als *erster Piola-Kirchhoff-Spannungstensor* bezeichnet. Da \mathbf{P} zwei Konfigurationen miteinander verbindet, ist er ein Zweifeldtensor und besitzt aus diesem Grund in der Regel ein unsymmetrisches Koeffizientenschema P_{ij} .

Wird der Cauchy-Spannungsvektor hingegen vollständig auf die Referenzkonfiguration transformiert, entspricht dies dem *zweiten Piola-Kirchhoff-Spannungstensor*

$$\mathbf{S} = \mathbf{F}^{-1} \cdot \mathbf{P}. \quad (3.6)$$

⁴unabhängig von der Krümmung

	\mathbf{T}	$\boldsymbol{\tau}$	\mathbf{P}	\mathbf{S}
$\mathbf{T} =$	–	$J^{-1} \boldsymbol{\tau}$	$J^{-1} \mathbf{P} \cdot \mathbf{F}^T$	$J^{-1} \mathbf{F} \cdot \mathbf{S} \cdot \mathbf{F}^T$
$\boldsymbol{\tau} =$	$J \mathbf{T}$	–	$\mathbf{P} \cdot \mathbf{F}^T$	$\mathbf{F} \cdot \mathbf{S} \cdot \mathbf{F}^T$
$\mathbf{P} =$	$J \mathbf{T} \cdot \mathbf{F}^{-T}$	$\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{F}^{-T}$	–	$\mathbf{F} \cdot \mathbf{S}$
$\mathbf{S} =$	$J \mathbf{F}^{-1} \cdot \mathbf{T} \cdot \mathbf{F}^{-T}$	$\mathbf{F}^{-1} \cdot \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{F}^{-T}$	$\mathbf{F}^{-1} \cdot \mathbf{P}$	–

Tab. 3.1: Verschiedene Spannungstensen in Referenz- und Momentankonfiguration und deren Transformationsbeziehungen

Dieser besitzt ein symmetrisches Koeffizientenschema S_{ij} . Der zweite Piola-Kirchhoff-Spannungstensor hat keine physikalische Bedeutung und stellt lediglich eine rein fiktive Rechengröße dar.

Ergänzend ist der *Kirchhoff-Spannungstensor* genannt. Dieser ist durch

$$\boldsymbol{\tau} = J \mathbf{T} \quad (3.7)$$

definiert.

3.3 Spannungsleistung

Die Spannungsleistung ist im verformten Volumen durch

$$\bar{\mathcal{E}} = \int_{\mathcal{B}} \mathbf{T} : \mathbf{D} \, dV \quad (3.8)$$

definiert. In Referenz- und Momentankonfiguration ist der Betrag der Spannungsleistung identisch. Daher gilt im unverformten Volumen

$$\bar{\mathcal{E}} = \int_{\mathcal{B}_0} \boldsymbol{\tau} : \mathbf{D} \, dV_0 = \int_{\mathcal{B}_0} \mathbf{P} : \dot{\mathbf{F}} \, dV_0 = \int_{\mathcal{B}_0} \mathbf{S} : \dot{\mathbf{E}} \, dV_0. \quad (3.9)$$

Die Gleichung (3.9) kann mit den Transformationsbeziehungen (2.9) und (2.11) hergeleitet werden. Die Spannungsleistung spielt bei der Herleitung des Homogenisierungsansatzes in Kapitel 8 eine zentrale Rolle.

4 Erhaltungssätze

Auf Basis der Ausführungen der vorangegangenen Kapitel werden in diesem Abschnitt die Erhaltungsgleichungen in bilanzierender Form aufgestellt. Abgeschlossen wird dieses Kapitel durch Erläuterungen zum zweiten Hauptsatz der Thermodynamik.

4.1 Masse

Die Eigenschaft eines Körpers \mathcal{B} , einen gewissen Raum einzunehmen, spiegelt sich in der Existenz einer nicht-negativen stetigen Funktion m , der Masse des Körpers, wider. Die Masse des Körpers \mathcal{B} ist eine intrinsische, von der Bewegung des Körpers \mathcal{B} unabhängige und deshalb objektive Größe. Sie ist die Ursache der Schwere und Trägheit. Da die Masse eine additive Größe ist, gilt

$$m = \int_{\mathcal{B}} dm. \quad (4.1)$$

Der Massenerhaltungssatz lautet

$$\boxed{\frac{Dm}{Dt} = 0}. \quad (4.2)$$

Das Massenelement ist mit dem Volumenelement über

$$\varrho(\mathbf{x}, t) = \lim_{\Delta V \rightarrow 0} \frac{\Delta m}{\Delta V} = \frac{dm}{dV} \quad (4.3)$$

gekoppelt. Das Symbol ϱ kennzeichnet ein Skalarfeld der Momentankonfiguration. Es wird *Dichte* genannt. Unter Berücksichtigung von Gleichung (2.17) lässt sich die Dichte in der Referenzkonfiguration zu

$$\varrho_0 = J \varrho \quad (4.4)$$

bestimmen. Die substantielle Zeitableitung der Gleichung (4.2) führt auf den Massenerhaltungssatz in der Form

$$\int_{\mathcal{B}} (\dot{\varrho} + \mathbf{v} \cdot \operatorname{div} \varrho) dV = 0. \quad (4.5)$$

Da die Gleichung (4.5) auch für beliebige Teilkörper erfüllt sein muss, folgt durch Lokalisierung

$$\dot{\varrho} + \mathbf{v} \cdot \operatorname{div} \varrho = 0 \quad \text{in } \mathcal{B}. \quad (4.6)$$

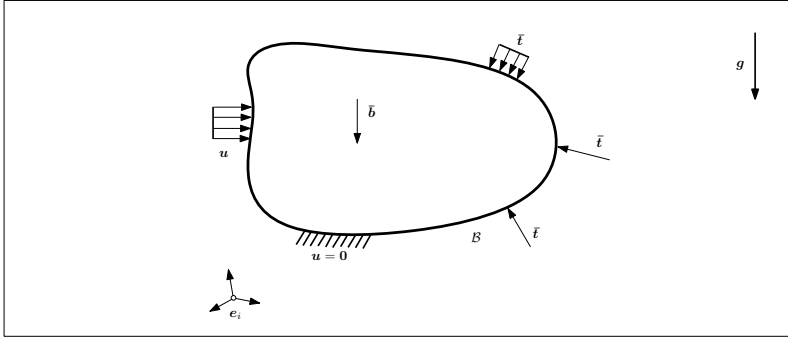


Abb. 4.1: Körper mit äußeren Kräften

4.2 Impuls

Der Impuls ist als

$$\mathbf{p} = \int_{\mathcal{B}} \dot{\mathbf{u}} \, dm \quad (4.7)$$

definiert. Das zweite Newtonsche Axiom fordert, dass die materielle Zeitableitung des Impulses gleich (der Summe) der äußeren Kräfte \mathbf{f} ist, mithin also

$$\boxed{\frac{D\mathbf{p}}{Dt} = \mathbf{f}} \quad (4.8)$$

gilt. In Abb. 4.1 ist beispielhaft ein durch äußere Kräfte beanspruchter Körper dargestellt. Diese Kräfte setzen sich aus den volumenhaft verteilten Kräften $\varrho \bar{\mathbf{b}}$ und den flächenhaft angreifenden Kräften $\bar{\mathbf{t}}$ zusammen. Somit lassen sich die äußeren Kräfte insgesamt zu

$$\mathbf{f} = \int_{\mathcal{B}} \bar{\mathbf{b}} \, dm + \int_{\partial\mathcal{B}} \bar{\mathbf{t}} \, dA \quad (4.9)$$

berechnen. Die äußeren Kräfte \mathbf{f} sind gegenüber einer Beobachtertransformation objektiv, vgl. Tabelle 2.1. Dann folgt aus Gleichung (4.8) und der Beziehung (4.3) der Impulserhaltungssatz in eulerscher Formulierung

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{B}} \varrho \dot{\mathbf{u}} \, dV = \int_{\mathcal{B}} \varrho \bar{\mathbf{b}} \, dV + \int_{\partial\mathcal{B}} \bar{\mathbf{t}} \, dA. \quad (4.10)$$

Für die Zeitableitung des Impulses ergibt sich hieraus der Ausdruck

$$\int_{\mathcal{B}} \varrho \ddot{\mathbf{u}} \, dV = \int_{\mathcal{B}} (\operatorname{div} \mathbf{T}^T + \varrho \bar{\mathbf{b}}) \, dV. \quad (4.11)$$

Daher führt der Impulserhaltungssatz in der Momentankonfiguration auf

$$\int_{\mathcal{B}} (\operatorname{div} \mathbf{T}^T + \varrho \bar{\mathbf{b}} - \varrho \ddot{\mathbf{u}}) \, dV = \mathbf{0}. \quad (4.12)$$

Da diese Gleichung auch für Teilkörper erfüllt sein muss, gilt

$$\operatorname{div} \mathbf{T}^T + \varrho \bar{\mathbf{b}} = \varrho \ddot{\mathbf{u}}. \quad (4.13)$$

Geschlossen werden die Probleme (4.12) bzw. (4.13) mit den

- wesentlichen Randbedingungen $\bar{\mathbf{u}}(t)$ auf $\partial\mathcal{B}_u$,
- natürlichen Randbedingungen $\bar{\mathbf{t}}(t) = \mathbf{T} \cdot \mathbf{n}$ auf $\partial\mathcal{B}_\sigma$

sowie den

- Anfangsbedingungen $(\mathbf{x}_{(0)}, \dot{\mathbf{x}}_{(0)}) = (\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}})|_{t=0}$.

4.3 Drehimpuls

Bezüglich eines beliebigen Bezugspunktes \mathbf{x}_A ist der Drehimpuls eines deformierbaren Körpers durch das Integral

$$\mathbf{l} = \int_{\mathcal{B}} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_A) \times d\mathbf{p} \quad (4.14)$$

definiert. Analog zum Impulserhaltungssatz wird der Drehimpulserhaltungssatz postuliert:

$$\begin{aligned} \frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{B}} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_A) \times \varrho \dot{\mathbf{u}} \, dV = \\ \int_{\mathcal{B}} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_A) \times \varrho \bar{\mathbf{b}} \, dV + \int_{\partial\mathcal{B}} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_A) \times \bar{\mathbf{t}} \, dA \end{aligned} \quad (4.15)$$

Diese Gleichung gilt in dieser Formulierung nur in Inertialsystemen. Jedoch ist die Gleichung (4.15) in beliebigen Inertialsystemen identisch. Das Einsetzen aller vorstehenden Erhaltungsgleichungen führt auf

$$\int_{\mathcal{B}} \epsilon_{ijk} T_{ij} \mathbf{e}_k \, dV = 0_k, \quad (4.16)$$

wobei ϵ_{ijk} das Levi-Civita-Permutationssymbol kennzeichnet. Die Ausführung der Permutationen liefert die Aussage

$$\mathbf{T} = \mathbf{T}^T. \quad (4.17)$$

Der Cauchy-Spannungstensor \mathbf{T} weist also ein symmetrisches Koeffizientenschema auf.

4.4 Energie

Die Energiebilanz lautet

$$\boxed{\frac{D}{Dt}(\mathcal{K} + \mathcal{U}) = \frac{d\mathcal{A}}{dt} + \frac{d\mathcal{Q}}{dt}}. \quad (4.18)$$

In der Bilanz (4.18) ist

- \mathcal{K} die in einem Körper \mathcal{B} gespeicherte kinetische Energie

$$\mathcal{K}(\dot{\mathbf{u}}) = \frac{1}{2} \dot{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{p} = \frac{1}{2} \int_{\mathcal{B}} \dot{\mathbf{u}}^2 \, dm, \quad (4.19)$$

- \mathcal{U} die in einem Körper \mathcal{B} gespeicherte innere Energie

$$\mathcal{U}(\mathbf{u}, s) = \int_{\mathcal{B}} e \, dm, \quad (4.20)$$

- $\frac{d\mathcal{A}}{dt}$ die Leistung der eingepprägten äußeren Kräfte (4.9)

$$\frac{d\mathcal{A}}{dt} = \dot{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{f} = \int_{\mathcal{B}} \dot{\mathbf{u}} \cdot \bar{\mathbf{b}} \, dm + \int_{\partial\mathcal{B}} \dot{\mathbf{u}} \cdot \bar{\mathbf{t}} \, dA, \quad (4.21)$$

- $\frac{d\mathcal{Q}}{dt}$ der Wärmestrom am betrachteten Teilkörper

$$\frac{d\mathcal{Q}}{dt} = \int_{\mathcal{B}} r \, dm - \int_{\partial\mathcal{B}} \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} \, dA. \quad (4.22)$$

Mit dem Symbol \bar{d} der beiden letztgenannten Größen soll ausgedrückt werden, dass diese in der Regel keine vollständigen Differentiale bilden. Die Variable s in Gleichung (4.20) kennzeichnet die Entropie und e die spezifische innere Energie. Diese Größe wird im Abschnitt 4.5 eingeführt und näher erläutert.

Mit dem Gaußschen Satz und der Impulserhaltung (4.12) lässt sich die Leistung der äußeren Kräfte zu dem Ausdruck

$$\frac{\bar{d}\mathcal{A}}{dt} = \int_{\mathcal{B}} \left(\frac{d}{dt} \frac{1}{2} \varrho \dot{\mathbf{u}}^2 + \mathbf{T} : \mathbf{D} \right) dV. \quad (4.23)$$

umformen, wobei die Symmetrie des Cauchy-Spannungstensors ausgenutzt wurde.

Für den Wärmestrom am Massenelement gilt Gleichung (4.22). In diesem Ausdruck ist $-\mathbf{q} \cdot \mathbf{n}$ der nach außen gerichtete Wärmestrom an der Oberfläche des Massenelements dm . Die im Inneren des Körpers produzierte Wärme wird durch den Quellterm r bestimmt.

Mit diesen Ausdrücken führt die Energiebilanz auf

$$\int_{\mathcal{B}} \dot{e} \varrho dV = \int_{\mathcal{B}} (\mathbf{T} : \mathbf{D} + r \varrho - \operatorname{div} \mathbf{q}) dV. \quad (4.24)$$

Die Lokalisierung der Gleichung (4.24) führt auf den äquivalenten Erhaltungssatz

$$\dot{e} \varrho + \operatorname{div} \mathbf{q} = \mathbf{T} : \mathbf{D} + r \varrho \quad (4.25)$$

in lokaler Form.

4.5 Entropie

Die Entropie s ist die zur absoluten Temperatur T energetisch konjugierte Größe. Der zweite Hauptsatz der Thermodynamik fordert, dass die Entropiesteigerung in einem Körper \mathcal{B} größer oder gleich der Summe aus Entropieeintrag und -produktion ist:

$$\boxed{\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{B}} s dm \geq \int_{\mathcal{B}} \frac{r}{T} dm - \int_{\partial \mathcal{B}} \frac{\mathbf{q}}{T} \cdot \mathbf{n} dA} \quad (4.26)$$

Mit Hilfe des Gaußschen Satzes lässt sich dies in die Form

$$\varrho \dot{s} - \varrho \frac{r}{T} + \operatorname{div} \frac{\mathbf{q}}{T} \geq 0 \quad (4.27)$$

überführen. Die Auswertung des letzten Summanden liefert

$$\varrho T \dot{s} - \varrho r + \operatorname{div} \mathbf{q} - \frac{1}{T} \mathbf{q} \cdot \operatorname{grad} T \geq 0. \quad (4.28)$$

Aus dieser Ungleichung lässt sich zusammen mit dem ersten Hauptsatz der Thermodynamik (4.25) der Ausdruck

$$\mathcal{D} = \mathbf{T} : \mathbf{D} - \varrho (\dot{e} - T \dot{s}) - \frac{1}{T} \mathbf{q} \cdot \operatorname{grad} T \geq 0 \quad (4.29)$$

ableiten. Die Größe \mathcal{D} wird *Dissipation* genannt. In Ungleichung (4.29) beschreiben die ersten beiden Terme die Änderung der Entropie des Körpers infolge innerer Prozesse. Der letzte Term gibt die durch Konduktion hervorgerufene Änderung der Entropie an. Hinreichende Bedingungen, um die Ungleichung (4.29) zu erfüllen, bilden

$$\mathcal{D}_{\text{int}} = \mathbf{T} : \mathbf{D} - \varrho (\dot{e} - T \dot{s}) \geq 0, \quad (4.30)$$

$$\mathcal{D}_{\text{kond}} = -\frac{1}{T} \mathbf{q} \cdot \operatorname{grad} T \geq 0. \quad (4.31)$$

Mit der Definition der Helmholtzenergie⁵

$$\psi(\mathbf{u}, T) = e(\mathbf{u}, s) - T s \quad (4.32)$$

und der daraus resultierenden Gleichung

$$\dot{\psi} = \dot{e} - \dot{T} s - T \dot{s} \quad (4.33)$$

kann die Ungleichung (4.30) auch in die Form

$$\mathcal{D}_{\text{int}} = \mathbf{T} : \mathbf{D} - \varrho (\dot{\psi} + \dot{T} s) \geq 0 \quad (4.34)$$

überführt werden. Bei isothermen Prozessen führt dies schließlich auf

$$\mathcal{D}_{\text{int}} = \mathbf{T} : \mathbf{D} - \dot{\Psi} \geq 0, \quad (4.35)$$

wobei die Abkürzung

$$\Psi = \varrho \psi \quad (4.36)$$

eingeführt wurde. Die Definition (4.36) wird in dieser Arbeit als *freie Helmholtzenergie* bezeichnet.

⁵Die Helmholtzenergie ψ und die innere Energie e sind durch eine Legendre-Transformation miteinander verknüpft.

5 Variationsprinzipien

In diesem Kapitel werden Variationsprinzipien der Kontinuumsmechanik vorgestellt. Diese stellen einen Rahmen bereit, in welchem viele Probleme sehr elegant und numerisch effizient gelöst werden können. Darüber hinaus erleichtern sie oftmals die mathematischen Beweise für die Existenz von Lösungen.

5.1 Das Prinzip der virtuellen Arbeit

Das Prinzip der virtuellen Arbeit fordert für einen Körper, dass die Bedingung

$$\int \delta \mathbf{v} \cdot d\mathbf{f} = 0 \quad (5.1)$$

erfüllt ist, wobei $\delta \mathbf{v}$ beliebige, infinitesimal kleine Testfunktionen bezeichnen. Dabei sind die Testfunktionen $\delta \mathbf{v}$ aus einem Funktionenraum zu wählen, der im Einklang mit allen kinematischen Nebenbedingungen steht, vgl. Szabó (2001). Werden die Testfunktionen $\delta \mathbf{v}$ als zu den kraftartigen Größen $d\mathbf{f}$ energetisch konjugierte Größen interpretiert, lässt sich die Gleichung (5.1) physikalisch erklären. Dann besitzt die Gleichung (5.1) die Dimension der Arbeit; dies motiviert den Namen des Prinzips. So lässt sich die Gleichung (5.1) abkürzend als

$$\delta \mathcal{A} = 0 \quad (5.2)$$

schreiben.

Im Rahmen der Kontinuumsmechanik können für die kraftartigen Größen $d\mathbf{f}$ im Inneren des Körpers die Impulserhaltungsgleichung (4.12) und auf dem Rand des Körpers die äußeren Lasten (natürlichen Randbedingungen) eingesetzt werden. Die Gleichung (5.2) führt dann in der Momentankonfiguration auf

$$\delta \mathcal{A} = \int_{\mathcal{B}} \delta \mathbf{v} \cdot (\operatorname{div} \mathbf{T} + \rho \bar{\mathbf{b}} - \rho \ddot{\mathbf{u}}) \, dV + \int_{\partial \mathcal{B}} \delta \mathbf{v} \cdot (\bar{\mathbf{t}} - \mathbf{T} \cdot \mathbf{n}) \, dA = 0. \quad (5.3)$$

Damit diese Bedingung erfüllt werden kann, müssen aufgrund des Fundamentalsatzes der Variationsrechnung die Klammerausdrücke unabhängig voneinander verschwinden. Die Beziehung (5.3) liefert dann die Euler-Lagrange-Differentialgleichungen, die sich aus der Impulserhaltungsgleichung und den natürlichen Randbedingungen zusammensetzt.

5.2 Das Prinzip von Hamilton

Das *Prinzip von Hamilton* postuliert, dass die *Wirkung* genannte Größe

$$\mathcal{S}(\mathbf{u}, \dot{\mathbf{u}}) = \int_{t_1}^{t_2} (\mathcal{A}^{(e)}(\mathbf{u}, t) + \mathcal{K}(\dot{\mathbf{u}}, t)) \, dt \quad (5.4)$$

stationär ist, also

$$\boxed{\delta \mathcal{S}(\mathbf{u}, \dot{\mathbf{u}}) = 0} \quad (5.5)$$

gilt, vgl. Szabó (2001). Mit dem Prinzip von Hamilton lassen sich die Bewegungsgleichungen variationell herleiten, wobei die Nebenbedingungen

$$\delta \mathbf{u}(t_1) = \mathbf{0}, \quad \delta \mathbf{u}(t_2) = \mathbf{0} \quad (5.6)$$

zu berücksichtigen sind. Der in Gleichung (5.4) angegebene Integrand gilt in dieser Form nur für konservative Systeme mit reversiblen Materialverhalten.

Die Variablen $\mathcal{A}^{(e)}$ und \mathcal{K} in der Definition (5.4) bezeichnen die Arbeit der eingepprägten Kräfte bzw. die kinetische Energie, Gleichung (4.19). Die Arbeit der eingepprägten Kräfte wird durch den Ausdruck

$$\mathcal{A}^{(e)} = \mathcal{A}_V^{(e)} + \mathcal{A}_F^{(e)} - \mathcal{W} \quad (5.7)$$

bestimmt. Hierbei ist

- $\mathcal{A}_V^{(e)}$ die Arbeit der volumenhaft eingepprägten Kräfte

$$\mathcal{A}_V^{(e)} = \int_{\mathcal{B}} \mathbf{u} \cdot \bar{\mathbf{b}} \, dm, \quad (5.8)$$

- $\mathcal{A}_F^{(e)}$ die Arbeit der flächenhaft eingepprägten Kräfte

$$\mathcal{A}_F^{(e)} = \int_{\partial \mathcal{B}} \mathbf{u} \cdot \bar{\mathbf{t}} \, dA, \quad (5.9)$$

- \mathcal{W} die Arbeit der Formänderungskräfte⁶

$$\mathcal{W} = \int_{\mathcal{B}} \psi(\mathbf{F}(\mathbf{u})) \, dm. \quad (5.10)$$

⁶ Die Arbeit der Formänderungskräfte \mathcal{W} kann nur unter der Annahme reversiblen Materialverhaltens in dieser Form, d. h. als Integral über die Helmholtzenergie ψ , angegeben werden.

Mit diesen Größen geht die Wirkung \mathcal{S} eines deformierbaren Körpers \mathcal{B} in

$$\mathcal{S} = \int_{t_1}^{t_2} \int_{\mathcal{B}} (-\psi + \mathbf{u} \cdot \bar{\mathbf{b}} + \frac{1}{2} \dot{\mathbf{u}}^2) dm dt + \int_{t_1}^{t_2} \int_{\partial \mathcal{B}} \mathbf{u} \cdot \bar{\mathbf{t}} dA dt \quad (5.11)$$

über. In der Referenzkonfiguration führt die Variation dieser Gleichung auf

$$\begin{aligned} \delta \mathcal{S} = & \int_{t_1}^{t_2} \int_{\mathcal{B}_0} \left[-\delta \mathbf{F} : \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{F}} + \varrho_0 \delta \mathbf{u} \cdot \bar{\mathbf{b}}_0 - \varrho_0 \delta \mathbf{u} \cdot \ddot{\mathbf{u}} \right] dV_0 dt \\ & + \int_{\mathcal{B}_0} \varrho_0 \delta \mathbf{u} \cdot \dot{\mathbf{u}} dV_0 \Big|_{t_1}^{t_2} + \int_{t_1}^{t_2} \int_{\partial \mathcal{B}_0} \delta \mathbf{u} \cdot \bar{\mathbf{t}}_0 dA_0 dt = 0. \end{aligned} \quad (5.12)$$

Da die Gleichung (5.12) für beliebige Zeitpunkte t gilt, entfällt das Zeitintegral. Unter Berücksichtigung der Nebenbedingungen (5.6) lässt sich die Gleichung (5.12) schließlich in

$$\int_{\mathcal{B}} \delta \mathbf{u} \cdot (\operatorname{div} \mathbf{T} + \varrho \bar{\mathbf{b}} - \varrho \ddot{\mathbf{u}}) dV + \int_{\partial \mathcal{B}} \delta \mathbf{u} \cdot (\bar{\mathbf{t}} - \mathbf{T} \cdot \mathbf{n}) dA = 0 \quad (5.13)$$

überführen. Dieses Ergebnis ist äquivalent zu Gleichung (5.3). Das Prinzip von Hamilton (und das Prinzip der virtuellen Arbeit) entspricht somit den Bewegungsgleichungen und den natürlichen Randbedingungen $\bar{\mathbf{t}}$.

Das Prinzip der virtuellen Verschiebungen bzw. das Extremalprinzip von Hamilton stellt die Grundlage der Finiten-Elemente-Methode dar. Im Rahmen der Herleitung der Finiten-Elemente-Methode wird die Gleichung (5.13) oftmals in einer modifizierten Form angegeben. Diese lässt sich aus der Gleichung (5.13) mit den drei Substitutionen $\delta \mathbf{F} = \operatorname{Grad} \delta \mathbf{u}$, $\partial_{\mathbf{F}} \Psi = \mathbf{P}$ und $\varrho_0 dV_0 = dm$ finden:

$$\begin{aligned} - \int_{\mathcal{B}_0} (\operatorname{Grad} \delta \mathbf{u}) : \mathbf{P} dV_0 \\ + \int_{\mathcal{B}_0} \delta \mathbf{u} \cdot \bar{\mathbf{b}}_0 dm + \int_{\partial \mathcal{B}_0} \delta \mathbf{u} \cdot \bar{\mathbf{t}}_0 dA_0 - \int_{\mathcal{B}_0} \delta \mathbf{u} \cdot \ddot{\mathbf{u}} dm = 0 \end{aligned} \quad (5.14)$$

In dieser Beziehung ist der erste Term

$$\delta \mathcal{W} = \int_{\mathcal{B}_0} (\operatorname{Grad} \delta \mathbf{u}) : \mathbf{P} dV_0 \quad (5.15)$$

die *virtuelle innere Arbeit*. Der zweite und der dritte Term von Gleichung (5.14) werden unter dem Begriff der *virtuellen äußeren Arbeit* zusammengefasst:

$$\delta \mathcal{A}_{\text{ext}} = \int_{\mathcal{B}_0} \delta \mathbf{u} \cdot \bar{\mathbf{b}}_0 \, dm + \int_{\partial \mathcal{B}_0} \delta \mathbf{u} \cdot \bar{\mathbf{t}}_0 \, dA_0 = \delta \mathbf{u} \cdot \mathbf{f}_0 \quad (5.16)$$

Der letzte Summand in (5.14) steht für die *virtuelle kinetische Arbeit*

$$\delta \mathcal{A}_{\text{kin}} = \int_{\mathcal{B}} \delta \mathbf{u} \cdot \ddot{\mathbf{u}} \, dm \quad (5.17)$$

und quantifiziert die von der d'Alembertschen Scheinkraft verrichtete Arbeit. Mit diesen Definitionen lässt sich das Gleichungssystem (5.14) zu

$$\delta \mathcal{A} = \delta \mathcal{A}_{\text{ext}} - \delta \mathcal{A}_{\text{kin}} - \delta \mathcal{W} = 0 \quad (5.18)$$

zusammenfassen. Damit steht das Gleichungssystem (5.18) zur Verfügung, das den Ausgangspunkt für die Implementierung eines Finite-Elemente-Programms darstellt. Da im Rahmen dieser Arbeit nicht in den Programmcode eines Finite-Elemente-Programms eingegriffen wurde, wird die konkrete technische Umsetzung der vorstehenden Gleichungen nicht weiter erläutert und stattdessen auf die Fachliteratur, wie beispielsweise Belytschko (2000), Bonet und Wood (2008) oder Zienkiewicz und Taylor (1989), verwiesen.

6 Konstitutive Beziehungen

Dieses Kapitel beinhaltet die mathematische Modellierung elastischer und plastischer Materialien. Das konstitutive Modell für Plastizität bei endlichen Deformationen wird zudem in eine konsistente variationelle Form überführt.

6.1 Konstitutive Modelle für elastische Materialien

Als *Cauchy-elastisch* wird ein Material bezeichnet, dessen Spannungszustand im betrachteten Punkt ausschließlich von dem momentanen Deformationszustand in diesem Punkt abhängig ist. *Green-elastisches* (oder hyperelastisches) Materialverhalten zeichnet sich zudem durch die Existenz eines massenbezogenen elastischen Potentials ψ aus. Wegen der Potentialeigenschaft ist Green-elastisches Materialverhalten grundsätzlich konservativ und die infolge einer Belastung verrichtete Arbeit ist vom Lastpfad unabhängig. Mit Hilfe eines solchen Potentials lässt sich die in einem Körper \mathcal{B} elastisch gespeicherte Energie durch das Integral

$$\mathcal{W} = \int_{\mathcal{B}} \psi \, dm \quad (5.10)$$

bestimmen. Die Zeitableitung dieser Gleichung führt auf

$$\dot{\mathcal{W}} = \int_{\mathcal{B}} \dot{\psi} \, dm = \int_{\mathcal{B}} \dot{\Psi} \, dV. \quad (6.1)$$

Aus dem zweiten Hauptsatz der Thermodynamik (4.35) folgt für reversible Prozesse in der Momentankonfiguration

$$\dot{\mathcal{W}} = \int_{\mathcal{B}} \mathbf{T} : \mathbf{D} \, dV. \quad (6.2)$$

Daher handelt es sich bei $\dot{\mathcal{W}}$ um die Spannungsleistung (3.8). Wird die freie Helmholtzenergie Ψ beispielsweise in Abhängigkeit des Green-Verzerrungstensors \mathbf{E} ausgedrückt, so liefert die Zeitableitung

$$\dot{\mathcal{W}} = \int_{\mathcal{B}_0} \dot{\Psi}(\mathbf{E}) \, dV_0 = \int_{\mathcal{B}_0} \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{E}} : \dot{\mathbf{E}} \, dV_0. \quad (6.3)$$

Der Vergleich mit Gleichung (3.9₃) zeigt, dass der zweite Piola-Kirchhoff-Spannungstensor durch partielle Differentiation aus der freien Helmholtzenergie folgt. Es gilt

$$\mathbf{S} = \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{E}} = 2 \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{C}}. \quad (6.4)$$

Analog lässt sich zeigen, dass der erste Piola-Kirchhoff-Spannungstensor durch die partielle Differentiation nach dem Deformationsgradienten, also

$$\mathbf{P} = \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{F}}, \quad (6.5)$$

aus der freien Helmholtzenergie abgeleitet werden.

Die Linearisierung der Piola-Kirchhoff-Spannungstensoren führt auf die beiden Ausdrücke

$$d\mathbf{P} = \mathbf{A} : d\mathbf{F} \quad (6.6)$$

und

$$d\mathbf{S} = \mathbf{C} : d\mathbf{E}, \quad (6.7)$$

wobei die kontinuumsmechanischen Tangentenmoduli

$$\mathbf{A} = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial (\mathbf{F} \otimes \mathbf{F})} \quad (6.8)$$

sowie

$$\mathbf{C} = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial (\mathbf{E} \otimes \mathbf{E})} = 4 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial (\mathbf{C} \otimes \mathbf{C})} \quad (6.9)$$

eingeführt worden sind. Folglich besitzen diese vierstufigen Tensoren die Symmetrien

$$[\mathbf{A}]_{ijkl} = [\mathbf{A}]_{klij} \quad (6.10)$$

und

$$[\mathbf{C}]_{ijkl} = [\mathbf{C}]_{ijlk} = [\mathbf{C}]_{klij} = [\mathbf{C}]_{klji}. \quad (6.11)$$

Ist das Materialverhalten isotrop, so kann die Helmholtzenergie als eine Funktion der drei Invarianten I_1 , I_2 und I_3 angegeben werden, vgl. Gleichungen (A.39–A.41). Beispielsweise wird in Ciralet (1988) die freie Helmholtzenergie

$$\Psi = K_1 (I_1 - 3) + K_2 (I_2 - 3) + \frac{K}{2} f(I_3) \quad (6.12)$$

mit den Materialparametern K_1 , K_2 und K betrachtet.

Im Rahmen dieser Arbeit werden zwei verschiedene hyperelastische Materialmodelle implementiert. Das erste dieser Modelle ist durch die Gleichung

$$\Psi = \frac{\mu}{2} \left(J^{-\frac{2}{3}} \operatorname{tr} \mathbf{C} - 3 \right) + \frac{K}{2} \left(\frac{1}{2} (J^2 - 1) - \ln J \right) \quad (6.13)$$

definiert. Hier bezeichnen die Materialparameter μ und K den Schub- bzw. Kompressionsmodul. Eine Erweiterung für orthotrope Materialmodelle ist durch die Energie

$$\begin{aligned} \Psi = & \frac{\mu}{2} \left(J^{-\frac{2}{3}} \operatorname{tr} \mathbf{C} - 3 \right) + \frac{K}{2} \left(\frac{1}{2} (J^2 - 1) - \ln J \right) \\ & + \frac{1}{2} (\alpha_1 J_4^2 + \alpha_2 J_6^2) + 2 (\alpha_3 J_5 + \alpha_4 J_7) \\ & + \alpha_5 J_4 J_1 + \alpha_6 J_6 J_1 + \alpha_7 J_4 J_6 \end{aligned} \quad (6.14)$$

gegeben, vgl. Löblein (2004). Die Deformation wird hierfür mit Hilfe folgender (Pseudo-) Invarianten des Green-Verzerrungstensors ausgedrückt:

$$\begin{aligned} J_1 &= \mathbf{E} : \mathbf{1} & J_2 &= \mathbf{E}^2 : \mathbf{1} \\ J_4 &= \mathbf{E} : \mathbf{M}^{(1)} & J_5 &= \mathbf{E}^2 : \mathbf{M}^{(1)} \\ J_6 &= \mathbf{E} : \mathbf{M}^{(2)} & J_7 &= \mathbf{E}^2 : \mathbf{M}^{(2)} \end{aligned} \quad (6.15)$$

Die Strukturtenoren

$$\mathbf{M}^{(i)} = \mathbf{m}_i \otimes \mathbf{m}_i \quad i = \{1, 2\} \quad (6.16)$$

erfassen die richtungsabhängige Materialantwort, wobei die Basisvektoren \mathbf{m}_i mit Euler-Winkeln aus kartesischen Basisvektoren durch die Transformation

$$\mathbf{m}_i = \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{R}(\varphi, \vartheta, \chi) \quad i = \{1, 2\} \quad (6.17)$$

abgeleitet sind. Für den Rotationstensor in Definition (6.17) wird der Ansatz

$$\mathbf{R}(\varphi, \vartheta, \chi) = \mathbf{R}_1(\varphi) \cdot \mathbf{R}_2(\vartheta) \cdot \mathbf{R}_3(\chi) \quad (6.18)$$

mit

$$\mathbf{R}_1(\varphi) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \varphi & \sin \varphi \\ 0 & -\sin \varphi & \cos \varphi \end{pmatrix}, \quad (6.19)$$

$$\mathbf{R}_2(\vartheta) = \begin{pmatrix} \cos \vartheta & 0 & \sin \vartheta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \vartheta & 0 & \cos \vartheta \end{pmatrix}, \quad (6.20)$$

$$\mathbf{R}_3(\chi) = \begin{pmatrix} \cos \chi & \sin \chi & 0 \\ -\sin \chi & \cos \chi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (6.21)$$

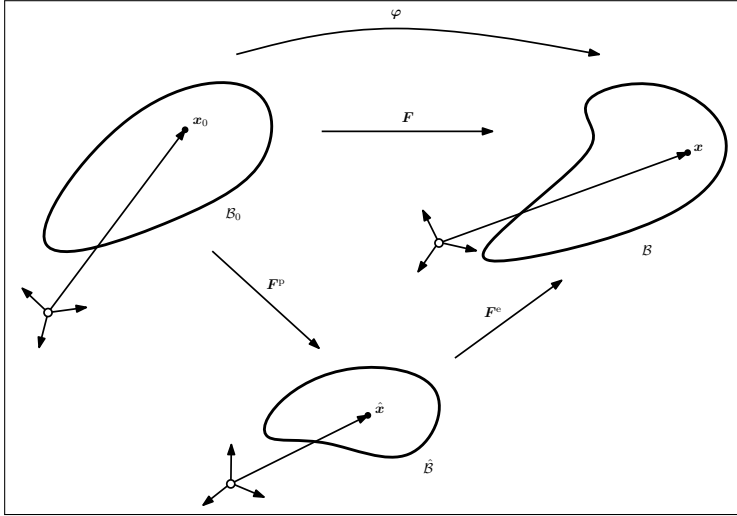


Abb. 6.1: Referenz-, Momentan- und lokal inkompatible Zwischenkonfiguration

gewählt, siehe beispielsweise Bronstein (2006). Die Winkel $(\varphi, \vartheta, \chi)$ dienen der Beschreibung der Anisotropie und sind insofern als zusätzliche Materialparameter anzusehen.

6.2 Konstitutive Modelle für plastische Materialien

Der erste Unterabschnitt dieses Kapitels führt eine wesentliche kinematische Annahme ein, mit deren Hilfe sich plastisches Materialverhalten beschreiben lässt. Hierzu wird eine fiktive Zwischenkonfiguration definiert und mit dieser kinematischen Annahme ein geeigneter konstitutiver Rahmen skizziert.

6.2.1 Kinematik

Die essentielle Eigenschaft von plastischem Materialverhalten ist die teilweise Nicht-Reversibilität der Deformation. Um diese Eigenschaft mathematisch beschreiben zu können, wird eine spannungsfreie fiktive Zwischenkonfiguration \hat{B} eingeführt, von der aus die elastische Beanspruchung gemessen wird, siehe Abb. 6.1. Das materielle Linienelement auf dieser Zwischenkonfiguration wird im Folgenden durch $d\hat{x}$ bezeichnet. Dann lassen sich zwei Deformations-

gradienten

$$d\mathbf{x} = \mathbf{F}^e \cdot d\hat{\mathbf{x}} \quad (6.22)$$

$$d\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{F}^p \cdot d\mathbf{x}_0 \quad (6.23)$$

unterscheiden, die zusammen mit Gleichung (2.9) den Deformationsgradienten

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^e \cdot \mathbf{F}^p \quad (6.24)$$

multiplikativ in einen elastischen und einen plastischen Anteil aufspalten. Diese Zerlegung geht auf Eckart (1948) zurück. In diesem Zusammenhang ist es wichtig hervorzuheben, dass die multiplikative Aufspaltung (6.24) in der Regel inkompatibel ist. Somit ist $d\hat{\mathbf{x}}$ kein Linienelement im klassischen Sinne und zu \mathbf{F}^e und \mathbf{F}^p korrespondiert in der Regel keine kompatible elastische und plastische Deformation. Ausnahmen bilden homogene Probleme.

In Anlehnung an die Gleichung (6.24) wird die freie Helmholtzenergie in einen elastischen und einen plastischen Anteil gemäß

$$\Psi(\mathbf{F}^e, \boldsymbol{\alpha}) = \Psi^e(\mathbf{F}^e) + \Psi^p(\boldsymbol{\alpha}) \quad (6.25)$$

zerlegt. Hierbei wurde angenommen, dass sich Ψ durch einen rein elastischen (gemessen in \mathbf{F}^e) und einen rein verfestigenden Anteil (gemessen in $\boldsymbol{\alpha}$) beschreiben lässt. Die internen Variablen $\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{R}^m$ dienen zur Quantifizierung des Schädigungsfortschritts.

6.2.2 Das Prinzip der maximalen Dissipationsleistung

In seiner grundlegenden Arbeit hat v. Mises (1928) das Prinzip der maximalen Dissipationsleistung postuliert. Dieses geht davon aus, dass die Zustandsvariablen aus der Maximierung der Dissipationsleistung (4.35) folgen:

$$\sup_{(\boldsymbol{\Sigma}, \mathbf{Q}) \in \mathbb{E}_\sigma} \mathcal{D}_{\text{int}} \quad (6.26)$$

Die hier eingeführten Symbole $\boldsymbol{\Sigma}$, \mathbf{Q} und \mathbb{E}_σ werden im Folgenden erläutert. Bezogen auf das unverformte Volumen \mathcal{B} nimmt die Dissipation für isotherme Zustände die Form

$$\mathcal{D}_{\text{int}} = \boldsymbol{\tau} : \mathbf{D} - \dot{\Psi} \quad (4.35)$$

an. Mit dieser lässt sich die Dissipationsleistung durch

$$\mathcal{D}_{\text{int}} = \boldsymbol{\tau} : \mathbf{D} - \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{F}^e} : \dot{\mathbf{F}}^e - \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\alpha}} \cdot \dot{\boldsymbol{\alpha}} \quad (6.27)$$

ausdrücken. Aus der elasto-plastischen Zerlegung (6.24) folgt

$$\mathbf{D} = \text{sym}(\dot{\mathbf{F}} \cdot \mathbf{F}^{-1}) = \text{sym}(\mathbf{L}^e + \mathbf{F}^e \cdot \mathbf{L}^p \cdot (\mathbf{F}^e)^{-1}) \quad (6.28)$$

und somit

$$\mathcal{D}_{\text{int}} = \left(\boldsymbol{\tau} - \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{F}^e} \cdot (\mathbf{F}^e)^T \right) : \mathbf{L}^e + \boldsymbol{\Sigma} : \mathbf{L}^p + \mathbf{Q} \cdot \dot{\boldsymbol{\alpha}}. \quad (6.29)$$

Hier tritt im zweiten Summanden der von Mandel (1971) eingeführte, so genannte *Mandel-Spannungstensor*

$$\boldsymbol{\Sigma} = (\mathbf{F}^e)^T \cdot \mathbf{P}^e \quad (6.30)$$

auf. Dieser Spannungstensor ist zum plastischen Anteil des Geschwindigkeitsgradienten $\mathbf{L}^p = \dot{\mathbf{F}}^p \cdot (\mathbf{F}^p)^{-1}$ energetisch konjugiert und daher, wie dieser, in der Zwischenkonfiguration definiert. Die Abkürzung

$$\mathbf{Q} = - \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\alpha}} \quad (6.31)$$

in Gleichung (6.29) bezeichnet die zu $\boldsymbol{\alpha}$ konjugierte spannungsartige interne Variable. Das Einsetzen der elastischen Materialantwort $\partial_{\mathbf{F}} \Psi = \mathbf{P}$ in die Gleichung (6.29) führt auf die reduzierte Dissipationsgleichung

$$\mathcal{D}_{\text{int}} = \boldsymbol{\Sigma} : \mathbf{L}^p + \mathbf{Q} \cdot \dot{\boldsymbol{\alpha}}. \quad (6.32)$$

Das Symbol \mathbb{E}_{σ} in Gleichung (6.26) bezeichnet den Raum der zulässigen Spannungen

$$\mathbb{E}_{\sigma} = \{ (\boldsymbol{\Sigma}, \mathbf{Q}) \in \mathbb{S} \times \mathbb{R}^m \mid \phi(\boldsymbol{\Sigma}, \mathbf{Q}) \leq 0 \}. \quad (6.33)$$

Dieser Raum wird durch die so genannte *Fließfunktion* ϕ definiert. Der Rand des elastischen Bereichs

$$\partial \mathbb{E}_{\sigma} = \{ (\boldsymbol{\Sigma}, \mathbf{Q}) \in \mathbb{S} \times \mathbb{R}^m \mid \phi(\boldsymbol{\Sigma}, \mathbf{Q}) = 0 \} \quad (6.34)$$

wird *Fließfläche* genannt. Die Eigenschaften der Fließfunktion werden im nächsten Abschnitt diskutiert und genauer erläutert.

Mit Hilfe des Postulats von Mises lassen sich zu einer vorgegebenen Deformation die Zustandsvariablen $(\boldsymbol{\Sigma}, \mathbf{Q})$ finden. Dazu ist die Extremalaufgabe (6.26) zu lösen. Diese lässt sich in das restringierte Maximierungsproblem

$$\sup_{(\boldsymbol{\Sigma}, \mathbf{Q})} \int_{t_1}^{t_2} (\boldsymbol{\Sigma} : \mathbf{L}^p + \mathbf{Q} \cdot \dot{\boldsymbol{\alpha}}) dt \quad (6.35)$$

$$\text{u. d. N.} \quad \phi = 0$$

transformieren. Aus mathematischer Sicht handelt es sich hierbei um ein Variationsproblem mit holonomer Nebenbedingung $\phi = 0$. Derartige Probleme lassen sich durch die Stationaritätsbedingung

$$\delta \mathcal{L}(\boldsymbol{\Sigma}, \mathbf{Q}, \lambda) = 0 \quad (6.36)$$

mit

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{\Sigma}, \mathbf{Q}, \lambda) = \int_{t_1}^{t_2} (\mathcal{D}_{\text{int}} - \lambda \phi) dt \quad (6.37)$$

in ein äquivalentes Problem überführen und effizient lösen. Der in (6.37) auftretende Lagrange-Multiplikator λ wird im Rahmen der Plastizitätstheorie *plastischer Multiplikator* genannt. Die Forderung der Stationarität des Funktionals (6.37) führt auf

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \boldsymbol{\Sigma}} : \delta \boldsymbol{\Sigma} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{Q}} \cdot \delta \mathbf{Q} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \lambda} \delta \lambda = 0. \quad (6.38)$$

Die Auswertung dieses Ausdrucks liefert

$$\left(-\mathbf{L}^P + \lambda \frac{\partial \phi}{\partial \boldsymbol{\Sigma}} \right) : \delta \boldsymbol{\Sigma} + \left(-\dot{\boldsymbol{\alpha}} + \lambda \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{Q}} \right) \cdot \delta \mathbf{Q} + \phi \delta \lambda = 0. \quad (6.39)$$

Somit ist das Lagrange-Funktional (6.37) nur dann stationär, falls die drei (Differential-)Gleichungen

$$\mathbf{L}^P = \lambda \frac{\partial \phi}{\partial \boldsymbol{\Sigma}} \qquad \dot{\boldsymbol{\alpha}} = \lambda \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{Q}} \qquad \phi = 0 \quad (6.40)$$

simultan erfüllt sind. Die Differentialgleichungen (6.40_{1,2}) werden *Evolutionsgleichungen* genannt.

Bei der vorgestellten Vorgehensweise lassen sich die Evolutionsgleichungen und die Fließfunktion konsistent aus dem Funktional (6.36) herleiten. Derartige Fließgesetze werden assoziativ genannt.

6.2.3 Fließfunktion

Bei einachsiger Zugbeanspruchung tritt in einem Stab dann plastisches Fließen ein, wenn die Normalspannung einen gewissen materialspezifischen Grenzwert Q_0^{eq} erreicht. Bei mehrachsiger Beanspruchung wird aus dem Spannungstensor ersatzweise eine Vergleichsspannung Σ^{eq} gebildet und einem Materialwert Q_0^{eq} gegenübergestellt. Mathematisch wird dies durch die Fließfunktion

$$\phi = \Sigma^{\text{eq}} - Q_0^{\text{eq}} \quad \begin{cases} < 0 & \text{elastische Deformation} \\ = 0 & \text{plastische Deformation} \end{cases} \quad (6.41)$$

bestimmt. Sie stellt die notwendige Bedingung für plastisches Fließen dar. Oftmals wird angenommen, dass die Fließfunktion die Form

$$\phi(\boldsymbol{\Sigma}, \mathbf{Q}^{\text{kin}}, Q^{\text{iso}}) = \Sigma^{\text{eq}}(\boldsymbol{\Sigma}, \mathbf{Q}^{\text{kin}}, Q^{\text{iso}}) - Q_0^{\text{eq}} \quad (6.42)$$

besitzt. Die Größe Q_0^{eq} bezeichnet ein äquivalentes Spannungsmaß, das den initialen Durchmesser des elastischen Bereichs \mathbb{E}_σ angibt, vgl. Gleichung (6.33). Mit Gleichung (6.42) lässt sich Größe \mathbf{Q} aus Gleichung (6.31) näher spezifizieren. Die so genannte *isotrope Verfestigung* bezeichnet die Änderung des Durchmessers der Fließfunktion. Isotrop verfestigendes Materialverhalten ist durch die skalare Variable $Q^{\text{iso}} = -\partial_{\alpha^{\text{iso}}}\Psi$ definiert. Die Änderung der Lage der Mittelachse der Fließfläche wird hingegen durch die tensorielle Größe $\mathbf{Q}^{\text{kin}} = -\partial_{\alpha^{\text{kin}}}\Psi$ angegeben. \mathbf{Q}^{kin} wird *kinematische Verfestigung* genannt. Der Unterschied zwischen isotroper und kinematischer Verfestigung tritt jedoch erst bei wechselseitiger Belastung zu Tage

In dieser Arbeit wird die in Gleichung (6.42) angegebene Vergleichsspannungsfunktion allgemein durch

$$\begin{aligned} \Sigma^{\text{eq}}(\boldsymbol{\Sigma}, \mathbf{Q}^{\text{kin}}, Q^{\text{iso}}) &= \gamma \operatorname{tr}(\boldsymbol{\Sigma} - \mathbf{Q}^{\text{kin}}) \\ &\quad + \theta \sqrt{(\boldsymbol{\Sigma} - \mathbf{Q}^{\text{kin}}) : \mathbb{H} : (\boldsymbol{\Sigma} - \mathbf{Q}^{\text{kin}})} - Q^{\text{iso}} \end{aligned} \quad (6.43)$$

angenommen. Werden in der Gleichung (6.43) die Parameter $\gamma = 0$, $\theta = 1$, $\mathbb{H} = \mathbb{P}^{\text{dev}}$ und $\mathbf{Q}^{\text{kin}} = \mathbf{0}$ gesetzt, so geht die Gleichung (6.42) in

$$\phi(\boldsymbol{\Sigma}, Q^{\text{iso}}) = \|\operatorname{dev} \boldsymbol{\Sigma}\| - Q^{\text{iso}} - Q_0^{\text{eq}} \quad (6.44)$$

über. Diese Fließfunktion wird nur durch den Spannungsdeviator $\operatorname{dev} \boldsymbol{\Sigma}$ gesteuert. Deviatorische Fließfunktionen vom Typ (6.44) werden *von-Mises-Fließfunktionen* genannt.

Ein anderes Beispiel für eine Fließfunktion wird durch $\gamma = 1$ und $\theta = 0$ angegeben:

$$\phi(\boldsymbol{\Sigma}, \mathbf{Q}^{\text{kin}}, Q^{\text{iso}}) = \operatorname{tr}(\boldsymbol{\Sigma} - \mathbf{Q}^{\text{kin}}) - Q^{\text{iso}} - Q_0^{\text{eq}} \quad (6.45)$$

Auch dieser Sonderfall wird in Abschnitt 7.2.1 variationell formuliert.

Der Gewichtungstensor \mathbb{H} aus Gleichung (6.43) wird in dieser Arbeit durch den Ausdruck

$$\mathbb{H} = \mathbb{P}^{\text{dev}} : \mathbb{D} : \mathbb{P}^{\text{dev}} \quad (6.46)$$

definiert. Damit ermöglicht \mathbb{D} eine richtungsabhängige Gewichtung des deviatorischen Teils der Fließfunktion. Die Definition (6.46) beinhaltet den Sonderfall $\mathbb{D} = \bar{\mathbb{I}}$. Mit $\gamma = 0$ geht die Gleichung (6.43) dann in die von-Mises-Vergleichsspannung $\Sigma^{\text{eq}} = \|\operatorname{dev} \boldsymbol{\Sigma}\|$ über.

Eine Zusammenfassung der grundlegenden Gleichungen, welche in diesem Abschnitt behandelt worden sind, gibt Abbildung 6.2.

6.2.4 Dissipation

Werden in der Dissipation (6.32) die dehnungsartigen Variablen \mathbf{L}^p und $\dot{\boldsymbol{\alpha}}$ durch die entsprechenden Ausdrücke der Evolutionsgleichungen (6.40_{1,2}) ersetzt, so führt dies mit der Abkürzung $\boldsymbol{\Delta} = (\boldsymbol{\Sigma}, \mathbf{Q})^T$ auf den Ausdruck

$$\mathcal{D}_{\text{int}} = \lambda \nabla \phi \cdot \boldsymbol{\Delta}. \quad (6.47)$$

Hierin bezeichnet $\nabla \phi = \left(\frac{\partial \phi}{\partial \boldsymbol{\Sigma}}, \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{Q}} \right)$. Im Rahmen dieser Arbeit wird angenommen, dass die Vergleichsspannung Σ^{eq} in Bezug auf die spannungsartigen Variablen $\boldsymbol{\Delta}$ eine homogene Funktion mit dem Homogenitätsgrad eins ist. Dann gilt nach dem im Anhang C zitierten Eulerschen Satz über homogene Funktionen

$$\nabla \Sigma^{\text{eq}} \cdot \boldsymbol{\Delta} = \Sigma^{\text{eq}}. \quad (6.48)$$

Der Vergleich der Gradienten der Fließfunktion ϕ (6.42) und der Vergleichsspannung Σ^{eq} (6.43) zeigt, dass

$$\nabla \phi = \nabla \Sigma^{\text{eq}} \quad (6.49)$$

gilt. Das Substituieren der beiden letztgenannten Gleichungen in (6.47) liefert

$$\mathcal{D}_{\text{int}} = \lambda \Sigma^{\text{eq}}. \quad (6.50)$$

Mit der Fließfunktion (6.42) gilt dann

$$\mathcal{D}_{\text{int}} = \lambda (Q_0^{\text{eq}} + \phi). \quad (6.51)$$

Bei plastischen Zustandsänderungen vereinfacht sich die Dissipation zu

$$\mathcal{D}_{\text{int}} = \lambda Q_0^{\text{eq}} \geq 0. \quad (6.52)$$

Die Größe Q_0^{eq} bezeichnet den initialen Durchmesser der Fließfunktion. Mithin ist sie reell und positiv und da das auch für den plastischen Multiplikator $\lambda \geq 0$ gilt, ist der zweite Hauptsatz der Thermodynamik erfüllt.

Für die Fließfunktion ϕ und den plastischen Multiplikator λ gilt

$$\begin{cases} \phi < 0, & \lambda = 0 & \Leftrightarrow & \text{elastische Deformation} \\ \phi = 0, & \lambda > 0 & \Leftrightarrow & \text{plastische Deformation} \end{cases} \quad (6.53)$$

Daher muss die Gleichung $\lambda \phi = 0$ erfüllt sein.

Folgende Seite

Abb. 6.2: Mathematisches Modell für Plastizität bei endlichen Deformationen

- Multiplikative Zerlegung des Deformationsgradiententensors \mathbf{F} in elastischen \mathbf{F}^e und plastischen Anteil \mathbf{F}^p

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^e \cdot \mathbf{F}^p \quad \text{mit} \quad \det \mathbf{F}^e > 0 \quad \text{und} \quad \det \mathbf{F}^p > 0 \quad (6.24)$$

- Additive Zerlegung der freien Helmholtzenergie Ψ

$$\Psi = \Psi^e(\mathbf{C}^e) + \Psi^p(\boldsymbol{\alpha}) \quad \text{mit} \quad \mathbf{C}^e = (\mathbf{F}^e)^T \cdot \mathbf{F}^e \quad (6.25)$$

- Herleitung der Spannungstensoren aus dem zweiten Hauptsatz der Thermodynamik

$$\mathbf{P} = \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{F}}, \quad \boldsymbol{\Sigma} = (\mathbf{F}^e)^T \cdot \mathbf{P}^e \quad (6.5, 6.30)$$

- Raum der zulässigen Spannungen \mathbb{E}_σ , definiert durch eine konvexe Fließfunktion ϕ (ϕ ist eine homogene Funktion ersten Grades bezüglich Σ^{eq})

$$\mathbb{E}_\sigma = \{(\boldsymbol{\Sigma}, \mathbf{Q}) \in \mathbb{S} \times \mathbb{R}^m \mid \phi(\boldsymbol{\Sigma}, \mathbf{Q}) = \Sigma^{\text{eq}}(\boldsymbol{\Sigma}, \mathbf{Q}) - Q_0^{\text{eq}} \leq 0\} \quad (6.33, 6.42)$$

- Assoziative Fließregel und Evolutionsgleichungen

$$\mathbf{L}^p = \dot{\mathbf{F}}^p \cdot (\mathbf{F}^p)^{-1} = \lambda \frac{\partial \phi}{\partial \boldsymbol{\Sigma}}, \quad \dot{\boldsymbol{\alpha}} = \lambda \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{Q}} \quad (6.40_{1,2})$$

- Karush-Kuhn-Tucker Optimalitätsbedingungen

$$\lambda \geq 0, \quad \phi \leq 0, \quad \lambda \phi = 0 \quad (6.53)$$

- Dissipationsungleichung und reduzierte Form

$$\mathcal{D}_{\text{int}} = \mathbf{P} : \dot{\mathbf{F}} - \dot{\Psi} = \boldsymbol{\Sigma} : \mathbf{L}^p + \mathbf{Q} \cdot \dot{\boldsymbol{\alpha}} = \lambda Q_0^{\text{eq}} \geq 0 \quad (4.35, 6.52)$$

6.2.5 Variationelle Formulierung von Plastizität bei endlichen Deformationen

Unter Verwendung von Gleichung (4.35) kann die Spannungsleistung für isotherme Zustände in die Form

$$\mathcal{E}(\dot{\varphi}, \lambda, \mathbf{M}) = \dot{\Psi}(\dot{\varphi}, \lambda, \mathbf{M}) + \mathcal{D}_{\text{int}}(\lambda) \quad (6.54)$$

überführt werden. Hierin bezeichnet $\mathbf{M} = \partial_{\Sigma}\phi$ die Fließrichtung. Mit der Gleichung (6.52) folgt daraus

$$\mathcal{E}(\dot{\varphi}, \lambda, \mathbf{M}) = \dot{\Psi}(\dot{\varphi}, \lambda, \mathbf{M}) + \lambda Q_0^{\text{eq}}. \quad (6.55)$$

Infolge der angenommenen additiven Aufspaltung der freien Helmholtzenergie (6.25) und den Evolutionsgleichungen (6.40_{1,2}) kann $\dot{\Psi}$ durch

$$\dot{\Psi} = \mathbf{P} : \dot{\mathbf{F}} - \lambda \Sigma : \frac{\partial \phi}{\partial \Sigma} - \lambda \mathbf{Q} \cdot \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{Q}} \quad (6.56)$$

ausdrückt werden. Die Gleichung (6.55) lässt sich daher durch

$$\mathcal{E}(\dot{\varphi}, \lambda, \mathbf{M}) = \mathbf{P} : \dot{\mathbf{F}} - \lambda \Sigma : \frac{\partial \phi}{\partial \Sigma} - \lambda \mathbf{Q} \cdot \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{Q}} + \lambda Q_0^{\text{eq}} \quad (6.57)$$

angeben. Die Auswertung der Stationaritätsbedingung von (6.57) hinsichtlich der Variablen λ und \mathbf{M} liefert

$$\underbrace{\delta \mathcal{E} = - \left(\Sigma : \frac{\partial \phi}{\partial \Sigma} - Q^{\text{iso}} - Q_0^{\text{eq}} \right)}_{-\phi} \delta \lambda - \lambda \Sigma : \frac{\partial^2 \phi}{\partial (\Sigma \otimes \mathbf{M})} : \delta \mathbf{M} = 0. \quad (6.58)$$

Deshalb gilt im Falle eines Minimums

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \lambda} = -\phi \geq 0. \quad (6.59)$$

Die Ungleichung (6.59) ist somit äquivalent zu der Forderung, dass die Spannungszustände zulässig sind ($\phi \leq 0$).

Außerdem ist

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathbf{M}} = -\lambda \Sigma : \frac{\partial^2 \phi}{\partial (\Sigma \otimes \mathbf{M})} = \mathbf{0}. \quad (6.60)$$

Andererseits führt der in dieser Arbeit angenommene Homogenitätsgrad der Vergleichsspannung Σ^{eq} mit $\partial_{\Sigma}\Sigma^{\text{eq}} = \partial_{\Sigma}\phi$ auf

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{M}} (\Sigma^{\text{eq}}) : \delta \mathbf{M} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{M}} \left(\Sigma : \frac{\partial \phi}{\partial \Sigma} \right) : \delta \mathbf{M} = \Sigma : \frac{\partial^2 \phi}{\partial (\Sigma \otimes \mathbf{M})} : \delta \mathbf{M} \stackrel{(6.60)}{=} \mathbf{0}. \quad (6.61)$$

- Spannungsleistung für physikalisch zulässige Zustände

$$\mathcal{E}(\dot{\varphi}, \lambda, \mathbf{M}) = \mathbf{P} : \dot{\mathbf{F}} = \dot{\Psi} + \lambda Q_0^{\text{eq}} \quad (6.54)$$

Hierbei kennzeichnet $\mathbf{M} = \partial_{\Sigma} \phi$ die Fließrichtung.

- Berechnung der internen Variablen λ, \mathbf{M} durch Variationsprinzip

$$(\lambda, \mathbf{M}) = \arg \inf_{\lambda, \mathbf{M}} \mathcal{E}(\dot{\varphi}, \lambda, \mathbf{M}) \Big|_{\dot{\varphi}=\mathbf{0}} \quad (6.62)$$

- Definition der Spannungen über die Spannungsleistung

$$\mathbf{P} = \frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{F}}} \inf_{\lambda, \mathbf{M}} \mathcal{E}(\dot{\varphi}, \lambda, \mathbf{M}) \quad (6.63)$$

Abb. 6.3: Mathematisches Modell zur konsistenten variationellen Formulierung von Plastizität bei endlichen Deformationen

Diese Gleichung definiert die Fließregel $\partial_{\Sigma} \phi$. Der Vergleich von (6.60) mit (6.61) zeigt, dass die Gleichung (6.61) im stationären Punkt verschwindet. Daher stellt die Gleichung (6.60) die korrekte Fließregel sicher. Zusammenfassend lässt sich daher mit der Gleichung (6.55) ein variationeller Algorithmus konstruieren, der die plastischen Variablen durch Lösung der Minimierungsaufgabe

$$(\lambda, \mathbf{M}) = \arg \inf_{\lambda, \mathbf{M}} \mathcal{E}(\dot{\varphi}, \lambda, \mathbf{M}) \Big|_{\dot{\varphi}=\mathbf{0}} \quad (6.62)$$

berechnet. Der zugehörige Spannungszustand folgt dann entsprechend zu Gleichung (6.5) aus

$$\mathbf{P} = \frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{F}}} \inf_{\lambda, \mathbf{M}} \mathcal{E}(\dot{\varphi}, \lambda, \mathbf{M}). \quad (6.63)$$

Die Gleichungen der variationellen Formulierung von Plastizität bei endlichen Deformationen sind in Abbildung 6.3 zusammengefasst.

7 Numerische Implementierung von Plastizität endlicher Deformationen

Der in dieser Arbeit als »klassisch« bezeichnete Return-Mapping-Algorithmus wurde nahezu gleichzeitig von Maenchen und Sacks (1964) sowie Wilkins (1964) eingeführt, um die Änderung der plastischen Zustandsvariablen numerisch zu ermitteln. Dieses Verfahren wird in Abschnitt 7.1 detailliert erläutert. Der Abschnitt 7.2 widmet sich sodann den Eigenschaften und der Implementierung eines neuartigen Algorithmus. Dieser Algorithmus wird konsistent aus einem Variationsprinzip hergeleitet.

Der Inhalt dieses Kapitels ist eng an den Zeitschriftenbeitrag von Bleier und Mosler (2012) angelehnt.

7.1 Klassischer Return-Mapping-Algorithmus

Ausgehend von dem Deformationsgradienten \mathbf{F}_{n+1} des aktuellen Lastschritts und den konvergierten Größen des vorherigen Lastschritts ($\mathbf{F}_n^{\text{P}}, \boldsymbol{\alpha}_n$) ermittelt ein Spannungsupdate-Algorithmus die aktuellen Variablen ($\mathbf{F}_{n+1}^{\text{P}}, \boldsymbol{\alpha}_{n+1}$) numerisch. Hierzu werden zunächst die (in der Zeit) kontinuierlichen Evolutionsgleichungen (6.40_{1,2}) mit Hilfe eines Zeitintegrationsverfahrens approximiert. In dieser Arbeit wird dafür ein implizites Euler-Verfahren genutzt. Dabei wird für den plastischen Deformationsgradienten die exponentielle Tensorfunktion

$$\mathbf{F}_{n+1}^{\text{P}} = \exp \left[\Delta\lambda_{n+1} \left. \frac{\partial\phi}{\partial\boldsymbol{\Sigma}} \right|_{n+1} \right] \cdot \mathbf{F}_n^{\text{P}} \quad (7.1)$$

verwendet, siehe Bronstein (2006) oder Ortiz u. a. (2001). Für die Zeitintegration der internen Variablen wird ein klassischer Backward-Euler-Ansatz durch

$$\boldsymbol{\alpha}_{n+1} = \boldsymbol{\alpha}_n + \Delta\lambda_{n+1} \left. \frac{\partial\phi}{\partial\mathbf{Q}} \right|_{n+1} \quad (7.2)$$

genutzt, vgl. Schwarz und Köckler (2006). In den beiden vorstehenden Gleichungen wurde für die inkrementelle Änderung des plastischen Multiplikators die Abkürzung

$$\Delta\lambda = \int_{t_n}^{t_{n+1}} \lambda \, dt \quad (7.3)$$

eingeführt.

Für die Implementierung wird ein Prädiktor-Korrektor-Verfahren verwendet. Derartige Verfahren berechnen die Lösung in zwei Stufen. Zunächst wird der gesuchte Systemzustand mit dem so genannten Prädiktorschritt geschätzt und sodann im Korrektorschritt so lange verbessert, bis die Lösung berechnet ist, vgl. Acton (1990). Bei Plastizitätsproblemen wird der elastische Prädiktor⁷

$$\mathbf{F}^{\text{e(trial)}} = \mathbf{F}_{n+1} \cdot (\mathbf{F}_n^{\text{p}})^{-1} \quad (7.4)$$

gebildet und damit der zugehörige Spannungszustand

$$\boldsymbol{\Sigma}^{\text{(trial)}} = \mathbf{S}^* : \mathbf{F}^{\text{e(trial)}} \quad (7.5)$$

bestimmt. Ist dieser Spannungszustand innerhalb des Raums der zulässigen Spannungen, also $\phi(\boldsymbol{\Sigma}^{\text{(trial)}}) < 0$, so handelt es sich um einen elastischen Schritt; der Prädiktorschritt entspricht somit bereits der Lösung und der Algorithmus terminiert mit $(\mathbf{F}_n^{\text{p}}, \boldsymbol{\alpha}_n) \rightarrow (\mathbf{F}_{n+1}^{\text{p}}, \boldsymbol{\alpha}_{n+1})$. Andernfalls werden die plastischen Zustandsvariablen $\Delta\lambda$ und $\boldsymbol{\Sigma}$ bzw. \mathbf{F}^{p} so lange systematisch modifiziert, bis Konvergenz eintritt. Hierfür wird in der Regel das Verfahren von Newton eingesetzt, vgl. Strang (1986).

Mit einem verallgemeinerten vektoriellen Ausdruck \mathbf{R} lassen sich die Evolutionsgleichungen (6.40) in Residuenform notieren. Zusammen mit der Fließfunktion ϕ führt dies auf ein nichtlineares Gleichungssystem der Form

$$\mathbf{R} = \mathbf{R}(\Delta\lambda, \boldsymbol{\Delta}, \mathbf{F}), \quad (7.6)$$

$$\phi = \phi(\boldsymbol{\Delta}, \mathbf{F}). \quad (7.7)$$

Hierin steht $\boldsymbol{\Delta}$ für einen Vektor, der entweder aus dem spannungsartigen oder dem dehnungsartigen Variablensatz, also $(\boldsymbol{\Sigma}, \mathbf{Q})$ oder $(\mathbf{F}^{\text{p}}, \boldsymbol{\alpha})$, gebildet ist.

Der mit Hilfe der numerischen Integrationsformeln (7.1, 7.2) aufbereitete und zu lösende Gleichungssatz lautet dann

$$\mathbf{R}(\Delta\lambda, \boldsymbol{\Delta}, \mathbf{F}) = \begin{pmatrix} -\mathbf{F}^{\text{e(trial)}} + \mathbf{F}_n^{\text{e}} \cdot \exp \left[-\Delta\lambda \frac{\partial \phi}{\partial \boldsymbol{\Sigma}} \right] \\ -\boldsymbol{\alpha}_{n+1} + \boldsymbol{\alpha}_n - \Delta\lambda \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{Q}} \end{pmatrix}, \quad (7.8)$$

$$\phi(\boldsymbol{\Delta}, \mathbf{F}) = 0. \quad (7.9)$$

Die Linearisierung dieses Gleichungssystems führt auf

$$\mathbf{R} + \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \Delta\lambda} d\Delta\lambda + \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \boldsymbol{\Delta}} \cdot d\boldsymbol{\Delta} + \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{F}} : d\mathbf{F} = \mathbf{0}, \quad (7.10)$$

$$\phi + \frac{\partial \phi}{\partial \boldsymbol{\Delta}} \cdot d\boldsymbol{\Delta} + \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{F}} : d\mathbf{F} = 0. \quad (7.11)$$

⁷Die Variablen des Prädiktors werden fortan durch den Superskript $(\bullet)^{\text{(trial)}}$ bezeichnet.

Mit einem verschiebungsgesteuerten Finite-Elemente-Programm lässt sich dieses System in gestaffelter Form lösen. Hierzu wird zunächst der Deformationsgradient \mathbf{F} von dem aufrufenden Finite-Elemente-Programm vorgegeben, vorläufig fixiert ($d\mathbf{F} = \mathbf{0}$) und die zugehörigen Variablen ($\Delta\lambda, \Delta$) durch das Gleichungssystem

$$\mathbf{R} + \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \Delta} \cdot d\Delta + \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \Delta\lambda} d\Delta\lambda = \mathbf{0}, \quad (7.12)$$

$$\phi + \frac{\partial \phi}{\partial \Delta} \cdot d\Delta = 0 \quad (7.13)$$

iterativ mit dem Verfahren von Newton gelöst. Die hierfür erforderlichen Inkremente lauten

$$d\Delta\lambda = \frac{\phi - \frac{\partial \phi}{\partial \Delta} \cdot \left[\frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \Delta} \right]^{-1} \cdot \mathbf{R}}{\frac{\partial \phi}{\partial \Delta} \cdot \left[\frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \Delta} \right]^{-1} \cdot \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \Delta\lambda}}, \quad (7.14)$$

$$d\Delta = - \left[\frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \Delta} \right]^{-1} \cdot \left(\mathbf{R} + \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \Delta\lambda} d\Delta\lambda \right). \quad (7.15)$$

Nach Erreichen der lokalen Konvergenz wird die Variable \mathbf{F} auf Strukturebene durch das Finite-Elemente-Programm modifiziert, wobei diese Änderung durch die globale Tangente $d\boldsymbol{\Sigma}_{n+1}/d\mathbf{F}_{n+1}$ gesteuert wird. Um diese zu berechnen, werden die Sensitivitäten ermittelt. Für $\mathbf{R} = \mathbf{0}$ und $\phi = 0$ wird also das Gleichungssystem

$$\frac{\partial \mathbf{R}_1}{\partial \boldsymbol{\Sigma}} : d\boldsymbol{\Sigma} + \frac{\partial \mathbf{R}_1}{\partial \Delta\lambda} d\Delta\lambda = - \frac{\partial \mathbf{R}_1}{\partial \mathbf{F}} : d\mathbf{F} \quad (7.16)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial \boldsymbol{\Sigma}} : d\boldsymbol{\Sigma} = - \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{F}} : d\mathbf{F} \quad (7.17)$$

gelöst, vgl. Gleichungen (7.10, 7.11). Der Index \mathbf{R}_1 weist darauf hin, dass für die globale Tangente $d\boldsymbol{\Sigma}_{n+1}/d\mathbf{F}_{n+1}$ nur die erste Zeile von Gleichung (7.8) nötig ist. Auf diese Art und Weise wird für die globale Tangente der Ausdruck

$$\frac{d\boldsymbol{\Sigma}_{n+1}}{d\mathbf{F}_{n+1}} = - \left[\frac{\partial \mathbf{R}_1}{\partial \boldsymbol{\Sigma}} \right]^{-1} : \left(\frac{\partial \mathbf{R}_1}{\partial \mathbf{F}_{n+1}} + \frac{\partial \mathbf{R}_1}{\partial \Delta\lambda} \otimes \frac{d\Delta\lambda}{d\mathbf{F}_{n+1}} \right) \quad (7.18)$$

mit

$$\frac{d\Delta\lambda}{d\mathbf{F}_{n+1}} = \frac{\frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{F}_{n+1}} - \frac{\partial \phi}{\partial \boldsymbol{\Sigma}} : \left[\frac{\partial \mathbf{R}_1}{\partial \boldsymbol{\Sigma}} \right]^{-1} : \frac{\partial \mathbf{R}_1}{\partial \mathbf{F}_{n+1}}}{\frac{\partial \phi}{\partial \boldsymbol{\Sigma}} : \left[\frac{\partial \mathbf{R}_1}{\partial \boldsymbol{\Sigma}} \right]^{-1} : \frac{\partial \mathbf{R}_1}{\partial \Delta\lambda}} \quad (7.19)$$

berechnet.

Um eine bessere Vergleichbarkeit mit dem noch zu erklärenden variationell konsistenten Algorithmus zu gewährleisten, wird die Implementierung des klassischen Return-Mapping-Algorithmus in spannungsartigen Variablen formuliert und deshalb $\Delta = (\Sigma, Q)$ gewählt.

7.2 Variationell konsistenter Algorithmus

Analog dem im vorstehenden Abschnitt beschriebenen klassischen Return-Mapping-Algorithmus, berechnet der variationell konsistente Algorithmus die Zustandsvariablen am Ende des Zeitschritts t_{n+1} mittels eines Prädiktor-Korrektor-Verfahrens. Um die Vergleichbarkeit beider Implementierungen zu gewährleisten, wird hier das gleiche implizite Euler-Verfahren zur Zeitintegration herangezogen. Somit wird für das betrachtete Zeitintervall $t \in [t_n, t_{n+1}]$ das kontinuierliche Problem (6.62) zu dem zeitdiskreten

$$(\Delta\lambda, \mathbf{M}) = \arg \inf_{\Delta\lambda, \mathbf{M}} \mathcal{J}_{\text{inc}}(\mathbf{F}_{n+1}, \Delta\lambda, \mathbf{M}) \Big|_{\mathbf{F}_{n+1}=\text{const}}, \quad (7.20)$$

wobei die Abkürzungen (7.3) und

$$\mathcal{J}_{\text{inc}}(\mathbf{F}_{n+1}, \Delta\lambda, \mathbf{M}) = \Psi_{n+1} - \Psi_n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathcal{D}_{\text{int}} dt \quad (7.21)$$

eingeführt wurden. Die Gleichung (7.21) lässt sich mit Gleichung (6.52) zu

$$\mathcal{J}_{\text{inc}}(\mathbf{F}_{n+1}, \Delta\lambda, \mathbf{M}) = \Psi_{n+1} - \Psi_n + \Delta\lambda_{n+1} Q_0^{\text{eq}} \quad (7.22)$$

umformen. Damit ist die Zeitintegration im aktuellen Zeitintervall $t \in [t_n, t_{n+1}]$ formal vollständig analytisch durchgeführt. Die Berechnung von Ψ_{n+1} muss jedoch numerisch erfolgen. Dies liegt, wie beim klassischen Return-Mapping-Algorithmus, daran, dass infolge der zugrunde liegenden nichtlinearen Gleichungen die Beziehung (7.21) im Allgemeinen nicht analytisch exakt lösbar ist. Die oben eingeführte Größe \mathcal{J}_{inc} wird in dieser Arbeit *integrierte Spannungsleistung* oder *inkrementelles elasto-plastisches Funktional* genannt.

Noch nicht näher spezifiziert ist die konkrete Ausführung der Zeitintegration in Gleichung (7.22). Wie bei dem klassischen Return-Mapping-Algorithmus wird die auf den Gleichungen (6.24), (7.1) und (7.4) beruhende Zeitintegration

$$\mathbf{F}_{n+1}^e = \mathbf{F}^e(\text{trial}) \cdot \exp \left[-\Delta\lambda_{n+1} \frac{\partial\phi}{\partial\Sigma} \Big|_{n+1} \right] \quad (7.23)$$

eingesetzt, wobei die internen Variablen mit Gleichung (7.2) berechnet werden. Somit ist das Funktional (7.22) vom Deformationsgradienten \mathbf{F}_{n+1} , dem plastischen Multiplikator $\Delta\lambda$ sowie der Fließrichtung $\mathbf{M} = \partial_{\Sigma}\phi$ abhängig.

Das Auftreten von Plastizität lässt sich während des elastischen Prädiktorschritts wegen Gleichung (6.55) direkt aus dem Funktional \mathcal{J}_{inc} berechnen, also ohne die Fließfunktion ϕ explizit auszuwerten:

$$\left. \frac{\partial \mathcal{J}_{\text{inc}}}{\partial \Delta \lambda} \right|_{\Delta \lambda=0} = -\phi^{(\text{trial})} \quad \left\{ \begin{array}{l} \geq 0 \quad \text{elastischer Lastschritt,} \\ \quad \text{d. h. energetisch stabiler Prädiktor} \\ < 0 \quad \text{plastischer Lastschritt,} \\ \quad \text{d. h. energetisch instabiler Prädiktor} \end{array} \right. \quad (7.24)$$

7.2.1 Direkte Parametrisierung der Fließregel

7.2.1.1 Allgemeines Anstelle der Fließrichtung kann im Funktional (7.22) auch direkt der plastische Fluss

$$\Delta \mathbf{L}^{\text{P}} = \Delta \lambda \frac{\partial \phi}{\partial \boldsymbol{\Sigma}} \quad (7.25)$$

als zu berechnende Unbekannte gewählt werden. In dieser Variablen $\Delta \mathbf{L}^{\text{P}}$ ist sowohl der plastische Multiplikator als auch die Fließrichtung enthalten. Eine derartige Parametrisierung wurde für isotrope Modelle bereits von Mosler und Bruhns (2009a) verwendet.

Die Isotropie erlaubt dabei, die Implementierung in den Eigenwerten von $\Delta \mathbf{L}^{\text{P}}$ und damit effizient zu formulieren. Hierfür ist die Zeitintegration mit der exponentiellen Tensorfunktion in der Form

$$\mathbf{F}_{n+1}^{\text{e}} = \mathbf{F}^{\text{e}(\text{trial})} \cdot \exp \left[-\Delta \mathbf{L}_{n+1}^{\text{P}} \right] \quad (7.26)$$

zu nutzen. Aus dem plastischen Fluss (7.25) lässt sich der Wert des plastischen Multiplikators in jedem Inkrement durch

$$\Delta \lambda = \frac{\|\Delta \mathbf{L}_{n+1}^{\text{P}}\|}{\|\partial_{\boldsymbol{\Sigma}} \phi|_{n+1}\|} \quad (7.27)$$

extrahieren. Die Gleichung (7.27) kann nur in wenigen Sonderfällen geschlossen gelöst werden. Ist die Fließfunktion ϕ beispielsweise anisotrop, so ändert sich die Länge der Fließrichtung $\|\partial_{\boldsymbol{\Sigma}} \phi|_{n+1}\|$ in jedem Iterationsschritt und ist vom abschließenden unbekanntem Spannungszustand $\boldsymbol{\Sigma}_{n+1}$ abhängig.

Die Funktion

$$\phi = \gamma \operatorname{tr} \boldsymbol{\Sigma} + \theta \|\operatorname{dev} \boldsymbol{\Sigma}\| - Q^{\text{iso}} - Q_0^{\text{eq}} \quad (7.28)$$

ist ein Beispiel für eine Fließfunktion vom Drucker-Prager-Typ mit invarianter Länge der Fließrichtung, die stets $c = \|\partial_{\boldsymbol{\Sigma}} \phi|_{n+1}\|$ beträgt. Damit lässt sich die integrierte Spannungsleistung (7.22) ohne kinematische Verfestigung zu

$$\mathcal{J}_{\text{inc}} = \Psi_{n+1}(\mathbf{F}_{n+1}, \Delta \mathbf{L}_{n+1}^{\text{P}}) - \Psi_n + \frac{1}{c} \|\Delta \mathbf{L}_{n+1}^{\text{P}}\| Q_0^{\text{eq}} \quad (7.29)$$

vereinfachen. Hiervon ausgehend folgt der inkrementelle plastische Fluss $\Delta \mathbf{L}_{n+1}^{\text{P}}$ aus dem Minimierungsprinzip

$$\Delta \mathbf{L}_{n+1}^{\text{P}} = \arg \inf_{\Delta \mathbf{L}_{n+1}^{\text{P}}} \mathcal{J}_{\text{inc}}(\mathbf{F}_{n+1}, \Delta \mathbf{L}_{n+1}^{\text{P}}) \Big|_{\mathbf{F}_{n+1}=\text{const}}. \quad (7.30)$$

Allerdings führt eine direkte Minimierung von \mathcal{J}_{inc} ohne Nebenbedingungen nicht notwendigerweise zu physikalischen Ergebnissen, da die Fließregel intrinsische Nebenbedingungen besitzt. Diese können mit den Mitteln der linearen Algebra oftmals durch eine Projektion berücksichtigt werden. Formal gilt dann

$$\Delta \mathbf{L}_{n+1}^{\text{P}} = \mathbb{P} : \tilde{\mathbf{K}}, \quad (7.31)$$

wobei $\tilde{\mathbf{K}} \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ ein beliebiger Tensor ist. Mit dem Symbol \mathbb{P} ist dabei ein Projektionsoperator bezeichnet, der allgemein $\tilde{\mathbf{K}}$ auf $\Delta \mathbf{L}_{n+1}^{\text{P}}$ abbildet. Beispielsweise ist für die von-Mises-Fließfunktion der deviatorische Projektionstensor \mathbb{P}^{dev} (A.30) zu verwenden. Analog kann die Symmetrie von $\Delta \mathbf{L}^{\text{P}}$ durch den Projektionsoperator $\mathbb{P}^{\text{sym}}: \mathbb{R}^{3 \times 3} \rightarrow \mathbb{R}^6$ erzwungen werden.

Dann lautet die mit einem Operator \mathbb{P} projizierte Stationaritätsbedingung der Minimierung (7.30) nach der Variablen $\tilde{\mathbf{K}}$ formal

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{J}_{\text{inc}}}{\partial \Delta \mathbf{L}_{n+1}^{\text{P}}} : \frac{\partial \Delta \mathbf{L}_{n+1}^{\text{P}}}{\partial \tilde{\mathbf{K}}} = \\ \left[-\boldsymbol{\Sigma}_{n+1}^* : \text{Dexp}[-\Delta \mathbf{L}_{n+1}^{\text{P}}] + \frac{1}{c} \frac{\Delta \mathbf{L}_{n+1}^{\text{P}}}{\|\Delta \mathbf{L}_{n+1}^{\text{P}}\|} (Q^{\text{iso}} + Q_0^{\text{eq}}) \right] : \mathbb{P} = \mathbf{0}. \end{aligned} \quad (7.32)$$

In dieser Gleichung ist mit

$$\boldsymbol{\Sigma}_{n+1}^* = (\mathbf{F}^{\text{e (trial)}})^T \cdot \mathbf{P}_{n+1} \quad (7.33)$$

ein fiktiver Spannungstensor vom Mandel-Typ eingeführt worden. Die Gleichung (7.32) lässt sich mit dem Verfahren von Newton lösen.

Um die Konsistenz des Algorithmus zu zeigen, wird die Stationaritätsbedingung (7.32) im Grenzübergang $\Delta t \rightarrow 0$ ausgewertet:

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\partial \mathcal{J}_{\text{inc}}}{\partial \tilde{\mathbf{K}}_{n+1}} = \left[-\boldsymbol{\Sigma}_{n+1} + \frac{1}{c} \frac{\Delta \mathbf{L}_{n+1}^{\text{P}}}{\|\Delta \mathbf{L}_{n+1}^{\text{P}}\|} (Q^{\text{iso}} + Q_0^{\text{eq}}) \right] : \mathbb{P} = \mathbf{0} \quad (7.34)$$

Dies ist äquivalent zu der Fließregel

$$\Delta \mathbf{L}_{n+1}^{\text{P}} : \mathbb{P} = c \frac{\|\Delta \mathbf{L}_{n+1}^{\text{P}}\|}{Q^{\text{iso}} + Q_0^{\text{eq}}} \boldsymbol{\Sigma}_{n+1} : \mathbb{P}. \quad (7.35)$$

Ist, wie vorausgesetzt, \mathbb{P} ein Projektionstensor im Sinne der linearen Algebra, d. h. $\mathbb{P} : \mathbb{P} = \mathbb{P}$, so führt Gleichung (7.35) auf

$$\Delta \mathbf{L}_{n+1}^{\mathbb{P}} = c \frac{\|\Delta \mathbf{L}_{n+1}^{\mathbb{P}}\|}{\Sigma^{\text{eq}}} \boldsymbol{\Sigma}_{n+1} : \mathbb{P}, \quad (7.36)$$

wobei bei einem plastischen Lastschritt unter Berücksichtigung von $\phi = 0$ der Nenner durch den Ausdruck $\Sigma^{\text{eq}} = Q_0^{\text{iso}} + Q_0^{\text{eq}}$ ersetzt wurde. Auf der Basis von Gleichung (7.36) lässt sich die Konsistenz des Algorithmus für unterschiedliche Modelle verifizieren. Beispielweise führt bei einer deviatorischen Fließfunktion, vgl. (6.44), die Gleichung (7.36) auf

$$\Delta \mathbf{L}_{n+1}^{\mathbb{P}} = \|\Delta \mathbf{L}_{n+1}^{\mathbb{P}}\| \frac{\text{dev } \boldsymbol{\Sigma}_{n+1}}{\|\text{dev } \boldsymbol{\Sigma}_{n+1}\|}. \quad (7.37)$$

Demgegenüber gilt für eine schubunabhängige Fließfunktion, vgl. (6.45),

$$\Delta \mathbf{L}_{n+1}^{\mathbb{P}} = \|\Delta \mathbf{L}_{n+1}^{\mathbb{P}}\| \mathbf{1}. \quad (7.38)$$

Die beiden letztgenannten Gleichungen genügen demnach der jeweils zugrunde liegenden Fließfunktion und den assoziativen Fließregeln.

Die zuvor hergeleitete Stationaritätsbedingung impliziert auch, dass die resultierenden Spannungen zulässig sind. Um dies zu zeigen, wird die Stationaritätsbedingung (7.32) verwendet und für eine beliebige Richtung ausgewertet:

$$\left. \frac{\partial \mathcal{J}_{\text{inc}}}{\partial \tilde{\mathbf{K}}_{n+1}} \right|_{\Delta t \rightarrow 0} : \mathbf{A} \geq 0 \quad \forall \mathbf{A} \quad (7.39)$$

Wird \mathbf{A} als inkrementeller plastischer Fluss betrachtet, d. h. $\mathbf{A} = \Delta \mathbf{L}_{n+1}^{\mathbb{P}}$, so impliziert Gleichung (7.39)

$$\left. \frac{\partial \mathcal{J}_{\text{inc}}}{\partial \tilde{\mathbf{K}}_{n+1}} \right|_{\Delta t \rightarrow 0} : \Delta \mathbf{L}_{n+1}^{\mathbb{P}} = - \left[c \frac{\|\boldsymbol{\Sigma} : \mathbb{P}\|^2}{\Sigma^{\text{eq}}} - (Q_0^{\text{eq}} + Q_0^{\text{iso}}) \right] \|\mathbf{L}_{n+1}^{\mathbb{P}}\| \geq 0. \quad (7.40)$$

Da $\|\mathbf{L}_{n+1}^{\mathbb{P}}\| \geq 0$ ist, muss

$$c \frac{\|\boldsymbol{\Sigma} : \mathbb{P}\|^2}{\Sigma^{\text{eq}}} - (Q_0^{\text{eq}} + Q_0^{\text{iso}}) \leq 0 \quad (7.41)$$

sein. Auch hier lässt sich zeigen, dass die Ungleichung (7.41) zu $\phi \leq 0$ äquivalent ist.

Grundsätzlich ist es aus numerischer Sicht möglich, auch Modelle zu parametrisieren, welche die Nebenbedingung $\|\partial_{\boldsymbol{\Sigma}} \phi\| = \text{const}$ nicht erfüllen. Mit einer gemischten impliziten/expliciten Zeitintegration der Form

$$\Delta \lambda = \frac{\|\mathbf{L}_{n+1}^{\mathbb{P}}\|}{\|\partial_{\boldsymbol{\Sigma}} \phi|_n\|} \quad (7.42)$$

kann der zuvor beschriebene Algorithmus unverändert angewandt werden.

7.2.1.2 Numerische Implementierung Nachdem gezeigt werden konnte, dass der variationelle Algorithmus konsistent ist und alle Nebenbedingungen erfüllt, wird in diesem Abschnitt eine numerische Implementierung angegeben und untersucht. Zur Lösung des Minimierungsproblems (7.30) wird das Verfahren von Newton herangezogen.

Formal liefert die Linearisierung des projizierten Residuums (7.32) das lineare Gleichungssystem

$$\frac{\partial \mathcal{J}_{\text{inc}}}{\partial \tilde{\mathbf{K}}} + \frac{\partial^2 \mathcal{J}_{\text{inc}}}{\partial(\tilde{\mathbf{K}} \otimes \tilde{\mathbf{K}})} : d\tilde{\mathbf{K}} = \mathbf{0}, \quad (7.43)$$

aus dem sich das Inkrement $d\tilde{\mathbf{K}}$ bestimmt. Der Term $\partial_{\tilde{\mathbf{K}}\tilde{\mathbf{K}}}^2 \mathcal{J}_{\text{inc}}$ kennzeichnet die Hesse-Matrix und ist über die Kettenregel

$$\frac{\partial^2 \mathcal{J}_{\text{inc}}}{\partial(\tilde{\mathbf{K}} \otimes \tilde{\mathbf{K}})} = \mathbb{P}^D : \frac{\partial^2 \mathcal{J}_{\text{inc}}}{\partial(\Delta \mathbf{L}_{n+1}^p \otimes \Delta \mathbf{L}_{n+1}^p)} : \mathbb{P} \quad (7.44)$$

konstruiert. Hier bezeichnet der Transpositionsoperator $\mathbb{P}_{ijkl}^D = \mathbb{P}_{klij}$, vgl. Kintzel (2007). In der Hesse-Matrix (7.44) wurde der Tensor

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \mathcal{J}_{\text{inc}}}{\partial(\Delta \mathbf{L}_{n+1}^p \otimes \Delta \mathbf{L}_{n+1}^p)} = & \mathbf{S}_{n+1}^* \stackrel{(1)}{:} \text{Dexp}[-\Delta \mathbf{L}_{n+1}^p] \stackrel{(3)}{:} \text{Dexp}[-\Delta \mathbf{L}_{n+1}^p] \\ & - \boldsymbol{\Sigma}_{n+1}^* : \text{D}^2 \exp[-\Delta \mathbf{L}_{n+1}^p] \\ & + \frac{1}{c} \frac{\partial^2 \|\Delta \mathbf{L}_{n+1}^p\|}{\partial(\Delta \mathbf{L}_{n+1}^p \otimes \Delta \mathbf{L}_{n+1}^p)} (Q^{\text{iso}} + Q_0^{\text{eq}}) \end{aligned} \quad (7.45)$$

eingeführt.⁸ Mit dem Ausdruck

$$\mathbf{S}_{n+1}^* = (\mathbf{F}^{\text{e (trial)}})^T \cdot \mathbf{A}_{n+1} \stackrel{(3)}{:} \mathbf{F}^{\text{e (trial)}} \quad (7.46)$$

wurde in Gleichung (7.45) eine neue vierstufige Materialtangente eingeführt. Diese Materialtangente stellt den differentiellen Zusammenhang zwischen $\boldsymbol{\Sigma}^*$ und \mathbf{F}^{e} her, mithin gilt

$$d\boldsymbol{\Sigma}^* = \mathbf{S}^* : d\mathbf{F}^{\text{e}}. \quad (7.47)$$

Ebenso wie $\boldsymbol{\Sigma}^*$ bezeichnet auch \mathbf{S}^* keine physikalische Größe, sondern \mathbf{S}^* ist rein numerisch motiviert.

In Gleichung (7.45) tritt außerdem der durch

$$\frac{\partial^2 \|\Delta \mathbf{L}_{n+1}^p\|}{\partial(\Delta \mathbf{L}_{n+1}^p \otimes \Delta \mathbf{L}_{n+1}^p)} = \frac{1}{\|\Delta \mathbf{L}_{n+1}^p\|} \left[\mathbb{I} - \frac{\partial \|\Delta \mathbf{L}_{n+1}^p\|}{\partial \Delta \mathbf{L}_{n+1}^p} \otimes \frac{\partial \|\Delta \mathbf{L}_{n+1}^p\|}{\partial \Delta \mathbf{L}_{n+1}^p} \right] \quad (7.48)$$

⁸Die Definition der doppelten Überschiebungen ist im Anhang A erklärt.

definierte Ausdruck auf. Mit dem Symbol $D^2\exp(\bullet)$ in Gleichung (7.45) ist die zweite Ableitung der exponentiellen Tensorfunktion bezüglich des Arguments (\bullet) bezeichnet. Details zu den Eigenschaften und der effizienten Implementierung von $D^2\exp(\bullet)$ sind in den Artikeln von Ortiz u. a. (2001) sowie von Moler und Van Loan (2003) zu finden.

Um während der Lösung durch ein verschiebungsgesteuertes Finite-Elemente-Programm auch asymptotisch quadratische Konvergenz auf Strukturebene zu erhalten, ist die konsistente algorithmische Tangente erforderlich. Sie folgt aus der Linearisierung

$$d\mathbf{P} = d\left(\frac{\partial \mathcal{J}_{\text{inc}}}{\partial \mathbf{F}}\right) = \underbrace{\left[\frac{\partial^2 \mathcal{J}_{\text{inc}}}{\partial(\mathbf{F} \otimes \mathbf{F})} + \frac{\partial^2 \mathcal{J}_{\text{inc}}}{\partial(\mathbf{F} \otimes \tilde{\mathbf{K}})} : \frac{d\tilde{\mathbf{K}}}{d\mathbf{F}} \right]}_{=d\mathbf{P}/d\mathbf{F}} : d\mathbf{F}. \quad (7.49)$$

Die Ableitung $d\tilde{\mathbf{K}}/d\mathbf{F}$ in Gleichung (7.49) wird durch Linearisierung des Residuums (7.32) bei erreichter Konvergenz gewonnen. Wegen $\partial_{\tilde{\mathbf{K}}} \mathcal{J}_{\text{inc}} = \mathbf{0}$ gilt dann

$$\frac{d\tilde{\mathbf{K}}}{d\mathbf{F}} = - \left[\frac{\partial^2 \mathcal{J}_{\text{inc}}}{\partial(\tilde{\mathbf{K}} \otimes \tilde{\mathbf{K}})} \right]^{-1} : \frac{\partial^2 \mathcal{J}_{\text{inc}}}{\partial(\tilde{\mathbf{K}} \otimes \mathbf{F})}. \quad (7.50)$$

Die gemischte Ableitung lautet ausgeschrieben

$$\frac{\partial^2 \mathcal{J}_{\text{inc}}}{\partial(\tilde{\mathbf{K}} \otimes \mathbf{F})} = - \left[\mathbf{S}^* : \frac{\partial \mathbf{F}^e}{\partial \mathbf{F}} \right] \stackrel{(1)}{\vdots} \text{Dexp} [-\Delta \mathbf{L}_{n+1}^p] \cdot \mathbf{P}. \quad (7.51)$$

Durch Einsetzen der Gleichungen (7.50) und (7.51) führt die Linearisierung (7.49) auf den konsistenten Tangentenmodul

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{P}_{n+1}}{d\mathbf{F}_{n+1}} &= \frac{\partial^2 \mathcal{J}_{\text{inc}}}{\partial(\mathbf{F}_{n+1} \otimes \mathbf{F}_{n+1})} \\ &\quad - \left[\frac{\partial^2 \mathcal{J}_{\text{inc}}}{\partial(\tilde{\mathbf{K}} \otimes \tilde{\mathbf{K}})} \right]^{-1} \stackrel{(1)}{\vdots} \frac{\partial^2 \mathcal{J}_{\text{inc}}}{\partial(\tilde{\mathbf{K}} \otimes \mathbf{F}_{n+1})} \stackrel{(3)}{\vdots} \frac{\partial^2 \mathcal{J}_{\text{inc}}}{\partial(\tilde{\mathbf{K}} \otimes \mathbf{F}_{n+1})}. \end{aligned} \quad (7.52)$$

Diese Gleichung zeigt, dass der variationell konsistente Algorithmus automatisch eine symmetrische Tangente liefert.

7.2.1.3 Vergleich mit dem klassischen Return-Mapping-Algorithmus Wird der Gradient (7.32) in Form eines Residuums

$$\mathbf{R}(\tilde{\mathbf{K}}) = \frac{\partial \mathcal{J}_{\text{inc}}(\tilde{\mathbf{K}})}{\partial \tilde{\mathbf{K}}} \quad (7.53)$$

notiert, so kann der variationell konsistente Algorithmus direkt mit dem klassischen Return-Mapping-Algorithmus, wie er in Simo und Hughes (1998), Simo (1998) oder in dieser Arbeit erläutert ist, verglichen werden.

Beide Algorithmen basieren auf der gleichen (exponentiellen) Zeitintegration und die zugrunde liegenden Residuen besitzen eine ähnliche Struktur. Während das Residuum des klassischen Return-Mapping-Algorithmus zehndimensional ist ($\dim \mathbf{F}^p + \dim \lambda = 10$), ist das Residuum des variationell konsistenten Algorithmus im Raum des jeweiligen Projektionsoperators \mathbb{P} definiert. Der Rang dieses Raumes hat grundsätzlich eine geringere Dimension als zehn. Als obere Grenze lässt sich für $\mathbb{P} = \bar{\mathbb{I}}$ $\dim \bar{\mathbf{K}} = 9$ finden. Allerdings ist für viele Konstitutivmodelle der Rang von \mathbb{P} demgegenüber deutlich reduziert. Beispielsweise ist das Residuum (7.53) für eine von-Mises-Fließfunktion ($\text{tr } \mathbf{L}^p = 0$) und elastisch isotropes Material ($\boldsymbol{\Sigma} = \boldsymbol{\Sigma}^T$) im nur fünfdimensionalen Raum des symmetrischen Spannungsdeviators formuliert, der durch den Projektionsoperator $\mathbb{P}^{\text{dev,sym}} : \mathbb{R}^{3 \times 3} \rightarrow \mathbb{R}^5$ charakterisiert ist. Insgesamt ist deshalb zu erwarten, dass der neue variationell konsistente Algorithmus numerisch effizienter ist. Dies lässt sich anhand numerischer Experimente zeigen. Die Ergebnisse dieser Studie sind in Abschnitt 7.3 zu finden.

Neben den positiven Eigenschaften des hier vorgestellten projizierten variationell konsistenten Algorithmus, weist er auch Nachteile auf. So kann der Algorithmus nur bei isotropen Fließfunktionen angewandt werden. Überdies sollte die Norm der Fließrichtung (möglichst) konstant sein. Beide Punkte schränken den Anwendungsbereich stark ein. Deshalb wird im folgenden Abschnitt eine andere Parametrisierung vorgestellt, die den Algorithmus verallgemeinert und frei von diesen Mängeln ist.

7.2.2 Parametrisierung der Fließregel mit Pseudo-Spannungen

Eine Parametrisierung, die keine der vorstehenden Mängel aufweist, wurde bereits in den Artikeln von Mosler und Bruhns (2009a), Mosler (2010), Mosler und Bruhns (2009b) und Canadija und Mosler (2011) vorgeschlagen. Diese Parametrisierung beruht auf dem Konzept der so genannten *Pseudo-Spannungen*. Im Folgenden werden die Grundlagen dieser Parametrisierung und eine numerische Implementierung mit dem Verfahren von Newton angegeben. Schließlich wird auch dieser Algorithmus detailliert analysiert.

7.2.2.1 Allgemeines Im Gegensatz zu der im vorherstehenden Abschnitt diskutierten direkten Parametrisierung (7.26) von $\Delta \mathbf{L}_{n+1}^p$ wird die Fließrichtung hier durch so genannte Pseudo-Spannungen $\tilde{\boldsymbol{\Sigma}}$ implementiert. Diese Spannungen sind nicht identisch mit den zugehörigen physikalischen Spannungen $\boldsymbol{\Sigma}$, allerdings stimmen per Definition die Fließrichtungen überein. Es gilt

also $M(\tilde{\Sigma}) = M(\tilde{\Sigma})$. So ist die Fließregel (6.40₁) durch

$$\mathbf{L}^P(\lambda, \tilde{\Sigma}) = \lambda \left. \frac{\partial \phi}{\partial \tilde{\Sigma}} \right|_{\tilde{\Sigma}=\tilde{\Sigma}} \quad (7.54)$$

parametrisiert. Das bedeutet, dass die Fließregel nur anhand der Pseudo-Spannungen ausgewertet wird; die physikalischen Spannungen sind irrelevant. Mit dieser Methode sind alle durch die in Fließfunktion und -richtung intrinsisch enthaltenen Nebenbedingungen automatisch erfüllt. Beispielsweise gilt für von-Mises-Plastizität

$$\mathbf{1} : \left. \frac{\partial \phi}{\partial \tilde{\Sigma}} \right|_{\tilde{\Sigma}=\tilde{\Sigma}} = 0 \quad \forall \tilde{\Sigma}. \quad (7.55)$$

Damit ist der plastische Fluss erwartungsgemäß rein deviatorisch. Außerdem erlaubt dieses Konzept die Zerlegung der plastischen Dehnungsrate in Richtung und Amplitude. Somit kann der plastische Multiplikator $\Delta\lambda$ direkt berechnet werden und nicht mit der Norm von \mathbf{L}^P .

Mit der vorstehenden Parametrisierung lässt sich der plastische Teil des Deformationsgradienten zum Zeitpunkt t_{n+1} zu

$$\mathbf{F}_{n+1}^e = \mathbf{F}^{e(\text{trial})} \cdot \exp \left[-\Delta\lambda \left. \frac{\partial \phi}{\partial \tilde{\Sigma}} \right|_{\tilde{\Sigma}=\tilde{\Sigma}} \right] \quad (7.56)$$

berechnen, wobei $\tilde{\Sigma}$ die Pseudo-Spannungen zum Zeitpunkt t_{n+1} darstellen. Der Algorithmus basiert somit ebenfalls auf einer impliziten Zeitintegration. Mit Gleichung (7.56) lautet der variationelle konstitutive Algorithmus⁹

$$(\Delta\lambda, \tilde{\Sigma}) = \arg \inf_{\Delta\lambda, \tilde{\Sigma}} \mathcal{J}_{\text{inc}}(\mathbf{F}_{n+1}, \Delta\lambda, \tilde{\Sigma}) \Big|_{\mathbf{F}_{n+1}=\text{const}} \quad (7.57)$$

mit

$$\mathbf{P}_{n+1} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{F}_{n+1}} \inf_{\Delta\lambda, \tilde{\Sigma}} \mathcal{J}_{\text{inc}}(\mathbf{F}_{n+1}, \Delta\lambda, \tilde{\Sigma}) \quad (7.58)$$

und

$$\mathcal{J}_{\text{inc}}(\mathbf{F}_{n+1}, \Delta\lambda, \tilde{\Sigma}) = \Psi_{n+1}(\mathbf{F}_{n+1}, \Delta\lambda, \tilde{\Sigma}) - \Psi_n + \Delta\lambda Q_0^{\text{eq}}. \quad (7.59)$$

Die Nebenbedingung $\Delta\lambda \geq 0$ kann entweder durch den Ausdruck $\Delta\lambda = a^2$ parameterisiert oder durch $|\Delta\lambda|$ realisiert werden. Durch numerische Analysen kann gezeigt werden, dass sich die zweite Möglichkeit numerisch stabiler verhält. Aufgrund der trivialen Umsetzung der Nebenbedingung $\Delta\lambda \geq 0$ wird diese im Folgenden nicht weiter erläutert, jedoch im Rahmen der Numerik verwendet.

⁹Kinematische Verfestigung wurde nicht betrachtet, da sie den Algorithmus nur unwesentlich verändert, vgl. Mosler (2010).

Zur Lösung des Minimierungsproblems (7.57) wird auch hier das Verfahren von Newton herangezogen. Die zugehörigen Residuen lauten

$$\mathbf{R}(\Delta\lambda, \tilde{\Sigma}) = \begin{pmatrix} R_{\Delta\lambda}(\Delta\lambda, \tilde{\Sigma}) \\ \mathbf{R}_{\tilde{\Sigma}}(\Delta\lambda, \tilde{\Sigma}) \end{pmatrix}, \quad (7.60)$$

wobei

$$R_{\Delta\lambda}(\Delta\lambda, \tilde{\Sigma}) = \frac{\partial \mathcal{J}_{\text{inc}}}{\partial \Delta\lambda} = \Sigma_{n+1}^* : \mathbf{T}_1 + Q^{\text{iso}} + Q_0^{\text{eq}}, \quad (7.61)$$

$$\mathbf{R}_{\tilde{\Sigma}}(\Delta\lambda, \tilde{\Sigma}) = \frac{\partial \mathcal{J}_{\text{inc}}}{\partial \tilde{\Sigma}} = \Sigma_{n+1}^* : \mathbf{T}_2 \quad (7.62)$$

ist. Hier und im Weiteren wurde als Abkürzung $\Delta\mathbf{L}_{n+1}^{\text{p}} = \Delta\lambda \partial_{\Sigma} \phi|_{\Sigma=\tilde{\Sigma}}$ substituiert, der Spannungstensor Σ_{n+1}^* aus Definition (7.33) und die Terme

$$\mathbf{T}_1 = - \quad \text{Dexp} \left[-\Delta\mathbf{L}_{n+1}^{\text{p}} \right] : \partial_{\Sigma} \phi|_{\Sigma=\tilde{\Sigma}} \quad (7.63)$$

$$\mathbf{T}_2 = -\Delta\lambda_{n+1} \text{Dexp} \left[-\Delta\mathbf{L}_{n+1}^{\text{p}} \right] : \partial_{\tilde{\Sigma}}^2 \phi|_{\Sigma=\tilde{\Sigma}} \quad (7.64)$$

eingeführt.

Mit den Gleichungen (7.61) und (7.62) lässt sich die Konsistenz dieses Algorithmus zeigen. Die Auswertung für den Grenzübergang $\Delta t \rightarrow 0$ führt auf

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\partial \mathcal{J}_{\text{inc}}}{\partial \Delta\lambda} = - \quad \Sigma_{n+1} : \partial_{\Sigma} \phi|_{\Sigma=\tilde{\Sigma}} + Q^{\text{iso}} + Q_0^{\text{eq}} = -\phi, \quad (7.65)$$

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\partial \mathcal{J}_{\text{inc}}}{\partial \tilde{\Sigma}} = -\Delta\lambda_{n+1} \Sigma_{n+1} : \partial_{\tilde{\Sigma}}^2 \phi|_{\Sigma=\tilde{\Sigma}}. \quad (7.66)$$

Die Gleichung (7.65) liefert die Stationaritätsbedingung von \mathcal{J}_{inc} bezüglich des plastischen Multiplikators und stellt mit $\phi \leq 0$ physikalisch zulässige Spannungszustände sicher. Bei der zweiten Stationaritätsbedingung $\partial_{\tilde{\Sigma}} \mathcal{J}_{\text{inc}} = \mathbf{0}$ handelt es sich um eine Kompatibilitätsbedingung zwischen den physikalischen Spannungen Σ und den Pseudo-Spannungen $\tilde{\Sigma}$. Wird die Annahme, dass Σ^{eq} den Homogenitätsgrad eins besitzt, in den Eulerschen Satz über homogene Funktionen eingesetzt, so ist

$$\Sigma^{\text{eq}} = \frac{\partial \Sigma^{\text{eq}}}{\partial \Sigma} : \Sigma \quad (7.67)$$

und weiter

$$\Sigma : \frac{\partial^2 \phi}{\partial (\Sigma \otimes \Sigma)} = \mathbf{0}. \quad (7.68)$$

Der Vergleich der Gleichungen (7.68) und (7.66) zeigt somit, dass die Forderung $\partial_{\tilde{\Sigma}} \mathcal{J}_{\text{inc}} = \mathbf{0}$ die Einhaltung der Fließregel sicherstellt. Aus diesem Grund konvergiert der in Pseudo-Spannungen formulierte variationelle Algorithmus gegen die korrekte Lösung und ist daher konsistent.

Die für die numerische Implementierung erforderlichen zweiten Ableitungen von \mathcal{I}_{inc} lauten

$$\frac{\partial^2 \mathcal{I}_{\text{inc}}}{\partial \Delta \lambda^2} = \mathbf{S}^* \begin{pmatrix} (1) \\ \vdots \end{pmatrix} \mathbf{T}_1 \begin{pmatrix} (3) \\ \vdots \end{pmatrix} \mathbf{T}_1 + \quad \mathbf{\Sigma}^* : \mathbf{T}_3 \quad + \frac{\partial Q^{\text{iso}}}{\partial \Delta \lambda}, \quad (7.69)$$

$$\frac{\partial^2 \mathcal{I}_{\text{inc}}}{\partial \Delta \lambda \partial \tilde{\Sigma}} = \mathbf{S}^* \begin{pmatrix} (1) \\ \vdots \end{pmatrix} \mathbf{T}_1 \begin{pmatrix} (3) \\ \vdots \end{pmatrix} \mathbf{T}_2 + \quad \mathbf{\Sigma}^* : \mathbf{T}_2 + \mathbf{\Sigma}^* : \mathbf{T}_4, \quad (7.70)$$

$$\frac{\partial^2 \mathcal{I}_{\text{inc}}}{\partial \tilde{\Sigma} \partial \Delta \lambda} = \mathbf{S}^* \begin{pmatrix} (1) \\ \vdots \end{pmatrix} \mathbf{T}_2 \begin{pmatrix} (3) \\ \vdots \end{pmatrix} \mathbf{T}_1 + \frac{1}{\Delta \lambda} \mathbf{\Sigma}^* : \mathbf{T}_2 - \mathbf{\Sigma}^* : \mathbf{T}_4, \quad (7.71)$$

$$\frac{\partial^2 \mathcal{I}_{\text{inc}}}{\partial (\tilde{\Sigma} \otimes \tilde{\Sigma})} = \mathbf{S}^* \begin{pmatrix} (1) \\ \vdots \end{pmatrix} \mathbf{T}_2 \begin{pmatrix} (3) \\ \vdots \end{pmatrix} \mathbf{T}_2 + \quad \mathbf{\Sigma}^* : \mathcal{T}_5 + \mathbf{\Sigma}^* : \mathcal{T}_6, \quad (7.72)$$

wobei die Abkürzungen

$$\mathbf{T}_3 = \quad \mathbf{D}^2 \exp \left[-\Delta \mathbf{L}_{n+1}^p \right] \begin{pmatrix} (3) \\ \vdots \end{pmatrix} \partial_{\Sigma} \phi \Big|_{\Sigma=\tilde{\Sigma}} \begin{pmatrix} (5) \\ \vdots \end{pmatrix} \partial_{\Sigma} \phi \Big|_{\Sigma=\tilde{\Sigma}}, \quad (7.73)$$

$$\mathbf{T}_4 = \Delta \lambda_{n+1} \mathbf{D}^2 \exp \left[-\Delta \mathbf{L}_{n+1}^p \right] \begin{pmatrix} (3) \\ \vdots \end{pmatrix} \partial_{\Sigma}^2 \phi \Big|_{\Sigma=\tilde{\Sigma}} \begin{pmatrix} (5) \\ \vdots \end{pmatrix} \partial_{\Sigma} \phi \Big|_{\Sigma=\tilde{\Sigma}}, \quad (7.74)$$

$$\mathcal{T}_5 = \Delta \lambda_{n+1}^2 \mathbf{D}^2 \exp \left[-\Delta \mathbf{L}_{n+1}^p \right] \begin{pmatrix} (3) \\ \vdots \end{pmatrix} \partial_{\Sigma}^2 \phi \Big|_{\Sigma=\tilde{\Sigma}} \begin{pmatrix} (5) \\ \vdots \end{pmatrix} \partial_{\Sigma}^2 \phi \Big|_{\Sigma=\tilde{\Sigma}}, \quad (7.75)$$

$$\mathcal{T}_6 = -\Delta \lambda_{n+1} \mathbf{D} \exp \left[-\Delta \mathbf{L}_{n+1}^p \right] : \partial_{\Sigma}^3 \phi \Big|_{\Sigma=\tilde{\Sigma}} \quad (7.76)$$

verwendet worden sind. Alle Ableitungen der Fließfunktion sind in Anhang B.3 angegeben.

Da \mathcal{I}_{inc} für plastische Lastschritte hinreichend glatt ist, folgt aus dem Satz von Schwarz, dass die beiden Ableitungen (7.70) und (7.71) identisch sind, also $\partial_{\Delta \lambda}^2 \tilde{\Sigma} \mathcal{I}_{\text{inc}} = \partial_{\tilde{\Sigma} \Delta \lambda}^2 \mathcal{I}_{\text{inc}}$ gilt. Für die Berechnung kann daher der mit geringerem numerischen Aufwand verbundene Ausdruck gewählt werden.

Für die auf Strukturebene erforderliche konsistente algorithmische Tangente $d\mathbf{P}/d\mathbf{F}$ sind die beiden zusätzlichen Ableitungen

$$\frac{\partial^2 \mathcal{I}_{\text{inc}}}{\partial \Delta \lambda \partial \mathbf{F}} = \left[\mathbf{S}^* : \frac{\partial \mathbf{F}^e}{\partial \mathbf{F}} \right] \begin{pmatrix} (1) \\ \vdots \end{pmatrix} \mathbf{T}_1, \quad (7.77)$$

$$\frac{\partial^2 \mathcal{I}_{\text{inc}}}{\partial (\tilde{\Sigma} \otimes \mathbf{F})} = \left[\mathbf{S}^* : \frac{\partial \mathbf{F}^e}{\partial \mathbf{F}} \right] \begin{pmatrix} (1) \\ \vdots \end{pmatrix} \mathbf{T}_2 \quad (7.78)$$

erforderlich. Weitere Details über Eigenschaften der Hesse-Matrix und die algorithmische Tangente werden in dem Abschnitt 7.2.3 gegeben.

Der größte Vorteil dieses Algorithmus ist seine umfangreiche Anwendungsmöglichkeit. Außer der Restriktion, dass die Fließfunktion den Homogenitätsgrad eins besitzt, sind keine weiteren Annahmen erforderlich. Deshalb kann er für beliebige anisotrope Fließfunktionen angewandt werden. Allerdings führt diese Verallgemeinerung, wie beim Vergleich der Hesse-Matrizen (7.45) bzw. (7.69–7.76) erkennbar ist, zu einem deutlich höheren numerischen Aufwand.

Beispielsweise ist die Hesse-Matrix abhängig von mehreren sechsstufigen Tensoren. Deshalb ist der allgemeinere Algorithmus numerisch weniger effizient, als der für einen Sonderfall adaptierte Algorithmus nach Abschnitt 7.2.1.

Ein wesentlicher Nachteil des auf Pseudo-Spannungen basierenden Algorithmus ist die hochgradig schlechte Kondition der Hesse-Matrix (7.69–7.76). Die schlechte Kondition hat unterschiedliche Gründe. Zunächst besitzt die Fließfunktion voraussetzungsgemäß den Homogenitätsgrad eins. Das bedeutet, dass die Fließrichtungen zweier Spannungstensoren

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial \tilde{\Sigma}} \right|_{\tilde{\Sigma}=\tilde{\Sigma}} = \left. \frac{\partial \phi}{\partial \tilde{\Sigma}} \right|_{\tilde{\Sigma}=c\tilde{\Sigma}} \quad \forall c \in \mathbb{R}^+ \quad (7.79)$$

in Betrag und Richtung übereinstimmen. Folglich ist die Energie \mathcal{J}_{inc} gegenüber einer solchen Transformation invariant, d. h.

$$\mathcal{J}_{\text{inc}}(\mathbf{F}_{n+1}, \Delta\lambda, \tilde{\Sigma}) = \mathcal{J}_{\text{inc}}(\mathbf{F}_{n+1}, \Delta\lambda, c\tilde{\Sigma}) \quad \forall c \in \mathbb{R}^+. \quad (7.80)$$

Darüber hinaus führen auch Invarianzen der Fließfunktion zu Singularitäten. Beispielsweise ist die von-Mises-Fließfunktion bezüglich additiv überlagerter Kugeltensoren ($\alpha \mathbf{1}$) invariant. Bezeichnet \mathbb{P}^{dev} die deviatorische Projektion, gilt

$$\mathcal{J}_{\text{inc}}(\mathbf{F}_{n+1}, \Delta\lambda, \tilde{\Sigma}) = \mathcal{J}_{\text{inc}}(\mathbf{F}_{n+1}, \Delta\lambda, \tilde{\Sigma} + \mathbf{A}) \quad \forall \mathbf{A} \in \ker(\mathbb{P}^{\text{dev}}). \quad (7.81)$$

Dies kann durch eine Analyse der Fließrichtung wie folgt verifiziert werden:

$$\frac{\text{dev } \tilde{\Sigma}}{\|\text{dev } \tilde{\Sigma}\|} = \frac{\text{dev } [\tilde{\Sigma} + \mathbf{A}]}{\|\text{dev } [\tilde{\Sigma} + \mathbf{A}]\|} \quad \forall \mathbf{A} \in \ker(\mathbb{P}^{\text{dev}}) = \{c \mathbf{1} \mid \forall c \in \mathbb{R}^+\} \quad (7.82)$$

7.2.3 Parametrisierung der Fließregel mit Pseudo-Spannungen und Euler-Winkeln

In diesem Abschnitt wird das mit Pseudo-Spannungen parameterisierte Minimierungsproblem gelöst. Hierzu werden die Pseudo-Spannungen wiederum selbst parameterisiert, um die Singularität der Hesse-Matrix zu beseitigen.

Die Invarianz (7.79) wird durch eine Normierung

$$\|\tilde{\Sigma}\| = 1 \quad (7.83)$$

beseitigt. Die Nebenbedingung (7.83) lässt sich durch eine geeignete Parametrisierung der Eigenwerte $\tilde{\Sigma}_k$ mit sphärischen Koordinaten (ψ, ρ) durch

$$\tilde{\Sigma} = \sum_{k=1}^3 \tilde{\Sigma}_k(\psi, \rho) \mathbf{B}_k \quad (7.84)$$

erfüllen. In Gleichung (7.84) bezeichnen \mathbf{B}_k die Eigenprojektionen. Für drei unterschiedliche Eigenwerte¹⁰ gilt

$$\tilde{\Sigma}_1 = \sin \psi \cos \rho, \quad \tilde{\Sigma}_2 = \sin \psi \sin \rho, \quad \tilde{\Sigma}_3 = \cos \psi. \quad (7.85)$$

Im Rahmen der Numerik werden die Eigenprojektionen \mathbf{B}_k zunächst mittels der Eigenprojektionen der Prädiktorspannungen $\mathbf{B}_k^{(\text{trial})}$ approximiert und anschließend durch Rotationstensoren korrigiert. Somit gilt

$$\mathbf{B}_k(\varphi_1, \vartheta_1, \chi_1, \varphi_2, \vartheta_2, \chi_2) = \mathbf{R}^T(\varphi_1, \vartheta_1, \chi_1) \cdot \mathbf{B}_k^{(\text{trial})} \cdot \mathbf{R}(\varphi_2, \vartheta_2, \chi_2). \quad (7.86)$$

Der Rotationstensor \mathbf{R} ist multiplikativ durch

$$\mathbf{R}(\varphi, \vartheta, \chi) = \mathbf{R}_1(\varphi) \cdot \mathbf{R}_2(\vartheta) \cdot \mathbf{R}_3(\chi) \quad (7.87)$$

aus den einzelnen Rotationstensoren (6.20–6.21) konstruiert.

Die vollständige Parametrisierung der Pseudo-Spannungen lautet damit

$$\begin{aligned} \tilde{\Sigma}(\psi, \rho, \varphi_1, \varphi_2, \vartheta_1, \vartheta_2, \chi_1, \chi_2) = \\ \mathbf{R}^T(\varphi_1, \vartheta_1, \chi_1) \cdot \left[\sum_{k=1}^3 \tilde{\Sigma}_k(\psi, \rho) \mathbf{B}_k^{(\text{trial})} \right] \cdot \mathbf{R}(\varphi_2, \vartheta_2, \chi_2). \end{aligned} \quad (7.88)$$

Für elastisch isotrope Konstitutivmodelle sind die Mandel-Spannungen Σ und damit auch die Pseudo-Spannungen $\tilde{\Sigma}$ symmetrisch. In diesem Fall tritt an die Stelle von Gleichung (7.88) die fünfdimensionale Parametrisierung

$$\tilde{\Sigma}(\psi, \rho, \varphi, \vartheta, \chi) = \mathbf{R}^T(\varphi, \vartheta, \chi) \cdot \left[\sum_{k=1}^3 \tilde{\Sigma}_k(\psi, \rho) \mathbf{B}_k^{(\text{trial})} \right] \cdot \mathbf{R}(\varphi, \vartheta, \chi). \quad (7.89)$$

Ist die Fließfunktion überdies isotrop, folgt aus der Koaxialität zwischen dem Prädiktor des elastischen rechten Cauchy-Green-Tensors $\mathbf{C}^{\text{e}(\text{trial})}$ und dem physikalischen Mandel-Spannungstensor Σ in jedem Iterationsschritt die Identität $\mathbf{B}_k = \mathbf{B}_k^{(\text{trial})}$. Folglich lassen sich bei einem isotropen Modell die Pseudo-Spannungen mit

$$\tilde{\Sigma}(\psi, \rho) = \sum_{k=1}^3 \tilde{\Sigma}_k(\psi, \rho) \mathbf{B}_k^{(\text{trial})} \quad (7.90)$$

¹⁰Im Sonderfall mehrfacher Eigenwerte ist die Richtung der entsprechenden Eigenvektoren des Tensors Σ nicht eindeutig bestimmt. Jedoch kann auch in diesem Fall eine spektrale Zerlegung definiert werden, siehe beispielsweise Xiao u. a. (1997).

zu einer Parametrisierung aus zwei Variablen vereinfachen. Damit ist das ganze Minimierungsproblem von nur drei Unbekannten $(\Delta\lambda, \psi, \rho)$ abhängig. Der variationell konsistente Algorithmus kann mit dem in Hauptachsen formulierten klassischen Return-Mapping-Algorithmus verglichen werden. Dieser benötigt, wie in Simo und Hughes (1998) gezeigt, neben den drei Hauptrichtungen der Fließrichtung den plastischen Multiplikator, mithin also vier Variable. In dem variationell konsistenten Algorithmus müssen hingegen nur drei Unbekannte berechnet werden. Außerdem lässt sich die numerisch aufwendige tensorielle Ableitung der exponentiellen Tensorfunktion (vgl. Ortiz u. a. (2001)) vermeiden, da die Eigenprojektionen innerhalb des lokalen Spannungsupdates konstant sind. Daher ist der variationell konsistente Algorithmus für vollständig isotrope Konstitutivmodelle sehr effizient.

Neben den bereits diskutierten Nebenbedingungen, die in den Parametrisierungen (7.88–7.90) enthalten sind, besitzen einige Fließfunktionen zusätzliche intrinsische Invarianzen bezüglich der Energie \mathcal{J}_{inc} (vgl. Gleichung (7.81)) und können deshalb zu einer schlecht konditionierten Hesse-Matrix führen.

Ein Beispiel hierfür ist die von-Mises-Fließbedingung mit assoziierten Evolutionsgleichungen. Diese weist die Nebenbedingung $\mathbf{1} : \partial_{\Sigma}\phi = 0$ auf. Die Parametrisierung (7.84) erfordert dann die Berücksichtigung von

$$\sum_{k=1}^3 \tilde{\Sigma}_k = 0. \quad (7.91)$$

Wird das charakteristische Polynom des Spannungstensors mit den Cardanischen Formeln unter Berücksichtigung der Nebenbedingungen (7.83) und (7.91) gelöst, kann die Parametrisierung

$$\tilde{\Sigma}_k(\psi) = \sqrt{\frac{2}{3}} \sin \left[\frac{2}{3} \pi k - \psi \right] \quad k = \{1, 2, 3\} \quad (7.92)$$

hergeleitet werden. Diese Parametrisierung wird für die numerischen Beispiele in Abschnitt 7.3 verwendet. In diesem Fall ist das zu minimierende Potenzial (7.22) lediglich von den beiden Unbekannten $\Delta\lambda$ und ψ abhängig. Der variationell konsistente Algorithmus ist deshalb numerisch sehr effizient – sogar im Vergleich zu dem klassischen Return-Mapping-Algorithmus, der in diesem Fall eine Beschreibung in Abhängigkeit von vier Unbekannten erfordert.

Die Konsistenz eines Algorithmus mit der verallgemeinerten Parametrisierung

$$(\Delta\lambda, \mathbf{\Gamma}) = \arg \inf_{\Delta\lambda, \mathbf{\Gamma}} \mathcal{J}_{\text{inc}}(\mathbf{F}_{n+1}, \Delta\lambda, \mathbf{\Gamma}) \Big|_{\mathbf{F}_{n+1}=\text{const}} \quad (7.93)$$

mit

$$\mathbf{P}_{n+1} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{F}_{n+1}} \inf_{\Delta\lambda, \mathbf{\Gamma}} \mathcal{J}_{\text{inc}}(\mathbf{F}_{n+1}, \Delta\lambda, \mathbf{\Gamma}) \quad (7.94)$$

und

$$\mathcal{J}_{\text{inc}}(\mathbf{F}_{n+1}, \Delta\lambda, \mathbf{\Gamma}) = \Psi_{n+1}(\mathbf{F}_{n+1}, \Delta\lambda, \mathbf{\Gamma}) - \Psi_n + \Delta\lambda Q_0^{\text{eq}} \quad (7.95)$$

kann in gleicher Weise zuvor gezeigt werden. Abkürzend wurde in den Gleichungen $\mathbf{\Gamma}$ für einen Vektor eingeführt, der alle Winkel der entsprechenden Parametrisierung enthält. Während $\mathbf{\Gamma}$ im allgemeinen Fall (7.88) ein achtdimensionaler Vektor ist, kann $\mathbf{\Gamma}$ bei Verwendung der Parametrisierung nach Gleichung (7.92) zu einem Skalar reduziert werden.

Zur Unterscheidung zwischen den in Gleichung (7.59) und Gleichung (7.95) definierten Energien \mathcal{J}_{inc} wird im Folgenden eine Tilde für die direkte Parametrisierung in Pseudo-Spannungen (7.59) verwendet. Dann lassen sich die integrierten Spannungsleistungen von zwei verschiedenen variationell konsistenten Algorithmen als Komposition der Form

$$\mathcal{J}_{\text{inc}} = \tilde{\mathcal{J}}_{\text{inc}} \circ \tilde{\mathbf{P}} \quad (7.96)$$

formulieren. Hierbei ist die Projektion durch

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{P}} &: (\mathbb{R}^{3 \times 3}, \mathbb{R}^+, \mathbb{R}^8) \rightarrow (\mathbb{R}^{3 \times 3}, \mathbb{R}^+, \mathbb{R}^{3 \times 3}) \\ &(\mathbf{F}_{n+1}, \Delta\lambda, \mathbf{\Gamma}) \mapsto (\mathbf{F}_{n+1}, \Delta\lambda, \tilde{\mathbf{\Sigma}}) \end{aligned} \quad (7.97)$$

gekennzeichnet. Der Vergleich beider Parametrisierungen zeigt nun, dass die ursprüngliche Struktur durch die neue Parametrisierung prinzipiell nicht berührt wird und dass deshalb der mit $\mathbf{\Gamma}$ parameterisierte Algorithmus ebenfalls konsistent ist.

7.2.3.1 Numerische Implementierung – allgemeiner Fall Im allgemeinen anisotropen Fall kann die unbekannt Fließrichtung entweder durch eine achtdimensionale Beschreibung nach Gleichung (7.88) oder durch eine fünfdimensionale Parametrisierung entsprechend Gleichung (7.89) beschrieben werden. Der aus der inkrementellen Energie $\mathcal{J}_{\text{inc}} = \mathcal{J}_{\text{inc}}(\mathbf{F}_{n+1}, \Delta\lambda, \mathbf{\Gamma})$ folgende variationell konsistente Algorithmus (7.93) lässt sich auch bei der Parametrisierung in $\mathbf{\Gamma}$ mit dem Verfahren von Newton effektiv lösen. Das zugehörige Residuum lautet

$$\mathbf{R}(\Delta\lambda, \mathbf{\Gamma}) = \begin{pmatrix} \mathbf{R}_{\Delta\lambda}(\Delta\lambda, \mathbf{\Gamma}) \\ \mathbf{R}_{\mathbf{\Gamma}}(\Delta\lambda, \mathbf{\Gamma}) \end{pmatrix} \quad (7.98)$$

mit

$$\mathbf{R}_{\Delta\lambda}(\Delta\lambda, \mathbf{\Gamma}) = \frac{\partial \mathcal{J}_{\text{inc}}}{\partial \Delta\lambda}, \quad (7.61)$$

$$\mathbf{R}_{\mathbf{\Gamma}}(\Delta\lambda, \mathbf{\Gamma}) = \frac{\partial \mathcal{J}_{\text{inc}}}{\partial \mathbf{\Gamma}} = \underbrace{\frac{\partial \mathcal{J}_{\text{inc}}}{\partial \tilde{\mathbf{\Sigma}}}}_{\text{≐ Gl. (7.62)}} : \frac{\partial \tilde{\mathbf{\Sigma}}}{\partial \mathbf{\Gamma}}. \quad (7.99)$$

Wie zu erkennen, ist das Residuum bezüglich des plastischen Multiplikators durch die Parametrisierung der Pseudo-Spannungen nicht beeinflusst und entspricht deshalb dem Residuum, das im Abschnitt 7.2.2 hergeleitet wurde. Überdies kann das Residuum der Fließrichtung (7.99) multiplikativ in den ursprünglichen Algorithmus, Gleichung (7.60), und die Parametrisierung zerlegt werden.

Die für das Verfahren von Newton erforderlichen zweiten Ableitungen von \mathcal{J}_{inc} lassen sich direkt berechnen. Sie lauten

$$\frac{\partial^2 \mathcal{J}_{\text{inc}}}{\partial \Delta \lambda^2}, \quad (7.69)$$

$$\frac{\partial^2 \mathcal{J}_{\text{inc}}}{\partial \Delta \lambda \partial \mathbf{\Gamma}} = \underbrace{\frac{\partial^2 \mathcal{J}_{\text{inc}}}{\partial \Delta \lambda \partial \tilde{\Sigma}}}_{\doteq \text{Gl. (7.70)}} : \frac{\partial \tilde{\Sigma}}{\partial \mathbf{\Gamma}}, \quad (7.100)$$

$$\frac{\partial^2 \mathcal{J}_{\text{inc}}}{\partial \mathbf{\Gamma}^2} = \underbrace{\frac{\partial^2 \mathcal{J}_{\text{inc}}}{\partial (\tilde{\Sigma} \otimes \tilde{\Sigma})}}_{\doteq \text{Gl. (7.72)}} \stackrel{(1)}{=} \frac{\partial \tilde{\Sigma}}{\partial \mathbf{\Gamma}} \stackrel{(3)}{=} \frac{\partial \tilde{\Sigma}}{\partial \mathbf{\Gamma}} + \underbrace{\frac{\partial \mathcal{J}_{\text{inc}}}{\partial \tilde{\Sigma}}}_{\doteq \text{Gl. (7.62)}} : \frac{\partial^2 \tilde{\Sigma}}{\partial \mathbf{\Gamma}^2}. \quad (7.101)$$

Um schließlich mit dem Algorithmus quadratische Konvergenz auch auf Strukturebene zu erreichen, sind die Tangentenmoduli für das Verfahren von Newton erforderlich. Sie sind durch die Ausdrücke

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{P}_{n+1}}{d\mathbf{F}_{n+1}} &= \frac{\partial^2 \mathcal{J}_{\text{inc}}}{\partial (\mathbf{F}_{n+1} \otimes \mathbf{F}_{n+1})} + \\ &\quad \underbrace{\frac{\partial^2 \mathcal{J}_{\text{inc}}}{\partial \mathbf{F}_{n+1} \partial \Delta \lambda}}_{\doteq \text{Gl. (7.77)}} \otimes \frac{d\Delta \lambda}{d\mathbf{F}_{n+1}} + \underbrace{\frac{\partial^2 \mathcal{J}_{\text{inc}}}{\partial (\mathbf{F}_{n+1} \otimes \tilde{\Sigma})}}_{\doteq \text{Gl. (7.78)}} : \frac{\partial \tilde{\Sigma}}{\partial \mathbf{\Gamma}} \cdot \frac{d\mathbf{\Gamma}}{d\mathbf{F}_{n+1}} \end{aligned} \quad (7.102)$$

gegeben. Die Linearisierungen $d\Delta \lambda / d\mathbf{F}_{n+1}$ und $d\mathbf{\Gamma} / d\mathbf{F}_{n+1}$ in dieser Gleichung folgen, wie bei den bereits vorgestellten Algorithmen, durch Linearisierung der konvergierten Residua (7.98)

$$\frac{\partial^2 \mathcal{J}_{\text{inc}}}{\partial \Delta \lambda^2} d\Delta \lambda + \frac{\partial^2 \mathcal{J}_{\text{inc}}}{\partial \Delta \lambda \partial \mathbf{\Gamma}} \cdot d\mathbf{\Gamma} + \frac{\partial^2 \mathcal{J}_{\text{inc}}}{\partial \Delta \lambda \partial \mathbf{F}_{n+1}} : d\mathbf{F}_{n+1} = 0, \quad (7.103)$$

$$\frac{\partial^2 \mathcal{J}_{\text{inc}}}{\partial \mathbf{\Gamma} \partial \Delta \lambda} d\Delta \lambda + \frac{\partial^2 \mathcal{J}_{\text{inc}}}{\partial \mathbf{\Gamma}^2} \cdot d\mathbf{\Gamma} + \frac{\partial^2 \mathcal{J}_{\text{inc}}}{\partial \mathbf{\Gamma} \partial \mathbf{F}_{n+1}} : d\mathbf{F}_{n+1} = \mathbf{0}. \quad (7.104)$$

Die Jacobi-Determinanten dieses Gleichungssystems lassen sich mit Hilfe der

Cramer-Regel zu den Ausdrücken

$$\frac{d\Delta\lambda}{d\mathbf{F}_{n+1}} = - \frac{\frac{\partial(\partial_{\Delta\lambda}\mathcal{J}_{\text{inc}}, \partial_{\mathbf{\Gamma}}\mathcal{J}_{\text{inc}})}{\partial(\mathbf{F}_{n+1}, \mathbf{\Gamma})}}{\frac{\partial(\partial_{\Delta\lambda}\mathcal{J}_{\text{inc}}, \partial_{\mathbf{\Gamma}}\mathcal{J}_{\text{inc}})}{\partial(\Delta\lambda, \mathbf{\Gamma})}}, \quad (7.105)$$

$$\frac{d\mathbf{\Gamma}}{d\mathbf{F}_{n+1}} = - \frac{\frac{\partial(\partial_{\Delta\lambda}\mathcal{J}_{\text{inc}}, \partial_{\mathbf{\Gamma}}\mathcal{J}_{\text{inc}})}{\partial(\Delta\lambda, \mathbf{F}_{n+1})}}{\frac{\partial(\partial_{\Delta\lambda}\mathcal{J}_{\text{inc}}, \partial_{\mathbf{\Gamma}}\mathcal{J}_{\text{inc}})}{\partial(\Delta\lambda, \mathbf{\Gamma})}} \quad (7.106)$$

auflösen und in Gleichung (7.102) einsetzen.

7.2.3.2 Numerische Implementierung – elastische und plastische isotrope Konstitutivmodelle Ist ein Materialmodell gewählt, das sich elastisch und plastisch isotrop verhält, so ist der elastische rechte Cauchy-Green-Tensor $\mathbf{C}^{\text{e(trial)}}$ koaxial zu dem konvergierten Tensor $\mathbf{C}_{n+1}^{\text{e}}$. Dieser ist seinerseits koaxial zu den Mandel-Spannungen. Deshalb ist die Eigenprojektion aller involvierten Tensoren identisch und wird im Weiteren durch \mathbf{B}_k bezeichnet.

Mit diesen Annahmen lässt sich die exponentielle Tensorfunktion zu

$$\exp \left[\Delta\lambda \frac{\partial\phi}{\partial\mathbf{\Sigma}} \Big|_{\mathbf{\Sigma}=\bar{\mathbf{\Sigma}}} \right] = \sum_{k=1}^3 \exp \left[\Delta\lambda \frac{\partial\phi}{\partial\Sigma_k} \Big|_{\Sigma_k=\bar{\Sigma}_k} \right] \mathbf{B}_k \quad (7.107)$$

spektral zerlegen. Demzufolge ist der elastische rechte Cauchy-Green Verzerrungstensor durch den Ausdruck

$$\mathbf{C}_{n+1}^{\text{e}} = (\mathbf{F}_{n+1}^{\text{e}})^T \cdot \mathbf{F}_{n+1}^{\text{e}} = \sum_{k=1}^3 \lambda_k^{\mathbf{C}^{\text{e(trial)}}} \exp \left[-2 \Delta\lambda \frac{\partial\phi}{\partial\Sigma_k} \Big|_{\Sigma_k=\bar{\Sigma}_k} \right] \mathbf{B}_k \quad (7.108)$$

gegeben. Hierbei bezeichnet $\lambda_k^{\mathbf{C}^{\text{e(trial)}}$ die Eigenwerte des elastischen rechten Cauchy-Green-Verzerrungstensors im Prädiktorschritt. Für ein isotropes elastisches Materialmodell ist die freie Helmholtzenergie lediglich von den Eigenwerten

Folgende Seite

Abb. 7.1: Lokale Iteration des variationell konsistenten Algorithmus in Hauptachsenformulierung für vollständig isotrope elastische Materialmodelle mit Plastizität vom Mises-Typ.

1. Gegeben: \mathbf{F}_n^p , α_n^{iso} und \mathbf{F}_{n+1}
2. Werte den Prädiktorschritt $(\bullet)^{(\text{trial})}$ aus:
 - Berechne zugehörige kinematische Größen: $\mathbf{F}^{(\text{trial})}$, $\mathbf{C}^{e(\text{trial})}$, $\lambda_k^{C^{e(\text{trial})}}$ und $\mathbf{B}_k^{(\text{trial})}$, vgl. Gleichung (7.108).
 - Berechne Spannungszustand $\boldsymbol{\Sigma}_{n+1}^{(\text{trial})}$ und zugehörigen Pseudo-Spannungstensor $\tilde{\boldsymbol{\Sigma}}^{(\text{trial})} = \boldsymbol{\Sigma}_{n+1}^{(\text{trial})} / \|\boldsymbol{\Sigma}_{n+1}^{(\text{trial})}\|$.
 - Berechne die Parameter $\psi^{(\text{trial})}$ und $\rho^{(\text{trial})}$, vgl. Gleichung (7.84).
3. IF $\partial_{\Delta\lambda} \mathcal{J}_{\text{inc}}|_{\Delta\lambda=0}^{(\text{trial})} > 0$: {setze $\mathbf{F}_{n+1}^p = \mathbf{F}_n^p$, $\alpha_{n+1}^{\text{iso}} = \alpha_n^{\text{iso}}$ und EXIT}, ELSE:
4. Setze Anfangswerte auf $\psi_0 = \psi^{(\text{trial})}$, $\rho_0 = \rho^{(\text{trial})}$ und $\Delta\lambda = 0$.
5. UNTIL $\|\mathbf{R}\| > \text{tol}$ DO:

(a) Berechne den Gradienten der inkrementellen Spannungsleistung \mathcal{J}_{inc} (Residuum) $\mathbf{R} = (R_{\Delta\lambda}, R_{\psi}, R_{\rho})^T$, mit

$$\mathbf{R} = -2 \sum_{k=1}^3 \left\{ \lambda_k^{C^{e(\text{trial})}} \frac{\partial \Psi^e}{\partial \lambda_k^C} \exp[-2 \Delta\lambda \partial_{\Sigma_k} \phi|_{\Sigma_k = \bar{\Sigma}_k}] \begin{pmatrix} \partial_{\Sigma_k} \phi|_{\Sigma_k = \bar{\Sigma}_k} \\ \Delta\lambda \partial_{(\Sigma_k, \psi)}^2 \phi|_{\Sigma_k = \bar{\Sigma}_k} \\ \Delta\lambda \partial_{(\Sigma_k, \rho)}^2 \phi|_{\Sigma_k = \bar{\Sigma}_k} \end{pmatrix} \right\} + \begin{pmatrix} Q^{\text{iso}} + Q_0^{\text{eq}} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

- (b) Berechne den Gradienten des Residuums (Hessematrix) $\mathbf{H} = \nabla \mathbf{R}$.
- (c) Ersetze die Unbekannten $\mathbf{U} = (\Delta\lambda, \psi, \rho)^T$, ggf. mit Line-Search-Verfahren, durch $\mathbf{U}_{n+1} = \mathbf{U}_n - \mathbf{H}^{-1} \cdot \mathbf{R}$.
- (d) Ersetze die Deformationsgradienten durch $\mathbf{F}_{n+1}^p = \exp[\Delta\lambda \partial_{\boldsymbol{\Sigma}} \phi|_{n+1}] \cdot \mathbf{F}_n^p$ und $\mathbf{F}_{n+1}^e = \mathbf{F}_{n+1} \cdot (\mathbf{F}_{n+1}^p)^{-1}$.
- (e) Ersetze den Spannungszustand durch $\mathbf{S}_{n+1} = 2 \mathbf{F}_{n+1}^{p-1} \cdot \frac{\partial \mathcal{J}_{\text{inc}}}{\partial \mathbf{C}^e} \cdot (\mathbf{F}_{n+1}^p)^{-T}$ und die interne Verfestigungsvariable durch $\alpha_{n+1}^{\text{iso}} = \alpha_n^{\text{iso}} + \Delta\lambda \partial_Q \phi$

$$\lambda_k^{C^e} = \lambda_k^{C^{e(\text{trial})}} \exp \left[-2 \Delta \lambda \left. \frac{\partial \phi}{\partial \Sigma_k} \right|_{\Sigma_k = \bar{\Sigma}_k} \right] \quad (7.109)$$

abhängig. Folglich ist das zu lösende Minimierungsproblem durch

$$\inf_{\Delta \lambda, \mathbf{\Gamma}} \mathcal{J}_{\text{inc}}(\mathbf{F}_{n+1}, \Delta \lambda, \mathbf{\Gamma}) \quad (7.110)$$

mit

$$\mathcal{J}_{\text{inc}}(\mathbf{F}_{n+1}, \Delta \lambda, \mathbf{\Gamma}) = \Psi_{n+1}(\mathbf{F}_{n+1}, \Delta \lambda, \mathbf{\Gamma}) - \Psi_n + \Delta \lambda Q_0^{\text{eq}} \quad (7.111)$$

und

$$\mathbf{\Gamma} = [\psi, \rho] \quad (7.112)$$

gegeben. Die Fließrichtung ist demnach durch zwei Winkel eindeutig definiert. Für Fließfunktionen, die auf einer volumetrisch-deviatorischen Zerlegung des Spannungstensors beruhen, ist die Parametrisierung (7.92) sogar nur durch eine einzige Variable

$$\mathbf{\Gamma} = [\psi] \quad (7.113)$$

definiert.

Mit dieser Implementierung wurde das Minimierungsproblem $\inf_{\Delta \lambda, \mathbf{\Gamma}} \mathcal{J}_{\text{inc}}$ durch das Verfahren von Newton zusammen mit den konsistenten Tangentenmoduli auf Stukturebene erneut gelöst. Da die hierfür notwendigen Schritte identisch zu den bereits erläuterten sind, wird hier nicht weiter darauf eingegangen. Als Pseudo-Code ist der Algorithmus auf Seite 58 zusammengefasst.

7.3 Numerische Beispiele

Die Leistung des variationell konsistenten Algorithmus wird in diesem Abschnitt analysiert. Während die Genauigkeit und die numerische Effizienz des Algorithmus in Abschnitt 7.3.1 anhand einer Studie auf Materialpunktebene diskutiert werden, behandelt Abschnitt 7.3.2 ein Randwertproblem.

7.3.1 Genauigkeit und Stabilität des variationell konsistenten Algorithmus

Die Analyse der Genauigkeit des variationell konsistenten Algorithmus erfolgt auf der Basis so genannter Iso-Error-Karten. Dies entspricht der Vorgehensweise, wie sie bereits in Krieg und Krieg (1977), Ortiz und Popov (1985), Ortiz und Simo (1986), Simo und Hughes (1998) oder Simo (1998) angewandt

λ	μ	Q_0^{eq}
[kN/cm ²]	[kN/cm ²]	[kN/cm ²]
67.27	81	$\sqrt{\frac{2}{3}} \cdot 0.10$

Tab. 7.1: Materialparameter des elastisch/ideal-plastischen Modells für Iso-Error-Karten. Die Lamé-Konstanten λ und μ definieren die elastische Energie eines Neo-Hooke Materialmodells und Q_0^{eq} bezeichnet die Fließspannung.

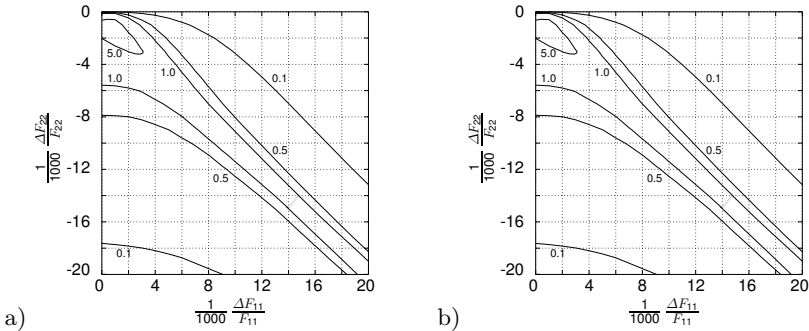


Abb. 7.2: Iso-Error-Karten für vollständig isotrope von-Mises-Plastizität. Lastfall: Einachsiger Zug. a) variationell konsistenter Algorithmus mit Parametrisierung in $(\Delta\lambda, \psi)$, b) Klassischer Return-Mapping-Algorithmus

wurde. Hierzu werden die vom Algorithmus berechneten Spannungen Σ für verschiedene dehnungskontrollierte Schrittweiten untersucht. Durch Vergleich der Ergebnisse mit der analytischen Lösung Σ_0 (die hier numerisch durch hinreichend kleine Lastschritte ermittelt wird) lässt sich eine Abweichung δ ermitteln. Diese Abweichung ist durch

$$\delta = \frac{\sqrt{(\Sigma - \Sigma_0) : (\Sigma - \Sigma_0)}}{\sqrt{\Sigma_0 : \Sigma_0}} \cdot 100\% \tag{7.114}$$

definiert und wird in den folgenden Abbildungen grafisch illustriert.

Für die Genauigkeitsanalyse wird ein vollständig isotropes Konstitutivmodell verwendet. Während die elastische Antwort durch ein klassisches Neo-Hooke-Materialgesetz mit den Laméschen Materialkonstanten λ und μ erfasst wird, sind die plastischen Effekte durch eine Fließfunktion vom Mises-Typ ohne Verfestigung beschrieben. Die verwendeten Materialparameter sind in der Tabelle 7.1 zusammengefasst.

Die berechneten Iso-Error-Karten sind in den Abbildungen 7.2–7.4 dargestellt.

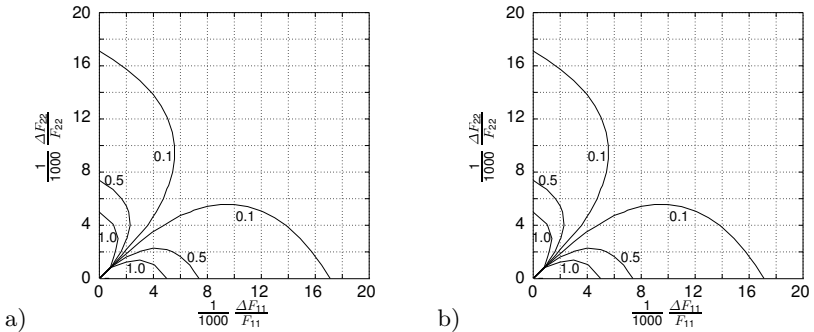


Abb. 7.3: Iso-Error-Karten für vollständig isotrope von-Mises-Plastizität. Lastfall: Zweiachsiger Zug. a) variationell konsistenter Algorithmus mit Parametrisierung in $(\Delta\lambda, \psi)$, b) Klassischer Return-Mapping-Algorithmus

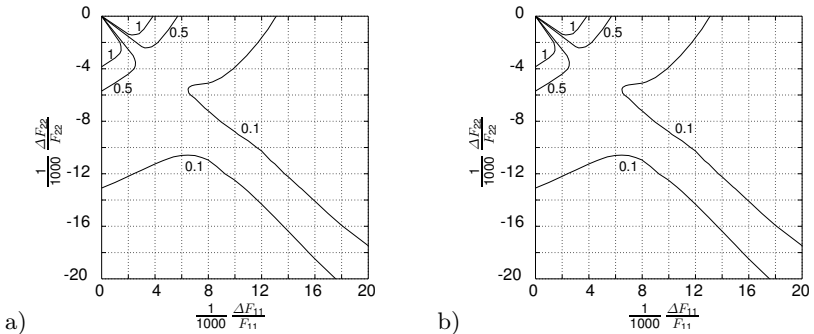


Abb. 7.4: Iso-Error-Karten für vollständig isotrope von-Mises-Plastizität. Lastfall: Reine Scherung. a) variationell konsistenter Algorithmus mit Parametrisierung in $(\Delta\lambda, \psi)$, b) Klassischer Return-Mapping-Algorithmus

Wie zu erkennen ist, besitzen der neue variationell konsistente Algorithmus (jeweils auf der linken Seite der Abbildungen) und der klassische Return-Mapping-Algorithmus (jeweils rechts gezeigt) in weiten Bereichen die gleiche Genauigkeit. Dies kann durch die zugrundeliegenden identischen Zeitintegrationsverfahren begründet werden. Allerdings nutzt der klassische Return-Mapping-Algorithmus – im Gegensatz zum variationell konsistenten Algorithmus – nicht die Isotropie des Konstitutivmodells aus. Deshalb wurde das Beispiel ohne Ausnutzung der Materialsymmetrie mit dem variationell konsistenten Algorithmus erneut analysiert. Die Resultate sind hier nicht gezeigt, da sie identisch mit denen in den Abbildungen 7.2–7.4 sind.

Lastfall	klass. Algorithmus	var. Algorithmus	
	Unbekannte $\Delta\lambda, \mathbf{F}^p$	direkt Param.	E'wertparam.
Einachsialer Zug	100 %	108 %	12 %
Zweiachsialer Zug	100 %	110 %	14 %
Reine Scherung	100 %	61 %	8 %

Tab. 7.2: Vergleich der numerischen Effizienz des variationell konsistenten Algorithmus mit dem klassischen Return-Mapping-Algorithmus für vollständig isotrope von-Mises-Plastizität ohne Verfestigung. Die Berechnungszeit ist auf die des klassischen Return-Mapping-Algorithmus bezogen (100 %).

Neben der Genauigkeit ist die numerische Effizienz ein maßgebliches Beurteilungskriterium. Die Berechnungszeit der beiden Algorithmen für verschiedene Lastfälle ist in Tabelle 7.2 zusammengestellt. Dabei ist für jeden Lastfall die Berechnungszeit auf die Werte des klassischen Return-Mapping-Algorithmus normiert.

Der direkt parameterisierte variationell konsistente Algorithmus wurde in Abschnitt 7.2.1 beschrieben. Er zieht keinen Nutzen aus der Materialsymmetrie. Bei dem zweiten Algorithmus handelt es sich um einen optimierten Algorithmus für vollständig isotrope Modelle mit deviatorischer Fließfunktion, vgl. Abschnitt 7.2.3.2. Nach Tabelle 7.2 ist die Berechnungszeit der direkten Parametrisierung mit $\Delta\mathbf{L}^p$ und die des klassischen Return-Mapping-Algorithmus ungefähr gleich. Allerdings ist die Berechnungszeit stark von der Implementierung der exponentiellen Tensorfunktion $\exp(\bullet)$ und deren Ableitungen $\text{Dexp}(\bullet)$ sowie $\text{D}^2\text{exp}(\bullet)$ abhängig. Es bestätigt sich die von Ortiz u. a. (2001) formulierte Beobachtung, dass die auf der spektralen Zerlegung basierende Methode deutlich effizienter ist als die auf der Taylor-Reihenentwicklung beruhende Implementierung. Wird die Materialsymmetrie berücksichtigt, kann die Komplexität des numerischen Problems deutlich reduziert werden und damit eine höhere Effizienz der Implementierung erreicht werden, siehe Tabelle 7.2.

7.3.2 Lochstreifen

In diesem Abschnitt wird ein strukturmechanisches Randwertproblem numerisch untersucht. Bei dem in Abbildung 7.5 dargestellten System handelt es sich um ein häufig verwendetes Benchmarkproblem, vgl. Fuschi u. a. (1992) oder Simo und Hughes (1998).

Analog zu den genannten Literaturstellen wird der Lochstreifen mit einem isotropen Neo-Hooke-Materialmodell und einer isotropen von-Mises-Fließfunktion mit assoziierten Evolutionsgleichungen modelliert. Die plastische Verfestigung

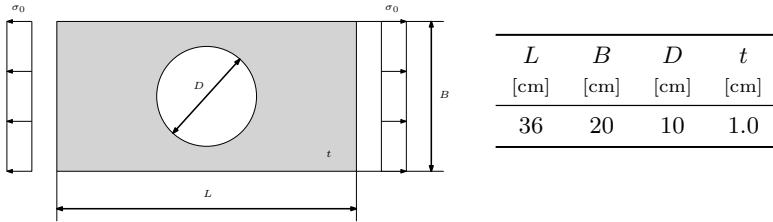


Abb. 7.5: Lochstreifen: Geometrie

E	ν	Q_0^{eq}	H^{iso}
[kN/cm ²]	[-]	[kN/cm ²]	[kN/cm ²]
70	0.2	$\sqrt{\frac{2}{3}}$ 0.242	$\sqrt{\frac{2}{3}}$ 0.2

Tab. 7.3: Lochstreifen: Materialparameter

ist mit einem konstanten isotropen Verfestigungsmodul H^{iso} berücksichtigt.

In Abbildung 7.6 ist die mechanische Systemantwort des Randwertproblems dargestellt, die mit dem variationell konsistenten Algorithmus ermittelt wurde. Wie zu erwarten, ist die plastische Deformation in der Nähe des Lochs groß und breitet sich in diesem Bereich aus. Der übrige Teil der Struktur deformiert sich nahezu elastisch. Der Konturplot in Abbildung 7.6 stimmt gut mit den Ergebnissen überein, die bereits in Mosler (2010) veröffentlicht wurden. Dies gilt auch für das Last-Verschiebungsdiagramm. Überdies kann kein Unterschied in der Genauigkeit zwischen dem variationellen und dem klassischen Return-Mapping-Algorithmus festgestellt werden.

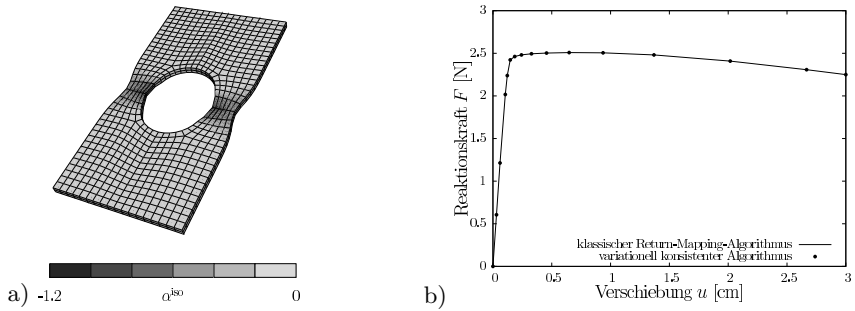


Abb. 7.6: Lochstreifen: Vorhersage der mechanischen Systemantwort durch den neuen variationell konsistenten Algorithmus. a) Verteilung der internen isotropen Verfestigungsvariable α^{iso} , b) Vergleich der Last-Verschiebungsdiagramme

8 Homogenisierung

Der Schwerpunkt dieses Abschnittes bildet eine neue hybride Homogenisierungsstrategie. Diese wird detailliert analysiert und ihre Anwendbarkeit anhand mehrerer Beispiele illustriert. Dazu werden zunächst einige ergänzende Bemerkungen zu den grundlegenden Abschnitten 2 und 3 gemacht. Insbesondere wird die bisherige Notation für lokal definierte Größen beibehalten. Räumlich gemittelte, also makroskopische Ausdrücke werden durch überstrichene Symbole wie $\bar{\mathbf{A}}$ bezeichnet.

Weite Teile dieses Kapitels sind aus der Veröffentlichung Bleier und Mosler (2013) entnommen.

8.1 Numerische Homogenisierung mit Hilfe von Energieminimierung

8.1.1 Grundlagen: Kinematik und Kinetik

Im Weiteren wird das Konzept der Repräsentativen Volumenelemente (RVE) zur Homogenisierung genutzt. Wird ein betrachtetes RVE mit \mathcal{B} bezeichnet, so kann es sich sowohl aus einem Festkörper Ω als auch aus Löchern \mathcal{H} zusammensetzen. Dabei gilt $\Omega \cup \mathcal{H} = \mathcal{B}$ und $\Omega \cap \mathcal{H} = \emptyset$.

8.1.1.1 Kinematik Ein wichtiger Aspekt des Multiskalenkonzepts ist die Homogenisierungsannahme. Dazu wird der Deformationsgradient auf der Mikroskala \mathbf{F} additiv durch den Ansatz

$$\mathbf{F} = \bar{\mathbf{F}} + \text{Grad } \mathbf{w} \quad (8.1)$$

in einen Anteil auf der Makroskala $\bar{\mathbf{F}}$ und ein überlagertes Fluktuationsfeld \mathbf{w} zerlegt, vgl. Miehe u. a. (2002). Diesem Ansatz liegt somit die kinematische Annahme

$$\boldsymbol{\varphi} = \bar{\mathbf{F}} \cdot \mathbf{x}_0 + \mathbf{w} \quad (8.2)$$

zugrunde. Die in Gleichung (8.2) angegebene Näherung ist wegen ihrer Linearität zwar numerisch effizient, kann jedoch Skaleneffekte nicht berücksichtigen. Da die Felder $\bar{\mathbf{F}}$ und \mathbf{w} zu einer Deformation korrespondieren, sind diese gekoppelt. Diese Kopplung führt zu einer Nebenbedingung für das Fluktuationsfeld \mathbf{w} , die im Folgenden betrachtet wird.

Um die Nebenbedingung für das Fluktuationsfeld \mathbf{w} herzuleiten, wird, Hill (1972) folgend, die Deformation auf der Makroskala durch Größen auf der

Oberfläche der Mikroskala berechnet. Es wird der Ansatz

$$\bar{\mathbf{F}} = \frac{1}{|\mathcal{B}_0|} \int_{\partial\mathcal{B}_0} \boldsymbol{\varphi} \otimes \mathbf{n}_0 \, dA_0 \quad (8.3)$$

genutzt, wobei \mathbf{n}_0 die Flächennormale auf dem RVE in der Referenzkonfiguration bezeichnet. Enthält das RVE keine Diskontinuitäten wie Klaffungen, Löcher oder Risse, so ist der in Gleichung (8.3) definierte makroskopische Deformationsgradient gleich dem volumetrisch gemittelten Deformationsgradienten

$$\bar{\mathbf{F}} = \frac{1}{|\mathcal{B}_0|} \int_{\mathcal{B}_0} \mathbf{F} \, dV_0. \quad (8.4)$$

Das Einsetzen der Gleichung (8.1) in (8.3) führt für das Fluktuationfeld auf die Nebenbedingung

$$\frac{1}{|\mathcal{B}_0|} \int_{\partial\mathcal{B}_0} \mathbf{w} \otimes \mathbf{n}_0 \, dA_0 = \mathbf{0}. \quad (8.5)$$

Die Bedingung (8.5) lässt sich a priori durch folgende Strategien erzwingen:

- $\mathbf{w} = \mathbf{0} \quad \forall \mathbf{x}_0 \in \mathcal{B}_0$: klassische Taylor-Annahme
- $\mathbf{w} = \mathbf{0} \quad \forall \mathbf{x}_0 \in \partial\mathcal{B}_0$: homogene Fluktuationen auf den Rändern
- $\mathbf{w}^+ = \mathbf{w}^-$: periodische Randbedingungen

Außer mit diesen kinematischen Randbedingungen lässt sich die Nebenbedingung (8.5) durch homogene Spannungsrandbedingungen erfüllen. Der daraus folgende Spannungszustand kann als Lagrange-Multiplikator interpretiert werden, der Gleichung (8.5) in schwacher Form erzwingt. Der Einfluss der unterschiedlichen Randbedingungen auf die Systemantwort kann durch die variationelle Struktur der zugrunde liegenden konstitutiven Antwort effektiv abgeschätzt werden. Dies wird im folgenden Abschnitt gezeigt.

8.1.1.2 Makroskopische Spannungen Analog zu Gleichung (8.3) lässt sich der makroskopische erste Piola-Kirchhoff-Spannungstensor $\bar{\mathbf{P}}$ mittels

$$\bar{\mathbf{P}} = \frac{1}{|\mathcal{B}_0|} \int_{\partial\mathcal{B}_0} \mathbf{t}_0 \otimes \mathbf{n}_0 \, dA_0 \quad (8.6)$$

definieren. In dieser Definition bezeichnet \mathbf{t}_0 den auf den Rändern des RVEs in der Referenzkonfiguration wirkenden Spannungsvektor nach Gleichung (3.2).

Existieren im Inneren des RVEs keine oder nur spannungsfreie Löcher, so liefert die Definition (8.6) die gemittelten Spannungen auf der Mikroskala, d. h.

$$\bar{\mathbf{P}} = \frac{1}{|\mathcal{B}_0|} \int_{\mathcal{B}_0} \mathbf{P} \, dV_0. \quad (8.7)$$

Außerdem erfüllen die durch die Gleichungen (8.3) und (8.6) eingeführten makroskopischen Variablen $\bar{\mathbf{F}}$ und $\bar{\mathbf{P}}$ zusammen mit den vorgenannten Randbedingungen des RVEs die von Hill (1963) eingeführte Bedingung (so genannte Hill-Mandel-Bedingung):

$$\bar{\mathbf{P}} : \dot{\bar{\mathbf{F}}} = \frac{1}{|\mathcal{B}_0|} \int_{\mathcal{B}_0} \mathbf{P} : \dot{\mathbf{F}} \, dV_0. \quad (8.8)$$

Die Gleichung (8.8) fordert somit, dass die über das RVE gemittelten Spannungsleistungen auf der Mikro- und Makroskala gleich sind. Dann lässt sich die Gleichung (8.8) mit einem Konstitutivmodell, wie es in Abschnitt 6.2.5 vorgestellt wurde, in die kompakte Schreibweise

$$\bar{\mathcal{E}} = \frac{1}{|\mathcal{B}_0|} \int_{\mathcal{B}_0} \mathcal{E} \, dV_0 \quad (8.9)$$

überführen. Da die Gleichungen (8.3) und (8.6) die Gleichungen (8.8) und (8.9) implizieren, könnte die makroskopische Spannung $\bar{\mathbf{P}}$ alternativ implizit definiert werden; hierzu wäre von den Gleichungen (8.3) und (8.9) auszugehen. Diese Idee ist Gegenstand des folgenden Abschnitts. Für rein elastische Materialien wurde dies bereits von Müller (1987) vorgeschlagen. Eine identische Vorgehensweise für inelastisches Materialverhalten kann bei Miehe (2002) und Miehe u. a. (2002) gefunden werden. Obwohl die Vorgehensweise in dieser Arbeit ähnlich zu denen in den zitierten Arbeiten ist, ist hier die Motivation eine grundsätzlich andere. Während bei Miehe (2002) und Miehe u. a. (2002) die analoge Struktur hyperelastischer und klassischer dissipativer Materialien in den Mittelpunkt rückt, ist in dieser Arbeit die Abhängigkeit der Gleichungen (8.3), (8.6) und (8.9) voneinander der Ausgangspunkt weiterer Betrachtungen.

Unter der Voraussetzung, dass sich das plastische Verhalten auf der Mikroskala mit einem Variationsprinzip nach Abschnitt 7.2 beschreiben lässt, führt das Einsetzen von Gleichung (6.62) mit $\mathbf{M} = \tilde{\Sigma}$ in Gleichung (8.1) dazu, dass die Spannungsleistung auf der Mikroskala eine Funktion des Typs

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}(\dot{\bar{\mathbf{F}}}, \dot{\mathbf{w}}, \lambda, \tilde{\Sigma}) \quad (8.10)$$

ist.

Lässt sich die Schädigung des Materials mit dem plastischen Multiplikator λ und die Fließrichtung durch Pseudo-Spannungen $\tilde{\Sigma}$ parameterisieren, so führt das Variationsprinzip auf die Minimierungsaufgabe

$$(\lambda, \tilde{\Sigma}) = \arg \inf_{\lambda, \tilde{\Sigma}} \mathcal{E}(\dot{\mathbf{F}}, \dot{\mathbf{w}}, \lambda, \tilde{\Sigma}) \Big|_{(\dot{\mathbf{F}}, \dot{\mathbf{w}}) = \text{const}}, \quad (8.11)$$

mit der sich wiederum abkürzend die reduzierte Spannungsleistung

$$\mathcal{E}_{\text{red}}(\dot{\mathbf{F}}, \dot{\mathbf{w}}) = \inf_{\lambda, \tilde{\Sigma}} \mathcal{E}(\dot{\mathbf{F}}, \dot{\mathbf{w}}, \lambda, \tilde{\Sigma}) \quad (8.12)$$

einführen lässt.

Im Gegensatz zu der Mikroskala ist die reduzierte Spannungsleistung auf der Makroskala nicht direkt vom Fluktuationsfeld \mathbf{w} abhängig. Daher ist

$$\bar{\mathcal{E}}_{\text{red}} = \bar{\mathcal{E}}_{\text{red}}(\dot{\mathbf{F}}). \quad (8.13)$$

Dementsprechend wird durch Einsetzen von Gleichung (8.12) und (8.13) in die Homogenisierungsbedingung (8.9) sichtbar, dass die mit \mathbf{w} assoziierten Randbedingungen für den Skalenübergang nicht alleine ausreichend sind. Stattdessen muss das Fluktuationsfeld \mathbf{w} an jedem Ort, also auch im Inneren des RVEs, bekannt sein.

Üblicherweise wird das Fluktuationsfeld so berechnet, dass Gleichgewicht auf der Mikroskala erfüllt ist. Werden volumenartige Kräfte $\bar{\mathbf{b}}_0$ und Trägheitskräfte im RVE vernachlässigt, so geht der Impulserhaltungssatz (4.13) nach Transformation in die Referenzkonfiguration in

$$\text{Div } \mathbf{P} = \mathbf{0} \quad \mathbf{w} \in \mathcal{W}_0 \quad (8.14)$$

über. In dieser Gleichung ist mit \mathcal{W}_0 der Raum der zulässigen Fluktuationsfelder bezeichnet, der von den Randbedingungen des RVEs abhängig ist. Wie beispielsweise in Müller (1987), Miehe (2002), Miehe u. a. (2002) gezeigt wurde, lässt sich die Gleichung (8.14) in die variationelle Formulierung

$$\dot{\mathbf{w}} = \arg \inf_{\dot{\mathbf{w}}} \left\{ \frac{1}{|\mathcal{B}_0|} \int_{\mathcal{B}_0} \mathcal{E}_{\text{red}}(\dot{\mathbf{F}}, \dot{\mathbf{w}}) \, dV_0 \right\} \Big|_{\dot{\mathbf{F}} = \text{const}, \mathbf{w} \in \mathcal{W}_0} \quad (8.15)$$

überführen. Dass die Gleichungen (8.14) und (8.15) zueinander äquivalent sind, kann direkt bewiesen werden. So ist beispielsweise die notwendige Bedingung zur Minimierung der gemittelten mikroskopischen Spannungsleistung

$$\frac{1}{|\mathcal{B}_0|} \int_{\mathcal{B}_0} \text{Grad}(\delta \mathbf{w}) : \mathbf{P} \, dV_0 = 0 \quad \forall \delta \mathbf{w} \in \mathcal{W}_0. \quad (8.16)$$

Hierin wurde für den ersten Piola-Kirchhoff-Spannungstensor auf der Mikroskala $\mathbf{P} = \partial_{\mathbf{F}} \mathcal{E}_{\text{red}}$ substituiert. Weitere Details zu den Randbedingungen sind in dem Artikel von Miehe u. a. (2002) zu finden.

Die Gleichungen (8.9) und (8.15) liefern zusammen die reduzierte Spannungsleistung auf der Makroskala

$$\bar{\mathcal{E}}_{\text{red}}(\dot{\bar{\mathbf{F}}}) = \inf_{\dot{\mathbf{w}}} \left\{ \frac{1}{|\mathcal{B}_0|} \int_{\mathcal{B}_0} \mathcal{E}_{\text{red}}(\dot{\bar{\mathbf{F}}}, \dot{\mathbf{w}}) \, dV_0 \right\} \Big|_{\dot{\bar{\mathbf{F}}} = \text{const}, \mathbf{w} \in \mathcal{W}_0}. \quad (8.17)$$

Da die makroskopische Spannungsleistung alternativ als

$$\bar{\mathcal{E}}_{\text{red}}(\dot{\bar{\mathbf{F}}}) = \bar{\mathbf{P}} : \dot{\bar{\mathbf{F}}} \quad (8.18)$$

geschrieben werden kann, sind, wie bereits nach Gleichung (7.58), die makroskopischen Spannungen durch partielle Differentiation der gemittelten mikroskopischen Spannungsleistung zu berechnen, d. h.

$$\bar{\mathbf{P}} = \frac{\partial}{\partial \dot{\bar{\mathbf{F}}}} \inf_{\dot{\mathbf{w}}} \left\{ \frac{1}{|\mathcal{B}_0|} \int_{\mathcal{B}_0} \mathcal{E}_{\text{red}}(\dot{\bar{\mathbf{F}}}, \dot{\mathbf{w}}) \, dV_0 \right\} \Big|_{\dot{\bar{\mathbf{F}}} = \text{const}, \mathbf{w} \in \mathcal{W}_0}. \quad (8.19)$$

Weitere Details sind in Miehe u. a. (2002) zu finden.

Erneut soll darauf hingewiesen werden, dass der Ausgangspunkt des diskutierten variationellen Homogenisierungskonzepts die kinematische Annahme (8.3) und das Postulat der Energieäquivalenz (8.9) war. Die Definition der Spannungen (8.19) ist in diesen Annahmen implizit enthalten und kann aus den Voraussetzungen hergeleitet werden. Dies steht im Gegensatz zu klassischen Homogenisierungstheorien, in denen üblicherweise ein eigener Skalenübergang für die Dehnungen und Spannungen postuliert wird.

8.1.2 Numerische Implementierung

Das Ziel der numerischen Implementierung ist die Berechnung der makroskopischen Spannungen $\bar{\mathbf{P}}$ zum Zeitpunkt t_{n+1} auf Basis der vorgeschriebenen makroskopischen Dehnungen $\bar{\mathbf{F}}_{n+1}$ unter Berücksichtigung der mikroskopischen konstitutiven Materialantwort.

8.1.2.1 Randbedingungen für das RVE Wird mit \mathcal{W}_{hom} der Raum zulässiger homogener Randbedingungen und mit \mathcal{W}_{per} der Raum der zulässigen periodischen Verschiebungsfelder bezeichnet, ist

$$\emptyset \subset \mathcal{W}_{\text{hom}} \subset \mathcal{W}_{\text{per}}. \quad (8.20)$$

Folglich gilt für die mechanischen Systemantworten

$$\bar{\mathcal{E}}^{\text{per}}(\dot{\bar{\mathbf{F}}}) \leq \bar{\mathcal{E}}^{\text{hom}}(\dot{\bar{\mathbf{F}}}) \leq \bar{\mathcal{E}}^{\text{Taylor}}(\dot{\bar{\mathbf{F}}}) \quad \forall \dot{\bar{\mathbf{F}}}. \quad (8.21)$$

Hierin bezeichnen

$$\bar{\mathcal{E}}^{\text{per}}(\dot{\bar{\mathbf{F}}}) = \inf_{\dot{\mathbf{w}} \in \mathcal{W}_{\text{per}}} \left\{ \frac{1}{|\mathcal{B}_0|} \int_{\mathcal{B}_0} \mathcal{E}_{\text{red}}(\dot{\bar{\mathbf{F}}}, \dot{\mathbf{w}}) \, dV_0 \right\}, \quad (8.22)$$

$$\bar{\mathcal{E}}^{\text{hom}}(\dot{\bar{\mathbf{F}}}) = \inf_{\dot{\mathbf{w}} \in \mathcal{W}_{\text{hom}}} \left\{ \frac{1}{|\mathcal{B}_0|} \int_{\mathcal{B}_0} \mathcal{E}_{\text{red}}(\dot{\bar{\mathbf{F}}}, \dot{\mathbf{w}}) \, dV_0 \right\}, \quad (8.23)$$

$$\bar{\mathcal{E}}^{\text{Taylor}}(\dot{\bar{\mathbf{F}}}) = \left. \left\{ \frac{1}{|\mathcal{B}_0|} \int_{\mathcal{B}_0} \mathcal{E}_{\text{red}}(\dot{\bar{\mathbf{F}}}, \dot{\mathbf{w}}) \, dV_0 \right\} \right|_{\dot{\mathbf{w}}=\mathbf{0}}. \quad (8.24)$$

Wie aus Ungleichung (8.21) hervorgeht, führen periodische Randbedingungen zu der weichsten der o. g. mechanischen Systemantworten. Dies liegt daran, dass sie, wie in (8.20) erkennbar ist, die geringsten Restriktionen (geringste Energie) beinhalten. Analog lässt sich zeigen, dass homogene natürliche Randbedingungen eine untere Schranke der Energie darstellt. Allerdings muss, wie in Miehe u. a. (2002) gezeigt, für diesen Randbedingungstyp die Implementierung in wesentlichen Punkten modifiziert werden.

In der Regel liefern periodische Randbedingungen gute Übereinstimmungen mit der Physik, vgl. Schröder (2000). Deshalb werden im Folgenden nur solche betrachtet.

8.1.2.2 Spannungsupdate für die makroskopischen Spannungen In diesem Abschnitt wird die Berechnung der makroskopischen Spannungen $\bar{\mathbf{P}}$ zum Zeitpunkt t_{n+1} kurz skizziert, vgl. Miehe u. a. (2002). Hierfür wird eine klassische verschiebungsgesteuerte Finite-Elemente-Implementierung vorausgesetzt. Demzufolge ist der makroskopische Deformationsgradient $\bar{\mathbf{F}}_{n+1}$ zum Zeitpunkt t_{n+1} a priori bekannt.

Mit dieser Notation führt ein impliziertes Euler-Zeitintegrationsverfahren der mikroskopischen Spannungsleistung über dem Zeitintervall $[t_n; t_{n+1}]$ zu

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_{\text{inc}} &= \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathcal{E} \, dt \\ &= \Psi_{n+1}(\bar{\mathbf{F}}_{n+1}, \mathbf{w}_{n+1}, \Delta\lambda, \tilde{\Sigma}_{n+1}) - \Psi_n + \Delta\lambda Q_0^{\text{eq}}. \end{aligned} \quad (8.25)$$

Auf Basis dieser inkrementell definierten Spannungsleistung lautet die entsprechende makroskopische Spannungsleistung des Variationsprinzips

$$\bar{\mathcal{J}}_{\text{inc}}(\bar{\mathbf{F}}_{n+1}) = \inf_{\mathbf{w}_{n+1}} \inf_{\Delta\lambda, \bar{\boldsymbol{\Sigma}}_{n+1}} \left\{ \frac{1}{|\mathcal{B}_0|} \int_{\mathcal{B}_0} \mathcal{J}_{\text{inc}}(\bar{\mathbf{F}}_{n+1}, \mathbf{w}_{n+1}, \Delta\lambda, \bar{\boldsymbol{\Sigma}}_{n+1}) \, dV_0 \right\}. \quad (8.26)$$

Aus diesem Ausdruck lassen sich mit Hilfe der partiellen Differentiation nach dem Deformationsgradienten die makroskopischen Spannungen zum Zeitpunkt t_{n+1} gewinnen:

$$\bar{\mathbf{P}}_{n+1} = \frac{\partial}{\partial \bar{\mathbf{F}}_{n+1}} \bar{\mathcal{J}}_{\text{inc}}(\bar{\mathbf{F}}_{n+1}) \quad (8.27)$$

Bei der Auswertung von Gleichung (8.26) ist zu beachten, dass der über dem Zeitschritt $[t_n; t_{n+1}]$ integrierte plastische Multiplikator $\Delta\lambda$ und die Pseudo-Spannungen $\bar{\boldsymbol{\Sigma}}$ nicht als einfache Variable auf Materialpunktebene definiert sind, sondern als Feldgrößen interpretiert werden müssen und deshalb innerhalb des RVEs als variabel anzusehen sind.

Um Gleichung (8.26) numerisch zu lösen, muss die mikroskopische Deformation $\boldsymbol{\varphi}$ durch einen Finite-Elemente-Ansatz diskretisiert werden. Damit ist die Näherung der Deformation nach Gleichung (8.2) innerhalb eines bestimmten Elements e durch den Ansatz

$$\boldsymbol{\varphi}_{n+1}^e = \sum_{k=1}^n N_k \left(\bar{\mathbf{F}}_{n+1} \cdot \mathbf{x}_0^{(k)} + \mathbf{w}_{n+1}^{(k)} \right) \quad (8.28)$$

erklärt. In Gleichung (8.28) bezeichnen N_k die Formfunktionen. Die Variablen $\mathbf{x}_0^{(k)}$ stehen für die Knotenkoordinaten in der Referenzkonfiguration und $\mathbf{w}_{n+1}^{(k)}$ für das Fluktuationfeld, jeweils am Knoten k . Da der makroskopische Deformationsgradient $\bar{\mathbf{F}}_{n+1}$ in Gleichung (8.26) als konstant vorausgesetzt ist, gilt $\Delta\mathbf{w}_{n+1} = \Delta\boldsymbol{\varphi}^e$. Daraus folgt die Beobachtung, dass sich periodische Fluktuationfelder durch Einführung einer Nebenbedingung für das mikroskopische Deformationsfeld erzwingen lassen. Diese Bedingung kann – zumindest, falls die Master- und Slave-Seite des RVEs die gleiche Oberflächendiskretisierung aufweist – problemlos implementiert werden.

Die Gleichung (8.28) approximiert die mikroskopische Deformation $\boldsymbol{\varphi}^e$ stückweise glatt. Eine solche Approximation ist erforderlich, da das Fluktuationfeld \mathbf{w} durch den Deformationsgradienten in die integrierte Spannungsleistung eingeht. Im Gegensatz hierzu ist die integrierte Spannungsleistung eine Funktion der räumlich lokal definierten Variablen $\Delta\lambda$ und $\bar{\boldsymbol{\Sigma}}_{n+1}$. Daher können diese Variablen (räumlich) lokal ermittelt werden und das Minimierungsproblem (8.26)

in ein lokales und ein globales zerlegt werden:

$$\bar{\mathcal{J}}_{\text{inc}}(\bar{\mathbf{F}}_{n+1}) = \inf_{\mathbf{w}_{n+1}} \left\{ \frac{1}{|\mathcal{B}_0|} \int_{\mathcal{B}_0} \inf_{\Delta\lambda, \tilde{\boldsymbol{\Sigma}}_{n+1}} \mathcal{J}_{\text{inc}}(\bar{\mathbf{F}}_{n+1}, \mathbf{w}_{n+1}, \Delta\lambda, \tilde{\boldsymbol{\Sigma}}_{n+1}) \, dV_0 \right\} \quad (8.29)$$

Die Gleichung (8.29) ermöglicht es, die durch den plastischen Multiplikator und die Pseudo-Spannungen beschriebene elasto-plastische Systemantwort auf Materialpunktebene zu berechnen und anschließend das Fluktuationfeld auf globaler (RVE-) Ebene zu betrachten. Eine derartige Berechnung stimmt mit der gängigen Behandlung der numerischen Plastizitätstheorie (vgl. Simo und Hughes (1998), Simo (1998)) überein. Auch dort wird die Modifikation der internen Variablen lokal (Return-Mapping-Algorithmus) und die Berechnung des Deformationsfeldes global (mittels FEM) durchgeführt. Um Gleichung (8.29) zu lösen, wird in einem ersten Schritt das Fluktuationfeld \mathbf{w}_{n+1} durch

$$\begin{aligned} \mathbf{w}_{n+1} = \\ \arg \inf_{\mathbf{w}_{n+1}} \left\{ \frac{1}{|\mathcal{B}_0|} \int_{\mathcal{B}_0} \mathcal{J}_{\text{inc}}(\bar{\mathbf{F}}_{n+1}, \mathbf{w}_{n+1}, \Delta\lambda, \tilde{\boldsymbol{\Sigma}}_{n+1}) \, dV_0 \right\} \Big|_{(\bar{\mathbf{F}}_{n+1}, \Delta\lambda, \tilde{\boldsymbol{\Sigma}}_{n+1}) = \text{const}} \end{aligned} \quad (8.30)$$

berechnet. Dabei werden alle internen Variablen fest gehalten. Dieses Minimum kann mit Hilfe klassischer Optimierungsalgorithmen (vgl. Geiger und Kanzow (1999, 2002)) oder durch Lösung der notwendigen Bedingung

$$\left\{ \frac{1}{|\mathcal{B}_0|} \int_{\mathcal{B}_0} \text{Grad}(\delta\mathbf{w}) : \mathbf{P} \, dV_0 \right\} \Big|_{(\bar{\mathbf{F}}_{n+1}, \Delta\lambda, \tilde{\boldsymbol{\Sigma}}_{n+1}) = \text{const}} = 0 \quad \forall \delta\mathbf{w} \in \mathcal{W}_0 \quad (8.31)$$

gefunden werden. Die Gleichung (8.31) ist zum Prinzip von Hamilton (bzw. dem Prinzip der virtuellen Arbeit) äquivalent.

Mit der so erhaltenen Zwischenlösung \mathbf{w}_{n+1} werden sodann die Werte der internen Variablen (üblicherweise an allen Integrationspunkten) im Inneren des RVE ermittelt. Diese folgen aus dem separaten lokalen Variationsprinzip

$$\begin{aligned} (\Delta\lambda, \tilde{\boldsymbol{\Sigma}}_{n+1}) = \\ \arg \inf_{\Delta\lambda, \tilde{\boldsymbol{\Sigma}}_{n+1}} \mathcal{J}_{\text{inc}}(\bar{\mathbf{F}}_{n+1}, \mathbf{w}_{n+1}, \Delta\lambda, \tilde{\boldsymbol{\Sigma}}_{n+1}) \Big|_{(\bar{\mathbf{F}}_{n+1}, \mathbf{w}_{n+1}) = \text{const}}, \end{aligned} \quad (8.32)$$

bei dem seinerseits die makroskopischen kinematischen Größen fixiert werden. Dieser gestaffelte Algorithmus wird so lange wiederholt, bis Konvergenz erreicht ist. Schließlich lassen sich die makroskopischen Spannungen mit Hilfe der Gleichung (8.27) ermitteln.

Der hier diskutierte gestaffelte Algorithmus führt nicht notwendigerweise zu einer asymptotisch quadratischen Konvergenz auf der Makroskala. Durch Anwendung des Verfahrens von Newton, auch auf globaler Ebene, lässt sich jedoch dieses konvergente Verhalten erreichen. Hierfür wird die algorithmische Tangente

$$\bar{\mathbf{A}}_{n+1} = \frac{d\bar{\mathbf{P}}_{n+1}}{d\bar{\mathbf{F}}_{n+1}} \quad (8.33)$$

benötigt. Diese erfordert, wie aus Gleichung (8.31) ersichtlich, eine Linearisierung des Randwertproblems bezüglich der Fluktuationen \mathbf{w} . Die Linearisierung ist äußerst umfangreich und daher ist die Berechnung von $\bar{\mathbf{A}}_{n+1}$ numerisch sehr aufwendig, siehe Miehe (2002) oder Miehe u. a. (2002).

Ergänzend soll bemerkt werden, dass sich der Algorithmus für periodische oder homogene Fluktuationen auf den Rändern anwenden lässt. Während bei homogenen Fluktuationen keine besonderen Gegebenheiten berücksichtigt werden müssen, erfordern die periodischen Randbedingungen eine Kopplung der Master- und Slave-Knoten auf den Flächen des RVE. Wird die Verschiebung an den Oberflächen des RVE festgehalten, führt dies auf die klassische Taylor-Approximation.

8.2 Eine neue variationelle Homogenisierungsmethode

Die variationelle Homogenisierungsmethode, die in den voranstehenden Abschnitten diskutiert wurde, ist mathematisch und physikalisch elegant. Jedoch fordert sie, wie alle klassischen FE²-Ansätze, die numerisch aufwendige Berechnung des Randwertproblems für jeden makroskopischen Materialpunkt. Um auch auf der Makroskala asymptotische, quadratische Konvergenz zu erreichen, ist es erforderlich, die aufwendige algorithmische Tangente zu berechnen. Dieses Kapitel behandelt eine numerisch effiziente Approximation der vorgestellten variationellen Homogenisierungsmethode.

8.2.1 Grundlagen

Die mathematisch, physikalisch und numerisch eleganteste und vielversprechendste Homogenisierungsmethode ist sicherlich die Herleitung eines effektiven, explizit definierten makroskopischen Konstitutivmodells. Ein für diesen Zweck passender mathematischer Rahmen ist die Γ -Konvergenz, vgl. Dal Maso (1983) oder Braides (2002). Obwohl Γ -Konvergenz eine vielversprechende Homogenisierungstechnik ist, ist die Anwendung bei komplexen Konstitutivmodellen beschränkt. Allerdings würde sie, wenn eine solche analytische Lösung existiert, die Hill-Mandel-Bedingung (8.17) und die diskretisierte Formulierung (8.29) erfüllen. Vorausgesetzt, dass das effektive makroskopische Modell

ein klassischer dissipativer Festkörper ist, lässt sich die freie Helmholtzenergie und ein Dissipationsfunktional definieren. Dann wird die Spannungsleistung zu

$$\mathcal{E}_{\text{macro}}(\dot{\vec{F}}, \dot{\vec{\Lambda}}) = \dot{\Psi}_{\text{macro}}(\dot{\vec{F}}, \dot{\vec{\Lambda}}) + \mathcal{D}_{\text{macro}}(\dot{\vec{F}}, \dot{\vec{\Lambda}}), \quad (8.34)$$

wobei $\vec{\Lambda}$ den Satz aller makroskopischen dehnungsartigen internen Variablen bezeichnet. In Gleichung (8.34) wurde die analytische Lösung mit dem Subskript »macro« bezeichnet. Falls eine solche Funktion existiert, würde sie die Bedingung

$$\bar{\mathcal{E}}_{\text{red}}(\dot{\vec{F}}) = \inf_{\vec{\Lambda}} \mathcal{E}_{\text{macro}}(\dot{\vec{F}}, \dot{\vec{\Lambda}}) \quad (8.35)$$

erfüllen. Dann führt die Kombination von Gleichung (8.35) mit der Hill-Mandel-Bedingung (8.17) zu dem Ausdruck

$$\left| \inf_{\vec{\Lambda}} \mathcal{E}_{\text{macro}}(\dot{\vec{F}}, \dot{\vec{\Lambda}}) - \inf_{\vec{w}} \inf_{\lambda, \vec{\Sigma}} \left\{ \frac{1}{|\mathcal{B}_0|} \int_{\mathcal{B}_0} \mathcal{E}(\dot{\vec{F}}, \vec{w}, \lambda, \vec{\Sigma}) \, dV_0 \right\} \right| = 0. \quad (8.36)$$

Diese Gleichung (8.36) erklärt in natürlicher Weise einen Abstand

$$\mathcal{R}(\mathcal{E}_{\text{macro}}) = \left| \inf_{\vec{\Lambda}} \mathcal{E}_{\text{macro}}(\dot{\vec{F}}, \dot{\vec{\Lambda}}) - \inf_{\vec{w}} \inf_{\lambda, \vec{\Sigma}} \left\{ \frac{1}{|\mathcal{B}_0|} \int_{\mathcal{B}_0} \mathcal{E}(\dot{\vec{F}}, \vec{w}, \lambda, \vec{\Sigma}) \, dV_0 \right\} \right|. \quad (8.37)$$

Dieser Abstand ist ein skalares Maß für die Abweichung zwischen dem gemittelten mikroskopischen und dem makroskopischen Materialmodell. Eine solche Metrik lässt sich verwenden, um ein effektives makroskopisches Modell herzuleiten. Wird der Raum aller denkbaren makroskopischen Modelle mit $\mathcal{X}_{\text{model}}$ bezeichnet, so lässt sich der Abstand \mathcal{R} durch ein effektives makroskopisches Materialgesetz minimieren, d. h.

$$\mathcal{E}_{\text{macro}} = \arg \inf_{\mathcal{E}_{\text{macro}} \in \mathcal{X}_{\text{model}}} \mathcal{R}(\mathcal{E}_{\text{macro}}) \quad (8.38)$$

unter der Nebenbedingung

$$\mathcal{R}(\mathcal{E}_{\text{macro}}) = 0 \quad \forall \text{ Lastpfade.} \quad (8.39)$$

Obwohl das Prinzip (8.38) gemeinsam mit den Nebenbedingungen (8.39) ein effektives makroskopisches Materialmodell festlegt, kann dieses Modell im Allgemeinen nicht exakt analytisch berechnet werden. Dies ist im Wesentlichen aus den folgenden Gründen nicht möglich:

- Der Raum der zulässigen Lastpfade ist unendlich-dimensional.
- Der Raum der zulässigen und physikalisch sinnvollen makroskopischen Materialmodelle ist unendlich-dimensional.
- Beide Funktionenräume sind hochgradig nichtlinear.

8.2.2 Neuartiger hierarchischer Homogenisierungsansatz

Der neue hierarchische Homogenisierungsansatz, der in diesem Abschnitt präsentiert wird, basiert auf einer Approximation von Gleichung (8.38), die auf der Methode von Ritz beruht. Für die numerische Implementierung lauten die diskretisierten Formulierungen der Gleichungen (8.37) und (8.38)

$$\mathcal{R}_{\text{inc}}(\mathcal{J}_{\text{inc}}^{\text{macro}}) = \left| \inf_{\Delta \mathbf{\Lambda}_{n+1}} \mathcal{J}_{\text{inc}}^{\text{macro}}(\bar{\mathbf{F}}_{n+1}, \Delta \mathbf{\Lambda}_{n+1}) - \inf_{\mathbf{w}_{n+1}} \inf_{\Delta \lambda, \bar{\mathbf{S}}_{n+1}} \frac{1}{|\mathcal{B}_0|} \int_{\mathcal{B}_0} \mathcal{J}_{\text{inc}} \, dV_0 \right| \quad (8.40)$$

beziehungsweise

$$\mathcal{J}_{\text{inc}}^{\text{macro}} = \arg \inf_{\mathcal{J}_{\text{inc}}^{\text{macro}} \in \mathcal{X}_{\text{model}}} \left\{ \sum_{i=1}^{n_{\text{loadings}}} \mathcal{R}_{\text{inc}}(\mathcal{J}_{\text{inc}}^{\text{macro}}) \right\}. \quad (8.41)$$

Die Gleichung (8.40) ist durch Anwendung der klassischen impliziten Zeitdiskretisierung aus dem Abstand (8.37) gewonnen worden. In Gleichung (8.41) sind noch zwei weitere numerische Approximationen enthalten. Einerseits ist der unendlich-dimensionale Funktionenraum der zulässigen Lastpfade durch n_{loadings} Deformationspfade diskretisiert worden. Andererseits verschwindet der Fehler \mathcal{R}_{inc} , wie in Gleichung (8.39) gefordert, nicht notwendigerweise. Die Gleichung (8.41) stellt weiterhin ein unendlich-dimensionales Minimierungsprinzip dar, da der Funktionenraum der zulässigen Materialmodelle unendlich-dimensional ist.

Eine klassische Herangehensweise, um ein derartiges Problem zu lösen, ist durch die Methode von Ritz gegeben. Hierbei wird der unendlich-dimensionale Funktionenraum $\mathcal{X}_{\text{model}}$ durch einen finiten Unterraum $\mathcal{X}_{\text{model}}^h$ ersetzt. Somit gilt $\mathcal{X}_{\text{model}}^h \subset \mathcal{X}_{\text{model}}$ mit $\dim \mathcal{X}_{\text{model}}^h < \infty$. Mit dieser Schreibweise lässt sich ein effektives makroskopisches Materialmodell durch

$$\mathcal{J}_{\text{inc}}^{\text{macro}} = \arg \inf_{\mathcal{J}_{\text{inc}}^{\text{macro}} \in \mathcal{X}_{\text{model}}^h} \left\{ \sum_{i=1}^{n_{\text{loadings}}} \mathcal{R}_{\text{inc}}(\mathcal{J}_{\text{inc}}^{\text{macro}}) \right\} \quad (8.42)$$

berechnen. Die numerische Implementierung des Prinzips (8.42) ist wesentlich von einer adäquaten Parametrisierung des Raums $\mathcal{X}_{\text{model}}^h$ abhängig. Die in dieser Arbeit verwendete Parametrisierung wurde in zwei Schritten konstruiert. Zunächst ist die mechanische Systemantwort des RVE durch einen klassischen FE^2 -Ansatz ermittelt worden. Die Ergebnisse dieser Analyse lassen zusammen mit den zugrunde liegenden mikroskopischen Materialmodellen auf die dominierenden Einflüsse der makroskopischen Systemantwort, wie elastische und

plastische Symmetriegruppen oder plastisches Verfestigungsverhalten, schließen. Sodann wurde ein phänomenologisches Modell gewählt, das die wesentlichen dieser Effekte – zumindest qualitativ – beschreibt. Die Materialparameter dieses Modells werden im Folgenden mit $\mathbf{X}_{\text{model}}$ bezeichnet. Mit dieser Notation überführt die Methode von Ritz die Gleichung (8.42) in den Ausdruck

$$\mathbf{X}_{\text{model}} = \arg \inf_{\mathbf{X}_{\text{model}}} \left\{ \sum_{i=1}^{n_{\text{loadings}}} \mathcal{R}_{\text{inc}}(\mathbf{X}_{\text{model}}) \right\}, \quad (8.43)$$

der die beste Lösung für die Materialparameter $\mathbf{X}_{\text{model}}$ liefert. Gelegentlich werden die Werte der Materialparameter durch weitere physikalische Nebenbedingungen eingegrenzt. Dann ist Gleichung (8.43) durch eine Gleichung mit den entsprechenden Nebenbedingungen zu ersetzen.

Um eine physikalisch sinnvolle Lösung von Gleichung (8.43) finden zu können, ist es wichtig, eine hinreichend gute Approximation von $\mathcal{X}_{\text{model}}^h$ durch ein geeignetes makroskopisches Modell zu finden. Hierfür liefert das zugrundeliegende Variationsprinzip eine wertvolle Hilfestellung: Ein Modell mit den Materialparametern $\mathbf{X}_{\text{model}}^{(2)}$ ist dann und nur dann besser als ein anderes Modell mit den Materialparametern $\mathbf{X}_{\text{model}}^{(1)}$, wenn

$$\inf_{\mathbf{X}_{\text{model}}^{(2)}} \left\{ \sum_{i=1}^{n_{\text{loadings}}} \mathcal{R}_{\text{inc}}(\mathbf{X}_{\text{model}}^{(2)}) \right\} \leq \inf_{\mathbf{X}_{\text{model}}^{(1)}} \left\{ \sum_{i=1}^{n_{\text{loadings}}} \mathcal{R}_{\text{inc}}(\mathbf{X}_{\text{model}}^{(1)}) \right\} \quad (8.44)$$

gilt. Diese Ungleichung lässt die Definition eines »Residuums«

$$\begin{aligned} \Delta \mathcal{R}_{\text{inc}} = \\ \inf_{\mathbf{X}_{\text{model}}^{(1)}} \left\{ \sum_{i=1}^{n_{\text{loadings}}} \mathcal{R}_{\text{inc}}(\mathbf{X}_{\text{model}}^{(1)}) \right\} - \inf_{\mathbf{X}_{\text{model}}^{(2)}} \left\{ \sum_{i=1}^{n_{\text{loadings}}} \mathcal{R}_{\text{inc}}(\mathbf{X}_{\text{model}}^{(2)}) \right\} \end{aligned} \quad (8.45)$$

mit

$$\Delta \mathcal{R}_{\text{inc}} \geq 0 \quad (8.46)$$

zu. Aus diesem Residuum lässt sich ein Algorithmus konstruieren. Dazu wird gefordert, dass, falls dieses Residuum größer als ein gewisser (von dem untersuchten Modell abhängiger) Grenzwert ist, das ursprüngliche makroskopische Modell durch ein verbessertes Modell zu ersetzen ist. Damit stellt das Variationsprinzip (8.43) einen natürlichen Fehlerschätzer bereit. Mit dieser Eigenschaft lässt sich eine Klasse zulässiger makroskopischer Modelle adaptiv entwickeln. Ähnliche adaptive Methoden sind auch in den Artikeln von Mosler und Ortiz (2006, 2007, 2009) nachzulesen.

8.2.3 Ein kongruenter hierarchischer Ansatz

Der im Abschnitt 8.1 diskutierte klassische FE²-Ansatz fordert einerseits die Berechnung eines zusätzlichen, numerisch aufwendigen Randwertproblems in jedem makroskopischen Materialpunkt. Andererseits ist kein Startwert für die resultierende makroskopische Materialantwort erforderlich, d. h. das Verfahren ist generisch. Im Gegensatz hierzu liefert die in Abschnitt 8.2.2 erläuterte Approximation ein explizites effektives makroskopisches Materialmodell, das überdies numerisch extrem effizient ist. Allerdings wird diese Eigenschaft dadurch erkauft, dass vorab eine physikalisch sinnvolle Klasse makroskopischer Materialmodelle zu definieren ist. In diesem Abschnitt wird ein Kompromiss zwischen diesen beiden Grenzfällen kurz skizziert.

Die zugrunde liegende Idee des kongruenten hierarchischen Ansatzes ist es, einen kontinuierlichen Übergang von dem in Abschnitt 8.1 erläuterten variationellen Multiskalenansatz zu der hierarchischen Strategie aus Abschnitt 8.2.2 bereitzustellen. Daher wird der in Abschnitt 8.2.2 eingeführte hierarchische Algorithmus auf die gesamte vorhergehende Belastungsgeschichte angewandt, die hierfür in n_{history} diskrete Berechnungsschritte zerlegt wird. Zu diesem Zweck wird Gleichung (8.43) durch

$$\mathbf{X}_{\text{model}} = \arg \inf_{\mathbf{x}_{\text{model}}} \left\{ \sum_{i=1}^{n_{\text{history}}} \mathcal{R}_{\text{inc}}(\mathbf{X}_{\text{model}}) \right\} \quad (8.47)$$

ersetzt und der aufsummierte Fehler

$$\mathcal{R}_{\text{history}} = \frac{1}{n_{\text{history}}} \left[\inf_{\mathbf{x}_{\text{model}}} \left\{ \sum_{i=1}^{n_{\text{history}}} \mathcal{R}_{\text{inc}}(\mathbf{X}_{\text{model}}) \right\} \right] \quad (8.48)$$

gespeichert. Falls $\mathcal{R}_{\text{history}}$ kleiner als ein gewisser Grenzwert ist, wird das zugehörige makroskopische Modell als hinreichend gute Approximation der mikrostrukturellen Antwort betrachtet. In diesem Falle kann das effektive makroskopische Modell verwendet werden. Anderfalls ist die komplette Auflösung eines FE²-Ansatzes erforderlich.

8.3 Numerische Beispiele

Dieser Abschnitt ist der Anwendbarkeit und der Leistung des neuartigen hierarchischen Homogenisierungsansatzes gewidmet. Hierfür werden zwei repräsentative numerische Beispiele gezeigt. Die analysierte Struktur mit den Randbedingungen ist in Abbildung 8.1a dargestellt. Die Materialantwort des Balkens ist durch die zugrunde gelegte Mikrostruktur gesteuert. Hier wird die in Abbildung 8.1b dargestellte Struktur mit zylindrischen Einschlüssen untersucht.

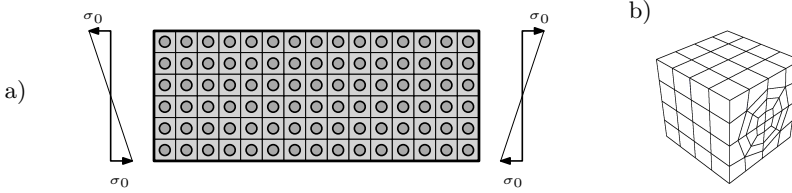


Abb. 8.1: Biegebalken, a) Geometrie der Struktur und zugehörige Randbedingungen. Abmessungen eines RVE $1\text{ mm} \times 1\text{ mm} \times 1\text{ mm}$; b) Triangulation des zugehörigen RVEs mit zylindrischem Einschluss

$$\eta = \left\{ -\frac{3}{120}, -\frac{2}{120}, -\frac{1}{120}, 0, +\frac{1}{120}, +\frac{2}{120}, +\frac{3}{120} \right\}$$

Tab. 8.1: Lastpfad des makroskop. Deformationsgradienten $\bar{\mathbf{F}} = \mathbf{1} + \eta \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j$

Während eine rein-elastische Antwort der Matrix und des Einschlusses im folgenden Abschnitt 8.3.1 angenommen ist, wird in Abschnitt 8.3.2 ein elastoplastisches Verhalten betrachtet. In diesen beiden Abschnitten werden die Resultate der vorgeschlagenen Homogenisierungsmethode mit denjenigen einer fein aufgelösten Simulation der ganzen Struktur verglichen. Um numerische Artefakte bezüglich der Diskretisierung zu verhindern, wurde das gleiche Netz in der fein aufgelösten Simulation der ganzen Struktur und für den neuen Homogenisierungsansatz verwendet.

Entsprechend Gleichung (8.43) erfordert die Anwendung des vorgeschlagenen hierarchischen Multiskalenansatzes die Wahl einer charakteristischen Familie von Konstitutivmodellen und die Spezifizierung einer Lastgeschichte. Für Letztere wurde eine Reihe von lokal definierten Deformationsgradienten nach Tabelle 8.1 verwendet. Andere Lastpfade sind auch zulässig, besonders wenn solche Pfade im Voraus bekannt sind. Der vorgestellte hierarchische Multiskalenansatz ist numerisch sehr effizient. Daher ist Anzahl der den Lastpfad definierenden Punkte für den numerischen Aufwand nicht ausschlaggebend.

Bei allen Berechnungen sind periodische Randbedingungen für das Fluktuationsfeld \mathbf{w} angenommen worden. Die Zielfunktion (8.43) wurde mit verschiedenen ableitungsfreien Optimierungsroutinen, wie den beispielsweise in Nocedal und Wright (1999) und Geiger und Kanzow (1999) erläuterten Nelder-Mead-, L-BFGS-, COBYLA- und genetischen Optimierungsalgorithmen, minimiert.

	λ [N/mm ²]	K [N/mm ²]
Einschluss	26.9	32.4
Matrix	269	324

Tab. 8.2: Elastischer Biegebalken: Materialparameter für die Mikroskala

λ [N/mm ²]	K [N/mm ²]	α_1 [N/mm ⁶]	α_2 [N/mm ⁶]	α_3 [N/mm ⁶]	α_4 [N/mm ⁶]	α_5 [N/mm ⁶]
165.0	244.8	-15.18	-12.39	30.23	-9.403	-11.67

α_6 [N/mm ⁶]	α_7 [N/mm ⁶]	β_1	β_2	β_3
13.45	-45.61	-1.379°	14.93°	18.44°

Tab. 8.3: Elastischer Biegebalken: homogenisierte Materialparameter

8.3.1 Hyperelastizität

Im ersten Beispiel ist der Einschluss und die Matrix des in Abbildung 8.1b dargestellten RVEs als rein elastisch und isotrop angenommen. Dabei wurden beide Materialien als hyperelastisch vom Neo-Hooke-Typ angesehen und entsprechend Gleichung (6.13) implementiert. Demzufolge ist die elastische Materialantwort des RVEs durch die vier in Tabelle 8.2 aufgelisteten Materialparameter bestimmt. Wie in Tabelle 8.2 ersichtlich, ist der Einschluss zehnmal weicher, als die umgebende Matrix.

Für eine Parametrisierung des makroskopischen Modells kann angenommen werden, dass sich das makroskopische Materialverhalten ähnlich der Mikrostruktur, also hyperelastisch verhält. Darüberhinaus legt die Geometrie des RVEs transversal isotropes Materialverhalten nahe, vgl. Abbildung 8.1b. Aus diesem Grund ist ein allgemeines orthotropes makroskopisches Konstitutivgesetz gewählt worden, das die vorgenannten Bedingungen erfüllen kann. Ein solches Modell ist in Gleichung (6.14) angegeben.

Die Tabelle 8.3 stellt die Ergebnisse der Homogenisierung zusammen. Wie dort zu erkennen ist, misst der Winkel β_1 annähernd Null. Physikalisch bedeutet dies, dass eine nahezu transversale isotrope Materialantwort durch den Algorithmus vorhergesagt wird. Dieses Resultat stimmt sehr gut mit der in diesem

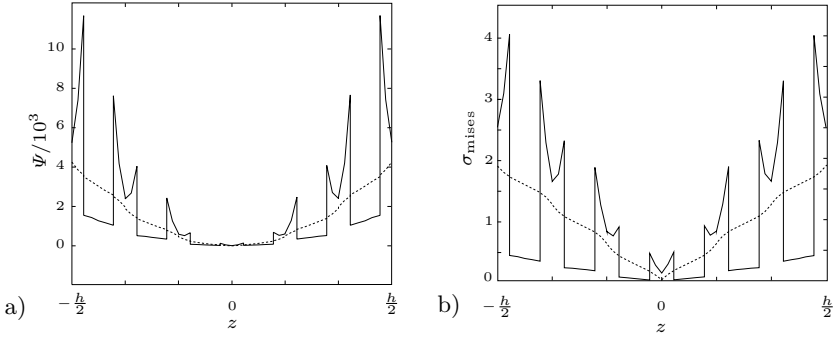


Abb. 8.2: Elastischer Biegebalken: a) Verteilung der freien Helmholtzenergie Ψ entlang eines Schnitts durch den Balken, b) dto., Verlauf der von-Mises-Spannung. Die gepunkteten Linien stellen die makroskopische Antwort dar.

Beispiel angenommenen Mikrostruktur überein.

Mit den Ergebnissen des effektiven makroskopischen Materialmodells wurde der in Abbildung 8.1a dargestellte Biegebalken numerisch untersucht. Die Ergebnisse sind zusammen mit denen einer fein aufgelösten Simulation der ganzen Struktur in Abbildung 8.2 angegeben. In dieser Abbildung sind die Verteilungen der elastischen Energie Ψ und der von-Mises-Vergleichsspannung entlang eines Pfades über den Querschnitt des Balkens gezeigt. Qualitativ sind die homogenisierten Energien und Spannungen den Ergebnissen der fein aufgelösten Simulation ähnlich. Trotzdem kann nur eine fein aufgelöste Simulation die Einflüsse der Grenzflächen zwischen Matrix und Einschluss erfassen. Es sei jedoch betont, dass dies auch für klassische FE²-Ansätze gilt und aus diesem Grund der neuartige Ansatz und klassische FE²-Methoden fast identische Resultate liefern. Hingegen ist der neuartige Ansatz numerisch deutlich effizienter. Zur Vollständigkeit ist der Fehler in der vertikalen Verschiebung entlang der Mittelebene des Balkens ebenfalls berechnet worden. Der Gesamtfehler beträgt in diesem Beispiel 0.318%.

8.3.2 Elasto-Plastizität

Als nächstes wird das numerische Beispiel nach Abbildung 8.1 erneut untersucht, wobei ein komplexeres elasto-plastisches Materialmodell auf der Mikroskala Verwendung findet. Der Fokus dieses Abschnitts liegt auf der elasto-plastischen Materialantwort. Aus diesem Grund werden die elastischen Eigenschaften als homogen verteilt angenommen, d. h. die Materialparameter der Matrix und des Einschlusses nach Abbildung 8.1b sind identisch. Folglich wird das gleiche Verhalten auf der Makroskala erwartet. Für die Plastizität wurde

	λ [N/mm ²]	K [N/mm ²]	Q_0^{eq} [N/mm ²]	\mathbb{D} [-]
Einschluss	269	324	1.5	$\bar{\mathbb{I}}$
Matrix	269	324	(rein elastisch)	

Tab. 8.4: Elasto-plastischer Biegebalken: Materialparameter für die Mikroskala

\mathbb{D}_{1111}	\mathbb{D}_{1212}	\mathbb{D}_{1313}	\mathbb{D}_{2121}	\mathbb{D}_{2222}	\mathbb{D}_{2323}	\mathbb{D}_{3131}	\mathbb{D}_{3232}	\mathbb{D}_{3333}
1.056	0.9907	0.9786	1.010	0.9994	0.9893	1.014	1.000	1.021

Tab. 8.5: Elasto-plastischer Biegebalken: homogenisierte Materialparameter

eine isotrope Fließfunktion vom Mises-Typ

$$\phi = \sqrt{\text{dev } \bar{\Sigma} : \text{dev } \bar{\Sigma}} - Q_0^{\text{eq}} \quad (8.49)$$

angenommen, um die Eigenschaften auf der Mikroskala zu beschreiben.

Um eine physikalisch sinnvolle Klasse makroskopischer Modelle zu finden, welche die Effekte der Mikroskala erfasst, wird Gleichung (8.49) mit der zugrunde gelegten Mikrostruktur kombiniert. Dies führt zu einer rein deviatorischen Fließfunktion, die auf der Makroskala transversale Orthotropie zeigt. Aus diesem Grund kann erwartet werden, dass eine Fließfunktion vom Hill-Typ

$$\bar{\phi} = \sqrt{\bar{\Sigma} : \mathbb{H} : \bar{\Sigma}} - \bar{Q}_0^{\text{eq}} \quad (8.50)$$

physikalisch sinnvolle Ergebnisse liefert. Der vierstufige Gewichtstensor \mathbb{H} ist in einen deviatorischen Projektionstensor \mathbb{P}^{dev} und einen zusätzlichen, die Symmetrie des Materials beschreibenden, Tensor \mathbb{D} zerlegt. Daher ist \mathbb{H} durch

$$\mathbb{H} = \mathbb{P}^{\text{dev}} : \mathbb{D} : \mathbb{P}^{\text{dev}} \quad (8.51)$$

definiert. Aus Gründen der Einfachheit ist hier perfekte Plastizität betrachtet. Jedoch können komplexere Verfestigungsmodelle in den vorgeschlagenen variationellen Multiskalenansatz ebenfalls eingebunden werden. Weitere Details hierzu können in Mosler und Bruhns (2009a,b) oder Mosler (2010) nachgelesen werden.

Nach Gleichung (8.50) sind die makroskopischen Materialparameter

$$\mathbf{X}_{\text{model}} = (\mathbb{D}, \bar{Q}_0^{\text{eq}}) \quad (8.52)$$

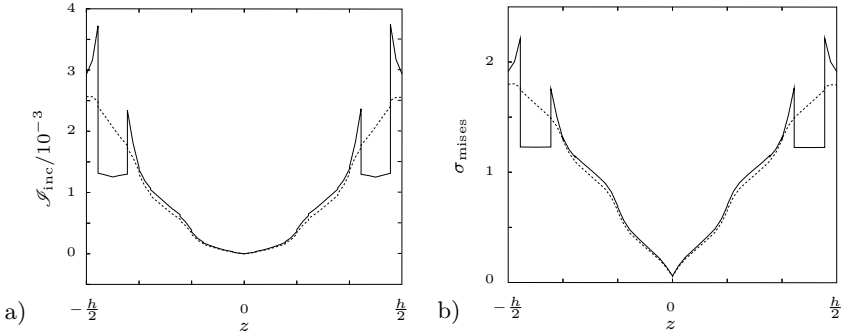


Abb. 8.3: Elasto-plastischer Biegebalken: a) Verteilung des inkrementellen elasto-plastischen Funktionals \mathcal{S}_{inc} entlang eines Schnitts durch den Balken, b) dto, Verlauf der von-Mises-Spannung. Die gepunkteten Linien stellen die makroskopische Antwort dar.

für das effektive Materialmodell zu berechnen. Diese Gleichung führt zu einer 82-dimensionalen Approximation des Raums der zulässigen makroskopischen Modelle. Gleichwohl ist dieser Raum nicht unbeschränkt. Beispielsweise muss die Fließfunktion konvex sein. Die zugehörige Nebenbedingung ist hochgradig nichtlinear und deshalb schwierig zu erzwingen. Aus diesem Grund wird angenommen, dass die Koeffizientenmatrix des Tensors \mathbb{D} nur diagonal besetzt ist. Einerseits geht dies mit der erwarteten Orthotropie (transversale Isotropie) der effektiven makroskopischen Fließfunktion einher. Andererseits erfordert die Konvexität der Fließfunktion, dass der Tensor \mathbb{D} positiv definit ist. Dann sind die Eigenwerte von \mathbb{D} (bzw. die Diagonalwerte seiner diagonal besetzten Koeffizientenmatrix) größer als null. Dies reduziert die Anzahl der Unbekannten von 82 auf 10. Des Weiteren kann der Anfangsdurchmesser der Fließfunktion entweder durch \bar{Q}_0^{eq} oder durch den vierstufigen Tensor \mathbb{D} definiert werden. In diesem Beispiel wurde $\bar{Q}_0^{\text{eq}} = 1.5 \text{ N/mm}^2$ gewählt. Zusammenfassend lauten daher die neun unbekannt Materialparameter, die für die vorliegende Simulation gewählt wurden,

$$\begin{aligned} \mathbf{X}_{\text{model}} = (\mathbb{D}_{1111}, \mathbb{D}_{1212}, \mathbb{D}_{1313}, \mathbb{D}_{2121}, \\ \mathbb{D}_{2222}, \mathbb{D}_{2323}, \mathbb{D}_{3131}, \mathbb{D}_{3232}, \mathbb{D}_{3333}). \end{aligned} \quad (8.53)$$

Die makroskopischen Materialparameter (8.53) wurden auch in diesem Beispiel mit Hilfe der Methode von Ritz, Gleichung (8.43), numerisch ermittelt. Im Gegensatz zu dem vorstehenden Beispiel wurden die besten Resultate durch einen genetischen Algorithmus des Optimierungsproblems (8.43) erzielt. Die Materialparameter, die zu dem abschließenden Zustand korrespondieren, sind

in Tabelle 8.5 zusammengestellt.

Mit den in Tabelle 8.5 angegebenen Materialparametern wurde der in den Abbildungen 8.1a und 8.1b dargestellte Biegebalken erneut numerisch untersucht. Wie in dem zuvor geschilderten hyperelastischen Beispiel wurde aus Gründen der Vollständigkeit eine fein aufgelöste Simulation der gesamten Struktur betrachtet. Die vorhergesagte Verteilung der Spannungsleistung \mathcal{S}_{inc} und die Werte der von-Mises-Vergleichsspannung über dem Querschnitt in der Balkenmitte sind in Abbildung 8.3 abgedruckt. Diesen Abbildungen ist zu entnehmen, dass das effektive Materialmodell die mechanische Systemantwort der zugrunde liegenden Mikrostruktur sehr gut erfasst.

9 Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit wurde zuerst ein variationell konsistenter Algorithmus vorgestellt. Dieser Algorithmus erlaubt die Berechnung aller in einem Plastizitätsmodell mit endlichen Deformationen auftretenden Zustandsvariablen durch Minimierung der inkrementellen Spannungsleistung \mathcal{J}_{inc} . Dabei ist der vorgestellte Rahmen äußerst allgemein gehalten und kann für eine große Klasse an Konstitutivmodellen angewandt werden, die elastisch anisotrop sind, anisotrope Fließfunktion oder kombinierte isotrope und nichtlineare kinematische Verfestigung besitzen. Für vollständig isotrope Materialmodelle wurde ein adaptierter Algorithmus entwickelt, der alle Materialsymmetrien optimal ausnutzt. Dieser Algorithmus ist in Eigenwerten formuliert, reduziert den numerischen Aufwand signifikant und ist äußerst effizient; er ist sogar effizienter als der vergleichbare, in Hauptspannungen formulierte, klassische Return-Mapping-Algorithmus. So konnte gezeigt werden, dass die zugrunde liegende Struktur der variationellen Plastizitätsformulierung auch für sehr effiziente numerische Implementierungen verwendet werden kann.

Die erfolgreiche Umsetzung des variationell konsistenten Algorithmus ist wesentlich von einer passenden Parametrisierung der Fließregel abhängig. Es konnte gezeigt werden, dass eine Kombination aus direkter Parametrisierung der Fließregel und der Einbindung der erforderlichen Nebenbedingung mit Hilfe einer Projektion numerisch stabil ist. Allerdings kann dieses Verfahren nur für wenige Fließfunktionen angewandt werden. Deshalb wurde eine verallgemeinerte Parametrisierung auf Basis so genannter Pseudo-Spannungen implementiert, die nicht dieser Einschränkung unterliegt. Leider führt die Implementierung mit dem Verfahren von Newton zu einer schlecht konditionierten Hesse-Matrix und ist daher numerisch nicht immer lösbar. Jedoch konnte dieses Problem mit Hilfe einer zusätzlichen Parametrisierung effizient umgangen werden, so dass nun ein Algorithmus existiert, der alle positiven Eigenschaften einer variationellen Formulierung besitzt und dabei ähnlich effizient wie der klassische Return-Mapping-Algorithmus ist.

Durch aussagekräftige numerische Experimente konnte gezeigt werden, dass der neue variationell konsistente Algorithmus eine ähnliche Genauigkeit wie der konventionelle klassische Return-Mapping-Algorithmus besitzt. Überdies ist der neue Algorithmus sehr effizient – in vielen Fällen sogar effizienter als das klassische Verfahren.

Mit Hilfe des neuen variationell konsistenten Algorithmus wurde eine neue hybride Homogenisierungsmethode vorgestellt. Wesentlich für diesen Ansatz ist eine variationell konsistente Beschreibung der Konstitutivmodelle sowohl auf der Ebene der Mikroskala als auch der Ebene der Makroskala. Diese Beschreibung definiert alle Zustandsvariablen durch eine natürliche Energieminimierung. Außerdem impliziert dieses Variationsprinzip das Prinzip der Ener-

gieäquivalenz zur Skalenkopplung. Da ein klassischer FE^2 -Ansatz zur Überbrückung der Skalen numerisch sehr aufwendig ist, wurde eine effiziente Approximation vorgeschlagen. Damit lassen sich die Materialparameter für ein effektives makroskopisches Materialmodell, das die wesentlichen Einflüsse der Mikrostruktur abbildet, effizient berechnen. Die einzige Schwierigkeit besteht darin, eine passende allgemeine Familie von makroskopischen Materialmodellen zu finden, welche alle relevanten Eigenschaften der Mikrostruktur erfasst. Allerdings gibt das Variationsprinzip hierfür eine Hilfestellung. Anhand mehrerer Beispiele konnte gezeigt werden, dass der vorgeschlagene Algorithmus tatsächlich sehr vielversprechend ist.

A Notation

Es werden die in Tabelle A.1 aufgelisteten Bezeichnungen verwendet.

Symbol	Beispiel
Skalare (Tensoren 0. Stufe)	a
Tensoren erster Stufe	\mathbf{a}
Tensoren zweiter Stufe	\mathbf{A}
Tensoren vierter Stufe	$\underline{\mathbf{A}}$
Tensoren sechster Stufe	$\overline{\mathbf{A}}$
Funktionale	\mathcal{A}
Vektoren	\mathbf{a}
Matrizen	\mathbf{A}

Tab. A.1: Notation der Symbole

Ab Kapitel 8 wird zwischen lokalen und globalen Größen unterschieden. Hierzu werden überstrichene Bezeichnungen ($\overline{\mathbf{A}}$) für globale, makroskopisch gemittelte Ausdrücke genutzt.

Der Begriff Tensor bezeichnet Tensoren über einem dreidimensionalen Euklidischen Raum \mathbb{E}^3 . Alle in dieser Arbeit verwendeten Tensoren beziehen sich auf kartesische Koordinatensysteme mit den Basisvektoren $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3\}$.

Die Einsteinsche Summenkonvention wird verwendet.

Folgende tensorielle Produkte werden definiert:

$$\mathbf{a} \otimes \mathbf{b} = a_i b_j \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \quad (\text{A.1})$$

$$\mathbf{A} \otimes \mathbf{B} = A_{ij} B_{kl} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l \quad (\text{A.2})$$

$$\overline{\mathbf{A}} \otimes \mathbf{B} = A_{ik} B_{jl} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l \quad (\text{A.3})$$

$$\underline{\mathbf{A}} \otimes \mathbf{B} = A_{il} B_{jk} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l \quad (\text{A.4})$$

Die einfache Überschiebung von Tensoren über benachbarte Indizes wird durch einen einfachen Punkt gekennzeichnet:

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = A_{im} B_{mj} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \quad (\text{A.5})$$

Analog wird die zweifache Überschiebung über benachbarte Indizes durch

Rechentafel A.1 Einfache Überschiebung mit vierstufigen Tensoren

$$\begin{aligned}
 \mathbf{A} \cdot (\mathbf{B} \otimes \mathbf{C}) &= (\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}) \otimes \mathbf{C} & (\mathbf{A} \otimes \mathbf{B}) \cdot \mathbf{C} &= \mathbf{A} \otimes (\mathbf{B} \cdot \mathbf{C}) \\
 \mathbf{A} \cdot (\mathbf{B} \underline{\otimes} \mathbf{C}) &= (\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}) \underline{\otimes} \mathbf{C} & (\mathbf{A} \underline{\otimes} \mathbf{B}) \cdot \mathbf{C} &= (\mathbf{A} \cdot \mathbf{C}) \underline{\otimes} \mathbf{B} \\
 \mathbf{A} \cdot (\mathbf{B} \overline{\otimes} \mathbf{C}) &= \mathbf{A} \overline{\otimes} (\mathbf{B} \cdot \mathbf{C}) & (\mathbf{A} \overline{\otimes} \mathbf{B}) \cdot \mathbf{C} &= \mathbf{A} \overline{\otimes} (\mathbf{B} \cdot \mathbf{C})
 \end{aligned}$$

Rechentafel A.2 Zweifache Überschiebung mit vierstufigen Tensoren

$$\begin{aligned}
 \mathbf{A} : (\mathbf{B} \otimes \mathbf{C}) &= \text{tr}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}) \mathbf{C} & (\mathbf{A} \otimes \mathbf{B}) : \mathbf{C} &= \mathbf{A} \text{tr}(\mathbf{B} \cdot \mathbf{C}) \\
 \mathbf{A} : (\mathbf{B} \underline{\otimes} \mathbf{C}) &= \mathbf{C}^T \cdot \mathbf{A}^T \cdot \mathbf{B} & (\mathbf{A} \underline{\otimes} \mathbf{B}) : \mathbf{C} &= \mathbf{A} \cdot \mathbf{C}^T \cdot \mathbf{B}^T \\
 \mathbf{A} : (\mathbf{B} \overline{\otimes} \mathbf{C}) &= \mathbf{B}^T \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{C} & (\mathbf{A} \overline{\otimes} \mathbf{B}) : \mathbf{C} &= \mathbf{A} \cdot \mathbf{C} \cdot \mathbf{B}^T
 \end{aligned}$$

:	$\mathbf{C} \otimes \mathbf{D}$	$\mathbf{C} \underline{\otimes} \mathbf{D}$	$\mathbf{C} \overline{\otimes} \mathbf{D}$
$\mathbf{A} \otimes \mathbf{B}$	$\mathbf{A} \otimes \mathbf{D} \text{tr}(\mathbf{B} \cdot \mathbf{C})$	$\mathbf{A} \otimes (\mathbf{D}^T \cdot \mathbf{B}^T \cdot \mathbf{C})$	$\mathbf{A} \otimes (\mathbf{C}^T \cdot \mathbf{B} \cdot \mathbf{D})$
$\mathbf{A} \underline{\otimes} \mathbf{B}$	$(\mathbf{A} \cdot \mathbf{C}^T \cdot \mathbf{B}^T) \otimes \mathbf{D}$	$(\mathbf{A} \cdot \mathbf{D}) \overline{\otimes} (\mathbf{B} \cdot \mathbf{C})$	$(\mathbf{A} \cdot \mathbf{D}) \underline{\otimes} (\mathbf{B} \cdot \mathbf{C})$
$\mathbf{A} \overline{\otimes} \mathbf{B}$	$(\mathbf{A} \cdot \mathbf{C} \cdot \mathbf{B}^T) \otimes \mathbf{D}$	$(\mathbf{A} \cdot \mathbf{C}) \underline{\otimes} (\mathbf{B} \cdot \mathbf{D})$	$(\mathbf{A} \cdot \mathbf{C}) \overline{\otimes} (\mathbf{B} \cdot \mathbf{D})$

einen zweifachen Punkt kenntlich gemacht:

$$\mathbf{A} : \mathbf{B} = A_{ij} B_{ij} \quad (\text{A.6})$$

$$\mathbf{A} : \mathbf{B} = A_{ijkl} B_{kl} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \quad (\text{A.7})$$

$$\mathbf{A} : \mathbf{B} = A_{ij} B_{ijkl} \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l \quad (\text{A.8})$$

$$\mathbf{A} : \mathbf{B} = A_{ijkl} B_{klmn} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_m \otimes \mathbf{e}_n \quad (\text{A.9})$$

Die Resultate häufiger ein- und zweifacher Überschiebungen mit vierstufigen Tensoren sind in den Rechentafeln A.1 und A.2 abgedruckt.

Wird die Überschiebung höherstufiger Tensoren nicht über benachbarte Indizes durchgeführt, so finden folgende Bezeichnungen Verwendung:

$$\mathbf{A} \begin{smallmatrix} (2) \\ \cdot \end{smallmatrix} \mathbf{B} = A_{imkl} B_{mj} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l \quad (\text{A.10})$$

$$\mathbf{A} \begin{smallmatrix} (1) \\ \cdot \end{smallmatrix} \mathbf{B} = A_{ijkl} B_{ij} \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l \quad (\text{A.11})$$

Die hochgestellte Zahl bezeichnet dabei den (ersten) Index des linksstehenden Tensors, über den die Überschiebung ausgeführt wird. In Tabellenform sind die Resultate dieser Verknüpfungen in der Rechentafel A.3 zusammengefasst.

Rechentafel A.3 Überschiebung nach den Gleichungen (A.10) und (A.11)

$$\begin{array}{ll}
 (\underline{\mathbf{A}} \otimes \underline{\mathbf{B}}) \stackrel{(2)}{\cdot} \underline{\mathbf{C}} = (\underline{\mathbf{A}} \cdot \underline{\mathbf{C}}) \otimes \underline{\mathbf{B}} & (\underline{\mathbf{A}} \otimes \underline{\mathbf{B}}) \stackrel{(1)}{\cdot} \underline{\mathbf{C}} = \text{tr}(\underline{\mathbf{A}} \cdot \underline{\mathbf{C}}) \underline{\mathbf{B}} \\
 (\underline{\mathbf{A}} \underline{\otimes} \underline{\mathbf{B}}) \stackrel{(2)}{\cdot} \underline{\mathbf{C}} = \underline{\mathbf{A}} \underline{\otimes} (\underline{\mathbf{C}}^T \cdot \underline{\mathbf{B}}) & (\underline{\mathbf{A}} \underline{\otimes} \underline{\mathbf{B}}) \stackrel{(1)}{\cdot} \underline{\mathbf{C}} = \underline{\mathbf{B}}^T \cdot \underline{\mathbf{C}}^T \cdot \underline{\mathbf{A}} \\
 (\underline{\mathbf{A}} \overline{\otimes} \underline{\mathbf{B}}) \stackrel{(2)}{\cdot} \underline{\mathbf{C}} = \underline{\mathbf{A}} \overline{\otimes} (\underline{\mathbf{C}}^T \cdot \underline{\mathbf{B}}) & (\underline{\mathbf{A}} \overline{\otimes} \underline{\mathbf{B}}) \stackrel{(1)}{\cdot} \underline{\mathbf{C}} = \underline{\mathbf{A}}^T \cdot \underline{\mathbf{C}} \cdot \underline{\mathbf{B}}
 \end{array}$$

Ausdrücke der Art

$$\underline{\mathbf{A}} \stackrel{(1)}{\cdot} \underline{\mathbf{B}} \stackrel{(3)}{\cdot} \underline{\mathbf{C}} = A_{ijkl} B_{ij} C_{kl}, \quad (\text{A.12})$$

$$\underline{\mathbf{A}} \stackrel{(1)}{\cdot} \underline{\mathbf{B}} \stackrel{(3)}{\cdot} \underline{\mathbf{C}} = A_{ijkl} B_{ij} C_{klmn} \mathbf{e}_m \otimes \mathbf{e}_n, \quad (\text{A.13})$$

$$\underline{\mathbf{A}} \stackrel{(3)}{\cdot} \underline{\mathbf{B}} \stackrel{(5)}{\cdot} \underline{\mathbf{C}} = A_{ijklmn} B_{klpq} C_{mnuv} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_p \otimes \mathbf{e}_q \otimes \mathbf{e}_u \otimes \mathbf{e}_v \quad (\text{A.14})$$

entstehen durch mehrmalige Differentiation eines Tensorfeldes nach einem Tensor höherer Stufe infolge der Kettenregel.¹¹

Mit den Symbolen $\det \mathbf{A}$, $\text{tr} \mathbf{A}$, \mathbf{A}^T und \mathbf{A}^{-1} werden Determinante, Spur, Transponierte und Inverse eines zweistufigen Tensors \mathbf{A} analog der Standard-Matrixnotation gekennzeichnet. Dabei wirken diese Operatoren auf die Koeffizientenmatrix eines Tensors:

$$\det \mathbf{A} = \det A_{ij} \quad (\text{A.15})$$

$$\text{tr} \mathbf{A} = A_{ii} \quad (\text{A.16})$$

$$\mathbf{1} \cdot \mathbf{A} = \mathbf{A} \quad (\text{A.17})$$

$$\mathbf{A}^T = A_{ji} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \quad (\text{A.18})$$

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{A}^{-1} = \mathbf{1} \quad (\text{A.19})$$

Hierbei steht

$$\mathbf{1} = \delta_{ij} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j, \quad \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{falls } i = j \\ 0 & \text{falls } i \neq j \end{cases} \quad (\text{A.20})$$

für den Einheitstensor zweiter Stufe und δ_{ij} für das Kronecker-Symbol.

Es werden fünf verschiedene vierstufige Einheitstensoren wie folgt definiert:

$$\mathbb{I} = \mathbf{1} \otimes \mathbf{1}, \quad (\text{A.21})$$

$$\overline{\mathbb{I}} = \mathbf{1} \overline{\otimes} \mathbf{1}, \quad \underline{\mathbb{I}} = \mathbf{1} \underline{\otimes} \mathbf{1}, \quad (\text{A.22, A.23})$$

$$\mathbb{I}^{\text{sym}} = \frac{1}{2} (\overline{\mathbb{I}} + \underline{\mathbb{I}}), \quad \mathbb{I}^{\text{skw}} = \frac{1}{2} (\overline{\mathbb{I}} - \underline{\mathbb{I}}) \quad (\text{A.24, A.25})$$

¹¹Prinzipiell lassen sich (A.12) und (A.13) zu $\underline{\mathbf{B}} : \underline{\mathbf{A}} : \underline{\mathbf{C}}$ bzw. $\underline{\mathbf{B}} : \underline{\mathbf{A}} : \underline{\mathbf{C}}$ umformulieren. Allerdings geht dann die innere Struktur der Gleichungen verloren. Außerdem ist diese Umformung bei Ausdrücken wie (A.14) nicht möglich. Deshalb werden derartige Umformungen in dieser Arbeit vermieden.

Die Ausdrücke

$$\text{sym } \mathbf{A} = \frac{1}{2} (\mathbf{A} + \mathbf{A}^T) \quad \text{skw } \mathbf{A} = \frac{1}{2} (\mathbf{A} - \mathbf{A}^T) \quad (\text{A.26, A.27})$$

stehen für den symmetrischen und den antimetrischen Anteil eines Tensors \mathbf{A} . Analog sind der deviatorische Anteil eines Tensors \mathbf{A} sowie der zugehörige Kugeltensor mit

$$\text{dev } \mathbf{A} = \mathbf{A} - \text{sph } \mathbf{A}, \quad \text{sph } \mathbf{A} = \frac{1}{3} \text{tr}(\mathbf{A}) \mathbf{1} \quad (\text{A.28, A.29})$$

gekennzeichnet.

Mit den Eins-Tensoren (A.20–A.22) lassen sich die zuvor eingeführten Definitionen als lineare Abbildung

$$\text{tr } \mathbf{A} = \mathbf{1} : \mathbf{A}, \quad (\text{A.16}^*)$$

$$\mathbf{A} = \bar{\mathbb{I}} : \mathbf{A}, \quad (\text{A.17}^*)$$

$$\mathbf{A}^T = \underline{\mathbb{I}} : \mathbf{A} \quad (\text{A.18}^*)$$

beziehungsweise

$$\text{sym } \mathbf{A} = \mathbb{I}^{\text{sym}} : \mathbf{A}, \quad \text{skw } \mathbf{A} = \mathbb{I}^{\text{skw}} : \mathbf{A} \quad (\text{A.26}^*, \text{A.27}^*)$$

notieren. Ebenso können Deviator und Kugeltensor

$$\text{dev } \mathbf{A} = \mathbb{P}^{\text{dev}} : \mathbf{A}, \quad \text{sph } \mathbf{A} = \mathbb{P}^{\text{sph}} : \mathbf{A} \quad (\text{A.28}^*, \text{A.29}^*)$$

als lineare Abbildung interpretiert werden. Dabei sind die Tensoren

$$\mathbb{P}^{\text{dev}} = \bar{\mathbb{I}} - \frac{1}{3} \mathbb{I}, \quad \mathbb{P}^{\text{sph}} = \frac{1}{3} \mathbb{I} \quad (\text{A.30, A.31})$$

eingeführt worden. Die Projektionstensoren (A.30, A.31) überführen einen Tensor von seinem Definitionsraum in den entsprechenden Werteraum durch

$$\mathbb{P}^{\text{dev}} : \mathbb{R}^{3 \times 3} \rightarrow \mathbb{R}^8, \quad \mathbb{P}^{\text{sph}} : \mathbb{R}^{3 \times 3} \rightarrow \mathbb{R}. \quad (\text{A.32, A.33})$$

Die Projektionstensoren verhalten sich bezüglich der zweifachen Überschiebung mathematisch wie neutrale Elemente, d. h. es gilt

$$\mathbb{P}^{\text{dev}} : \mathbb{P}^{\text{dev}} = \mathbb{P}^{\text{dev}}, \quad \mathbb{P}^{\text{sph}} : \mathbb{P}^{\text{sph}} = \mathbb{P}^{\text{sph}}. \quad (\text{A.34, A.35})$$

Daher ist beispielsweise $\text{dev}(\text{dev } \mathbf{A}) = \text{dev } \mathbf{A}$.¹²

¹²Wegen dieser Eigenschaft wäre es naheliegend, die Projektionstensoren durch \mathbb{I}^{dev} bzw. \mathbb{I}^{sph} zu bezeichnen. Um jedoch die Projektionseigenschaft (A.32, A.33) zu betonen, werden in dieser Arbeit die Symbole \mathbb{P}^{dev} und \mathbb{P}^{sph} gewählt.

Aufgrund der Orthogonalität der Projektionen (A.26–A.29) gilt

$$\mathbb{P}^{\text{sph}} + \underbrace{\mathbb{I}^{\text{sym}} + \mathbb{I}^{\text{skw}}}_{=\mathbb{P}^{\text{dev}}} - \mathbb{P}^{\text{sph}} - \bar{\mathbb{I}} = \mathbf{O}. \quad (\text{A.36})$$

Die Darstellung eines zweistufigen Tensors \mathbf{A} in Eigenwerten λ_i sowie Links- und Rechts-Eigenvektoren, \mathbf{n}_{li} , \mathbf{n}_{ri} , lautet

$$\mathbf{A} = \sum_{i=1}^3 \lambda_i \mathbf{n}_{li} \otimes \mathbf{n}_{ri}, \quad (\text{A.37})$$

wobei die Eigenvektoren – wie grundsätzlich alle in dieser Arbeit genannten Eigenvektoren – normiert sind.

Aus dem charakteristischen Polynom

$$\det(\mathbf{A} - \lambda \mathbf{1}) = \lambda^3 - I_1 \lambda^2 + I_2 \lambda - I_3 \quad (\text{A.38})$$

lassen sich die Koeffizienten zu

$$I_1 = \text{tr } \mathbf{A}, \quad (\text{A.39})$$

$$I_2 = \frac{1}{2} (\text{tr}^2 \mathbf{A} - \text{tr } \mathbf{A}^2), \quad (\text{A.40})$$

$$\begin{aligned} I_3 &= \det \mathbf{A} \\ &= \frac{1}{6} (\text{tr}^3 \mathbf{A} - 3 \text{tr } \mathbf{A}^2 \text{tr } \mathbf{A} + 2 \text{tr } \mathbf{A}^3) \end{aligned} \quad (\text{A.41})$$

ermitteln, die als Hauptinvarianten bezeichnet werden. Die Ausdrücke

$$I_{\mathbf{A}} = \text{tr } \mathbf{A}, \quad (\text{A.42})$$

$$II_{\mathbf{A}} = \text{tr } \mathbf{A}^2, \quad (\text{A.43})$$

$$III_{\mathbf{A}} = \text{tr } \mathbf{A}^3 \quad (\text{A.44})$$

werden hingegen Grundinvarianten genannt.

Für den Deviator $\text{dev } \mathbf{A}$ eines Tensors \mathbf{A} lautet das charakteristische Polynom

$$\det(\text{dev } \mathbf{A} - s \mathbf{1}) = s^3 - J_1 s^2 - J_2 s - J_3 = 0 \quad (\text{A.45})$$

mit den Eigenwerten s und den Invarianten

$$J_1 = \text{tr}(\text{dev } \mathbf{A}) = 0, \quad (\text{A.46})$$

$$J_2 = \frac{1}{2} \text{dev } \mathbf{A} : \text{dev } \mathbf{A} = \frac{1}{3} (I_{\mathbf{A}}^2 - 3 II_{\mathbf{A}}), \quad (\text{A.47})$$

$$\begin{aligned} J_3 &= \det(\text{dev } \mathbf{A}) \\ &= \frac{1}{27} (2 I_{\mathbf{A}}^3 - 9 I_{\mathbf{A}} II_{\mathbf{A}} + 27 III_{\mathbf{A}}). \end{aligned} \quad (\text{A.48})$$

Die Invarianten eines deviatorischen Tensors lassen sich also aus den Grundinvarianten (A.42–A.44) des zugehörigen Tensors \mathbf{A} bestimmen.

Nach der Zusammenfassung einiger Grundlagen der Tensoralgebra soll abschließend ein fundamentaler und häufig angewendeter Satz der Tensoranalysis angegeben werden. Dies ist der *Gaußsche Integralsatz*. Er lautet in verallgemeinerter (tensorieller) Form

$$\int_{\partial\mathcal{B}} \mathbf{a} \circ \mathbf{n} \, dA = \int_{\mathcal{B}} \nabla \circ \mathbf{a} \, dV, \quad (\text{A.49})$$

$$\int_{\partial\mathcal{B}} \mathbf{A} \circ \mathbf{n} \, dA = \int_{\mathcal{B}} \nabla \circ \mathbf{A} \, dV. \quad (\text{A.50})$$

Hierin bezeichnet \mathbf{n} die Flächennormale auf dA und das Zeichen ∇ den Nabla-Operator. Die Verknüpfung \circ steht wahlweise für eine der Operationen:

$$\nabla \circ \mathbf{a} = \begin{cases} \nabla \cdot \mathbf{a} \\ \nabla \otimes \mathbf{a} \\ \nabla \times \mathbf{a} \end{cases} \quad \nabla \circ \mathbf{A} = \begin{cases} \nabla \cdot \mathbf{A} \\ \nabla \otimes \mathbf{A} \\ \nabla \times \mathbf{A} \end{cases}$$

B Differentiale wichtiger tensorieller Größen

Alle tensoriellen Symbole sind im Anhang A erklärt.

B.1 Ausgewählte Differentiale

- beliebiger zweistufiger Tensor \mathbf{A}

$$\frac{d\mathbf{A}}{d\mathbf{A}} = \bar{\mathbb{I}} \qquad \frac{dA_{ij}}{dA_{kl}} = \delta_{ik}\delta_{jl} \qquad (\text{B.1})$$

$$\frac{d\mathbf{A}^T}{d\mathbf{A}} = \underline{\mathbb{I}} \qquad \frac{dA_{ji}}{dA_{kl}} = \delta_{il}\delta_{jk} \qquad (\text{B.2})$$

$$\frac{d\mathbf{A}^{-1}}{d\mathbf{A}} = -\mathbf{A}^{-1} \otimes \bar{\mathbf{A}}^{-T} \qquad \frac{dA_{ij}^{-1}}{dA_{kl}} = -A_{ik}^{-1} A_{lj}^{-1} \qquad (\text{B.3})$$

$$\frac{d\mathbf{A}^{-T}}{d\mathbf{A}} = -\mathbf{A}^{-T} \otimes \underline{\mathbf{A}}^{-1} \qquad \frac{dA_{ji}^{-1}}{dA_{kl}} = -A_{li}^{-1} A_{jk}^{-1} \qquad (\text{B.4})$$

$$\frac{d(\text{tr } \mathbf{A})}{d\mathbf{A}} = \mathbf{1} \qquad \frac{dA_{kk}}{dA_{ij}} = \delta_{ij} \qquad (\text{B.5})$$

$$\frac{d\|\mathbf{A}\|}{d\mathbf{A}} = \frac{\mathbf{A}}{\|\mathbf{A}\|} \qquad \frac{d\|A_{kl}\|}{dA_{ij}} = \frac{A_{ij}}{\sqrt{A_{kl}A_{kl}}} \qquad (\text{B.6})$$

- Deformationsgradiententensor \mathbf{F} und rechter Cauchy-Green-Tensor \mathbf{C}

$$\frac{d(\text{tr } \mathbf{F})}{d\mathbf{C}} = 2\mathbf{F} \qquad \frac{dF_{kk}}{dC_{ij}} = 2F_{ij} \qquad (\text{B.7})$$

$$\frac{d\mathbf{C}}{d\mathbf{F}} = \mathbf{1} \otimes \underline{\mathbf{F}}^{-T} + \mathbf{F}^{-T} \otimes \bar{\mathbf{1}} \qquad \frac{dC_{ij}}{dF_{kl}} = \delta_{il}F_{kj}^{-1} + F_{ki}^{-1}\delta_{jl} \qquad (\text{B.8})$$

- Jacobi-Determinante J

$$\frac{dJ}{d\mathbf{F}} = J\mathbf{F}^{-T} \qquad \frac{dJ}{dF_{ij}} = JF_{ji}^{-1} \qquad (\text{B.9})$$

$$\frac{dJ}{d\mathbf{C}} = \frac{1}{2}J\mathbf{C}^{-1} \qquad \frac{dJ}{dC_{ij}} = \frac{1}{2}JC_{ij}^{-1} \qquad (\text{B.10})$$

B.2 Ableitungen der freien Helmholtzenergie

Die in dieser Arbeit gewählte freie Helmholtzenergie lautet

$$\Psi = \frac{\mu}{2} \left(J^{-\frac{2}{3}} \operatorname{tr} \mathbf{C} - 3 \right) + \frac{K}{2} \left(\frac{1}{2} (J^2 - 1) - \ln J \right). \quad (6.13)$$

Zur Anwendung des Verfahrens von Newton sind die ersten beiden Ableitungen von (6.13) nach dem Deformationsgradienten \mathbf{F} erforderlich. Sie lauten

$$\mathbf{P} = \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{F}} = \frac{\mu}{3} J^{-\frac{2}{3}} (3 \mathbf{F} - \operatorname{tr}(\mathbf{C}) \mathbf{F}^{-T}) + \frac{K}{2} (J^2 - 1) \mathbf{F}^{-T} \quad (B.11)$$

und

$$\begin{aligned} \mathbb{A} = \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial \mathbf{F}} = & \frac{\mu}{9} J^{-\frac{2}{3}} \left(9 \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} + 6 (\mathbf{F} \otimes \mathbf{F}^{-T} - \mathbf{F}^{-T} \otimes \mathbf{F}) \right. \\ & \left. + \operatorname{tr}(\mathbf{C}) (2 \mathbf{F}^{-T} \otimes \mathbf{F}^{-T} + 3 \mathbf{F}^{-T} \otimes \underline{\mathbf{F}}^{-1}) \right) \\ & + \frac{K}{2} (2 J^2 \mathbf{F}^{-T} \otimes \mathbf{F}^{-T} + (1 - J^2) \mathbf{F}^{-T} \otimes \underline{\mathbf{F}}^{-1}). \end{aligned} \quad (B.12)$$

B.3 Ableitungen der Fließfunktion

Zur Anwendung des Verfahrens von Newton auf den variationell konsistenten Algorithmus ist in den Gleichungen (7.73–7.76) die explizite Kenntnis der ersten drei Ableitungen der Fließfunktion nötig. Mit der Vergleichsspannung $\Sigma^{\text{eq}} = \sqrt{\boldsymbol{\Sigma}} : \mathbb{H} : \boldsymbol{\Sigma}$ lassen sich für eine Fließfunktion vom Typ

$$\phi = \Sigma^{\text{eq}} - Q_0^{\text{eq}} \quad (6.41)$$

die Ableitungen durch

$$\partial_{\boldsymbol{\Sigma}} \phi = \frac{1}{\Sigma^{\text{eq}}} \mathbb{H} : \boldsymbol{\Sigma}, \quad (B.13)$$

$$\partial_{\boldsymbol{\Sigma}}^2 \phi = \frac{1}{\Sigma^{\text{eq}}} \left[\mathbb{H} - \frac{\partial \phi}{\partial \boldsymbol{\Sigma}} \otimes \frac{\partial \phi}{\partial \boldsymbol{\Sigma}} \right], \quad (B.14)$$

$$\begin{aligned} \partial_{\boldsymbol{\Sigma}}^3 \phi = & -\frac{1}{\Sigma^{\text{eq}}} \left[\frac{\partial \phi}{\partial \Sigma_{ij}} \frac{\partial^2 \phi}{\partial \Sigma_{kl} \partial \Sigma_{mn}} + \frac{\partial \phi}{\partial \Sigma_{mn}} \frac{\partial^2 \phi}{\partial \Sigma_{ij} \partial \Sigma_{kl}} + \frac{\partial \phi}{\partial \Sigma_{kl}} \frac{\partial^2 \phi}{\partial \Sigma_{mn} \partial \Sigma_{ij}} \right] \\ & \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l \otimes \mathbf{e}_m \otimes \mathbf{e}_n \end{aligned} \quad (B.15)$$

bestimmen. Infolge der angenommenen Isotropie des elastischen Materialverhaltens ist der Spannungstensor $\boldsymbol{\Sigma}$ symmetrisch und die Indizes in der Klammer der dritten Ableitung treten paarweise nur in gerader Permutation auf.

Für Plastizität vom Mises-Typ tritt an die Stelle von \mathbb{H} der deviatorische Projektionstensor \mathbb{P}^{dev} .

C Homogene Funktionen

Die wesentliche Forderung für die Implementierung von plastischen Konstitutivmodellen mit Hilfe eines Variationsansatzes ist die positive Homogenität der Vergleichsspannung Σ^{eq} .

Allgemein wird eine Funktion $f(\mathbf{x})$ homogen vom Grad p genannt, falls

$$f(\lambda \mathbf{x}) = \lambda^p f(\mathbf{x}) \quad (\text{C.1})$$

gilt. Nach dem eulerschen Satz über homogene Funktionen haben Funktionen dieser Klasse die Eigenschaft

$$\mathbf{x}^T \cdot \nabla f(\mathbf{x}) = p f(\mathbf{x}). \quad (\text{C.2})$$

Für die Herleitung des variationell konsistenten Algorithmus wird angenommen, dass die Fließfunktion $\Sigma^{\text{eq}}(\boldsymbol{\Sigma}, \mathbf{Q})$ den Homogenitätsgrad $p = 1$ besitzt. Dann gilt

$$\boldsymbol{\Sigma} : \frac{\partial \Sigma^{\text{eq}}}{\partial \boldsymbol{\Sigma}} + \mathbf{Q} \cdot \frac{\partial \Sigma^{\text{eq}}}{\partial \mathbf{Q}} = \Sigma^{\text{eq}}. \quad (6.48)$$

Literatur

- Acton, F. S. (1990). *Numerical Methods that Work*. Mathematical Association of America, Washington. corrected edition.
- Başar, Y. und Weichert, D. (2000). *Nonlinear continuum mechanics of solids: fundamental concepts and perspectives*. Springer, Berlin Heidelberg.
- Belytschko, T. (2000). *Nonlinear Finite Elements for Continua and Structures*. Wiley & Sons, Ltd.
- Betten, J. (1993). *Kontinuumsmechanik*. Springer, New York.
- Bleier, N., Bruhns, O., und Mosler, J. (2010). On the effect of different parameterizations of the flow rule on the efficiency of variational constitutive updates. *PAMM* 10, 277–278.
- Bleier, N. und Mosler, J. (2009). On the numerical implementation of variational constitutive updates. In *COMPLAS X*.
- Bleier, N. und Mosler, J. (2012). Efficient variational constitutive updates by means of a novel parameterization of the flow rule. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 89, 1120–1143.
- Bleier, N. und Mosler, J. (2013). A hybrid variationally consistent homogenization approach based on Ritz’s method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 94, 625–647.
- Bonet, J. und Wood, R. D. (2008). *Nonlinear Continuum Mechanics For Finite Element Analysis* (2. Auflage). Cambridge University Press.
- Braides, A. (2002). *Gamma-convergence for Beginners*. Oxford University Press.
- Bronstein, I. N. (2006). *Taschenbuch der Mathematik*. Harri Deutsch.
- Canadija, M. und Mosler, J. (2011). On the thermomechanical coupling in finite strain plasticity theory with non-linear kinematic hardening by means of incremental energy minimization. *International Journal of Solids and Structures* 48, 1120–1129.
- Carstensen, C., Hackl, K., und Mielke, A. (2002). Non-convex potentials and microstructures in finite-strain plasticity. *Proceedings of the Royal Society of London Series A* 458(2018), 299–317.
- Chadwick, P. (1976). *Continuum Mechanics, Concise Theory and Problems*. Dover Publications.

- Ciralet, P. G. (1988). *Mathematical Elasticity, Volume I: Three-dimensional elasticity*. North-Holland Publishing Company Amsterdam.
- Dal Maso, G. (1983). *An introduction to Γ -convergence*. Birkhäuser, Boston.
- Eckart, C. (1948). *The Thermodynamics of Irreversible Processes. IV. The Theory of Elasticity and Anelasticity*, Volume 73, 373–382.
- Feigenbaum, H. P. und Dafalias, Y. F. (2007). Directional distortional hardening in metal plasticity within thermodynamics. *Int. J. Solids Struct.* 44, 7526–7542.
- Finger, J. (1892). Über die gegenseitigen Beziehungen von gewissen in der Mechanik mit Vortheil anwendbaren Flächen zweiter Ordnung nebst Anwendungen auf die Astatik. *Sitzungsberichte Akad. Wiss. Wien (IIa)* 101, 1105–1142.
- Fuschi, P., Peric, D., und Owen, D. (1992). Studies on generalized midpoint integration in rate-independent plasticity with reference to plane stress J_2 -flow theory. *Computers & Structures* 43, 1117–1133.
- Galilei, G. (1638). *Unterredungen und mathematische Demonstrationen*. Ostwalds Klassiker der exakten Wissenschaften. Reprint 2007.
- Geiger, C. und Kanzow, C. (1999). *Numerische Verfahren zur Lösung unrestringierter Optimierungsaufgaben*. Springer, New York.
- Geiger, C. und Kanzow, C. (2002). *Theorie und Numerik restringierter Optimierungsaufgaben*. Springer, New York.
- Göldner, H. (1985). *Lehrbuch Höhere Festigkeitslehre*, Band 2. Physik-Verlag.
- Guedes, J. und Kikuchi, N. (1990). Preprocessing and postprocessing for materials based on the homogenization method with adaptive finite element methods. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 83(2), 143–198.
- Hackl, K. und Fischer, F. D. (2008). On the relation between the principle of maximum dissipation and inelastic evolution given by dissipation potentials. *Proceedings of the Royal Society A* 464, 117–132.
- Hashin, Z. (1983). Analysis of Composite Materials - A Survey. *Journal of Applied Mechanics* 50, 481–505.
- Hill, R. (1963). Elastic properties of reinforced solids: Some theoretical principles. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 11, 357–372.

- Hill, R. (1972). On Constitutive Macro-Variables for Heterogeneous Solids at Finite Strain. *Proceedings of the Royal Society* 326, 131–147.
- Hughes, T. (2000). *The Finite Element Method*. Dover Publications.
- Kintzel, O. (2007). *Modellierung elasto-plastischen Materialverhaltens und duktiler Porenschädigung metallischer Werkstoffe bei großen Deformationen*. Dissertation, Ruhr-Universität Bochum, Fakultät für Bauingenieurwesen.
- Krieg, R. D. und Krieg, D. B. (1977). Accuracies of numerical simulation methods for the elastic-perfectly plastic model. *Journal of Pressure Vessel Technology* 99, 510–515.
- Li, S. und Wang, G. (2008). *Micromechanics and Nanomechanics*. World Scientific.
- Löblein, J. (2004). *Ein Modell zur Beschreibung finiter anisotroper elasto-plastischer Deformationen unter Berücksichtigung diskreter Rissausbreitung*. Dissertation, Universität Duisburg-Essen.
- Maenchen, G. und Sacks, S. (1964). The tensor code. *Methods in Computational Physics*, 181–210.
- Malvern, L. E. (1969). *Introduction to the Mechanics of a Continuous Medium*. Englewood Cliffs, New Jersey: Prentice-Hall, Inc.
- Mandel, J. (1971). *Plasticité classique et viscoplasticité*. CISM.
- Marsden, J. E. und Hughes, J. R. (1983). *Mathematical foundations of elasticity*. Englewood Cliffs, N.J. Prentice-Hall.
- Miehe, C. (2002). Strain-driven homogenization of inelastic microstructures and composites based on an incremental variational formulation. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 55, 1285–1322.
- Miehe, C., Apel, N., und Lambrecht, M. (2002). Anisotropic additive plasticity in the logarithmic strain space: modular kinematic formulation and implementation based on incremental minimization principles for standard materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 191, 5383–5425.
- Miehe, C., Schotte, J., und Lambrecht, M. (2002). Homogenization of inelastic solid materials at finite strains based on incremental minimization principles. Application to the texture analysis of polycrystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 50(10), 2123 – 2167.

- Moler, C. und Van Loan, C. (2003). Nineteen Dubious Ways to Compute the Exponential of a Matrix, Twenty-Five Years Later. *SIAM Review* 45(1), 3–49.
- Mosler, J. (2010). Variationally consistent modeling of finite strain plasticity theory with non-linear kinematic hardening. *International Journal of Solids and Structures* 200, 3127–3138.
- Mosler, J. und Bruhns, O. T. (2009a). On the implementation of rate-independent standard dissipative solids at finite strain – Variational constitutive updates. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 199, 417–429.
- Mosler, J. und Bruhns, O. T. (2009b). Towards variational constitutive updates for non-associative plasticity models at finite strain: models based on a volumetric-deviatoric split. *International Journal of Solids and Structures* 46, 1676–1684.
- Mosler, J. und Ortiz, M. (2006). On the numerical implementation of variational arbitrary Lagrangian-Eulerian (VALE) formulations. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 67, 1272–1289.
- Mosler, J. und Ortiz, M. (2007). Variational h -adaption in finite deformation elasticity and plasticity. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 72, 505–523.
- Mosler, J. und Ortiz, M. (2009). An error-estimate-free and remapping-free variational mesh refinement and coarsening method for dissipative solids at finite strains. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 77, 437–450.
- Müller, S. (1987). Homogenization of non convex integral functionals and cellular elastic materials. *Archive for Rational Mechanics and Analysis* 99, 189–212.
- Nemat-Nasser, S. und Hori, M. (1999). *Micromechanics: Overall properties of heterogeneous materials*. Elsevier.
- Nocedal, J. und Wright, S. J. (1999). *Numerical Optimization*. Springer, New York.
- Ogden, R. W. (1997). *Non-Linear Elastic Deformations*. Dover Publications.
- Ortiz, M. und Popov, E. (1985). Accuracy and stability of integration algorithms for elastoplastic constitutive relations. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 21, 1561–1576.

- Ortiz, M., Radovitzky, R. A., und Repetto, E. A. (2001). The computation of the exponential and logarithmic mappings and their first and second linearizations. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 52, 1434–1441.
- Ortiz, M. und Repetto, E. A. (1999). Nonconvex energy minimization and dislocation structures in ductile single crystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 47, 397–462.
- Ortiz, M. und Simo, J. (1986). An analysis for a new class of interaction algorithms for elastoplastic constitutive relations. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 23, 353–366.
- Ortiz, M. und Stainier, L. (1999). The variational formulation of viscoplastic constitutive updates. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 171, 419–444.
- Schröder, J. (2000). *Homogenisierungsmethoden der nichtlinearen Kontinuumsmechanik unter Beachtung von Instabilitäten*. Habilitationsschrift, Institut für Mechanik (Bauwesen), Lehrstuhl I, Universität Stuttgart.
- Schwarz, H. R. und Köckler, N. (2006). *Numerische Mathematik* (6. Auflage). B. G. Teubner.
- Simo, J. (1998). *Handbook for numerical analysis*, Volume IV, Chapter Numerical analysis of classical plasticity. Elsevier.
- Simo, J. C. und Hughes, T. J. R. (1998). *Computational Inelasticity*. Springer, New York.
- Strang, G. (1986). *Introduction to applied mathematics*. Wellesley-Cambridge Press.
- Suquet, P. (1985). Local and global aspects in the mathematical theory of plasticity. In A. Sawczuck und G. Bianchi (Hrsgg.), *Plasticity Today: Modelling, Methods and Applications*, S. 279–310. Elsevier Applied Science Publishers, London.
- Szabó, I. (2001). *Höhere Technische Mechanik*. Springer.
- v. Mises, R. (1928). Mechanik der plastischen Formänderung von Kristallen. *Zeitschrift für Angewandte Mechanik und Mathematik* 8, 161–185.
- Wilkins, M. L. (1964). Calculation of elastic-plastic flow. *Methods in Computational Physics*, 211–263.
- Xiao, H., Bruhns, O. T., und Meyers, A. (1997). Logarithmic strain, logarithmic spin and logarithmic rate. *Acta Mechanica* 124, 89–105.

Zienkiewicz, O. C. und Taylor, R. L. (1989). *The Finite Element Method*,
Volume 1. McGraw-Hill Book Company.