

Eine hierarchische Modellierung der Thermoelastoplastizität und nicht-lokalen Schädigung mit adaptiver Modellwahl

Dissertation
zur Erlangung des akademischen Grades eines
Doktors der Naturwissenschaften
(Dr. rer. nat.)

Der Fakultät für Mathematik der
Technischen Universität Dortmund
vorgelegt von

André Große-Wöhrmann

am 30.09.2015

Dissertation

Eine hierarchische Modellierung der Thermoelastoplastizität und nicht-lokalen Schädigung mit adaptiver Modellwahl

Fakultät für Mathematik
Technische Universität Dortmund

Erstgutachter: Prof. Dr. Heribert Blum

Zweitgutachter: Prof. Dr. Andreas Menzel

Tag der mündlichen Prüfung: 27.06.2016

Inhaltsverzeichnis

Inhaltsverzeichnis	iv
Einführung und Übersicht	v
Motivation	v
Stand der Forschung	vi
Aufgabenstellung	vii
Ergebnis	vii
1 Elastizität	1
1.1 Finite Elemente	1
1.2 Impulsbilanz	2
1.3 Kontaktproblem	2
1.3.1 Aktivieren und Freilassen von Knoten	3
1.3.2 Projektion der Lösung in den Tangentialraum	3
1.3.3 Lokale und globale Projektion	4
1.4 Volumetrisch-deviatorisch entkoppelte elastische Energie	4
1.4.1 Spezialfall I	5
1.4.2 Spezialfall II	5
1.4.3 Allgemeiner Fall	6
1.5 Algorithmisch konsistente Tangente	6
1.5.1 Unzerlegte Tangente	7
1.5.2 Deviatorische Tangente	8
1.5.3 Volumetrische Tangente	8
1.6 Eine Hierarchie der entkoppelten elastischen Energie	8
1.6.1 Isotrope Elastizität	9
1.6.2 Anisotrope Elastizität	10
2 Vermeidung von Locking	13
2.1 Gemischte Formulierung	13
2.1.1 Lagrange-Funktional	13
2.1.2 Vorbereitung der Euler-Lagrange-Gleichungen	14
2.1.3 Euler-Lagrange-Gleichungen	15
2.1.4 Diskretisierung des volumetrischen Terms	16
2.1.5 Diskretisierung des volumetrischen Terms für höhere FE-Ansätze	16
2.2 <i>Solid-Shell</i> -Formulierung	19
2.2.1 <i>Enhanced-Strain</i> -Formulierung	19
2.2.2 <i>Assumed-Strain</i> -Formulierung	21
2.3 Gemischte und <i>Enhanced-Strain</i> -Formulierung	24
2.3.1 Lagrange-Funktional	24
2.3.2 Euler-Lagrange-Gleichungen	25
2.3.3 Diskretisierung des volumetrischen Terms	25
2.4 Numerischer Vergleich der Formulierungen	26
3 Elastoplastizität	31
3.1 Hierarchie aus Modelleigenschaften	31

3.2	Hierarchie aus Isotropie und Anisotropie	32
3.3	Diskretisierung der Evolutionsgleichungen	32
3.3.1	Evolutionsgleichung direkt	33
3.3.2	Mit Exponentialfunktion und \mathbf{F}^p als innerer Variable	33
3.3.3	Mit Exponentialfunktion und \mathbf{C}^e als innerer Variable	33
3.3.4	Abspaltung des plastischen Spins	34
3.3.5	Vernachlässigung des plastischen Spins	34
3.4	Systematische Lösung der lokalen Probleme	34
3.5	Algorithmisch konsistente Tangente	35
3.5.1	\mathbf{F}^p als innere Variable	36
3.5.2	\mathbf{C}^e als innere Variable	36
3.6	Schädigung	36
3.6.1	Tensorwertige Schädigung	37
3.6.2	Übergang von tensor- zu skalarwertiger Schädigung	37
3.6.3	Skalarwertige Schädigung	38
3.6.4	Parametrisierung	39
3.7	Anisotrope Funktionen	39
4	Enhanced-Gradient-Formulierung	41
4.1	Nicht-lokale Potentiale	41
4.2	Globale Gleichungen	42
4.3	Ergänzung der konjugierten Variablen	43
4.4	Diskussion der Alternative	43
5	Thermoelastoplastizität	45
5.1	Dissipation	45
5.1.1	Von der Leistungsbilanz zur Bilanz der inneren Energie	45
5.1.2	Clausius-Planck-Ungleichung	45
5.2	Modell mit Wärmeleitung	46
5.2.1	Innere und freie Energie	46
5.2.2	Wärmeleitungsgleichung	46
5.2.3	Prinzip der maximalen Dissipation	47
5.3	Adiabates Modell	48
5.4	Bestimmung der freien und der inneren Energie	49
5.4.1	Temperatur verändert Festigkeit	50
5.4.2	Temperatur bewirkt Volumenänderung	50
5.5	Modellhierarchie	50
6	Systematische Linearisierung und Diskretisierung	53
6.1	Gesamtsystem	53
6.2	Linearisierung	55
6.2.1	Lösung des lokalen Problems	56
6.2.2	Tangenten für global stetige Variablen	56
6.2.3	Reduzierte, einstufige Alternative	57
6.3	Diskretisierung in der Zeit	59
6.3.1	Zeitschema	59
6.3.2	Zeitableitung	60
6.4	Eliminierung	60
6.4.1	Eliminierung des Inkrements der Geschwindigkeit	61
6.4.2	Eliminierung der <i>Enhanced-Strain</i> -Variable	62
6.4.3	Rekonstruktion der eliminierten Variablen	62

7	Fehlerschätzung und automatische Modellwahl	65
7.1	Erweiterung der Funktionenräume um die Zeit	65
7.2	Zielfunktional, primales und duales Problem	66
7.3	Diskretisierung des dualen Problems	66
7.4	Dual-gewichtete Fehlerkontrolle	67
7.5	Indikator für den Modellfehler	69
8	Algorithmus	71
8.1	Vorbereitung vor Beginn der Rechnung	71
8.2	Speicherbedarf während eines Zeitschritts	71
8.3	Unterteilung der Iterationen auf dem Zeitschritt	71
8.4	Darstellung der Iteration (k)	72
9	Numerische Beispiele	75
9.1	2D-Beispiel	75
9.1.1	Hierarchie aus Schädigungsmodellen	79
9.2	3D-Beispiel	81
A	Technische Details	83
A.1	Partielle Ableitungen	83
A.2	Herleitung von \mathbb{G}	84
B	Diskretisierung der isotropen Elastoplastizität	85
B.1	Referenzmodell	85
B.1.1	Evolutionsgleichung der Schädigung	86
B.1.2	Aktualisierung des plastischen Deformationsgradienten	86
B.2	Reduziertes Modell	86
B.3	Lösung des lokalen Problems	87
B.3.1	Zweistufiges Schema	87
B.3.2	Einstufiges Schema	88
B.4	Algorithmisch konsistente Tangente	88
B.4.1	Zweistufiges Schema	89
B.4.2	Einstufiges Schema	90
C	Grundlagen	91
C.1	Tensorrechnung	91
C.1.1	Verknüpfungen	91
C.1.2	Voigt-Schreibweise	92
C.1.3	Tensorinvarianten	93
C.1.4	Tensoren in Hauptachsendarstellung	94
C.2	Deformation	94
C.2.1	Deformationsgradient	94
C.2.2	Deformationsraten	96
C.3	Invarianz	97
C.3.1	Beobachterinvarianz	97
C.3.2	Invarianz unter Basistransformation	98
C.4	Spannung und Energie	98
C.4.1	Quadratische Energie	100
C.4.2	Volumetrisch-deviatorische Zerlegung	100
C.5	Bilanzen	102
C.5.1	Transformation von Kräften	102
C.5.2	Impulsbilanz	102
C.5.3	Entropiebilanz	103

C.6	Differentiale	103
C.6.1	Exponentialabbildung	103
C.6.2	Determinante	105
C.6.3	Divergenz	105
C.6.4	Unimodulare Tensoren	106
C.6.5	Inverse Tensoren zweiter Stufe	107
C.6.6	Vollständiges Differential	108
C.7	Materialmodelle	109
C.7.1	Fließfunktion	109
C.7.2	Isotrope Verfestigung	110
C.7.3	Kinematischer Verfestigung	111
D	Symbolverzeichnis	113
D.1	Materialparameter	117
	Literaturverzeichnis	119

Einführung und Übersicht

Aus der Motivation und dem Stand der Forschung ergibt sich die Aufgabenstellung, welche zu einem Ergebnis geführt hat.

Motivation

Es soll die Rechenzeit für die Simulation von Elastoplastizität verkürzt werden. Dazu wird eine Hierarchie von Modellen eingesetzt, wobei der Rechenaufwand vom einfachsten Modell, dem Basismodell, bis hin zum komplexesten Modell, dem Referenzmodell, zunimmt. Wenn nun nicht überall das Referenzmodell verwendet wird, so verringert sich der Aufwand, wobei jedoch ein Fehler entsteht, der sogenannte Modellfehler. Es wird nach der Methode gesucht, welche die Modelle optimal verteilt, so dass die maximale Ersparnis an Rechenzeit mit dem minimalen Modellfehler erkauft wird.

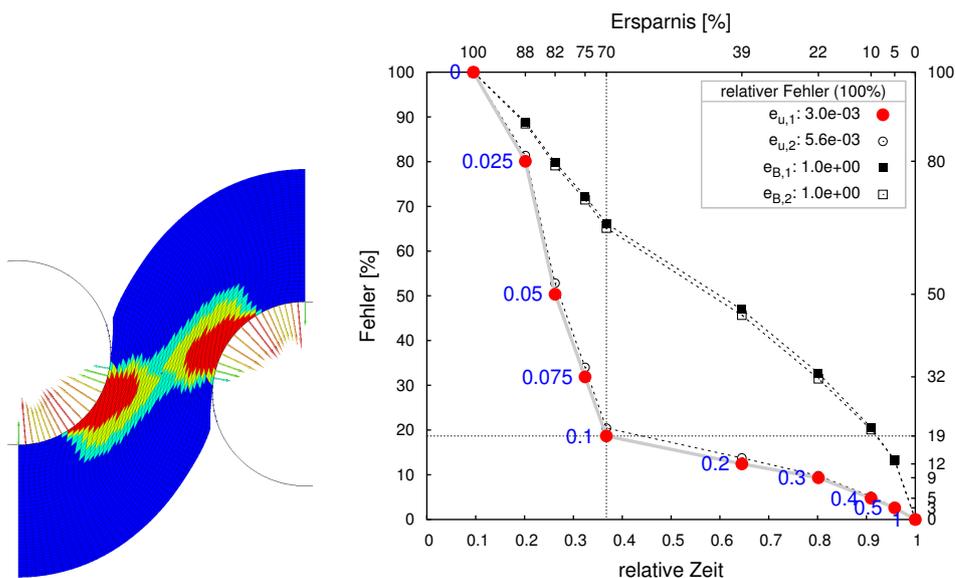


Abbildung I: Links ist ein verformtes Reckeck zu sehen. Das Verhältnis ξ der Anzahl der Zellen mit höheren Modellen zu der Anzahl der Zellen mit dem Basismodell (blau) ist festgelegt (hier: $\xi = 0.3$). Die Anzahl der Zellen mit höheren Modellen ist in gleiche Teile geteilt, so dass also das Referenzmodell (rot) auf 10% der Zellen gewählt ist. Als Fehlerindikator dient die isotrope Verfestigung. Die Modellverteilung ändert sich mit der Zeit. Es wird nun zu einem gewählten Verhältnis ξ der Modellfehler über der Zeit der Assemblierung der Steifigkeitsmatrix aufgetragen. Für $\xi = 1$ verschwindet der Modellfehler, für $\xi = 0$ ist er maximal. Gleichzeitig wird für $\xi = 0$ die maximal mögliche Ersparnis an Rechenzeit erreicht. Für den Modellfehler in der Verschiebung (rot gefüllte Kreise) ergibt sich für $\xi = 0.1$ das optimale Verhältnis von der Ersparnis zum Modellfehler. Die schwarzen Quadrate markieren den Modellfehler in der Schädigung. Je näher die Kurven dem Ursprung $(0, 0)$ kommen, desto wirksamer ist die Modelladaptivität.

Stand der Forschung

Die in dieser Arbeit verwendeten Modelle der Elastoplastizität sind bereits bekannt. Ein möglicherweise neuer Aspekt könnte jedoch in der systematischen Formulierung liegen. Für einen Überblick über die Elastoplastizität wird auf MENZEL [40] verwiesen. Weil es hier darum geht, nach Hierarchien innerhalb der bekannten Modelle zu suchen, wird stattdessen ein Überblick über die bisherigen Arbeiten zur Modelladaptivität gegeben. Zuvor werden die wesentlichen verwendeten Quellen zur Elastoplastizität genannt.

Verwendete Quellen zur Elastoplastizität

Die Grundlagen und die Thermoelastoplastizität sind bei SIMÓ [60] zu finden. Die Modellierung der *Solid-Shell* und einzelne Modelle der Elastoplastizität stammen von APEL [3]. Die Entwicklung des numerischen Schemas beruht auf ARMERO & ZAMBRANA-ROJAS [5]. Das Schädigungsmodell stützt sich auf MENZEL & STEINMANN [41] und LEMAITRE [34]. Die *Enhanced-Gradient*-Formulierung ist WAFFENSCHMIDT ET AL. [71] entnommen. Die kinematische Verfestigung bezieht sich auf MOSLER [45] und die anisotrope Fließfunktion auf SCHRÖDER ET AL. [59]. Der Frage nach der Urheberschaft der einzelnen Ideen wird an dieser Stelle nicht nachgegangen.

Modelladaptivität

Es wird ein Überblick über die Modellhierarchien in der Literatur gegeben.

In der Fluidmechanik entstehen Modellhierarchien, indem die Anzahl von Summanden verändert wird, so wie sich das Problem von Stokes durch Streichung von Termen aus den Navier-Stokes-Gleichungen ergibt (VAN OPSTAL ET AL. [50]). Als Zwischenstufe bieten sich die Oseen-Gleichungen an (ODEN & PRUDHOMME [47]). In diese „additive“ Gruppe von Hierarchien lassen sich die Reaktions-Diffusions-Gleichungen (BRAACK & ERN [16]) und Transport- und Diffusionsgleichungen (CHAMOIN & DESVILLETES [36]) einordnen.

In der Elastizität entsteht eine Modellhierarchie aus einem nichtlinearen Modell und seiner Linearisierung, wie z. B. bei der nichtlinearen und linearen Membran (BRAACK & ERN [15]). Allgemein handelt es sich um Modelle für kleine und für große Verformungen (ODEN ET AL. [48]).

Bei Platten- und Schalenmodellen treten eigenständige Modelle auf, die sich nach der Anzahl der kinematischen Freiheiten ordnen lassen: Kirchhoff-Platte (Normale steht senkrecht auf Mittelebene), Mindlin-Reissner-Platte (Normale ist unabhängig), dicke Platte (M.-R.-Platte und zusätzlich variable Plattendicke). In der Modellierung entsteht also eine Hierarchie. Die einzelnen Modelle erfordern jedoch spezielle Diskretisierungen, die nicht auseinander hervorgehen, was ihre Vereinigung in einer Hierarchie erschwert (BOHINC [14]). Verwandt hiermit ist die Dimensionsadaptivität, bei der eine Hierarchie aus dem 3D-Kontinuum und dem Bernoulli- und Timoshenko-Balken (HEINTZ [27]), der Kirchhoff-Platte (REPIN ET AL. [56]) oder der Mindlin-Reissner-Platte (AUBRY ET AL. [7], STEIN ET AL. [65]) gebildet wird.

Die Schalenformulierung der *Solid-Shell* bildet eine Hierarchie mit dem 3D-Kontinuum, welche sich durch adaptive Verfeinerung des Netzes in Dickenrichtung erweitern lässt (JOHANSEN [30]). Bei der *Solid-Shell* handelt es sich nicht um ein kinematisches Modell, sondern um eine spezielle Diskretisierung, so dass im strengen Sinn nicht von einer Modellhierarchie gesprochen werden kann. Dies trifft auch auf die Polynomgrad-Adaptivität zu, bei der Platten und Schalen in Quer- und Dickenrichtung mit Ansatzpolynomen verschiedenen Grades diskretisiert werden. Die Modelle unterscheiden sich einzig in den Polynomgraden (BILLADE & VEMAGANTI [12], ZBOINSKI [74], RANK ET AL. [54], DÜSTER ET AL. [20]). Hier handelt es also um p-, pq- oder hpq-Adaptivität, wobei q den Polynomgrad in Querrichtung bezeichnet.

Das Mono- und Bidomain-Modell der Elektrokardiologie liefert eine Hierarchie von Modellen, die unterschiedlich viele räumlich stetige Variablen verwenden. So werden im Bidomain-Modell zwei skalare Felder berechnet, während in seiner Reduktion zum Monodomain-Modell die Differenz aus

beiden Feldern die einzige Unbekannte darstellt (MIRABELLA [43]).

In der Multi-Skalen-Modellierung ergibt sich die Modellhierarchie aus den unterschiedlichen Skalen. Dabei bietet die Modellreduktion der Mikro-Skala auf ein repräsentatives Volumenelement eine weitere Möglichkeit hierarchischer Abstufungen (FISH ET AL. [24], VERNEREY & KABIRI [70], PRUDHOMME ET AL. [51], KERFRIDEN ET AL. [31], HERNÁNDEZ ET AL. [28], ODEN [49], LARSSON [33]).

Häufig wird neben der Modell- auch gleichzeitig Netzadaptivität verwendet. Als entfernt verwandter Bereich ist die Adaptivität von Finiten Elementen und anderen Methoden zu nennen. So können Finite Elemente für kleine und die *Material-Point*-Methode für extrem große Verformungen kombiniert werden (LIAN ET AL. [35]), oder auch FEM und BEM (ELLEITHY [23]).

Die Systematik und Kombinierbarkeit von Modellen im Allgemeinen untersuchen DELALONDRE ET AL. [19].

Die Modellwahl erfolgt stets auf der Basis von Fehlerschätzern. Dabei müssen die Kosten für die Fehlerschätzung klein sein gegenüber der Alternative, gleich das Referenzmodell zu verwenden. Nach der ersten Strategie wird dazu lokal auf jeder Zelle oder auf Patches von Zellen ein Neumann-Problem gelöst. Die Lösung ist der approximierter Fehler auf der Zelle. Die Methode der *Equilibrated Fluxes* (AINSWORTH [1]) beruht auf der Galerkin-Orthogonalität, welche nur für den Diskretisierungsfehler gilt (BOHINC [14], RÜTER [57]). Nach der zweiten Strategie werden globale Residuen ausgewertet. Die Beiträge in den Knoten werden auf die Zellen verteilt, womit sich Fehlerindikatoren ergeben (BRAACK & ERN [15]). In der Erweiterung zur zielorientierten Fehlerschätzung gibt es die Methode der dual-gewichteten Residuen (DWR) (BECKER [10]). Für zeitabhängige Probleme erfordert diese Methode mehrere Durchläufe der Simulation mit jeweils verfeinerten Netzen (MEIDNER & VEXLER [37]).

Aufgabenstellung

Der erste Teil der Aufgabe besteht darin, nach Modellen in der Elastoplastizität zu suchen, für die eine hierarchische Verwendung sinnvoll ist. Der zweite Teil umfasst die Methode, nach der die Modellwahl getroffen wird. Ein Fehlerschätzer muß besser sein als ein heuristischer Fehlerindikator, wie ihn die isotrope Verfestigung liefert.

Ergebnis

Die Gleichungen der Elastoplastizität werden aus zwei Funktionen hergeleitet, welche die Freie Energie und die Fließfunktion sind. Je nach Modellierung enthalten diese Funktionen eine unterschiedliche Anzahl an Termen mit einem entsprechenden Satz an räumlich un stetigen (inneren) und räumlich stetigen (globalen) Variablen. Es ergibt sich also eine Modellhierarchie, indem die Anzahl der inneren Variablen verändert und auch global stetige Felder zellweise hinzugeschaltet werden. Ersteres betrifft die Modelleigenschaften der kinematische Verfestigung und Schädigung, letzteres die *Enhanced-Gradient*-Formulierung und die Thermoelastoplastizität.

In diesem Zusammenhang sind Aufgabenstellungen besonders interessant, bei denen sich die Lösung in kleinen Bereichen lokalisiert, indem z. B. nur räumlich begrenzt eine starke Schädigung auftritt, sich dieser Bereich jedoch verändert und damit nicht im Vornherein bekannt ist. Ein mögliche Modellhierarchie ist in der Tabelle unten angegeben.

Innerhalb des bisherigen Rahmens gibt es eine weitere Hierarchie, und zwar die von Isotropie und Anisotropie: So kann eine anfängliche Isotropie verloren gehen, wenn tensorwertige innere Variablen Anisotropie induzieren. Ebenso können anisotrope Funktionen in der Modellierung verwendet werden. Hierzu gibt es eine Hierarchie aus der speziellen Diskretisierung in der Hauptachsenbasis für isotrope Modelle, einem Modell für schwach ausgeprägte Anisotropie und dem allgemeinen Modell. Es lässt sich also sagen, dass mit einer Hierarchie von Diskretisierungen auf eine mechanische Hierarchie reagiert wird.

Modell	Eigenschaften
7	$IY + KH + T + TD + EG^{plt} + EG^{grad}$
6	$IY + KH + T + TD + EG^{plt}$
5	$IY + KH + T + TD$
4	$IY + KH + T + SD$
3	$IY + KH + T$
2	$IY + KH$
1	IY

Tabelle I: Die Modellhierarchie setzt sich aus den Modelleigenschaften einer isotropen Fließfunktion (IY), der kinematischen Verfestigung (KH), der Temperaturabhängigkeit (T), der skalar- und tensorwertigen Schädigung (SD/TD) und der Verwendung eines Penalty- und Gradienten-Potentials (EG^{plt}/EG^{grad}) in der *Enhanced-Gradient-Formulierung* zusammen. Modell 1 ist das Basis- und Modell 7 das Referenzmodell. Die Reihenfolge der Modelleigenschaften richtet sich nach dem Grad der Lokalisierung. Die Eigenschaften KH und T können auch vertauscht werden.

Innerhalb der Thermoelastoplastizität gibt es die Möglichkeit, durch den Übergang zum adiabaten Modell die räumlich stetige Temperatur in eine räumlich unstetige Variable zu verwandeln. Dieses Modell kollidiert jedoch mit der Gemischten Formulierung, welche zu den Methoden zur Vermeidung von Locking gehört. Diese Methoden sind spezielle Diskretisierungen, welche sich in Hierarchien kombinieren lassen. Dabei erhöhen sie lokal auf jeder Zelle den Rechenaufwand, ohne die Dimension der Unbekannten zu verändern. Weil beim Locking große Teile des Rechengebiets zusammenwirken und sich die Ursache nicht auf kleinen Gebieten lokalisiert, liegt die Bedeutung dieser Thematik nicht so sehr in der Modelladaptivität sondern vielmehr in der Notwendigkeit, die anderen Modelle mit der Gemischten Formulierung und der *Solid Shell* kombinieren zu können. Ein weiteres Ergebnis stellt die entwickelte Systematik in der Modellierung und der Linearisierung dar, welche die Voraussetzung für die Modelladaptivität ist.

1 Elastizität

In diesem Kapitel werden die Grundlagen für die Gemischte Formulierung und die *Solid-Shell* bereitgestellt, und es wird das Gesamtproblem in den Rahmen des reibungsfreien Kontaktproblems gestellt. Dafür ist die Elastizität ausreichend. Bei der Einführung der algorithmisch konsistenten Tangente wird bereits die Elastoplastizität verwendet, wobei die Elastizität der Spezialfall ist. Es wird nach einer Modellhierarchie innerhalb der Elastizität gesucht. Eine Hierarchie aus Modellen kleiner und großer Verformungen verletzt den Grundsatz, dass auch allein mit dem Basismodell der Deformationsprozess, welcher in dieser Arbeit große Rotationen enthält, gerechnet werden können muss. Die gesamte Arbeit beschränkt sich auf Modelle großer Verformungen. Eine Modellhierarchie wird für die elastische Energie gefunden, welche sich im Fall von Isotropie vereinfacht.

1.1 Finite Elemente

Die Rechnung erfolgt auf dem unverformten Gebiet Ω in der Referenzkonfiguration, s. Abschn. C.2. Die Komponenten der globalen Variable \mathbf{x} , die z. B. $\mathbf{x} = (\mathbf{u}, \Theta, \bar{\mathbf{B}})$ lauten kann, ergeben sich aus dem gewählten Modell. Deshalb wird die Dimension $n = \dim(\mathbf{x})$ eingeführt. Auf dem Rand Γ_D^k des Gebiets Ω sind für die skalarwertige Komponente x_k inhomogene Dirichlet-Randbedingungen \bar{x}_k gegeben und auf dem Rand $\Gamma_{D,0}^k$ homogene. Auf dem Rand Γ_N^k können Neumann-Randbedingungen gegeben sein. Die Aufteilung des Rands $\Gamma = \Gamma_D^k \cup \Gamma_{D,0}^k \cup \Gamma_N^k$ kann also für jede skalarwertige Komponente x_k verschieden sein. Die Funktionenräume lauten mit dem Sobolev-Raum H^1 und den gegebenen, im Allgemeinen zeitabhängigen Randwerten $\bar{\mathbf{x}}$

$$\begin{aligned} H_{\Gamma_D}^1 &:= \{\mathbf{x} \in H^1(\Omega)^n \mid x_k(\mathbf{X}) = \bar{x}_k(\mathbf{X}) \quad \text{für } \mathbf{X} \in \Gamma_D^k, \quad k = 1, \dots, n\}, \\ H_{\Gamma_{D,0}}^1 &:= \{\mathbf{x} \in H^1(\Omega)^n \mid x_k(\mathbf{X}) = 0 \quad \text{für } \mathbf{X} \in \Gamma_{D,0}^k, \quad k = 1, \dots, n\}. \end{aligned} \quad (1.1)$$

Es werden die Bezeichnungen abgekürzt:

$$\mathcal{V}_0 := H_{\Gamma_{D,0}}^1 \quad \text{und} \quad \mathcal{V} := H_{\Gamma_D}^1. \quad (1.2)$$

Das Gebiet Ω wird mit Vierecken (2D) oder Quadern (3D) vernetzt. Die Triangulierung mit m Zellen K_i lautet

$$\mathcal{T}_h = \{K_1, \dots, K_m\}, \quad \Omega = \bigcup_{i=1}^m K_i. \quad (1.3)$$

Für Dreiecke oder Tetraeder muss die *Solid-Shell*-Formulierung (Abschnitt 2.2) neu formuliert werden. Alle Komponenten von \mathbf{x} werden zellweise mit bilinearen Ansatzfunktionen diskretisiert:

$$\begin{aligned} \mathcal{V}_{0,h} &:= \{\mathbf{x}_h \in \mathcal{V}_0 \mid \mathbf{x}_h|_K \in Q_1(K)^n, \forall K \in \mathcal{T}_h\}, \\ \mathcal{V}_h &:= \{\mathbf{x}_h \in \mathcal{V} \mid \mathbf{x}_h|_K \in Q_1(K)^n, \forall K \in \mathcal{T}_h\}. \end{aligned} \quad (1.4)$$

Die *Solid-Shell*-Formulierung ist gerade für bilineare Ansätze geschaffen. Die Gemischte Formulierung für höhere Ansätze steht in Abschnitt 2.1.5.

1.2 Impulsbilanz

Die Impulsbilanz (C.85) in ihrer Formulierung für große Verformungen,

$$\rho_0 \int_{\Omega} \partial_t \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\eta} dV + \frac{1}{2} \int_{\Omega} \mathbf{S}(\mathbf{C}(\mathbf{u})) : \dot{\mathbf{C}}(\mathbf{u})[\boldsymbol{\eta}] dV = G_{ext}(\boldsymbol{\eta}), \quad \forall \boldsymbol{\eta} \in \mathcal{V}_0, \quad (1.5)$$

bildet den Rahmen, der für alle elastischen und elastoplastischen Modelle gleich ist. Die Funktionenräume sind in Abschnitt 1.1 definiert. Das jeweilige Modell liefert die Spannung \mathbf{S} und die algorithmisch konsistente Tangente $d_C \mathbf{S}$, welche für die Linearisierung,

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \frac{1}{2} \dot{\mathbf{C}}[\boldsymbol{\eta}] : d_C \mathbf{S} : \dot{\mathbf{C}}[\Delta \mathbf{u}] dV + \int_{\Omega} \frac{1}{2} \mathbf{S} : \ddot{\mathbf{C}}[\boldsymbol{\eta}, \Delta \mathbf{u}] dV &= G_{ext}(\boldsymbol{\eta}) - \int_{\Omega} \frac{1}{2} \mathbf{S} : \dot{\mathbf{C}}[\boldsymbol{\eta}] dV, \\ a'(\mathbf{u})(\boldsymbol{\eta}, \Delta \mathbf{u}) &= L(\boldsymbol{\eta}) - a(\mathbf{u})(\boldsymbol{\eta}), \quad \forall \boldsymbol{\eta} \in \mathcal{V}_0, \\ \mathbf{A}_h \Delta \mathbf{u}_h &= \mathbf{f}_h, \end{aligned} \quad (1.6)$$

gebraucht wird. Bei (1.6) handelt es sich um die quasi-statische Formulierung. Die Schreibweise mit der Semi-Bilinearform a und dem Funktional L dient dem besseren Verständnis. Das Gleichungssystem (1.6)₃ wird für das Kontaktproblem verwendet.

Um zu Formulierungen zur Vermeidung von Locking zu gelangen, muß zuerst die Impulsbilanz (1.5) in ein Extremalproblem umgewandelt werden. Es wird die äußere Arbeit $W_{ext}(\mathbf{u}) = G_{ext}(\mathbf{u}) - \int_{\Omega} \rho_0 \partial_t \mathbf{v} \cdot \mathbf{u} dV$ und die innere Arbeit

$$W_{int}(\mathbf{u}) = \int_{\Omega} \Psi dV, \quad (1.7)$$

eingeführt. Die freie Energie Ψ steht neben der Fließfunktion (C.137) im Zentrum der Materialmodellierung und hat je nach Modell eine verschiedene Liste an Argumenten, s. (3.1), (4.1) und (5.10). Deshalb wird sie bei allgemeiner Verwendung ohne Argumente geschrieben. Im einfachsten Fall der Elastizität lautet sie $\Psi = \Psi(\mathbf{C}^e(\mathbf{C}(\mathbf{u}))) = \bar{W}(\mathbf{C}^e)$. Mit der Einschränkung (C.56), dass die inneren Variablen keine Funktionen von \mathbf{C} sind, folgt mit $\mathbf{S} = 2d_C \Psi$ (C.57)

$$d_{\mathbf{u}} W_{int}(\mathbf{u}) \cdot \boldsymbol{\eta} = \int_{\Omega} d_C \Psi : \dot{\mathbf{C}}[\boldsymbol{\eta}] dV = \int_{\Omega} \frac{1}{2} \mathbf{S} : \dot{\mathbf{C}}[\boldsymbol{\eta}] dV. \quad (1.8)$$

Damit ist die Impulsbilanz äquivalent zur Stationarität der Differenz

$$W_{int}(\mathbf{u}) - W_{ext}(\mathbf{u}) \rightarrow \text{stat.} \quad (1.9)$$

Mit der Einschränkung (C.56) wird bereits an dieser Stelle die Entscheidung zur Diskretisierung getroffen, die Impulsbilanz in ein globales Problem der Verschiebung und in lokale Probleme zu staffeln. Die Formulierung als Extremalproblem ist die Voraussetzung für die Gemischte Formulierung, die *Enhanced-Strain*- und die *Enhanced-Gradient*-Formulierung.

1.3 Kontaktproblem

Die Lösung des Kontaktproblems ist unabhängig vom numerischen Schema und den verwendeten mechanischen Modellen. Es verlangt keine weitere Iterationsschleife. Das mechanische Kontaktmodell ist der reibungsfreie Kontakt. Das Konzept erlaubt eine Erweiterung auf reibungsbehaftete Kontaktmodelle.

1.3.1 Aktivieren und Freilassen von Knoten

Das reibungsfreie Kontaktproblem wird durch die Bedingungen

$$d_n \leq 0, \quad f_n \leq 0, \quad d_n f_n = 0, \quad f_t = 0 \quad (1.10)$$

beschrieben, welche zusätzlich zur Impulsbilanz (1.5) zu erfüllen sind, s. Abb. 1.1. Die Kontaktkraft



Abbildung 1.1: Der Knoten (i) auf dem Rand des Gebiets Ω wird aktiviert, wenn er durch das Hindernis Γ hindurch verschoben wird. In diesem Fall ist der Abstand zum Hindernis $d_n > 0$. Der Knoten wird normal auf das Hindernis projiziert, so dass $d_n = 0$. Der Knoten bleibt aktiv, solange die Kontaktkraft anpressend ist, also $f_n = \mathbf{f}^{(i)} \cdot \mathbf{n} < 0$. Im reibungsfreien Kontakt verschwindet die Tangentialkomponente f_t der Kontaktkraft. Ein aktiver Knoten kann in der Tangentialebene gleiten. Mit der Tangentialverschiebung ändert sich auch die Tangentialebene.

$\mathbf{f}^{(i)}$ im Knoten (i) wird durch die entsprechenden Komponenten der rechten Seite des Gleichungssystems $\mathbf{A}_h \Delta \mathbf{u}_h = \mathbf{f}_h$ (1.6)₃ geliefert.

Die Lösung von (1.10) ist mit der Elastoplastizität verschränkt und wird in Abschnitt 8.3 in einem Algorithmus berechnet, der als Operatorzerlegung verstanden werden kann: Zuerst wird mit eingefrorener Elastoplastizität das Kontaktproblem gelöst und anschließend mit eingefrorenem Kontakt das Problem der Elastoplastizität. Während des zweiten Teils können die aktiven Knoten in ihrer Tangentialebene gleiten.

1.3.2 Projektion der Lösung in den Tangentialraum

Die aktiven Komponenten des Verschiebungsincrement $\Delta \mathbf{u}_h$ werden nun in der lokalen Basis dargestellt, welche von den Tangenten und der Normale des Hindernisses gebildet wird (s. Abb 1.2),

$$\Delta \mathbf{u}^{(i)} = \widetilde{\Delta u}_1^{(i)} \mathbf{g}_1 + \widetilde{\Delta u}_2^{(i)} \mathbf{g}_2 + \widetilde{\Delta u}_3^{(i)} \mathbf{g}_3 = \mathbf{P}_i \widetilde{\Delta \mathbf{u}}^{(i)}. \quad (1.11)$$

Die Normalkomponente in einem aktiven Knoten kann damit als Randbedingung zu Null gesetzt werden, womit der Knoten die Tangentialebene nicht verlassen kann, jedoch in den Tangentialverschiebungen frei bleibt. Die lokalen Projektionen \mathbf{P}_i werden zur globalen Projektionsmatrix \mathbf{P}

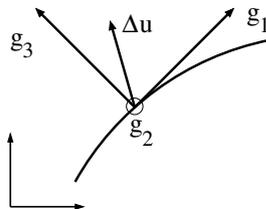


Abbildung 1.2: Darstellung des Verschiebungsincrement $\Delta \mathbf{u}$ in der lokalen Basis der Tangentialebene des Hindernisses.

zusammengesetzt,

$$\mathbf{P} = \begin{vmatrix} \mathbf{P}_1 & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & \mathbf{P}_i & & 0 \\ & & & \ddots & \\ 0 & & & & \mathbf{P}_n \end{vmatrix} \quad (1.12)$$

wobei für aktive Knoten die Projektion $\mathbf{P}_i = (\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \mathbf{g}_3)$ (1.11) und für inaktive Knoten die Identität $\mathbf{P}_i = \mathbf{1}$ eingesetzt wird. Einsetzen von (1.12) in das Gleichungssystem $\mathbf{A}_h \Delta \mathbf{u}_h = \mathbf{f}_h$ (1.6)₃ ergibt $\mathbf{A}_h \mathbf{P} \widetilde{\Delta} \mathbf{u}_h = \mathbf{f}_h$. Es muß ebenso die Testfunktion $\boldsymbol{\eta}_h = \mathbf{P} \widetilde{\boldsymbol{\eta}}_h$ projiziert werden, $\mathbf{P}^T \mathbf{A}_h \mathbf{P} \widetilde{\Delta} \mathbf{u}_h = \mathbf{P}^T \mathbf{f}_h$, womit anstelle von $\mathbf{A}_h \Delta \mathbf{u}_h = \mathbf{f}_h$ das System

$$\widetilde{\mathbf{A}}_h \widetilde{\Delta} \mathbf{u}_h = \widetilde{\mathbf{f}}_h \quad (1.13)$$

mit $\widetilde{\mathbf{A}}_h = \mathbf{P}^T \mathbf{A}_h \mathbf{P}$ und $\widetilde{\mathbf{f}}_h = \mathbf{P}^T \mathbf{f}_h$ zu lösen ist. Anschließend wird mit $\Delta \mathbf{u}_h = \mathbf{P} \widetilde{\Delta} \mathbf{u}_h$ die Lösung in den kartesischen Raum zurückprojiziert.

1.3.3 Lokale und globale Projektion

Bei (1.13) handelt es sich um die globale Projektion. Dank der speziellen Struktur von \mathbf{P} kann die Multiplikation der schwachbesetzten Matrizen $\mathbf{P}^T \mathbf{A}_h \mathbf{P}$ vor der Berechnung der Lösung ausgeführt werden. Die globale Projektion ist dennoch teuer und speicherintensiv.

Alternativ kann die Projektion (1.12) auch auf die lokalen Steifigkeitsmatrizen angewendet werden. Dies geschieht in Abschnitt 6.4.2. Bei der MPI-Parallelisierung ergibt sich hier jedoch eine Einschränkung an das Netz, weil die lokale Projektion in diesem Fall nicht auf hängende Knoten angewendet werden kann. Die Zellen in einem Kontaktbereich müssen also jeweils die gleiche Verfeinerungsstufe haben.

1.4 Volumetrisch-deviatorisch entkoppelte elastische Energie

Metalle plastizieren volumenerhaltend (C.104), es gilt also $J^p = 1$ (C.33). Somit ist die Volumenänderung elastisch, $J = J^e$. Deshalb ist es richtig, die volumetrisch-deviatorisch entkoppelte elastische Energie

$$\widetilde{W}(\mathbf{C}^e) = U(J^e) + \widetilde{W}(\widetilde{\mathbf{C}}^e) \quad (1.14)$$

zu verwenden, in der die volumetrische Energie U nur von der Determinanten J^e abhängt, während die volumenerhaltende Deformation $\widetilde{\mathbf{C}}^e = J^e^{-\frac{2}{ndim}} \mathbf{C}^e$ (C.109) allein in die deviatorische Energie \widetilde{W} eingeht. Diese Entkopplung ist die Voraussetzung dafür, dass die Gemischte Formulierung aus Abschnitt 2.1 angewendet werden kann. Unter Verwendung von (C.113) und (C.103) ergibt sich

$$\begin{aligned} \partial_{\mathbf{C}^e} \widetilde{W}(\mathbf{C}^e) &= \partial_{\mathbf{C}^e} U(J) + \partial_{\mathbf{C}^e} \widetilde{W}(\widetilde{\mathbf{C}}^e) \\ &= U'(J^e) \partial_{\mathbf{C}^e} J^e + \partial_{\widetilde{\mathbf{C}}^e} \widetilde{W}(\widetilde{\mathbf{C}}^e) : \partial_{\mathbf{C}^e} \widetilde{\mathbf{C}}^e \\ &= \frac{1}{2} J^e U'(J^e) \mathbf{C}^{e-1} + J^e^{-\frac{2}{ndim}} \text{DEV}_{\mathbf{C}^{e-1}} [\partial_{\widetilde{\mathbf{C}}^e} \widetilde{W}(\widetilde{\mathbf{C}}^e)]. \end{aligned} \quad (1.15)$$

Aufgrund der Eindeutigkeit der volumetrisch-deviatorischen Zerlegung (C.70) folgt

$$\begin{aligned}
 \text{DEV}_{C^{e-1}}[\partial_{C^e}\bar{W}(\mathbf{C}^e)] &= J^e^{-\frac{2}{n_{\text{dim}}}} \text{DEV}_{C^{e-1}}[\partial_{\tilde{C}^e}\tilde{W}(\tilde{\mathbf{C}}^e)], \\
 \text{VOL}_{C^{e-1}}[\partial_{C^e}\bar{W}(\mathbf{C}^e)] &= \frac{1}{2}p(J^e)\mathbf{C}^{e-1},
 \end{aligned} \tag{1.16}$$

wobei $p(J^e) = J^e U'(J^e)$ der Druck ist. Die Fließfunktion (C.131) muß so gewählt werden, dass sie das plastische Volumen $J^p = 1$ (C.104) erhält. Damit gilt $J = J^e$.

Der in dieser Arbeit verwendete volumetrische Anteil der Energie ist bei SIMÓ [60] zu finden,

$$U(J) = \frac{1}{2}\kappa\left(\frac{1}{2}J^2 - 1 - \log J\right), \tag{1.17}$$

mit $U'(J) = \frac{1}{2}\kappa(J - 1/J)$, $p(J) = JU'(J) = \frac{1}{2}\kappa(J^2 - 1)$ und $U''(J) = \frac{1}{2}\kappa(1 + 1/J^2)$. κ ist das Kompressionsmodul.

Um die Ableitung $d_C \mathbf{S}$ von $\mathbf{S} = 2d_C \Psi = 2\partial_C \Psi + \mathbf{F}^{p-1} \bar{\mathbf{S}} \mathbf{F}^{p-T}$ (C.57) vorzubereiten, werden drei Fälle unterschieden.

1.4.1 Spezialfall I

Es gelte $\partial_C \Psi = \mathbf{0}$ und $\partial_{C^e} \Psi = \partial_{C^e} \bar{W}$ (C.56). Es gilt also $\bar{\mathbf{S}} = 2\partial_{C^e} \Psi = 2\partial_{C^e} \bar{W}$. Dieser einfachste Fall kommt bei der Elastizität oder der Elastoplastizität ohne *Enhanced-Gradient*-Erweiterungen vor. Aufgrund von $\mathbf{C}^{-1} = \mathbf{F}^{p-1} \mathbf{C}^{e-1} \mathbf{F}^{p-T}$ (C.31) hängt der volumetrische Anteil von \mathbf{S} allein von der gegebenen Deformation \mathbf{C} ab:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{S} &= 2d_C \Psi(\mathbf{C}) = \mathbf{F}^{p-1} \bar{\mathbf{S}} \mathbf{F}^{p-T} \\
 &= \mathbf{F}^{p-1} \left(\text{VOL}_{C^{e-1}}[\bar{\mathbf{S}}] + \text{DEV}_{C^{e-1}}[\bar{\mathbf{S}}] \right) \mathbf{F}^{p-T} \\
 &= \mathbf{F}^{p-1} \left(p(J)\mathbf{C}^{e-1} + \text{DEV}_{C^{e-1}}[\bar{\mathbf{S}}] \right) \mathbf{F}^{p-T} \\
 &= p(J)\mathbf{C}^{-1} + \mathbf{F}^{p-1} \text{DEV}_{C^{e-1}}[\bar{\mathbf{S}}] \mathbf{F}^{p-T} \\
 &= \text{VOL}_{C^{-1}}[\mathbf{S}] + \text{DEV}_{C^{-1}}[\mathbf{S}]
 \end{aligned} \tag{1.18}$$

mit

$$\begin{aligned}
 \text{VOL}_{C^{-1}}[\mathbf{S}] &= p(J)\mathbf{C}^{-1}, \\
 \text{DEV}_{C^{-1}}[\mathbf{S}] &= \mathbf{F}^{p-1} \text{DEV}_{C^{e-1}}[\bar{\mathbf{S}}] \mathbf{F}^{p-T}.
 \end{aligned} \tag{1.19}$$

(1.19)₂ folgt aus (1.18) aufgrund der Eindeutigkeit der volumetrisch-deviatorischen Zerlegung (C.70). (1.19)₂ kann auch direkt gezeigt werden, siehe (C.73).

1.4.2 Spezialfall II

Es gelte $\partial_C \Psi \neq \mathbf{0}$ und $\partial_{C^e} \Psi = \partial_{C^e} \bar{W}$ (C.56). Es gilt also $\bar{\mathbf{S}} = 2\partial_{C^e} \Psi = 2\partial_{C^e} \bar{W}$. Dieser zweite Spezialfall umfasst die *Enhanced-Gradient*-Formulierung für die Schädigung (4.1). Weil der Term $2\partial_C \Psi(\mathbf{C})$ hinzutritt,

$$\begin{aligned}
\mathbf{S} &= 2d_C\Psi(\mathbf{C}) = 2\partial_C\Psi(\mathbf{C}) + \mathbf{F}^{\mathbf{p}-1}\bar{\mathbf{S}}\mathbf{F}^{\mathbf{p}-T} \\
&= 2\partial_C\Psi(\mathbf{C}) + \mathbf{F}^{\mathbf{p}-1}\left(\text{VOL}_{C^{e-1}}[\bar{\mathbf{S}}] + \text{DEV}_{C^{e-1}}[\bar{\mathbf{S}}]\right)\mathbf{F}^{\mathbf{p}-T} \\
&= 2\partial_C\Psi(\mathbf{C}) + \mathbf{F}^{\mathbf{p}-1}\left(p(J)\mathbf{C}^{e-1} + \text{DEV}_{C^{e-1}}[\bar{\mathbf{S}}]\right)\mathbf{F}^{\mathbf{p}-T} \\
&= 2\partial_C\Psi(\mathbf{C}) + p(J)\mathbf{C}^{-1} + \mathbf{F}^{\mathbf{p}-1}\text{DEV}_{C^{e-1}}[\bar{\mathbf{S}}]\mathbf{F}^{\mathbf{p}-T},
\end{aligned} \tag{1.20}$$

gilt die Zerlegung (1.19) nicht mehr.

1.4.3 Allgemeiner Fall

Es gelte $\partial_C\Psi \neq \mathbf{0}$ und $\partial_{C^e}\Psi \neq \partial_{C^e}\bar{W}$ (C.56). Es gilt also $\bar{\mathbf{S}} = 2\partial_{C^e}\Psi \neq 2\partial_{C^e}\bar{W}$. Dieser allgemeine Fall umfasst auch die *Enhanced-Gradient*-Formulierung für C^e . Um die volumetrisch-deviatorische Zerlegung nur auf die elastische Energie \bar{W} anwenden zu können, wird sie von der freien Energie abgespalten,

$$\Psi_2 = \Psi - \bar{W}. \tag{1.21}$$

Die Spannung im allgemeinen Fall lautet also

$$\begin{aligned}
\mathbf{S} &= 2d_C\Psi(\mathbf{C}) = 2\partial_C\Psi(\mathbf{C}) + \mathbf{F}^{\mathbf{p}-1}\bar{\mathbf{S}}\mathbf{F}^{\mathbf{p}-T} \\
&= 2\partial_C\Psi(\mathbf{C}) + \mathbf{F}^{\mathbf{p}-1}\left(\text{VOL}_{C^{e-1}}[2\partial_{C^e}\bar{W}] + \text{DEV}_{C^{e-1}}[2\partial_{C^e}\bar{W}] + 2\partial_{C^e}\Psi_2\right)\mathbf{F}^{\mathbf{p}-T} \\
&= 2\partial_C\Psi(\mathbf{C}) + \mathbf{F}^{\mathbf{p}-1}\left(p(J)\mathbf{C}^{e-1} + \text{DEV}_{C^{e-1}}[2\partial_{C^e}\bar{W}] + 2\partial_{C^e}\Psi_2\right)\mathbf{F}^{\mathbf{p}-T} \\
&= 2\partial_C\Psi(\mathbf{C}) + p(J)\mathbf{C}^{-1} + \mathbf{F}^{\mathbf{p}-1}\left(\text{DEV}_{C^{e-1}}[2\partial_{C^e}\bar{W}] + 2\partial_{C^e}\Psi_2\right)\mathbf{F}^{\mathbf{p}-T}.
\end{aligned} \tag{1.22}$$

1.5 Algorithmisch konsistente Tangente

Es wird die auf die Fließfläche projizierte Spannung \mathbf{S} nach der gegebenen Deformation \mathbf{C} abgeleitet. Dazu wird die Einschränkung (C.56) aufgehoben. Damit überschreitet die algorithmisch konsistente Tangente $d_C\mathbf{S}$ die global-lokale Staffelung des Gesamtproblems, vgl. Abschnitt 1.2. Es treten nun auch die Ableitungen $d_C\boldsymbol{\omega}$ der inneren Variablen nach \mathbf{C} auf, welche aufbauend auf der elastoplastischen Rückprojektion in Abschnitt 3.5 berechnet werden. Die Ableitung $d_C\mathbf{S}$ wird in der Linearisierung der Impulsbilanz (1.6) verwendet. Die Herleitung wird in Abschnitt 6.2 zur weiteren global stetigen Variablen systematisiert. Für eine entkoppelte Energie (1.14) zerlegt sich

$$\mathbb{C} = 2d_C\mathbf{S} \tag{1.23}$$

in einen volumetrischen Anteil \mathbb{C}^{vol} und einen deviatorischen Anteil $\tilde{\mathbb{C}}$:

$$\begin{aligned}
\mathbb{C} &= \mathbb{C}^{vol} + \tilde{\mathbb{C}}, \\
\mathbb{C}^{vol} &= 2\partial_C[p(J)\mathbf{C}^{-1}], \\
\tilde{\mathbb{C}} &= \mathbb{C} - \mathbb{C}^{vol}.
\end{aligned} \tag{1.24}$$

Nur im Spezialfall (1.18) überträgt sich die Zerlegung (1.19),

$$\begin{aligned}\mathbb{C}^{\text{vol}} &= 2\partial_C \text{VOL}_{C^{-1}}[\mathbf{S}], \\ \tilde{\mathbb{C}} &= 2\partial_C \text{DEV}_{C^{-1}}[\mathbf{S}].\end{aligned}\tag{1.25}$$

Zuerst wird die algorithmische Tangente für eine allgemeine elastische Energie in Abschnitt 1.5.1 hergeleitet. Die Änderungen, welche sich aus der volumetrisch-deviatorisch entkoppelten Energie (1.14) ergeben, werden in Abschnitt 1.5.2 beschrieben. \mathbb{C}^{vol} hängt allein von der gegebenen Deformation \mathbf{C} ab und wird deshalb unabhängig von der Elastoplastizität in Abschnitt 1.5.3 behandelt.

1.5.1 Unzerlegte Tangente

Die vollständige Ableitung von $\mathbf{S} = 2\partial_C \Psi + \mathbf{F}^{\text{P}^{-1}} \bar{\mathbf{S}} \mathbf{F}^{\text{P}^{-T}}$ (C.57) lautet

$$\begin{aligned}d_C \mathbf{S} : \dot{\mathbf{C}} &= 2\partial_{CC}^2 \Psi : \dot{\mathbf{C}} \\ &+ \left[d_C \mathbf{F}^{\text{P}^{-1}} : \dot{\mathbf{C}} \right] \bar{\mathbf{S}} \mathbf{F}^{\text{P}^{-T}} + \mathbf{F}^{\text{P}^{-1}} \bar{\mathbf{S}} \left[d_C \mathbf{F}^{\text{P}^{-T}} : \dot{\mathbf{C}} \right] + \mathbf{F}^{\text{P}^{-1}} \left[d_C \bar{\mathbf{S}} : \dot{\mathbf{C}} \right] \mathbf{F}^{\text{P}^{-T}}.\end{aligned}\tag{1.26}$$

Es werden der zweite und dritte Term mit \mathbb{G} (A.8) zusammengefasst,

$$\mathbf{F}^{\text{P}^{-1}} \left[\mathbb{G} : d_C \mathbf{F}^{\text{P}^{-1}} : \dot{\mathbf{C}} \right] \mathbf{F}^{\text{P}^{-T}} = \left[d_C \mathbf{F}^{\text{P}^{-1}} : \dot{\mathbf{C}} \right] \bar{\mathbf{S}} \mathbf{F}^{\text{P}^{-T}} + \mathbf{F}^{\text{P}^{-1}} \bar{\mathbf{S}} \left[d_C \mathbf{F}^{\text{P}^{-T}} : \dot{\mathbf{C}} \right].\tag{1.27}$$

Die vollständige Ableitung im letzten Term in (1.26),

$$d_C \bar{\mathbf{S}} = \partial_C \bar{\mathbf{S}} + \partial_\omega \bar{\mathbf{S}} \circ d_C \boldsymbol{\omega},\tag{1.28}$$

unterscheidet sich, je nachdem ob \mathbf{C}^e oder \mathbf{F}^{P} als innere Variable (3.22) verwendet wird. Beide Fälle werden unten ausgeführt. Die vollständige Ableitung (1.26) lautet also

$$d_C \mathbf{S} : \dot{\mathbf{C}} = \frac{1}{2} \tilde{\mathbb{C}} : \dot{\mathbf{C}} = 2\partial_{CC}^2 \Psi : \dot{\mathbf{C}} + \mathbf{F}^{\text{P}^{-1}} \left[(\partial_C \bar{\mathbf{S}} + \partial_\omega \bar{\mathbf{S}} \circ d_C \boldsymbol{\omega} + \mathbb{G} : d_C \mathbf{F}^{\text{P}}) : \dot{\mathbf{C}} \right] \mathbf{F}^{\text{P}^{-T}}.\tag{1.29}$$

Es wird (1.29) ohne $\dot{\mathbf{C}}$ geschrieben,

$$\begin{aligned}\frac{1}{2} \mathbb{C} &= 2\partial_{CC}^2 \Psi + \mathbf{F}^{\text{P}^{-1}} \circ \mathbf{F}^{\text{P}^{-1}} \circ (\partial_C \bar{\mathbf{S}} + \partial_\omega \bar{\mathbf{S}} \circ d_C \boldsymbol{\omega} + \mathbb{G} : d_C \mathbf{F}^{\text{P}}), \\ \frac{1}{2} \mathbb{C}_{ijklm} &= 2(\partial_{CC}^2 \Psi)_{ijklm} + F_{ia}^{\text{P}^{-1}} F_{jb}^{\text{P}^{-1}} (\partial_C \bar{\mathbf{S}} + \partial_\omega \bar{\mathbf{S}} \circ d_C \boldsymbol{\omega} + \mathbb{G} : d_C \mathbf{F}^{\text{P}})_{abkm},\end{aligned}\tag{1.30}$$

wobei sich die Verknüpfung \circ in der ersten Zeile aus der indizierten Darstellung erklärt.

\mathbf{F}^{P} als innere Variable

Mit der Wahl $\boldsymbol{\omega} = (\mathbf{F}^{\text{P}}, \mathbf{B})$ (3.22) lautet (1.28)

$$\begin{aligned}d_C \bar{\mathbf{S}} &= \partial_C \bar{\mathbf{S}} + \partial_\omega \bar{\mathbf{S}} \circ d_C \boldsymbol{\omega}, \\ \partial_C \bar{\mathbf{S}} &= \partial_{C^e} \bar{\mathbf{S}} : \partial_C \mathbf{C}^e, \\ \partial_\omega \bar{\mathbf{S}} &= \begin{pmatrix} \partial_{C^e} \bar{\mathbf{S}} : \partial_{\mathbf{F}^{\text{P}}} \mathbf{C}^e \\ \partial_B \bar{\mathbf{S}} \end{pmatrix},\end{aligned}\tag{1.31}$$

wobei $\partial_C \mathbf{C}^e$ (C.39) und $\partial_{\mathbf{F}^{\text{P}}} \mathbf{C}^e$ (C.119) gegeben sind. $d_C \boldsymbol{\omega}$ wird in Abschnitt 3.5 berechnet. Im elastischen Fall verschwindet $d_C \boldsymbol{\omega}$. Es bleibt in der runden Klammer in (1.30) also nur $\partial_C \bar{\mathbf{S}}$ stehen.

C^e als innere Variable

Mit der Wahl $\boldsymbol{\omega} = (C^e, \mathbf{B})$ (3.22) verschwindet $\partial_C \bar{\mathbf{S}}$. (1.28) lautet

$$d_C \bar{\mathbf{S}} = \partial_\omega \bar{\mathbf{S}} \circ d_C \boldsymbol{\omega} = \partial_{C^e} \bar{\mathbf{S}} : d_C C^e + \partial_B \bar{\mathbf{S}} : d_C \mathbf{B}. \quad (1.32)$$

$d_C \boldsymbol{\omega}$ wird in Abschnitt 3.5 berechnet. Die vollständige Ableitung $d_C \mathbf{F}^p$ in (1.30) muss für das Residuum (3.16) aus $\mathbf{F}^p = \exp(\Delta\gamma d_\Sigma \phi) \mathbf{F}_n^p$ bestimmt werden, was ebenfalls in Abschnitt 3.5 geschieht. Für das Residuum (3.21) ist \mathbf{F}^p konstant und damit $d_C \mathbf{F}^p = \mathbf{0}$. Im elastischen Fall verschwinden $d_C \boldsymbol{\omega}$ und $d_C \mathbf{F}^p$. In diesem Fall wird die innere Variable C^e mit der Konstanten \mathbf{F}^p in der Form $C^e = \mathbf{F}^{p^{-T}} C \mathbf{F}^{p^{-1}}$ (C.32) geschrieben. Wie in (1.31)₂ gilt $d_C \bar{\mathbf{S}} = \partial_C \bar{\mathbf{S}} = \partial_{C^e} \bar{\mathbf{S}} : \partial_C C^e$.

1.5.2 Deviatorische Tangente

Die deviatorische Tangente $\tilde{\mathbb{C}}$ (1.24)₃ unterscheidet sich von der unzerlegten Tangente \mathbb{C} (1.30) durch eine Ersetzung von $\bar{\mathbf{S}}$ im gesamten Abschnitt 1.5.1 entsprechend den Fällen in den Abschnitten 1.4.1, 1.4.2 und 1.4.3.

So muß in den Spezialfällen (1.18) und (1.20) $\bar{\mathbf{S}} = 2\partial_{C^e} \Psi$ durch $\text{DEV}_{C^e}^{-1}[\bar{\mathbf{S}}]$ ersetzt werden. Im allgemeinen Fall (1.22) muß $\bar{\mathbf{S}}$ durch $\text{DEV}_{C^e}^{-1}[2\partial_{C^e} \bar{W}] + 2\partial_{C^e} \Psi_2$ ersetzt werden, wobei $\Psi_2 = \Psi - \bar{W}$. Nur im einfachen Spezialfall (1.18) folgt aus der Ersetzung, dass \mathbf{S} zu $\text{DEV}_{C^{-1}}[\mathbf{S}]$ wird.

1.5.3 Volumetrische Tangente

Durch die Ersetzung ist in (1.18), (1.20) und (1.22) jeweils der Term $p(J)C^{-1}$ übrig geblieben. Dieser Term hängt allein von der gegebenen Deformation C ab und ist somit im elastischen und im plastischen Fall gleich. Nur im Spezialfall (1.18) gilt $\text{VOL}_{C^{-1}}[\mathbf{S}] = p(J)C^{-1}$. Die volumetrische Tangente \mathbb{C}^{vol} kann mit $\partial_C C^{-1} = -\mathbf{I}_{C^{-1}}$ (C.118) angegeben werden,

$$\mathbb{C}^{\text{vol}} = 2\partial_C (p(J)C^{-1}) = 2p'(J)C^{-1}d_C J - 2p(J)\mathbf{I}_{C^{-1}}, \quad (1.33)$$

wobei $p'(J) = J^2 U''(J) + JU'(J)$. Es wird \mathbb{C}^{vol} zerlegt,

$$\begin{aligned} \mathbb{C}^{\text{vol}} &= \mathbb{C}^{\text{vol}(1)} + \mathbb{C}^{\text{vol}(2)}, \\ \mathbb{C}^{\text{vol}(1)} &= 2p'(J)C^{-1}d_C J = p'(J)JC^{-1} \otimes C^{-1}, \\ \mathbb{C}^{\text{vol}(2)} &= -2p(J)\mathbf{I}_{C^{-1}}. \end{aligned} \quad (1.34)$$

Diese Zerlegung bereitet die Gemischte Formulierung in Abschnitt 2.1.4 vor, bei der statt J eine Mittelung \bar{J} verwendet wird, womit $d_C \bar{J} \neq d_C J = \frac{1}{2}JC^{-1}$ (C.103).

1.6 Eine Hierarchie der entkoppelten elastischen Energie

In dieser Arbeit wird eine deviatorische elastische Energie \tilde{W} (1.14) verwendet, welche quadratisch in $\tilde{\mathbf{C}}^e$ (C.109) ist. Es wird der zweite Term der isotropen Energie (C.64) gewählt, um zu einer möglichst einfachen und plausiblen Form zu gelangen:

$$\tilde{W}(\tilde{\mathbf{C}}^e) = \mu \tilde{\mathbf{E}}^e : \tilde{\mathbf{E}}^e = \mu I_2(\tilde{\mathbf{E}}^e). \quad (1.35)$$

Für eine anisotrope Energie kann $\tilde{W}(\tilde{\mathbf{C}}^e) = \bar{\psi}(\tilde{\mathbf{E}}^e)$ (C.49) genommen werden. Für eine hierarchische Modellierung kann im Fall der isotropen Elastizität die Darstellung in der Hauptachsenbasis

erfolgen, s. Abschnitt 1.6.1. Für die anisotrope Elastizität bleibt die allgemeine Darstellung in Abschnitt 1.6.2.

1.6.1 Bemerkung. *Gibt es eine Hierarchiestufe zwischen diesen Modellen? Es bietet sich die St.-Venant-Kirchhoff-Energie $\widetilde{W}^{\text{quad}}(\mathbf{C}^e) = I_2(\text{dev}[\mathbf{E}^e])$ (C.67)₂ an, bzw. die anisotrope Form $\widetilde{W}^{\text{quad}}(\mathbf{C}^e) = \widetilde{\psi}(\mathbf{E}^e)$ (C.49). Statt $\text{DEV}[\widetilde{\mathbf{S}}] = 2\partial_{\mathbf{C}^e}\widetilde{W}(\widetilde{\mathbf{C}}^e)$ lautet der Deviator der Spannung nun $\text{dev}[\widetilde{\mathbf{S}}] = 2\partial_{\mathbf{C}^e}\widetilde{W}^{\text{quad}}(\mathbf{C}^e)$.*

Für den Unterschied zwischen großen und kleinen Verformungen ist die Wahl von $U(J)$ (1.17) oder $\dot{U}(\text{tr}[\mathbf{E}^e])$ (C.67)₁ entscheidend. Es wird deshalb an $U(J)$ festgehalten. Die Kombination von $U(J)$ mit $\widetilde{W}^{\text{quad}}(\mathbf{C}^e)$ bedeutet jedoch eine inkonsistente Modellreduktion, weil die volumetrisch-deviatorische Zerlegung nicht mehr korrekt ist. Dieses Modell dient als Negativ-Beispiel: Es sollen keine Modelle verwendet werden, die zwar eine Vereinfachung enthalten, sich jedoch nicht mehr sauber herleiten lassen.

1.6.1 Isotrope Elastizität

Wenn die elastische Energie \widetilde{W} isotrop ist, so kann das lokale Problem in der Basis der Hauptachsen formuliert werden. Details zur Formulierung in den Hauptachsen sind bei SIMÓ [60] zu finden. Zu \mathbf{C}^e werden die Eigenwerte λ_A^2 und die Eigenvektoren \mathbf{N}_A (C.18) bestimmt, $\widetilde{\mathbf{C}}^e = J^{-\frac{2}{n_{\text{dim}}}}\mathbf{C}^e$ hat die gleichen Eigenvektoren wie \mathbf{C}^e . Es gilt also $\tilde{\lambda}_A^2 = \lambda_A^2 J^{-\frac{2}{n_{\text{dim}}}}$. Aufgrund der Isotropie ist \widetilde{W} eine Funktion der Eigenwerte von $\widetilde{\mathbf{C}}^e$, also $\widetilde{W}(\widetilde{\mathbf{C}}^e) = \widetilde{W}(\tilde{\lambda}_A^2)$. Bei der Ableitung der Energie bleiben die Eigenvektoren unverändert,

$$2\partial_{\mathbf{C}^e}\widetilde{W}(\widetilde{\mathbf{C}}^e) = 2\sum_{A=1}^3\sum_{B=1}^3\frac{d\widetilde{W}}{d\lambda_A^2}\mathbf{N}_A\otimes\mathbf{N}_A = \sum_{A=1}^3\bar{S}_A\mathbf{N}_A\otimes\mathbf{N}_A, \quad (1.36)$$

$\bar{S}_A(\tilde{\lambda}_B^2)$ bezeichnet hier die Eigenwerte von $\text{DEV}[\widetilde{\mathbf{S}}]$. Für die Tangente ergibt sich gemäß (C.20)

$$\begin{aligned} 2\partial_{\mathbf{C}^e\mathbf{C}^e}\widetilde{W}(\widetilde{\mathbf{C}}^e) &= \sum_{A=1}^3\sum_{B=1}^3\frac{d\bar{S}_A}{d\lambda_B^2}\mathbf{N}_A\otimes\mathbf{N}_A\otimes\mathbf{N}_B\otimes\mathbf{N}_B + \\ &+ \sum_{A=1}^3\sum_{\substack{B=1 \\ B\neq A}}^3\frac{1}{2}\frac{\bar{S}_A - \bar{S}_B}{\lambda_A^2 - \lambda_B^2}\mathbf{N}_A\otimes\mathbf{N}_B\otimes(\mathbf{N}_A\otimes\mathbf{N}_B + \mathbf{N}_B\otimes\mathbf{N}_A). \end{aligned} \quad (1.37)$$

Beispiel

Es wird die Energie (1.35) verwendet, welche mit $\widetilde{\mathbf{E}}^e = \frac{1}{2}(\widetilde{\mathbf{C}}^e - \mathbf{1})$ und $\widetilde{\mathbf{C}}^e = J^{-\frac{2}{n_{\text{dim}}}}\mathbf{C}^e$ ausmultipliziert wird,

$$\widetilde{W}(\widetilde{\mathbf{C}}^e) = \mu\widetilde{\mathbf{E}}^e : \widetilde{\mathbf{E}}^e = \mu\left\{\frac{1}{4}J^{-\frac{4}{n_{\text{dim}}}}\text{tr}[\mathbf{C}^{e^2}] - \frac{1}{2}J^{-\frac{2}{n_{\text{dim}}}}\text{tr}[\mathbf{C}^e] + \frac{n_{\text{dim}}}{4}\right\}, \quad (1.38)$$

und weiter mit $\text{tr}[\mathbf{C}^{e^2}] = J_1^2(\mathbf{C}^e) - 2J_2(\mathbf{C}^e)$ (C.16)₂, $J_1(\mathbf{C}^e) = \text{tr}[\mathbf{C}^e]$ und $J^2 = J_3(\mathbf{C}^e)$ in den Hauptinvarianten (C.16) und (C.17) von \mathbf{C}^e dargestellt wird:

$$\widetilde{W}(\widetilde{\mathbf{C}}^e) = \widetilde{W}(\lambda_A^2) = \mu\left\{\frac{1}{4}J_3^{-\frac{2}{n_{\text{dim}}}}[J_1^2 - 2J_2] - \frac{1}{2}J_3^{-\frac{1}{n_{\text{dim}}}}J_1 + \frac{n_{\text{dim}}}{4}\right\}. \quad (1.39)$$

Die Eigenwerte von $\text{DEV}[\widetilde{\mathbf{S}}]$ lauten $\bar{S}_A = 2\partial_{\lambda_A^2}\widetilde{W}(\lambda_B^2)$.

1.6.2 Anisotrope Elastizität

Es wird nun der Fall betrachtet, dass die Hauptachsen nicht mehr wie in Abschnitt 1.6.1 kommutieren. Die Ursache kann eine anisotrope elastische Energie (C.49) sein. Im Vorgriff auf die Schädigung in Abschnitt 3.6 kann auch ein Schädigungstensor \mathbf{B} Anisotropie induzieren, $\widetilde{W} = \widetilde{W}(\widetilde{\mathbf{C}}^e, \mathbf{B})$. Zur Kombination beider Fälle siehe Abschnitt 3.7. Im Vorgriff auf die Elastoplastizität sei bemerkt, dass auch eine anisotrope Fließfunktion (C.131) bei isotroper elastischer Energie dazu führt, dass die Hauptachsen nicht kommutieren. Für alle diese Fälle muß der Deviator der Spannung (1.36) und die Tangente (1.37) in allgemeiner Form bestimmt werden,

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}\mathbf{C}^e &= 2\partial_{\mathbf{C}^e}^2 \bar{W}(\mathbf{C}^e, \mathbf{B}), \\ \frac{1}{2}\mathbf{C}^d &= 2\partial_{\mathbf{B}\mathbf{C}^e}^2 \bar{W}(\mathbf{C}^e, \mathbf{B}),\end{aligned}\tag{1.40}$$

und im Spezialfall des deviatorischen Anteil der Energie $\widetilde{W}(\widetilde{\mathbf{C}}^e, \mathbf{B})$ (1.14):

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}\widetilde{\mathbf{C}}^e &= 2\partial_{\widetilde{\mathbf{C}}^e}^2 \widetilde{W}(\widetilde{\mathbf{C}}^e, \mathbf{B}), \\ \frac{1}{2}\widetilde{\mathbf{C}}^d &= 2\partial_{\mathbf{B}\widetilde{\mathbf{C}}^e}^2 \widetilde{W}(\widetilde{\mathbf{C}}^e, \mathbf{B}).\end{aligned}\tag{1.41}$$

Die erste Ableitung von \widetilde{W} (1.14), siehe (C.113), wird erneut hingeschrieben, wobei nun und überall in diesem Abschnitt zur besseren Übersicht $\mathbf{C} = \mathbf{C}^e$ geschrieben wird:

$$\partial_{\mathbf{C}}\widetilde{W}(\widetilde{\mathbf{C}}) = \partial_{\widetilde{\mathbf{C}}}\widetilde{W}(\widetilde{\mathbf{C}}) : d_{\mathbf{C}}\widetilde{\mathbf{C}} = J^{-\frac{2}{n_{dim}}} \left(\mathbf{I} - \frac{1}{n_{dim}}\mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{C} \right) : \partial_{\widetilde{\mathbf{C}}}\widetilde{W}(\widetilde{\mathbf{C}}).\tag{1.42}$$

Die zweite Ableitung (1.41)₂ wird in die Terme $\frac{1}{4}\widetilde{\mathbf{C}}_1^e$ und $\frac{1}{4}\widetilde{\mathbf{C}}_2^e$ verlegt:

$$\begin{aligned}\partial_{\mathbf{C}\mathbf{C}}^2 \widetilde{W}(\widetilde{\mathbf{C}}) = \frac{1}{4}\widetilde{\mathbf{C}}^e &= \partial_{\mathbf{C}} \left[J^{-\frac{2}{n_{dim}}} \left(\mathbf{I} - \frac{1}{n_{dim}}\mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{C} \right) \right] : \partial_{\widetilde{\mathbf{C}}}\widetilde{W}(\widetilde{\mathbf{C}}) \\ &\quad + J^{-\frac{2}{n_{dim}}} \left(\mathbf{I} - \frac{1}{n_{dim}}\mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{C} \right) : \partial_{\widetilde{\mathbf{C}}\widetilde{\mathbf{C}}}^2 \widetilde{W}(\widetilde{\mathbf{C}}) : \partial_{\mathbf{C}}\widetilde{\mathbf{C}} \\ &= \frac{1}{4}\widetilde{\mathbf{C}}_1^e + \frac{1}{4}\widetilde{\mathbf{C}}_2^e.\end{aligned}\tag{1.43}$$

Einsetzen von $\partial_{\mathbf{C}}\widetilde{\mathbf{C}}$ (C.113) ergibt für den zweiten Teil

$$\widetilde{\mathbf{C}}_2^e = 4J^{-\frac{4}{n_{dim}}} \left(\mathbf{I} - \frac{1}{n_{dim}}\mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{C} \right) : \partial_{\widetilde{\mathbf{C}}\widetilde{\mathbf{C}}}^2 \widetilde{W}(\widetilde{\mathbf{C}}) : \left(\mathbf{I} - \frac{1}{n_{dim}}\mathbf{C} \otimes \mathbf{C}^{-1} \right)\tag{1.44}$$

Dabei ist \mathbf{H} in (C.113) mit den letzten beiden Indizes von $\partial_{\widetilde{\mathbf{C}}\widetilde{\mathbf{C}}}^2 \widetilde{W}$ gegeben. Entsprechend folgt die Reihenfolge $\mathbf{C} \otimes \mathbf{C}^{-1}$ in der zweiten Klammer. Es ist nicht sinnvoll, (1.44) auszumultiplizieren. Mit $\partial_{\mathbf{C}}\mathbf{C}^{-1} = \mathbf{I}_{\mathbf{C}^{-1}}$ (C.118), $\mathbf{K} = \text{DEV}[d_{\mathbf{C}}\widetilde{W}]$ und $\mathbf{H} = \partial_{\widetilde{\mathbf{C}}}\widetilde{W}(\widetilde{\mathbf{C}})$ folgt für $\widetilde{\mathbf{C}}_1^e$:

$$\begin{aligned}
\tilde{\mathbb{C}}_1^e &= 4\partial_C \left[\left(\mathbf{I} - \frac{1}{n_{dim}} \mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{C} \right) : \partial_{\tilde{\mathbf{C}}} \tilde{W}(\tilde{\mathbf{C}}) J^{-\frac{2}{n_{dim}}} \right] \\
&= -\frac{4J^{-\frac{2}{n_{dim}}}}{n_{dim}} \left(\mathbf{H} - \frac{1}{n_{dim}} \mathbf{C}^{-1} (\mathbf{C} : \mathbf{H}) \right) \otimes \mathbf{C}^{-1} - \frac{4J^{-\frac{2}{n_{dim}}}}{n_{dim}} \partial_C (\mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{C}) : \mathbf{H} \\
&= -\frac{2}{n_{dim}} \mathbf{K} \otimes \mathbf{C}^{-1} + \frac{4J^{-\frac{2}{n_{dim}}}}{n_{dim}} (\mathbf{I}_{C^{-1}} (\mathbf{H} : \mathbf{C}) - \mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{H}).
\end{aligned} \tag{1.45}$$

Unter Verwendung von (C.70):

$$\begin{aligned}
\tilde{\mathbb{C}}_1^e &= -\frac{2}{n_{dim}} \mathbf{K} \otimes \mathbf{C}^{-1} \\
&\quad + J^{-\frac{2}{n_{dim}}} \frac{4}{n_{dim}} \left(\mathbf{I}_{C^{-1}} (\mathbf{H} : \mathbf{C}) - \mathbf{C}^{-1} \otimes \text{DEV}[\mathbf{H}] - \mathbf{C}^{-1} \otimes \frac{1}{n_{dim}} (\mathbf{H} : \mathbf{C}) \mathbf{C}^{-1} \right) \\
&= -\frac{2}{n_{dim}} \mathbf{K} \otimes \mathbf{C}^{-1} - \frac{2}{n_{dim}} \mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{K} \\
&\quad + \frac{4}{n_{dim}} J^{-\frac{2}{n_{dim}}} (\mathbf{H} : \mathbf{C}) \left(\mathbf{I}_{C^{-1}} - \frac{1}{n_{dim}} \mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{C}^{-1} \right).
\end{aligned} \tag{1.46}$$

Damit ist die deviatorische elastische Tangente $\tilde{\mathbb{C}}^e = \tilde{\mathbb{C}}_2^e + \tilde{\mathbb{C}}_1^e$ (1.41)₂ im allgemeinen Fall bekannt.

2 Vermeidung von Locking

In der primalen Formulierung der Impulsbilanz sind die Ansatzräume für den volumetrischen und den deviatorischen Anteil der Deformation nicht korrekt gewählt. Deshalb kommt es zu einer unphysikalischen, numerisch bedingten Versteifung des Materials, dem Locking. Dieses zeigt sich auch in der Bildung von netzabhängigen Mustern in der Spannung.

Zur Vermeidung von Locking muss der Ansatzraum des volumetrischen Anteils verkleinert und der des deviatorischen Anteils entsprechend vergrößert werden. Es werden drei verschiedene Methoden beschrieben: die Gemischte Formulierung, die *Enhanced-Strain*- und die *Assumed-Strain*-Formulierung. Die beiden letzten bilden zusammen die *Solid-Shell*-Formulierung.

Bei der Gemischten Formulierung wird der volumetrische Anteil des Ansatzraums durch eine Mittelung verkleinert. Bei der *Enhanced-Strain*-Formulierung wird der deviatorische Anteil des Ansatzraums vergrößert, indem zusätzliche Moden eingefügt werden. Die *Assumed-Strain*-Formulierung filtert ungewünschte Moden heraus und glättet so die Deformation.

Die drei Methoden lassen sich untereinander kombinieren. Insofern laden sie dazu ein, Modellhierarchien zu bilden. Es ist jedoch keine Lokalisierung wie bei der Schädigung zu beobachten. Stattdessen geht das Locking von großen Teilen des Gebiets aus, so dass eine adaptive Modellwahl wenig sinnvoll erscheint.

2.1 Gemischte Formulierung

Die Gemischte Formulierung reduziert das Volumen-Locking. SIMO [60] formuliert diese Methode in der Momentankonfiguration. Hier wird sie in der Referenzkonfiguration geschrieben.

In der Gemischten Formulierung wird der Ansatzraum des volumetrischen Anteils der Deformation verkleinert, wodurch sich der Ansatzraum des deviatorischen Anteils entsprechend vergrößert. Übliche Paarungen der Ansatzräume sind $P_0 - Q_1$ (konstant-bilinear) oder $P_1 - Q_2$ (linear-biquadratisch). Eine gemischte Formulierung mit der Paarung $Q_1 - Q_2$ führt zu keiner Verbesserung. Die Paarung $P_0 - Q_1$ erfüllt zwar nicht die inf-sup-Bedingung, ist jedoch die einzig mögliche Wahl, wenn kein quadratischer Ansatz verwendet werden soll. Die folgende Diskretisierung führt auf eine primale Formulierung, in der die lokalen Steifigkeitsmatrizen angereichert werden. Es ist also kein Sattelpunktproblem zu lösen.

In Abschnitt 2.1.1 wird ein Lagrange-Funktional eingeführt, um über die Nebenbedingung den Ansatzraum der volumetrischen Deformation verändern zu können. Aus den Euler-Lagrange-Gleichungen in Abschnitt 2.1.3 folgt als wesentliches Resultat, dass die Gemischte Formulierung nur den volumetrischen Teil der Spannung verändert. Dieser wird in Abschnitt 2.1.4 für die Paarung $P_0 - Q_1$ diskretisiert. Der Abschnitt 2.1.5 dient dazu, die Allgemeinheit der Methode für höhere Ansätze zu zeigen.

2.1.1 Lagrange-Funktional

Die Deformation \mathbf{C} wird in der Form $\mathbf{C} = J^{\frac{2}{n_{dim}}} \tilde{\mathbf{C}}$ zerlegt, wobei $\tilde{\mathbf{C}}$ unimodular (C.109) ist. Die volumetrische Deformation ist also in J enthalten, während $\tilde{\mathbf{C}}$ die volumenerhaltende, also deviatorische Deformation beschreibt. Um nun J verändern zu können, wird zuerst eine Formulierung gesucht, in der sich J durch ein beliebiges \bar{J} ersetzen läßt. Dazu wird der Tensor

$$\bar{\mathbf{C}} = \bar{J}^{\frac{2}{n_{dim}}} \tilde{\mathbf{C}} = (J/\bar{J})^{-\frac{2}{n_{dim}}} \mathbf{C} \quad (2.1)$$

eingeführt, welcher die Eigenschaft $\det(\bar{\mathbf{C}}) = \bar{J}^2$ besitzt. Aus der Bedingung $\bar{J} = J$ folgt wieder $\bar{\mathbf{C}} = \mathbf{C}$. Es soll nun \bar{J} eine zellweise Mittelung von J sein. Dies wird über eine Nebenbedingung in schwacher Form erreicht. Die spezielle Form der Mittelung wird durch die Wahl der Funktionsräume in der schwachen Formulierung festgelegt.

Mit (1.9) ist bekannt, dass die gesuchte Lösung \mathbf{u} aus einem Extremalprinzip folgt, also aus der Stationarität der Differenz aus innerer und äußerer Arbeit,

$$W_{int}(\mathbf{u}) - W_{ext}(\mathbf{u}) \rightarrow \text{stat.} \quad (2.2)$$

Damit kann der Lagrange-Formalismus angewendet werden, um die Nebenbedingung einzubinden. \bar{J} wird in der Form $\bar{J} = \exp(\theta)$ mit $\theta \in \mathbb{R}$ parametrisiert, damit stets $\bar{J} > 0$ gilt. Mit der Nebenbedingung $\log(J) = \theta$ wird (2.2) zum Lagrange-Funktional

$$\mathcal{L}^G(\mathbf{u}, \theta, \bar{p}) = \int_{\Omega} \bar{W}(\bar{\mathbf{C}}^e(\mathbf{u}, \theta)) + \Psi_2 dV + \int_{\Omega} \bar{p}(\log(J(\mathbf{u})) - \theta) dV - W_{ext}(\mathbf{u}) \rightarrow \text{stat.} \quad (2.3)$$

erweitert, wobei $\bar{\mathbf{C}}^e = \mathbf{C}^e(\bar{\mathbf{C}}, \mathbf{F}^p)$ (C.32). Es erhält nur der Teil der freien Energie das Argument $\bar{\mathbf{C}}^e$ anstelle von \mathbf{C}^e , welcher auch volumetrisch-deviatorisch zerlegt ist. Weil dies nur \bar{W} ist, wird die Zerlegung $\Psi = \bar{W} + \Psi_2$ (1.21) verwendet. Aus der Stationarität folgt $\bar{J} = J$ und damit $\bar{\mathbf{C}}^e = \mathbf{C}^e$. (2.3) ist also äquivalent zu (2.2). In den Abschnitten 2.1.4 und 2.1.5 wird der Raum für \bar{J} und \bar{p} eingeschränkt, wodurch diese Äquivalenz nicht mehr gilt.

2.1.2 Vorbereitung der Euler-Lagrange-Gleichungen

In diesem Abschnitt wird die Ableitung von $\bar{\mathbf{C}}^e$ nach \mathbf{u} so umgeformt, dass sie weder $\bar{\mathbf{C}}^e$ noch \bar{J} enthält. Dazu wird $\bar{\mathbf{C}}^e$ mit $\bar{J} = \exp(\theta)$ in der Form

$$\bar{\mathbf{C}}^e(\mathbf{u}, \theta) = (\exp(\theta))^{\frac{2}{n_{dim}}} \tilde{\mathbf{C}}^e = \left(\frac{J}{\exp(\theta)} \right)^{-\frac{2}{n_{dim}}} \mathbf{C}^e \quad (2.4)$$

geschrieben. Die Ableitung nach \mathbf{u} ,

$$\partial_{\mathbf{u}} \bar{\mathbf{C}}^e(\mathbf{u}, \theta) \cdot \boldsymbol{\eta} = (\exp(\theta))^{\frac{2}{n_{dim}}} \partial_{\mathbf{C}^e} \tilde{\mathbf{C}}^e : \dot{\mathbf{C}}^e[\boldsymbol{\eta}], \quad (2.5)$$

wird gemäß (C.113) von links mit dem symmetrischen Tensor \mathbf{H} verjüngt, woraus sich

$$\mathbf{H} : \partial_{\mathbf{u}} \bar{\mathbf{C}}^e(\mathbf{u}, \theta) \cdot \boldsymbol{\eta} = \left(\frac{J}{\exp(\theta)} \right)^{-\frac{2}{n_{dim}}} \text{DEV}_{\mathbf{C}^e}^{-1}[\mathbf{H}] : \dot{\mathbf{C}}^e[\boldsymbol{\eta}] \quad (2.6)$$

ergibt. $\bar{\mathbf{C}}^e(\mathbf{u}, \theta)$ (2.4) abgeleitet nach θ ergibt

$$\partial_{\theta} \bar{\mathbf{C}}^e(\mathbf{u}, \theta) = \frac{2}{n_{dim}} \left(\frac{J}{\exp(\theta)} \right)^{-\frac{2}{n_{dim}}} \mathbf{C}^e = \frac{2}{n_{dim}} \bar{\mathbf{C}}^e(\mathbf{u}, \theta). \quad (2.7)$$

Die elastische Energie (1.14) zerlegt sich in der Form

$$\bar{W}(\bar{\mathbf{C}}^e) = U(\bar{J}) + \tilde{W}(\tilde{\mathbf{C}}^e). \quad (2.8)$$

Es ist in diesem Abschnitt mit dem Deviator DEV stets der Deviator $\text{DEV}_{\mathbf{C}^e}^{-1}$ gemeint, und nie der Deviator $\text{DEV}_{\mathbf{C}^{-1}}$, siehe hierzu die Invarianz (C.71). In Analogie zu (1.15) ergibt sich für $\bar{\mathbf{C}}^e$

$$\begin{aligned}\partial_{\bar{\mathbf{C}}^e} \bar{W}(\bar{\mathbf{C}}^e) &= \frac{1}{2} \bar{J} U'(\bar{J}) \bar{\mathbf{C}}^{e-1} + \bar{J}^{-\frac{2}{n_{dim}}} \text{DEV}[\partial_{\bar{\mathbf{C}}^e} \bar{W}(\bar{\mathbf{C}}^e)], \\ \text{DEV}[\partial_{\bar{\mathbf{C}}^e} \bar{W}(\bar{\mathbf{C}}^e)] &= \bar{J}^{-\frac{2}{n_{dim}}} \text{DEV}[\partial_{\bar{\mathbf{C}}^e} \widetilde{W}(\widetilde{\mathbf{C}}^e)].\end{aligned}\quad (2.9)$$

Es wird nun (2.6) mit $\mathbf{H} = \partial_{\bar{\mathbf{C}}^e} \bar{W}(\bar{\mathbf{C}}^e)$ verwendet und dann (2.9)₂ eingesetzt:

$$\begin{aligned}\partial_{\bar{\mathbf{C}}^e} \bar{W}(\bar{\mathbf{C}}^e) : \partial_{\mathbf{u}} \bar{\mathbf{C}}^e(\mathbf{u}, \theta) \cdot \boldsymbol{\eta} &= \left(\frac{J}{\bar{J}} \right)^{-\frac{2}{n_{dim}}} \text{DEV}_{\mathbf{C}^{e-1}}[\partial_{\bar{\mathbf{C}}^e} \bar{W}(\bar{\mathbf{C}}^e)] : \dot{\mathbf{C}}^e[\boldsymbol{\eta}] \\ &= J^{-\frac{2}{n_{dim}}} \text{DEV}[\partial_{\bar{\mathbf{C}}^e} \widetilde{W}(\widetilde{\mathbf{C}}^e)] : \dot{\mathbf{C}}^e[\boldsymbol{\eta}] \\ &= J^{-\frac{2}{n_{dim}}} \mathbf{F}^{\text{P}-1} \text{DEV}[\partial_{\bar{\mathbf{C}}^e} \widetilde{W}(\widetilde{\mathbf{C}}^e)] \mathbf{F}^{\text{P}-T} : \dot{\mathbf{C}}[\boldsymbol{\eta}].\end{aligned}\quad (2.10)$$

Diese Gleichung wird im nächsten Abschnitt verwendet.

2.1.3 Euler-Lagrange-Gleichungen

Es werden nun die Euler-Lagrange-Gleichungen zu (2.3) bestimmt, welche sich durch Ableiten nach \mathbf{u} , θ und \bar{p} ergeben. Unter Verwendung von (C.103) folgt aus (2.3) die erste Euler-Lagrange-Gleichung $(\partial_{\mathbf{u}} \mathcal{L}(\mathbf{u}, \theta, \bar{p}), \boldsymbol{\eta})$ mit der Testfunktion $\boldsymbol{\eta} \in \mathcal{V}$, wobei (2.10) eingesetzt wird,

$$\begin{aligned}(\partial_{\mathbf{u}} \mathcal{L}, \boldsymbol{\eta}) &= \int_{\Omega} \partial_{\bar{\mathbf{C}}^e} \bar{W}(\bar{\mathbf{C}}^e(\mathbf{u}, \theta)) : \dot{\mathbf{C}}^e[\boldsymbol{\eta}] + d_C \Psi_2 : \dot{\mathbf{C}}[\boldsymbol{\eta}] + \frac{1}{2} \bar{p} \mathbf{C}^{-1} : \dot{\mathbf{C}}[\boldsymbol{\eta}] dV - G_{ext}(\boldsymbol{\eta}) \\ &= \int_{\Omega} \frac{1}{2} \left\{ 2d_C \Psi_2 + J^{-\frac{2}{n_{dim}}} \mathbf{F}^{\text{P}-1} \text{DEV} \left[2\partial_{\bar{\mathbf{C}}^e} \widetilde{W}(\widetilde{\mathbf{C}}^e) \right] \mathbf{F}^{\text{P}-T} + \bar{p} \mathbf{C}^{-1} \right\} : \dot{\mathbf{C}}[\boldsymbol{\eta}] dV \\ &\quad - G_{ext}(\boldsymbol{\eta}),\end{aligned}\quad (2.11)$$

mit $G_{ext}(\boldsymbol{\eta}) = \int_{\Omega} d_{\mathbf{u}} V_{ext} \cdot \boldsymbol{\eta} dV$. Die zweite Gleichung lautet mit (2.7) und (1.16)₂

$$\begin{aligned}(\partial_{\theta} \mathcal{L}(\mathbf{u}, \theta, \bar{p}), q) &= \int_{\Omega} \left[\frac{1}{n_{dim}} 2\partial_{\bar{\mathbf{C}}^e} \bar{W}(\bar{\mathbf{C}}^e(\mathbf{u}, \theta)) : \bar{\mathbf{C}}^e(\mathbf{u}, \theta) - \bar{p} \right] q dV \\ &= \int_{\Omega} [p(\bar{J}) - \bar{p}] q dV = 0, \quad \forall q \in L^2(\Omega).\end{aligned}\quad (2.12)$$

Der Lagrange-Multiplikator \bar{p} ist also im Integralmittel gleich dem Druck $p(\bar{J}) = \bar{J} U'(\bar{J})$. Die dritte Euler-Lagrange-Gleichung ist die schwache Formulierung der Nebenbedingung $\bar{J} = J$:

$$(\partial_{\bar{p}} \mathcal{L}(\mathbf{u}, \theta, \bar{p}), \psi) = \int_{\Omega} [\log(J(\mathbf{u})) - \theta] \psi dV = 0, \quad \forall \psi \in L^2(\Omega).\quad (2.13)$$

Die geschweifte Klammer in (2.11),

$$\mathbf{S} = \bar{p} \mathbf{C}^{-1} + 2d_C \Psi_2 + J^{-\frac{2}{n_{dim}}} \mathbf{F}^{\text{P}-1} \text{DEV} \left[2\partial_{\bar{\mathbf{C}}^e} \widetilde{W}(\widetilde{\mathbf{C}}^e) \right] \mathbf{F}^{\text{P}-T},\quad (2.14)$$

unterscheidet sich von \mathbf{S} (1.22) allein im Druck \bar{p} , welcher $p(J)$ ersetzt. Dieses ergibt sich aus $2d_C \Psi_2 = 2\partial_C \Psi + \mathbf{F}^{\text{P}-1} 2\partial_{\bar{\mathbf{C}}^e} \Psi_2 \mathbf{F}^{\text{P}-T}$ (C.57) und (1.16)₁. Damit ist (2.11) die Impulsbilanz (1.5) in der Gemischten Formulierung. Die Gemischte Formulierung verändert also allein den Teil der Spannung, welcher aus dem volumetrischen Anteil $U(\bar{J})$ der elastischen Energie stammt, während der Rest der Spannung unverändert bleibt.

2.1.4 Diskretisierung des volumetrischen Terms

Wie bereits in Abschnitt 2.1.1 angekündigt, wird nun in (2.13) der Raum für θ und die Testfunktion ψ verkleinert. Dies geschieht, indem die zellweise konstante Mittelung für $K \in \mathcal{T}_h$ (1.3),

$$\theta = \frac{1}{|K|} \int_K \log(J) dV \quad (2.15)$$

verwendet wird. Für den Lagrange-Multiplikator \bar{p} und die Testfunktion q erfolgt in (2.12) keine Einschränkung. Damit ist $\bar{p} = p(\bar{J})$ mit $\bar{J} = \exp(\theta)$ bekannt. Diese Mittelung entspricht der Paarung der Ansatzräume $P_0 - Q_1$ (konstant-bilinear). Dies wird im Abschnitt 2.1.5 für höhere Ansätze deutlich werden.

Für die Ableitung von \bar{J} ergibt sich unter Verwendung von (C.103) und (C.106)

$$\begin{aligned} \dot{\bar{J}} &= d_u \bar{J} \cdot \boldsymbol{\eta} = d_C \bar{J} : \dot{\mathbf{C}}[\boldsymbol{\eta}] = \bar{J}'(\theta) d_C \theta : \dot{\mathbf{C}}[\boldsymbol{\eta}] \\ &= \frac{\bar{J}}{|K|} \int_K \frac{1}{\bar{J}} \frac{1}{2} J \mathbf{C}^{-1} : \dot{\mathbf{C}}[\boldsymbol{\eta}] dV = \frac{\bar{J}}{|K|} \int_K \operatorname{div}[\boldsymbol{\eta}] dV = \bar{J} \overline{\operatorname{div}}[\boldsymbol{\eta}] \end{aligned} \quad (2.16)$$

mit

$$\overline{\operatorname{div}}[\boldsymbol{\eta}] := \frac{1}{|K|} \int_K \operatorname{div}[\boldsymbol{\eta}] dV. \quad (2.17)$$

Es wird die Zerlegung (1.34) angewendet, und statt für $\mathbb{C} = 2d_C \mathbf{S}$ wird in der Linearisierung der Impulsbilanz (1.6) das erste Integral $\int_{\Omega} \frac{1}{2} \dot{\mathbf{C}}[\boldsymbol{\eta}] : d_C \mathbf{S} : \dot{\mathbf{C}}[\Delta \mathbf{u}] dV$ nur für $\mathbb{C}^{\text{vol}(1)} = 2\bar{p}'(\bar{J}) \mathbf{C}^{-1} \partial_C \bar{J}$ ausgeführt, wobei (2.16) verwendet wird:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \frac{1}{2} \dot{\mathbf{C}}[\boldsymbol{\eta}] : \frac{1}{2} \mathbb{C}^{\text{vol}(1)} : \dot{\mathbf{C}}[\Delta \mathbf{u}] dV &= \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K \frac{1}{2} \dot{\mathbf{C}}[\boldsymbol{\eta}] : \mathbf{C}^{-1} \bar{p}'(\bar{J}) \partial_C \bar{J} : \dot{\mathbf{C}}[\Delta \mathbf{u}] dV \\ &= \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K \frac{1}{2} \dot{\mathbf{C}}[\boldsymbol{\eta}] : \mathbf{C}^{-1} \bar{p}'(\bar{J}) \bar{J} \overline{\operatorname{div}}[\boldsymbol{\eta}] \overline{\operatorname{div}}[\Delta \mathbf{u}] dV \\ &= \sum_{K \in \mathcal{T}_h} |K| \bar{p}'(\bar{J}) \bar{J} \overline{\operatorname{div}}[\boldsymbol{\eta}] \overline{\operatorname{div}}[\Delta \mathbf{u}]. \end{aligned} \quad (2.18)$$

Der zweite Teil von \mathbb{C}^{vol} lautet $\mathbb{C}^{\text{vol}(2)} = -2\bar{p}(\bar{J}) \mathbf{I}_{C^{-1}}$.

2.1.5 Diskretisierung des volumetrischen Terms für höhere FE-Ansätze

In Abschnitt 2.1.4 wurde der Spezialfall $P_0 - Q_1$ behandelt, bei dem \bar{J} zellweise konstant ist. Nun wird der allgemeine Fall von Paarungen $P_k - Q_{k+1}$ mit $k > 0$ hergeleitet. Erst mit der Paarung $P_1 - Q_2$ wird die inf-sup-Bedingung erfüllt. Auch wenn es aus mathematischer Sicht die korrekte Lösung ist, höhere Ansätze zu verwenden, so spricht doch der numerische Aufwand dafür, Methoden mit bilinearem Ansatz zu bevorzugen. In diesem Abschnitt wird also eine Vergleichsmethode für andere Verfahren bereitgestellt. Außerdem wird gezeigt, dass der Spezialfall aus Abschnitt 2.1.4 im allgemeinen Fall enthalten ist.

Es werden die Bezeichnungen an einem Spezialfall erklärt: Für die Paarung $P_1 - Q_2$ lautet der Vektor der Ansatzfunktionen $\boldsymbol{\Gamma} = (\phi_1(\boldsymbol{\Theta}), \phi_2(\boldsymbol{\Theta}), \phi_3(\boldsymbol{\Theta}), \phi_4(\boldsymbol{\Theta}))$, $\boldsymbol{\Theta} = (\theta_1, \theta_2, \theta_3)$, mit $\phi_1(\boldsymbol{\Theta}) = 1 - \theta_1 - \theta_2 - \theta_3$, $\phi_2(\boldsymbol{\Theta}) = \theta_1$, $\phi_3(\boldsymbol{\Theta}) = \theta_2$ und $\phi_4(\boldsymbol{\Theta}) = \theta_3$ auf der Einheitspyramide mit den Eckpunkten $\boldsymbol{\Theta}_1 = (0, 0, 0)$, $\boldsymbol{\Theta}_2 = (1, 0, 0)$, $\boldsymbol{\Theta}_3 = (0, 1, 0)$, $\boldsymbol{\Theta}_4 = (0, 0, 1)$. Der Punkt auf der Einheitspyramide $\boldsymbol{\Theta}$ wird auf den Punkt $\mathbf{X}(\boldsymbol{\Theta}) = \mathbf{X}_1 + (\mathbf{X}_2 - \mathbf{X}_1)\theta_1 + (\mathbf{X}_3 - \mathbf{X}_1)\theta_2 = \mathbf{X}_1 + \mathbf{T}\boldsymbol{\Theta}$ der geometrischen Zelle transformiert. Die Projektion zurück auf die Einheitspyramide lautet $\boldsymbol{\Theta}(\mathbf{X}) = \mathbf{T}^{-1}(\mathbf{X} - \mathbf{X}_1)$. Eine Veranschaulichung liefert Abb. 2.1. Für den allgemeinen Fall $P_k - Q_{k+1}$ erhöht sich entsprechend

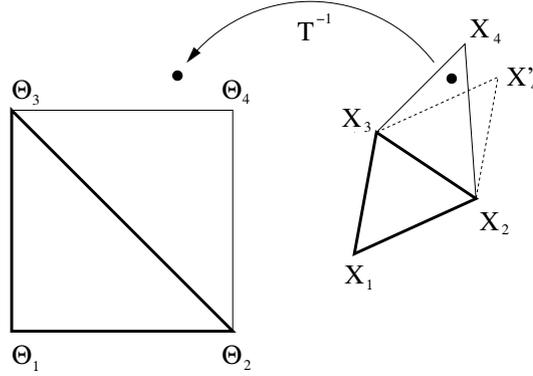


Abbildung 2.1: Im zweidimensionalen Raum wird der Fall $P_1 - Q_2$ beschrieben: Für den biquadratischen Ansatz (Q_2) wird die quadratische Einheitszelle auf die physikalische Zelle abgebildet. Für den bilinearen Ansatz (P_1) wird das Einheitsdreieck $\Theta_1 - \Theta_2 - \Theta_3$ mit $\Theta_1 = (0, 0)$, $\Theta_2 = (1, 0)$, $\Theta_3 = (0, 1)$ auf das Dreieck $\mathbf{X}_1 - \mathbf{X}_2 - \mathbf{X}_3$ abgebildet. Die Koordinaten der Einheitszelle sind $\Theta = (\theta_1, \theta_2)$, die der physikalischen Zelle sind die kartesischen Koordinaten $\mathbf{X} = (X_1, X_2)$. Die Abbildung des Einheitsdreiecks lautet $\mathbf{X}(\Theta) = \mathbf{X}_1 + (\mathbf{X}_2 - \mathbf{X}_1)\theta_1 + (\mathbf{X}_3 - \mathbf{X}_1)\theta_2 = \mathbf{X}_1 + \mathbf{T}\Theta$. $\mathbf{X}(\Theta)$ bildet also das Einheitsquadrat auf ein Parallelogramm ab. Um die Ansatzfunktionen $\Gamma = (\phi_1(\Theta), \phi_2(\Theta), \phi_3(\Theta)) = (1 - \theta_1 - \theta_2, \theta_1, \theta_2)$ auswerten zu können, muß der (Quadratur-) Punkt \mathbf{X} auf der geometrischen Zelle zuvor mit der Umkehrabbildung $\Theta(\mathbf{X}) = \mathbf{T}^{-1}(\mathbf{X} - \mathbf{X}_1)$ auf das Einheitsdreieck transformiert werden. $\Theta(\mathbf{X})$ kann auch außerhalb des Einheitsquadrats liegen.

die Anzahl der Ansatzfunktionen. Mit dem Vektor der Unbekannten α der gleichen Dimension wie Γ kann nun eine Funktion $\bar{\vartheta} \in P_k$ auf der geometrischen Zelle beschrieben werden:

$$\bar{\vartheta}(\mathbf{X}) = \Gamma^T(\Theta(\mathbf{X}))\alpha = \Gamma^T\alpha. \quad (2.19)$$

Es wird nun die Funktion $\vartheta \in L_2(K)$ lokal auf die Funktion $\bar{\vartheta} \in P_k(K)$ projiziert. Multiplikation von (2.19) mit Γ von links und Integration über die Zelle K ,

$$\int_K \Gamma \Gamma^T \alpha \, dV = \left\{ \int_K \Gamma \Gamma^T \, dV \right\} \alpha = \mathbf{H} \alpha = \int_K \Gamma \vartheta \, dV, \quad (2.20)$$

und Auflösen nach α ,

$$\alpha = \mathbf{H}^{-1} \int_K \Gamma \vartheta \, dV, \quad (2.21)$$

liefert die Projektion $\bar{\vartheta}$ der Funktion ϑ

$$\bar{\vartheta} = \Gamma^T \alpha = \Gamma^T \mathbf{H}^{-1} \int_K \Gamma \vartheta \, dV. \quad (2.22)$$

Für die Paarung $P_0 - Q_1$ ist $\bar{\vartheta}$ das Integralmittel (2.15):

$$\bar{\vartheta} = \alpha = \frac{1}{|K|} \int_K \vartheta \, dV. \quad (2.23)$$

Für J (2.15) ergibt sich die Projektion

$$\bar{J} = \exp \left[\mathbf{\Gamma}^T \mathbf{H}^{-1} \int_K \mathbf{\Gamma} \log(J(\mathbf{u})) dV \right]. \quad (2.24)$$

Der Druck $p(\bar{J})$ wird ebenso projiziert:

$$\bar{p} = \mathbf{\Gamma}^T \mathbf{H}^{-1} \int_K \mathbf{\Gamma} p(\bar{J}) dV. \quad (2.25)$$

Für die Paarung $P_0 - Q_1$ ergibt sich mit $\mathbf{\Gamma} = 1$ die Gleichung $\bar{p} = p(\bar{J})$. \bar{p} soll ein Element aus P_k sein. Die Projektion (2.25) ist erforderlich, weil p im allgemeinen keine lineare Funktion ist. Für die Ableitung von (2.24) nach \mathbf{u} ergibt sich mit $d_C J$ (C.103) und der Divergenz (C.106), vgl. für den speziellen Fall (2.16),

$$\begin{aligned} d_u \bar{J} \cdot \boldsymbol{\eta} &= \bar{J} \left[\mathbf{\Gamma}^T \mathbf{H}^{-1} \int_K \mathbf{\Gamma} \frac{1}{J} \frac{1}{2} J \mathbf{C}^{-1} : \dot{\mathbf{C}}[\boldsymbol{\eta}] dV \right] \\ &= \bar{J} \left[\mathbf{\Gamma}^T \mathbf{H}^{-1} \int_K \mathbf{\Gamma} \operatorname{div}[\boldsymbol{\eta}] dV \right] = \bar{J} \overline{\operatorname{div}}[\boldsymbol{\eta}] \end{aligned} \quad (2.26)$$

mit der projizierten Divergenz

$$\overline{\operatorname{div}}[\boldsymbol{\eta}] = \mathbf{\Gamma}^T \mathbf{H}^{-1} \int_K \mathbf{\Gamma} \operatorname{div}[\boldsymbol{\eta}] dV. \quad (2.27)$$

Die Ableitung von $p = p(\bar{J})$ lautet mit (2.26)

$$\dot{p}(\bar{J}) = d_u p(\bar{J}) \cdot \Delta \mathbf{u} = p'(\bar{J}) d_u \bar{J} \cdot \Delta \mathbf{u} = p'(\bar{J}) \bar{J} \overline{\operatorname{div}}[\Delta \mathbf{u}]. \quad (2.28)$$

Es soll gezeigt werden, dass für die Projektion (2.22) folgende Symmetrie gilt:

$$\int_K \bar{\vartheta} \operatorname{div}[\boldsymbol{\eta}] dV = \int_K \vartheta \overline{\operatorname{div}}[\boldsymbol{\eta}] dV. \quad (2.29)$$

Es folgt der Beweis:

$$\begin{aligned} \int_K \bar{\vartheta} \operatorname{div}[\boldsymbol{\eta}] dV &= \int_K \left[\mathbf{\Gamma}^T \mathbf{H}^{-1} \int_K \mathbf{\Gamma} \vartheta dV \right] \operatorname{div}[\boldsymbol{\eta}] dV \\ &= \int_K \vartheta \mathbf{\Gamma}^T dV \int_K \mathbf{H}^{-1} \mathbf{\Gamma} \operatorname{div}[\boldsymbol{\eta}] dV \\ &= \int_K \vartheta \left[\mathbf{\Gamma}^T \int_K \mathbf{H}^{-1} \mathbf{\Gamma} \operatorname{div}[\boldsymbol{\eta}] dV \right] dV \\ &= \int_K \vartheta \left[\mathbf{\Gamma}^T \mathbf{H}^{-1} \int_K \mathbf{\Gamma} \operatorname{div}[\boldsymbol{\eta}] dV \right] dV = \int_K \vartheta \overline{\operatorname{div}}[\boldsymbol{\eta}] dV. \end{aligned} \quad (2.30)$$

Im Schritt von der ersten zur zweiten Zeile wird das innere Integral vor das äußere gezogen, und $\mathbf{\Gamma}^T \mathbf{H}^{-1} \mathbf{\Gamma}$ wird entsprechend transponiert: $\mathbf{\Gamma}^T \mathbf{H}^{-1} (\mathbf{\Gamma} p) = (\mathbf{\Gamma}^T p) \mathbf{H}^{-1} \mathbf{\Gamma}$. \square

Es gilt ebenso wegen $\dot{\vartheta} = \bar{\vartheta}$

$$\int_K \dot{\vartheta} \operatorname{div}[\boldsymbol{\eta}] dV = \int_K \vartheta \overline{\operatorname{div}}[\boldsymbol{\eta}] dV. \quad (2.31)$$

Es wird von (2.18),

$$\dot{\mathbf{C}}[\boldsymbol{\eta}] : \partial_C [\bar{p}(\bar{J})\mathbf{C}^{-1}] : \dot{\mathbf{C}}[\Delta\mathbf{u}] = \dot{\mathbf{C}}[\boldsymbol{\eta}] : \mathbf{C}^{-1}\bar{p}'(\bar{J})\bar{J}\bar{\text{div}}[\Delta\mathbf{u}] + \dot{\mathbf{C}}[\boldsymbol{\eta}] : \bar{p}\partial_C\mathbf{C}^{-1} : \dot{\mathbf{C}}[\Delta\mathbf{u}], \quad (2.32)$$

ausgegangen, wobei jedoch

$$\dot{\mathbf{C}}[\boldsymbol{\eta}] : \partial_C [\bar{p}(\bar{J})\mathbf{C}^{-1}] : \dot{\mathbf{C}}[\Delta\mathbf{u}] = 2\text{div}[\boldsymbol{\eta}]\dot{\bar{p}} + \dot{\mathbf{C}}[\boldsymbol{\eta}] : \bar{p}\partial_C\mathbf{C}^{-1} : \dot{\mathbf{C}}[\Delta\mathbf{u}]. \quad (2.33)$$

geschrieben wird, vgl. (2.28). Der erste Term der rechten Seite wird integriert: Es gilt nach (2.31) mit (2.28)

$$2 \int_K \dot{\bar{p}}\text{div}[\boldsymbol{\eta}] dV = 2 \int_K \dot{\bar{p}}\bar{\text{div}}[\boldsymbol{\eta}] dV = 2 \int_K \bar{p}'(\bar{J})\bar{J}\bar{\text{div}}[\boldsymbol{\eta}]\bar{\text{div}}[\Delta\mathbf{u}] dV \quad (2.34)$$

Für den einfachen Spezialfall mit $p(\bar{J}) = \bar{p}$ und Konstanten unter dem Integral ist dies wieder genau (2.18).

2.2 Solid-Shell-Formulierung

Wenn die *Enhanced-Strain*- und die *Assumed-Strain*-Formulierung beide für die Geometrie einer Schale modelliert werden, so bilden beide zusammen die *Solid-Shell*-Formulierung.

In einer Modellhierarchie sorgt die *Enhanced-Strain*-Formulierung für besonders große Unterschiede im numerischen Aufwand, weil sie bei einem bilinearen Ansatz für die Verschiebung zwingend eine quadratische Quadraturformel verlangt. Es ist also in $3^{n_{dim}}$ statt in $2^{n_{dim}}$ Quadraturpunkten das lokale Problem zu lösen ($n_{dim} = 2$ oder 3). Die *Assumed-Strain*-Formulierung hingegen funktioniert auch bei einer linearen Quadratur.

2.2.1 Enhanced-Strain-Formulierung

Bei der gemischten Formulierung in Abschnitt 2.1 wurde der Ansatzraum für die volumetrische Deformation verkleinert, um dem Volumen-Locking entgegenzuwirken. Bei der *Enhanced-Strain*-Formulierung hingegen wird der Ansatzraum der deviatorischen Deformation vergrößert. Dies geschieht, indem zellweise zusätzliche lokale Freiheitsgrade eingeführt werden, welche bei der Assemblierung eliminiert werden, so dass die Dimension der globalen Steifigkeitsmatrix nicht verändert wird. Diese Methode geht auf SIMÓ & RIFAI [61] zurück. Eine Darstellung findet sich bei APEL [3].

Es wird $\mathbf{C}(\mathbf{u})$ additiv um den symmetrischen Tensor zweiter Stufe $\mathbf{C}_E = \mathbb{B}^{es}[\mathbf{a}]$ ergänzt, welcher linear von einem Vektor zellweise konstanter Parameter $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^{n_{int}}$, hier: $n_{int} = 5$, abhängt:

$$\mathbf{C}(\mathbf{u}) \rightarrow \mathbf{C}(\mathbf{u}) + \mathbb{B}^{es}[\mathbf{a}]. \quad (2.35)$$

Wenn alle $N_{int} = m \times n_{int}$ Parameter auf den m Zellen des Netzes \mathcal{T}_h gemeint sind, so wird $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^{N_{int}}$ geschrieben. \mathbb{B}^{es} enthält die Abbildung \mathbf{J} der Einheitszelle auf die jeweilige Zelle im FE-Netz, vgl. Abb. 2.2,

$$\mathbb{B}^{es}[\mathbf{a}] := \frac{J_0}{J}(\mathbf{J}^T \mathbf{J}_0^{-T})\mathbf{C}_E^*[\mathbf{a}](\mathbf{J}_0^{-1}\mathbf{J}), \quad (2.36)$$

wobei \mathbf{J}_0 den Zellmittelpunkt abbildet und \mathbf{J} die Quadraturpunkte. J und J_0 sind die Determinanten. \mathbb{B}^{es} wird in jedem Quadraturpunkt gebildet. Die Modellierung von \mathbf{C}_E^* ,

$$\mathbf{C}_E^*[\mathbf{a}] = \begin{pmatrix} \theta_1 a_1 & \theta_1 a_4 + \theta_2 a_5 & 0 \\ \theta_1 a_4 + \theta_2 a_5 & \theta_2 a_2 & 0 \\ 0 & 0 & \theta_3 a_3 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{a} = [a_1, a_2, a_3, a_4, a_5]^T, \quad (2.37)$$

ist durch die Bedingung $\int_{\Omega_e} \mathbf{C}_E^*[\mathbf{a}] dV = \mathbf{0}$ eingeschränkt. θ sind die Koordinaten der Einheitszelle. In (2.37) sind zusätzliche Schermoden nur in der Schalebene eingefügt. \mathbf{C}_E läßt sich in der Form $(\mathbf{C}_E)_{km} = \sum_{i=1}^{n_{int}} \mathbb{B}_{kmi}^{es} a_i$ darstellen.

Mit dem Lagrange-Formalismus wird nun eine Formulierung gewonnen, bei der das Inkrement des Parameter-Vektors \mathbf{a} zellweise eliminiert wird, so dass weiterhin allein die Verschiebung \mathbf{u} die Unbekannte des globalen Problems bleibt. Ausgangspunkt ist die Stationarität der Energie (1.9),

$$W_{int}(\mathbf{u}) - W_{ext}(\mathbf{u}) \rightarrow \text{stat.}, \quad (2.38)$$

in der \mathcal{C} ergänzt wird, und die Nebenbedingung $\mathbf{C}_E = \mathbb{B}^{es}[\mathbf{a}]$ hinzugefügt wird,

$$\mathcal{L} = \int_{\Omega} \Psi + \mathbf{S} : (\mathbb{B}^{es}[\mathbf{a}] - \mathbf{C}_E) dV - W_{ext}(\mathbf{u}) \rightarrow \text{stat.}, \quad (2.39)$$

wobei \mathbf{S} als Lagrange-Multiplikator dient. Die freie Energie Ψ (1.7) ist nun eine Funktion von $\mathbf{C}(\mathbf{u}) + \mathbf{C}_E$ statt von $\mathbf{C}(\mathbf{u})$. Die Euler-Lagrange-Gleichungen lauten

$$\begin{aligned} (\partial_{\mathbf{C}_E} \mathcal{L}, \bar{\mathbf{C}}_E) &= \int_{\Omega} (d_{\mathbf{C}} \Psi - \frac{1}{2} \mathbf{S}) : \bar{\mathbf{C}}_E dV = 0, & \forall \bar{\mathbf{C}}_E \in \mathbb{R}^{n_{dim} \times n_{dim}}, \\ (\partial_{\mathbf{S}} \mathcal{L}, \hat{\mathbf{S}}) &= \int_{\Omega} (\mathbb{B}^{es}[\mathbf{a}] - \mathbf{C}_E) : \hat{\mathbf{S}} dV = 0, & \forall \hat{\mathbf{S}} \in \mathbb{R}^{n_{dim} \times n_{dim}}, \\ (\partial_{\bar{\mathbf{a}}} \mathcal{L}, \bar{\mathbf{a}}) &= \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K \mathbf{S} : \mathbb{B}^{es}[\bar{\mathbf{a}}] dV = 0, & \forall \bar{\mathbf{a}} \in \mathbb{R}^{N_{int}}, \\ (\partial_{\mathbf{u}} \mathcal{L}, \boldsymbol{\eta}) &= \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K d_{\mathbf{C}} \Psi : \dot{\mathbf{C}}(\mathbf{u})[\boldsymbol{\eta}] dV - G_{ext,K}(\boldsymbol{\eta}) = 0, & \forall \boldsymbol{\eta} \in \mathcal{V}_0. \end{aligned} \quad (2.40)$$

Aus der ersten Gleichung folgt $\mathbf{S} = 2d_{\mathbf{C}} \Psi$ (C.57), aus der zweiten die Nebenbedingung. Die vierte ist die Impulsbilanz. Die dritte Gleichung sagt, dass die Spannung auf dem Weg der zusätzlichen Deformation für beliebige Parameter $\bar{\mathbf{a}}$ keine Arbeit leisten darf.

2.2.1 Bemerkung. Bei APEL [3] wird diese Bedingung erfüllt, indem $\widetilde{\mathbb{B}^{es}}$ symmetrisch konstruiert wird und \mathbf{S} zellweise konstant ist. Letzteres kann bei bilinearen Ansätzen und nichtlinearen Spannungs-Dehnungs-Beziehungen nur näherungsweise erfüllt werden. Hier kommt also eine Ungewissheit ins Spiel. Im Gegensatz dazu ist diese Bedingung bei dieser Formulierung hier Teil des Gleichungssystems.

(2.40)₃ und (2.40)₄ werden nun linearisiert. Dabei wird in Vorbereitung der *Assumed-Strain*-Methode $\dot{\mathbf{C}}(\mathbf{u}, \mathbf{a})[\boldsymbol{\eta}] = \mathbb{B}[\boldsymbol{\eta}]$ (C.37) geschrieben. Aus Symmetriegründen wird der Faktor $\frac{1}{2}$ eingefügt:

$$\begin{aligned} g_K(\mathbf{u}, \mathbf{a}; \bar{\mathbf{a}}) &= \frac{1}{2} \int_K \mathbf{S}(\mathbb{B}^{es}[\mathbf{a}] + \mathbf{C}(\mathbf{u})) : \mathbb{B}^{es}[\bar{\mathbf{a}}] dV = \bar{\mathbf{a}}^T \mathbf{R}_a, \quad \forall \bar{\mathbf{a}} \in \mathbb{R}^{n_{int}}, \\ \Delta g_K(\mathbf{u}, \mathbf{a}; \bar{\mathbf{a}}, \Delta \mathbf{u}, \Delta \mathbf{a}) &= (\partial_a g_K, \Delta \mathbf{a}) + (\partial_u g_K, \Delta \mathbf{u}) \\ &= \frac{1}{2} \int_K \mathbb{B}^{es}[\bar{\mathbf{a}}] : \frac{d\mathbf{S}}{d\mathbf{C}} : (\mathbb{B}^{es}[\Delta \mathbf{a}] + \mathbb{B}[\Delta \mathbf{u}]) dV \\ &= \bar{\mathbf{a}}^T \mathbf{K}_{aa} \Delta \mathbf{a} + \bar{\mathbf{a}}^T \mathbf{K}_{ad} \Delta \mathbf{u}_h, \end{aligned} \quad (2.41)$$

und

$$\begin{aligned}
 f(\mathbf{u}, \mathbf{a}; \boldsymbol{\eta}) &= \int_K \frac{1}{2} \mathbf{S}(\mathbb{B}^{\text{es}}[\mathbf{a}] + \mathbf{C}(\mathbf{u})) : \mathbb{B}[\boldsymbol{\eta}] dV - G_{\text{ext},K}(\boldsymbol{\eta}) = \boldsymbol{\eta}_h^T \mathbf{R}_d, \\
 \Delta f(\mathbf{u}, \mathbf{a}; \boldsymbol{\eta}, \Delta \mathbf{u}, \Delta \mathbf{a}) &= (\partial_a f, \Delta \mathbf{a}) + (\partial_u f, \Delta \mathbf{u}) \\
 &= \int_K \frac{1}{2} \mathbb{B}[\boldsymbol{\eta}] : \frac{d\mathbf{S}}{d\mathbf{C}} : (\mathbb{B}^{\text{es}}[\Delta \mathbf{a}] + \mathbb{B}[\Delta \mathbf{u}]) + \frac{1}{2} \mathbf{S} : \ddot{\mathbf{C}}[\boldsymbol{\eta}, \Delta \mathbf{u}] dV \\
 &= \boldsymbol{\eta}_h^T \mathbf{K}_{da} \Delta \mathbf{a} + \boldsymbol{\eta}_h^T \mathbf{K}_{dd} \Delta \mathbf{u}_h.
 \end{aligned} \tag{2.42}$$

(2.41) und (2.42) liefern das auf der Zelle K lokale System

$$\begin{aligned}
 \mathbf{R}_a + \mathbf{K}_{aa} \Delta \mathbf{a} + \mathbf{K}_{ad} \Delta \mathbf{u}_h &= 0, \\
 \mathbf{R}_d + \mathbf{K}_{da} \Delta \mathbf{a} + \mathbf{K}_{dd} \Delta \mathbf{u}_h &= 0,
 \end{aligned} \tag{2.43}$$

aus dem $\Delta \mathbf{a} = -\mathbf{K}_{aa}^{-1} \mathbf{R}_a - \mathbf{K}_{aa}^{-1} \mathbf{K}_{ad} \Delta \mathbf{u}_h$ eliminiert werden kann, so dass sich das lokale Gleichungssystem

$$(\mathbf{K}_{dd} - \mathbf{K}_{da} \mathbf{K}_{aa}^{-1} \mathbf{K}_{ad}) \Delta \mathbf{u}_h = -\mathbf{R}_d + \mathbf{K}_{da} \mathbf{K}_{aa}^{-1} \mathbf{R}_a \tag{2.44}$$

ergibt, welches zum globalen Gleichungssystem $\mathbf{A}_h \Delta \mathbf{u}_h = \mathbf{f}_h$ assembliert wird. Die Matrizen \mathbf{K}_{aa}^{-1} und \mathbf{K}_{ad} und der Vektor \mathbf{R}_a müssen für jede Zelle gespeichert werden, um $\Delta \mathbf{a}$ aus der Lösung des globalen Gleichungssystems $\Delta \mathbf{u}_h$ zu berechnen.

Im nächsten Abschnitt wird zusätzlich \mathbb{B} durch \mathbb{B}^{as} (2.56) ersetzt.

2.2.2 Assumed-Strain-Formulierung

Die *Assumed-Strain*-Formulierung geht auf DVORKIN & BARTHE [21] und BATHE & DVORKIN [8] zurück. Die hier aufgeführte Methode wurde von BETSCH & STEIN [11] entwickelt. Weitere Darstellungen befinden sich bei ULZ [69] und APEL [3]. Hier geht es darum, die Methode besonders übersichtlich und systematisch darzustellen, so dass sie sich in den Kontext dieser Arbeit einfügt. Dazu erfolgt die Beschränkung auf kartesische Koordinaten.

Bei der *Assumed-Strain*-Formulierung werden parasitäre Deformationen unterdrückt, indem einzelne Komponenten von \mathbf{C} auf der Einheitszelle durch Mittelwerte ersetzt werden. Dazu wird die

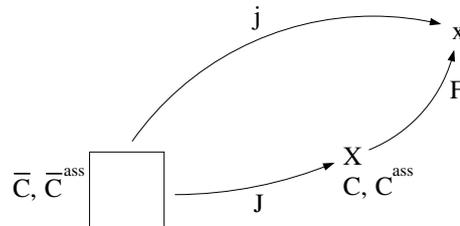


Abbildung 2.2: \mathbf{J} bildet die Einheitszelle auf das FE-Netz ab. Aus dieser unverformten Lage, der Referenzkonfiguration \mathbf{X} , bildet \mathbf{F} in die Momentankonfiguration \mathbf{x} ab. $\mathbf{j} = \mathbf{FJ}$ bildet die Einheitszelle auf die verformte Lage ab.

Deformation \mathbf{C} aus der Referenzkonfiguration auf die Einheitszelle zurückgezogen, s. Abb. 2.2. Auf der Einheitszelle fallen die Komponenten von $\bar{\mathbf{C}}$ mit den Normal- und Tangentialrichtungen der Schale zusammen. Auf der Einheitszelle werden einzelne Komponenten von $\bar{\mathbf{C}} = \mathbf{j}^T \mathbf{j} = \mathbf{J}^T \mathbf{C} \mathbf{J}$ durch Mittelwerte aus der Schalenmittelebene ersetzt. Die so erhaltene Deformation $\bar{\mathbf{C}}^{\text{as}}(\bar{\mathbf{C}})$ wird zurück in die Referenzkonfiguration transformiert, $\mathbf{C}^{\text{as}}(\mathbf{C}) = \mathbf{J}^{-T} \bar{\mathbf{C}}^{\text{as}} \mathbf{J}^{-1}$. Die Abbildung $\mathbf{C}^{\text{as}}(\mathbf{C})$ ist linear in \mathbf{C} . Die Komponenten 33, 13, 31, 23 und 32 von $\bar{\mathbf{C}}^{\text{as}}$ in den Quadraturpunkten des Volumens \mathbf{q}_k (hohle Kreise in Abb. 2.3) werden mit ein- und zweidimensionalen Ansatzfunktionen

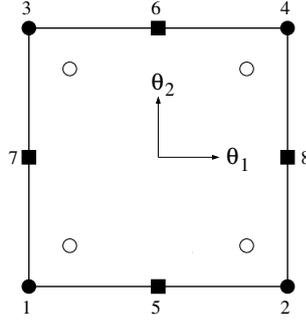


Abbildung 2.3: Dargestellt ist die Mittelebene der Einheitszelle. Die Daten \mathbf{C} und \mathbf{J} werden in den Quadraturpunkten des Volumens (projiziert auf hohle Kreise) und in den Eck- und Seitenmittelpunkten der Mittelebene bestimmt. Die 33-Komponenten werden aus den vier Eckpunkten mit zweidimensionalen bilinearen Ansatzfunktionen in den Projektionen der Volumenquadraturpunkte (hohle Kreise) interpoliert und diesen zugeordnet. Die 13- und 23-Komponenten werden entsprechend mit eindimensionalen Ansatzfunktionen aus den Seitenmittelpunkten ermittelt, siehe (2.45).

N_I^{2D} und N_I^{3D} aus den entsprechenden Komponenten von $\bar{\mathbf{C}}$ in den Punkten $I = 1, \dots, 8$ (gefüllte Kreise und Quadrate) bestimmt. $\mathbb{P}_3 \mathbf{q}_k$ projiziert den Punkt \mathbf{q}_k auf die 12-Mittelebene, $\mathbb{P}_1 \mathbb{P}_3 \mathbf{q}_k$ ist die weitere Projektion auf die 2-Achse. Die Komponenten 11, 12, 21 und 22 in der Schalebene bleiben unverändert:

$$\begin{aligned}
 \bar{\mathbf{C}}_{33}^{\text{as}}(\mathbf{q}_k) &= \sum_{I=1}^4 \bar{\mathbf{C}}_{33}^I N_I^{2D}(\mathbb{P}_3 \mathbf{q}_k), \\
 \bar{\mathbf{C}}_{13}^{\text{as}}(\mathbf{q}_k) &= \sum_{I=5}^6 \bar{\mathbf{C}}_{13}^I N_I^{1D}(\mathbb{P}_1 \mathbb{P}_3 \mathbf{q}_k), \\
 \bar{\mathbf{C}}_{23}^{\text{as}}(\mathbf{q}_k) &= \sum_{I=7}^8 \bar{\mathbf{C}}_{23}^I N_I^{1D}(\mathbb{P}_2 \mathbb{P}_3 \mathbf{q}_k), \\
 \bar{\mathbf{C}}_{ab}^{\text{as}}(\mathbf{q}_k) &= \bar{\mathbf{C}}_{ab}(\mathbf{q}_k), \quad a < 3, b < 3,
 \end{aligned} \tag{2.45}$$

wobei $\bar{\mathbf{C}}_{31}^{\text{as}} = \bar{\mathbf{C}}_{13}^{\text{as}}$ und $\bar{\mathbf{C}}_{32}^{\text{as}} = \bar{\mathbf{C}}_{23}^{\text{as}}$. Diese Abbildung lässt sich in der Form

$$\bar{\mathbf{C}}^{\text{as}}(\mathbf{q}_k) = \sum_{m=1}^{n_q+8} \mathbb{P}_{km}^{\text{as}} : \bar{\mathbf{C}}(\mathbf{q}_m), \quad k = 1, 2, \dots, n_q \tag{2.46}$$

zusammenfassen, wobei n_q die Anzahl der Quadraturpunkte im Volumen einer Zelle ist. Im Fall der Modellierung (2.45) gilt $\mathbb{P}_{km}^{\text{as}} = \mathbf{0}$ für $m \neq k$ und $m \leq n_q$. Die Darstellung (2.46) zeigt durch ihre allgemeine Form den vorhandenen Spielraum zur Modellierung auf. Dabei werden alle Kollokationspunkte, also die Quadraturpunkte und die Punkte auf der Mittelebene, durchnummeriert. Die Abbildungen zwischen den Konfigurationen lassen sich mit Tensoren vierter Stufe darstellen:

$$\begin{aligned}
 \bar{\mathbf{C}} &= \mathbf{J}^T \mathbf{C} \mathbf{J} = \mathbf{I}_J : \mathbf{C}, \\
 \mathbf{C}^{\text{as}} &= \mathbf{J}^{-T} \bar{\mathbf{C}}^{\text{as}} \mathbf{J}^{-1} = \mathbf{I}_{J^{-1}} : \bar{\mathbf{C}}^{\text{as}}.
 \end{aligned} \tag{2.47}$$

Zusammen mit (2.46) lautet die Abbildung der *Assumed-Strain*-Methode

$$\mathbf{C}^{\text{as}}(\mathbf{q}_k) = \mathbf{I}_{J^{-1}}(\mathbf{q}_k) : \sum_{m=1}^{n_q+8} \mathbb{P}_{km}^{\text{as}} : \mathbf{I}_J(\mathbf{q}_m) : \mathbf{C}(\mathbf{q}_m), \quad k = 1, 2, \dots, n_q, \quad (2.48)$$

deren Schreibweise nun zusammengefasst wird:

$$\check{\mathbf{C}}^{\text{as}(q)} = \sum_{p=1}^{n_q+8} \mathbb{A}^{qp} : \mathbf{C}^{(p)}, \quad q = 1, 2, \dots, n_q. \quad (2.49)$$

p und q sind die Indizes der Kollokationspunkte. \mathbb{A} hängt allein von der Geometrie der Zelle und der Interpolation (2.45) ab. Die modifizierte Deformation $\check{\mathbf{C}}^{\text{as}(q)}$ im Quadraturpunkt q ist also eine lineare Funktion der Deformation $\mathbf{C}^{(p)}$ in allen Kollokationspunkten p der Zelle. Diese Abbildung wird der Einfachheit halber in der Form $\check{\mathbf{C}}^{\text{as}}(\mathbf{C})$ geschrieben. Im unverformten Zustand gilt im Allgemeinen $\check{\mathbf{C}}^{\text{as}}(\mathbf{1}) \neq \mathbf{0}$. Deshalb lautet die gesuchte Abbildung $\mathbf{C}^{\text{as}}(\mathbf{C}) = \check{\mathbf{C}}^{\text{as}}(\mathbf{C}) + \mathbf{1} - \check{\mathbf{C}}^{\text{as}}(\mathbf{1})$, welche $\mathbf{C}^{\text{as}}(\mathbf{1}) = \mathbf{0}$ erfüllt. Es braucht die Konstante

$$\check{\mathbf{C}}^{\text{as}}(\mathbf{1}) \quad (2.50)$$

also nur einmal für jeden Quadraturpunkt berechnet werden. In der Linearisierung $f + \Delta f := 0$ der Impulsbilanz (1.6) wird \mathbf{C} durch $\mathbf{C}^{\text{as}}(\mathbf{C})$ ersetzt,

$$\begin{aligned} f(\mathbf{u}; \boldsymbol{\eta}) &= \int_{\Omega} \frac{1}{2} \mathbf{S}(\mathbf{C}^{\text{as}}) : \dot{\mathbf{C}}^{\text{as}}[\boldsymbol{\eta}] dV - G_{\text{ext}}(\boldsymbol{\eta}), \\ \Delta f(\mathbf{u}; \boldsymbol{\eta}, \Delta \mathbf{u}) &= \int_{\Omega} \frac{1}{2} \dot{\mathbf{C}}^{\text{as}}[\boldsymbol{\eta}] : \frac{d\mathbf{S}(\mathbf{C}^{\text{as}})}{d\mathbf{C}^{\text{as}}} : \dot{\mathbf{C}}^{\text{as}}[\Delta \mathbf{u}] dV + \int_{\Omega} \frac{1}{2} \mathbf{S}(\mathbf{C}^{\text{as}}) : \ddot{\mathbf{C}}^{\text{as}}[\boldsymbol{\eta}, \Delta \mathbf{u}] dV. \end{aligned} \quad (2.51)$$

Es müssen also die ersten beiden Ableitungen von

$$\mathbf{C}^{\text{as}} = \mathbf{C}^{\text{as}}(\mathbf{C}) \quad (2.52)$$

nach der Verschiebung \mathbf{u} bestimmt werden. Dazu werden zuvor die entsprechenden Ableitungen von \mathbf{C} (C.37) im Kollokationspunkt p angegeben,

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{C}}_{km}^{(p)}[\Delta \mathbf{u}] &= \sum_{i=1}^{n_{\text{dofs}}} \mathbb{B}_{kmi}^p \Delta u_i = \mathbb{B}[\Delta \mathbf{u}], \\ \ddot{\mathbf{C}}_{km}^{(p)}[\Delta \mathbf{u}, \boldsymbol{\eta}] &= \sum_{i=1}^{n_{\text{dofs}}} \sum_{j=1}^{n_{\text{dofs}}} \mathbb{G}_{kmi j}^p \Delta u_i \eta_j = \mathbb{G}[\Delta \mathbf{u}, \boldsymbol{\eta}], \end{aligned} \quad (2.53)$$

wobei n_{dofs} die Anzahl der Freiheitsgrade auf der Zelle bedeutet. Einsetzen in (2.49) liefert die gewünschten Ableitungen

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{C}}^{\text{as}(q)}[\Delta \mathbf{u}] &= \sum_{p=1}^{n_q+8} \mathbb{A}^{qp} : \dot{\mathbf{C}}^{(p)}[\Delta \mathbf{u}], \quad q = 1, \dots, n_q, \\ \dot{\mathbf{C}}_{abi}^{\text{as}(q)} \Delta u_i &= \sum_{p=1}^{n_q+8} \mathbb{A}_{abkm}^{qp} \mathbb{B}_{kmi}^p \Delta u_i, \quad q = 1, \dots, n_q; \quad i = 1, \dots, n_{\text{dofs}} \end{aligned} \quad (2.54)$$

und

$$\begin{aligned}
 \ddot{\mathbf{C}}^{\text{as}(q)}[\Delta \mathbf{u}] &= \sum_{p=1}^{n_q+8} \mathbb{A}^{qp} : \ddot{\mathbf{C}}^{(p)}[\Delta \mathbf{u}], \quad q = 1, \dots, n_q, \\
 \ddot{C}_{abij}^{\text{as}(q)} \Delta \mathbf{u}_i \eta_j &= \sum_{p=1}^{n_q+8} \mathbb{A}_{abkm}^{qp} \mathbb{G}_{kmij}^p \Delta \mathbf{u}_i \eta_j, \quad q = 1, \dots, n_q; \quad i = 1, \dots, n_{\text{dofs}}; j = 1, \dots, n_{\text{dofs}}.
 \end{aligned} \tag{2.55}$$

Die vorhandenen Symmetrien wurden in der Darstellung nicht berücksichtigt. Es müssen also die Deformation \mathbf{C} und ihre Ableitungen (2.53) in den Quadraturpunkten und den 8 zusätzlichen Punkten aus Abb. 2.3 gebildet werden. Aus diesen setzen sich dann die modifizierte Deformation \mathbf{C}^{as} und ihre Ableitungen in den Quadraturpunkten zusammen. Wenn in (2.54) und (2.55) die Summationen ausgeführt werden, so ergibt sich

$$\begin{aligned}
 \dot{C}_{km}^{\text{as}(q)}[\Delta \mathbf{u}] &= \sum_{i=1}^{n_{\text{dofs}}} \mathbb{B}_{kmi}^{\text{as}(q)} \Delta \mathbf{u}_i = \mathbb{B}^{\text{as}}[\Delta \mathbf{u}], \\
 \ddot{C}_{km}^{\text{as}(q)}[\Delta \mathbf{u}, \boldsymbol{\eta}] &= \sum_{i=1}^{n_{\text{dofs}}} \sum_{j=1}^{n_{\text{dofs}}} \mathbb{G}_{kmij}^{\text{as}(q)} \Delta \mathbf{u}_i \eta_j = \mathbb{G}^{\text{as}}[\Delta \mathbf{u}, \boldsymbol{\eta}]
 \end{aligned} \tag{2.56}$$

Die Anwendung der *Assumed-Strain*-Formulierung bedeutet also, dass (2.53) durch (2.56) ersetzt wird.

2.3 Gemischte und Enhanced-Strain-Formulierung

Es werden die Gemischte und die *Enhanced-Strain*-Formulierung vereinigt. Die gegenseitige Durchdringung und Verflechtung der beiden Formulierungen entsteht aus der Fortführung der den Formulierungen innewohnenden Methoden.

2.3.1 Lagrange-Funktional

Es werden das Lagrange-Funktional für die *Enhanced-Strain*-Formulierung (2.39),

$$\mathcal{L} = \int_{\Omega} \Psi + \mathbf{S} : (\mathbb{B}^{\text{es}}[\mathbf{a}] - \mathbf{C}_E) dV - W_{\text{ext}}(\mathbf{u}) \rightarrow \text{stat.}, \tag{2.57}$$

und das Lagrange-Funktional für die Gemischte Formulierung (2.3),

$$\mathcal{L}(\mathbf{u}, \theta, \bar{p}) = \int_{\Omega} \bar{W}(\bar{\mathbf{C}}^e(\mathbf{u}, \theta)) + \Psi_2 dV + \int_{\Omega} \bar{p}(\log(J(\mathbf{u})) - \theta) dV - W_{\text{ext}}(\mathbf{u}) \rightarrow \text{stat.} \tag{2.58}$$

vereint. Es werden also beide Nebenbedingungen hinzugefügt und \mathbf{C} durch $\mathbf{C} + \mathbf{C}_E$ ersetzt. Dabei wird $\bar{\mathbf{C}}^e = \mathbf{C}^e(\bar{\mathbf{C}}, \mathbf{F}^p)$ (C.32) verwendet:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{L}(\mathbf{C}_E, \mathbf{S}, \mathbf{a}, \mathbf{u}, \theta, \bar{p}) &= \int_{\Omega} \bar{W}(\mathbf{C}^e(\bar{\mathbf{C}}(\mathbf{C} + \mathbf{C}_E, \theta), \mathbf{F}^p)) + \Psi_2 dV \\
 &\quad + \int_{\Omega} \mathbf{S} : (\mathbb{B}^{\text{es}}[\mathbf{a}] - \mathbf{C}_E) dV \\
 &\quad + \int_{\Omega} \bar{p}(\log(J(\mathbf{C} + \mathbf{C}_E)) - \theta) dV - W_{\text{ext}}(\mathbf{u}) \rightarrow \text{stat.},
 \end{aligned} \tag{2.59}$$

2.3.2 Euler-Lagrange-Gleichungen

Die Euler-Lagrange-Gleichungen für die *Enhanced-Strain*-Formulierung (2.40) und die für die Gemischte Formulierung in Abschnitt 2.1.3 ergeben folgendes Resultat: Die Spannung aus der Gemischte Formulierung (2.14),

$$\mathbf{S} = \bar{p}\mathbf{C}^{-1} + 2d_C\Psi_2 + J^{-\frac{2}{n_{dim}}}\mathbf{F}^{\mathbb{P}^{-1}}\text{DEV}\left[2\partial_{\tilde{\mathbf{C}}^e}\tilde{W}(\tilde{\mathbf{C}}^e)\right]\mathbf{F}^{\mathbb{P}^{-T}}, \quad (2.60)$$

ist mit \mathbf{C} durch $\mathbf{C} + \mathbb{B}^{\text{es}}[\mathbf{a}]$ ersetzt in den Gleichungen (2.41) und (2.42) einzusetzen.

2.3.3 Diskretisierung des volumetrischen Terms

Es wird nun die Ableitung $\dot{\bar{J}}$ (2.16) für die Abhängigkeit $J(\mathbf{u}, \mathbf{a}) = J(\mathbf{C}(\mathbf{u}) + \mathbb{B}^{\text{es}}[\mathbf{a}])$ ausgeführt. Es wird analog zu (2.16) verfahren. Die Ableitung von $\bar{J} = \exp(\theta)$ mit $\theta = \frac{1}{|K|} \int_K \log(J(\mathbf{u}, \mathbf{a})) dV$ (2.15) lautet

$$\begin{aligned} \dot{\bar{J}} &= d_u \bar{J} \cdot \boldsymbol{\eta} + d_a \bar{J} \cdot \bar{\mathbf{a}} = d_C \bar{J} : \left(\dot{\mathbf{C}}[\boldsymbol{\eta}] + \mathbb{B}^{\text{es}}[\bar{\mathbf{a}}] \right) = \bar{J}'(\theta) d_C \theta : \left(\dot{\mathbf{C}}[\boldsymbol{\eta}] + \mathbb{B}^{\text{es}}[\bar{\mathbf{a}}] \right) \\ &= \frac{\bar{J}}{|K|} \int_K \frac{1}{\bar{J}} \frac{1}{2} J [\mathbf{C} + \mathbb{B}^{\text{es}}[\mathbf{a}]]^{-1} : \left(\dot{\mathbf{C}}[\boldsymbol{\eta}] + \mathbb{B}^{\text{es}}[\bar{\mathbf{a}}] \right) dV = \bar{J} (\bar{\text{div}}[\boldsymbol{\eta}] + \bar{\text{div}}_B[\bar{\mathbf{a}}]). \end{aligned} \quad (2.61)$$

mit

$$\begin{aligned} \bar{\text{div}}[\boldsymbol{\eta}] &:= \frac{1}{|K|} \int_K \frac{1}{2} (\mathbf{C} + \mathbb{B}^{\text{es}}[\mathbf{a}])^{-1} : \dot{\mathbf{C}}[\boldsymbol{\eta}] dV, \\ \bar{\text{div}}_B[\bar{\mathbf{a}}] &:= \frac{1}{|K|} \int_K \frac{1}{2} (\mathbf{C} + \mathbb{B}^{\text{es}}[\mathbf{a}])^{-1} : \mathbb{B}^{\text{es}}[\bar{\mathbf{a}}] dV \end{aligned} \quad (2.62)$$

Wie schon in (2.18) wird die Zerlegung der volumetrischen Tangente (1.34) angewendet, und statt für $\mathbb{C} = 2d_C\mathbf{S}$ werden (2.41) und (2.42) nur für $\mathbb{C}^{\text{vol}(1)} = 2\bar{p}'(\bar{J})(\mathbf{C} + \mathbb{B}^{\text{es}}[\mathbf{a}])^{-1} \partial_C \bar{J}$ ausgeführt. Dabei wird (2.61) verwendet:

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2} \int_{\Omega} \dot{\mathbf{C}}[\boldsymbol{\eta}] : \frac{1}{2} \mathbb{C}^{\text{vol}(1)} : \left(\dot{\mathbf{C}}[\Delta\mathbf{u}] + \mathbb{B}^{\text{es}}[\Delta\mathbf{a}] \right) dV \\ &= \frac{1}{2} \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K \dot{\mathbf{C}}[\boldsymbol{\eta}] : (\mathbf{C} + \mathbb{B}^{\text{es}}[\mathbf{a}])^{-1} \bar{p}'(\bar{J}) \bar{J} (\bar{\text{div}}[\boldsymbol{\eta}] + \bar{\text{div}}_B[\bar{\mathbf{a}}]) dV \\ &= \sum_{K \in \mathcal{T}_h} |K| \bar{p}'(\bar{J}) \bar{J} \bar{\text{div}}[\boldsymbol{\eta}] \otimes (\bar{\text{div}}[\boldsymbol{\eta}] + \bar{\text{div}}_B[\bar{\mathbf{a}}]) \end{aligned} \quad (2.63)$$

und

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2} \int_{\Omega} \mathbb{B}^{\text{es}}[\bar{\mathbf{a}}] : \frac{1}{2} \mathbb{C}^{\text{vol}(1)} : \left(\dot{\mathbf{C}}[\Delta\mathbf{u}] + \mathbb{B}^{\text{es}}[\Delta\mathbf{a}] \right) dV \\ &= \frac{1}{2} \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K \mathbb{B}^{\text{es}}[\bar{\mathbf{a}}] : (\mathbf{C} + \mathbb{B}^{\text{es}}[\mathbf{a}])^{-1} \bar{p}'(\bar{J}) \bar{J} (\bar{\text{div}}[\boldsymbol{\eta}] + \bar{\text{div}}_B[\bar{\mathbf{a}}]) dV \\ &= \sum_{K \in \mathcal{T}_h} |K| \bar{p}'(\bar{J}) \bar{J} \bar{\text{div}}_B[\bar{\mathbf{a}}] \otimes (\bar{\text{div}}[\boldsymbol{\eta}] + \bar{\text{div}}_B[\bar{\mathbf{a}}]). \end{aligned} \quad (2.64)$$

Durch die Gemischte Formulierung lauten die Beiträge von $\mathbb{C}^{\text{vol}(1)}$ zum Gleichungssystem (2.43)

$$\begin{aligned}
 \boldsymbol{\eta}_h^T \mathbf{K}_{dd}^{\text{vol}(1)} \Delta \mathbf{u}_h &= |K| \bar{p}'(\bar{J}) \bar{J} \bar{\text{div}}[\boldsymbol{\eta}] \otimes \bar{\text{div}}[\Delta \mathbf{u}], \\
 \boldsymbol{\eta}_h^T \mathbf{K}_{da}^{\text{vol}(1)} \Delta \mathbf{a} &= |K| \bar{p}'(\bar{J}) \bar{J} \bar{\text{div}}[\boldsymbol{\eta}] \otimes \bar{\text{div}}_B[\Delta \mathbf{a}], \\
 \bar{\mathbf{a}}^T \mathbf{K}_{ad}^{\text{vol}(1)} \Delta \mathbf{u}_h &= |K| \bar{p}'(\bar{J}) \bar{J} \bar{\text{div}}_B[\bar{\mathbf{a}}] \otimes \bar{\text{div}}[\Delta \mathbf{u}], \\
 \bar{\mathbf{a}}^T \mathbf{K}_{aa}^{\text{vol}(1)} \Delta \mathbf{a} &= |K| \bar{p}'(\bar{J}) \bar{J} \bar{\text{div}}_B[\bar{\mathbf{a}}] \otimes \bar{\text{div}}_B[\Delta \mathbf{a}].
 \end{aligned} \tag{2.65}$$

Die erste Gleichung (2.65)₁ ist wieder (2.18). Die Beiträge von $\mathbb{C}^{\text{vol}(2)} = -2\bar{p}(\bar{J})\mathbf{I}_{C^{-1}}$ (1.34) zum Gleichungssystem (2.43) lauten mit $\mathbf{I}_{C^{-1}}$ (C.118)

$$\begin{aligned}
 \boldsymbol{\eta}_h^T \mathbf{K}_{dd}^{\text{vol}(2)} \Delta \mathbf{u}_h &= -\frac{1}{2} \int_K \bar{p}(\bar{J}) \mathbb{B}[\boldsymbol{\eta}] : \mathbf{I}_{C^{-1}} : \mathbb{B}[\Delta \mathbf{u}] dV, \\
 \boldsymbol{\eta}_h^T \mathbf{K}_{da}^{\text{vol}(2)} \Delta \mathbf{a} &= -\frac{1}{2} \int_K \bar{p}(\bar{J}) \mathbb{B}[\boldsymbol{\eta}] : \mathbf{I}_{C^{-1}} : \mathbb{B}^{\text{es}}[\Delta \mathbf{a}] dV, \\
 \bar{\mathbf{a}}^T \mathbf{K}_{ad}^{\text{vol}(2)} \Delta \mathbf{u}_h &= -\frac{1}{2} \int_K \bar{p}(\bar{J}) \mathbb{B}^{\text{es}}[\bar{\mathbf{a}}] : \mathbf{I}_{C^{-1}} : \mathbb{B}[\Delta \mathbf{u}] dV, \\
 \bar{\mathbf{a}}^T \mathbf{K}_{aa}^{\text{vol}(2)} \Delta \mathbf{a} &= -\frac{1}{2} \int_K \bar{p}(\bar{J}) \mathbb{B}^{\text{es}}[\bar{\mathbf{a}}] : \mathbf{I}_{C^{-1}} : \mathbb{B}^{\text{es}}[\Delta \mathbf{a}] dV.
 \end{aligned} \tag{2.66}$$

Die restlichen Beiträge zum Gleichungssystem werden entsprechend von der deviatorischen Tangente $\tilde{\mathbb{C}}$ (1.24) geliefert.

2.4 Numerischer Vergleich der Formulierungen

Es werden die primale, die gemischte und die *Enhanced-Strain*-Formulierung (Abschnitt 2.2.1) bei der Berechnung einer Schale miteinander verglichen, wobei alle Methoden auch mit der *Assumed-Strain*-Formulierung aus Abschnitt 2.2.2 kombiniert werden.

Als erstes zeigt sich, dass es bei allen drei Formulierungen zur Bildung netzabhängiger Muster in der Lösung kommt, welche durch die Kombination mit der *Assumed-Strain*-Formulierung fast vollständig verschwinden.

Neben der Musterbildung ist *Locking* der zweite große Aspekt: Die gemischte Formulierung oder die *Enhanced-Strain*-Formulierung verringern die Steifigkeit der Schale auf in etwa ein Drittel, wobei die *Assumed-Strain*-Formulierung für eine weitere Reduzierung sorgt (Abb. 2.9 und Tab. 2.1).

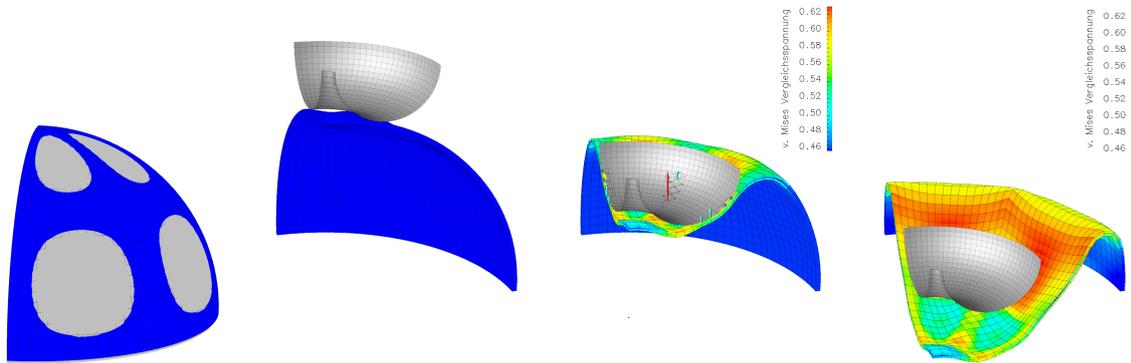


Abbildung 2.4: Eine Schale in Form einer Halbkugel ist in ihrer Schnittebene unverschieblich gelagert. Von oben wird ein Hindernis in Form eines Torus abgesenkt. Die Schale mit Radius $r = 1$ hat die Wandstärke $0.025r$. Um Verzweigungsprobleme (Durchschlagen, Beulen) zu umgehen, erhält die Schale in der unverformten Lage glatte Ausbuchtungen der Tiefe $0.05r$, die links im Schnitt mit einer Kugel erkennbar sind. Aufgrund der Symmetrie wird nur ein Viertel der Halbkugel berechnet. Auf den Schnittflächen sind Symmetrierandbedingungen gegeben. Die Schale ist über die Wandstärke mit nur einer FE-Zelle vernetzt. Der Torus wird so weit abgesenkt, bis sein Mittelpunkt gleich dem Mittelpunkt der Kugel ist. Anschließend wird der Torus wieder angehoben. Diese Schritte sind rechts zu sehen.

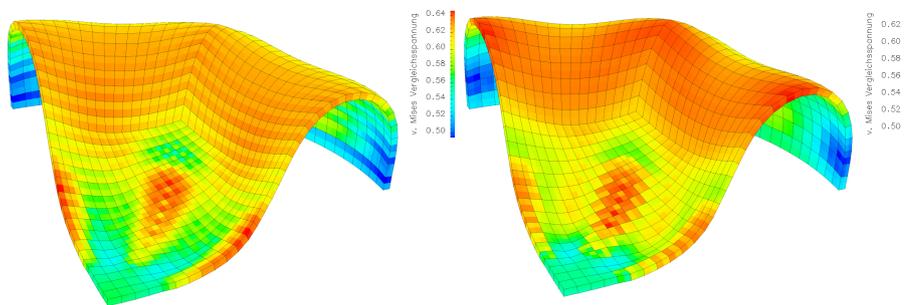


Abbildung 2.5: Dargestellt ist die Verformung nach Entlastung für die primale Formulierung ohne (links) und mit (rechts) der *Assumed-Strain*-Formulierung. Die von-Mises-Vergleichsspannung zeigt links stark ausgeprägte netzabhängige Muster, die rechts kaum noch vorhanden sind. Auf dem Rand jeder Zelle sind mit vier Vierecken jeweils gleicher Farbe die Werte in den 8 Quadraturpunkten der Zelle dargestellt. Diese Darstellung hebt die Musterbildung besonders hervor.

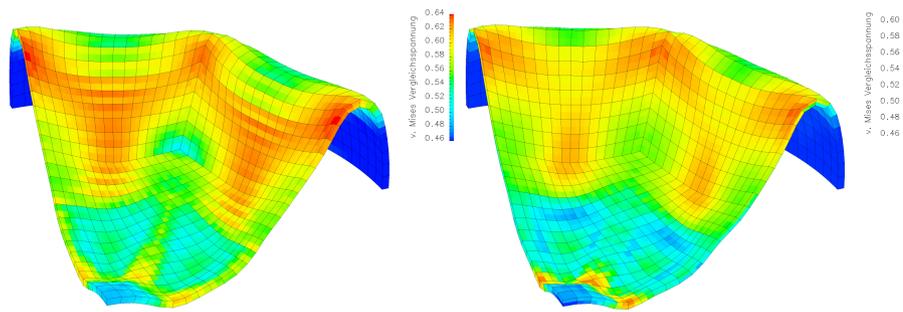


Abbildung 2.6: Dargestellt ist die Verformung nach Entlastung für die gemischte Formulierung ohne (links) und mit (rechts) der *Assumed-Strain*-Formulierung. Das Ergebnis unterscheidet sich stark von dem in Abb. 2.5. Die *Assumed-Strain*-Formulierung verhindert auch hier die Bildung von netzabhängigen Mustern.

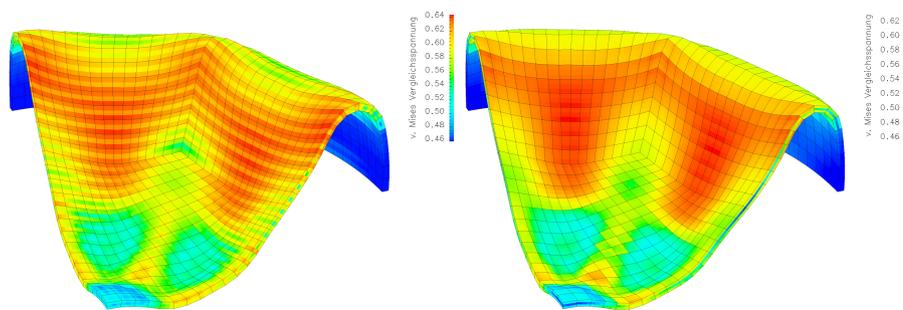


Abbildung 2.7: Dargestellt ist die Verformung nach Entlastung für die *Enhanced-Strain*-Formulierung ohne (links) und mit (rechts) der *Assumed-Strain*-Formulierung. Die *Enhanced-Strain*-Formulierung erfordert eine Quadraturformel dritter statt zweiter Ordnung. Auf jeder Zelle gibt es also 27 statt 8 Quadraturpunkte. Entsprechend feinteiliger ist das Muster links, welches rechts nahezu vollständig unterbunden wird.

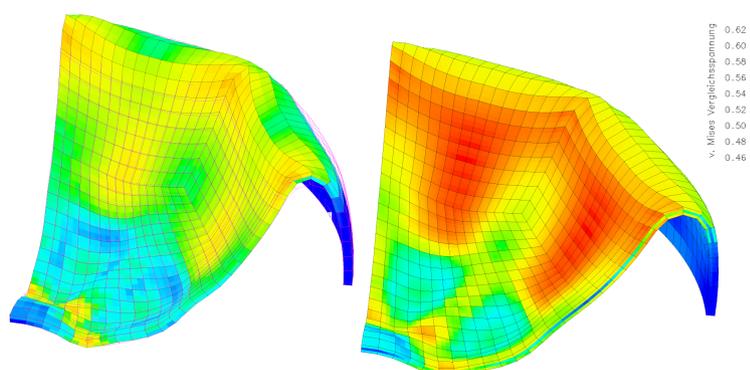


Abbildung 2.8: Es werden die Lösungen der gemischten Formulierung (links) aus Abb. 2.6 und der *Enhanced-Strain*-Formulierung (rechts) aus Abb. 2.7, beide in der *Assumed-Strain*-Formulierung, verglichen. Beide Lösungen werden in der gleichen Farbskala dargestellt. Deshalb sind die Farbkontraste links gegenüber denen in Abb. 2.6 schwächer. Das Netz aus dem rechten Bild ist links magentafarben dargestellt.

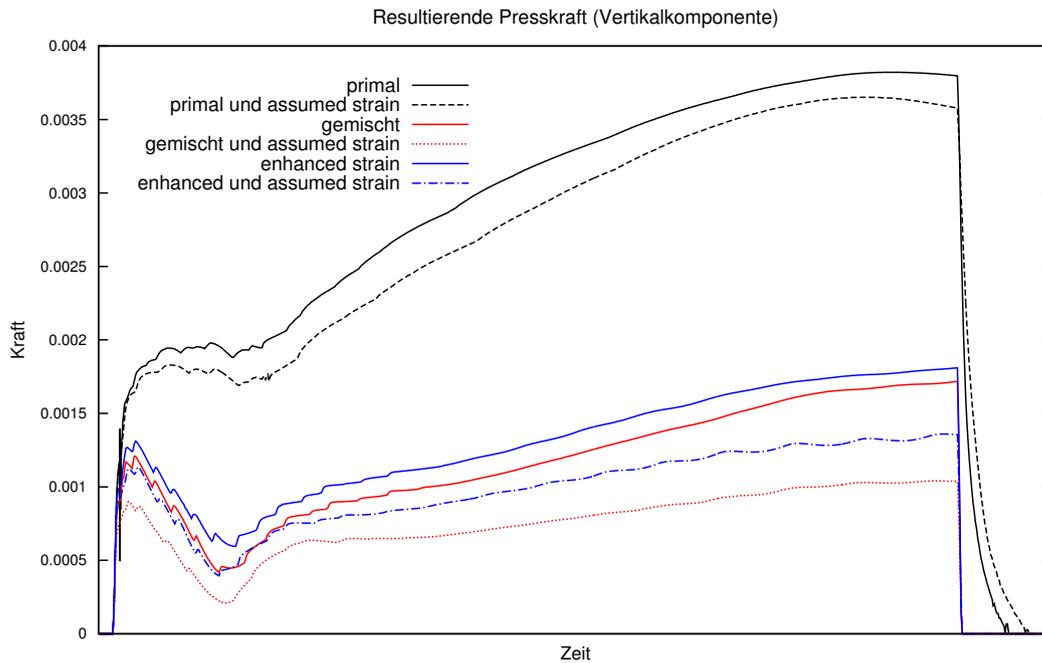


Abbildung 2.9: Es werden für alle Formulierungen die Kräfte berechnet, welche das Hindernis auf die Schale ausübt, und über der Zeit aufgetragen. Die gemischte Formulierung und die *Enhanced-Strain*-Formulierung bewirken, dass die Presskraft stark reduziert wird. Es liegt nahe, dass hier das Phänomen des *Lockings* zu beobachten ist. Es zeigt sich, dass die Presskraft durch die *Assumed-Strain*-Formulierung weiter verkleinert wird.

Methode	Mittlere Presskraft	Zeit des Lösens	Zeit der Assemblierung
Primal	3.00	0.85	0.08
Primal und A. S.	2.82	0.97	0.29
Gemischt	1.18	0.88	0.07
Gemischt und A. S.	0.76	1.11	0.27
Enhanced Strain	1.30	0.78	0.44
Enhanced Strain und A. S.	1.00	1.00	1.00

Tabelle 2.1: Es wird links die über die Zeit gemittelte Presskraft aus Abb. 2.9 dargestellt, wobei diese auf die letzte Zeile bezogen wird. Ebenso werden die relativen Zeiten dargestellt, welche für das Assemblieren und Lösen der Gleichungssysteme gebraucht werden. Die Gleichungssysteme haben für alle hier betrachteten Formulierungen die gleiche Dimension. Es fällt auf, dass die *Assumed-Strain*-Formulierung eine Verschlechterung des Lösungsverhaltens bewirkt. Bei der primalen und der gemischten Formulierung vervierfacht die *Assumed-Strain*-Formulierung die Zeitdauer der Assemblierung. Der hohe Aufwand für die *Enhanced-Strain*-Formulierung liegt darin begründet, dass nun in 27 statt 8 Quadraturpunkten je Zelle das lokale Problem zu lösen ist.

3 Elastoplastizität

Die Modellierung in der Elastoplastizität erfolgt über die Erweiterung der freien Energie und einer entsprechenden Fließfunktion. Nach einem einheitlichen Verfahren ergibt sich ein Satz an Evolutionsgleichungen, welche auf ebenso systematische Weise gelöst werden. Für die hierarchische Modellierung ergeben sich drei verschiedene Typen:

- Die freie Energie und die Fließfunktion werden um weitere unabhängige Variablen ergänzt, die jeweils zu einer zusätzlichen Evolutionsgleichung führen.
- Die einzelnen Bestandteile der freien Energie und der Fließfunktion werden in ihrer Qualität hierarchisch modelliert. So kann die Fließfunktion isotrop oder anisotrop sein. Das Schädigungspotential kann linear oder quadratisch sein.
- Die inneren Variablen werden in ihrer Dimension reduziert. So wird der Schädigungstensor zweiter Stufe \mathbf{B} durch einen Skalar ersetzt. Statt des unsymmetrischen plastischen Deformationsgradienten \mathbf{F}^p wird der symmetrische Tensor \mathbf{C}^e als innere Variable verwendet.

Die räumlich unstetigen inneren Variablen neigen zur netzabhängigen Instabilität, weshalb erst durch zusätzliche nicht-lokale Methoden ein brauchbares Ergebnis erzielt wird.

3.1 Hierarchie aus Modelleigenschaften

Die freie Energie Ψ (1.7) und die Fließfunktion ϕ (C.137) können von weiteren inneren Variablen abhängen. Naheliegender bieten sich hier die kinematische Verfestigung α^k und die Schädigung \mathbf{B} an. Auf diese Weise entsteht eine Hierarchie von Modellen, wobei jedes Modell durch eine bestimmte Kombination von Eigenschaften gekennzeichnet ist. Diese grundsätzlich offene Hierarchie von Modellen wird systematisch formuliert. Innerhalb dieses Konzepts sind alle inneren Variablen unstetig im Raum.

Es wird die freie Energie um das isotrope Verfestigungspotential \mathcal{H} (C.140) und das kinematische Verfestigungspotential \mathcal{I} (C.143) ergänzt. Die elastische Energie \bar{W} (1.14) erhält als weiteres Argument die Schädigung \mathbf{B} :

$$\Psi(\mathbf{C}^e, \mathbf{B}, \alpha, \alpha^k) = \bar{W}(\mathbf{C}^e, \mathbf{B}) + \mathcal{H}(\alpha) + \mathcal{I}(\alpha^k). \quad (3.1)$$

Aus der Ungleichung der Dissipation $\mathcal{D}_{int} = \frac{1}{2} \mathbf{S} : \dot{\mathbf{C}} - \dot{\Psi}$ folgen die konjugierten Variablen

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{S}} &= 2\partial_{\mathbf{C}^e} \bar{W}, \\ \mathbf{\Delta} &= -\partial_{\mathbf{B}} \bar{W}, \\ \mathbf{Q}^k &= -\partial_{\alpha^k} \mathcal{I}, \\ q &= -d_{\alpha} \mathcal{H}(\alpha), \\ \mathcal{D}_{int} &= \mathbf{\Sigma} : \mathbf{L}^p + q\dot{\alpha} + \mathbf{Q}^k : \dot{\alpha}^k + \mathbf{\Delta} : \dot{\mathbf{B}} \geq 0. \end{aligned} \quad (3.2)$$

Die Fließfunktion (C.137),

$$\phi = I_2 \left(\text{dev} \left[\mathbf{\Sigma} - \mathbf{Q}^k \right] \right) + \beta_{AF} I_2(\mathbf{Q}^k) - n_{\phi}^2 y^2(\Theta, \alpha) + \varphi(\mathbf{\Delta}, \mathbf{B}) \leq 0, \quad (3.3)$$

erlaubt ebenfalls eine weitere Modellierung. Der zweite Term bewirkt die nach Armstrong-Frederick

benannte sättigende kinematische Verfestigung. $\varphi(\mathbf{\Delta}, \mathbf{B})$ ist das Schädigungspotential. $\hat{\phi}$ kann weiterhin isotrop oder anisotrop sein. Aus der Minimierung des Lagrange-Funktional $\mathcal{L} = -\mathcal{D}_{int} + \gamma\phi$ ergeben sich die Evolutionsgleichungen

$$\mathbf{L}^p = \gamma\partial_\Sigma\phi, \quad \dot{\alpha} = \gamma\partial_q\phi, \quad \dot{\mathbf{B}} = \gamma\partial_\Delta\phi, \quad \dot{\alpha}^k = \gamma\partial_{Q^k}\phi. \quad (3.4)$$

Die Kuhn-Tucker-Bedingungen treten hinzu:

$$\phi \leq 0, \quad \gamma \geq 0, \quad \phi\gamma = 0. \quad (3.5)$$

3.2 Hierarchie aus Isotropie und Anisotropie

Ist sowohl die elastische Energie \bar{W} (1.14) als auch die Fließfunktion ϕ (C.137) isotrop, so kommutieren Σ und \mathbf{C}^e (C.9). In diesem Spezialfall der isotropen Elastoplastizität kann die Diskretisierung in der Basis der Hauptachsen (C.18) erfolgen. Diese Formulierung wird in Abschnitt B ausgeführt. Die Kommutation bewirkt, dass der plastische Spin \mathbf{W}^p (C.42)₂ verschwindet. Daraus folgt $\mathbf{D}^p = \text{sym}[\mathbf{C}^e\mathbf{L}^p] = \mathbf{C}^e\mathbf{L}^p$ (C.42)₁. Einsetzen von \mathbf{D}^p und der Evolutionsgleichung $\mathbf{L}^p = \gamma\partial_\Sigma\phi$ (3.4)₁ in $\dot{\mathbf{C}} = \mathbf{F}^{pT} [\dot{\mathbf{C}}^e + 2\mathbf{D}^p] \mathbf{F}^p$ (C.43) und Umstellen nach $\dot{\mathbf{C}}^e$ führt auf die Evolutionsgleichung

$$\dot{\mathbf{C}}^e = \mathbf{F}^{p-T} (\mathbf{C}^e) \dot{\mathbf{C}} \mathbf{F}^{p-1} (\mathbf{C}^e) - 2\mathbf{C}^e \gamma \partial_\Sigma \phi. \quad (3.6)$$

Als innere Variable wird nun \mathbf{C}^e verwendet. Es werden nun zwei Modellreduktionen durchgeführt: In der ersten Reduktion wird die Abhängigkeit $\mathbf{F}^p(\mathbf{C}^e)$ abgeschwächt, indem \mathbf{F}^p als Konstante betrachtet wird,

$$\dot{\mathbf{C}}^e = \mathbf{F}^{p-T} \dot{\mathbf{C}} \mathbf{F}^{p-1} - 2\mathbf{C}^e \gamma \partial_\Sigma \phi, \quad (3.7)$$

die am Ende eines Zeitschritts aktualisiert wird. Dadurch verändert sich der Charakter des numerischen Schemas hin zu einer Fixpunktiteration. In der zweiten Modellreduktion wird zur anisotropen Elastoplastizität zurückgekehrt. Damit gilt $\mathbf{W}^p \neq \mathbf{0}$. Es wird nun jedoch als entscheidender Modellierungsschritt \mathbf{W}^p vernachlässigt. Die Symmetrie muss wieder eingefügt werden:

$$\dot{\mathbf{C}}^e = \mathbf{F}^{p-T} \dot{\mathbf{C}} \mathbf{F}^{p-1} - 2\text{sym}[\mathbf{C}^e \gamma \partial_\Sigma \phi]. \quad (3.8)$$

Damit ist das Modell für eine schwach ausgeprägte Anisotropie gerechtfertigt. Die Vorteile des Modells liegen in der Symmetrie der inneren Variablen und im vereinfachten Schema.

3.3 Diskretisierung der Evolutionsgleichungen

Die Evolutionsgleichungen (3.4) werden in der Zeit diskretisiert und als Residuum $\mathbf{R}_\omega = \mathbf{0}$ geschrieben. Neben der Modellreduktion (3.8) wird die Evolutionsgleichung $\mathbf{L}^p = \gamma\partial_\Sigma\phi$ (3.4)₁ in drei weiteren Varianten diskretisiert. Alle Varianten enthalten eine lineare Diskretisierung in der Zeit. Eine Hierarchie ergibt sich nicht trotz unterschiedlicher Ansätze und unterschiedlichem numerischen Aufwand.

Die Evolutionsgleichung $\dot{\mathbf{B}} = \gamma\partial_\Delta\phi$ (3.4)₃ wird mit einer linearen Approximation der Zeitableitung $\dot{\mathbf{B}} \approx (\mathbf{B}_{n+1} - \mathbf{B}_n)/\Delta t$ als Residuum geschrieben,

$$\mathbf{R}_B = \mathbf{B}_{n+1} - \mathbf{B}_n - \Delta\gamma\partial_\Delta\phi = \mathbf{0}. \quad (3.9)$$

Ebenso wird die Evolutionsgleichung $\dot{\alpha}^k = \gamma\partial_{Q^k}\phi$ diskretisiert.

Die Evolutionsgleichung $\dot{\alpha} = \gamma \partial_q \phi$ (3.4)₂ hat eine Ausnahmestellung und wird deshalb sofort diskretisiert, $\alpha_{n+1} - \alpha_n = \gamma \Delta t \partial_q \phi$. Für die spezielle Fließfunktion (C.136) lautet $\partial_q \phi = n_\phi$, für die allgemeine Fließfunktion (C.137) hingegen

$$\partial_q \phi(\alpha) = 2n_\phi^2 (\sigma_Y - q) = 2n_\phi^2 y(\Theta, \alpha). \quad (3.10)$$

In beiden Fällen ist das Inkrement des plastischen Multiplikators

$$\Delta \gamma = \gamma \Delta t = \frac{\alpha_{n+1} - \alpha_n}{\partial_q \phi(\alpha_*)} \quad (3.11)$$

mit der isotropen Verfestigung (und der Temperatur) gegeben.

Wenn das Schädigungspotential φ oder der Sättigungsterm in (C.137) unter das Quadrat geschrieben würden, so hinge $\partial_q \phi$ von weiteren Variablen als Θ und α ab. Damit wäre die Staffelung (s. Abschnitt 3.4) des lokalen Problems nicht mehr möglich.

3.3.1 Evolutionsgleichung direkt

Anstatt die Lösungsfunktion der Differentialgleichung $\dot{\mathbf{F}}^p = \gamma \partial_\Sigma \phi \mathbf{F}^p$ (3.13) zu bestimmen und diese dann zu diskretisieren, kann die Differentialgleichung direkt diskretisiert werden:

$$\mathbf{R}_{F^p} = \mathbf{F}_{n+1}^p - \mathbf{F}_n^p - \Delta \gamma \partial_\Sigma \phi \mathbf{F}_*^p = \mathbf{0}. \quad (3.12)$$

3.3.2 Mit Exponentialfunktion und F^p als innerer Variable

Die Evolutionsgleichung $L^p = \gamma \partial_\Sigma \phi$ (3.4)₁ mit L^p (C.41) wird in der Form

$$\dot{\mathbf{F}}^p = \gamma \partial_\Sigma \phi \mathbf{F}^p \quad (3.13)$$

geschrieben. Die Lösung (C.93) dieser Evolutionsgleichung lautet

$$\mathbf{F}^p(t_{n+\vartheta}) = \exp\left(\int_{t_n}^{t_{n+\vartheta}} \gamma(\tau) \partial_\Sigma \phi(\tau) d\tau\right) \mathbf{F}^p(t_n). \quad (3.14)$$

$\alpha(\tau) = \tau \alpha_{n+1} + (1 - \tau) \alpha_n$ ist gegeben. Die Diskretisierung des Integrals erfolgt, indem die Fließfunktion zum Zeitpunkt $t_{n+\vartheta}$ ausgewertet wird. Das diskrete Residuum lautet also

$$\mathbf{R}_{F^p} = \mathbf{F}_*^p - \exp(\Delta \gamma_* \partial_\Sigma \phi) \mathbf{F}_n^p = \mathbf{0}, \quad (3.15)$$

wobei $\Delta \gamma_* = (\alpha_* - \alpha_n) / \partial_q \phi(\alpha_*)$.

3.3.3 Mit Exponentialfunktion und C^e als innerer Variable

Zu (3.15) gibt es eine gleichwertige Alternative, in der statt \mathbf{F}^p die innere Variable \mathbf{C}^e ist. Dazu wird zuerst (3.15) in der Form $\mathbf{F}_*^p = \mathbf{e} \mathbf{F}_n^p$ geschrieben. Mit (C.29) folgt $\mathbf{F}_* = \mathbf{F}_*^e \mathbf{F}_*^p = \mathbf{F}_*^e \mathbf{e} \mathbf{F}_n^p$ und weiter $\mathbf{F}_* \mathbf{F}_n^{p-1} = \mathbf{F}_*^e \mathbf{e}$. $\mathbf{F}^{e*} := \mathbf{F}_* \mathbf{F}_n^{p-1}$ enthält gegebene Größen. Umstellen liefert $\mathbf{F}_*^e = \mathbf{F}^{e*} \mathbf{e}^{-1}$. Daraus ergibt sich die Gleichung $\mathbf{C}_*^e = \mathbf{e}^{-T} \mathbf{F}^{e*T} \mathbf{F}^{e*} \mathbf{e}^{-1} = \mathbf{e}^{-T} \mathbf{C}^{e*} \mathbf{e}^{-1}$ mit $\mathbf{C}^{e*} := \mathbf{F}^{e*T} \mathbf{F}^{e*} = \mathbf{F}_n^{p-T} \mathbf{C}_* \mathbf{F}_n^{p-1}$. Das Residuum lautet also

$$\mathbf{R}_{C^e} = \mathbf{C}_*^e - \mathbf{e}^{-T} \mathbf{C}^{e*} \mathbf{e}^{-1} = \mathbf{0}. \quad (3.16)$$

Diese Gleichung enthält keine Modellreduktion in Bezug auf (3.15). Im Gegensatz zur Modellierung (3.6), bei der die Abhängigkeit $\mathbf{F}^p(\mathbf{C}^e)$ unbekannt bleibt, ist $\mathbf{F}^p(\mathbf{C}^e) = \mathbf{e}(\mathbf{C}^e)\mathbf{F}_n^p$ hier gegeben.

3.3.4 Abspaltung des plastischen Spins

Es wird die Gleichung $\dot{\mathbf{C}} = \mathbf{F}^{pT} [\dot{\mathbf{C}}^e + 2\mathbf{D}^p] \mathbf{F}^p$ (C.43) nach $\mathbf{D}^p := \text{sym}[\mathbf{C}^e \mathbf{L}^p]$ (C.42) umgestellt und auch $\mathbf{W}^p := \text{skew}[\mathbf{C}^e \mathbf{L}^p]$ als weitere Gleichung hinzugefügt:

$$\begin{aligned} \text{sym}[\mathbf{C}^e \mathbf{L}^p] &= \frac{1}{2} \left(\mathbf{F}^{p-T} \dot{\mathbf{C}} \mathbf{F}^{p-1} - \dot{\mathbf{C}}^e \right) = \gamma \text{sym}[\mathbf{C}^e \partial_\Sigma \phi], \\ \text{asym}[\mathbf{C}^e \dot{\mathbf{F}}^p \mathbf{F}^{p-1}] &= \gamma \text{asym}[\mathbf{C}^e \partial_\Sigma \phi]. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Es wird nun nicht \mathbf{C}^e als innere Variable verwendet wie in Abschnitt 3.2, sondern stattdessen \mathbf{F}^p . Damit gibt es keine Modellreduktion in Bezug auf die Rotationen. Das Residuum lautet

$$\mathbf{R}_{F^p} = \begin{pmatrix} \mathbf{R}_{flow} \\ \mathbf{R}_{spin} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{F}_*^{p-T} (\mathbf{C}_{n+1} - \mathbf{C}_n) \mathbf{F}_*^{p-1} - (\mathbf{C}_{n+1}^e - \mathbf{C}_n^e) - 2\Delta\gamma \mathbf{N}_{\phi_S} \\ \text{axial} \left[\mathbf{C}_*^e (\mathbf{F}_{n+1}^p - \mathbf{F}_n^p) \mathbf{F}_*^{p-1} - \Delta\gamma \widehat{\mathbf{M}}_{W^p} \right] \end{pmatrix} = \mathbf{0}, \quad (3.18)$$

wobei $\mathbf{N}_{\phi_S} = \text{sym}[\mathbf{C}^e \partial_\Sigma \phi]$ und $\widehat{\mathbf{M}}_{W^p} = \text{asym}[\mathbf{C}^e \partial_\Sigma \phi]$.

3.3.5 Vernachlässigung des plastischen Spins

Es wird die Evolutionsgleichung (3.8) diskretisiert:

$$\dot{\mathbf{C}}^e = \mathbf{F}^{p-T} \dot{\mathbf{C}} \mathbf{F}^{p-1} - 2\gamma \text{sym}[\mathbf{C}^e \partial_\Sigma \phi]. \quad (3.19)$$

Als innere Variable wird nun \mathbf{C}^e verwendet. \mathbf{F}^p wird als Konstante modelliert. Die lineare Diskretisierung an der Stelle $n + \vartheta$ mit $\dot{\mathbf{C}}^e = \mathbf{C}_*^e - \mathbf{C}_n^e$ und $\dot{\mathbf{C}} = \mathbf{C}_* - \mathbf{C}_n$ lautet

$$\mathbf{C}_*^e = \mathbf{C}^{e*} - 2\Delta\gamma_* \text{sym}[\mathbf{C}_*^e \partial_\Sigma \phi] \quad (3.20)$$

mit der Konstanten $\mathbf{C}^{e*} = \mathbf{F}^{p-T} (\mathbf{C}_* - \mathbf{C}_n) \mathbf{F}^{p-1} + \mathbf{C}_n^e$ und mit $\Delta\gamma_* = (\alpha_* - \alpha_n) / \partial_q \phi(\alpha_*)$. Das Residuum lautet

$$\mathbf{R}_{C^e} = \mathbf{C}_*^e + 2\Delta\gamma_* \text{sym}[\mathbf{C}_*^e \partial_\Sigma \phi] - \mathbf{C}^{e*} = \mathbf{0}. \quad (3.21)$$

3.4 Systematische Lösung der lokalen Probleme

Es wurde gezeigt, dass sich je nach Modellierung und Diskretisierung eine Anzahl von Residuen ergibt, wobei neben \mathbf{R}_{F^p} oder \mathbf{R}_{C^e} für jede weitere innere Variable \mathbf{B} , α^k ... ein weiteres Residuum \mathbf{R}_B , \mathbf{R}_{α^k} ... (3.9) hinzutritt. Zusammen mit $\phi = 0$ (3.5) ist nun das lokale Problem gegeben. Im elastischen Fall vereinfacht sich die Rechnung (1.29). Deshalb ist mit dem lokalen Problem immer der plastische Fall gemeint.

Es wird nun gezeigt, dass sich das lokale Problem auf einheitliche Weise in einem zweistufig gestaffelten Newton-Verfahren lösen lässt. In Abschnitt 6.2.1 befindet sich weitere Darstellung in Matrix-Vektor-Schreibweise. In Abschnitt 6.2.3 wird eine Alternative mit einem einstufigen Newton-Verfahren beschrieben. Es werden die inneren Variablen in der Form

$$\boldsymbol{\omega} = (\mathbf{F}^p, \mathbf{B}, \alpha^k, \dots) \quad \text{bzw.} \quad \boldsymbol{\omega} = (\mathbf{C}^e, \mathbf{B}, \alpha^k, \dots) \quad (3.22)$$

zusammengefasst. Die Residuen werden in einen Vektor geschrieben,

$$\mathbf{R}_\omega = \begin{pmatrix} \mathbf{R}_{F^p} \text{ oder } \mathbf{R}_{C^e} \\ \mathbf{R}_B \\ \mathbf{R}_{\alpha^k} \end{pmatrix} = \mathbf{0}. \quad (3.23)$$

Als zweites Residuum tritt die Fließfunktion

$$R_\phi(\alpha) = \phi = 0 \quad (3.24)$$

hinzu. Für jeden Newton-Schritt auf der oberen Stufe zur Lösung von (3.24) ist zuvor (3.23) mit gegebenem $\Delta\gamma$ (3.11) zu lösen, wobei in diesem Newton-Verfahren auf der unteren Stufe zur Berechnung eines jeden Inkrements $\delta\omega = -(\partial_\omega \mathbf{R}_\omega)^{-1} \circ \mathbf{R}_\omega$ ein Gleichungssystem zu lösen ist, welches für $\omega = (\mathbf{F}^p, \mathbf{B}, \alpha^k)$ ausgeschrieben

$$\begin{pmatrix} \delta \mathbf{F}^p \\ \delta \mathbf{B} \\ \delta \alpha^k \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \partial_{F^p} \mathbf{R}_{F^p} & \partial_B \mathbf{R}_{F^p} & \partial_{\alpha^k} \mathbf{R}_{F^p} \\ \partial_{F^p} \mathbf{R}_B & \partial_B \mathbf{R}_B & \partial_{\alpha^k} \mathbf{R}_B \\ \partial_{F^p} \mathbf{R}_{\alpha^k} & \partial_B \mathbf{R}_{\alpha^k} & \partial_{\alpha^k} \mathbf{R}_{\alpha^k} \end{pmatrix}^{-1} \circ \begin{pmatrix} \mathbf{R}_{F^p} \\ \mathbf{R}_B \\ \mathbf{R}_{\alpha^k} \end{pmatrix} \quad (3.25)$$

lautet. Mit der Lösung ω , welche (3.23) erfüllt, wird nun das Inkrement $\delta\alpha = -(d_\alpha R_\phi)^{-1} R_\phi$ berechnet, wobei die Linearisierung

$$d_\alpha R_\phi = \partial_\alpha R_\phi + \partial_\omega R_\phi \circ d_\alpha \omega \quad (3.26)$$

lautet. Zur Berechnung von $d_\alpha \omega$ ist ein weiteres Gleichungssystem mit der Matrix aus (3.25) zu lösen,

$$d_\alpha \omega = -(\partial_\omega \mathbf{R}_\omega)^{-1} \circ \partial_\alpha \mathbf{R}_\omega, \quad (3.27)$$

wozu die vollständige Ableitung (C.128) verwendet wird. Diese darf angewendet werden, weil die Voraussetzung $\mathbf{R}_\omega(\omega) = \mathbf{0}$ erfüllt ist.

3.5 Algorithmisch konsistente Tangente

Die algorithmisch konsistente Tangente wurde in Abschnitt 1.5 eingeführt. In der Schreibweise (1.30) lautet sie

$$\frac{1}{2} \mathbb{C} = 2\partial_{CC}^2 \Psi + \mathbf{F}^p \circ \mathbf{F}^p \circ (\partial_C \bar{\mathbf{S}} + \partial_\omega \bar{\mathbf{S}} \circ d_C \omega + \mathbb{G} : d_C \mathbf{F}^p). \quad (3.28)$$

Es wurden bereits die Fälle $\omega = (\mathbf{F}^p, \mathbf{B}, \alpha^k, \dots)$ und $\omega = (\mathbf{C}^e, \mathbf{B}, \alpha^k, \dots)$ unterschieden. Es werden nun die vollständigen Ableitungen $d_C \omega$ für beide Fälle gemeinsam berechnet. Anschließend werden die Unterschiede erläutert, welche sich aus der Verwendung von \mathbf{F}^p oder \mathbf{C}^e als innerer Variable ergeben. Die folgende Herleitung findet sich in Abschnitt 6.2.2 in größerer Allgemeinheit. Dort erfolgen alle Operationen, die hier nur symbolisch dargestellt sind, als Matrix-Vektor-Operationen. $d_C \mathbf{F}^p$ bzw. $d_C \mathbf{C}^e$ und $d_C \mathbf{B}$ in (3.28) sind die ersten beiden Zeilen der vollständigen Ableitung

$$d_C \omega = \partial_C \omega \Big|_{\alpha=\text{konst.}} + d_\alpha \omega \Big|_{C=\text{konst.}} \otimes d_C \alpha \Big|_{\omega=\text{konst.}}. \quad (3.29)$$

Die einzelnen Terme werden über die vollständige Ableitung (C.128), $d_x \mathbf{y} = -[d_y \mathbf{f}]^{-1} \circ \partial_x \mathbf{f}$, erhalten. Voraussetzung dafür ist, dass die Residuen verschwinden, also $\mathbf{R}_\omega = \mathbf{0}$ (3.23) und $R_\phi = 0$

(3.24). Damit ist festgelegt, dass $\boldsymbol{\omega}$ und α die Lösung des lokalen Problems sein müssen. So ergibt sich die folgende erste Zeile mit den Entsprechungen $\mathbf{C} \rightarrow \mathbf{x}$, $\mathbf{R}_\omega \rightarrow \mathbf{f}$ und $\boldsymbol{\omega} \rightarrow \mathbf{y}$ aus (C.128):

$$\left. \begin{aligned} \partial_C \boldsymbol{\omega} \Big|_{\alpha=\text{konst.}} &= -[\partial_\omega \mathbf{R}_\omega]^{-1} \circ \partial_C \mathbf{R}_\omega \\ d_\alpha \boldsymbol{\omega} \Big|_{C=\text{konst.}} &= -[\partial_\omega \mathbf{R}_\omega]^{-1} \circ \partial_\alpha \mathbf{R}_\omega \\ d_C \alpha \Big|_{\omega=\text{konst.}} &= -[d_\alpha R_\phi]^{-1} d_C R_\phi \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} \text{Analogie: } \mathbf{C} \rightarrow \mathbf{x}, \quad \mathbf{R}_\omega \rightarrow \mathbf{f}, \quad \boldsymbol{\omega} \rightarrow \mathbf{y}, \\ \alpha \rightarrow \mathbf{x}, \quad \mathbf{R}_\omega \rightarrow \mathbf{f}, \quad \boldsymbol{\omega} \rightarrow \mathbf{y}, \\ \mathbf{C} \rightarrow \mathbf{x}, \quad R_\phi \rightarrow \mathbf{f}, \quad \alpha \rightarrow \mathbf{y}. \end{array} \quad (3.30)$$

In der ersten Zeile muß eine Folge von Gleichungssystemen gelöst werden, aus deren Lösungen sich $\partial_C \boldsymbol{\omega}$ zusammensetzt. In der zweiten Zeile ist $d_\alpha \boldsymbol{\omega}$ bereits als Lösung des Gleichungssystems (3.27) gegeben. In der dritten Zeile ist $d_\alpha R_\phi$ (3.26) bekannt.

3.5.1 \mathbf{F}^{P} als innere Variable

Wenn \mathbf{F}^{P} als innere Variable verwendet wird, so gilt in (3.30)₃

$$\begin{aligned} d_C R_\phi &= d_{C^e} R_\phi : [\partial_C \mathbf{C}^e + \partial_{F^{\text{P}}} \mathbf{C}^e : \partial_C \mathbf{F}^{\text{P}}] + \partial_B R_\phi : \partial_C \mathbf{B} + \partial_{\alpha^k} R_\phi : \partial_C \alpha^k \\ &= d_{C^e} R_\phi : \partial_C \mathbf{C}^e + \partial_\omega R_\phi \circ \partial_C \boldsymbol{\omega} \\ &= \partial_C \Big|_{\omega=\text{konst.}} R_\phi + \partial_\omega R_\phi \circ \partial_C \boldsymbol{\omega}, \end{aligned} \quad (3.31)$$

wobei $\partial_C \boldsymbol{\omega}$ (3.30)₁ bekannt ist. $\partial_C \mathbf{C}^e$ (C.39) und $\partial_{F^{\text{P}}} \mathbf{C}^e$ (C.119) sind gegeben. $d_C \mathbf{F}^{\text{P}}$ in (3.28) ist die erste Zeile von $d_C \boldsymbol{\omega}$.

3.5.2 \mathbf{C}^e als innere Variable

Wenn \mathbf{C}^e als innere Variable verwendet wird, so gilt $\partial_C R_\phi = \mathbf{0}$ und damit in (3.30)₃

$$d_C R_\phi = \partial_\omega R_\phi \circ \partial_C \boldsymbol{\omega}. \quad (3.32)$$

Die vollständige Ableitung $d_C \mathbf{F}^{\text{P}}$ in (3.28) muss für das Residuum (3.16) aus $\mathbf{F}^{\text{P}} = \exp[\Delta \gamma d_\Sigma \phi] \mathbf{F}_n^{\text{P}}$ bestimmt werden,

$$d_C \mathbf{F}^{\text{P}} = \partial_\omega \mathbf{F}^{\text{P}} \circ d_C \boldsymbol{\omega} + \partial_\alpha \mathbf{F}^{\text{P}} \otimes d_C \alpha. \quad (3.33)$$

Für das Residuum (3.21) ist \mathbf{F}^{P} eine Konstante und damit $d_C \mathbf{F}^{\text{P}} = \mathbf{0}$.

3.6 Schädigung

Die Schädigung ist in mehrfacher Hinsicht für eine hierarchische Modellierung interessant:

- Bei der Reduktion der tensor- zur skalarwertigen Schädigung wird der Schädigungstensor zweiter Stufe aufgespalten, so dass ein konstanter Tensor und ein Skalar als neue innere Variable entsteht.
- Die elastische Energie und das Schädigungspotential können in linearer, quadratischer oder höherer Potenz von der Schädigungsvariable abhängen. Dies ist ein Beispiel dafür, wie einzelne Terme der freien Energie und der Fließfunktion in unterschiedlicher Qualität modelliert werden können und dadurch eine Hierarchie von Modellen bilden.
- Das Material wird nur in kleinen, im Voraus unbekanntem Bereichen stark geschädigt. Eine solche Lokalisierung eignet sich besonders für eine adaptive Modellwahl.

- Die Schädigung verlangt nach weiteren Modellen bei Materialerweichung (s. Abschnitt 4) und Materialversagen. Das macht sie zu einem aussichtsreichen Anwendungsgebiet.

3.6.1 Tensorwertige Schädigung

Die elastische Energie $\bar{W}(\mathbf{C}^e)$ (1.14) erhält als weiteres Argument den symmetrischen Schädigungstensor zweiter Stufe \mathbf{B} . Aus der elastischen Energie $\bar{W}(\mathbf{C}^e, \mathbf{B})$ ergibt sich die konjugierte Schädigungsvariable $\Delta = -\partial_{\mathbf{B}}\bar{W}(\mathbf{C}^e, \mathbf{B})$ (3.2)₂. Wird stattdessen die skalarwertige Schädigungsvariable b verwendet, so lautet die elastische Energie $\bar{W}(\mathbf{C}^e, b)$ und die konjugierte Schädigungsvariable $\delta = -\partial_b\bar{W}(\mathbf{C}^e, b)$. Dazu gehören die Schädigungspotentiale $\varphi(\Delta, \mathbf{B})$ und $\varphi(\delta, b)$.

Die quadratische elastische Energie $\bar{W}(\mathbf{C}^e)$ (C.64) ist eine Funktion der ersten beiden Basisinvarianten $I_k(\mathbf{E}^e)$ (C.14). Die isotrope deviatorische Energie $\bar{W}(\tilde{\mathbf{C}}^e)$ (1.35) ist eine Funktion der zweiten Basisinvarianten $I_2(\tilde{\mathbf{E}}^e)$. Die elastische Energie $\bar{W}(\mathbf{C}^e, \mathbf{B})$ ist eine Funktion der Basisinvarianten $I_k(\mathbf{E}^e, \mathbf{B})$ (Tab. 3.1), welche aus den ersten drei Basisinvarianten $I_i(\mathbf{E}^e)$ durch eine Erweiterung hervorgehen. Mit $\mathbf{B} = \mathbf{1}$ ergeben sich wieder die ersten drei Basisinvarianten. Es ist eine Frage der

$W(\mathbf{A}) = W(I_1, I_2, I_3)$		$W(\mathbf{A}, \mathbf{P}) = W(I_1, \dots, I_{15})$		
		Ersetzung von I_1, I_2, I_3		
		linear	quadratisch	kubisch
$I_1 = \mathbf{1} : \mathbf{A}$		$I_7 = \mathbf{P} : \mathbf{A}$	$I_9 = [\mathbf{P}\mathbf{A}] : \mathbf{P}$	$I_{13} = [\mathbf{P}\mathbf{A}\mathbf{P}] : \mathbf{P}$
$I_2 = \mathbf{1} : \mathbf{A}^2$		$I_8 = [\mathbf{A}\mathbf{P}] : \mathbf{A}$	$I_{10} = [\mathbf{A}\mathbf{P}\mathbf{A}] : \mathbf{P}$	$I_{14} = [\mathbf{A}\mathbf{P}\mathbf{A}\mathbf{P}] : \mathbf{P}$
$I_3 = \mathbf{1} : \mathbf{A}^3$		$I_{11} = [\mathbf{A}\mathbf{P}\mathbf{A}] : \mathbf{A}$	$I_{12} = [\mathbf{P}\mathbf{A}\mathbf{P}\mathbf{A}] : \mathbf{A}$	$I_{15} = [\mathbf{P}\mathbf{A}\mathbf{P}\mathbf{A}\mathbf{P}] : \mathbf{A}$

Tabelle 3.1: Der Einheitstensor $\mathbf{1}$ in I_1 , I_2 und I_3 kann durch \mathbf{P} in beliebiger Potenz ersetzt werden. Dieses ist bis zur dritten Potenz in der Tabelle oben dargestellt. Für $\mathbf{P} = \mathbf{1}$ ergibt sich wieder die linke Spalte. Der sphärische Tensor $\mathbf{P} = p\mathbf{1}$ bewirkt, dass die ersten drei Basisinvarianten in der linken Spalte entsprechend dem Polynomgrad der Ersetzung rechts skaliert werden, also z. B. $I_{10}(\mathbf{A}, p\mathbf{1}) = p^2 I_2(\mathbf{A})$.

Modellierung, ob \mathbf{B} in linearer, quadratischer oder kubischer Potenz auftritt. Der ungeschädigte Zustand liegt mit $\mathbf{B} = \mathbf{1}$ vor, während $\det(\mathbf{B}) = 0$ die Zerstörung bedeutet. Dieser Fall muß numerisch ausgeschlossen werden, weil sonst die Elliptizität verloren geht. Ein Ansatz hierzu ist die Parametrisierung, s. Abschnitt 3.6.4.

3.6.2 Übergang von tensor- zu skalarwertiger Schädigung

Es soll nun von der tensor- zur skalarwertigen Schädigung gewechselt werden, ohne dass dabei die bisher berechnete Schädigung verloren geht. Dazu wird \mathbf{B} in einen konstanten unimodularen Tensor $\tilde{\mathbf{B}}$ mit der Eigenschaft $\det \tilde{\mathbf{B}} = 1$ und die skalarwertige Schädigungsvariable b aufgespalten,

$$\mathbf{B} = b\tilde{\mathbf{B}}, \quad \tilde{\mathbf{B}} = \text{konst.}, \quad b = (\det \mathbf{B})^{\frac{1}{n_{dim}}}. \quad (3.34)$$

Bei dem Wechsel von \mathbf{B} zu b bleibt die tensorwertige Schädigung in der Konstanten $\tilde{\mathbf{B}}$ gespeichert, und es ändert sich fortan nur noch der skalarwertige Anteil b . Bei einem Wechsel zurück wird \mathbf{B} wieder zusammengesetzt. Für die elastische Energie mit tensorwertiger Schädigung wird die Bezeichnung $W_B = \bar{W}(\mathbf{C}^e, \mathbf{B})$ eingeführt. Die elastische Energie nach dem Abstieg heißt ab jetzt $W_b = \bar{W}(\mathbf{C}^e, \tilde{\mathbf{B}}, b)$. $\delta = -\partial_b W_b$ kann aus W_B berechnet werden, wenn $\tilde{\mathbf{B}}$ konstant ist,

$$\delta = -\partial_B W_B : \partial_b \mathbf{B} = \mathbf{\Delta} : \tilde{\mathbf{B}}. \quad (3.35)$$

Die Probe zeigt, dass sich $\mathbf{\Delta}$ in der Form

$$\mathbf{\Delta} = \frac{1}{n_{dim}} \delta \tilde{\mathbf{B}}^{-1} \quad (3.36)$$

zerlegt. Es werden nun $\mathbf{\Delta}$ und \mathbf{B} in ihrer Zerlegung in das Schädigungspotential $\varphi(\mathbf{\Delta}, \mathbf{B})$ eingesetzt, welches gleich dem Potential für die skalarwertige Schädigung $\varphi^{SD}(\delta, b, \tilde{\mathbf{B}})$ ist. Als erstes werden Schädigungspotentiale betrachtet, welche symmetrisch in $\mathbf{\Delta}$ und \mathbf{B} sind. Dabei neutralisiert sich $\tilde{\mathbf{B}}$, und es gilt $\varphi^{SD}(\delta, b) = \varphi^{SD}(\delta, b, \tilde{\mathbf{B}})$:

$$\begin{aligned} \varphi(\mathbf{\Delta}, \mathbf{B}) &= I_{15}(\mathbf{\Delta}, \mathbf{B}) = [\mathbf{\Delta} \mathbf{B} \mathbf{\Delta} \mathbf{B} \mathbf{\Delta}] : \mathbf{B} = \frac{\delta^3 b^3}{n_{dim}^3} \left[\tilde{\mathbf{B}}^{-1} \tilde{\mathbf{B}} \tilde{\mathbf{B}}^{-1} \tilde{\mathbf{B}} \tilde{\mathbf{B}}^{-1} \right] : \tilde{\mathbf{B}} = \frac{\delta^3 b^3}{n_{dim}^2} = \varphi^{SD}(\delta, b), \\ \varphi(\mathbf{\Delta}, \mathbf{B}) &= I_{10}(\mathbf{\Delta}, \mathbf{B}) = [\mathbf{\Delta} \mathbf{B} \mathbf{\Delta}] : \mathbf{B} = \frac{\delta^2 b^2}{n_{dim}^2} \left[\tilde{\mathbf{B}}^{-1} \tilde{\mathbf{B}} \tilde{\mathbf{B}}^{-1} \right] : \tilde{\mathbf{B}} = \frac{\delta^2 b^2}{n_{dim}} = \varphi^{SD}(\delta, b), \\ \varphi(\mathbf{\Delta}, \mathbf{B}) &= I_7(\mathbf{\Delta}, \mathbf{B}) = \mathbf{\Delta} : \mathbf{B} = \frac{\delta b}{n_{dim}} \tilde{\mathbf{B}}^{-1} : \tilde{\mathbf{B}} = \delta b = \varphi^{SD}(\delta, b). \end{aligned} \quad (3.37)$$

Für unsymmetrische Schädigungspotentiale hebt sich $\tilde{\mathbf{B}}$ nicht heraus,

$$\begin{aligned} \varphi(\mathbf{\Delta}, \mathbf{B}) &= I_8(\mathbf{\Delta}, \mathbf{B}) = [\mathbf{\Delta} \mathbf{B}] : \mathbf{\Delta} = \frac{\delta^2 b}{n_{dim}^2} \left[\tilde{\mathbf{B}}^{-1} \tilde{\mathbf{B}} \right] : \tilde{\mathbf{B}}^{-1} = \frac{\delta^2 b}{n_{dim}^2} \text{tr} \left[\tilde{\mathbf{B}}^{-1} \right] \\ &= \frac{\delta^2 b}{n_{dim}^2} I_1 \left(\tilde{\mathbf{B}}^{-1} \right) = \varphi^{SD}(\delta, b, \tilde{\mathbf{B}}), \\ \varphi(\mathbf{\Delta}, \mathbf{B}) &= I_8(\mathbf{\Delta}, \mathbf{B}^{-1}) = [\mathbf{\Delta} \mathbf{B}^{-1}] : \mathbf{\Delta} = \frac{\delta^2}{bn_{dim}^2} \left[\tilde{\mathbf{B}}^{-1} \tilde{\mathbf{B}}^{-1} \right] : \tilde{\mathbf{B}}^{-1} = \frac{\delta^2}{bn_{dim}^2} \text{tr} \left[\tilde{\mathbf{B}}^{-3} \right] \\ &= \frac{\delta^2}{bn_{dim}^2} I_3 \left(\tilde{\mathbf{B}}^{-1} \right) = \varphi^{SD}(\delta, b, \tilde{\mathbf{B}}). \end{aligned} \quad (3.38)$$

3.6.3 Skalarwertige Schädigung

Im Fall der reinen skalarwertigen Schädigung gilt $\tilde{\mathbf{B}} = \mathbf{1}$ und damit $\mathbf{B} = b\mathbf{1}$. Im symmetrischen Fall (3.37) ändert sich nichts, im unsymmetrischen Fall (3.38) lauten die Potentiale nun

$$\begin{aligned} \varphi(\mathbf{\Delta}, \mathbf{B}) &= I_8(\mathbf{\Delta}, \mathbf{B}) = \frac{\delta^2 b}{n_{dim}} = \varphi^{SD}(\delta, b), \\ \varphi(\mathbf{\Delta}, \mathbf{B}) &= I_8(\mathbf{\Delta}, \mathbf{B}^{-1}) = \frac{\delta^2}{bn_{dim}} = \varphi^{SD}(\delta, b). \end{aligned} \quad (3.39)$$

3.6.1 Bemerkung. Das Schädigungspotential (3.39)₂ kann bei LEMAITRE & DESMORAT [34], (1.126) gefunden werden. In der originalen Schreibweise lautet es

$$F_D = \frac{S}{(s+1)(1-D)} \left(\frac{Y}{S} \right)^{s+1}, \quad (3.40)$$

wobei hier $\delta = Y$, $b = 1 - D$ und der Parameter $s = 1$ gewählt wurde:

$$\varphi(\delta, b) = \frac{S}{(s+1)b} \left(\frac{\delta}{S}\right)^{s+1} = \frac{S^{-s}}{(s+1)} \frac{\delta^{s+1}}{b} = \frac{n_{\text{dim}}}{2S} \frac{\delta^2}{n_{\text{dim}} b}. \quad (3.41)$$

3.6.4 Parametrisierung

Mit einer Parametrisierung der Schädigung soll dem Zustand des vollständigen Materialversagens beliebig nahegekommen werden, ohne ihn tatsächlich zu erreichen. Die numerischen Probleme, die so vermieden werden sollen, treten jedoch an anderer Stelle auf. So wird die Ableitung nach dem Parameter numerisch zu klein. Die bessere Lösung besteht darin, ein Modell zu verwenden, das ein zerstörtes Material beschreiben kann.

Parametrisierung der skalarwertigen Schädigung

Der Fall $b \leq 0$ darf aus numerischen Gründen nicht eintreten. Deshalb wird b so parametrisiert, dass $b(\xi) > 0$ für $\xi \in \mathbb{R}$, also z. B. $b(\xi) = \exp(-a\xi)$ mit dem konstanten Parameter $a > 0$. Der Fall $b > 1$ für $\xi < 0$ ist zwar unphysikalisch, jedoch numerisch unproblematisch. Mit dem Gleichungssystem (3.25) soll das Inkrement δb berechnet werden. Mit $\xi = -\log(b)/a$ folgt die Ersetzung

$$\delta b = b'(\xi)\delta\xi. \quad (3.42)$$

Mit der Lösung $\delta\xi$ wird ξ aktualisiert und damit auch $b(\xi)$.

Parametrisierung der tensorwertigen Schädigung

Für die tensorwertige Schädigung könnte analog mit der Exponentialabbildung (C.90) in der Form $\mathbf{B}(\Xi) = \exp(-a\Xi)$ parametrisiert werden, was jedoch teuer ist. Stattdessen wird die Zerlegung $\mathbf{B} = b\tilde{\mathbf{B}}$ verwendet:

Der symmetrische Tensor $\tilde{\mathbf{B}}$ hat sechs Komponenten, aufgrund der Bedingung $\det(\tilde{\mathbf{B}}) = 1$ jedoch nur fünf Freiheitsgrade. Als sechster Freiheitsgrad wird $\Xi_6 = \xi$ hinzugefügt:

$$\mathbf{B}(\Xi) = b(\Xi_6)\tilde{\mathbf{B}}(\Xi_1, \Xi_2, \dots, \Xi_5) \quad (3.43)$$

Damit kann \mathbf{B} analog zu (3.42) mit dem symmetrischen Tensor Ξ parametrisiert werden,

$$\delta\mathbf{B} = \frac{d\mathbf{B}(\Xi)}{d\Xi} : \delta\Xi. \quad (3.44)$$

3.7 Anisotrope Funktionen

Jede isotrope skalarwertige Funktion in der freien Energie (3.1) und in der Fließfunktion (C.137) kann durch eine anisotrope Funktion $\bar{\psi}$ (C.49) ersetzt werden. Es geht also um die elastische Energie \bar{W} , das kinematische Verfestigungspotential \mathcal{I} , die beiden zweiten Basisinvarianten in der Fließfunktion (C.137) und das Schädigungspotential φ .

Ein besonderer Fall sind dabei die Funktionen, die bereits zwei Argumente haben, nämlich \bar{W} und φ . Es wird nun das Produkt der beiden Argumente den ersten drei Basisinvarianten übergeben. Am Beispiel der isotropen elastischen Energie zeigt sich,

$$\begin{aligned}
 I_1(\mathbf{E}^e \mathbf{B}) &= \operatorname{tr} [\mathbf{E}^e \mathbf{B}] &= I_7(\mathbf{E}^e, \mathbf{B}), \\
 I_2(\mathbf{E}^e \mathbf{B}) &= \operatorname{tr} [(\mathbf{E}^e \mathbf{B})^2] = \operatorname{tr} [\mathbf{E}^e \mathbf{B} \mathbf{E}^e \mathbf{B}] &= I_{10}(\mathbf{E}^e, \mathbf{B}), \\
 I_3(\mathbf{E}^e \mathbf{B}) &= \operatorname{tr} [(\mathbf{E}^e \mathbf{B})^3] = \operatorname{tr} [\mathbf{E}^e \mathbf{B} \mathbf{E}^e \mathbf{B} \mathbf{E}^e \mathbf{B}] &= I_{15}(\mathbf{E}^e, \mathbf{B}),
 \end{aligned} \tag{3.45}$$

dass dies nach Tabelle 3.1 eine Einschränkung auf die Basisinvarianten I_7 , I_{10} und I_{15} bedeutet. Mit dieser Einschränkung kann nun die anisotrope Funktion $\bar{W}(\mathbf{C}^e, \mathbf{B}) = \bar{\psi}(\mathbf{E}^e \mathbf{B})$ (C.49) verwendet werden. Gleiches gilt für $\varphi(\mathbf{\Delta}, \mathbf{B}) = \bar{\psi}(\mathbf{\Delta} \mathbf{B})$. Zu beachten ist der Verlust der Symmetrie (C.9).

3.7.1 Bemerkung. *Am Beispiel des Produkts $\mathbf{X} = \mathbf{E} \mathbf{B}$ wird gezeigt, wie sich die ersten und zweiten Ableitungen ergeben: Aus*

$$(d_E \mathbf{X})_{ijpq} = \frac{1}{2} (\delta_{ip} B_{qj} + \delta_{iq} B_{pj}), \quad (d_B \mathbf{X})_{ijpq} = \frac{1}{2} (E_{ip} \delta_{jq} + E_{iq} \delta_{jp}) \tag{3.46}$$

folgen die ersten Ableitungen,

$$d_E \bar{\psi}(\mathbf{X}) = d_X \bar{\psi} : d_E \mathbf{X}, \quad d_B \bar{\psi}(\mathbf{X}) = d_X \bar{\psi} : d_B \mathbf{X}, \tag{3.47}$$

und die zweiten:

$$\begin{aligned}
 d_{BB}^2 \bar{\psi}(\mathbf{X}) &= (d_{XX}^2 \bar{\psi} : d_B \mathbf{X}) : d_B \mathbf{X}, \\
 d_{EE}^2 \bar{\psi}(\mathbf{X}) &= (d_{XX}^2 \bar{\psi} : d_E \mathbf{X}) : d_E \mathbf{X}, \\
 d_{EB}^2 \bar{\psi}(\mathbf{X}) &= (d_{XX}^2 \bar{\psi} : d_B \mathbf{X}) : d_E \mathbf{X}.
 \end{aligned} \tag{3.48}$$

Anisotrope Funktionen ermöglichen eine Hierarchie in den Daten. So kann z. B. ein Material mit kubischer Symmetrie lokal durch ein isotropes Material approximiert werden. Der Unterschied im numerischen Aufwand ist jedoch vergleichsweise gering.

4 Enhanced-Gradient-Formulierung

In der *Enhanced-Gradient*-Formulierung können auf jeder einzelnen Zelle des FE-Netzes die Freiheitsgrade zusätzlicher Felder hinzugefügt und wieder entfernt werden. Jedes dieser Felder entspricht einer inneren Variablen. Je nach Anzahl der aktivierten Felder ergeben sich die Modelle einer Hierarchie. Dabei gibt es auch für ein einzelnes Feld eine zweistufige Hierarchie von Modellen: Das Basismodell erhöht die Stetigkeit der zugeordneten inneren Variablen. Es handelt sich also nur um eine verbesserte Diskretisierung. Das Referenzmodell hingegen glättet aufgrund von Diffusion die Lösung und hat damit eine zusätzliche mechanische Eigenschaft.

Das Konzept der räumlichen Unstetigkeit der inneren Variablen wird in extremen Situationen ungenügend. So kommt es zu netzabhängigen Lösungen bei Materialerweichung infolge Schädigung oder bei Scherbandbildung. Die Ursache liegt im Verlust von Elliptizität. Das Problem ließe sich mit räumlich stetigen inneren Variablen lösen. Nun hat die räumliche Unstetigkeit jedoch auch Vorteile:

- Die inneren Variablen werden aus dem Gradienten der Verschiebung \mathbf{u} berechnet, welche gewöhnlich nur einmal schwach differenzierbar ist, womit bereits der Gradient räumlich unstetig ist. Es ist also richtig, die inneren Variablen als unstetig aufzufassen.
- Die räumliche Unstetigkeit erlaubt es, die lokalen Probleme in jedem Quadraturpunkt einzeln und punktweise zu lösen. Es sind also keine schwachen Formulierungen innerhalb der lokalen Probleme erforderlich.
- Die Zerlegung des Gebietes in voneinander unabhängige elastische und plastische Bereiche ist möglich.
- Gerade bei aufwendigen Modellen bedeutet die Zerlegung in lokale Probleme auch die Zerlegung des numerischen Aufwands. Ein zu großes Gleichungssystem wird so vermieden.

Es sollen nun alle diese Vorteile erhalten bleiben, und trotzdem soll die räumliche Stetigkeit der inneren Variablen erhöht werden. Dazu kann zu jeder inneren Variablen $\mathbf{C}^e, \mathbf{B}, \dots$ eine räumlich stetige (nicht-lokale) Variable $\bar{\mathbf{C}}^e, \bar{\mathbf{B}}, \dots$ hinzugefügt werden. Ob dies auch für die innere Variable \mathbf{F}^p gilt, wird in Abschnitt 4.4 diskutiert. Im Rahmen der *Enhanced-Gradient*-Formulierung wird die freie Energie Ψ (4.1) um zwei Potentiale erweitert. Die folgende Formulierung beruht auf der Forderung nach Stationarität $W_{int}(\mathbf{u}) - W_{ext}(\mathbf{u}) \rightarrow \text{stat.}$ (1.9).

4.1 Nicht-lokale Potentiale

Das nicht-lokale Penalty-Potential Ψ_{plt}^{nloc} bewirkt die Übereinstimmung beider paarweiser Variablen im Rahmen einer Penalty-Formulierung. Das nicht-lokale Gradienten-Potential Ψ_{grad}^{nloc} beeinflusst die Stärke der Glättung. Beide Potentiale ergänzen die freie Energie (1.7), (3.1),

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{C}, \alpha, \mathbf{C}^e, \mathbf{B}, \alpha^k, \bar{\mathbf{C}}^e, \bar{\mathbf{B}}) &= \bar{W}(\mathbf{C}^e, \mathbf{B}) + \mathcal{I}(\alpha^k) + \mathcal{H}(\alpha) \\ &\quad + \Psi_{grad}^{nloc}(\bar{\mathbf{C}}^e, \mathbf{C}) + \Psi_{plt}^{nloc}(\mathbf{C}^e, \bar{\mathbf{C}}^e) \\ &\quad + \Psi_{grad}^{nloc}(\bar{\mathbf{B}}, \mathbf{B}) + \Psi_{plt}^{nloc}(\mathbf{B}, \bar{\mathbf{B}}). \end{aligned} \quad (4.1)$$

Grundsätzlich kann zu jeder inneren Variablen eine nichtlokale Variable hinzugefügt werden. Dank

homogener Neumann-Randbedingungen $\partial_n \bar{\mathbf{B}} = \mathbf{0}$ kann die nichtlokale Variable zellweise hinzugeschaltet werden, wodurch eine hierarchische, adaptive Modellierung ermöglicht wird.

Das nichtlokale Gradienten-Potential

$$\begin{aligned}\Psi_{grad}^{nloc}(\bar{\mathbf{B}}, \mathbf{C}) &= \frac{c_1}{2} \nabla \bar{\mathbf{B}} \cdot \nabla \bar{\mathbf{B}} = \frac{c_1}{2} \text{GRAD}[\bar{\mathbf{B}}] \cdot \mathbf{C}^{-1} \cdot \text{GRAD}[\bar{\mathbf{B}}], \\ &= \frac{c_1}{2} \frac{d\bar{B}_{ij}}{dx_k} \frac{d\bar{B}_{ij}}{dx_k} = \frac{c_1}{2} \frac{d\bar{B}_{ij}}{dX_a} \frac{dX_a}{dx_k} \frac{d\bar{B}_{ij}}{dX_b} \frac{dX_b}{dx_k} = \frac{c_1}{2} \frac{d\bar{B}_{ij}}{dX_a} F_{ak}^{-1} F_{kb}^{-T} \frac{d\bar{B}_{ij}}{dX_b}\end{aligned}\quad (4.2)$$

enthält den Gradienten in der Momentankonfiguration $\nabla \mathbf{B} = d_x \mathbf{B} = d_X \mathbf{B} \cdot d_x \mathbf{X}$, weil die Glättung in Bezug auf das verformte Gebiet erfolgen muß. In der Formulierung in Bezug auf die Referenzkonfiguration, welche in dieser gesamten Arbeit verwendet wird, entsteht so die Abhängigkeit von \mathbf{C} . Die Glättung wirkt wie beim Laplace-Operator. Sie wird durch den Parameter c_1 gewichtet. Das nichtlokale Penalty-Potential

$$\Psi_{plt}^{nloc}(\mathbf{B}, \bar{\mathbf{B}}) = \frac{c_2}{2} |\mathbf{B} - \bar{\mathbf{B}}|^2 \quad (4.3)$$

beeinflusst über den Penalty-Parameter c_2 den Grad der Übereinstimmung beider Variablen.

4.2 Globale Gleichungen

Mit der Energie Ψ (4.1) wird die innere Arbeit (1.7) in der Form $W_{int}(\mathbf{u}, \bar{\mathbf{B}}, \bar{\mathbf{C}}^e, \alpha, \boldsymbol{\omega}) = \int_{\Omega} \Psi dV$ geschrieben. Wie schon in (1.8) wird nun nach den globalen stetigen Variablen \mathbf{u} , $\bar{\mathbf{B}}$ und $\bar{\mathbf{C}}^e$ abgeleitet, wobei die inneren Variablen $(\alpha, \boldsymbol{\omega})$ konstant bleiben. Auch hier ist also die Staffellung in ein globales Problem und lokale Probleme grundlegend. Die Ableitung der inneren Arbeit lautet

$$\begin{aligned}& d_{\mathbf{u}} W_{int} \cdot \boldsymbol{\eta} + d_{\mathbf{F}^p} W_{int} : \boldsymbol{\zeta} + d_{\bar{\mathbf{B}}} W_{int} : \boldsymbol{\xi} \\ &= \int_{\Omega} \left[\mathbf{F}^{p-1} \partial_{\bar{\mathbf{C}}^e} \bar{W}(\bar{\mathbf{C}}^e) \mathbf{F}^{p-T} + d_{\bar{\mathbf{C}}^e} \Psi_{grad}^{nloc}(\bar{\mathbf{C}}^e, \mathbf{C}) + d_{\mathbf{C}} \Psi_{grad}^{nloc}(\bar{\mathbf{B}}, \mathbf{C}) \right] : \dot{\bar{\mathbf{C}}}[\boldsymbol{\eta}] dV \\ &+ \int_{\Omega} \left[d_{\bar{\mathbf{C}}^e} \Psi_{grad}^{nloc}(\bar{\mathbf{C}}^e, \mathbf{C}) + d_{\bar{\mathbf{C}}^e} \Psi_{plt}^{nloc}(\mathbf{C}^e, \bar{\mathbf{C}}^e) \right] : \boldsymbol{\zeta} dV \\ &+ \int_{\Omega} \left[d_{\bar{\mathbf{B}}} \Psi_{grad}^{nloc}(\bar{\mathbf{B}}, \mathbf{C}) + d_{\bar{\mathbf{B}}} \Psi_{plt}^{nloc}(\mathbf{B}, \bar{\mathbf{B}}) \right] : \boldsymbol{\xi} dV.\end{aligned}\quad (4.4)$$

Aus der Forderung nach Stationarität (1.9) folgt

$$\dot{W}_{int}(\mathbf{u}, \bar{\mathbf{B}}, \bar{\mathbf{C}}^e, \alpha, \boldsymbol{\omega})[\boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\zeta}] - \dot{W}_{ext}(\mathbf{u})[\boldsymbol{\eta}] = 0 \quad (4.5)$$

und damit aus (4.4) die Impulsbilanz (1.5) mit

$$\mathbf{S} = 2d_{\mathbf{C}} \Psi = \mathbf{F}^{p-1} 2\partial_{\bar{\mathbf{C}}^e} \bar{W}(\bar{\mathbf{C}}^e) \mathbf{F}^{p-T} + 2d_{\bar{\mathbf{C}}^e} \Psi_{grad}^{nloc}(\bar{\mathbf{C}}^e, \mathbf{C}) + 2d_{\mathbf{C}} \Psi_{grad}^{nloc}(\bar{\mathbf{B}}, \mathbf{C}), \quad (4.6)$$

vgl. (C.57), und die beiden Gleichungen

$$\begin{aligned}d_{\bar{\mathbf{C}}^e} \Psi_{grad}^{nloc}(\bar{\mathbf{C}}^e, \mathbf{C}) + d_{\bar{\mathbf{C}}^e} \Psi_{plt}^{nloc}(\mathbf{C}^e, \bar{\mathbf{C}}^e) &= \mathbf{0}, \\ d_{\bar{\mathbf{B}}} \Psi_{grad}^{nloc}(\bar{\mathbf{B}}, \mathbf{C}) + d_{\bar{\mathbf{B}}} \Psi_{plt}^{nloc}(\mathbf{B}, \bar{\mathbf{B}}) &= \mathbf{0}.\end{aligned}\quad (4.7)$$

Deren schwache Formulierung lautet mit (4.2) und (4.3)

$$\begin{aligned}
 \int_{\Omega} c_1^{C^e} \text{GRAD}[\bar{C}^e] \cdot C^{-1} \cdot \text{GRAD}[\zeta] dV &= \int_{\Omega} c_2^{C^e} (C^e - \bar{C}^e) : \zeta dV, \\
 \int_{\Omega} c_1^B \text{GRAD}[\bar{B}] \cdot C^{-1} \cdot \text{GRAD}[\xi] dV &= \int_{\Omega} c_2^B (B - \bar{B}) : \xi dV.
 \end{aligned} \tag{4.8}$$

Für $C = \mathbf{1}$ würde also für jede Komponente von \bar{B} eine Laplace-Gleichung vorliegen.

4.3 Ergänzung der konjugierten Variablen

Auf der lokalen Ebene sind nun C , \bar{C}^e und \bar{B} konstant. Mit der Energie Ψ (4.1) wird das Verfahren aus Abschnitt 3.1 durchlaufen, welches ausführlich in Abschnitt 5.2.3 erklärt wird. Die Erweiterung von Ψ bewirkt, dass die konjugierten inneren Variablen, \bar{S} für F^P und Δ für B , um jeweils einen Term ergänzt werden. Die freie Energie (4.1) wird erneut hingeschrieben,

$$\begin{aligned}
 \Psi(C, \alpha, C^e, B, \alpha^k, \bar{C}^e, \bar{B}) &= \bar{W}(C^e, B) + \mathcal{I}(\alpha^k) + \mathcal{H}(\alpha) \\
 &\quad + \Psi_{grad}^{nloc}(\bar{B}, C) + \Psi_{plt}^{nloc}(B, \bar{B}) \\
 &\quad + \Psi_{grad}^{nloc}(\bar{C}^e, C) + \Psi_{plt}^{nloc}(C^e, \bar{C}^e).
 \end{aligned} \tag{4.9}$$

Die innere Dissipation $\mathcal{D}_{int} = \frac{1}{2} \mathbf{S} : \dot{C} - \dot{\Psi}$ kann nun gebildet werden, indem Ψ nach unabhängigen Variablen abgeleitet wird,

$$\mathcal{D}_{int} = \frac{1}{2} \mathbf{S} : \dot{C} - \partial_{C^e} \Psi : \dot{C}^e - \partial_B \Psi : \dot{B} - d_{\alpha} \mathcal{H} \dot{\alpha} - d_{\alpha^k} \mathcal{I} : \dot{\alpha}^k \geq 0. \tag{4.10}$$

Mit $\mathbf{S} : \dot{C} = 2\partial_C \Psi : \dot{C} + \bar{\mathbf{S}} : \dot{C}^e + 2\Sigma : L^P$ (C.62) ergibt sich

$$\mathcal{D}_{int} = \left[\frac{1}{2} \bar{\mathbf{S}} - \partial_{C^e} \Psi \right] : \dot{C}^e + \Sigma : L^P - \partial_B \Psi : \dot{B} - d_{\alpha} \mathcal{H} \dot{\alpha} - d_{\alpha^k} \mathcal{I} : \dot{\alpha}^k \geq 0, \tag{4.11}$$

wobei $\partial_C \Psi$ verschwindet, weil C konstant ist. Die Ungleichung muß für jeden beliebigen Prozess $(\dot{C}^e, L^P, \dot{B}, \dot{\alpha}, \dot{\alpha}^k)$ erfüllbar sein. Deshalb muß die eckige Klammer verschwinden. Es folgt

$$\begin{aligned}
 \bar{\mathbf{S}} &= 2\partial_{C^e} \Psi = 2\partial_{C^e} \bar{W} - 2\partial_{C^e} \Psi_{plt}^{nloc}, \\
 \Delta &= -\partial_B \Psi = -\partial_B \bar{W} - \partial_B \Psi_{plt}^{nloc}(B, \bar{B}), \\
 q &= -d_{\alpha} \mathcal{H}(\alpha), \\
 \mathbf{Q}^k &= -d_{\alpha^k} \mathcal{I}(\alpha^k), \\
 \mathcal{D}_{int} &= \Sigma : L^P + \Delta : \dot{B} + q \dot{\alpha} + \mathbf{Q}^k : \dot{\alpha}^k \geq 0.
 \end{aligned} \tag{4.12}$$

Gegenüber (3.2) sind $\bar{\mathbf{S}}$ und die konjugierte Schädigungsvariable Δ um einen weiteren Term ergänzt worden. Aus der Minimierung des Lagrange-Funktional $\mathcal{L} = -\mathcal{D}_{int} + \lambda \phi$ folgt

$$L^P = \gamma \partial_{\Sigma} \phi, \quad \dot{B} = \gamma \partial_{\Delta} \phi, \quad \dot{\alpha}^k = \gamma \partial_{\mathbf{Q}^k} \phi, \quad \dot{\alpha} = \gamma \partial_q \phi. \tag{4.13}$$

4.4 Diskussion der Alternative

Es geht nun um die Frage, ob es auch eine der inneren Variablen F^P zugeordnete *Enhanced-Gradient-Variable* \bar{F}^P gibt. Die freie Energie lautet in diesem Fall

$$\begin{aligned}
 \Psi(\mathbf{C}, \mathbf{C}^e, \mathbf{F}^p, \bar{\mathbf{F}}^p, \mathbf{B}, \bar{\mathbf{B}}, \alpha, \alpha^k) &= \bar{W}(\mathbf{C}^e, \mathbf{B}) + \mathcal{I}(\alpha^k) + \mathcal{H}(\alpha) \\
 &+ \Psi_{grad}^{nloc}(\bar{\mathbf{B}}, \mathbf{C}) + \Psi_{plt}^{nloc}(\mathbf{B}, \bar{\mathbf{B}}) \\
 &+ \Psi_{grad}^{nloc}(\bar{\mathbf{F}}^p, \mathbf{C}) + \Psi_{plt}^{nloc}(\mathbf{F}^p, \bar{\mathbf{F}}^p).
 \end{aligned} \tag{4.14}$$

Um die innere Dissipation $\mathcal{D}_{int} = \frac{1}{2} \bar{\mathbf{S}} : \dot{\mathbf{C}} - \dot{\Psi}$ bilden zu können, muß zuvor die Ableitung $d_{\mathbf{F}^p} \Psi_{plt}^{nloc}(\mathbf{F}^p, \bar{\mathbf{F}}^p)$ mit (C.123) in eine Ableitung nach \mathbf{C}^e überführt werden,

$$d_{\mathbf{C}^e} \Psi_{plt}^{nloc} = -\frac{1}{2} \mathbf{C}^{e-1} d_{\mathbf{F}^p} \Psi_{plt}^{nloc} \mathbf{F}^{pT}. \tag{4.15}$$

Dieses muß geschehen, weil \mathbf{C} konstant ist und deshalb \mathbf{F}^p und \mathbf{C}^e voneinander abhängig sind. Die innere Dissipation (4.10) wird gebildet, indem Ψ nach unabhängigen Variablen abgeleitet wird. Um zu (4.11) zu gelangen, wird die Identität $\bar{\mathbf{S}} : \dot{\mathbf{C}} = 2\partial_{\mathbf{C}} \Psi : \dot{\mathbf{C}} + \bar{\mathbf{S}} : \dot{\mathbf{C}}^e + 2\bar{\Sigma} : \mathbf{L}^p$ (C.62) verwendet, welche die Symmetrie von $\bar{\mathbf{S}}$ voraussetzt. Unter der Annahme, dass $\bar{\mathbf{S}}$ symmetrisch ist, folgt aus (4.11)

$$\bar{\mathbf{S}} = 2\partial_{\mathbf{C}^e} \Psi = 2\partial_{\mathbf{C}^e} \bar{W} - \mathbf{C}^{e-1} d_{\mathbf{F}^p} \Psi_{plt}^{nloc} \mathbf{F}^p. \tag{4.16}$$

Offensichtlich ist $\bar{\mathbf{S}}$ jedoch nicht symmetrisch. Eine *Enhanced-Gradient-Formulierung* mit $\bar{\mathbf{F}}^p$ verlässt also an dieser Stelle die übliche Herleitung. Bereits die fehlende Symmetrie von $\bar{\mathbf{S}}$ bedeutet einen Nachteil. Es zeigt sich, dass die Formulierung (3.16) als einzige an dieser Stelle brauchbar ist.

5 Thermoelastoplastizität

Es wird die Thermoelastoplastizität hierarchisch modelliert. Eine Übersicht der Modelle befindet sich in Abschnitt 5.5. Aufgrund der Materialerweichung und der damit verbundenen Lokalisierung ist die Temperaturabhängigkeit besonders interessant für die Modelladaptivität. Die Thermoelastoplastizität fügt sich in die Systematik von Abschnitt 6.2 ein und untermauert damit die Allgemeinheit der Methode zur Linearisierung. Eine mögliche Reduktion zu einem adiabaten Modell bereichert die Vielfalt der Modellhierarchien. Dieses Modell kollidiert jedoch mit der Gemischten Formulierung. Außerdem liefert die Thermoelastoplastizität die exakte Begründung für die isotherme Modellierung.

5.1 Dissipation

Die Dissipation bildet den Ausgangspunkt der Modellierung.

5.1.1 Von der Leistungsbilanz zur Bilanz der inneren Energie

Der erste Hauptsatz wird als Bilanz der Leistung formuliert: Die zeitliche Änderung der kinetischen und der inneren Energie ist gleich der Leistung der äußeren Kräfte (C.81), der inneren Wärmezufuhr R und der Wärmezufuhr $-\mathbf{Q} \cdot \mathbf{n}$ über die Oberfläche $\partial\Omega$,

$$\partial_t \int_{\Omega} \frac{1}{2} \rho_0 |\mathbf{v}|^2 dV + \int_{\Omega} \partial_t E dV = \int_{\Omega} \mathbf{f}_V \cdot \mathbf{v} dV + \int_{\partial\Omega} \mathbf{T} \cdot \mathbf{v} dA + \int_{\Omega} R dV - \int_{\partial\Omega} \mathbf{Q} \cdot \mathbf{n} dA. \quad (5.1)$$

Mit (C.80) ergibt sich die lokale Leistungsbilanz

$$\rho_0 \mathbf{v} \cdot \partial_t \mathbf{v} + \partial_t E = \mathbf{f}_V \cdot \mathbf{v} + \text{DIV} [\mathbf{v} \cdot \mathbf{P}] + R - \text{DIV} [\mathbf{Q}]. \quad (5.2)$$

In die lokale Leistungsbilanz wird die Identität (C.83) eingesetzt,

$$\rho_0 \mathbf{v} \cdot \partial_t \mathbf{v} + \partial_t E = \mathbf{f}_V \cdot \mathbf{v} + \text{GRAD} [\mathbf{v}] : \mathbf{P} + \mathbf{v} \cdot \text{DIV} [\mathbf{P}] + R - \text{DIV} [\mathbf{Q}]. \quad (5.3)$$

Mit der lokalen Impulsbilanz $\rho_0 \partial_t \mathbf{v} = \mathbf{f}_V + \text{DIV} [\mathbf{P}]$ (C.81)₂ vereinfacht sich die Gleichung:

$$\partial_t E = \text{GRAD} [\mathbf{v}] : \mathbf{P} + R - \text{DIV} [\mathbf{Q}]. \quad (5.4)$$

5.1.2 Clausius-Planck-Ungleichung

Aus dem zweiten Hauptsatz ergibt sich mit der Temperatur Θ , der Entropie H und der Entropieproduktion Ξ die Ungleichung (C.89),

$$\Theta \Xi = \Theta \partial_t H - R + \text{DIV} [\mathbf{Q}] - \mathbf{Q} \cdot \text{GRAD} [\Theta] / \Theta. \quad (5.5)$$

Es kann wieder frei entschieden werden, ob es sich bei der zeitliche Änderung in Ξ , \mathbf{Q} und $\partial_t H$ um die Änderung der physikalischen Zeit oder eine Rate handelt. Es wird die Änderung der inneren Energie (5.4) eingesetzt,

$$\Theta \Xi = \Theta \partial_t H + \mathbf{P} : \text{GRAD} [\mathbf{v}] - \partial_t E - \mathbf{Q} \cdot \text{GRAD} [\Theta] / \Theta = \mathcal{D}_{int} + \mathcal{D}_{conv} \geq 0, \quad (5.6)$$

wobei die Zerlegung in die innere Dissipation \mathcal{D}_{int} und die konvektive Dissipation \mathcal{D}_{conv} erfolgt,

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{int} &= \Theta \partial_t H - R + \text{DIV} [\mathbf{Q}] \\ &= \Theta \partial_t H + \mathbf{P} : \text{GRAD} [\mathbf{v}] - \partial_t E \geq 0, \\ \mathcal{D}_{conv} &= -\mathbf{Q} \cdot \text{GRAD} [\Theta] / \Theta \geq 0. \end{aligned} \quad (5.7)$$

Die Ungleichung (5.7)₃ wird allgemein durch das Wärmeleitungsgesetz von Fourier,

$$\mathbf{Q} = -k \mathbf{C}^{-1} \cdot \text{GRAD} [\Theta], \quad (5.8)$$

erfüllt. k ist der Wärmeleitungskoeffizient. Der erste Teil (5.7)₁ der Clausius-Planck-Ungleichung bildet die Grundlage für die Wärmeleitungsgleichung in Abschnitt 5.2.2, und aus dem zweiten Teil (5.7)₂ folgen die Evolutionsgleichungen in Abschnitt 5.2.3.

5.2 Modell mit Wärmeleitung

Das Modell mit Wärmeleitung beruht auf der freien Energie Ψ und verwendet die Temperatur Θ als räumlich stetige Variable. Zur Impulsbilanz tritt die Wärmeleitungsgleichung hinzu.

5.2.1 Innere und freie Energie

Es wird angenommen, dass sich die Entropie additiv in einen elastischen und einen plastischen Anteil zerlegt, $H = H^e + H^p$. Die innere Energie ist eine Funktion von H^e und weiteren Argumenten, jedoch nicht von Θ . Es wird der Teil E_2 von E abgespalten, welcher nicht von H^e abhängt,

$$E(H^e) = E_1(H^e) + E_2. \quad (5.9)$$

Der Übergang zur freien Energie Ψ (1.7) erfolgt mit der Legendre-Transformation

$$\Psi = E - H^e \Theta = E_1(H^e(\Theta)) - H^e(\Theta) \Theta + E_2 = \Psi_1(\Theta) + E_2. \quad (5.10)$$

Dabei ist $\Psi_1(\Theta)$ der Teil von Ψ , welcher von Θ abhängt. Aus $\Psi = E - H^e \Theta$ folgt $H^e(\Theta) = -\partial_\Theta \Psi$. Damit lässt sich H^e aus der freien Energie eliminieren, welche nur von Θ und weiteren Argumenten abhängt. Als Beispiel wird die freie Energie (3.1), $\Psi(\mathbf{C}^e, \mathbf{B}, \alpha, \boldsymbol{\alpha}^k) = \bar{W}(\mathbf{C}^e, \mathbf{B}) + \mathcal{H}(\alpha) + \mathcal{I}(\boldsymbol{\alpha}^k)$, um Θ erweitert und entsprechend zerlegt: $\Psi_1(\Theta) = \bar{W}(\mathbf{C}^e, \mathbf{B}, \Theta) + \mathcal{H}(\alpha, \Theta)$ und $E_2 = \mathcal{I}(\boldsymbol{\alpha}^k)$ mit dem isotropen Verfestigungspotential (C.140). Ebenso lässt sich die freie Energie (4.1) zerlegen. E_1 wird in Abschnitt 5.4 aus Ψ_1 bestimmt.

Einsetzen von (5.10)₁, $E = \Psi + H^e \Theta$, in die Clausius-Planck-Ungleichung (5.7)₂ ergibt

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{int} &= \Theta \dot{H} + \mathbf{P} : \text{GRAD} [\dot{\mathbf{u}}] - \dot{E} \\ &= \Theta (\dot{H}^e + \dot{H}^p) + \mathbf{P} : \text{GRAD} [\dot{\mathbf{u}}] - \dot{\Psi} - \dot{H}^e \Theta - H^e \dot{\Theta} \\ &= \Theta \dot{H}^p + \mathbf{P} : \text{GRAD} [\dot{\mathbf{u}}] - \dot{\Psi} - H^e \dot{\Theta} \geq 0. \end{aligned} \quad (5.11)$$

5.2.2 Wärmeleitungsgleichung

Zur Herleitung der Wärmeleitungsgleichung wird von der freien Energie Ψ ausgegangen, weil die Variable der Gleichung die Temperatur sein soll. Aus (5.10) folgt für die elastische Entropie

$$H^e = -\partial_\Theta \Psi = -\partial_\Theta \widehat{\Psi}. \quad (5.12)$$

Es wird $H = H^e + H^p$ nach der Zeit abgeleitet und mit Θ multipliziert:

$$\begin{aligned} \Theta \partial_t H &= \Theta \partial_t H^e + \Theta \partial_t H^p = -\Theta \partial_{\Theta\Theta}^2 \Psi \frac{d\Theta}{dt} + \Theta \partial_t H^p - \Theta [\partial_{C^e\Theta}^2 \Psi : \partial_t C^e + \partial_{B\Theta}^2 \Psi : \partial_t B] \\ &= c \frac{d\Theta}{dt} + \Theta \partial_t H^p + \mathcal{H}_{heat}^e \end{aligned} \quad (5.13)$$

mit der Wärmekapazität

$$c = -\Theta \partial_{\Theta\Theta}^2 \Psi \quad (5.14)$$

und

$$\mathcal{H}_{heat}^e = -\Theta [\partial_{C^e\Theta}^2 \Psi : \partial_t C^e + \partial_{B\Theta}^2 \Psi : \partial_t B]. \quad (5.15)$$

In der inneren Dissipation (5.7)₁ wird (5.13)₂ eingesetzt,

$$\mathcal{D}_{int} = \Theta \partial_t H - R + \text{DIV} [\mathbf{Q}] = c \frac{d\Theta}{dt} + \Theta \partial_t H^p + \mathcal{H}_{heat}^e - R + \text{DIV} [\mathbf{Q}] \geq 0. \quad (5.16)$$

Es wird das Gesetz von Fourier (5.8) $\mathbf{Q} = -k \mathbf{C}^{-1} \cdot \text{GRAD} [\Theta]$ eingesetzt, womit die Wärmeleitungsgleichung vorliegt:

$$c \frac{d\Theta}{dt} - \text{DIV} [k \mathbf{C}^{-1} \cdot \text{GRAD} [\Theta]] + \mathcal{H}_{heat}^e = \mathcal{D}_{mech} + R \quad (5.17)$$

mit $\mathcal{D}_{mech} = \mathcal{D}_{int} - \Theta \partial_t H^p$. \mathcal{D}_{int} wird im nächsten Abschnitt bestimmt. Weil \mathcal{D}_{int} den Term $\Theta \partial_t H^p$ enthält, hebt sich dieser aus \mathcal{D}_{mech} heraus.

Die schwache Formulierung mit der Testfunktion τ lautet

$$0 = \int_{\Omega} c \tau \frac{d\Theta}{dt} + k \text{GRAD} [\tau] \cdot \mathbf{C}^{-1} \cdot \text{GRAD} [\Theta] + \tau [\mathcal{H}_{heat}^e - \mathcal{D}_{mech} - R] dV. \quad (5.18)$$

5.2.3 Prinzip der maximalen Dissipation

Es wird von der inneren Dissipation (5.11) ausgegangen, welche die freie Energie enthält, hier mit $\mathbf{P} : \partial_t \mathbf{F} = \frac{1}{2} \mathbf{S} : \partial_t \mathbf{C}$ (C.53),

$$\mathcal{D}_{int} = \Theta \partial_t H^p + \frac{1}{2} \mathbf{S} : \partial_t \mathbf{C} - \partial_t \Psi(C^e, \Theta, \alpha, \alpha^k, \mathbf{B}) - H^e \partial_t \Theta \geq 0. \quad (5.19)$$

Die Ableitung der freien Energie in (5.19) wird ausgeführt:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{int} &= \Theta \partial_t H^p + \frac{1}{2} \mathbf{S} : \partial_t \mathbf{C} - \partial_\Theta \Psi \partial_t \Theta - \partial_{C^e} \Psi : \partial_t C^e \\ &\quad - \partial_B \Psi : \partial_t B - d_\alpha \mathcal{H} \partial_t \alpha - d_{\alpha^k} \mathcal{I} : \partial_t \alpha^k - H^e \partial_t \Theta \geq 0. \end{aligned} \quad (5.20)$$

Mit $\mathbf{S} : \partial_t \mathbf{C} = \bar{\mathbf{S}} : \partial_t C^e + 2 \boldsymbol{\Sigma} : \mathbf{L}^p$ (C.62) ergibt sich

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{int} &= \Theta \partial_t H^p - [H^e + \partial_\Theta \Psi] \partial_t \Theta + \left[\frac{1}{2} \bar{\mathbf{S}} - \partial_{C^e} \Psi \right] : \partial_t C^e + \boldsymbol{\Sigma} : \mathbf{L}^p \\ &\quad - \partial_B \Psi : \partial_t \mathbf{B} - d_\alpha \mathcal{H} \partial_t \alpha - d_{\alpha^k} \mathcal{I} : \partial_t \boldsymbol{\alpha}^k \geq 0. \end{aligned} \quad (5.21)$$

Hier enthält $\mathbf{L}^p = \partial_t \mathbf{F}^p \mathbf{F}^{p-1}$ (C.41) die Zeitableitung. Die Ungleichung muß für jeden beliebigen Prozess $(\partial_t H^p, \partial_t \Theta, \partial_t C^e, \partial_t \mathbf{F}^p, \partial_t \mathbf{B}, \partial_t \alpha, \partial_t \boldsymbol{\alpha}^k)$ erfüllbar sein. Deshalb müssen die eckigen Klammern verschwinden. Es folgt

$$H^e = -\partial_\Theta \Psi, \quad \bar{\mathbf{S}} = 2\partial_{C^e} \Psi, \quad (5.22)$$

und mit den Benennungen

$$\boldsymbol{\Delta} = -\partial_B \Psi, \quad q = -d_\alpha \mathcal{H}(\alpha, \Theta), \quad \mathbf{Q}^k = -d_{\alpha^k} \mathcal{I}(\boldsymbol{\alpha}^k), \quad (5.23)$$

lautet (5.21) nun

$$\mathcal{D}_{int} = \Theta \partial_t H^p + \boldsymbol{\Sigma} : \mathbf{L}^p + \boldsymbol{\Delta} : \partial_t \mathbf{B} + q \partial_t \alpha + \mathbf{Q}^k : \partial_t \boldsymbol{\alpha}^k \geq 0. \quad (5.24)$$

Damit ist die mechanische Dissipation in (5.17) bekannt,

$$\mathcal{D}_{mech} = \boldsymbol{\Sigma} : \mathbf{L}^p + \boldsymbol{\Delta} : \partial_t \mathbf{B} + q \partial_t \alpha + \mathbf{Q}^k : \partial_t \boldsymbol{\alpha}^k \geq 0. \quad (5.25)$$

Bisher wurde nur sichergestellt, dass die Ungleichung $\mathcal{D}_{int} \geq 0$ für einen beliebigen Prozess erfüllt werden kann. Das Prinzip der maximalen Dissipation erfüllt die Forderung der Ungleichung nun in einer abgeschwächten Form, indem ein Lagrange-Funktional eingeführt wird, welches die innere Dissipation (5.24) maximiert und die Fließbedingung $\phi = 0$ (C.137) erfüllt:

$$\begin{aligned} \mathcal{L} &= -\mathcal{D}_{int} + \gamma \phi, \\ \mathcal{L} &\rightarrow \min! \end{aligned} \quad (5.26)$$

Die Ungleichung wird nur abgeschwächt erfüllt, da maximal nicht zwingend größer oder gleich Null bedeutet. Insofern ist das Prinzip der maximalen Dissipation eine abgeschwächte Form des zweiten Hauptsatzes. Die Minimierung von \mathcal{L} ergibt die Evolutionsgleichungen

$$\mathbf{L}^p = \gamma \partial_\Sigma \phi, \quad \partial_t \mathbf{B} = \gamma \partial_\Delta \phi, \quad \partial_t \boldsymbol{\alpha}^k = \gamma \partial_{Q^k} \phi, \quad \partial_t \alpha = \gamma \partial_q \phi, \quad \partial_t H^p = \gamma \partial_\Theta \phi. \quad (5.27)$$

Wenn die physikalische Zeitableitung an dieser Stelle beibehalten wird, so handelt es sich um (Thermo-)Viskoelastoplastizität. Wenn das Plastizieren unabhängig von der physikalischen Zeit stattfinden soll, so muss zu Raten übergegangen werden, z. B. $\partial_t \mathbf{B} = \dot{\mathbf{B}}/dt$. Das Zeitdifferenzial geht dabei im unbekanntem Multiplikator auf, so dass γdt zu γ wird. Die Evolutionsgleichungen der (Thermo-)Elastoplastizität lauten also

$$\mathbf{L}^p = \gamma \partial_\Sigma \phi, \quad \dot{\mathbf{B}} = \gamma \partial_\Delta \phi, \quad \dot{\boldsymbol{\alpha}}^k = \gamma \partial_{Q^k} \phi, \quad \dot{\alpha} = \gamma \partial_q \phi, \quad \dot{H}^p = \gamma \partial_\Theta \phi. \quad (5.28)$$

mit $\mathbf{L}^p = \dot{\mathbf{F}}^p \mathbf{F}^{p-1}$ (C.41). Wenn H^p in keiner Funktion als Argument auftaucht, was hier der Fall ist, so kann die letzte Evolutionsgleichung entfallen.

5.3 Adiabates Modell

Das adiabate Modell ist eine Modellreduktion. Die Annahme, dass die Entropie H verschwindet, bewirkt wegen $\partial_t H = 0$ (5.13), dass die Wärmeleitungsgleichung entfällt. Die Temperatur ist nicht

mehr stetig im Raum, sondern eine unstetige Funktion der elastischen Entropie H^e , welche nun eine innere Variable ist. Deshalb muss statt der freien Energie Ψ die innere Energie E verwendet werden. Es wird nun von der inneren Dissipation (5.7)₂,

$$\mathcal{D}_{int} = \frac{1}{2} \mathbf{S} : \partial_t \mathbf{C} - \partial_t E(\mathbf{C}^e, H^e, \alpha, \boldsymbol{\alpha}^k, \mathbf{B}) \geq 0, \quad (5.29)$$

ausgegangen. Die Ableitung der inneren Energie wird ausgeführt:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{int} &= \frac{1}{2} \mathbf{S} : \partial_t \mathbf{C} - (\partial_{H^e} E) \partial_t H^e - \partial_{C^e} E : \partial_t \mathbf{C}^e \\ &\quad - \partial_B E : \partial_t \mathbf{B} - d_\alpha \mathcal{H} \partial_t \alpha - d_{\alpha^k} \mathcal{I} : \partial_t \boldsymbol{\alpha}^k \geq 0. \end{aligned} \quad (5.30)$$

Mit $\mathbf{S} : \partial_t \mathbf{C} = 2d_C \Psi + \bar{\mathbf{S}} : \partial_t \mathbf{C}^e + 2\Sigma : \mathbf{L}^P$ (C.62) und $d_C \Psi = 0$ ergibt sich

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{int} &= -(\partial_{H^e} E) \partial_t H^e + \left[\frac{1}{2} \bar{\mathbf{S}} - \partial_{C^e} E \right] : \partial_t \mathbf{C}^e + \Sigma : \mathbf{L}^P \\ &\quad - \partial_B E : \partial_t \mathbf{B} - d_\alpha \mathcal{H} \partial_t \alpha - d_{\alpha^k} \mathcal{I} : \partial_t \boldsymbol{\alpha}^k \geq 0. \end{aligned} \quad (5.31)$$

Die Ungleichung muß für jeden beliebigen Prozess $(\partial_t H^e, \partial_t \mathbf{C}^e, \mathbf{L}^P, \partial_t \mathbf{B}, \partial_t \alpha, \partial_t \boldsymbol{\alpha}^k)$ erfüllbar sein. Deshalb muss die eckige Klammer verschwinden. Es folgt

$$\bar{\mathbf{S}} = 2\partial_{C^e} E. \quad (5.32)$$

Mit den konjugierten Variablen $\Theta = -\partial_{H^e} E$, $\boldsymbol{\Delta} = -\partial_B E$, $q = -d_\alpha \mathcal{H}(\alpha, \Theta)$ und $\mathbf{Q}^k = -d_{\alpha^k} \mathcal{I}(\boldsymbol{\alpha}^k)$ lautet die innere Dissipation

$$\mathcal{D}_{int} = \Theta \partial_t H^e + \Sigma : \mathbf{L}^P + \boldsymbol{\Delta} : \partial_t \mathbf{B} + q \partial_t \alpha + \mathbf{Q}^k : \partial_t \boldsymbol{\alpha}^k \geq 0. \quad (5.33)$$

Der Vergleich mit (5.24) zeigt, dass $\Theta \partial_t H^e$ den Term $\Theta \partial_t H^P$ ersetzt hat. Aus dem Prinzip der maximalen Dissipation (5.26) folgen die Evolutionsgleichungen

$$\mathbf{L}^P = \gamma \partial_\Sigma \phi, \quad \partial_t \mathbf{B} = \gamma \partial_\Delta \phi, \quad \partial_t \boldsymbol{\alpha}^k = \gamma \partial_{\mathbf{Q}^k} \phi, \quad \partial_t \alpha = \gamma \partial_q \phi, \quad \partial_t H^e = \gamma \partial_\Theta \phi. \quad (5.34)$$

Es hängt die elastische Energie und die Fließfunktion über $\Theta(H^e)$ von H^e ab.

5.4 Bestimmung der freien und der inneren Energie

Es wird die Wärmekapazität c (5.14) als konstant angenommen. Aus dieser Annahme folgt, dass die elastische Energie und auch das isotrope Verfestigungspotential \mathcal{H} (C.140) nur linear von der Temperatur abhängen können, weil sonst c eine Funktion von \mathbf{C}^e , \mathbf{B} und α wäre. Durch zweimalige Integration der Wärmekapazität ergibt sich Ψ_1 (5.10),

$$\begin{aligned} c &= -\Theta \partial_\Theta^2 \Psi_1, \\ \Psi_1(\mathbf{C}^e, \mathbf{B}, \Theta) &= T(\Theta) - (\Theta - \Theta_0) M(\mathbf{C}^e, \mathbf{B}) + \bar{W}(\mathbf{C}^e, \mathbf{B}) + \mathcal{H}(\alpha, \Theta), \\ T(\Theta) &= c [(\Theta - \Theta_0) - \Theta \log(\Theta/\Theta_0)]. \end{aligned} \quad (5.35)$$

Die Funktion $M(\mathbf{C}^e, \mathbf{B})$ wird in den Unterabschnitten spezifiziert. Mit (5.12) folgt

$$H^e = -\partial_\Theta \Psi_1 = c \log(\Theta/\Theta_0) + M(\mathbf{C}^e, \mathbf{B}) + \partial_\Theta \mathcal{H}(\alpha, \Theta). \quad (5.36)$$

Auflösen von (5.36) nach Θ liefert

$$\Theta = \hat{\Theta}(\mathbf{C}^e, \mathbf{B}, H^e) = \Theta_0 \exp \{ [H^e - M(\mathbf{C}^e, \mathbf{B}) - \partial_{\Theta} \mathcal{H}(\alpha, \Theta)] / c \}. \quad (5.37)$$

Die Temperatur $\hat{\Theta}$ wird nun in (5.10) eingesetzt,

$$\hat{E}(\mathbf{C}^e, H^e, \mathbf{B}) = \hat{\Psi}(\mathbf{C}^e, \hat{\Theta}, \mathbf{B}) + H^e \hat{\Theta}, \quad (5.38)$$

womit auch die innere Energie bekannt ist.

Wenn die elastischen Energie zerlegt wird, $\bar{W}(\mathbf{C}^e, \mathbf{B}) = U(J) + \widetilde{W}(\widetilde{\mathbf{C}}^e, \mathbf{B})$ (1.14), wie es in der Metallplastizität geboten ist, so gibt es zwei Möglichkeiten, wie $M(\mathbf{C}^e, \mathbf{B})$ in (5.35) gewählt werden kann.

5.4.1 Temperatur verändert Festigkeit

Es kann M unabhängig von der Volumenänderung sein in der Form $M(\widetilde{\mathbf{C}}^e, \mathbf{B}) = \alpha_{ex} \widetilde{W}(\widetilde{\mathbf{C}}^e, \mathbf{B})$, wobei α_{ex} der Expansionskoeffizient (Tab. D.6) ist. In diesem Fall lautet (5.35)₂

$$\Psi_1(\mathbf{C}^e, \mathbf{B}, \Theta) = T(\Theta) + U(J) + (1 - (\Theta - \Theta_0)\alpha_{ex}) \widetilde{W}(\widetilde{\mathbf{C}}^e, \mathbf{B}) + \mathcal{H}(\alpha, \Theta). \quad (5.39)$$

Mit dieser Modellierung bewirkt eine Temperaturerhöhung eine Abnahme der Festigkeit. Für Metalle ist dieser Zusammenhang unphysikalisch. Für das adiabate Modell (Abschnitt 5.3) ergibt sich jedoch der Vorteil, dass die inneren Variablen, von denen Θ in diesem Fall abhängt (5.37), nicht im volumetrischen Term auftreten und dieser unabhängig vom lokalen Problem in der Gemischten Formulierung in Abschnitt 2.1 diskretisiert werden kann.

5.4.2 Temperatur bewirkt Volumenänderung

Mit der für Metalle korrekten Wahl $M = M(J) = \alpha_{ex} U(J)$ ergibt sich für (5.35)₂

$$\Psi_1(\mathbf{C}^e, \mathbf{B}, \Theta) = T(\Theta) + (1 - (\Theta - \Theta_0)\alpha_{ex}) U(J) + \widetilde{W}(\widetilde{\mathbf{C}}^e, \mathbf{B}) + \mathcal{H}(\alpha, \Theta). \quad (5.40)$$

Eine Temperaturänderung bewirkt nun eine Volumendehnung. Mit dem adiabaten Modell wird jedoch die Gemischte Formulierung unmöglich gemacht, wie oben erläutert. Es wäre ein Ausweg, den Einfluss von $(\Theta - \Theta_0)\alpha_{ex}$ für das adiabate Modell zu vernachlässigen. Dies verstößt jedoch gegen den Grundsatz, keine „falschen“ Modelle zu verwenden.

Im vollständigen Modell lautet \mathcal{H}_{heat}^e (5.15), weil $U(J)$ nicht von der Schädigung abhängt, $\mathcal{H}_{heat}^e = -\Theta \partial_{\mathbf{C}^e}^2 \Psi : \partial_t \mathbf{C}^e$. Mit (C.103), (1.16), $\partial_{\mathbf{C}^e}^2 \Psi = -\alpha_{ex} U'(J) \frac{1}{2} J \mathbf{C}^{-1} = -\alpha_{ex} \frac{1}{2} p(J) \mathbf{C}^{-1}$, ergibt sich

$$\mathcal{H}_{heat}^e = \Theta \alpha_{ex} \frac{1}{2} p(J) \mathbf{C}^{-1} : \partial_t \mathbf{C}^e. \quad (5.41)$$

Die Gemischte Formulierung in Abschnitt 2.1.4 bezieht sich allein auf die Impulsbilanz. Deshalb lautet die partielle Ableitung nach \mathbf{C} mit der volumetrischen Tangente (1.33)

$$\partial_{\mathbf{C}} \mathcal{H}_{heat}^e = \Theta \alpha_{ex} \frac{1}{2} \partial_{\mathbf{C}} (p(J) \mathbf{C}^{-1}) : \partial_t \mathbf{C}^e = \Theta \alpha_{ex} \frac{1}{4} \mathbf{C}^{vol} : \partial_t \mathbf{C}^e. \quad (5.42)$$

Dies gilt für das Residuum (3.16), ansonsten ist auch die Abhängigkeit $\mathbf{C}^e(\mathbf{C})$ (C.32) zu beachten.

5.5 Modellhierarchie

Es wird die Modellhierarchie aus diesem Kapitel zur Übersicht zusammengestellt:

- Das **Referenzmodell** besteht aus der Wärmeleitungsgleichung (5.18) mit der mechanischen Dissipation (5.25), \mathcal{H}_{heat}^e (5.41), den Evolutionsgleichungen (5.28) und der Impulsbilanz (1.5),

$$\begin{aligned}
0 &= \int_{\Omega} c\tau \frac{d\Theta}{dt} + k \text{GRAD}[\tau] \cdot \mathbf{C}^{-1} \cdot \text{GRAD}[\Theta] + \tau [\mathcal{H}_{heat}^e - \mathcal{D}_{mech} - R] dV, \\
\mathcal{D}_{mech} &= \boldsymbol{\Sigma} : \mathbf{L}^p + \boldsymbol{\Delta} : \dot{\mathbf{B}} + q\dot{\alpha} + \mathbf{Q}^k : \dot{\boldsymbol{\alpha}}^k, \\
\mathcal{H}_{heat}^e &= \Theta \alpha_{ex} \frac{1}{2} p(J) \mathbf{C}^{-1} : \partial_t \mathbf{C}^e, \\
\mathbf{L}^p &= \gamma \partial_{\Sigma} \phi, \quad \dot{\mathbf{B}} = \gamma \partial_{\Delta} \phi, \quad \dot{\boldsymbol{\alpha}}^k = \gamma \partial_{Q^k} \phi, \quad \dot{\alpha} = \gamma \partial_q \phi, \quad \dot{H}^p = \gamma \partial_{\Theta} \phi.
\end{aligned} \tag{5.43}$$

- Das **Modell ohne Wärmeleitung** ist eine Vereinfachung des Referenzmodells. Mit $k = 0$ entfällt der Diffusionsterm in der Wärmeleitungsgleichung,

$$0 = \int_{\Omega} c\tau \frac{d\Theta}{dt} + \tau [\mathcal{H}_{heat}^e - \mathcal{D}_{int} - R] dV. \tag{5.44}$$

Dieses Modell sorgt für eine Systematik wie bei der *Enhanced-Gradient*-Formulierung (Tab. 9.2), bei der es sinnvoll ist, den Diffusionsterm erst in einer weiteren Modellstufe hinzuzuschalten, um den Übergang zwischen den Modellen zu erleichtern. Praktisch hat sich dieses Modell jedoch als überflüssig erwiesen.

- **Adiabates Modell** $H = 0$. Wegen $\partial_t H = 0$ (5.13) entfällt die Wärmeleitungsgleichung. $H^e = -H^p$ wird zur inneren Variable und $\Theta = -\partial_{H^e} E$ zur konjugierten Variablen ohne räumliche Stetigkeit. Die Evolutionsgleichungen (5.34) lauten

$$\mathbf{L}^p = \gamma \partial_{\Sigma} \phi, \quad \dot{\mathbf{B}} = \gamma \partial_{\Delta} \phi, \quad \dot{\boldsymbol{\alpha}}^k = \gamma \partial_{Q^k} \phi, \quad \dot{\alpha} = \gamma \partial_q \phi, \quad \dot{H}^e = \gamma \partial_{\Theta} \phi. \tag{5.45}$$

In diesem Modell findet die Umwandlung von mechanischer Energie und Wärme statt, ohne dass Konvektion auftritt. Der Umwandlungsprozess findet so schnell statt, dass jeder Punkt im Raum gleichsam wärmeisoliert ist. Deshalb ist die Temperatur räumlich unstetig. Dieses Modell kann für Kaltumformungen ausreichend sein.

- Das **Isotherme Modell** mit $\Theta = \Theta_0$ steht in Abschnitt 3.1.

6 Systematische Linearisierung und Diskretisierung

Es werden sämtliche Gleichungen auf der oberen Iterationsstufe zusammengestellt. Mit Ausnahme der Nebenbedingung aus der *Enhanced-Strain*-Formulierung sind die Variablen der Gleichungen stetig im Raum und werden mit Finiten Elementen diskretisiert. Die Gleichungen werden in dem Residuum $\bar{r} = 0$ zusammengefasst. Um die Lösung mit dem Newton-Verfahren bestimmen zu können, werden die Ableitungen von Inneren Variablen und Spannungen nach den globalen stetigen Variablen gebraucht. Diese werden in systematischer Weise bestimmt, nachdem auf der unteren ($\mathbf{R}_\omega = \mathbf{0}$) und der mittleren Iterationsstufe ($R_\phi = 0$) das lokale Problem gelöst wurde. Dabei sind nur wenige einfach zugängliche partielle Ableitungen bereitzustellen, aus denen die gesuchten vollständigen Ableitungen automatisch berechnet werden. Auf diese Weise wird die Änderung oder Erweiterung der Modellierung erleichtert und weniger fehleranfällig.

Aus der linearisierten und diskretisierten Systemmatrix wird zuerst die Geschwindigkeit eliminiert und dann die innere Variable der *Enhanced-Strain*-Formulierung. Dabei wird die Kontaktprojektion eingefügt.

6.1 Gesamtsystem

Es werden die Gleichungen des Gesamtsystems zusammengetragen. Dieses sind die Diffusionsgleichungen der *Enhanced-Gradient*-Formulierung (4.8), die Wärmeleitungsgleichung (5.18), die Nebenbedingung aus der *Enhanced-Strain*-Formulierung (2.40)₃, die schwache Formulierung der Geschwindigkeit $\mathbf{v} = \partial_t \mathbf{u}$ und die Impulsbilanz (1.5). Die Unbekannten sind $\mathbf{y} = (\mathbf{u}, \mathbf{v}, \Theta, \bar{\mathbf{B}}, \bar{\mathbf{C}}^e) \in \mathcal{V}$ (1.2) und $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^{N_{int}}$ (2.35) mit den Testfunktionen $\bar{\mathbf{y}} = (\boldsymbol{\eta}_2, \boldsymbol{\eta}_1, \tau, \boldsymbol{\xi}, \zeta) \in \mathcal{V}_0$ und $\bar{\mathbf{a}} \in \mathbb{R}^{N_{int}}$. Das System lautet also

$$\begin{aligned}
 \int_{\Omega} c_1^{C^e} \text{GRAD} [\bar{\mathbf{C}}^e] \cdot \mathbf{C}^{-1} \cdot \text{GRAD} [\zeta] dV &= \int_{\Omega} c_2^{C^e} (\mathbf{C}^e - \bar{\mathbf{C}}^e) : \zeta dV, \\
 \int_{\Omega} c_1^{\mathbf{B}} \text{GRAD} [\bar{\mathbf{B}}] \cdot \mathbf{C}^{-1} \cdot \text{GRAD} [\boldsymbol{\xi}] dV &= \int_{\Omega} c_2^{\mathbf{B}} (\mathbf{B} - \bar{\mathbf{B}}) : \boldsymbol{\xi} dV, \\
 \int_{\Omega} c\tau \frac{d\Theta}{dt} + \kappa \text{GRAD} [\tau] \cdot \mathbf{C}^{-1} \cdot \text{GRAD} [\Theta] dV &= - \int_{\Omega} \tau [\mathcal{H}_{heat}^e - \mathcal{D}_{int} - R] dV, \\
 \int_{\Omega} \mathbf{S} : \partial_a \mathbf{C}[\bar{\mathbf{a}}] dV &= 0, \\
 \int_{\Omega} \partial_t \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\eta}_1 dV &= \int_{\Omega} \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\eta}_1 dV, \\
 \rho_0 \int_{\Omega} \partial_t \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\eta}_2 dV + \frac{1}{2} \int_{\Omega} \mathbf{S}(\mathbf{C}) : \partial_u \mathbf{C}[\boldsymbol{\eta}_2] dV &= G_{ext}(\boldsymbol{\eta}_2).
 \end{aligned} \tag{6.1}$$

Die Gleichungen werden als Residuum \hat{r} zusammengefasst,

$$\begin{aligned}
 \hat{r}(\mathbf{y}, \mathbf{a})(\bar{\mathbf{y}}, \bar{\mathbf{a}}) &= \int_{\Omega} \left\{ c_1^{C^e} \text{GRAD} [\bar{\mathbf{C}}^e] \cdot \mathbf{C}^{-1} \cdot \text{GRAD} [\boldsymbol{\zeta}] - c_2^{C^e} (\mathbf{C}^e - \bar{\mathbf{C}}^e) : \boldsymbol{\zeta} \right. \\
 &\quad + c_1^B \text{GRAD} [\bar{\mathbf{B}}] \cdot \mathbf{C}^{-1} \cdot \text{GRAD} [\boldsymbol{\xi}] - c_2^B (\mathbf{B} - \bar{\mathbf{B}}) : \boldsymbol{\xi} \\
 &\quad + c\tau \frac{d\Theta}{dt} + \kappa \text{GRAD} [\tau] \cdot \mathbf{C}^{-1} \cdot \text{GRAD} [\Theta] + \tau (\mathcal{H}_{heat}^e - \mathcal{D}_{int} - R) \\
 &\quad + \mathbf{S} : \partial_a \mathbf{C}[\bar{\mathbf{a}}] \\
 &\quad \left. + (\partial_t \mathbf{u} - \mathbf{v}) \cdot \boldsymbol{\eta}_1 + \rho_0 \partial_t \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\eta}_2 + \frac{1}{2} \mathbf{S} : \partial_u \mathbf{C}[\boldsymbol{\eta}_2] \right\} dV - G_{ext}(\boldsymbol{\eta}_2) = 0.
 \end{aligned} \tag{6.2}$$

Die Parameter \mathbf{a} werden eliminiert. Es besteht also die Abhängigkeit $\mathbf{a} = \mathbf{a}(\mathbf{y})$, die sich jedoch nur inkrementell hinschreiben lässt (2.44). Es wird also ein $\mathbf{y} \in \mathcal{V}$ gesucht, so dass

$$\bar{r}(\mathbf{y})(\bar{\mathbf{y}}) = \hat{r}(\mathbf{y}, \mathbf{a}(\mathbf{y}))(\bar{\mathbf{y}}, \bar{\mathbf{a}}(\bar{\mathbf{y}})) = 0 \quad \forall \bar{\mathbf{y}} \in \mathcal{V}_0. \tag{6.3}$$

Es treten hinzu die Kuhn-Tucker-Bedingungen (3.5), $\phi \leq 0$, $\gamma \geq 0$, $\phi\gamma = 0$, und das Kontaktproblem (1.10), $d_n \leq 0$, $F_n \geq 0$, $d_n F_n = 0$, $F_t = 0$. Die Lösung der lokalen Probleme und damit die Projektion der Spannung auf die Fließfläche ist zwar bereits in (6.2) enthalten, nicht jedoch die Unterscheidung zwischen dem elastischen ($\phi < 0$) und dem plastischen ($\phi = 0$, $\gamma > 0$) Zustand. Diese erfolgt in Abschnitt 8.3. Die Kontaktprojektion wird in Abschnitt 6.4.2 auf das diskrete System angewendet. Die Unterscheidung von aktiven und inaktiven Knoten findet ebenfalls in Abschnitt 8.3 statt. Die Lösung von (6.3) erfolgt mit dem Newton-Verfahren, wobei in jeder Iteration das Inkrement $\dot{\mathbf{y}} \in \mathcal{V}$ berechnet wird, so dass

$$\bar{r}(\mathbf{y})(\bar{\mathbf{y}}) + \bar{r}'(\mathbf{y})(\bar{\mathbf{y}}, \dot{\mathbf{y}}) = 0, \quad \forall \bar{\mathbf{y}} \in \mathcal{V}_0. \tag{6.4}$$

Es wird die Linearisierung von \hat{r} (6.3) hingeschrieben, weil sie gebraucht wird, um die Eliminierung durchzuführen: Gesucht werden $\dot{\mathbf{y}} \in \mathcal{V}$ und $\dot{\mathbf{a}} \in \mathbb{R}^{N_{int}}$, so dass

$$\hat{r}(\mathbf{y}, \mathbf{a})(\bar{\mathbf{y}}, \bar{\mathbf{a}}) + \hat{r}'(\mathbf{y}, \mathbf{a})(\bar{\mathbf{y}}, \bar{\mathbf{a}}, \dot{\mathbf{y}}, \dot{\mathbf{a}}) = 0, \quad \forall \bar{\mathbf{y}} \in \mathcal{V}_0, \quad \forall \bar{\mathbf{a}} \in \mathbb{R}^{N_{int}}. \tag{6.5}$$

Um später das duale Problem formulieren zu können, werden in (6.4) alle Terme abgespalten, die eine Zeitableitung enthalten. Dazu wird die Semi-Trilinearform \bar{b} verwendet,

$$\bar{r}(\mathbf{y})(\bar{\mathbf{y}}) = \bar{b}(\mathbf{y})(\partial_t \mathbf{y}, \bar{\mathbf{y}}) + \bar{a}(\mathbf{y})(\bar{\mathbf{y}}) = 0, \quad \forall \bar{\mathbf{y}} \in \mathcal{V}_0. \tag{6.6}$$

Die Nichtlinearität in \bar{b} wird durch \mathcal{H}_{heat}^e (5.41) verursacht. Für (6.2) ergibt sich

$$\bar{b}(\mathbf{y})(\partial_t \mathbf{y}, \bar{\mathbf{y}}) = \int_{\Omega} \rho_0 \boldsymbol{\eta}_1 \cdot \partial_t \mathbf{v} + \boldsymbol{\eta}_2 \cdot \partial_t \mathbf{u} + c\tau \partial_t \Theta + \tau \mathcal{H}_{heat}^e(\mathbf{y})[\partial_t \mathbf{u}] dV. \tag{6.7}$$

In der Ableitung des Residuums,

$$\bar{r}'(\mathbf{y})(\bar{\mathbf{y}}, \dot{\mathbf{y}}) = \bar{b}' + \bar{a}' = \bar{b}(\mathbf{y})(\partial_t \dot{\mathbf{y}}, \bar{\mathbf{y}}) + \partial_{\mathbf{y}} \bar{b}(\mathbf{y})(\partial_t \mathbf{y}, \bar{\mathbf{y}}, \dot{\mathbf{y}}) + \bar{a}'(\mathbf{y})(\bar{\mathbf{y}}, \dot{\mathbf{y}}), \tag{6.8}$$

bedeutet $\partial_{\mathbf{y}} \bar{b}$ die Ableitung allein nach der Nichtlinearität im ersten Argument.

6.2 Linearisierung

In der Linearisierung von \bar{r} (6.2) treten folgende Ableitungen auf:

$$\begin{array}{cccc}
 d_C \mathbf{C}^e, & d_\Theta \mathbf{C}^e, & d_{\bar{B}} \mathbf{C}^e, & d_{\bar{C}^e} \mathbf{C}^e, \\
 d_C \mathbf{B}, & d_\Theta \mathbf{B}, & d_{\bar{B}} \mathbf{B}, & d_{\bar{C}^e} \mathbf{B}, \\
 d_C(\mathcal{H}_{heat}^e - \mathcal{D}_{int}), & d_\Theta(\mathcal{H}_{heat}^e - \mathcal{D}_{int}), & d_{\bar{B}}(\mathcal{H}_{heat}^e - \mathcal{D}_{int}), & d_{\bar{C}^e}(\mathcal{H}_{heat}^e - \mathcal{D}_{int}), \\
 d_C \mathbf{S}, & d_\Theta \mathbf{S}, & d_{\bar{B}} \mathbf{S}, & d_{\bar{C}^e} \mathbf{S}, \\
 d_C \mathbf{F}^p, & d_\Theta \mathbf{F}^p, & d_{\bar{B}} \mathbf{F}^p, & d_{\bar{C}^e} \mathbf{F}^p.
 \end{array} \tag{6.9}$$

Wenn auf die *Enhanced-Gradient*-Formulierung für \mathbf{C}^e verzichtet wird, so entfällt die rechte Spalte. In diesem Fall kann statt \mathbf{C}^e als innere Variable \mathbf{F}^p gewählt werden, womit auch die erste Zeile entfällt. Die Voraussetzung zur Berechnung dieser Ableitungen ist die Lösung des lokalen Problems, also $R_\alpha = 0$ (3.24) und $\mathbf{R}_\omega = \mathbf{0}$ (3.23). Deshalb wird die Lösung des lokalen Problems zur Linearisierung gezählt. Die Ableitungen (6.9) werden nach einem einheitlichen Schema berechnet, welches für \mathbf{C} , $\bar{\mathbf{B}}$, \bar{b} , $\bar{\mathbf{C}}^e$ und Θ gleich ist. Es kommen in dem Schema nur Matrizen und Vektoren vor. Im Folgenden steht \mathbf{Z} entweder für \mathbf{C} , $\bar{\mathbf{B}}$, \bar{b} , $\bar{\mathbf{C}}^e$ oder Θ . Entsprechend ändert sich die Dimension $N_Z = \dim(\mathbf{Z})$:

Es werden nur wenige, vergleichsweise einfach zu programmierende partielle Ableitungen (s. Ab-

\mathbf{Z}		\mathbf{C}	$\bar{\mathbf{B}}$	\bar{b}	$\bar{\mathbf{C}}^e$	Θ
$\dim(\mathbf{Z})$	$3D$	6	6	1	6	1
$\dim(\mathbf{Z})$	$2D$	3	3	1	3	1

Tabelle 6.1: Je nach Raumdimension und Bedeutung ändert sich die Dimension von \mathbf{Z} .

schnitt A) gebraucht, welche rechts in der Tabelle (6.2) stehen. Aus diesen berechnet das einheitliche Verfahren die vollständigen Ableitungen in der linken Spalte.

Von grundlegender Bedeutung ist im Folgenden das vollständige Differential C.128. Ansonsten

vollständige Ableitung	zu programmierende partielle Ableitungen		
$d_\alpha R_\phi$	$\partial_\omega \mathbf{R}_\omega, \partial_\omega R_\phi$	$\partial_\alpha \mathbf{R}_\omega, \partial_\alpha R_\phi$	
$d_Z \mathbf{S}$	$\partial_\omega \bar{\mathbf{S}}$		$\partial_Z \mathbf{R}_\omega, \partial_Z R_\phi, \partial_Z \bar{\mathbf{S}}$
$d_Z(\mathcal{H}_{heat}^e - \mathcal{D}_{int})$	$\partial_\omega(\mathcal{H}_{heat}^e - \mathcal{D}_{int})$	$\partial_\alpha(\mathcal{H}_{heat}^e - \mathcal{D}_{int})$	$\partial_Z(\mathcal{H}_{heat}^e - \mathcal{D}_{int})$
$d_Z \boldsymbol{\omega}$			
$d_Z \mathbf{F}^p$	$\partial_\omega \mathbf{F}^p$	$\partial_\alpha \mathbf{F}^p$	$\partial_Z \mathbf{F}^p$

Tabelle 6.2: Die vollständigen Ableitungen in der linken Spalte werden nach einem einheitlichen Verfahren aus den partiellen Ableitungen rechts berechnet.

wird die Kettenregel verwendet. Die Rechnungen finden fast nur mit Matrizen und Vektoren statt. Zur Lösung des lokalen Problems müssen Gleichungssysteme gelöst werden. Dies geschieht mit der QR-Zerlegung. Zur Berechnung der Tangenten müssen Gleichungssysteme mit der aus dem lokalen Problem gegebenen Matrix $\partial_\omega \mathbf{R}_\omega$ gelöst werden. Es muss also nur die gegebene QR-Zerlegung auf

eine Sequenz von rechten Seiten angewendet werden.

6.2.1 Lösung des lokalen Problems

Es wird nun der Algorithmus aus Abschnitt 3.4 ausführlicher dargestellt. Die inneren Variablen werden in einen Vektor der Länge $N_\omega = \dim(\boldsymbol{\omega})$ geschrieben. Es ist $\mathbf{R}_\omega = \mathbf{0}$ mit dem Newton-Verfahren zu lösen. Für jeden Newton-Schritt wird eine QR-Zerlegung von $\partial_\omega \mathbf{R}_\omega$ durchgeführt, mit der das Gleichungssystem

$$\sum_{j=1}^{N_\omega} (\partial_\omega \mathbf{R}_\omega)_{ij} (\delta \boldsymbol{\omega})_j = (\mathbf{R}_\omega)_i, \quad i = 1, 2, \dots, N_\omega. \quad (6.10)$$

gelöst wird. Der Lösungsvektor $\delta \boldsymbol{\omega}$ wird nach Voigt (C.13) skaliert. $\boldsymbol{\omega}$ wird mit $\delta \boldsymbol{\omega}$ aktualisiert. Nach der Konvergenz des Verfahrens auf der unteren Stufe wird ein Newton-Schritt auf der mittleren Stufe zur Lösung von $R_\phi = 0$ ausgeführt. Dazu ist zuerst ein Gleichungssystem mit der gegebenen QR-Zerlegung aus letztem Newton-Schritt (6.10) zu lösen,

$$\sum_{j=1}^{N_\omega} (\partial_\omega \mathbf{R}_\omega)_{ij} (d_\alpha \boldsymbol{\omega})_j = -(\partial_\alpha \mathbf{R}_\omega)_i, \quad i = 1, 2, \dots, N_\omega, \quad (6.11)$$

wobei der Lösungsvektor $d_\alpha \boldsymbol{\omega}$ nach Voigt (C.13) skaliert wird. In (6.11) wurde (C.128) angewendet. Damit kann ein Newton-Schritt mit dem Inkrement $\delta \alpha = -(\partial_\alpha R_\phi)^{-1} R_\phi$ mit

$$d_\alpha R_\phi = \sum_{i=1}^{N_\omega} (\partial_\omega R_\phi)_i (d_\alpha \boldsymbol{\omega})_i + \partial_\alpha R_\phi \quad (6.12)$$

ausgeführt werden. α wird mit $\delta \alpha$ aktualisiert. Dieses gestaffelte Verfahren wird bis zur Konvergenz auf der mittleren Stufe fortgesetzt.

6.2.2 Tangenten für global stetige Variablen

Es wird nun das Verfahren aus Abschnitt 3.5 in eine größere Systematik gebracht, um auf einheitliche Weise die vollständigen Ableitungen aus der linken Spalte der Tabelle (6.2) zu berechnen. Für die Lösung des lokalen Problems wurden bereits $\partial_\omega \mathbf{R}_\omega$ und $\partial_\omega R_\phi$ programmiert. $d_\alpha R_\phi$ (6.12) und $d_\alpha \boldsymbol{\omega}$ (6.11) wurden berechnet.

1. Es wird (C.128) angewendet, um $\partial_Z \boldsymbol{\omega}$ zu erhalten. Die Voraussetzung $\mathbf{R}_\omega = \mathbf{0}$ ist erfüllt. Dazu werden N_Z (6.1) Gleichungssysteme mit der aus (6.10) gegebenen QR-Zerlegung gelöst. Die Lösungsvektoren sind die k -te Spalte von $\partial_Z \boldsymbol{\omega}$:

$$\sum_{j=1}^{N_\omega} (\partial_\omega \mathbf{R}_\omega)_{ij} (\partial_Z \boldsymbol{\omega})_{jk} = -(\partial_Z \mathbf{R}_\omega)_{ik}, \quad i = 1, 2, \dots, N_\omega, \quad k = 1, 2, \dots, N_Z. \quad (6.13)$$

Die Lösungsvektoren sind nach Voigt (C.13) zu skalieren.

2. Es wird nach der Kettenregel die vollständige Ableitung $d_Z R_\phi$ gebildet:

$$(d_Z R_\phi)_k = (\partial_Z R_\phi)_k + \sum_{j=1}^{N_\omega} (\partial_\omega R_\phi)_j (\partial_Z \boldsymbol{\omega})_{jk} \quad k = 1, 2, \dots, N_Z. \quad (6.14)$$

3. Es wird (C.128) angewendet, um $d_Z\alpha$ zu erhalten. Die Voraussetzung $R_\phi = 0$ ist erfüllt:

$$(d_Z\alpha)_k = - (d_\alpha R_\phi)^{-1} (d_Z R_\phi)_k. \quad (6.15)$$

4. Es wird die vollständige Ableitung $d_Z\omega$ gebildet:

$$(d_Z\omega)_{jk} = (\partial_Z\omega)_{jk} + (d_\alpha\omega)_j (d_Z\alpha)_k \quad j = 1, 2, \dots, N_\omega, \quad k = 1, 2, \dots, N_Z. \quad (6.16)$$

$d_Z\omega$ gehört zu den gesuchten vollständigen Ableitungen (6.2).

5. Es wird die vollständige Ableitung $d_Z\mathbf{F}^P$ zusammengesetzt. Es gilt $N_{F^P} = \dim(\mathbf{F}^P)$:

$$(d_Z\mathbf{F}^P)_{mk} = (\partial_Z\mathbf{F}^P)_{mk} + \sum_{j=1}^{N_\omega} (\partial_\omega\mathbf{F}^P)_{mj} (d_Z\omega)_{jk} + (d_\alpha\mathbf{F}^P)_m (d_Z\alpha)_k, \quad (6.17)$$

$$m = 1, \dots, N_{F^P}, \quad k = 1, \dots, N_Z.$$

Dieser Schritt ist an die Verwendung des Residuums (3.16) gebunden. Für \mathbf{F}^P als innerer Variable ist $d_Z\mathbf{F}^P$ bereits die erste Zeile von $d_Z\omega$.

6. Es wird die vollständige Ableitung $d_Z\bar{\mathbf{S}}$ zusammengesetzt. Es gilt $N_{\bar{\mathbf{S}}} = \dim(\bar{\mathbf{S}})$:

$$(d_Z\bar{\mathbf{S}})_{mk} = (\partial_Z\bar{\mathbf{S}})_{mk} + \sum_{j=1}^{N_\omega} (\partial_\omega\bar{\mathbf{S}})_{mj} (d_Z\omega)_{jk}, \quad m = 1, 2, \dots, N_{\bar{\mathbf{S}}}, \quad k = 1, 2, \dots, N_Z. \quad (6.18)$$

Es wird $d_Z\mathbf{F}^P$ über die Matrix (\mathbb{G}) (A.8) hinzugefügt, vgl. für $\mathbf{Z} = \mathbf{C}$ (1.30):

$$(\widetilde{d_Z\bar{\mathbf{S}}})_{mk} = (d_Z\bar{\mathbf{S}})_{mk} + \sum_{j=1}^{N_{F^P}} (\mathbb{G})_{mj} (d_Z\mathbf{F}^P)_{jk}, \quad m = 1, 2, \dots, N_{\bar{\mathbf{S}}}, \quad k = 1, 2, \dots, N_Z. \quad (6.19)$$

Daraus wird $d_Z\mathbf{S}$ bestimmt, vgl. für $\mathbf{Z} = \mathbf{C}$ (1.30), wobei alle Indizes außer k nach Einstein'scher Summationskonvention laufen:

$$(d_Z\mathbf{S})_{s_{ij}k} = F_{ip}^{P-1} (\widetilde{d_Z\bar{\mathbf{S}}})_{s_{pq}k} F_{qj}^{P-T}, \quad k = 1, 2, \dots, N_Z. \quad (6.20)$$

s (C.10) bezeichnet die Abwicklung der Tensorkomponenten. Dies ist die einzige Stelle im Algorithmus, an der die Matrix-Vektor-Schreibweise verlassen wird.

7. Für den Quellterm in der Thermoelastoplastizität $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{heat}^e - \mathcal{D}_{int}$ müssen die partiellen Ableitungen $\partial_Z\mathcal{H}$, $\partial_\omega\mathcal{H}$, $\partial_\alpha\mathcal{H}$ programmiert werden. Die vollständige Ableitung lautet

$$(d_Z\mathcal{H})_k = (\partial_Z\mathcal{H})_k + \sum_{j=1}^{N_\omega} (\partial_\omega\mathcal{H})_j (d_Z\omega)_{jk} + (\partial_\alpha\mathcal{H}) (d_Z\alpha) + \sum_{j=1}^{N_{F^P}} (\partial_{F^P}\mathcal{H})_j (d_Z\mathbf{F}^P)_{jk}, \quad (6.21)$$

$$k = 1, 2, \dots, N_Z.$$

wobei $d_Z\mathbf{F}^P$ (6.17). Der letzte Term tritt nur bei Verwendung des Residuums (3.16) auf. Für \mathbf{F}^P als innerer Variable ist $d_Z\mathbf{F}^P$ bereits die erste Zeile von $d_Z\omega$.

6.2.3 Reduzierte, einstufige Alternative

Das Verfahren aus den Abschnitten 6.2.1 und 6.2.2 lässt sich so vereinfachen, dass die untere Iterationsstufe wegfällt. Das numerische Verfahren bekommt dadurch Eigenschaften einer Fixpunkt-

titeration. Weil kleinere Zeitschritte notwendig sind, wird die verkürzte Rechenzeit jedoch wieder ausgeglichen.

Die Residuen \mathbf{R}_ω sind so zu formulieren, dass $\mathbf{R}_\omega = \mathbf{0}$ immer erfüllt ist und dass $\partial_\omega \mathbf{R}_\omega$ die Einheitsmatrix ist. Dadurch entfällt (6.10), und es gilt statt (6.11) $d_\alpha \omega = -\partial_\alpha \mathbf{R}_\omega$. Das Newton-Verfahren auf der mittleren Stufe (6.12) bleibt unverändert erhalten.

Bei der Tangente entfällt die Lösung der Gleichungssysteme (6.13). Stattdessen gilt $\partial_Z \omega = -\partial_Z \mathbf{R}_\omega$. Das weitere Verfahren bleibt unverändert. Die geforderte Vereinfachung ist nicht für die Formulierung des Residuums in Abschnitt 3.3.4 möglich.

Evolutionsgleichung direkt (Abschnitt 3.3.1)

Das Residuum $\mathbf{R}_{F^p} = \mathbf{F}_{n+1}^p - \mathbf{F}_n^p - \Delta\gamma \partial_\Sigma \phi \mathbf{F}_*^p$ (3.12) wird so vereinfacht, dass $\mathbf{R}_{F^p} = \mathbf{0}$ immer erfüllt ist und dass $\partial_{F^p} \mathbf{R}_{F^p} = \mathbb{I}$ (C.5) gilt. Dazu wird $\partial_\Sigma \phi \mathbf{F}_*^p = (\partial_\Sigma \phi \mathbf{F}_*^p)^0$ als Konstante aufgefasst und \mathbf{F}_{n+1}^p als Funktion von α geschrieben, $\mathbf{F}_{n+1}^p(\alpha) = \mathbf{F}_n^p + \Delta\gamma(\alpha) (\partial_\Sigma \phi \mathbf{F}_*^p)^0$ (3.11), so dass mit

$$\mathbf{R}_{F^p}(\alpha) = \mathbf{F}_{n+1}^p(\alpha) - \mathbf{F}_n^p - \Delta\gamma(\alpha) (\partial_\Sigma \phi \mathbf{F}_*^p)^0 = \mathbf{0} \quad (6.22)$$

alle Forderungen erfüllt sind. Es gilt

$$\begin{aligned} \partial_\alpha \mathbf{R}_{F^p}(\alpha) &= -\Delta\gamma'(\alpha) (\partial_\Sigma \phi \mathbf{F}_*^p)^0, \\ \partial_Z \mathbf{R}_{F^p}(\alpha) &= -\Delta\gamma(\alpha) (\partial_{Z\Sigma}^2 \phi \mathbf{F}_*^p)^0. \end{aligned} \quad (6.23)$$

Die Konstanten $(\partial_\Sigma \phi \mathbf{F}_*^p)^0$ und $(\partial_{Z\Sigma}^2 \phi \mathbf{F}_*^p)^0$ werden zu Beginn der Iteration zur Lösung von $R_\phi = 0$ mit den bekannten Daten berechnet.

Mit Exponentialfunktion und F^p als innerer Variable (Abschn. 3.3.2)

Das Residuum $\mathbf{R}_{F^p} = \mathbf{F}_*^p - \exp(\Delta\gamma \partial_\Sigma \phi) \mathbf{F}_n^p$ (3.15) wird vereinfacht, indem $\partial_\Sigma \phi = (\partial_\Sigma \phi)^0$ als Konstante aufgefasst wird und \mathbf{F}_*^p als Funktion von α geschrieben wird, $\mathbf{F}_*^p(\alpha) = \exp(\Delta\gamma(\alpha) (\partial_\Sigma \phi)^0) \mathbf{F}_n^p$, so dass mit

$$\mathbf{R}_{F^p}(\alpha) = \mathbf{F}_*^p(\alpha) - \exp(\Delta\gamma(\alpha) (\partial_\Sigma \phi)^0) \mathbf{F}_n^p \quad (6.24)$$

alle Forderungen erfüllt sind. Es gilt (C.99)

$$\begin{aligned} \partial_\alpha \mathbf{R}_{F^p}(\alpha) &= -\exp'(\Delta\gamma(\alpha) (\partial_\Sigma \phi)^0) \circ \Delta\gamma'(\alpha) (\partial_\Sigma \phi)^0 \circ \mathbf{F}_n^p, \\ \partial_Z \mathbf{R}_{F^p}(\alpha) &= -\exp'(\Delta\gamma(\alpha) (\partial_\Sigma \phi)^0) \circ \Delta\gamma(\alpha) (\partial_{Z\Sigma}^2 \phi)^0 \circ \mathbf{F}_n^p. \end{aligned} \quad (6.25)$$

Die Konstanten $(\partial_\Sigma \phi)^0$ und $(\partial_{Z\Sigma}^2 \phi)^0$ werden zu Beginn der Iteration zur Lösung von $R_\phi = 0$ mit den bekannten Daten berechnet.

Mit Exponentialfunktion und C^e als innerer Variable (Abschn. 3.3.3)

Das Residuum $\mathbf{R}_{C^e} = \mathbf{C}_*^e - e^{-T} \mathbf{C}^{e*} e^{-1}$ (3.16) mit $e = \exp(\Delta\gamma \partial_\Sigma \phi)$ wird so vereinfacht, dass $\mathbf{R}_{C^e} = \mathbf{0}$ immer erfüllt ist und dass $\partial_{C^e} \mathbf{R}_{C^e} = \mathbb{I}$ (C.5) gilt. Dazu wird $\partial_\Sigma \phi = (\partial_\Sigma \phi)^0$ als Konstante aufgefasst und \mathbf{C}_*^e als Funktion von α geschrieben, $\mathbf{C}_*^e(\alpha) = e^{-T}(\alpha) \mathbf{C}^{e*} e^{-1}(\alpha)$, so dass mit

$$\mathbf{R}_{C^e}(\alpha) = \mathbf{C}_*^e(\alpha) - e^{-T}(\alpha) \mathbf{C}^{e*} e^{-1}(\alpha) \quad (6.26)$$

alle Forderungen erfüllt sind. Es gilt (C.99)

$$\begin{aligned}
 \partial_\alpha \mathbf{R}_{C^e}(\alpha) &= -(\mathbf{e}^{-T})' \circ \Delta\gamma'(\partial_\Sigma\phi)^0 \circ \mathbf{C}^{e*} \mathbf{e}^{-1} - \mathbf{e}^{-T} \mathbf{C}^{e*} (\mathbf{e}^{-1})' \circ \Delta\gamma'(\partial_\Sigma\phi)^0, \\
 \partial_Z \mathbf{R}_{C^e}(\alpha) &= -(\mathbf{e}^{-T})' \circ \Delta\gamma'(\partial_{ZZ}^2\phi)^0 \circ \mathbf{C}^{e*} \mathbf{e}^{-1} - \mathbf{e}^{-T} \mathbf{C}^{e*} (\mathbf{e}^{-1})' \circ \Delta\gamma'(\partial_{ZZ}^2\phi)^0 \\
 &\quad - \mathbf{e}^{-T} \partial_Z \mathbf{C}^{e*} \circ \mathbf{e}^{-1}.
 \end{aligned} \tag{6.27}$$

Die Konstanten $(\partial_\Sigma\phi)^0$ und $(\partial_{ZZ}^2\phi)^0$ werden zu Beginn der Iteration zur Lösung von $R_\phi = 0$ mit den bekannten Daten berechnet. Der letzte Term ist für $\mathbf{Z} = \mathbf{C}$ ungleich Null. $\partial_C \mathbf{C}^{e*}$ berechnet sich aus (C.39) mit $\mathbf{F}^p = \mathbf{F}_n^p$.

Vernachlässigung des plastischen Spins (Abschnitt 3.3.5)

Das Residuum $\mathbf{R}_{C^e} = \mathbf{C}_*^e + 2\Delta\gamma_* \text{sym} [\mathbf{C}_*^e \partial_\Sigma\phi] - \mathbf{C}^{e*}$ (3.21) wird vereinfacht, indem $\text{sym} [\mathbf{C}_*^e \partial_\Sigma\phi] = (\text{sym} [\mathbf{C}_*^e \partial_\Sigma\phi])^0$ als Konstante aufgefasst wird und \mathbf{C}_*^e als Funktion von α geschrieben wird, $\mathbf{C}_*^e(\alpha) = -2\Delta\gamma_*(\alpha) \text{sym} [\mathbf{C}_*^e \partial_\Sigma\phi] + \mathbf{C}^{e*}$, so dass mit

$$\mathbf{R}_{C^e}(\alpha) = \mathbf{C}_*^e(\alpha) + 2\Delta\gamma_*(\alpha) (\text{sym} [\mathbf{C}_*^e \partial_\Sigma\phi])^0 - \mathbf{C}^{e*} \tag{6.28}$$

alle Forderungen erfüllt sind. Es gilt

$$\begin{aligned}
 \partial_\alpha \mathbf{R}_{C^e}(\alpha) &= 2\Delta\gamma_*'(\alpha) (\text{sym} [\mathbf{C}_*^e \partial_\Sigma\phi])^0, \\
 \partial_Z \mathbf{R}_{C^e}(\alpha) &= 2\Delta\gamma_*(\alpha) (\text{sym} [\mathbf{C}_*^e \partial_{ZZ}^2\phi])^0 - \partial_Z \mathbf{C}^{e*}
 \end{aligned} \tag{6.29}$$

Die Konstanten $(\text{sym} [\mathbf{C}_*^e \partial_\Sigma\phi])^0$ und $(\text{sym} [\mathbf{C}_*^e \partial_{ZZ}^2\phi])^0$ werden zu Beginn der Iteration zur Lösung von $R_\phi = 0$ mit den bekannten Daten berechnet. Der letzte Term ist für $\mathbf{Z} = \mathbf{C}$ ungleich Null. $\partial_C \mathbf{C}^{e*}$ berechnet sich aus (C.39) mit $\mathbf{F}^p = \mathbf{F}_n^p$.

6.3 Diskretisierung in der Zeit

Die Diskretisierung im Raum steht in Abschn. 1.1.

6.3.1 Zeitschema

Auf dem Zeitschritt $\Delta t_n = [t_n, t_{n+1}]$ sind zum Zeitpunkt t_n alle Größen $\mathbf{u}_n, \boldsymbol{\omega}_n, \dots$ gegeben. Die Größen zum Zeitpunkt t_{n+1} werden in einer Iteration berechnet. In der Iteration (k) sind die Größen $\mathbf{u}_{n+1}^{(k-1)}, \boldsymbol{\omega}_{n+1}^{(k-1)}, \dots$ bekannt. Aus ihnen werden die Größen zum Zeitpunkt $t_{n+\vartheta}$ mit $\vartheta \in [0, 1]$ interpoliert, also z. B.

$$\boldsymbol{\omega}_{n+\vartheta} = \boldsymbol{\omega}_* = \vartheta \boldsymbol{\omega}_{n+1}^{(k-1)} + (1 - \vartheta) \boldsymbol{\omega}_n \tag{6.30}$$

Der Index $*$ bezeichnet die linear interpolierte Zwischenkonfiguration.

Der Parameter $\vartheta \in [0, 1]$ legt fest, wo innerhalb des Zeitschritts die Diskretisierung in der Zeit erfolgt. Für $\vartheta \leq 0.5$ ist das Schema instabil. Mit der Wahl $\vartheta = 0.5$ bleibt die Energie erhalten. Diese Diskretisierung entspricht dem Newmark-Mittelpunktsschema. Die Konsequenz ist jedoch eine Instabilität, die sich in Oszillationen der Lösung äußert. Um diese zu vermeiden, wird ϑ erhöht, beispielsweise auf $\vartheta = 0.55$. Damit ist eine Dämpfung der Energie verbunden. Stabilität und auch Dämpfung sind für $\vartheta = 1$ am größten. Der Fehler, welcher aus der Dämpfung entsteht, wird jedoch erst bei mehreren Lastwechseln relevant. Für eine energierhaltende Lösung müssen spezielle Zwischenkonfigurationen $\boldsymbol{\omega}_{n+\vartheta} = \boldsymbol{\omega}(\boldsymbol{\omega}_*) \neq \boldsymbol{\omega}_*$ konstruiert werden, siehe MOHR & STEINMANN [44]. Hier liegt ein Feld möglicher Modellhierarchien,

Es wird das Zeitschema auf die Impulsbilanz (1.5) angewendet. Alle gegebenen Größen müssen an der Stelle $n + \vartheta$ eingesetzt werden. Dafür gibt es jedoch mehrere Möglichkeiten. Die Diskretisierung

von $\int_{\Omega} \frac{1}{2} \dot{\mathbf{C}}[\boldsymbol{\eta}] : \mathbf{S}(\mathbf{C}) dV$ lautet

$$\int_{\Omega} \frac{1}{2} \dot{\mathbf{C}}(\mathbf{u}_{n+\vartheta})[\boldsymbol{\eta}] : \mathbf{S}(\mathbf{C}_*) dV. \quad (6.31)$$

mit $\dot{\mathbf{C}}(\mathbf{u}_{n+\vartheta})$ (C.37) und $\mathbf{C}_* = \vartheta \mathbf{C}_{n+1} + (1 - \vartheta) \mathbf{C}_n$ wobei $\mathbf{C}_{n+1} = \mathbf{C}(\mathbf{u}_{n+1})$ (C.26).

6.3.1 Bemerkung. Richtig wäre auch die Wahl $\int_{\Omega} \frac{1}{2} \dot{\mathbf{C}}(\mathbf{u}_{n+\vartheta})[\boldsymbol{\eta}] : \mathbf{S}(\mathbf{C}(\mathbf{u}_{n+\vartheta})) dV$. Sie ist jedoch unpraktisch. Außerdem macht sie die Assumed-Strain-Formulierung unmöglich, bei der $\mathbf{C}_n \neq \mathbf{F}_n^T \mathbf{F}_n$. Falsch ist die Wahl $\int_{\Omega} \frac{1}{2} \dot{\mathbf{C}}_*[\boldsymbol{\eta}] : \mathbf{S}(\mathbf{C}_*) dV = \int_{\Omega} \frac{1}{2} \vartheta \dot{\mathbf{C}}_{n+1}[\boldsymbol{\eta}] : \mathbf{S}(\mathbf{C}_*) dV$, weil nun $\dot{\mathbf{C}}$ und \mathbf{S} zu verschiedenen Zeitpunkten diskretisiert werden.

In der Linearisierung der Impulsbilanz (1.6) tritt links $\dot{\mathbf{C}}(\mathbf{u}_{n+\vartheta})[\boldsymbol{\eta}] = \mathbb{B}^L[\boldsymbol{\eta}]$ auf und rechts $\dot{\mathbf{C}}_*[\Delta \mathbf{u}] = \vartheta \dot{\mathbf{C}}_{n+1}[\Delta \mathbf{u}] = \vartheta \mathbb{B}^R[\Delta \mathbf{u}]$. Die Ungleichheit $\mathbb{B}^L \neq \mathbb{B}^R$ bringt den Nachteil mit sich, dass \mathbb{B} und auch \mathbb{B}^{as} (2.56) stets zweimal erzeugt werden müssen. (1.6) lautet also

$$\int_{\Omega} \frac{1}{2} \mathbb{B}^L[\boldsymbol{\eta}] : d_C \mathbf{S} : \mathbb{B}^R[\Delta \mathbf{u}] dV + \int_{\Omega} \frac{1}{2} \mathbf{S} : \mathbb{G}[\boldsymbol{\eta}, \Delta \mathbf{u}] dV = G_{\text{ext}}(\boldsymbol{\eta}) - \int_{\Omega} \frac{1}{2} \mathbf{S} : \mathbb{B}^L[\boldsymbol{\eta}] dV. \quad (6.32)$$

6.3.2 Zeitableitung

Die lineare Approximation der Zeitableitung auf dem Zeitschritt $\Delta t = t_{n-1} - t_n$ lautet

$$d\mathbf{u}(t)/dt = \partial_t \mathbf{u} \approx (\mathbf{u}_{n+1} - \mathbf{u}_n) / \Delta t. \quad (6.33)$$

Sie läßt sich mit $\mathbf{u}_{n+1} = (\mathbf{u}_* - (1 - \vartheta) \mathbf{u}_n) / \vartheta$ auf das Inkrement $[t_n, t_{n+\vartheta}]$ verkürzen,

$$\frac{\mathbf{u}_{n+1} - \mathbf{u}_n}{\Delta t} = \frac{(\mathbf{u}_* - (1 - \vartheta) \mathbf{u}_n) - \vartheta \mathbf{u}_n}{\vartheta \Delta t} = \frac{\mathbf{u}_* - \mathbf{u}_n}{\vartheta \Delta t} = \frac{\mathbf{u}_* - \mathbf{u}_n}{\Delta t_*}, \quad (6.34)$$

wobei $\Delta t_* = \vartheta \Delta t$. Die Linearisierung der Zeitableitung lautet

$$(\partial_t \dot{\mathbf{u}}) = \left. \frac{d}{d\zeta} \right|_{\zeta=0} \frac{1}{\Delta t} (\mathbf{u}_{n+1} + \zeta \Delta \mathbf{u} - \mathbf{u}_n) = \frac{1}{\Delta t} \Delta \mathbf{u}. \quad (6.35)$$

$$\dot{\mathbf{u}} = \left. \frac{d}{d\zeta} \right|_{\zeta=0} (\mathbf{u}_{n+1} + \zeta \Delta \mathbf{u}) = \Delta \mathbf{u}. \quad (6.36)$$

6.4 Eliminierung

Es wird $\bar{r}'(\mathbf{y})(\bar{\mathbf{y}}, \dot{\mathbf{y}})$ (6.8) mit der Zeitableitung (6.33), der Rate (6.36) und dem Zeitschema (6.30) in der Zeit diskretisiert,

$$\bar{r}'(\mathbf{y}_*)(\bar{\mathbf{y}}, \Delta \mathbf{y}) = \bar{b}(\mathbf{y}_*)(\frac{1}{\Delta t} \Delta \mathbf{y}_h, \bar{\mathbf{y}}) + \partial_y \bar{b}(\mathbf{y}_*)(\frac{1}{\Delta t} \Delta \mathbf{y}, \bar{\mathbf{y}}, \Delta \mathbf{y}) + \bar{a}'_h(\mathbf{y}_*)(\bar{\mathbf{y}}, \Delta \mathbf{y}). \quad (6.37)$$

Der erste Term \bar{b} (6.7) lautet ausgeschrieben

$$\bar{b}(\mathbf{y}_*)(\frac{1}{\Delta t} \Delta \mathbf{y}, \bar{\mathbf{y}}) = \frac{1}{\Delta t} \int_{\Omega} \rho_0 \boldsymbol{\eta}_1 \cdot \Delta \mathbf{v} + \boldsymbol{\eta}_2 \cdot \Delta \mathbf{u} + c_T \Delta \Theta + \tau \mathcal{H}_{\text{heat}}^e(\mathbf{y}_*)(\Delta \mathbf{u}) dV \quad (6.38)$$

und wird räumlich diskretisiert,

$$\bar{b}_h(\mathbf{y}_{h^*})\left(\frac{1}{\Delta t}\Delta\mathbf{y}_h, \bar{\mathbf{y}}_h\right) = \frac{1}{\Delta t} [\boldsymbol{\eta}_{1,h}^t \rho_0 \mathbf{M}_{uv} \Delta\mathbf{v}_h + \boldsymbol{\eta}_{2,h}^t \mathbf{M}_{vu} \Delta\mathbf{u}_h + \tau_h^t c \mathbf{M}_{\Theta\Theta} \Delta\Theta_h + \tau_h^t \mathbf{M}_{\Theta u}(\mathbf{y}_{h^*}) \Delta\mathbf{u}_h].$$

Die Linearisierung und räumliche Diskretisierung von (6.5) führt auf das lokale (zellweise) Gleichungssystem

$$\begin{pmatrix} \mathbf{R}_u \\ \mathbf{R}_v \\ \mathbf{R}_a \\ \mathbf{R}_\Theta \\ \mathbf{R}_{\bar{B}} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathbf{K}_{uu} & \frac{\rho_0}{\Delta t} \mathbf{M}_{uv} & \mathbf{K}_{ua} & \mathbf{K}_{u\Theta} & \mathbf{K}_{u\bar{B}} \\ \frac{1}{\Delta t} \mathbf{M}_{vu} & -\mathbf{M}_{vv} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{K}_{au} & \mathbf{0} & \mathbf{K}_{aa} & \mathbf{K}_{a\Theta} & \mathbf{K}_{a\bar{B}} \\ \mathbf{K}_{\Theta u} + \frac{1}{\Delta t} \mathbf{M}_{\Theta u} & \mathbf{0} & \mathbf{K}_{\Theta a} & \mathbf{K}_{\Theta\Theta} + \frac{c}{\Delta t} \mathbf{M}_{\Theta\Theta} & \mathbf{K}_{\Theta\bar{B}} \\ \mathbf{K}_{\bar{B}u} & \mathbf{0} & \mathbf{K}_{\bar{B}a} & \mathbf{K}_{\bar{B}\Theta} & \mathbf{K}_{\bar{B}\bar{B}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta\mathbf{u}_h \\ \Delta\mathbf{v}_h \\ \Delta\mathbf{a} \\ \Delta\Theta_h \\ \Delta\bar{\mathbf{B}}_h \end{pmatrix} = \mathbf{0}, \quad (6.39)$$

$\partial_y \bar{b}$ und \bar{a} werden in den Matrizen \mathbf{K} diskretisiert. Eine Ausnahme bildet die Massenmatrix \mathbf{M}_{vv} , welche aus \bar{a} stammt. Aufgrund dieser Zerlegung kann die Diskretisierung für das Primale Problem auch für das duale Problem (7.7) verwendet werden. Wenn die duale Lösung nicht berechnet werden soll, so kann auf die Abspaltung von $\mathbf{M}_{\Theta u}$ und $\mathbf{M}_{\Theta\Theta}$ verzichtet werden.

Die zusätzlichen räumlich stetigen Variablen werden mit $\mathbf{w} = (\Theta, \bar{\mathbf{B}})$ zusammengefasst. Es gilt also $\mathbf{y} = (\mathbf{u}, \mathbf{v}, \Theta, \bar{\mathbf{B}}) = (\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w})$. Entsprechend werden die Massenmatrizen zusammengefasst:

$$\mathbf{M}_{wu} = \begin{pmatrix} \mathbf{M}_{\Theta u} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{M}_{ww} = \begin{pmatrix} c\mathbf{M}_{\Theta\Theta} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix}. \quad (6.40)$$

6.4.1 Eliminierung des Inkrements der Geschwindigkeit

In (6.39) kann die Geschwindigkeit eliminiert werden, wenn für \mathbf{u} und \mathbf{v} die gleichen Ansatzräume verwendet werden, und wenn die Dichte ρ_0 konstant ist. In diesem Fall gilt $\mathbf{M} = \mathbf{M}_{uv} = \mathbf{M}_{vu} = \mathbf{M}_{vv}$. Das Inkrement der Geschwindigkeit wird eliminiert, indem in (6.39) die zweite Gleichung mit $\rho_0/\Delta t$ multipliziert und zur ersten Gleichung addiert wird:

$$\begin{pmatrix} \frac{\rho_0}{\Delta t} \mathbf{R}_v + \mathbf{R}_u \\ \mathbf{R}_a \\ \mathbf{R}_w \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathbf{K}_{uu} + \frac{\rho_0}{(\Delta t)^2} \mathbf{M} & \mathbf{K}_{ua} & \mathbf{K}_{uw} \\ \mathbf{K}_{au} & \mathbf{K}_{aa} & \mathbf{K}_{aw} \\ \mathbf{K}_{wu} + \frac{1}{\Delta t} \mathbf{M}_{wu} & \mathbf{K}_{wa} & \mathbf{K}_{ww} + \frac{1}{\Delta t} \mathbf{M}_{ww} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta\mathbf{u}_h \\ \Delta\mathbf{a} \\ \Delta\mathbf{w}_h \end{pmatrix} = \mathbf{0}. \quad (6.41)$$

Es wird die Impulsbilanz (6.1)₆ mit $\boldsymbol{\eta}_2^T \mathbf{g} = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \mathbf{S} : \partial_u \mathbf{C}[\boldsymbol{\eta}_2] dV - G_{ext}(\boldsymbol{\eta}_2)$ zusammengefasst, so dass das Residuum (6.39)₁ $\mathbf{R}_u = \frac{\rho_0}{\Delta t} \mathbf{M}(\mathbf{v}_{n+1} - \mathbf{v}_n) + \mathbf{g}$ lautet. Mit der Zeitdiskretisierung (6.30) und der Zeitableitung (6.33) ergibt sich für die rechte Seite (6.41)

$$\begin{aligned} \frac{\rho_0}{\Delta t} \mathbf{R}_v + \mathbf{R}_u &= \frac{\rho_0}{\Delta t} \mathbf{M} \left\{ \frac{1}{\Delta t} (\mathbf{u}_{n+1}^{(k-1)} - \mathbf{u}_n) - (\vartheta \mathbf{v}_{n+1}^{(k-1)} + (1 - \vartheta) \mathbf{v}_n) + (\mathbf{v}_{n+1}^{(k-1)} - \mathbf{v}_n) \right\} + \mathbf{g} \\ &= \frac{\rho_0}{\Delta t} \mathbf{M} \left\{ \frac{1}{\Delta t} (\mathbf{u}_{n+1}^{(k-1)} - \mathbf{u}_n) + (1 - \vartheta) \mathbf{v}_{n+1}^{(k-1)} - \vartheta \mathbf{v}_n \right\} + \mathbf{g}. \end{aligned} \quad (6.42)$$

In (6.42) wird \mathbf{g} zellweise assembliert. Die übrigen Terme werden nach der Assemblierung aus globalen Vektoren und der konstanten Massenmatrix berechnet. Der Block $\rho_0/(\Delta t)^2 \mathbf{M} + \mathbf{K}_{uu}$ in (6.41) muss bereits auf der einzelnen Zelle ausgeführt werden, wenn später die lokale Kontaktprojektion auf die lokale Steifigkeitsmatrix angewendet werden soll.

6.4.2 Eliminierung der Enhanced-Strain-Variable

Als letztes muß die Variable $\Delta \mathbf{a}$ aus dem lokalen Gleichungssystem (6.41) eliminiert werden. Dies erfolgt zunächst ohne lokale Kontaktprojektion, womit die globale Kontaktprojektion (1.13) nicht ausgeschlossen ist. Anschließend wird die lokale Kontaktprojektion angewendet.

Ohne lokale Kontaktprojektion

Es werden nun in (6.41) alle stetigen Variablen mit $\mathbf{x}_h = (\mathbf{u}_h, \mathbf{w}_h) = (\mathbf{u}_h, \Theta_h, \bar{\mathbf{B}}_h, \bar{\mathbf{C}}_h^e)$ zusammengefasst,

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_a + \mathbf{K}_{aa} \Delta \mathbf{a}_h + \mathbf{K}_{ax} \Delta \mathbf{x}_h &= 0, \\ \mathbf{R}_x + \mathbf{K}_{xa} \Delta \mathbf{a}_h + \mathbf{K}_{xx} \Delta \mathbf{x}_h &= 0. \end{aligned} \quad (6.43)$$

Es wird $\Delta \mathbf{a} = -\mathbf{K}_{aa}^{-1} \mathbf{R}_a - \mathbf{K}_{aa}^{-1} \mathbf{K}_{ax} \Delta \mathbf{x}_h$ eliminiert, so dass sich das lokale Gleichungssystem

$$(\mathbf{K}_{xx} - \mathbf{K}_{xa} \mathbf{K}_{aa}^{-1} \mathbf{K}_{ax}) \Delta \mathbf{x}_h = -\mathbf{R}_x + \mathbf{K}_{xa} \mathbf{K}_{aa}^{-1} \mathbf{R}_a \quad (6.44)$$

ergibt. Dieses lokale Gleichungssystem wird zum globalen Gleichungssystem $\mathbf{A}_h \Delta \mathbf{x}_h = \mathbf{f}_h$ assembliert.

Mit lokaler Kontaktprojektion

Die lokale Kontaktprojektion wirkt allein auf die Verschiebung und ihre Testfunktion. Um sie auf \mathbf{x} anwenden zu können, wird sie mit den Identitäten 1 in der Form

$$\mathbf{P}_x = \begin{pmatrix} \mathbf{P}_u & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (6.45)$$

geschrieben. Es wird \mathbf{P}_x in (6.43) angewendet,

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_a + \mathbf{K}_{aa} \Delta \mathbf{a}_h + \mathbf{K}_{ax} \mathbf{P}_x \Delta \mathbf{x}_h &= 0, \\ \mathbf{P}_x^t \mathbf{R}_x + \mathbf{P}_x^t \mathbf{K}_{xa} \Delta \mathbf{a}_h + \mathbf{P}_x^t \mathbf{K}_{xx} \mathbf{P}_x \Delta \mathbf{x}_h &= 0. \end{aligned} \quad (6.46)$$

Es wird wie folgt zusammengefasst: $\tilde{\mathbf{K}}_{ax} = \mathbf{K}_{ax} \mathbf{P}_x$, $\tilde{\mathbf{K}}_{xa} = \mathbf{P}_x^t \mathbf{K}_{xa}$, $\tilde{\mathbf{K}}_{xx} = \mathbf{P}_x^t \mathbf{K}_{xx} \mathbf{P}_x$ und $\tilde{\mathbf{R}}_x = \mathbf{P}_x^t \mathbf{R}_x$. Aus der ersten Gleichung (6.46)₁ folgt $\Delta \mathbf{a} = -\mathbf{K}_{aa}^{-1} \mathbf{R}_a - \mathbf{K}_{aa}^{-1} \tilde{\mathbf{K}}_{ax} \Delta \mathbf{x}_h$, welches in die zweite Gleichung eingesetzt wird,

$$(\tilde{\mathbf{K}}_{xx} - \tilde{\mathbf{K}}_{xa} \mathbf{K}_{aa}^{-1} \tilde{\mathbf{K}}_{ax}) \Delta \mathbf{x}_h = -\tilde{\mathbf{R}}_x + \tilde{\mathbf{K}}_{xa} \mathbf{K}_{aa}^{-1} \mathbf{R}_a. \quad (6.47)$$

Dieses lokale Gleichungssystem wird zum globalen Gleichungssystem $\mathbf{A}_h \Delta \mathbf{x}_h = \mathbf{f}_h$ assembliert.

6.4.3 Rekonstruktion der eliminierten Variablen

Nachdem das Inkrement $\Delta \mathbf{x}_h$ als Lösung des globalen Gleichungssystems (6.47) berechnet worden ist, müssen die transformierten und eliminierten Variablen aktualisiert werden.

Kontakt

Die Kontaktprojektion \mathbf{P} muss gespeichert werden, um $\Delta \mathbf{u} = \mathbf{P} \widetilde{\Delta \mathbf{u}}$ (1.11) aus der lokalen Basis in die globale Basis zurückzutransformieren.

Enhanced-Strain-Variable

Es wird \mathbf{a}_h mit $\Delta\mathbf{a}_h$ aktualisiert. Um $\Delta\mathbf{a} = -\mathbf{K}_{aa}^{-1}\mathbf{R}_a - \mathbf{K}_{aa}^{-1}\tilde{\mathbf{K}}_{ax}\Delta\mathbf{x}_h$ berechnen zu können, müssen auf jeder Zelle die lokalen Matrizen \mathbf{K}_{aa}^{-1} und $\tilde{\mathbf{K}}_{ax}$ und der Vektor \mathbf{R}_a gespeichert werden.

Geschwindigkeit

Aus $\partial_t\mathbf{u} = \mathbf{v}$ (6.1)₅ folgt $\frac{1}{\Delta t}(\mathbf{u}_{n+1}^{(k)} - \mathbf{u}_n) - \vartheta\mathbf{v}_{n+1}^{(k)} + (1 - \vartheta)\mathbf{v}_n = 0$ und damit die mit $\mathbf{u}_{n+1}^{(k)}$ aktualisierte Geschwindigkeit

$$\mathbf{v}_{n+1}^{(k)} = \frac{1}{\vartheta\Delta t}(\mathbf{u}_{n+1}^{(k)} - \mathbf{u}_n) + \frac{1 - \vartheta}{\vartheta}\mathbf{v}_n. \quad (6.48)$$

7 Fehlerschätzung und automatische Modellwahl

Auf das Gesamtproblem (6.3) lässt sich die Theorie der dual-gewichteten residualen Fehlerkontrolle anwenden. In der Theorie können der Modell- und der Diskretisierungsfehler abgeschätzt werden, wobei ein Zielfunktional über die duale Lösung für eine Gewichtung sorgt. Die Modellwahl und Netzverfeinerung erfolgt dann so, dass unter der Voraussetzung kleiner Fehler Modell- und Diskretisierungsfehler ausbalanciert werden. Dieser theoretische Rahmen wird dargestellt.

In dieser Arbeit wird jedoch auf die adaptive Netzverfeinerung und auf die zielorientierte Fehlerschätzung verzichtet. Im Zentrum steht zuerst die grundlegende Frage, für welche Modellhierarchien in der Elastoplastizität eine adaptive Modellwahl überhaupt sinnvoll ist. Die Antwort lautet: für Probleme, bei denen Lokalisierungen auftreten. Die Lokalisierungen gehen einher mit der isotropen Verfestigung, welche sich als heuristischer Fehlerindikator verwenden lässt.

Bei aller Theorie bleibt die Darstellung des dualen Problems hier letztlich an der technischen und konstruktiven Oberfläche. Ein umfassende mathematische Darstellung ist bei BLUM & SUTTMEIER [13] und MEIDNER [38] zu finden.

7.1 Erweiterung der Funktionenräume um die Zeit

Es wird von der Zeit 0 bis zur Zeit T gerechnet. Das Zeitintervall $I = (0, T)$, $0 < T < \infty$ wird in M Zeitsegmente \bar{I}_k , $I = \bigcup_{k=1}^M \bar{I}_k$, zerlegt. Es werden Funktionenräume eingeführt, welche gegenüber \mathcal{V} als weitere Dimension die Zeit haben:

$$\begin{aligned} \mathcal{Y} &:= \{ \mathbf{y} \in \mathcal{V}, \mathbf{y} \text{ stetig in der Zeit} \}, \\ \mathcal{Y}_0 &:= \{ \mathbf{y} \in \mathcal{V}_0, \mathbf{y} \text{ stetig in der Zeit} \}, \\ \tilde{\mathcal{Y}} &:= \{ \mathbf{y} \in \mathcal{V}, \mathbf{y} \text{ konstant auf jedem Zeitsegment} \}, \\ \tilde{\mathcal{Y}}_0 &:= \{ \mathbf{y} \in \mathcal{V}_0, \mathbf{y} \text{ konstant auf jedem Zeitsegment} \}. \end{aligned} \tag{7.1}$$

Die entsprechenden räumlich diskretisierten Funktionenräume werden mit \mathcal{V}_h , $\mathcal{V}_{0,h}$ (1.4) als \mathcal{Y}_h , $\mathcal{Y}_{0,h}$, $\tilde{\mathcal{Y}}_h$ und $\tilde{\mathcal{Y}}_{0,h}$ bezeichnet. Es wird das innere Produkt $(\cdot, \cdot) : \mathcal{V} \times \mathcal{V} \rightarrow \mathbb{R}$ eingeführt. Dieses lautet für $\mathbf{y}, \bar{\mathbf{y}} \in \mathcal{V}$

$$(\mathbf{y}, \bar{\mathbf{y}}) = \int_{\Omega} \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\eta}_1 + \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\eta}_2 + \tau \Theta + \bar{\mathbf{B}} : \boldsymbol{\xi} + \bar{\mathbf{C}}^e : \boldsymbol{\zeta} dV. \tag{7.2}$$

Mit der Schreibweise für $\mathbf{y} \in \mathcal{Y}$, $\bar{\mathbf{y}} \in \tilde{\mathcal{Y}}_0$,

$$\begin{aligned} (\mathbf{y}, \bar{\mathbf{y}})_I &= \int_I (\mathbf{y}, \bar{\mathbf{y}}) dt, & r(\mathbf{y})(\bar{\mathbf{y}}) &= \int_I \bar{r}(\mathbf{y})(\bar{\mathbf{y}}) dt, \\ b(\mathbf{y})(\partial_t \mathbf{y}, \bar{\mathbf{y}}) &= \int_I \bar{b}(\mathbf{y})(\partial_t \mathbf{y}, \bar{\mathbf{y}}) dt, & a(\mathbf{y})(\bar{\mathbf{y}}) &= \int_I \bar{a}(\mathbf{y})(\bar{\mathbf{y}}) dt, \end{aligned} \tag{7.3}$$

lautet (6.6): Gesucht wird $\mathbf{y} \in \mathcal{Y}$, so dass

$$r(\mathbf{y})(\bar{\mathbf{y}}) = b(\mathbf{y})(\partial_t \mathbf{y}, \bar{\mathbf{y}}) + a(\mathbf{y})(\bar{\mathbf{y}}) = 0, \quad \forall \bar{\mathbf{y}} \in \mathcal{Y}_0. \tag{7.4}$$

Weil $\bar{\mathbf{y}}$ unstetig in der Zeit ist, zerfällt (7.4) in M Einzelschritte (6.6), die auf jedem Zeitsegment zu lösen sind.

7.2 Zielfunktional, primales und duales Problem

Es wird nun ein Zielfunktional $J(\mathbf{y})$ eingeführt, welches minimiert werden soll. Über das Zielfunktional kann der Fehler in einem Teilgebiet oder in einem einzelnen Punkt während eines Zeitsegments oder zu einem Zeitpunkt minimiert werden. Das Zielfunktional und das Residuum (7.4) werden in einem Lagrange-Funktional vereint:

$$\mathcal{L}(\mathbf{y})(\mathbf{z}) = J(\mathbf{y}) + r(\mathbf{y})(\mathbf{z}) \rightarrow \min! \quad (7.5)$$

Hier ist $\mathbf{z} \in \mathcal{Y}$ (7.2)₁ der Lagrange-Multiplikator oder die duale Lösung. Die Lösung $\mathbf{y} \in \mathcal{Y}$ ist mit (7.4) bereits eindeutig festgelegt. Das Zielfunktional soll minimiert werden. Deshalb ist die Lagrange-Formulierung äquivalent zu $J \rightarrow \min$ und $r = 0$. Die verschwindenden Ableitungen von \mathcal{L} sind die Bedingungen für die Stationarität: Die Ableitung nach \mathbf{z} ergibt wieder das primale Problem (7.4),

$$(\partial_{\mathbf{z}}\mathcal{L}(\mathbf{y})(\mathbf{z}), \bar{\mathbf{y}})_I = r(\mathbf{y})(\bar{\mathbf{y}}) = 0, \quad \forall \bar{\mathbf{y}} \in \mathcal{Y}_0, \quad (7.6)$$

die Ableitung nach \mathbf{y} hingegen ergibt das duale Problem

$$(\partial_{\mathbf{y}}\mathcal{L}(\mathbf{y})(\mathbf{z}), \bar{\mathbf{y}})_I = (J'(\mathbf{y}), \bar{\mathbf{y}})_I + r'(\mathbf{y})(\mathbf{z}, \bar{\mathbf{y}}) = 0, \quad \forall \bar{\mathbf{y}} \in \mathcal{Y}_0. \quad (7.7)$$

Um das duale Problem lösen zu können, müssen alle globalen Steifigkeitsmatrizen aus dem primalen Problem gespeichert werden, weil die duale Lösung vom Endzeitpunkt beginnend rückwärts in der Zeit berechnet wird.

Die Lösung $(\mathbf{y}, \mathbf{z}) \in \mathcal{Y} \times \mathcal{Y}$ dient allein zur Referenz. Tatsächlich berechnet wird die im Raum diskretisierte Lösung $(\mathbf{y}_{mh}, \mathbf{z}_{mh}) \in \mathcal{Y}_h \times \mathcal{Y}_h$, für die meist ein gegenüber dem Referenzmodell reduziertes Modell verwendet wird. Die Lösung wird also mit dem Residuum $r_m \neq r$ berechnet,

$$r_m(\mathbf{y}_{mh})(\bar{\mathbf{y}}) = 0, \quad (\partial_{\mathbf{y}}J(\mathbf{y}_{mh}), \bar{\mathbf{y}})_I + r'_m(\mathbf{y}_{mh})(\mathbf{z}_{mh}, \bar{\mathbf{y}}) = 0, \quad \forall \bar{\mathbf{y}} \in \mathcal{Y}_{0,h}. \quad (7.8)$$

Der Index h steht für die Diskretisierung der Lösung im Raum und der Index m steht für die Wahl eines Modells, welches verschieden vom Referenzmodell ist. Es wird also der Diskretisierungs- und der Modellfehler berücksichtigt.

7.3 Diskretisierung des dualen Problems

Das duale Problem (7.7) lautet mit (6.8)

$$(\partial_{\mathbf{y}}\mathcal{L}(\mathbf{y})(\mathbf{z}), \bar{\mathbf{y}})_I = (J'(\mathbf{y}), \bar{\mathbf{y}})_I + b(\mathbf{y})(\partial_t \bar{\mathbf{y}}, \mathbf{z}) + \partial_{\mathbf{y}}b(\mathbf{y})(\partial_t \mathbf{y}, \mathbf{z}, \bar{\mathbf{y}}) + a'(\mathbf{y})(\mathbf{z}, \bar{\mathbf{y}}) = 0, \quad \forall \bar{\mathbf{y}} \in \tilde{\mathcal{Y}}_0.$$

Es wird mit der Zeitableitung (6.33) und dem Zeitschema (6.30) diskretisiert. Es gilt $\Delta t = \bar{I}_k$. Dabei wird aus Platzgründen die Abkürzung $\tilde{a}(\mathbf{y})(\partial_t \mathbf{y}, \mathbf{z}, \bar{\mathbf{y}}) = \partial_{\mathbf{y}}\tilde{b}(\mathbf{y})(\partial_t \mathbf{y}, \mathbf{z}, \bar{\mathbf{y}}) + \tilde{a}'(\mathbf{y})(\mathbf{z}, \bar{\mathbf{y}})$ verwendet. Ausgeschrieben für alle Zeitinkremente lautet das duale Problem

$$\begin{aligned} & (J'(\mathbf{y}_*), \bar{\mathbf{y}}^1)_{\bar{I}_1} + \bar{b}(\mathbf{y}_*)(\bar{\mathbf{y}}^1 - \bar{\mathbf{y}}^0, \mathbf{z}^1) + \tilde{a}(\mathbf{y}_*)\left(\frac{1}{\bar{I}_1}(\mathbf{y}^1 - \mathbf{y}^0), \mathbf{z}^1, \bar{\mathbf{y}}^1\right)_{\bar{I}_1} \\ & + \dots \\ & + (J'(\mathbf{y}_*), \bar{\mathbf{y}}^k)_{\bar{I}^k} + \bar{b}(\mathbf{y}_*)(\bar{\mathbf{y}}^k - \bar{\mathbf{y}}^{k-1}, \mathbf{z}^k) + \tilde{a}(\mathbf{y}_*)\left(\frac{1}{\bar{I}_k}(\mathbf{y}^k - \mathbf{y}^{k-1}), \mathbf{z}^k, \bar{\mathbf{y}}^k\right)_{\bar{I}^k} \\ & + (J'(\mathbf{y}_*), \bar{\mathbf{y}}^{k+1})_{\bar{I}^{k+1}} + \bar{b}(\mathbf{y}_*)(\bar{\mathbf{y}}^{k+1} - \bar{\mathbf{y}}^k, \mathbf{z}^{k+1}) + \tilde{a}(\mathbf{y}_*)\left(\frac{1}{\bar{I}_{k+1}}(\mathbf{y}^{k+1} - \mathbf{y}^k), \mathbf{z}^{k+1}, \bar{\mathbf{y}}^{k+1}\right)_{\bar{I}^{k+1}} \\ & + \dots \\ & + (J'(\mathbf{y}_*), \bar{\mathbf{y}}^M)_{\bar{I}^M} + \bar{b}(\mathbf{y}_*)(\bar{\mathbf{y}}^M - \bar{\mathbf{y}}^{M-1}, \mathbf{z}^M) + \tilde{a}(\mathbf{y}_*)\left(\frac{1}{\bar{I}^M}(\mathbf{y}^M - \mathbf{y}^{M-1}), \mathbf{z}^M, \bar{\mathbf{y}}^M\right)_{\bar{I}^M} \\ & = 0. \end{aligned}$$

Es wird nach $\bar{\mathbf{y}}^k$ geordnet, womit sich ein zeitabhängiges Problem ergibt, welches in der Zeit rückwärts läuft:

$$0 = (\mathbf{J}'(\mathbf{y}_*), \bar{\mathbf{y}}^k) \bar{\mathbf{I}}^k + \bar{\mathbf{b}}(\mathbf{y}_*)(\mathbf{z}^k - \mathbf{z}^{k+1}, \bar{\mathbf{y}}^k) + \partial_y \bar{\mathbf{b}}(\mathbf{y}_*)(\mathbf{y}^k - \mathbf{y}^{k-1}, \mathbf{z}^k, \bar{\mathbf{y}}^k) + \bar{\mathbf{a}}'(\mathbf{y}_*)(\mathbf{z}^k, \bar{\mathbf{y}}^k) \bar{\mathbf{I}}^k.$$

Es wird mit gegebenem \mathbf{z}^{k+1} die aktuelle Lösung \mathbf{z}^k berechnet. Die Komponenten der dualen Lösung werden mit $\mathbf{z} = (\mathbf{u}_z, \mathbf{v}_z, \mathbf{w}_z)$ bezeichnet. Der Vergleich mit (6.39) zeigt, dass der Vektor der gegebenen Residuen durch

$$\begin{pmatrix} \check{\mathbf{R}}_u \\ \check{\mathbf{R}}_v \\ \check{\mathbf{R}}_w \end{pmatrix} = (\mathbf{J}')_h^k - \frac{1}{\Delta t} \begin{pmatrix} 0 & \rho_0 \mathbf{M} & 0 \\ \mathbf{M} & 0 & 0 \\ \mathbf{M}_{wu}^k & 0 & \mathbf{M}_{ww} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u}_{z,h}^{k+1} \\ \mathbf{v}_{z,h}^{k+1} \\ \mathbf{w}_{z,h}^{k+1} \end{pmatrix} \quad (7.9)$$

zu ersetzen ist, wobei $(\bar{\mathbf{y}}_h^k)^t (\mathbf{J}')_h^k = (\mathbf{J}'(\mathbf{y}_*), \bar{\mathbf{y}}^k) \bar{\mathbf{I}}^k$. Mit diesen Residuen wird nun wie in (6.41) das Inkrement der Geschwindigkeit eliminiert:

$$\begin{pmatrix} \frac{\rho_0}{\Delta t} \check{\mathbf{R}}_v + \check{\mathbf{R}}_u \\ \check{\mathbf{R}}_a \\ \check{\mathbf{R}}_w \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathbf{K}_{uu} + \frac{\rho_0}{(\Delta t)^2} \mathbf{M} & \mathbf{K}_{ua} & \mathbf{K}_{uw} \\ \mathbf{K}_{au} & \mathbf{K}_{aa} & \mathbf{K}_{aw} \\ \mathbf{K}_{wu} + \frac{1}{\Delta t} \mathbf{M}_{wu} & \mathbf{K}_{wa} & \mathbf{K}_{ww} + \frac{1}{\Delta t} \mathbf{M}_{ww} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u}_{z,h}^k \\ \Delta \mathbf{a} \\ \mathbf{w}_{z,h}^k \end{pmatrix} = 0. \quad (7.10)$$

Mit den Bezeichnungen $\mathbf{x}_z = (\mathbf{u}_z, \mathbf{w}_z)$ und $\check{\mathbf{R}}_x = (\rho_0/\Delta t \check{\mathbf{R}}_v + \check{\mathbf{R}}_u, \check{\mathbf{R}}_w)$ sowie $\check{\mathbf{R}}_a = 0$ (7.9) wird nun wie in (6.44) $\Delta \mathbf{a}$ eliminiert:

$$(\mathbf{K}_{xx} - \mathbf{K}_{xa} \mathbf{K}_{aa}^{-1} \mathbf{K}_{ax}) \mathbf{x}_{z,h}^k = -\check{\mathbf{R}}_x. \quad (7.11)$$

Das Gleichungssystem mit lokaler Kontaktprojektion (6.47) lautet

$$\left(\tilde{\mathbf{K}}_{xx} - \tilde{\mathbf{K}}_{xa} \mathbf{K}_{aa}^{-1} \tilde{\mathbf{K}}_{ax} \right) \tilde{\mathbf{x}}_{z,h}^k = -\mathbf{P}_x^t \check{\mathbf{R}}_x. \quad (7.12)$$

Die duale Lösung $\tilde{\mathbf{u}}_{z,h}^k$ liegt in den lokalen Koordinatensystemen vor und muss mit $\mathbf{u}_{z,h}^k = \mathbf{P}_u \tilde{\mathbf{u}}_{z,h}^k$ auf globale kartesische Koordinaten transformiert werden. Anschließend ist die duale Geschwindigkeit $\mathbf{v}_{z,h}^k$ wie in (6.48) zu rekonstruieren.

Es ist also beim Lösen des primalen Problems für jeden Zeitschritt die globale Steifigkeitsmatrix \mathbf{A}_h zu speichern. Diese wird unverändert gemäß (7.12) für das duale Problem verwendet. Für die rechte Seite sind für jeden Zeitschritt die globalen Vektoren $(\mathbf{J}')_h^k$ und die Massenmatrizen \mathbf{M}_{wu}^k zu speichern. \mathbf{M} und \mathbf{M}_{ww} sind konstant und müssen nur einmal gespeichert werden. Es werden der globale Vektor $\frac{\rho_0}{\Delta t} \check{\mathbf{R}}_v + \check{\mathbf{R}}_u = (\mathbf{J}')_{u,h}^k + \frac{\rho_0}{\Delta t} (\mathbf{J}')_{v,h}^k - \frac{\rho_0}{\Delta t} \mathbf{M} \left[\mathbf{v}_{z,h}^{k+1} + \frac{1}{\Delta t} \mathbf{u}_{z,h}^{k+1} \right]$ und entsprechend $\check{\mathbf{R}}_w$ aus den Daten in (7.9) berechnet. Die Kontaktprojektionen \mathbf{P}_u^t müssen für jeden Zeitschritt und jeden aktiven Knoten gespeichert werden, um die rechte Seite von (7.12) zu berechnen und um $\tilde{\mathbf{u}}_{z,h}^k$ zu transformieren.

7.4 Dual-gewichtete Fehlerkontrolle

Für die exakte Lösung $\boldsymbol{\xi} = (\mathbf{y}, \mathbf{z})$ aus (7.6) folgt $r(\mathbf{y})(\mathbf{z}) = 0$. Für die approximierte Lösung $\boldsymbol{\xi}_{mh} = (\mathbf{y}_{mh}, \mathbf{z}_{mh})$ aus (7.8) hingegen verschwindet das Residuum r nicht. Das Lagrange-Funktional (7.5) für beide Fälle lautet

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\mathbf{y})(\mathbf{z}) &= J(\mathbf{y}), \\ \mathcal{L}(\mathbf{y}_{mh})(\mathbf{z}_{mh}) &= J(\mathbf{y}_{mh}) + r(\mathbf{y}_{mh})(\mathbf{z}_{mh}). \end{aligned} \quad (7.13)$$

Es wird mit (7.13) der Fehler im Zielfunktional gebildet,

$$J(\mathbf{y}) - J(\mathbf{y}_{mh}) = \mathcal{L}(\mathbf{y})(\mathbf{z}) - \mathcal{L}(\mathbf{y}_{mh})(\mathbf{z}_{mh}) + r(\mathbf{y}_{mh})(\mathbf{z}_{mh}). \quad (7.14)$$

Der Fehler im Zielfunktional soll nun mit der bekannten Lösung ξ_{mh} approximiert werden, um ihn kontrollieren zu können. Dazu werden die Fehler $\mathbf{e}_y = \mathbf{y} - \mathbf{y}_{mh}$, $\mathbf{e}_z = \mathbf{z} - \mathbf{z}_{mh}$ und $\mathbf{e} = \xi - \xi_{mh} = (\mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z)$ eingeführt. Mit $\mathcal{L}(\xi) = \mathcal{L}(\mathbf{y})(\mathbf{z})$ wird (7.14) umgeformt,

$$\begin{aligned} J(\mathbf{y}) - J(\mathbf{y}_{mh}) &= r + \mathcal{L}(\xi) - \mathcal{L}(\xi_{mh}) \\ &= r + \int_0^1 \partial_\lambda \mathcal{L}(\xi_{mh} + \lambda e) d\lambda \\ &= r + \frac{1}{2} \left\{ \partial_\lambda \Big|_{\lambda=1} \mathcal{L}(\xi_{mh} + \lambda e) + \partial_\lambda \Big|_{\lambda=0} \mathcal{L}(\xi_{mh} + \lambda e) \right\} + \mathcal{R}, \\ &= r + \frac{1}{2} \{ \mathcal{L}'(\xi)(e) + \mathcal{L}'(\xi_{mh})(e) \} + \mathcal{R}. \end{aligned} \quad (7.15)$$

Aus der Approximation durch die Trapezregel in der dritten Zeile entsteht das Restglied \mathcal{R} .

Die Ableitungen in der letzten Zeile werden nach \mathbf{y} und \mathbf{z} aufgespalten, $\mathcal{L}'(\xi)(e) = (\partial_y \mathcal{L}(\xi), \mathbf{e}_y) + (\partial_z \mathcal{L}(\xi), \mathbf{e}_z)$. Der erste Term ist das duale (7.7), der zweite das primale Problem (7.6),

$$\begin{aligned} (\partial_y \mathcal{L}(\xi), \mathbf{e}_y) &= (\partial_y J(\mathbf{y}), \mathbf{e}_y) + r'(\mathbf{y})(\mathbf{z}, \mathbf{e}_y) = 0, \\ (\partial_z \mathcal{L}(\xi), \mathbf{e}_z) &= r(\mathbf{y})(\mathbf{e}_z) = 0. \end{aligned} \quad (7.16)$$

Ebenso werden beide Terme aus $\mathcal{L}'(\xi_{mh})(e) = (\partial_y \mathcal{L}(\xi_{mh}), \mathbf{e}_y) + (\partial_z \mathcal{L}(\xi_{mh}), \mathbf{e}_z)$ betrachtet. Es wird nun r durch r_m (7.8) approximiert,

$$\begin{aligned} (\partial_y \mathcal{L}(\xi_{mh}), \mathbf{e}_y) &= (\partial_y J(\mathbf{y}_{mh}), \mathbf{e}_y) + r'(\mathbf{y}_{mh})(\mathbf{z}_{mh}, \mathbf{e}_y) \\ &\approx (\partial_y J(\mathbf{y}_{mh}), \mathbf{y}) + r'_m(\mathbf{y}_{mh})(\mathbf{z}_{mh}, \mathbf{y}) = r_m^*(\mathbf{y}_{mh})(\mathbf{z}_{mh}, \mathbf{y}), \\ (\partial_z \mathcal{L}(\xi_{mh}), \mathbf{e}_z) &= r(\mathbf{y}_{mh})(\mathbf{e}_z) \approx r_m(\mathbf{y}_{mh})(\mathbf{z}). \end{aligned} \quad (7.17)$$

\mathbf{y} und \mathbf{z} bleiben übrig, weil (7.8) von \mathbf{y}_{mh} und \mathbf{z}_{mh} als Testfunktionen erfüllt wird. Wenn der Modell- und der Diskretisierungsfehler klein sind, so kann das Restglied in (7.15) vernachlässigt werden und die Näherung $r_m \approx r$ in (7.17) verwendet werden. Es lautet dann die Approximation des Fehlers im Zielfunktional (7.14)

$$J(\mathbf{y}) - J(\mathbf{y}_{mh}) \approx r(\mathbf{y}_{mh})(\mathbf{z}_{mh}) + \frac{1}{2} \{ r_m(\mathbf{y}_{mh})(\mathbf{z}) + r_m^*(\mathbf{y}_{mh})(\mathbf{z}_{mh}, \mathbf{y}) \}. \quad (7.18)$$

Dieses ist die zentrale Gleichung zur dual-gewichteten Fehlerkontrolle. Die Auswertung des ersten Terms liefert Indikatoren für den Modellfehler, die letzten beiden Terme liefern Indikatoren für den Diskretisierungsfehler. Die Steuerung der Netzverfeinerung und der Modellwahl entsprechend der Größe der Indikatoren minimiert den Fehler im Zielfunktional $J(\mathbf{y}) - J(\mathbf{y}_{mh})$ auf optimale Weise. Die berechnete Lösung weicht dann also geringstmöglich von der exakten Lösung ab, wobei jedoch das Zielfunktional bestimmte Eigenschaften der Lösung in der Bewertung herausheben kann. Außerdem können Modell- und Diskretisierungsfehler ausbalanciert werden.

Soweit die Theorie. Es stellt sich die Frage, ob die Voraussetzung kleiner Fehler in dieser Arbeit überhaupt erfüllt wird.

7.5 Indikator für den Modellfehler

Es wird nun nur der Indikator für den Modellfehler betrachtet. Es ist das Residuum $r(\mathbf{y}_m)(\mathbf{z}_m)$ (7.18) der aktuellen Lösung zum Referenzmodell im Zeitpunkt t auszuwerten, so dass auf jeder Zelle Ω_e ein Fehlerindikator I_e heranwächst:

$$\begin{aligned} r_t(\mathbf{y}_m)(\mathbf{z}_m) &= \int_0^t \bar{r}_\tau(\mathbf{y}_m)(\mathbf{z}_m) d\tau \approx \sum_{n=1}^N \bar{r}_{t_n}(\mathbf{y}_{m,n})(\mathbf{z}_{m,n}) \Delta t_n \\ &= \sum_{n=1}^N \sum_{\Omega_e \in \Omega} \Delta I_e \leq \sum_{\Omega_e \in \Omega} \sum_{n=1}^N |\Delta I_e| = \sum_{\Omega_e \in \Omega} I_e. \end{aligned} \quad (7.19)$$

Das Residuum \bar{r} (6.2) wird mit $\mathbf{y}_m = (\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{a}, \Theta, \bar{\mathbf{B}}, \bar{\mathbf{C}}^e)$ erneut hingeschrieben:

$$\begin{aligned} \bar{r}(\mathbf{y})(\bar{\mathbf{y}}) &= \int_{\Omega} \left\{ c_1^{\mathbf{C}^e} \text{GRAD} [\bar{\mathbf{C}}^e] \cdot \mathbf{C}^{-1} \cdot \text{GRAD} [\zeta] - c_2^{\mathbf{C}^e} (\mathbf{C}^e - \bar{\mathbf{C}}^e) : \zeta \right. \\ &\quad + c_1^{\mathbf{B}} \text{GRAD} [\bar{\mathbf{B}}] \cdot \mathbf{C}^{-1} \cdot \text{GRAD} [\xi] - c_2^{\mathbf{B}} (\mathbf{B} - \bar{\mathbf{B}}) : \xi \\ &\quad + c\tau \frac{d\Theta}{dt} + \kappa \text{GRAD} [\tau] \cdot \mathbf{C}^{-1} \cdot \text{GRAD} [\Theta] + \tau (\mathcal{H}_{heat}^e - \mathcal{D}_{mech} - R) \\ &\quad \left. + \mathbf{S} : \partial_a \mathbf{C}[\bar{\mathbf{a}}] + (\partial_t \mathbf{u} - \mathbf{v}) \cdot \boldsymbol{\eta}_1 + \rho_0 \partial_t \mathbf{v}(\mathbf{u}) \cdot \boldsymbol{\eta}_2 + \frac{1}{2} \mathbf{S} : \partial_u \mathbf{C}[\boldsymbol{\eta}_2] \right\} dV - G_{ext}(\boldsymbol{\eta}_2). \end{aligned} \quad (7.20)$$

Die Auswertung erfolgt zum Ende der Rechnung auf jedem Zeitschritt, wenn mit $R_\phi = 0$, $\mathbf{R}_\omega = \mathbf{0}$ und $\bar{r}_m(\mathbf{y}_m)(\bar{\mathbf{y}}) = 0$ das Gleichgewicht erreicht ist. Weil \mathbf{y}_m während der Auswertung konstant ist, entfällt in (7.20) der Term $(\partial_t \mathbf{u} - \mathbf{v}) \cdot \boldsymbol{\eta}_1$. Das Residuum \bar{r}_m kann so aussehen wie (7.20) und sich nur in der Anzahl der inneren Variablen, wobei hier nur die kinematische Verfestigung in Frage kommt, und z. B. in der Fließfunktion unterscheiden. Das Residuum kann im einfachsten Fall auch einfach nur $\bar{r}_m(\mathbf{y})(\bar{\mathbf{y}}) = \int_{\Omega} \rho_0 \partial_t \mathbf{v}(\mathbf{u}) \cdot \boldsymbol{\eta}_2 + \frac{1}{2} \mathbf{S} : \partial_u \mathbf{C}[\boldsymbol{\eta}_2] dV - G_{ext}(\boldsymbol{\eta}_2)$ lauten. Es muss nun für das Residuum \bar{r} das Gleichgewicht auf den unteren beiden Iterationsstufen hergestellt werden. Indem $R_\phi = 0$ und $\mathbf{R}_\omega = \mathbf{0}$ erreicht werden, ändern sich die inneren Variablen $\boldsymbol{\omega} = (\mathbf{C}^e, \mathbf{B}, \dots)$, die rechte Seite \mathcal{H}_{heat}^e , \mathcal{D}_{mech} und auch \mathbf{S} in (7.20). Im genannten Minimalfall müssen vor der Auswertung die *Enhanced-Gradient*-Variablen $\bar{\mathbf{B}}$ und $\bar{\mathbf{C}}^e$ aus \mathbf{B} und \mathbf{C}^e mit einer lokalen L_2 -Projektion und anschließender Mittelung der Werte in den Knoten berechnet werden.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass zum Referenzmodell gewechselt und die rechte Seite des globalen Gleichungssystems anschließend erneut gebildet wird.

Das Skalarprodukt aus dem Vektor der rechten Seite und dem Vektor der dualen Lösung $\mathbf{z}_{m,n}$ ist das gesuchte Inkrement in (7.19). Um es als Fehlerindikator verwenden zu können, müssen die Beiträge zum Skalarprodukt in jedem Knoten auf die angrenzenden Zellen verteilt werden. Die Beträge der Inkremente des Indikators $|\Delta I_e|$ auf der Zelle e werden jeweils zum Indikator I_e addiert. Die zellweisen Indikatoren I_e geben einen Hinweis auf den entstandenen Modellfehler und dienen als Kriterium für den Modellwechsel.

8 Algorithmus

Die Elastoplastizität ist mit dem Kontaktproblem, der Gemischten und *Solid-Shell*-Formulierung algorithmisch verwoben. Hinzukommt die dynamische Formulierung. Innerhalb des Algorithmus wird das Gebiet in elastische und plastische Bereiche zerlegt und der Kontaktrand identifiziert. Dies geschieht nach einem Verfahren, das sich als Operatorzerlegung bezeichnen lässt. Der Algorithmus bezieht sich auf ein statisches FE-Netz. Die Darstellung beschränkt sich auf die Verschiebung als einziger globaler Variable. Der Modellwechsel erfolgt während der elastoplastischen Iteration.

8.1 Vorbereitung vor Beginn der Rechnung

Vor dem Beginn der Rechnung, also zum Zeitpunkt $t = 0$, können Konstanten berechnet werden, die allein von der Geometrie der unverformten Zelle und der Quadraturordnung abhängen. Diese müssen in jedem Quadraturpunkt gespeichert werden.

- Für die *Assumed-Strain*-Formulierung sind dies die Abbildung \mathbb{A}^{pq} (2.49) und der konstante Tensor zweiter Stufe $\check{\mathbf{C}}^{as}(\mathbf{1})$ (2.50).
- Für die *Enhanced-Strain*-Formulierung wird \mathbb{B}^{es} (2.36) berechnet.
- Außerdem wird die globale Massenmatrix \mathbf{M} für die dynamische Formulierung benötigt.

8.2 Speicherbedarf während eines Zeitschritts

- In jedem Quadraturpunkt werden \mathbf{F}_n , \mathbf{F}_{n+1} , \mathbf{C}_n und \mathbf{C}_{n+1} gespeichert. Für die Elastoplastizität werden die innere Variablen $(\alpha_n, \boldsymbol{\omega}_n)$ und $(\alpha_{n+1}, \boldsymbol{\omega}_{n+1})$ gespeichert.
- Für die *Enhanced-Strain*-Formulierung müssen auf jeder Zelle die Matrizen \mathbf{K}_{dd} , \mathbf{K}_{da} und \mathbf{K}_{aa} sowie die Vektoren \mathbf{R}_d und \mathbf{R}_a gespeichert werden.
- Für das Kontaktproblem wird in jedem aktiven Knoten die lokale Kontaktprojektion \mathbf{P} (1.11) gespeichert.

8.3 Unterteilung der Iterationen auf dem Zeitschritt

Es wird die Lösung auf dem Zeitschritt $\Delta t = [t_n, t_{n+1}]$ berechnet. Gegeben sind die Verschiebung $\mathbf{u}_{n+1}^{(0)} = \mathbf{u}_n$, die Geschwindigkeit $\mathbf{v}_{n+1}^{(0)} = \mathbf{v}_n$, die Deformation $\mathbf{F}_{n+1}^{(0)} = \mathbf{F}_n$, $\mathbf{C}_{n+1}^{(0)} = \mathbf{C}_n$.

1. Elastische Iterationen

Zuerst wird rein elastisch gerechnet. Es wird das Fließkriterium also nicht abgefragt. Die inneren Variablen bleiben konstant. Für das Kontaktproblem werden die Iterationen der elastischen Rechnung weiter unterschieden:

Nur in der ersten Iteration $k = 0$ werden Knoten nach dem geometrischen Kriterium aktiviert, falls im Laufe der Iteration ein Knoten das Hindernis durchdringt, so wird er nicht beachtet. Stattdessen können in der Iteration $k > 0$ Knoten deaktiviert werden, deren Kontaktkraft abhebend ist. Die lokale Projektion $\mathbf{P}^{(e)}$ wird in jeder Iteration aktualisiert. Es werden also nur in der ersten Iteration inhomogene Randbedingungen aus der Verschiebung des Hindernisses aufgebracht. In folgenden Iterationen treten nur homogene Randbedingungen auf, weil keine weiteren Knoten aktiviert werden.

		Elastoplastizität	Kontakt	
		Aktivieren/Deaktivieren	Aktivieren/Deaktivieren	Tangentialebene
Phase I	1	-	nur Aktivieren möglich	variabel
	2, 3...	-	nur Deaktivieren möglich	variabel
Phase II	1	nur Aktivieren möglich	-	konstant
	2, 3...	-	-	konstant

Tabelle 8.1: Es werden wechselseitig Freiheiten gesperrt, was sich als Operatorzerlegung auffassen lässt.

2. Aus der elastisch berechneten Deformation $\mathbf{C}_{n+1}^{(k)}$ wird die Spannung berechnet, mit der das Fließkriterium abgefragt wird, und welche auf die Fließfläche projiziert wird. Wenn kein Kontaktproblem gerechnet wird, sondern dynamische Randbedingungen oder dynamische äußere Kräfte gegeben sind, so reicht eine einzige elastische Iteration aus, um $\mathbf{C}_{n+1}^{(k)}$ bereitzustellen.

3. Elastoplastische Iterationen

Von nun an dürfen Knoten nicht mehr freigelassen werden. Die lokalen Projektionen $\mathbf{P}^{(e)}$ bleiben konstant. Die aktiven Knoten können weiterhin in der nun festgelegten Tangentialebene gleiten. In der ersten Iteration $k_{EP} = 0$ wird das Fließkriterium abgefragt. Die Quadraturpunkte werden in elastische und plastische unterteilt. Im weiteren Verlauf der Iteration wird diese Unterteilung nicht verändert. Für die plastischen Quadraturpunkte wird in jeder Iteration das lokale Problem gelöst und die algorithmisch konsistente Tangente berechnet.

4. Bei Scheitern Halbierung des Zeitschrittes $t_{n+1} = t_n + \frac{1}{2}\Delta t$, ansonsten Aktualisierung $t_n = t_{n+1}$, $\mathbf{u}_n = \mathbf{u}_{n+1}$, $\mathbf{v}_n = \mathbf{v}_{n+1}$, $\mathbf{F}_n = \mathbf{F}_{n+1}$, $\mathbf{C}_n = \mathbf{C}_{n+1}^{mod}$.
5. Verschiebung des Hindernisses und/oder Veränderung der äußeren Kräfte

8.3.1 Bemerkung. *Es müsste korrekterweise eine weitere Iterationsschleife geschaffen werden: Elastische Quadraturpunkte, die nach der Iteration das Fließkriterium verletzen, müssten als plastisch markiert werden. Plastische Quadraturpunkte, in denen nach der Iteration der Multiplikator $\Delta\gamma$ negativ ist, müssten als elastisch gekennzeichnet werden. Es müsste solange iteriert werden, bis keine solche Korrektur mehr erforderlich ist. Es bleibt hier eine offene Frage, wie groß der Fehler durch diese Vereinfachung des numerischen Verfahrens ist.*

Das gleiche gilt für das Kontaktproblem, wo inaktive Knoten erst im Laufe der Iteration das Hindernis durchdringen können, und aktive Knoten erst während der plastischen Rechnung eine abhebende Kontaktkraft erhalten können.

8.4 Darstellung der Iteration (k)

1. gegeben: Verschiebung \mathbf{u}_n , $\mathbf{u}_{n+1}^{(k)}$, Geschwindigkeit \mathbf{v}_n , $\mathbf{v}_{n+1}^{(k)}$, \mathbf{F}_n , \mathbf{C}_n , \mathbf{a}_n

2. Assemblierung: Lauf über alle Zellen $\Omega_e \subset \Omega$:

a) Aktualisierung der Deformation: $\mathbf{F}_{n+1}^{(k)} = \mathbf{1} + \text{GRAD} \left[\mathbf{u}_{n+1}^{(k)} \right]$,

$$\mathbf{C}_{n+1} = \mathbf{F}_{n+1}^T \mathbf{F}_{n+1}$$

b) *Assumed- und Enhanced-Strain*: $\mathbf{C}_{n+1}^{mod} = \mathbf{C}^{ass}(\mathbf{C}_{n+1}) + \mathbb{B}^{es}[\mathbf{a}_{n+1}]$,
 $\mathbb{B}^{as,L}, \mathbb{B}^{as,R}, \mathbb{G}^{as}$.

- c) Die Initialisierung des lokalen Problems erfolgt mit \mathbf{C}_n , \mathbf{C}_{n+1}^{mod} , $(\alpha_n, \boldsymbol{\omega}_n)$ und $(\alpha_{n+1}, \boldsymbol{\omega}_{n+1}^{(k)})$. Das Ergebnis der Lösung des lokalen Problems (s. Abschnitt 3.4) sind die aktualisierten inneren Variablen $(\alpha_{n+1}^{(k+1)}, \boldsymbol{\omega}_{n+1}^{(k+1)})$, die Spannung \mathbf{S} und die algorithmisch konsistente Tangente $d_C \mathbf{S}$. Wenn in einem Quadraturpunkt keine Konvergenz vorhanden ist, so wird der gesamte Zeitschritt abgebrochen.
- d) Aufbau der lokalen Steifigkeitsmatrix mit \mathbf{S} , $d_C \mathbf{S}$, \mathbb{B}^{es} , $\mathbb{B}^{as,L}$, $\mathbb{B}^{as,R}$, \mathbb{G}^{as} .
- e) Das lokale Gleichungssystem (2.44) wird zur globalen Steifigkeitsmatrix addiert:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}^{(e)} &= (\mathbf{K}_{dd} - \mathbf{K}_{da} \mathbf{K}_{aa}^{-1} \mathbf{K}_{ad}), \\ \mathbf{f}^{(e)} &= -\mathbf{R}_d + \mathbf{K}_{da} \mathbf{K}_{aa}^{-1} \mathbf{R}_a \end{aligned} \quad (8.1)$$

Die Matrizen $\mathbf{K}_{aa}^{(e)}$ und $\mathbf{K}_{ad}^{(e)}$ und der Vektor $\mathbf{R}_a^{(e)}$ werden gespeichert.

- f) Lokale Kontaktprojektion (6.47)
- g) Addieren von $\mathbf{A}^{(e)}$ und $\mathbf{f}^{(e)}$ zur globalen Steifigkeitsmatrix \mathbf{A} und zur globalen rechten Seite \mathbf{f}
3. Lösen von $\mathbf{A} \Delta \mathbf{u} = \mathbf{P} [\mathbf{f} - \mathbf{L}(\mathbf{u}_{n+1}^{(k)}, \mathbf{u}_n, \mathbf{v}_n)]$, Aktualisieren von $\mathbf{u}_{n+1}^{(k+1)} = \mathbf{u}_{n+1}^{(k)} + \Delta \mathbf{u}$
 4. Aktualisierung der Geschwindigkeit \mathbf{v}_{n+1}
 5. Aktualisieren von $\mathbf{a}^{(e)}$ mit $\Delta \mathbf{a}^{(e)} = -\mathbf{K}_{aa}^{(e)-1} \mathbf{R}_a^{(e)} - \mathbf{K}_{aa}^{(e)-1} \mathbf{K}_{ad}^{(e)} \Delta \mathbf{u}^{(e)}$

9 Numerische Beispiele

Es werden Beispiele mit verschiedenen Modellhierarchien gerechnet. Die verwendeten Materialparameter stehen in Tabelle D.6.

9.1 2D-Beispiel

Es wird ein Umformprozess im ebenen Verzerrungszustand gemäß Abb. 9.1 berechnet. Dabei wird die Modellhierarchie aus Tab. 9.2 eingesetzt. Die Modellwahl wird von einem heuristischen Fehlerindikator gesteuert. Dieser wird von der isotropen Verfestigung geliefert, welche dort groß ist, wo das Material bereits stark plastiziert ist. Die isotrope Verfestigung kann im Gegensatz zu alternativen Größen (v.-Mises-Vergleichsspannung, kinematische Verfestigung) nicht wieder abnehmen und wird selbst im einfachsten Modell berechnet. Deshalb ist sie der bestmögliche Indikator für den Modellfehler, welcher kostenlos bereitsteht. An diesem Indikator muss sich ein residualer Fehlerschätzer messen lassen.

In Abb. 9.2 sind die Modelle 2-6 auf $\xi = 30\%$ der Zellen gewählt und gleich aufgeteilt, so dass

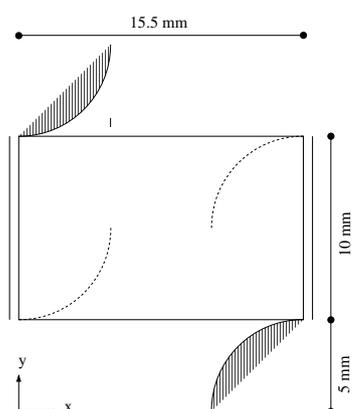


Abbildung 9.1: Versuchsaufbau. Ein rechteckiges Gebiet ist links und rechts in y-Richtung verschieblich und in x-Richtung unverschieblich gelagert. Es ist also eine Symmetrie-Randbedingung gegeben. Zwei kreisförmige Hindernisse mit Radius $R = 5\text{ mm}$ bewegen sich im Laufe des Umformprozesses von der Ober- und Unterseite bis in die gestrichelt eingezeichnete Position, woraufhin sie sich wieder etwas zurückbewegen, um vollständig abzuheben. Die Verschiebung in z-Richtung ist gesperrt, so dass es sich um einen ebenen Verzerrungszustand handelt. Der Prozess dauert 180 ms bis zur maximalen Absenkung.

also jedes der Modelle 2-6 auf 6% der Zellen vorkommt. Dieses Verhältnis bleibt über den Prozess konstant. Die Zuordnung der Modelle zu den Zellen ändert sich jedoch entsprechend der Steuerung durch den Fehlerindikator.

Abkürzung	Eigenschaft	
IY / OY	isotrope / orthotrope Fließfunktion	(C.131)
KH	kinematische Verfestigung	3.1
SD / TD	skalar- / tensorwertige Schädigung	3.6
T	Temperaturabhängigkeit	(5.43)
EG^{pl} / EG^{grad}	Penalty- / Gradienten-Potential der <i>Enhanced-Gradient</i> -Form.	4

Tabelle 9.1: Aus diesen Eigenschaften werden die Modelle zusammengesetzt. Die Eigenschaft *IY* allein bildet das einfachst mögliche Modell. Das Penalty-Potential verbessert die Stetigkeit der Schädigung. Das Gradienten-Potential bewirkt eine Glättung der Schädigung durch Diffusion.

Modell	Eigenschaften
6	IY + T + TD + EG^{plt} + EG^{grad}
5	IY + T + TD + EG^{plt}
4	IY + T + TD
3	IY + T + SD
2	IY + T
1	IY

Tabelle 9.2: Dies ist die Modell-Hierarchie in diesem Beispiel. Die Abkürzungen stehen in Tab. 9.1. Die tensorwertige Schädigung in Modell 4 ersetzt die skalarwertige Schädigung in Modell 3. Modell 5 sorgt für Stetigkeit der Schädigung, Modell 6 glättet sie zusätzlich. Die Hierarchie entspricht der Neigung zur Lokalisierung. Modell 6 ist das Referenzmodell und Modell 1 das Basismodell. Die Modelle 1-5 sind also Vereinfachungen des Referenzmodells.

In Abb. 9.3 wird das Verhältnis ξ variiert. Dazu wird der Modellfehler über dem numerischen Aufwand aufgetragen. Der Modellfehler wird für die Verschiebung \mathbf{u} und für die Schädigung \mathbf{B} betrachtet. Die relativen Fehler über die gesamte Zeit $[0, T]$ und zum Endzeitpunkt T lauten

$$e_{u,1}^{\text{rel}} = \frac{\int_T \|\mathbf{u}(t) - \mathbf{u}_{\text{ref}}(t)\|_2 dt}{\int_T \|\mathbf{u}_{\text{ref}}(t)\|_2 dt}, \quad e_{u,2}^{\text{rel}} = \frac{\|\mathbf{u}(T) - \mathbf{u}_{\text{ref}}(T)\|_2}{\|\mathbf{u}_{\text{ref}}(T)\|_2}. \quad (9.1)$$

Gleiches gilt für \mathbf{B} statt \mathbf{u} . In Abb. 9.3 wird der relative Fehler auf den maximalen relativen Fehler bezogen und in Prozent dargestellt.

Zum einen geht es darum, das optimale Verhältnis ξ zu finden. Dieses Ergebnis hängt jedoch stark vom Versuchsaufbau ab. Das eigentliche Ziel besteht darin, den Fehlerindikator zu finden, welcher für die optimale Modellverteilung sorgt. Die bestmögliche Modellverteilung bedeutet, dass die vorhandenen Ressourcen optimal eingesetzt werden, so dass mit einem kleinen numerischen Aufwand ein kleiner Modellfehler erreicht wird.

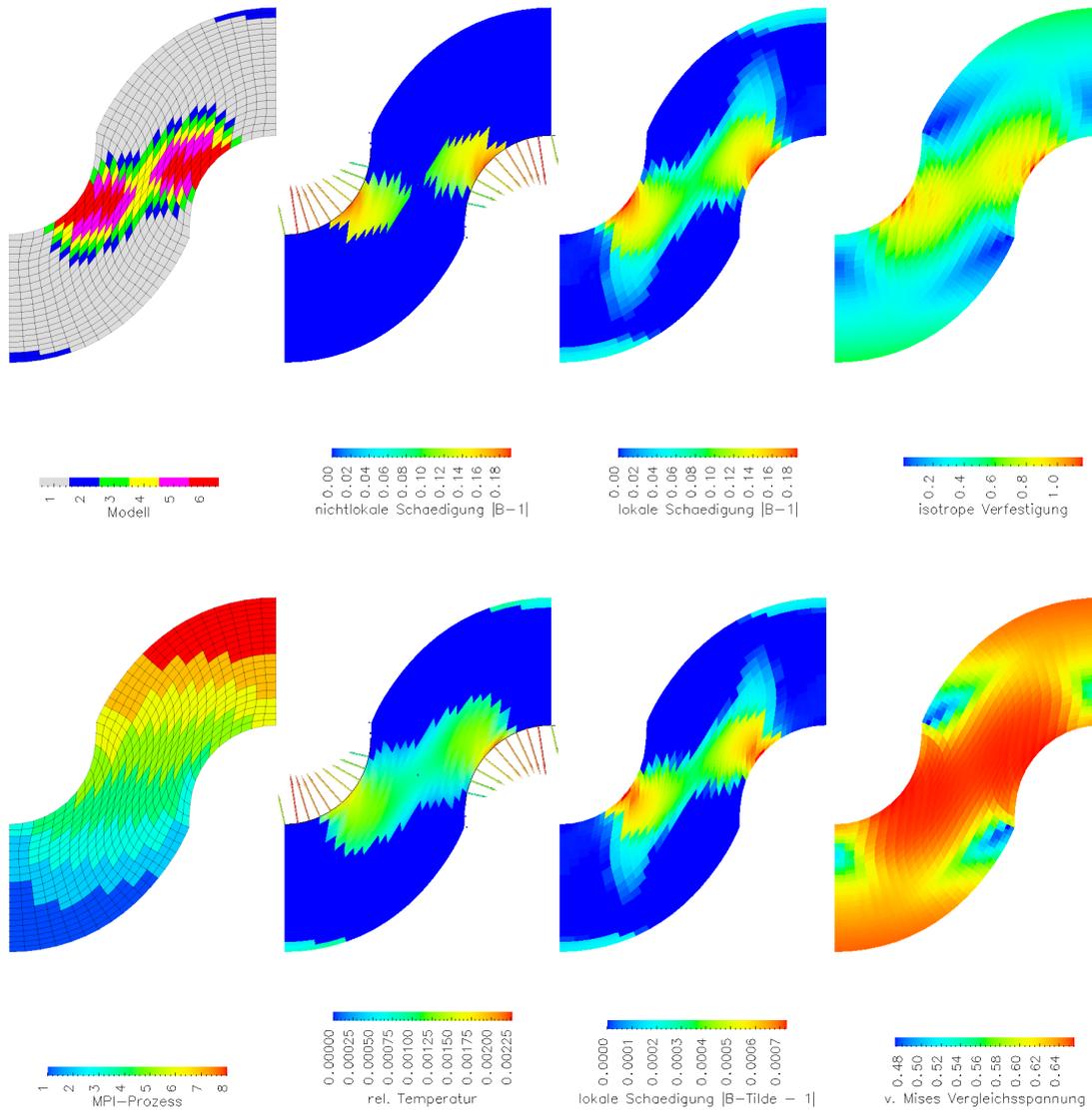


Abbildung 9.2: Es werden für den Prozess entsprechend dem Versuchsaufbau in Abb. 9.1 acht verschiedene Größen beschrieben. Oben links ist die Verteilung der sechs Modelle (Tab. 9.2) zu sehen. Sie ändert sich während des Prozesses. Die Modellverteilung wird von der isotropen Verfestigung (oben rechts) gesteuert, welche als heuristischer Fehlerindikator dient. Die nicht-lokale Schädigung $\tilde{\mathbf{B}}$ (oben links der Mitte) wird nur auf den Zellen mit den Modellen 5 und 6 berechnet. Die lokale Schädigung \mathbf{B} (oben rechts der Mitte) wird von den Modellen 3-6 berechnet. Zusätzlich wird sie dort gespeichert, wo sie im Laufe des Prozesses bereits berechnet wurde. Die Schädigung $\tilde{\mathbf{B}} = \mathbf{B}/b$ (unten rechts der Mitte) ist nur dort entstanden, wo mindestens das Modell 4 gewählt war. Die relative Temperatur $\Theta - \Theta_0$ (unten links der Mitte) wird auf den Zellen berechnet, auf denen aktuell die Modelle 2-6 vorkommen. Im Gegensatz zur isotropen Verfestigung α zeigt die v.-Mises-Vergleichsspannung $\hat{\phi}$ (unten rechts) dank der Gemischten Formulierung keine Muster. Alle lokalen Größen, die also in jedem Quadraturpunkt berechnet werden, sind auf einem konstant gefärbten Viertel jeder Zelle dargestellt. Dadurch zeichnet sich das Netz ab. Unten links wird die Verteilung der Zellen auf die (hier acht) MPI-Prozesse gezeigt. Die aufwendigen Modelle kommen fast nur im Bereich der Prozesse 4 und 5 vor. Hier wäre eine gewichtete Verteilung der Zellen auf die Prozesse sinnvoll. Links der Mitte sind die Kontaktkräfte des reibungsfreien Kontakts zu sehen.

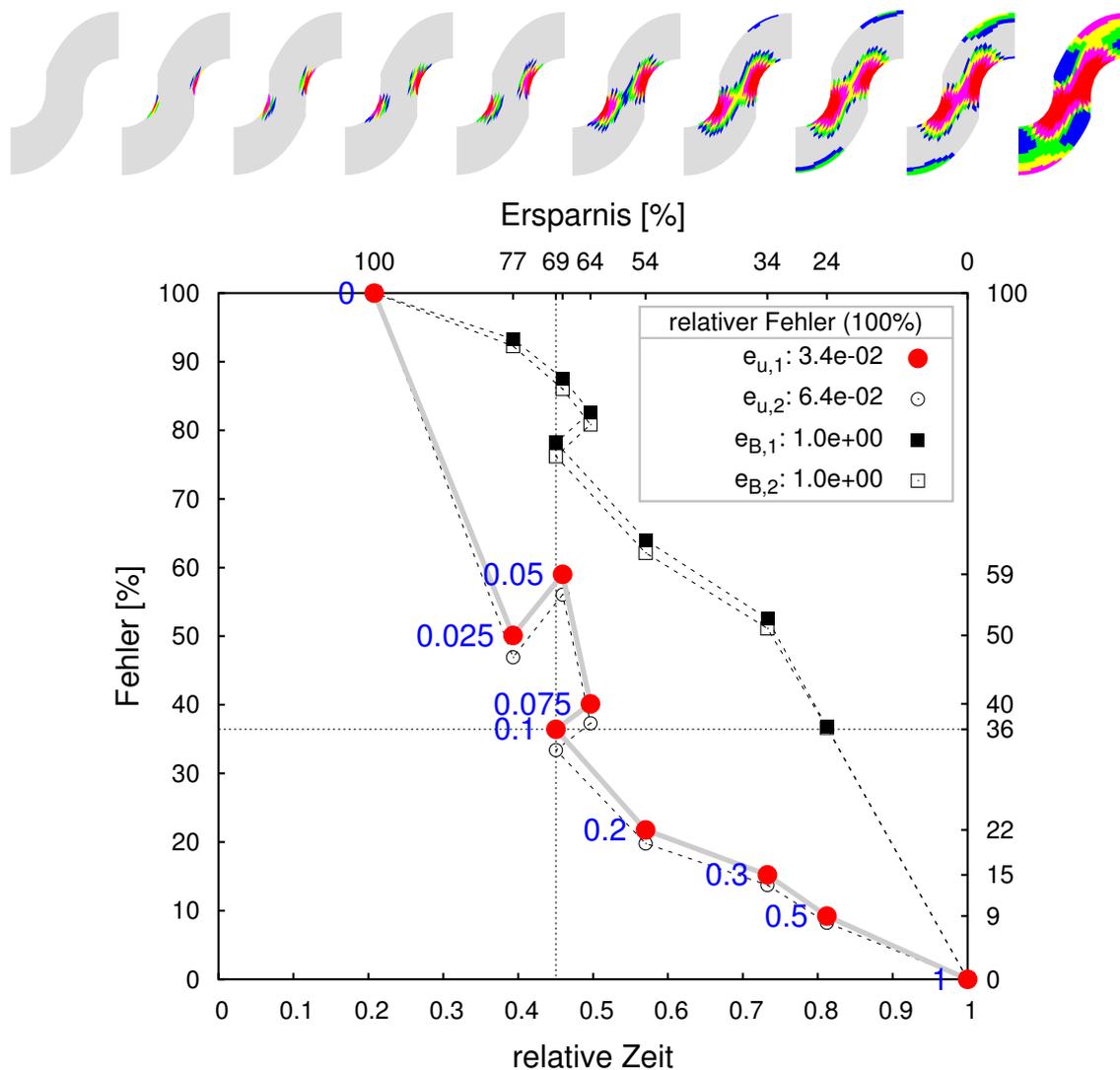


Abbildung 9.3: Es wird nun der Prozess für eine Serie von Verhältnissen ξ gerechnet, und zwar für die Werte 0.0, 0.025, 0.05, 0.075, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5 und 1.0. Die Modellverteilung nach den Farben aus Abb. 9.2 oben links ist für den Endzustand der Prozesse in der Bildleiste dargestellt. Die Bildleiste zeigt also den fließenden Übergang vom reinen Basismodell links hin zum Referenzmodell rechts. Im Graphen ist für jede Fraktion der relative Modellfehler über der relativen Zeit der Assemblierung der Steifigkeitsmatrix aufgetragen. Die Kreise bezeichnen den Fehler in der Verschiebung, die Quadrate den in der lokalen Schädigung. Neben dem Fehler über den gesamten Prozess (fett) wird der Fehler zum Endzeitpunkt des Prozesses (hohl) dargestellt. Für das reine Basismodell ($\xi = 0$) ist der Fehler maximal (100 %) und auch die maximal mögliche Ersparnis an Rechenzeit wird erreicht. Für das reine Referenzmodell ($\xi = 1$) verschwindet der Fehler und es wird keine Ersparnis erreicht. Es wäre nun wünschenswert, wenn die Kurven als Hyperbeln sich möglichst nahe dem Ursprung näherten.

In der Legende sind für das reine Basismodell die absoluten Fehler angegeben. Bei der Verschiebung geht es also um Abweichungen von 3 bis 6 %. Weil es im reinen Basismodell keine Schädigung gibt, lautet der absolute Fehler in der lokalen Schädigung 1.

9.1.1 Hierarchie aus Schädigungsmodellen

Im letzten Beispiel wurde die Fraktion $\xi = 1$ als Referenz verwendet. Nun wird der Modellfehler auf das Referenzmodell bezogen, so wie es der „reinen Lehre“ entspricht (Abb. 9.5). Der Versuchsaufbau wird leicht verändert (Abb. 9.4). Aus der Modellhierarchie wird die Temperatur entfernt (Tab. 9.3). Das Ergebnis in Abb. 9.6 zeigt die Proportionalität zwischen der Ersparnis an Aufwand und dem Modellfehler für den Fehler in der Variable, welche unmittelbar von der Modellwahl betroffen ist, der Schädigung. Der Einfluss der Schädigung auf die Verschiebung ist in diesem Beispiel zu schwach ausgeprägt, um hier eine Aussage treffen zu können.

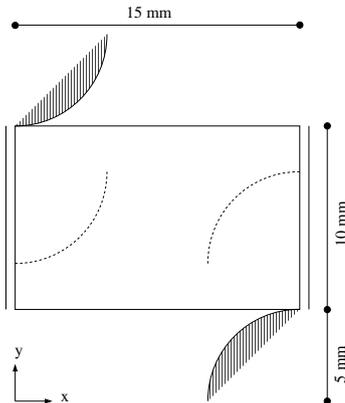


Abbildung 9.4: Es wird der Versuchsaufbau aus Abb. 9.1 etwas verändert. Die Hindernisse senken sich nun 7.5 mm statt 10 mm ab. Der Prozess dauert bis zur maximalen Absenkung 180 ms.

Modell	Eigenschaften			
5	IY	+	TD	+ EG^{plt} + EG^{grad}
4	IY	+	TD	+ EG^{plt}
3	IY	+	TD	
2	IY	+	SD	
1	IY			

Tabelle 9.3: Dies ist die Modell-Hierarchie in diesem Beispiel mit den Abkürzungen aus Tab. 9.1

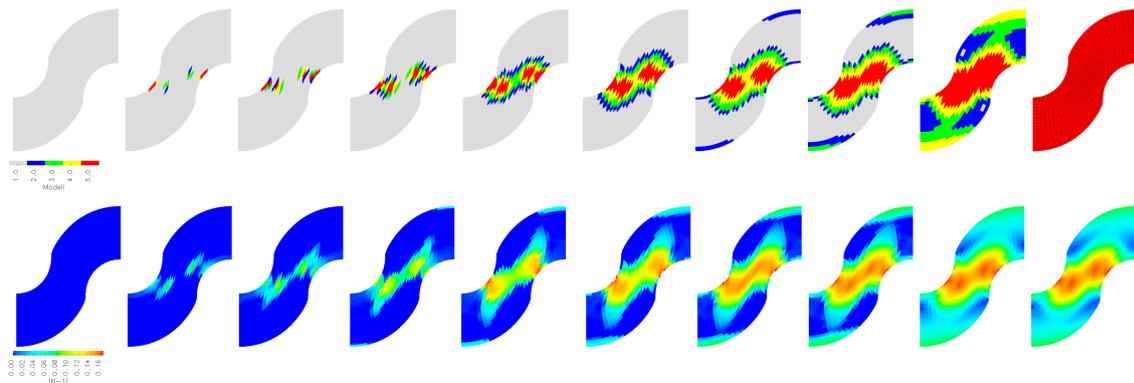


Abbildung 9.5: Es wird der Prozess für eine Serie von Verhältnissen ξ gerechnet, und zwar für die Werte 0.0, 0.025, 0.05, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 1.0 und das Referenzmodell. Oben ist die Verteilung der fünf Modelle aus Tab. 9.1 am Ende der Simulation dargestellt und unten die lokale Schädigung $|B - 1|/\sqrt{2}$ mit dem Maximalwert 0.16.

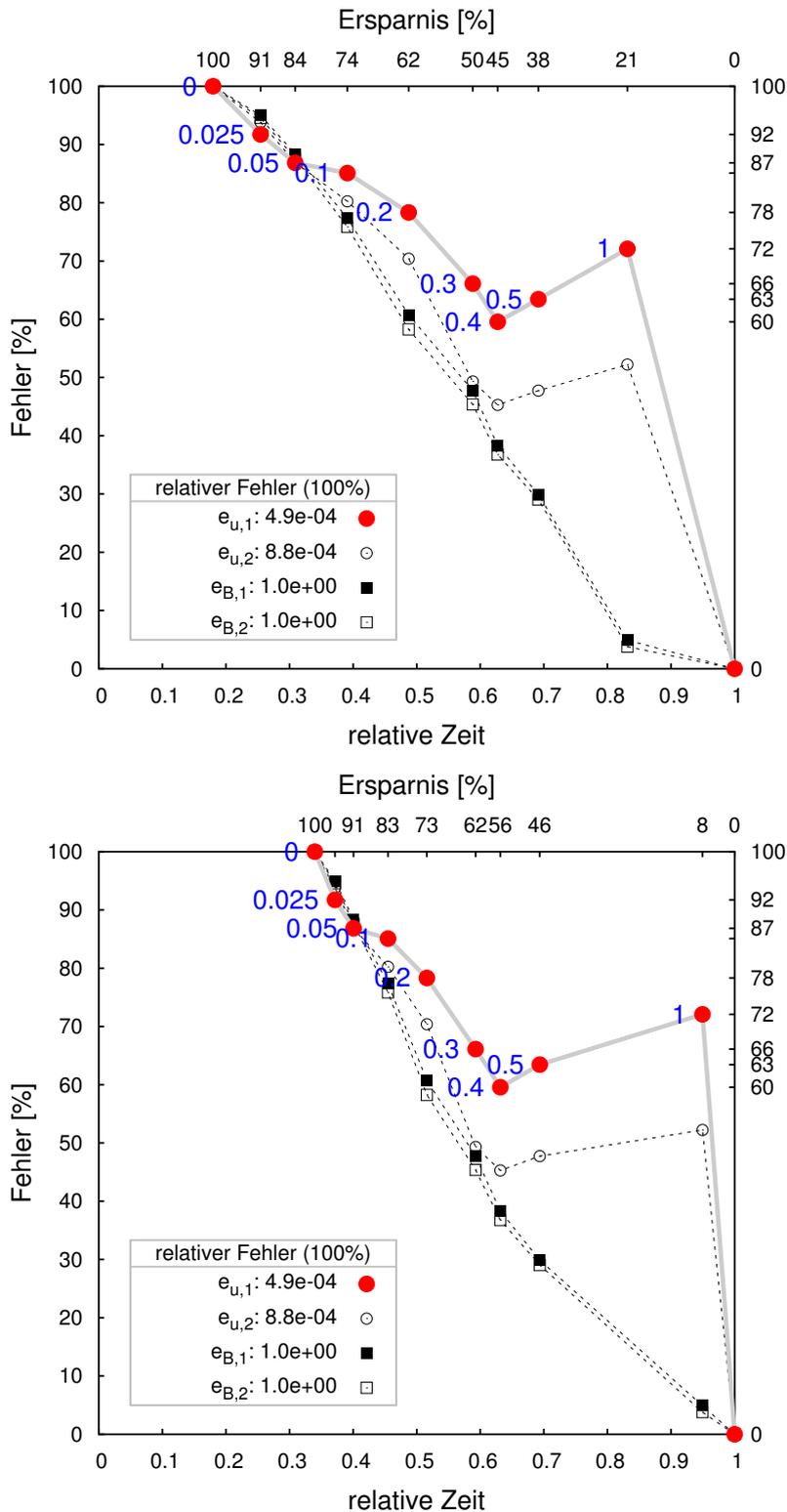


Abbildung 9.6: Zu den Simulationen aus Abb. 9.2 sind links die Fehler über der relativen Zeit der Assemblierung aufgetragen und rechts die Fehler über der relativen Gesamtzeit. Der relative Modellfehler in der Schädigung (Quadrate) fällt fast linear ab. Der Fehler in der Verschiebung (Kreise) verläuft schlechter als linear. Der absolute Fehler ist mit 0.088 % jedoch so klein, dass er gar nicht interessant ist. Für die Erklärung der Darstellung s. Tab. 9.3.

9.2 3D-Beispiel

Zum Versuchsaufbau aus Abb. 2.4 werden Hierarchien mit der Gemischten Formulierung (G), der *Enhanced-Strain-* (ES) und der Assumed-Strain-Formulierung (AS) gebildet. Als heuristischer Fehlerindikator dient der Glättungsoperator aus der Assumed-Strain-Formulierung in der Form $|C^{as}(C) - C|$ (2.52).

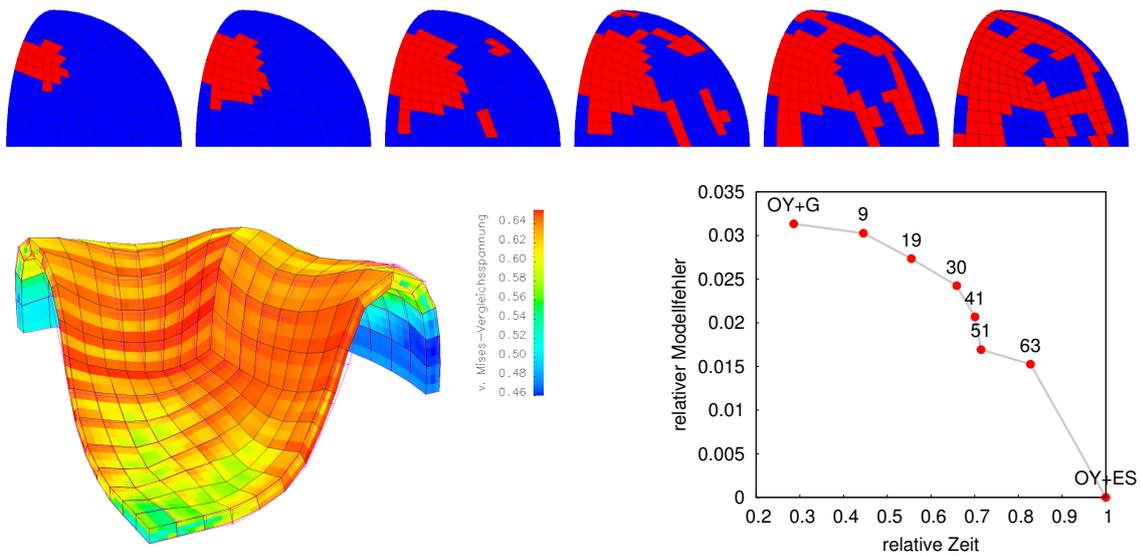


Abbildung 9.7: Es wird die Hierarchie aus dem Basismodell $OY + G$ und dem Referenzmodell $OY + ES$ verwendet, wobei die Fließfunktion orthotrop ist (Tab. 9.1). Links wird die Lösung aus dem Referenzmodell (farbig) mit der aus dem Basismodell (magentafarbenes Netz) verglichen. Der Graph zeigt den Fehler in der Verschiebung für eine Reihe von Fraktionen.

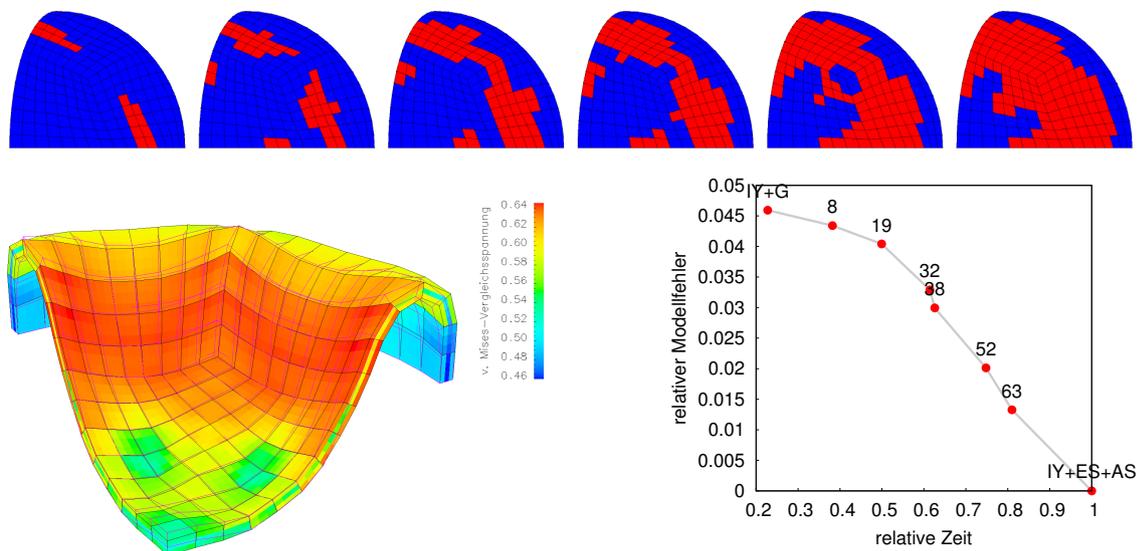


Abbildung 9.8: Im Beispiel oben wird nun die Hierarchie aus dem Basismodell $IY + G$ und dem Referenzmodell $IY + ES + AS$ verwendet. Die Aufsicht zeigt eine symmetrische Modellverteilung.

A Technische Details

A.1 Partielle Ableitungen

Um die vollständigen Ableitungen in der linken Spalte der Tabelle 6.2 berechnen zu können, müssen die partiellen Ableitungen in den rechten Spalten programmiert werden. Bei jeder Erweiterung oder Änderung der Modellierung ist diese Arbeit zu leisten. Im Vergleich zu den systematisch berechneten vollständigen Ableitungen ist der Umfang und Aufwand jedoch eher gering. Die Tabelle wird erneut hingeschrieben.

vollständige Ableitung	zu programmierende partielle Ableitungen		
$d_\alpha R_\phi$	$\partial_\omega \mathbf{R}_\omega, \partial_\omega R_\phi$	$\partial_\alpha \mathbf{R}_\omega, \partial_\alpha R_\phi$	
$d_Z \mathbf{S}$	$\partial_\omega \bar{\mathbf{S}}$		$\partial_Z \mathbf{R}_\omega, \partial_Z R_\phi, \partial_Z \bar{\mathbf{S}}$
$d_Z(\mathcal{H}_{heat}^e - \mathcal{D}_{int})$	$\partial_\omega(\mathcal{H}_{heat}^e - \mathcal{D}_{int})$	$\partial_\alpha(\mathcal{H}_{heat}^e - \mathcal{D}_{int})$	$\partial_Z(\mathcal{H}_{heat}^e - \mathcal{D}_{int})$
$d_Z \boldsymbol{\omega}$			
$d_Z \mathbf{F}^p$	$\partial_\omega \mathbf{F}^p$	$\partial_\alpha \mathbf{F}^p$	$\partial_Z \mathbf{F}^p$

Tabelle A.1

Als ein Beispiel für die Ableitungen, welche zu bilden sind, wird das Residuum \mathbf{R}_B (3.9) genommen. Es wird der Fall betrachtet, in dem \mathbf{F}^p eine innere Variable ist. Nach einigen vorbereitenden Schritten,

$$\begin{aligned}
 \Delta &= -\partial_B \bar{W} - \partial_B \Psi_{plt}^{nloc}(\mathbf{B}, \bar{\mathbf{B}}) \quad (4.12), \\
 \partial_B \Delta &= -\partial_{BB}^2 \bar{W} - \partial_{BB}^2 \Psi_{plt}^{nloc}(\mathbf{B}, \bar{\mathbf{B}}), \\
 \partial_{C^e} \Delta &= -\partial_{C^e B}^2 \bar{W}, \\
 d_B \varphi(\Delta, \mathbf{B}) &= \partial_B \varphi + \partial_\Delta \varphi : \partial_B \Delta, \\
 d_{C^e} \varphi(\Delta, \mathbf{B}) &= \partial_\Delta \varphi : \partial_{C^e} \Delta, \\
 d_{F^p} \varphi(\Delta, \mathbf{B}) &= \partial_\Delta \varphi : \partial_{C^e} \Delta : \partial_{F^p} C^e \quad (C.119),
 \end{aligned} \tag{A.1}$$

wird ein Teil von $\partial_\omega \mathbf{R}_\omega$ gebildet,

$$\begin{aligned}
 \partial_{F^p} \mathbf{R}_B &= -\Delta \gamma \partial_\Delta \varphi : \partial_{C^e} \Delta : \partial_{F^p} C^e, \\
 \partial_B \mathbf{R}_B &= \mathbb{I} - \Delta \gamma (\partial_B \varphi + \partial_\Delta \varphi : \partial_B \Delta), \\
 \partial_{\alpha^k} \mathbf{R}_B &= 0.
 \end{aligned} \tag{A.2}$$

A.1.1 Bemerkung. *Sämtliche Ableitungen, auch die automatisch berechneten vollständigen in der Tabelle links, müssen mit Differenzenquotienten numerisch überprüft werden, weil nur so eine Gewissheit über die Korrektheit der Linearisierung zu erlangen ist.*

A.2 Herleitung von \mathbb{G}

Es wird \mathbb{G} in der algorithmisch konsistenten Tangente (1.27),

$$\begin{aligned} \mathbf{F}^{\mathbb{P}-1} \left[\mathbb{G} : d_C \mathbf{F}^{\mathbb{P}} : \dot{\mathbf{C}} \right] \mathbf{F}^{\mathbb{P}-T} &= \left[d_C \mathbf{F}^{\mathbb{P}-1} : \dot{\mathbf{C}} \right] \bar{\mathbf{S}} \mathbf{F}^{\mathbb{P}-T} + \mathbf{F}^{\mathbb{P}-1} \bar{\mathbf{S}} \left[d_C \mathbf{F}^{\mathbb{P}-T} : \dot{\mathbf{C}} \right] \\ &= \mathcal{A} + \mathcal{B}, \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

ausgeführt. Beide Terme werden getrennt in Indexdarstellung geschrieben, wobei (C.115) und (C.117) verwendet werden:

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{ij} &= (d_C \mathbf{F}^{\mathbb{P}-1})_{ikrs} \dot{C}_{rs} \bar{S}_{km} F_{mj}^{\mathbb{P}-T} = \frac{dF_{ik}^{\mathbb{P}-1}}{dF_{pq}^{\mathbb{P}}} (d_C \mathbf{F}^{\mathbb{P}})_{pqrs} \dot{C}_{rs} \bar{S}_{km} F_{mj}^{\mathbb{P}-T} \\ &= -F_{ip}^{\mathbb{P}-1} F_{qk}^{\mathbb{P}-1} (d_C \mathbf{F}^{\mathbb{P}})_{pqrs} \dot{C}_{rs} \bar{S}_{km} F_{mj}^{\mathbb{P}-T} = -F_{ip}^{\mathbb{P}-1} F_{jm}^{\mathbb{P}-1} F_{qk}^{\mathbb{P}-1} \bar{S}_{km} (d_C \mathbf{F}^{\mathbb{P}})_{pqrs} \dot{C}_{rs}, \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

$$\begin{aligned} \mathcal{B}_{ij} &= F_{ik}^{\mathbb{P}-1} \bar{S}_{km} (d_C \mathbf{F}^{\mathbb{P}-T})_{mjrs} \dot{C}_{rs} = F_{ik}^{\mathbb{P}-1} \bar{S}_{km} \frac{dF_{mj}^{\mathbb{P}-T}}{dF_{pq}^{\mathbb{P}}} (d_C \mathbf{F}^{\mathbb{P}})_{pqrs} \dot{C}_{rs} \\ &= -F_{ik}^{\mathbb{P}-1} \bar{S}_{km} F_{jp}^{\mathbb{P}-1} F_{qm}^{\mathbb{P}-1} (d_C \mathbf{F}^{\mathbb{P}})_{pqrs} \dot{C}_{rs} = -F_{ik}^{\mathbb{P}-1} F_{jp}^{\mathbb{P}-1} F_{qm}^{\mathbb{P}-1} \bar{S}_{km} (d_C \mathbf{F}^{\mathbb{P}})_{pqrs} \dot{C}_{rs}. \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Die Summe von (A.4) und (A.5) lautet

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{ij} + \mathcal{B}_{ij} &= - \left\{ F_{ip}^{\mathbb{P}-1} F_{jm}^{\mathbb{P}-1} F_{qk}^{\mathbb{P}-1} \bar{S}_{km} + F_{ik}^{\mathbb{P}-1} F_{jp}^{\mathbb{P}-1} F_{qm}^{\mathbb{P}-1} \bar{S}_{km} \right\} (d_C \mathbf{F}^{\mathbb{P}})_{pqrs} \dot{C}_{rs} \\ &= - \left\{ F_{ia}^{\mathbb{P}-1} F_{jb}^{\mathbb{P}-1} \delta_{ap} \delta_{bm} F_{qk}^{\mathbb{P}-1} \bar{S}_{km} + F_{ia}^{\mathbb{P}-1} F_{jb}^{\mathbb{P}-1} \delta_{ak} \delta_{bp} F_{qm}^{\mathbb{P}-1} \bar{S}_{km} \right\} (d_C \mathbf{F}^{\mathbb{P}})_{pqrs} \dot{C}_{rs}. \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

Es werden nun Tensoren ausgeklammert:

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{ij} + \mathcal{B}_{ij} &= -F_{ia}^{\mathbb{P}-1} F_{jb}^{\mathbb{P}-1} \left\{ \delta_{ap} \delta_{bm} F_{qk}^{\mathbb{P}-1} \bar{S}_{km} + \delta_{ak} \delta_{bp} F_{qm}^{\mathbb{P}-1} \bar{S}_{km} \right\} (d_C \mathbf{F}^{\mathbb{P}})_{pqrs} \dot{C}_{rs} \\ &= -F_{ia}^{\mathbb{P}-1} F_{jb}^{\mathbb{P}-1} \left\{ \delta_{ap} (F_{qk}^{\mathbb{P}-1} \bar{S}_{kb} + \delta_{bp} F_{qm}^{\mathbb{P}-1} \bar{S}_{am}) \right\} (d_C \mathbf{F}^{\mathbb{P}})_{pqrs} \dot{C}_{rs} \\ &= -F_{ia}^{\mathbb{P}-1} F_{jb}^{\mathbb{P}-1} \left\{ \delta_{ap} F_{qk}^{\mathbb{P}-1} \bar{S}_{kb} + \delta_{bp} F_{qk}^{\mathbb{P}-1} \bar{S}_{ak} \right\} (d_C \mathbf{F}^{\mathbb{P}})_{pqrs} \dot{C}_{rs} \\ &= F_{ia}^{\mathbb{P}-1} F_{jb}^{\mathbb{P}-1} \left\{ -F_{qk}^{\mathbb{P}-1} [\delta_{ap} \bar{S}_{kb} + \delta_{bp} \bar{S}_{ak}] \right\} (d_C \mathbf{F}^{\mathbb{P}})_{pqrs} \dot{C}_{rs} \\ &= F_{ia}^{\mathbb{P}-1} F_{jb}^{\mathbb{P}-1} \mathbb{G}_{abpq} (d_C \mathbf{F}^{\mathbb{P}})_{pqrs} \dot{C}_{rs}. \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

\mathbb{G} in (A.3) lautet also

$$\mathbb{G}_{abpq} = -F_{qk}^{\mathbb{P}-1} [\delta_{ap} \bar{S}_{kb} + \delta_{bp} \bar{S}_{ak}]. \quad (\text{A.8})$$

\mathbb{G} ist symmetrisch in den ersten beiden Indizes. Der Tensor vierter Stufe wird als 6×9 - bzw. 3×4 -Matrix $(\mathbb{G})_{ij}$ geschrieben. Es gilt $\mathbb{G}_{ijkm} = (\mathbb{G})_{s_i j c_{km}}$ (C.10).

B Diskretisierung der isotropen Elastoplastizität

Dieses Kapitel bezieht sich auf die Hierarchie aus isotroper und anisotroper Elastoplastizität in Abschnitt 3.2. Das isotrope Modell ermöglicht die spezielle Diskretisierung in der Basis der Hauptachsen. Dadurch wird die Anzahl der Unbekannten reduziert. Es ist jedoch ein Eigenwertproblem zu lösen. Die Modellierung ist beschränkt auf eine isotrope elastische Energie, eine isotrope Fließfunktion und weitere skalarwertige innere Variablen. Hier wird die skalarwertige Schädigung b verwendet. Auch bei sonst isotropen Funktionen induziert der Schädigungstensor \mathbf{B} Anisotropie. Gleiches gilt für die kinematische Verfestigung.

Die Modelle in diesem Kapitel bilden die unterste Stufe in einer Hierarchie von Modellen der Elastoplastizität großer Verformungen. Darunter beginnt der Bereich der kleinen Verformungen.

Es werden die Evolutionsgleichungen (3.4) $\mathbf{L}^p = \gamma \partial_{\Sigma} \phi$, $\dot{\alpha} = \gamma \partial_q \phi$ und $\dot{b} = \gamma \partial_{\delta} \phi$ diskretisiert. Ausgangspunkt sind die Diskretisierungen (3.16) und (3.21), welche beide als innere Variable \mathbf{C}^e verwenden. Weil das Residuum (3.21) die Modellreduktion (3.7) enthält, wird es in diesem Kapitel als reduziertes Modell bezeichnet, während (3.16) das Referenzmodell ist.

Die isotrope elastische Energie $\bar{W}(\mathbf{C}^e, b)$ (1.14) heißt im folgenden $W(\lambda_A^2, b)$. Sie läßt sich in den Eigenwerten λ_A^2 von \mathbf{C}^e darstellen. Für eine entkoppelte Energie gilt $W(\lambda_A^2, b) = \bar{W}(\mathbf{C}^e, b)$ (1.39). Ebenso wird die Fließfunktion $\hat{\phi}^{iso}(\boldsymbol{\Sigma})$ in der Form $\hat{\phi}(\Sigma_A) = \hat{\phi}^{iso}(\Sigma_A)$ (C.139) mit den Eigenwerten Σ_A von $\boldsymbol{\Sigma}$ geschrieben.

B.1 Referenzmodell

Das Residuum (3.16),

$$\mathbf{R}_{\mathbf{C}^e} = \mathbf{C}_*^e - \mathbf{e}^{-T} \mathbf{C}^{e*} \mathbf{e}^{-1} = \mathbf{0}, \quad (\text{B.1})$$

mit $\mathbf{C}^{e*} = \mathbf{F}_n^{p-T} \mathbf{C}_* \mathbf{F}_n^{p-1}$ und $\mathbf{e} = \exp(\Delta \gamma \partial_{\Sigma} \phi(\boldsymbol{\Sigma}_*))$ wird nun in der Basis der Hauptachsen von \mathbf{C}^{e*} diskretisiert. Dazu werden mit (C.18) die Eigenwerte λ^{*2} und die Eigenvektoren \mathbf{N} von \mathbf{C}^{e*} bestimmt. Es gilt also $\mathbf{C}_*^{e*} = \sum_{A=1}^3 \lambda_A^{*2} \mathbf{N}_A \otimes \mathbf{N}_A$. Weil \mathbf{C}_*^e , \mathbf{C}^{e*} , $\boldsymbol{\Sigma}^*$, und $\partial_{\Sigma} \phi$ kommutieren (C.9), vereinfacht sich (B.1) im einstufigen Fall zu

$$\lambda_A^2 = \lambda_A^{*2} \exp\left(-2\Delta \gamma \frac{\partial \phi(\Sigma_A^*)}{\partial \Sigma_A^*}\right), \quad (\text{B.2})$$

wobei Σ_A^* die Eigenwerte von $\boldsymbol{\Sigma}^*$ sind. Es gilt $\Sigma_A^* = \lambda_A^{*2} \bar{S}_A^*$ mit $\bar{S}_A^* = 2 \frac{\partial W(\lambda_B^{*2}, b)}{\partial \lambda_A^{*2}}$. Im zweistufigen Fall wird die Hauptachsendarstellung von (B.1) als Residuum mit den Unbekannten λ_A^2 geschrieben,

$$R_{\lambda^2} = \lambda_A^2 - \lambda_A^{*2} \exp\left(-2\Delta \gamma \frac{\partial \phi(\Sigma_B)}{\partial \Sigma_A}\right) = 0, \quad (\text{B.3})$$

wobei Σ_A die Eigenwerte von $\boldsymbol{\Sigma}(\mathbf{C}_*^e, b_*)$ sind. Es gilt $\Sigma_A = \lambda_A^2 \bar{S}_A$ mit $\bar{S}_A = 2 \frac{\partial W(\lambda_B^2, b)}{\partial \lambda_A^2}$.

B.1.1 Evolutionsgleichung der Schädigung

Außerdem tritt die Evolutionsgleichung $\dot{b} = \gamma \partial_\delta \phi$ (3.4)₃ hinzu, die im zweistufigen Fall in der Form $b_* = b_n + \Delta \gamma \partial_\delta \phi(\delta_*, b_*)$ diskretisiert (6.34) wird mit $\delta_* = -\partial_b \bar{W}(\lambda_A^2, b_*)$, so dass sich das Residuum

$$R_b = b_* - b_n - \Delta \gamma \partial_\delta \phi(\delta_*, b_*) \quad (\text{B.4})$$

ergibt. Im einstufigen Fall darf b_* nur von α_* abhängen, also

$$b_* = b_n + \Delta \gamma \partial_\delta \phi^*. \quad (\text{B.5})$$

$\partial_\delta \phi^*$ ist aus dem vorherigen Zeitschritt gegeben, ebenso δ^* . Zu Beginn des Zeitschritts wird das Fließkriterium mit $\phi(\delta^*, b_n)$ und $\bar{S}_A^* = 2 \partial_{\lambda_A^2} \bar{W}(\lambda_B^{*2}, b_n)$ abgefragt, anschließend mit $\delta_* = -\partial_b \bar{W}(\lambda_A^2, b_*)$. Am Ende des Zeitschritts werden $\delta^* = \delta_*$ und $\partial_\delta \phi^* = \partial_\delta \phi(\delta_*, b_*)$ aktualisiert. Das einstufige Schema läßt sich nur über Konstanten aus dem vorherigen Zeitschritt realisieren, weil $\delta = -\partial_b \bar{W}(\lambda_A^{*2}, b_n) = 0$.

B.1.2 Aktualisierung des plastischen Deformationsgradienten

Nachdem in Abschnitt B.3 die Lösung α_* , oder im zweistufigen Fall, die Lösungen α_* und λ_A^2 berechnet wurden, und die Rechnung auf dem Zeitschritt beendet ist, so wird \mathbf{F}_{n+1}^p mit

$$\mathbf{F}_{n+1}^p = \left\{ \sum_{A=1}^3 \exp \left(\frac{1}{n_\phi} (\alpha_{n+1} - \alpha_n) \frac{\partial \phi(\Sigma_B)}{\partial \Sigma_A} \right) \mathbf{N}_A \otimes \mathbf{N}_A \right\} \mathbf{F}_n^p \quad (\text{B.6})$$

aktualisiert, wobei $\Sigma = \Sigma^*$ im einstufigen Fall.

B.2 Reduziertes Modell

Ausgangspunkt ist die Modellreduktion (3.7), deren Diskretisierung (3.21) wegen der Isotropie ohne den Symmetrie-Operator geschrieben wird,

$$\mathbf{C}_*^e = \mathbf{C}^{e*} - 2 \mathbf{C}_*^e \Delta \gamma_* \partial_{\Sigma} \phi(\Sigma(\mathbf{C}_*^e)) \quad (\text{B.7})$$

mit der Konstanten $\mathbf{C}^{e*} = \mathbf{F}^{p-T} (\mathbf{C}_* - \mathbf{C}_n) \mathbf{F}^{p-1} + \mathbf{C}_n^e$ und mit $\Delta \gamma_* = (\alpha_* - \alpha_n) / n_\phi$. Die einstufige Formulierung mit $\Sigma^* = \Sigma(\mathbf{C}^{e*})$ lautet

$$\mathbf{C}_*^e = \mathbf{C}_n^{e*} - 2 \mathbf{C}_*^e \Delta \gamma_* \partial_{\Sigma} \phi(\Sigma^*). \quad (\text{B.8})$$

Die Formulierung (B.8) wird in der Basis der Hauptachsen dargestellt,

$$\lambda_A^2 = \frac{\lambda_A^{*2}}{1 + 2 \Delta \gamma_* \partial_{\Sigma_A} \phi(\Sigma_B^*)}, \quad (\text{B.9})$$

wobei $\Sigma_B^* = \lambda_B^{*2} \bar{S}_B(\lambda_A^{*2})$. Für die zweistufige Formulierung wird (B.8) in der Basis der Hauptachsen als Residuum geschrieben,

$$R_{\lambda^2} = \lambda_A^2 (1 + 2 \Delta \gamma_* \partial_{\Sigma_A} \phi(\Sigma_B)) - \lambda_A^{*2} = 0, \quad (\text{B.10})$$

wobei $\Sigma_B = \lambda_B^2 \bar{S}_B(\lambda_A^2)$. Für die Evolutionsgleichung der Schädigung gilt Abschnitt B.1.1.

B.3 Lösung des lokalen Problems

Zur besseren Übersicht werden alle Gleichungen zusammengestellt. Das Lösungsverfahren entspricht dem in Abschnitt 3.4. Im plastizierenden Fall $\phi > 0$ ist die Lösung α_* der nichtlinearen Gleichung

$$R_\phi(\alpha_*) = \hat{\phi}(\Sigma_A(\lambda_B^2, b_*) - n_\phi(\sigma_Y - q(\alpha_*)) + \varphi(\delta_*, b_*) = 0 \quad (\text{B.11})$$

zu bestimmen. Im einstufigen Fall ergeben sich b_* und λ_A^2 aus (B.5) und (B.2) oder (B.9),

$$\begin{aligned} \text{Referenzmodell : } \quad b_* &= b_n + \Delta\gamma \partial_\delta \varphi^*, \\ \lambda_A^2 &= \lambda_A^{*2} \exp\left(-2\Delta\gamma \frac{\partial \phi(\Sigma_B^*)}{\partial \Sigma_A^*}\right), \\ \text{Reduziertes Modell : } \quad \lambda_A^2 &= \frac{\lambda_A^{*2}}{1 + 2\Delta\gamma_* \partial_{\Sigma_A} \phi(\Sigma_B^*)}. \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

Im zweistufigen Fall ergeben sich b_* und λ_A^2 als Lösung der nichtlinearen Gleichungen (B.4) und (B.3) oder (B.10):

$$\begin{aligned} R_b &= b_* - b_n - \Delta\gamma \partial_\delta \varphi(\delta_*, b_*), \\ \text{Referenzmodell : } \quad R_{\lambda^2} &= \lambda_A^2 - \lambda_A^{*2} \exp\left(-2\Delta\gamma \frac{\partial \phi(\Sigma_B)}{\partial \Sigma_A}\right) = 0, \\ \text{Reduziertes Modell : } \quad R_{\lambda^2} &= \lambda_A^2 (1 + 2\Delta\gamma_* \partial_{\Sigma_A} \phi(\Sigma_B)) - \lambda_A^{*2} = 0. \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

B.3.1 Zweistufiges Schema

Zur Vorbereitung der Lösung wird die Schreibweise komprimiert: $\mathbf{R}_\lambda = (R_{\lambda_1^2}, R_{\lambda_2^2}, R_{\lambda_3^2})$, $\boldsymbol{\lambda} = (\lambda_1^2, \lambda_2^2, \lambda_3^2)$, $\boldsymbol{\omega} = (\boldsymbol{\lambda}, b)$ und $\mathbf{R}_\omega = (\mathbf{R}_\lambda, R_b)$. Für jeden Newton-Schritt auf der oberen Stufe zur Lösung von (B.11) ist zuvor $\mathbf{R}_\omega = \mathbf{0}$ (B.13) mit gegebenem $\Delta\gamma$ zu lösen, wobei in diesem Newton-Verfahren auf der unteren Stufe zur Berechnung eines jeden Inkrements $\delta\boldsymbol{\omega} = -(\partial_\omega \mathbf{R}_\omega)^{-1} \mathbf{R}_\omega$ ein Gleichungssystem zu lösen ist, welches ausgeschrieben

$$\begin{pmatrix} \delta\boldsymbol{\lambda} \\ \delta b \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} d_\lambda \mathbf{R}_\lambda & d_b \mathbf{R}_\lambda \\ d_\lambda \mathbf{R}_b & d_b \mathbf{R}_b \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \mathbf{R}_\lambda \\ R_b \end{pmatrix} \quad (\text{B.14})$$

lautet. Mit der Lösung $\boldsymbol{\omega}_{n+1}$, welche $\mathbf{R}_\omega = \mathbf{0}$ erfüllt, wird nun das Inkrement $\delta\alpha = -(d_\alpha R_\phi)^{-1} R_\phi$ berechnet, wobei die Linearisierung

$$d_\alpha R_\phi = (d_\omega \phi) : (d_\alpha \boldsymbol{\omega}) + (\partial_q \phi)(\partial_\alpha q) \quad (\text{B.15})$$

lautet. Zur Berechnung von $d_\alpha \boldsymbol{\omega}$ ist ein weiteres Gleichungssystem mit der Matrix aus (B.14) zu lösen,

$$d_\alpha \boldsymbol{\omega} = -(d_\omega \mathbf{R}_\omega)^{-1} d_\alpha \mathbf{R}_\omega, \quad (\text{B.16})$$

wozu die vollständige Ableitung (C.128) verwendet wird. Diese darf angewendet werden, weil die Voraussetzung $\mathbf{R}_\omega(\boldsymbol{\omega}) = \mathbf{0}$ erfüllt ist.

B.3.2 Einstufiges Schema

Es muß die Lösung α_* der nichtlinearen Gleichung (B.11) zusammen mit (B.12) in einem (einstufigen) Newton-Verfahren bestimmt werden, um das lokale Problem zu lösen.

B.4 Algorithmisch konsistente Tangente

Es ist die Tangente $d\mathbf{S}_*/d\mathbf{C}_*$ zu bestimmen, wobei $\mathbf{S}_* = \mathbf{F}_*^{\text{p}^{-1}} \bar{\mathbf{S}}_* \mathbf{F}_*^{\text{p}^{-T}}$ die auf die Fließfläche zurückgezogene Spannung ist, $\mathbf{C}_* = \mathbf{F}_*^T \mathbf{F}_*$ jedoch die gegebene Deformation. Die Ableitungen $d\bar{\mathbf{S}}_*/d\mathbf{C}^{\text{e}*}$ und $d\mathbf{F}_*^{\text{p}}/d\mathbf{C}^{\text{e}*}$ können in der Basis der gegebenen Eigenvektoren bestimmt werden. Sie werden unten getrennt für den ein- und zweistufigen Fall hergeleitet und hier als bekannt angenommen. Mit ihnen lauten die Ableitungen nach \mathbf{C}_*

$$\frac{d\bar{\mathbf{S}}_*}{d\mathbf{C}_*} = \frac{d\bar{\mathbf{S}}_*}{d\mathbf{C}^{\text{e}*}} : \frac{\partial \mathbf{C}^{\text{e}*}}{\partial \mathbf{C}_*}, \quad \frac{d\mathbf{F}_*^{\text{p}}}{d\mathbf{C}_*} = \frac{d\mathbf{F}_*^{\text{p}}}{d\mathbf{C}^{\text{e}*}} : \frac{\partial \mathbf{C}^{\text{e}*}}{\partial \mathbf{C}_*}, \quad (\text{B.17})$$

wobei $\partial_{\mathbf{C}_*} \mathbf{C}^{\text{e}*}(\mathbf{C}_*, \mathbf{F}_*^{\text{p}*})$ mit (C.39) gegeben ist. Die algorithmisch konsistente Tangente $\mathbb{C} = 2d_{\mathbf{C}} \mathbf{S}$ wurde in Abschnitt 1.5 eingeführt. Das Ergebnis (1.30) lautete

$$\frac{1}{2} \mathbb{C} = \mathbf{F}^{\text{p}^{-1}} \circ \mathbf{F}^{\text{p}^{-1}} \circ (\partial_{\mathbf{C}} \bar{\mathbf{S}} + \partial_{\omega} \bar{\mathbf{S}} : d_{\mathbf{C}} \boldsymbol{\omega} + \mathbb{G} : d_{\mathbf{C}} \mathbf{F}^{\text{p}}) \quad (\text{B.18})$$

$$\frac{\partial \mathbf{S}_*}{\partial \mathbf{C}_*} = \mathbf{F}_*^{\text{p}^{-1}} \circ \mathbf{F}_*^{\text{p}^{-1}} \circ \left(\frac{d\bar{\mathbf{S}}_*}{d\mathbf{C}_*} + \mathbb{G}_* : \frac{d\mathbf{F}_*^{\text{p}}}{d\mathbf{C}_*} \right). \quad (\text{B.19})$$

Für das reduzierte Modell ist \mathbf{F}_*^{p} konstant, und es entfällt der zweite Term. Die Tangente in Hauptachsendarstellung (C.20) wurde bereits für die isotrope Elastizität (1.37) verwendet. In diesem Fall lautet sie

$$\begin{aligned} \frac{d\bar{\mathbf{S}}_*}{d\mathbf{C}^{\text{e}*}} &= \sum_{A=1}^3 \sum_{B=1}^3 \frac{d\bar{S}_A}{d\lambda_B^{*2}} \mathbf{N}_A \otimes \mathbf{N}_A \otimes \mathbf{N}_B \otimes \mathbf{N}_B + \\ &+ \sum_{A=1}^3 \sum_{\substack{B=1 \\ B \neq A}}^3 \frac{1}{2} \frac{\bar{S}_A - \bar{S}_B}{\lambda_A^{*2} - \lambda_B^{*2}} \mathbf{N}_A \otimes \mathbf{N}_B \otimes (\mathbf{N}_A \otimes \mathbf{N}_B + \mathbf{N}_B \otimes \mathbf{N}_A) \end{aligned} \quad (\text{B.20})$$

mit

$$\frac{d\bar{S}_A}{d\lambda_B^{*2}} = \sum_{D=1}^3 \frac{\partial \bar{S}_A}{\partial \lambda_D^2} \frac{d\lambda_D^2}{d\lambda_B^{*2}} + \frac{\partial \bar{S}_A}{\partial b_*} \frac{db_*}{d\lambda_B^{*2}}. \quad (\text{B.21})$$

Während die partiellen Ableitungen $\partial \bar{S}_A / \partial \lambda_D^2$ und $\partial \bar{S}_A / \partial b_*$ aus $\bar{S}_A = 2 \frac{\partial W(\lambda_B^2, b)}{\partial \lambda_A^2}$ bestimmt werden, unterscheiden sich die vollständigen Ableitungen $d\lambda_D^2 / d\lambda_B^{*2}$ und $db_* / d\lambda_B^{*2}$ im zweistufigen Schema (B.26) und im einstufigen Schema.

Für das Referenzmodell verschwindet der letzte Term in der algorithmisch konsistenten Tangente (B.18) nicht, und es muß aus $\mathbf{F}_*^{\text{p}} = \exp(\Delta \gamma \partial_{\Sigma} \phi(\boldsymbol{\Sigma})) \mathbf{F}_n^{\text{p}} = \mathbf{e} \mathbf{F}_n^{\text{p}}$ die Ableitung

$$\left(\frac{d\mathbf{F}_*^{\text{p}}}{d\mathbf{C}^{\text{e}*}} \right)_{ijkm} = \left(\frac{d\mathbf{e}_*}{d\mathbf{C}^{\text{e}*}} \right)_{iakm} (\mathbf{F}_n^{\text{p}})_{aj}. \quad (\text{B.22})$$

bestimmt werden, welche in $d\mathbf{F}_*^{\text{p}}/d\mathbf{C}_*$ (B.17)₂ eingesetzt wird. Die Eigenwerte von \mathbf{e} lauten

$$e_A = \exp\left(\Delta\gamma \frac{\partial\phi(\Sigma_B, b)}{\partial\Sigma_A}\right), \quad (\text{B.23})$$

so dass $\mathbf{e} = \sum_{A=1}^3 e_A \mathbf{N}_A \otimes \mathbf{N}_A$, wobei $\Sigma_A = \Sigma_A^*$ und $b = b^*$ im einstufigen Fall. Es wird nun wie schon in (B.20) die Tangente für \mathbf{e} gebildet,

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{e}_*}{d\mathbf{C}^{e_*}} &= \sum_{A=1}^3 \sum_{B=1}^3 \frac{de_A}{d\lambda_B^{*2}} \mathbf{N}_A \otimes \mathbf{N}_A \otimes \mathbf{N}_B \otimes \mathbf{N}_B + \\ &+ \sum_{A=1}^3 \sum_{\substack{B=1 \\ B \neq A}}^3 \frac{1}{2} \frac{e_A - e_B}{\lambda_A^{*2} - \lambda_B^{*2}} \mathbf{N}_A \otimes \mathbf{N}_B \otimes (\mathbf{N}_A \otimes \mathbf{N}_B + \mathbf{N}_B \otimes \mathbf{N}_A), \end{aligned} \quad (\text{B.24})$$

wobei sich die Ableitung

$$\frac{de_A}{d\lambda_B^{*2}} = \frac{\partial e_A}{\partial \lambda_B^{*2}} + \frac{\partial e_A}{\partial \alpha_*} \otimes \frac{d\alpha_*}{d\lambda_B^{*2}}. \quad (\text{B.25})$$

im ein- und zweistufigen Schema unterscheidet. Im einstufigen Fall kann $\partial e_A / \partial \lambda_B^{*2}$ direkt aus (B.23) bestimmt werden.

B.4.1 Zweistufiges Schema

Es werden die Abkürzungen $\boldsymbol{\lambda}^* = (\lambda_1^{*2}, \lambda_2^{*2}, \lambda_3^{*2})$, $\boldsymbol{\lambda} = (\lambda_1^2, \lambda_2^2, \lambda_3^2)$ und $\boldsymbol{\omega} = (\boldsymbol{\lambda}, b)$ verwendet. $d_{\lambda^*} \boldsymbol{\lambda}$ und $d_{\lambda^*} b$, welche für (B.21) und (B.29) gebraucht werden, sind die ersten beiden Zeilen der vollständigen Ableitung

$$d_{\lambda^*} \boldsymbol{\omega} = \left. \partial_{\lambda^*} \boldsymbol{\omega} \right|_{\alpha = \text{konst.}} + d_{\alpha} \boldsymbol{\omega} \Big|_{\lambda^* = \text{konst.}} \otimes d_{\lambda^*} \alpha \Big|_{\omega = \text{konst.}}. \quad (\text{B.26})$$

Die einzelnen Terme werden über die vollständige Ableitung (C.128), $d_x \mathbf{y} = -[d_y \mathbf{f}]^{-1} \circ \partial_x \mathbf{f}$, erhalten. Voraussetzung dafür ist, dass die Residuen verschwinden, also $\mathbf{R}_\omega = \mathbf{0}$ und $R_\phi = 0$. So ergibt sich die folgende erste Zeile mit den Entsprechungen $\boldsymbol{\lambda}^* \rightarrow \mathbf{x}$, $\mathbf{R}_\omega \rightarrow \mathbf{f}$ und $\boldsymbol{\omega} \rightarrow \mathbf{y}$ aus (C.128):

$$\begin{array}{l|l} \left. \partial_{\lambda^*} \boldsymbol{\omega} \right|_{\alpha = \text{konst.}} = -[d_\omega \mathbf{R}_\omega]^{-1} \circ d_{\lambda^*} \mathbf{R}_\omega, & \text{Analogie: } \boldsymbol{\lambda}^* \rightarrow \mathbf{x}, \quad \mathbf{R}_\omega \rightarrow \mathbf{f}, \quad \boldsymbol{\omega} \rightarrow \mathbf{y}, \\ \left. d_{\alpha} \boldsymbol{\omega} \right|_{\lambda^* = \text{konst.}} = -[d_\omega \mathbf{R}_\omega]^{-1} \circ d_{\alpha} \mathbf{R}_\omega & \alpha \rightarrow \mathbf{x}, \quad \mathbf{R}_\omega \rightarrow \mathbf{f}, \quad \boldsymbol{\omega} \rightarrow \mathbf{y}, \\ \left. d_{\lambda^*} \alpha \right|_{\omega = \text{konst.}} = -[d_{\alpha} R_\phi]^{-1} d_{\lambda^*} R_\phi & \boldsymbol{\lambda}^* \rightarrow \mathbf{x}, \quad R_\phi \rightarrow \mathbf{f}, \quad \alpha \rightarrow \mathbf{y}. \end{array} \quad (\text{B.27})$$

Die Verküpfung \circ bedeutet hier eine Matrix-Matrix-Multiplikation. In der ersten Zeile muß das Gleichungssystem für jede Spalte der Matrix $\partial_{\lambda^*} \boldsymbol{\omega}$ gelöst werden. In der zweiten Zeile ist $d_{\alpha} \boldsymbol{\omega}$ bereits als Lösung des Gleichungssystems (B.16) gegeben. Die Ableitung $d_{\lambda^*} R_\phi$ verwendet $\partial_{\lambda^*} \boldsymbol{\omega}$ (B.27)₁,

$$d_{\lambda^*} R_\phi = d_\omega R_\phi \circ \partial_{\lambda^*} \boldsymbol{\omega}. \quad (\text{B.28})$$

$d_{\lambda^*} \mathbf{R}_\omega$ war als einzige der verwendeten Ableitungen noch nicht bereits beim Lösen des lokalen Problems berechnet worden. $d_{\lambda^*} \alpha$ wird auch im letzten Term von (B.25) verwendet. Im ersten Term von (B.25),

$$\frac{\partial e_A}{\partial \lambda_B^{*2}} = \sum_{D=1}^3 \frac{\partial e_A}{\partial \lambda_D^2} \frac{d\lambda_D^2}{d\lambda_B^{*2}} + \frac{\partial e_A}{\partial b_*} \frac{db_*}{d\lambda_B^{*2}}, \quad (\text{B.29})$$

werden die partiellen Ableitungen $\partial e_A / \partial \lambda_D^2$ und $\partial e_A / \partial b_*$ aus (B.23) bestimmt. Die weiteren Ableitungen folgen in Analogie zu (B.21) aus (B.26).

B.4.2 Einstufiges Schema

Für das einstufige Schema verschwinden die Residuen (B.3)

$$\begin{aligned} R_{\lambda_A^2} &= \lambda_A^2 - \lambda_A^{*2} \exp \left[-2\Delta\gamma \frac{\partial \phi(\Sigma_B^*)}{\partial \Sigma_A^*} \right] = 0, \\ R_b &= b_* - b_n - \Delta\gamma_n \partial_\delta \varphi(\delta^*, b^*) = 0 \end{aligned} \quad (\text{B.30})$$

und für das reduzierte Modell (B.9),

$$R_{\lambda_A^2} = \lambda_A^2 - \frac{\lambda_A^{*2}}{1 + 2\Delta\gamma \partial_{\Sigma_A^*} \phi(\Sigma_B^*)} = 0. \quad (\text{B.31})$$

$d_\omega \mathbf{R}_\omega$ ist Identität, $\partial_{\lambda^*} \boldsymbol{\omega} = -d_{\lambda^*} \mathbf{R}_\omega$ und $d_\alpha \boldsymbol{\omega} = -d_\alpha \mathbf{R}_\omega$ lassen sich aus (B.30) und (B.31) bestimmen. Damit sind alle Terme von (B.26) bekannt.

C Grundlagen

Es werden die mechanischen Grundlagen aufgelistet, die in der Arbeit verwendet werden.

C.1 Tensorrechnung

C.1.1 Verknüpfungen

Die verwendeten Tensoroperationen werden zusammengestellt. Es sind \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} Tensoren erster Stufe, \mathbf{A} , \mathbf{B} , \mathbf{C} , \mathbf{D} Tensoren zweiter Stufe und \mathbb{A} , \mathbb{B} , \mathbb{C} Tensoren vierter Stufe. c ist ein Skalar. Für eine hier nicht aufgeführte Verknüpfung wird das Zeichen \circ verwendet. Für die indizierte Darstellung gilt die Einstein'sche Summationskonvention. $\mathbf{1}$ ist die Identität zweiter Stufe, also $\mathbf{A}\mathbf{1} = \mathbf{A}$, und δ_{ij} ist das Kronecker-Symbol.

	Symbolische Schreibweise	Indizierte Schreibweise
Transposition	\mathbf{A}^T	$A_{ij}^T = A_{ji}$
Einfache Verjüngung		
Multiplikation	$\mathbf{c} = \mathbf{A}\mathbf{b} = \mathbf{A}[\mathbf{b}]$ $\mathbf{C} = \mathbf{A}\mathbf{B}$ $\mathbb{A} = \mathbf{A}\mathbb{C}\mathbf{B}$	$c_i = A_{ij}b_j$ $C_{ij} = A_{ik}B_{kj}$ $\mathbb{A}_{ijkm} = A_{ir}C_{rjks}B_{sm}$
Skalarprodukt	$c = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$	$c = a_i b_i$
Doppelte Verjüngung		
Skalarprodukt	$c = \mathbf{A} : \mathbf{B}$	$c = A_{ij}B_{ij}$
Spur	$c = \text{tr}[\mathbf{A}] = \mathbf{A} : \mathbf{1}$ $c = \text{tr}[\mathbf{A}\mathbf{B}] = \mathbf{A}\mathbf{B} : \mathbf{1} = \mathbf{A}^T : \mathbf{B}$	$c = A_{ii} = A_{ij}\delta_{ij}$ $c = A_{ik}B_{kj}\delta_{ij} = A_{ik}B_{ki}$
	$\mathbf{C} = \mathbb{A} : \mathbf{B} = \mathbb{A}[\mathbf{B}]$	$C_{ij} = \mathbb{A}_{ijkm}B_{km}$
Skalarprodukt	$c = \mathbf{C} : \mathbb{A} : \mathbf{B}$	$c = C_{ij}\mathbb{A}_{ijkm}B_{km}$
Dyadisches Produkt		
	$\mathbf{A} = \mathbf{a} \otimes \mathbf{b}$ $\mathbb{A} = \mathbf{A} \otimes \mathbf{B}$	$A_{ij} = a_i b_j$ $\mathbb{A}_{ijkm} = A_{ij}B_{km}$

Tabelle C.1: Es wird die symbolische der indizierten Schreibweise gegenübergestellt.

Für die doppelte Verjüngung gelten folgende Identitäten:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{AB} : \mathbf{C} &= A_{ij}B_{jk}C_{ik} = A_{ij}B_{jk}C_{ki}^T = \mathbf{ABC}^T : \mathbf{1}, \\
 &= C_{ki}^T A_{ij}B_{jk} = \mathbf{C}^T \mathbf{AB} : \mathbf{1} \\
 &= B_{jk}A_{ji}^T C_{ik} = \mathbf{B} : \mathbf{A}^T \mathbf{C},
 \end{aligned} \tag{C.1}$$

$$\mathbf{ABC} : \mathbf{1} = A_{ij}B_{jk}C_{ki} = C_{ki}A_{ij}B_{jk} = \mathbf{CAB} : \mathbf{1} \tag{C.2}$$

und

$$\begin{aligned}
 \mathbf{AB} : \mathbf{CD} &= A_{ij}B_{jk}C_{im}D_{mk} = A_{ij}B_{jk}D_{km}^T C_{im} = \mathbf{ABD}^T : \mathbf{C}, \\
 \mathbf{AB} : \mathbf{CD} &= A_{ij}B_{jk}C_{im}D_{mk} = C_{mi}^T A_{ij}B_{jk}D_{mk} = \mathbf{C}^T \mathbf{AB} : \mathbf{D}.
 \end{aligned} \tag{C.3}$$

Ein Tensor zweiter Stufe \mathbf{A} lässt sich in seinen symmetrischen und schiefsymmetrischen Teil zerlegen,

$$\begin{aligned}
 \text{sym}[\mathbf{A}] &= \frac{1}{2}(\mathbf{A} + \mathbf{A}^T), \\
 \text{skew}[\mathbf{A}] &= \frac{1}{2}(\mathbf{A} - \mathbf{A}^T).
 \end{aligned} \tag{C.4}$$

Die symmetrische Identität vierter Stufe \mathbb{I} wirkt wie (C.4)₁, $\mathbb{I} : \mathbf{A} = \text{sym}[\mathbf{A}]$, und lautet

$$\mathbb{I}_{ijklm} = \frac{1}{2}(\delta_{ik}\delta_{jm} + \delta_{im}\delta_{jk}). \tag{C.5}$$

Die nicht-symmetrische Identität vierter Stufe lautet $\bar{\mathbb{I}}_{ijklm} = \delta_{ik}\delta_{jm}$.

Ein schiefsymmetrischer Tensor zweiter Stufe kann auf einen axialen Tensor erster Stufe abgebildet werden. Mit dem Kreuzprodukt gilt

$$\text{skew}[\mathbf{A}]\mathbf{b} = \text{axial}[\mathbf{A}] \times \mathbf{b}. \tag{C.6}$$

Ein Tensor vierter Stufe ist hauptsymmetrisch, wenn

$$\mathbb{A}_{ijkl} = \mathbb{A}_{klij}. \tag{C.7}$$

Er ist nebensymmetrisch, wenn

$$\mathbb{A}_{ijkl} = \mathbb{A}_{jikl} = \mathbb{A}_{ijlk} = \mathbb{A}_{jilk}. \tag{C.8}$$

Zwei Tensoren \mathbf{A} , \mathbf{B} zweiter Stufe kommutieren, wenn sie die gleichen Eigenvektoren haben. In diesem Fall gilt das Kommutativgesetz

$$\mathbf{AB} = \mathbf{BA}. \tag{C.9}$$

Das Produkt zweier symmetrischer Tensoren \mathbf{A} , \mathbf{B} ist nur dann symmetrisch, wenn \mathbf{A} und \mathbf{B} kommutieren.

C.1.2 Voigt-Schreibweise

Um die Komponenten eines Tensors zweiter Stufe in einen Vektor zu schreiben, muss eine Nummerierung der Indizes festgelegt werden. Diese ist beliebig wählbar. c_{ij} numeriert die Komponenten eines unsymmetrischen Tensors zweiter Stufe und s_{ij} die eines symmetrischen:

$$c_{ij} = \begin{pmatrix} 1 & 4 & 5 \\ 7 & 2 & 6 \\ 8 & 9 & 3 \end{pmatrix}, \quad s_{ij} = \begin{pmatrix} 1 & 4 & 5 \\ 4 & 2 & 6 \\ 5 & 6 & 3 \end{pmatrix}. \quad (\text{C.10})$$

Es gilt nun für den Vektor (\mathbf{A}): $A_{ij} = (\mathbf{A})_{c_{ij}}$ für $\mathbf{A} \neq \mathbf{A}^T$ und $A_{ij} = (\mathbf{A})_{s_{ij}}$ für $\mathbf{A} = \mathbf{A}^T$. Entsprechendes gilt im Zweidimensionalen.

Es wird nun die doppelte Verjüngung $\mathbb{A} : \mathbf{B} = \mathbf{C}$ (Tab. C.1) betrachtet. Es gelte $\mathbf{B} = \mathbf{B}^T$. Damit kann die Multiplikation $\mathbb{A}_{ijkm} B_{km} = C_{ij}$ vereinfacht werden in der Form $\sum_{k,m \leq k} \mathbb{A}_{ijkm} V_{(k)(m)} B_{km} = C_{ij}$ mit den Voigt-Faktoren $V_{km} = 1$ für $k = m$ und $V_{km} = 2$ für $k \neq m$. Es werden die symmetrischen Komponenten also nur einfach durchlaufen und dafür ihre Werte verdoppelt. In Matrix-Vektor-Schreibweise lautet die Multiplikation mit (C.10) $\sum_{k,m \leq k} (\mathbb{A})_{c_{ij}s_{km}} (\tilde{\mathbf{B}})_{s_{km}} = (\mathbf{C})_{c_{ij}}$ mit $\tilde{B}_{ij} = V_{ij} B_{ij}$. Genauso kann für $\mathbb{A} : \mathbf{B} = \mathbf{C}$ im Dreidimensionalen auch

$$\sum_{m=1}^6 (\mathbb{A})_{km} (\tilde{\mathbf{B}})_m = (\mathbf{C})_k, \quad k = 1, 2, \dots, 9 \quad (\text{C.11})$$

geschrieben werden. Wenn \mathbf{B} gegeben ist, und die Multiplikation (C.11) ausgeführt werden soll, sind also zuvor die symmetrischen Komponenten mit 2 zu skalieren,

$$\tilde{B}_{ij} = V_{(i)(j)} B_{ij}. \quad (\text{C.12})$$

Wenn $(\tilde{\mathbf{B}})_m$ der Lösungsvektor des Gleichungssystem ist, so wird \mathbf{B} erhalten, indem die symmetrischen Komponenten mit $\frac{1}{2}$ skaliert werden,

$$B_{ij} = V_{(i)(j)}^{inv} \tilde{B}_{ij}, \quad (\text{C.13})$$

wobei $V_{km}^{inv} = 1$ für $k = m$ und $V_{km}^{inv} = \frac{1}{2}$ für $k \neq m$.

C.1.3 Tensorinvarianten

Die Basisinvarianten eines Tensors zweiter Stufe \mathbf{A} lauten

$$I_1(\mathbf{A}) = \text{tr}[\mathbf{A}], \quad I_2(\mathbf{A}) = \text{tr}[\mathbf{A}^2], \quad I_3(\mathbf{A}) = \text{tr}[\mathbf{A}^3]. \quad (\text{C.14})$$

Die ersten Ableitungen der Basisinvarianten (C.14) eines Tensors zweiter Stufe \mathbf{A} sind

$$d_A I_1(\mathbf{A}) = \mathbf{1}, \quad d_A I_2(\mathbf{A}) = 2\mathbf{A}, \quad d_A I_3(\mathbf{A}) = 3\mathbf{A}^2. \quad (\text{C.15})$$

Die Hauptinvarianten eines Tensors zweiter Stufe \mathbf{A} lauten

$$\begin{aligned} J_1(\mathbf{A}) &= \text{tr}[\mathbf{A}] = I_1(\mathbf{A}), \\ J_2(\mathbf{A}) &= \frac{1}{2} \left((\text{tr}[\mathbf{A}])^2 - \text{tr}[\mathbf{A}^2] \right) = \frac{1}{2} [I_1^2(\mathbf{A}) - I_2(\mathbf{A})], \\ J_3(\mathbf{A}) &= \det[\mathbf{A}]. \end{aligned} \quad (\text{C.16})$$

Die Hauptinvarianten (C.16) werden durch die Eigenwerte von \mathbf{A} dargestellt,

$$J_1(\mathbf{A}) = \lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3, \quad J_2(\mathbf{A}) = \lambda_1 \lambda_2 + \lambda_2 \lambda_3 + \lambda_1 \lambda_3, \quad J_3(\mathbf{A}) = \lambda_1 \lambda_2 \lambda_3. \quad (\text{C.17})$$

C.1.4 Tensoren in Hauptachsendarstellung

Zur Herleitung der folgenden Gleichungen wird auf SIMÓ [60] verwiesen. Es wird der symmetrische Tensor zweiter Stufe \mathbf{C} auf Hauptachsenform

$$\mathbf{C} = \sum_{A=1}^{n_{dim}} \lambda_{(A)}^2 \mathbf{N}_A \otimes \mathbf{N}_A \quad (\text{C.18})$$

transformiert. Die Wurzel $\mathbf{C}^{\frac{1}{2}}$ wird erhalten, indem aus den Eigenwerten λ^2 die Wurzel λ gezogen wird. Eine isotrope Funktion $W(\mathbf{C})$ ist eine Funktion in den Eigenwerten von \mathbf{C} : $W(\mathbf{C}) = W(\lambda_A^2)$. Für die Ableitung ergibt sich

$$d_{\mathbf{C}}W(\mathbf{C}) = \sum_{A=1}^{n_{dim}} \frac{dW(\lambda_A^2)}{d\lambda_{(A)}^2} \mathbf{N}_A \otimes \mathbf{N}_A. \quad (\text{C.19})$$

Die Ableitung einer tensorwertigen Funktion $\mathbf{S}(\mathbf{C})$ lautet

$$\begin{aligned} d_{\mathbf{C}}\mathbf{S} &= \sum_{A=1}^3 \sum_{B=1}^3 \frac{dS_A}{d\lambda_B^2} \mathbf{N}_A \otimes \mathbf{N}_A \otimes \mathbf{N}_B \otimes \mathbf{N}_B + \\ &+ \sum_{A=1}^3 \sum_{\substack{B=1 \\ B \neq A}}^3 \frac{1}{2} \frac{S_A - S_B}{\lambda_A^2 - \lambda_B^2} \mathbf{N}_A \otimes \mathbf{N}_B \otimes (\mathbf{N}_A \otimes \mathbf{N}_B + \mathbf{N}_B \otimes \mathbf{N}_A), \end{aligned} \quad (\text{C.20})$$

wobei S_A die Eigenwerte von \mathbf{S} sind. Der Fall zweier gleicher Eigenwerte ist nach *De L'Hospital* abzufangen:

$$\frac{S_A - S_B}{\lambda_A^2 - \lambda_B^2} \approx \frac{dS_A}{d\lambda_A^2} - \frac{dS_B}{d\lambda_B^2} \quad \text{für } \lambda_A^2 \approx \lambda_B^2. \quad (\text{C.21})$$

Die Eigenwerte und Eigenvektoren lassen sich auf allgemeine Weise mit dem Jacobi-Verfahren bestimmen.

C.2 Deformation

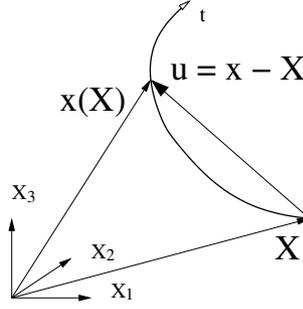
Diese Arbeit beschränkt sich auf kartesische dreidimensionale Koordinaten $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^3$, $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$. Das Gebiet $\Omega_t \subset \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^3$ verformt sich in der dimensionslosen Zeit t . Zum Zeitpunkt $t = 0$ befindet sich das Gebiet unverformt in der ursprünglichen Lage, der Referenzkonfiguration $\varphi_0(\mathbf{X}) := \mathbf{X}$. Zum Zeitpunkt t befindet es sich in der verformten Lage, der Momentankonfiguration $\varphi_t(\mathbf{X}) := \mathbf{x} : \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$, $\mathbf{X} \in \Omega$. Jeder Punkt \mathbf{X} auf dem unverformten Gebiet Ω wird auf den Punkt $\mathbf{x} = \varphi_t(\mathbf{X})$ auf dem verformten Gebiet Ω_t abgebildet. Die Differenz ist die Verschiebung $\mathbf{u}(\mathbf{X}) = \varphi_t(\mathbf{X}) - \mathbf{X}$, s. Abb. C.1.

C.2.1 Deformationsgradient

Die Ableitung der Verschiebung nach den Koordinaten der Referenzkonfiguration ist der Verschiebungsgradient

$$\text{GRAD}[\mathbf{u}] = \frac{d\mathbf{u}}{d\mathbf{X}}. \quad (\text{C.22})$$

Die Ableitung der Verschiebung nach den Koordinaten der Momentankonfiguration lautet


 Abbildung C.1: Der Punkt \mathbf{X} wird in der Zeit t in den Punkt $\mathbf{x}(\mathbf{X})$ verschoben.

$$\nabla \mathbf{u} = \frac{d\mathbf{u}}{d\mathbf{x}} = \frac{d\mathbf{u}}{d\mathbf{X}} \frac{d\mathbf{X}}{d\mathbf{x}} = \text{GRAD}[\mathbf{u}] \mathbf{F}^{-1}. \quad (\text{C.23})$$

Der Deformationsgradient \mathbf{F} differenziert die Momentan- nach der Referenzkonfiguration,

$$\mathbf{F} = \frac{d\varphi_t(\mathbf{X})}{d\mathbf{X}} = \frac{d(\mathbf{X} + \mathbf{u}(\mathbf{X}))}{d\mathbf{X}} = \mathbf{1} + \text{GRAD}[\mathbf{u}]. \quad (\text{C.24})$$

Er bildet somit den Vektor $d\mathbf{X}$ aus der Referenzkonfiguration in die Momentankonfiguration ab: $d\mathbf{x} = \mathbf{F}d\mathbf{X}$. Die Rate des Deformationsgradienten lautet

$$\dot{\mathbf{F}}[\Delta\mathbf{u}] = \left. \frac{d}{d\zeta} \right|_{\zeta=0} [\mathbf{1} + \text{GRAD}[\mathbf{u} + \zeta\Delta\mathbf{u}]] = \text{GRAD}[\Delta\mathbf{u}], \quad (\text{C.25})$$

wobei $\Delta\mathbf{u}$ ein Verschiebungsinkrement ist. Das Produkt

$$\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \mathbf{F} \quad (\text{C.26})$$

ist der rechte Cauchy-Green-Tensor. \mathbf{C} ist invariant unter Beobachterwechsel, s. Abschnitt C.3.1. In Abhängigkeit von \mathbf{C} lassen sich Materialgesetze auf natürliche Weise in der Referenzkonfiguration formulieren. Im undeforinierten Zustand gilt $\mathbf{C} = \mathbf{1}$. Aus dem symmetrischen Tensor \mathbf{C} lässt sich die Wurzel ziehen,

$$\mathbf{U} = \mathbf{C}^{\frac{1}{2}}, \quad \mathbf{C} = \mathbf{U}^2. \quad (\text{C.27})$$

Damit kann \mathbf{F} polar zerlegt werden,

$$\mathbf{F} = \mathbf{R}\mathbf{U}. \quad (\text{C.28})$$

\mathbf{R} beschreibt eine Rotation, $\mathbf{R}^T = \mathbf{R}^{-1}$, $\det(\mathbf{R}) = 1$.

Der Deformationsgradient lässt sich multiplikativ in seinen elastischen Anteil \mathbf{F}^e und seinen plastischen Anteil \mathbf{F}^p zerlegen,

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^e \mathbf{F}^p. \quad (\text{C.29})$$

Auf die beiden Anteile wird die polare Zerlegung (C.28) angewendet,

$$\begin{aligned} \mathbf{F}^e &= \mathbf{R}^e \mathbf{U}^e, \\ \mathbf{F}^p &= \mathbf{R}^p \mathbf{U}^p. \end{aligned} \quad (\text{C.30})$$

Einsetzen in (C.26) liefert für \mathbf{C} die Darstellung

$$\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \mathbf{F} = \mathbf{F}^{\mathbb{P}T} \mathbf{F}^{\mathbb{e}T} \mathbf{F}^{\mathbb{e}} \mathbf{F}^{\mathbb{P}} = \mathbf{F}^{\mathbb{P}T} \mathbf{C}^{\mathbb{e}} \mathbf{F}^{\mathbb{P}}. \quad (\text{C.31})$$

$\mathbf{C}^{\mathbb{e}}$ ist also eine Funktion von \mathbf{C} und $\mathbf{F}^{\mathbb{P}}$,

$$\mathbf{C}^{\mathbb{e}}(\mathbf{C}, \mathbf{F}^{\mathbb{P}}) = \mathbf{F}^{\mathbb{P}-T} \mathbf{C} \mathbf{F}^{\mathbb{P}-1}. \quad (\text{C.32})$$

Es werden die Determinanten eingeführt,

$$J = \det(\mathbf{F}) = J^{\mathbb{e}} J^{\mathbb{P}}, \quad J^{\mathbb{e}} = \det(\mathbf{F}^{\mathbb{e}}), \quad J^{\mathbb{P}} = \det(\mathbf{F}^{\mathbb{P}}). \quad (\text{C.33})$$

Statt \mathbf{C} und $\mathbf{C}^{\mathbb{e}}$ werden auch die Green-Tensoren

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2}(\mathbf{C} - \mathbf{1}), \quad \mathbf{E}^{\mathbb{e}} = \frac{1}{2}(\mathbf{C}^{\mathbb{e}} - \mathbf{1}) \quad (\text{C.34})$$

verwendet. \mathbf{E} wird mit (C.24) ausgeschrieben,

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2}(\text{GRAD}[\mathbf{u}] + \text{GRAD}^T[\mathbf{u}]) + \frac{1}{2}\text{GRAD}^T[\mathbf{u}]\text{GRAD}[\mathbf{u}]. \quad (\text{C.35})$$

Beim Übergang von großen zu kleinen Verformungen fallen die Momentan- und die Referenzkonfiguration zusammen, und es gilt $\nabla[\mathbf{u}] \approx \text{GRAD}[\mathbf{u}]$. Der quadratische Term kann vernachlässigt werden, und es folgt $\mathbf{E} \approx \boldsymbol{\epsilon}$ mit

$$\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u}) = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T). \quad (\text{C.36})$$

C.2.2 Deformationsraten

Die erste Ableitung von $\mathbf{C}(\mathbf{u}) = \mathbf{F}^T(\mathbf{u})\mathbf{F}(\mathbf{u})$ (C.26) ergibt sich mit der Rate des Deformationsgradienten (C.25) zu

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{C}}(\mathbf{u})[\boldsymbol{\eta}] &= \dot{\mathbf{F}}^T[\boldsymbol{\eta}]\mathbf{F}(\mathbf{u}) + \mathbf{F}^T(\mathbf{u})\dot{\mathbf{F}}[\boldsymbol{\eta}] \\ &= \text{GRAD}^T[\boldsymbol{\eta}]\mathbf{F}(\mathbf{u}) + \mathbf{F}^T(\mathbf{u})\text{GRAD}[\boldsymbol{\eta}] = \mathbb{B}[\boldsymbol{\eta}]. \end{aligned} \quad (\text{C.37})$$

Für die zweite Ableitung folgt

$$\begin{aligned} \ddot{\mathbf{C}}[\boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\xi}] &= \text{GRAD}^T[\boldsymbol{\eta}]\dot{\mathbf{F}}[\boldsymbol{\xi}] + \dot{\mathbf{F}}^T[\boldsymbol{\xi}]\text{GRAD}[\boldsymbol{\eta}] \\ &= \text{GRAD}^T[\boldsymbol{\eta}]\text{GRAD}[\boldsymbol{\xi}] + \text{GRAD}^T[\boldsymbol{\xi}]\text{GRAD}[\boldsymbol{\eta}] = \mathbb{G}[\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}]. \end{aligned} \quad (\text{C.38})$$

Die partielle Ableitung von $\mathbf{C}^{\mathbb{e}}(\mathbf{C}, \mathbf{F}^{\mathbb{P}})$ (C.32), in Indexschreibweise $C_{rs}^{\mathbb{e}} = F_{mr}^{\mathbb{P}-1} C_{mn} F_{ns}^{\mathbb{P}-1}$, nach \mathbf{C} lautet

$$\begin{aligned} (\partial_{\mathbf{C}} \mathbf{C}^{\mathbb{e}})_{rspq} &= F_{mr}^{\mathbb{P}-1} \frac{1}{2} (\delta_{mp} \delta_{nq} + \delta_{mq} \delta_{np}) F_{ns}^{\mathbb{P}-1} \\ &= \frac{1}{2} \left(F_{pr}^{\mathbb{P}-1} F_{qs}^{\mathbb{P}-1} + F_{qr}^{\mathbb{P}-1} F_{ps}^{\mathbb{P}-1} \right). \end{aligned} \quad (\text{C.39})$$

Der Geschwindigkeitsgradient $\mathbf{l} = \dot{\mathbf{F}}\mathbf{F}^{-1}$ entsteht durch die Ableitung von $d\mathbf{x} = \mathbf{F}d\mathbf{X}$ (C.24). Es folgt $d\dot{\mathbf{x}} = \dot{\mathbf{F}}d\mathbf{X} = \dot{\mathbf{F}}\mathbf{F}^{-1}d\mathbf{x}$. Der symmetrische Geschwindigkeitsgradient $\mathbf{d} = \frac{1}{2}(\mathbf{l} + \mathbf{l}^T)$ steht in Zusammenhang mit $\dot{\mathbf{C}}$: Aus $\dot{\mathbf{C}} = \dot{\mathbf{F}}^T \mathbf{F} + \mathbf{F}^T \dot{\mathbf{F}}$ folgt

$$\mathbf{F}^{-T} \dot{\mathbf{C}} \mathbf{F}^{-1} = \mathbf{F}^{-T} \dot{\mathbf{F}}^T + \dot{\mathbf{F}} \mathbf{F}^{-1} = \mathbf{l}^T + \mathbf{l} = 2\mathbf{d}. \quad (\text{C.40})$$

Der plastischer Geschwindigkeitsgradient

$$\mathbf{L}^P := \dot{\mathbf{F}}^P \mathbf{F}^{P-1} \quad (\text{C.41})$$

wird in seinen symmetrischen Anteil \mathbf{D}^P und den plastischen Spin \mathbf{W}^P zerlegt,

$$\mathbf{D}^P := \text{sym}[\mathbf{C}^e \mathbf{L}^P], \quad \mathbf{W}^P := \text{skew}[\mathbf{C}^e \mathbf{L}^P]. \quad (\text{C.42})$$

Aus dieser Zerlegung folgt

$$\dot{\mathbf{C}} = \mathbf{F}^{P^T} [\dot{\mathbf{C}}^e + 2\mathbf{D}^P] \mathbf{F}^P. \quad (\text{C.43})$$

Dies ergibt sich aus der Ableitung von $\mathbf{C} = \mathbf{F}^{P^T} \mathbf{C}^e \mathbf{F}^P$ (C.31),

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{C}} &= \mathbf{F}^{P^T} \dot{\mathbf{C}}^e \mathbf{F}^P + \dot{\mathbf{F}}^{P^T} \mathbf{C}^e \mathbf{F}^P + \mathbf{F}^{P^T} \mathbf{C}^e \dot{\mathbf{F}}^P \\ &= \mathbf{F}^{P^T} \left[\dot{\mathbf{C}}^e + \mathbf{F}^{P-1} \dot{\mathbf{F}}^{P^T} \mathbf{C}^e + \mathbf{C}^e \dot{\mathbf{F}}^P \mathbf{F}^{P-1} \right] \mathbf{F}^P \\ &= \mathbf{F}^{P^T} \left[\dot{\mathbf{C}}^e + \mathbf{L}^{P^T} \mathbf{C}^e + \mathbf{C}^e \mathbf{L}^P \right] \mathbf{F}^P \\ &= \mathbf{F}^{P^T} \left[\dot{\mathbf{C}}^e + 2\text{sym}[\mathbf{C}^e \mathbf{L}^P] \right] \mathbf{F}^P \\ &= \mathbf{F}^{P^T} \left[\dot{\mathbf{C}}^e + 2\mathbf{D}^P \right] \mathbf{F}^P. \end{aligned} \quad (\text{C.44})$$

C.3 Invarianz

C.3.1 Beobachterinvarianz

Die Konfiguration $\varphi(t, \mathbf{X}) = \mathbf{X} + \mathbf{u}(t, \mathbf{X})$ wird um einen beliebigen Punkt φ_0 mit der Drehmatrix $\mathbf{Q}(t)$ gedreht. $\mathbf{Q}(t)$ hängt nicht vom Ort ab und ist für alle Punkte gleich. Es wird also eine Starrkörperrotation beschrieben:

$$\varphi^*(t, \mathbf{X}) = \varphi_0 + \mathbf{Q}(t) [\varphi(t, \mathbf{X}) - \varphi_0]. \quad (\text{C.45})$$

Ein verformter Körper darf sich nicht weiter verformen, nur weil er eine Starrkörperrotation erfährt, wobei Trägheitskräfte ausgeschlossen werden. Anders gesagt darf ein Verformungsprozess nicht dadurch verändert werden, dass ein Beobachter desselben sich bewegt. Diese trivalenten Forderungen führen jedoch zu weitgehenden Einschränkungen in bezug auf die mechanische Formulierung. Es wird der Deformationsgradient $\mathbf{F} = \text{GRAD}[\varphi]$ (C.24) zu (C.45) gebildet:

$$\mathbf{F}^*(t, \mathbf{X}) = \mathbf{Q}(t) \mathbf{F}(t, \mathbf{X}). \quad (\text{C.46})$$

\mathbf{F} ist nicht invariant unter Beobachterwechsel wegen $\mathbf{F}^* \neq \mathbf{F}$, jedoch \mathbf{C} (C.26):

$$\mathbf{C}^* = \mathbf{F}^{*T} \mathbf{F}^* = \mathbf{F}^T \mathbf{Q}^T \mathbf{Q} \mathbf{F} = \mathbf{F}^T \mathbf{F} = \mathbf{C}. \quad (\text{C.47})$$

Ebenso ist $\mathbf{E}^* = \frac{1}{2}(\mathbf{C}^* - \mathbf{1}) = \frac{1}{2}(\mathbf{C} - \mathbf{1}) = \mathbf{E}$ (C.34) invariant unter Beobachterwechsel. Für $\mathbf{b} = \mathbf{F} \mathbf{F}^T$ folgt $\mathbf{b}^* = \mathbf{Q} \mathbf{b} \mathbf{Q}^T$. Indem eine skalarwertige Funktion von \mathbf{C} oder \mathbf{E} abhängt, wird die Beobachterinvarianz automatisch erfüllt.

C.3.2 Invarianz unter Basistransformation

Eine skalarwertige Funktion $\psi(\mathbf{C})$ muss unabhängig von der Basis sein, in welcher der Tensor zweiter Stufe \mathbf{C} dargestellt wird (\mathbf{C} hat nichts mit (C.26) zu tun). ψ ist invariant unter Basistransformationen, wenn $\psi(\mathbf{C}) = \psi(\mathbf{Q}^T \mathbf{C} \mathbf{Q})$ erfüllt ist, wobei \mathbf{Q} orthonormal ist. Für eine isotrope Funktion lässt sich die Forderung nach Invarianz nur erfüllen, indem ψ eine Funktion allein der Basisinvarianten (C.14) ist:

$$\psi(\mathbf{C}) = \psi(I_1(\mathbf{C}), I_2(\mathbf{C}), I_3(\mathbf{C})). \quad (\text{C.48})$$

Eine anisotrope Funktion

$$\bar{\psi}(\mathbf{C}) = \psi(\mathbf{C}, \dots) \quad (\text{C.49})$$

enthält weitere Argumente, welche die Symmetriegruppe betreffen (s. Tab. C.2). In \mathbf{C} quadratische Funktionen für $\mathbf{C} = \mathbf{C}^T$ sind bei APEL [3] zu finden. Für ein asymmetrisches Argument sind dort einige Änderungen erforderlich.

Transversal-isotrop:		
$\bar{\psi}(\mathbf{C}) = \psi(\mathbf{C}, \mathbf{M}),$	$\mathbf{M} = \mathbf{n} \otimes \mathbf{n},$	$\mathbf{n} : \text{Richtungsvektor.}$
Kubisch:		
$\bar{\psi}(\mathbf{C}) = \psi(\mathbf{C}, \mathbb{O}_h : \mathbf{C})$	$\mathbb{O}_h = \sum_{i=1}^3 \mathbf{a}_i \otimes \mathbf{a}_i \otimes \mathbf{a}_i \otimes \mathbf{a}_i,$	$\mathbf{a}_i : \text{orthogonale Vektoren.}$
Orthotrop:		
$\bar{\psi}(\mathbf{C}) = \psi(\mathbf{C}, \mathbf{M}_1, \mathbf{M}_2)$	$\mathbf{M}_\alpha = \mathbf{m}_\alpha \otimes \mathbf{m}_\alpha$	$\mathbf{m}_\alpha : \text{orthogonale Vektoren, } \alpha = 1, 2.$

Tabelle C.2: Beispiele für eine anisotrope Funktion. Das dritte Beispiel steht bei SCHRÖDER ET AL. [59]. Die Schreibweise (C.49) reflektiert den Umstand, dass die Vektoren \mathbf{n}, \mathbf{a}_i und \mathbf{m}_α gewöhnlich gegebene Daten sind.

C.4 Spannung und Energie

Der Cauchy-Spannungstensor $\boldsymbol{\sigma}$ lebt in der Momentankonfiguration Ω_t , s. Abschnitt C.2. Dort bildet er die Normale \mathbf{n} einer infinitesimalen Schnittfläche auf die Kraft \mathbf{t} in der Schnittfläche ab,

$$\mathbf{t} = \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}. \quad (\text{C.50})$$

Die Kirchhoff-Spannung $\boldsymbol{\tau} = J \boldsymbol{\sigma}$ ist die Transformation der Cauchy-Spannung in die Referenzkonfiguration Ω ,

$$\int_{\Omega_t} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) dV_t = \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}(\mathbf{X})) J dV = \int_{\Omega} \boldsymbol{\tau}(\mathbf{X}) dV, \quad (\text{C.51})$$

wobei die Transformation des Volumendifferentials $dV_t = J dV$ aus der Referenz- in die Momentankonfiguration verwendet wird, welche sich aus dem Spatprodukt $[\cdot, \cdot, \cdot]$ ergibt:

$$dV_t = [d\mathbf{x}_1, d\mathbf{x}_2, d\mathbf{x}_3] = [\mathbf{F}d\mathbf{X}_1, \mathbf{F}d\mathbf{X}_2, \mathbf{F}d\mathbf{X}_3] = J[d\mathbf{X}_1, d\mathbf{X}_2, d\mathbf{X}_3] = JdV. \quad (\text{C.52})$$

Es wird aus der Spannung $\boldsymbol{\tau}$ und der Dehnungsrate \mathbf{d} (C.40) die Rate einer Energie $\boldsymbol{\tau} : \mathbf{d}$ gebildet. Eine Rate ist eine Änderung in der dimensionslosen Zeit. Bei dieser Energie handelt es sich um

die freie Energie Ψ . Mit (C.40) wird die Rate der freien Energie $\dot{\Psi}$ in die Referenzkonfiguration transformiert,

$$\dot{\Psi}(\mathbf{C}) = \boldsymbol{\tau} : \mathbf{d} = \boldsymbol{\tau} : \frac{1}{2} \mathbf{F}^{-T} \dot{\mathbf{C}} \mathbf{F}^{-1} = \frac{1}{2} \mathbf{F}^{-1} \boldsymbol{\tau} \mathbf{F}^{-T} : \dot{\mathbf{C}} = \frac{1}{2} \mathbf{S} : \dot{\mathbf{C}}. \quad (\text{C.53})$$

$\mathbf{S} = \mathbf{F}^{-1} \boldsymbol{\tau} \mathbf{F}^{-T}$ ist der zweite Piola-Kirchhoff-Tensor. Die Rate der Energie lässt sich auch mit dem ersten Piola-Kirchhoff-Tensor $\mathbf{P} = \boldsymbol{\tau} \mathbf{F}^{-T}$ darstellen:

$$\dot{\Psi}(\mathbf{C}) = \boldsymbol{\tau} : \mathbf{d} = \boldsymbol{\tau} : \mathbf{l} = \boldsymbol{\tau} : \dot{\mathbf{F}} \mathbf{F}^{-1} = \boldsymbol{\tau} \mathbf{F}^{-T} : \dot{\mathbf{F}} = \mathbf{P} : \dot{\mathbf{F}}. \quad (\text{C.54})$$

Wenn die Rate der freien Energie mit einem vollständigen Differential dargestellt wird, $\dot{\Psi}(\mathbf{C}) = d_{\mathbf{C}} \Psi(\mathbf{C}) : \dot{\mathbf{C}}$, so folgt aus dem Vergleich mit (C.53) für die Spannung

$$\mathbf{S} = 2d_{\mathbf{C}} \Psi(\mathbf{C}). \quad (\text{C.55})$$

Die freie Energie Ψ besteht aus der elastischen Energie $\bar{W}(\mathbf{C}^e(\mathbf{C}))$ und möglicherweise weiteren Termen, die von \mathbf{C} abhängen. Es wird nun die Einschränkung eingeführt, dass \mathbf{F}^p nicht von \mathbf{C} abhängt, also

$$\mathbf{F}^p \neq \mathbf{F}^p(\mathbf{C}). \quad (\text{C.56})$$

Diese Einschränkung ist in der Staffellung in ein globales Problem und in lokale Probleme begründet: Wenn (in den lokalen Problemen) \mathbf{F}^p eine Variable ist, so ist \mathbf{C} konstant. Wenn (im globalen Problem) \mathbf{C} variabel ist, so ist \mathbf{F}^p konstant. Die Einschränkung gilt nicht in der algorithmisch konsistenten Tangenten, welche die Staffellung überwindet. Weil die Einschränkung (C.56) für alle inneren Variablen gilt, kann Ψ nur über \mathbf{C}^e als einziger Variablen von \mathbf{C} abhängen. In diesem Zusammenhang ist also $\Psi = \Psi(\mathbf{C}, \mathbf{C}^e(\mathbf{C}))$ gemeint. Ausführen der vollständigen Ableitung (C.55) mit $\partial_{\mathbf{C}} \mathbf{C}^e$ (C.39) liefert

$$\mathbf{S} = 2d_{\mathbf{C}} \Psi = 2\partial_{\mathbf{C}} \Psi + 2\partial_{\mathbf{C}^e} \Psi : \partial_{\mathbf{C}} \mathbf{C}^e = 2\partial_{\mathbf{C}} \Psi + \mathbf{F}^{p-1} 2\partial_{\mathbf{C}^e} \Psi \mathbf{F}^{p-T}. \quad (\text{C.57})$$

Damit wird der elastische zweite Piola-Kirchhoff-Tensor

$$\bar{\mathbf{S}} = 2\partial_{\mathbf{C}^e} \Psi \quad (\text{C.58})$$

eingeführt. Im Spezialfall $\partial_{\mathbf{C}^e} \bar{W} = \partial_{\mathbf{C}^e} \Psi$ gilt

$$\partial_{\mathbf{C}^e} \bar{W}(\mathbf{C}^e) : \dot{\mathbf{C}}^e = \frac{1}{2} \bar{\mathbf{S}} : \dot{\mathbf{C}}^e = \frac{1}{2} \mathbf{F}^{p-1} \bar{\mathbf{S}} \mathbf{F}^{p-T} : \dot{\mathbf{C}}. \quad (\text{C.59})$$

Durch Vergleich mit (C.55) ergibt sich der zweite Piola-Kirchhoff-Tensor

$$\mathbf{S} = \mathbf{F}^{p-1} \bar{\mathbf{S}} \mathbf{F}^{p-T}. \quad (\text{C.60})$$

Die Mandel-Spannung lautet

$$\boldsymbol{\Sigma} = \mathbf{C}^e \bar{\mathbf{S}}. \quad (\text{C.61})$$

Es gilt unter Voraussetzung der Symmetrie von $\bar{\mathbf{S}}$ die Identität

$$\mathbf{S} : \dot{\mathbf{C}} = 2\partial_{\mathbf{C}} \Psi : \dot{\mathbf{C}} + \bar{\mathbf{S}} : \dot{\mathbf{C}}^e + 2\boldsymbol{\Sigma} : \mathbf{L}^p. \quad (\text{C.62})$$

Dies wird gezeigt: Aus (C.57) folgt $\mathbf{S} : \dot{\mathbf{C}} = 2\partial_{\mathbf{C}} \Psi : \dot{\mathbf{C}} + \mathbf{F}^{p-1} \bar{\mathbf{S}} \mathbf{F}^{p-T} : \dot{\mathbf{C}} = 2\partial_{\mathbf{C}} \Psi : \dot{\mathbf{C}} + \bar{\mathbf{S}} :$

$\mathbf{F}^{\text{p}^{-T}} \dot{\mathbf{C}} \mathbf{F}^{\text{p}^{-1}}$. Nun wird (C.44) eingesetzt, woraus

$$\mathbf{S} : \dot{\mathbf{C}} = 2\partial_{\mathbf{C}}\Psi : \dot{\mathbf{C}} + \bar{\mathbf{S}} : \left[\dot{\mathbf{C}}^{\text{e}} + 2\mathbf{D}^{\text{p}} \right] = 2\partial_{\mathbf{C}}\Psi : \dot{\mathbf{C}} + \bar{\mathbf{S}} : \dot{\mathbf{C}}^{\text{e}} + 2\bar{\mathbf{S}} : \mathbf{D}^{\text{p}} \quad (\text{C.63})$$

folgt. Es wird der letzte Term weiter umgeformt, wobei (C.42)₁ verwendet und die Symmetrie von $\bar{\mathbf{S}}$ ausgenutzt wird: $\bar{\mathbf{S}} : \mathbf{D}^{\text{p}} = \bar{\mathbf{S}} : \text{sym}[\mathbf{C}^{\text{e}}\mathbf{L}^{\text{p}}] = \bar{\mathbf{S}} : \mathbf{C}^{\text{e}}\mathbf{L}^{\text{p}} = \mathbf{C}^{\text{e}}\bar{\mathbf{S}} : \mathbf{L}^{\text{p}} = \boldsymbol{\Sigma} : \mathbf{L}^{\text{p}}$.

C.4.1 Quadratische Energie

Es wird eine Funktion der Basisinvarianten (C.14) von $\mathbf{E}^{\text{e}} = \frac{1}{2}(\mathbf{C}^{\text{e}} - \mathbf{1})$ (C.34) gesucht, welche quadratisch in \mathbf{E}^{e} ist. Die Funktion lautet

$$\bar{W}(\mathbf{C}^{\text{e}}) = \alpha_1 I_1^2(\mathbf{E}^{\text{e}}) + \alpha_2 I_2(\mathbf{E}^{\text{e}}). \quad (\text{C.64})$$

Es erfolgt die Definition $\alpha_1 := \frac{1}{2}\lambda$ und $\alpha_2 := \mu$. λ und μ sind die Lamé-Konstanten. Mit einem Tensor vierter Stufe \mathbb{C}^{e} lautet (C.64):

$$\begin{aligned} \bar{W}(\mathbf{C}^{\text{e}}) &= \frac{1}{2} \mathbf{E}^{\text{e}} : \mathbb{C}^{\text{e}} : \mathbf{E}^{\text{e}}, \\ \mathbb{C}^{\text{e}} &= 2\mu \mathbf{I} + \lambda \mathbf{1} \otimes \mathbf{1}. \end{aligned} \quad (\text{C.65})$$

Für die Spannung folgt

$$\bar{\mathbf{S}} = 2\partial_{\mathbf{C}^{\text{e}}}\bar{W}(\mathbf{C}^{\text{e}}) = \mathbb{C}^{\text{e}} : \mathbf{E}^{\text{e}} = 2\mu \mathbf{E}^{\text{e}} + \lambda \text{tr}[\mathbf{E}^{\text{e}}] \mathbf{1}. \quad (\text{C.66})$$

Es wird \mathbf{E}^{e} mit (C.68) zerlegt. Daraus ergibt sich die Aufspaltung $\bar{W}(\mathbf{C}^{\text{e}}) = \check{U}(\text{tr}[\mathbf{E}^{\text{e}}]) + \widetilde{W}^{\text{quad}}(\mathbf{C}^{\text{e}})$ mit

$$\begin{aligned} \check{U}(\text{tr}[\mathbf{E}^{\text{e}}]) &= \frac{1}{2n_{\text{dim}}} \kappa (\text{tr}[\mathbf{E}^{\text{e}}])^2, \\ \widetilde{W}^{\text{quad}}(\mathbf{C}^{\text{e}}) &= \mu \text{dev}[\mathbf{E}^{\text{e}}] : \text{dev}[\mathbf{E}^{\text{e}}] = \mu I_2(\text{dev}[\mathbf{E}^{\text{e}}]), \end{aligned} \quad (\text{C.67})$$

wobei $\kappa = 2\mu + n_{\text{dim}}\lambda$ das Kompressionsmodul ist. Die Bezeichnungen sind in Anlehnung an (1.14) gewählt. Die volumetrisch-deviatorische Zerlegung überträgt sich auf die Spannung: $\text{dev}[\bar{\mathbf{S}}] = d_{\mathbf{E}^{\text{e}}}\widetilde{W}^{\text{quad}} = 2\mu \text{dev}[\mathbf{E}^{\text{e}}]$ und $\text{vol}[\bar{\mathbf{S}}] = d_{\mathbf{E}^{\text{e}}}\check{U} = \frac{1}{n_{\text{dim}}}\kappa \text{tr}[\mathbf{E}^{\text{e}}] \mathbf{1}$.

C.4.2 Volumetrisch-deviatorische Zerlegung

Die volumetrisch-deviatorische Zerlegung in der Momentankonfiguration und für kleine Verformungen lautet

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma} &= \text{vol}[\boldsymbol{\sigma}] + \text{dev}[\boldsymbol{\sigma}], \\ \text{vol}[\boldsymbol{\sigma}] &= \frac{1}{n_{\text{dim}}} \text{tr}[\boldsymbol{\sigma}] \mathbf{1} = \mathbb{P}_{\text{vol}} : \boldsymbol{\sigma}, \\ \text{dev}[\boldsymbol{\sigma}] &= \boldsymbol{\sigma} - \frac{1}{n_{\text{dim}}} \text{tr}[\boldsymbol{\sigma}] \mathbf{1} = \mathbb{P}_{\text{dev}} : \boldsymbol{\sigma}, \end{aligned} \quad (\text{C.68})$$

mit den Eigenschaften $\text{dev}[\text{vol}[\boldsymbol{\sigma}]] = 0$, $\text{vol}[\text{dev}[\boldsymbol{\sigma}]] = 0$, $\text{dev}[\text{dev}[\boldsymbol{\sigma}]] = \text{dev}[\boldsymbol{\sigma}]$ und $\text{vol}[\text{vol}[\boldsymbol{\sigma}]] = \text{vol}[\boldsymbol{\sigma}]$ und den Projektionen

$$\mathbb{P}_{\text{vol}} = \frac{1}{n_{\text{dim}}} \mathbf{1} \otimes \mathbf{1}, \quad \mathbb{P}_{\text{dev}} = \mathbf{I} - \frac{1}{n_{\text{dim}}} \mathbf{1} \otimes \mathbf{1}. \quad (\text{C.69})$$

Die volumetrisch-deviatorische Zerlegung in der Referenzkonfiguration,

$$\begin{aligned} \mathbf{S} &= \text{VOL}[\mathbf{S}] + \text{DEV}[\mathbf{S}], \\ \text{VOL}_{C^{-1}}[\mathbf{S}] &= \frac{1}{n_{\text{dim}}}(\mathbf{S} : \mathbf{C})\mathbf{C}^{-1} = \frac{1}{n_{\text{dim}}}\mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{C} : \mathbf{S}, \\ \text{DEV}_{C^{-1}}[\mathbf{S}] &= \mathbf{S} - \frac{1}{n_{\text{dim}}}(\mathbf{S} : \mathbf{C})\mathbf{C}^{-1} = \left(\mathbf{I} - \frac{1}{n_{\text{dim}}}\mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{C} \right) : \mathbf{S}, \end{aligned} \quad (\text{C.70})$$

mit den Eigenschaften $\text{DEV}[\text{VOL}[\mathbf{S}]] = 0$, $\text{VOL}[\text{DEV}[\mathbf{S}]] = 0$ und $\text{DEV}[\mathbf{S}] : \text{VOL}[\mathbf{S}] = 0$, entsteht im Zusammenhang von unimodularen Tensoren, s. (C.112). Die Operatoren VOL und DEV sind invariant bezüglich der Skalierung des Index,

$$\text{VOL}_{C^{-1}}[\mathbf{S}] = \text{VOL}_{\alpha C^{-1}}[\mathbf{S}], \quad \text{DEV}_{C^{-1}}[\mathbf{S}] = \text{DEV}_{\alpha C^{-1}}[\mathbf{S}] \quad (\text{C.71})$$

mit $\alpha \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$. Es gilt jedoch $\text{DEV}_{C^{-1}}[\mathbf{S}] \neq \text{DEV}_{\bar{C}^{-1}}[\mathbf{S}]$. Zwischen (C.68) und (C.70) besteht folgender Zusammenhang:

$$\begin{aligned} \text{CVOL}[\mathbf{S}] &= \frac{1}{n_{\text{dim}}}(\mathbf{S} : \mathbf{C})\mathbf{1} = \text{vol}[\mathbf{CS}], \\ \text{CDEV}[\mathbf{S}] &= \mathbf{CS} - \frac{1}{n_{\text{dim}}}(\mathbf{S} : \mathbf{C})\mathbf{1} = \text{dev}[\mathbf{CS}]. \end{aligned} \quad (\text{C.72})$$

Es gilt für den Zusammenhang von $\text{DEV}_{C^{-1}}[\mathbf{S}]$ und $\text{DEV}_{C^e}[\bar{\mathbf{S}}]$:

$$\text{DEV}_{C^{-1}}[\mathbf{S}] = \mathbf{F}^{\text{p}-1} \text{DEV}_{C^e}[\bar{\mathbf{S}}] \mathbf{F}^{\text{p}-T}. \quad (\text{C.73})$$

Mit $\mathbf{C} = \mathbf{F}^{\text{p}T} \mathbf{C}^e \mathbf{F}^{\text{p}}$ (C.31) und (C.1)_{3,4} folgt dies mit $\mathbf{S} = \mathbf{F}^{\text{p}-1} \bar{\mathbf{S}} \mathbf{F}^{\text{p}-T}$ (C.60) aus

$$\begin{aligned} \text{DEV}_{C^{-1}}[\mathbf{S}] &= \mathbf{S} - \frac{1}{n_{\text{dim}}}(\mathbf{S} : \mathbf{C})\mathbf{C}^{-1} \\ &= \mathbf{F}^{\text{p}-1} \bar{\mathbf{S}} \mathbf{F}^{\text{p}-T} - \frac{1}{n_{\text{dim}}} \left(\mathbf{F}^{\text{p}-1} \bar{\mathbf{S}} \mathbf{F}^{\text{p}-T} : \mathbf{F}^{\text{p}T} \mathbf{C}^e \mathbf{F}^{\text{p}} \right) \mathbf{F}^{\text{p}-1} \mathbf{C}^{e-1} \mathbf{F}^{\text{p}-T} \\ &= \mathbf{F}^{\text{p}-1} \left[\bar{\mathbf{S}} - \frac{1}{n_{\text{dim}}}(\bar{\mathbf{S}} : \mathbf{C}^e) \mathbf{C}^{e-1} \right] \mathbf{F}^{\text{p}-T} = \mathbf{F}^{\text{p}-1} \text{DEV}_{C^e}[\bar{\mathbf{S}}] \mathbf{F}^{\text{p}-T}. \end{aligned}$$

Mit der Näherung $\mathbf{C} \approx \mathbf{1}$ erfolgt der Übergang von (C.70) nach (C.68):

$$\begin{aligned} \text{VOL}[\mathbf{S}] &= \frac{1}{n_{\text{dim}}}(\mathbf{S} : \mathbf{C})\mathbf{C}^{-1} \approx \frac{1}{n_{\text{dim}}}(\mathbf{S} : \mathbf{1})\mathbf{1} = \text{vol}[\mathbf{S}], \\ \text{DEV}[\mathbf{S}] &= \mathbf{S} - \frac{1}{n_{\text{dim}}}(\mathbf{S} : \mathbf{C})\mathbf{C}^{-1} \approx \mathbf{S} - \frac{1}{n_{\text{dim}}}(\mathbf{S} : \mathbf{1})\mathbf{1} = \text{dev}[\mathbf{S}]. \end{aligned} \quad (\text{C.74})$$

Für zwei Tensoren zweiter Stufe \mathbf{A} und \mathbf{B} gilt

$$\text{dev}[\mathbf{A}] : \text{dev}[\mathbf{B}] = \text{dev}[\mathbf{A}] : \mathbf{B}. \quad (\text{C.75})$$

Unter Verwendung der Hauptsymmetrie (C.7) von \mathbb{P}_{dev} (C.69) ergibt sich

$$\begin{aligned} \text{dev}[\mathbf{A}] : \text{dev}[\mathbf{B}] &= (\mathbb{P}_{\text{dev}})_{ijkl} A_{km} (\mathbb{P}_{\text{dev}})_{ijrs} B_{rs} = (\mathbb{P}_{\text{dev}})_{rsij} (\mathbb{P}_{\text{dev}})_{ijkl} A_{km} B_{rs} \\ &= (\mathbb{P}_{\text{dev}})_{rskm} A_{km} B_{rs} = \text{dev}[\mathbf{A}] : \mathbf{B}. \end{aligned} \quad (\text{C.76})$$

C.5 Bilanzen

C.5.1 Transformation von Kräften

Es wird die Piola-Transformation

$$\mathbf{n} da = J\mathbf{F}^{-T}\mathbf{n}_0 dA \quad (\text{C.77})$$

hergeleitet, welche die Normale \mathbf{n}_0 in der Referenzkonfiguration auf die Normale \mathbf{n} in der Momentankonfiguration abbildet. Beide Normalen sind normiert, $|\mathbf{n}_0| = 1$ und $|\mathbf{n}| = 1$. Die Herleitung lautet

$$\begin{aligned} (\mathbf{F}\mathbf{c}) \cdot \mathbf{n} da &= (\mathbf{F}\mathbf{c}) \cdot (d\mathbf{x}_1 \times d\mathbf{x}_2) = [\mathbf{F}\mathbf{c}, d\mathbf{x}_1, d\mathbf{x}_2] = J[\mathbf{c}, d\mathbf{X}_1, d\mathbf{X}_2] = J\mathbf{c} \cdot \mathbf{n}_0 dA, \\ (\mathbf{F}\mathbf{c}) \cdot \mathbf{n} da &= \mathbf{c} \cdot \mathbf{F}^T \mathbf{n} da = J\mathbf{c} \cdot \mathbf{n}_0 dA, \\ \mathbf{n} da &= J\mathbf{F}^{-T}\mathbf{n}_0 dA \end{aligned} \quad (\text{C.78})$$

mit $\mathbf{n}_0 dA = d\mathbf{X}_1 \times d\mathbf{X}_2$ und $dA = |d\mathbf{X}_1 \times d\mathbf{X}_2|$. Die Piola-Transformation erlaubt nun die Transformation der Oberflächenkräfte $\mathbf{t} = \boldsymbol{\sigma}\mathbf{n}$ (C.50) mit $\mathbf{S} = J\mathbf{F}^{-1}\boldsymbol{\sigma}\mathbf{F}^{-T}$ (C.53) und $\mathbf{P} = \boldsymbol{\tau}\mathbf{F}^{-T}$:

$$\mathbf{t} da = \boldsymbol{\sigma}\mathbf{n} da = J^{-1}\mathbf{F}\mathbf{S}\mathbf{F}^T\mathbf{n} da = J^{-1}\mathbf{P}\mathbf{F}^T\mathbf{n} da = \mathbf{P}\mathbf{n}_0 dA. \quad (\text{C.79})$$

Damit lautet der Divergenzsatz auf dem Gebiet Ω der Referenzkonfiguration mit der Divergenz (C.108)

$$\int_{\partial\Omega_t} \mathbf{t} da = \int_{\partial\Omega} \mathbf{P}\mathbf{n}_0 dA = \int_{\Omega} \text{DIV}[\mathbf{P}] dV. \quad (\text{C.80})$$

C.5.2 Impulsbilanz

Es wird das Kräftegleichgewicht in der Referenzkonfiguration Ω aufgestellt. Die Trägheitskräfte $\rho_0\partial_t\mathbf{v}$ mit der Geschwindigkeit $\mathbf{v} = \partial_t\mathbf{u}$ stehen mit den Volumenkräften \mathbf{f}_V und den Oberflächenkräften $\mathbf{T} = \mathbf{P}\mathbf{n}_0$ (C.80) im Gleichgewicht:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \rho_0\partial_t\mathbf{v} dV &= \int_{\Omega} \mathbf{f}_V dV + \int_{\partial\Omega} \mathbf{T} dA, \\ \rho_0\partial_t\mathbf{v} &= \mathbf{f}_V + \text{DIV}[\mathbf{P}]. \end{aligned} \quad (\text{C.81})$$

Die lokale Impulsbilanz (C.81)₂ wird mit der Testfunktion $\boldsymbol{\eta}$ schwach formuliert,

$$\int_{\Omega} \rho_0\partial_t\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\eta} - \text{DIV}[\mathbf{P}] \cdot \boldsymbol{\eta} dV = \int_{\Omega} \mathbf{f}_V \cdot \boldsymbol{\eta} dV, \quad \boldsymbol{\eta} \in \mathcal{V}_0. \quad (\text{C.82})$$

Mit der Identität

$$\text{DIV}[\mathbf{v} \cdot \mathbf{P}] = \text{GRAD}[\mathbf{v}] : \mathbf{P} + \mathbf{v} \cdot \text{DIV}[\mathbf{P}] \quad (\text{C.83})$$

und (C.80) folgt

$$\begin{aligned}
 \int_{\Omega} \rho_0 \partial_t \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\eta} + \mathbf{P} : \text{GRAD} [\boldsymbol{\eta}] dV &= \int_{\Omega} \mathbf{f}_V \cdot \boldsymbol{\eta} dV + \int_{\Omega} \text{DIV} [\boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{P}] dV \\
 &= \int_{\Omega} \mathbf{f}_V \cdot \boldsymbol{\eta} dV + \int_{\partial\Omega} \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{P} \cdot \mathbf{n}_0 dA \\
 &= \int_{\Omega} \mathbf{f}_V \cdot \boldsymbol{\eta} dV + \int_{\partial\Omega} \mathbf{T} \cdot \boldsymbol{\eta} dA = G_{ext}(\boldsymbol{\eta}), \quad \boldsymbol{\eta} \in \mathcal{V}_0.
 \end{aligned} \tag{C.84}$$

Mit (C.53) und (C.54) ergibt sich die schwach formulierte Impulsbilanz

$$\int_{\Omega} \rho_0 \partial_t \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\eta} + \frac{1}{2} \mathbf{S}(\mathbf{C}(\mathbf{u})) : \dot{\mathbf{C}}(\mathbf{u})[\boldsymbol{\eta}] dV = G_{ext}(\boldsymbol{\eta}), \quad \forall \boldsymbol{\eta} \in \mathcal{V}_0. \tag{C.85}$$

Für kleine Verformungen (C.36) lautet sie mit $\boldsymbol{\epsilon} = \dot{\boldsymbol{\epsilon}}$

$$\int_{\Omega} \rho_0 \partial_t \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\eta} + \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\epsilon}(\boldsymbol{\eta}) dV = G_{ext}(\boldsymbol{\eta}), \quad \forall \boldsymbol{\eta} \in \mathcal{V}_0. \tag{C.86}$$

C.5.3 Entropiebilanz

Die Entropiebilanz oder auch der zweite Hauptsatz der Thermodynamik lautet in integraler und lokaler Formulierung

$$\begin{aligned}
 \int_{\Omega} \Xi dV &= \int_{\Omega} \dot{H} dV - \int_{\Omega} R/\Theta dV + \int_{\partial\Omega} \mathbf{Q} \cdot \mathbf{n}/\Theta dA \geq 0, \\
 \Xi &= \dot{H} - R/\Theta + \text{DIV} [\mathbf{Q}/\Theta] \geq 0,
 \end{aligned} \tag{C.87}$$

wobei H die Entropie, Θ die Temperatur und Ξ die Entropieproduktion ist. Die Entropieproduktion Ξ nimmt ab durch eine Wärmezufuhr R und nimmt zu durch den Abfluss von Wärme $\mathbf{Q} \cdot \mathbf{n}$. In die lokale Entropiebilanz (C.87)₂ wird zuerst die Identität

$$\text{DIV} [\mathbf{Q}/\Theta] = (\text{DIV} [\mathbf{Q}]\Theta - \mathbf{Q} \cdot \text{GRAD} [\Theta]) / \Theta^2 \tag{C.88}$$

eingesetzt, $\Xi = \dot{H} - R/\Theta + (\text{DIV} [\mathbf{Q}]\Theta - \mathbf{Q} \cdot \text{GRAD} [\Theta]) / \Theta^2 \geq 0$. Multiplikation mit Θ ergibt

$$\Theta \Xi = \Theta \dot{H} - R + \text{DIV} [\mathbf{Q}] - \mathbf{Q} \cdot \text{GRAD} [\Theta] / \Theta. \tag{C.89}$$

C.6 Differentiale

C.6.1 Exponentialabbildung

Die Exponentialabbildung lautet

$$\exp(\mathbf{A}) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \mathbf{A}^k. \tag{C.90}$$

Die Lösung der gewöhnlichen Differentialgleichung $\dot{\mathbf{F}}^P(t) = \mathbf{F}^P(t)\mathbf{A}(t)$ lautet

$$\mathbf{F}^{\text{P}}(t) = \mathbf{F}^{\text{P}}(t_0) \exp \left(\int_{t_0}^t \mathbf{A}(\tau) d\tau \right). \quad (\text{C.91})$$

Die Lösung wird überprüft, wobei (C.101) verwendet wird:

$$\begin{aligned} F_{ij}^{\text{P}}(t) &= F_{ik}^{\text{P}}(t_0) [\exp(\cdot)]_{kj}, \\ \dot{F}_{ij}^{\text{P}}(t) &= F_{ik}^{\text{P}}(t_0) [\exp(\cdot)]_{km} A_{mj}(t) = F_{im}^{\text{P}}(t) A_{mj}(t). \end{aligned} \quad (\text{C.92})$$

Die Lösung der gewöhnlichen Differentialgleichung $\dot{\mathbf{F}}^{\text{P}}(t) = \mathbf{A}(t)\mathbf{F}^{\text{P}}(t)$ lautet

$$\mathbf{F}^{\text{P}}(t) = \exp \left(\int_{t_0}^t \mathbf{A}(\tau) d\tau \right) \mathbf{F}^{\text{P}}(t_0). \quad (\text{C.93})$$

Die Lösung wird ebenfalls überprüft,

$$\begin{aligned} F_{ij}^{\text{P}}(t) &= [\exp(\cdot)]_{ik} F_{kj}^{\text{P}}(t_0), \\ \dot{F}_{ij}^{\text{P}}(t) &= [\exp(\cdot)]_{im} A_{mk}(t) F_{kj}^{\text{P}}(t_0) \\ &= A_{im}(t) [\exp(\cdot)]_{mk} F_{kj}^{\text{P}}(t_0) = A_{im}(t) F_{mj}^{\text{P}}(t), \end{aligned} \quad (\text{C.94})$$

wobei zusätzlich die Eigenschaft $\exp(\mathbf{A})\mathbf{A} = \mathbf{A}\exp(\mathbf{A})$ verwendet wird.

Die Lösung der gewöhnlichen Differentialgleichung $\dot{\mathbf{C}}^e(t) = \text{sym} [\mathbf{C}^e(t)\mathbf{A}(t)] = \frac{1}{2}(\mathbf{C}^e(t)\mathbf{A}(t) + \mathbf{A}^T(t)\mathbf{C}^e(t))$ lautet

$$\begin{aligned} \mathbf{C}^e(t) &= \frac{1}{2} \mathbf{C}^e(t_0) \exp \left(\int_{t_0}^t \mathbf{A}(\tau) d\tau \right) + \frac{1}{2} \exp \left(\int_{t_0}^t \mathbf{A}^T(\tau) d\tau \right) \mathbf{C}^e(t_0) \\ &= \frac{1}{2} \mathbf{C}^e(t_0) \exp \left(\int_{t_0}^t \mathbf{A}(\tau) d\tau \right) + \frac{1}{2} \exp^T \left(\int_{t_0}^t \mathbf{A}(\tau) d\tau \right) \mathbf{C}^e(t_0). \end{aligned} \quad (\text{C.95})$$

Es gilt

$$\det \exp[\mathbf{A}] = \exp[\text{tr} \mathbf{A}]. \quad (\text{C.96})$$

Die Exponentialabbildung kann nur im Spezialfall von Symmetrie und kommutierenden Tensoren auf die e -Funktion und eine Rechnung im reellen Hauptachsensystem zurückgeführt werden. Es wird die Ableitung der Exponentialabbildung (C.90) hergeleitet. Der vierte Term lautet $(\mathbf{A}^3)_{ij} = A_{ik}A_{km}A_{mj}$. Seine Ableitung ergibt sich zu

$$\begin{aligned} \frac{d(\mathbf{A}^3)_{ij}}{d(\mathbf{A})_{pq}} &= I_{ikpq} A_{kj}^2 + A_{ik} I_{kmpq} A_{mj} + A_{im}^2 I_{mj pq} \\ &= \delta_{im} I_{kmpq} A_{kj}^2 + A_{im} I_{kmpq} A_{kj} + A_{im}^2 I_{kmpq} \delta_{kj} \\ &= A_{im}^0 I_{kmpq} A_{kj}^2 + A_{im}^1 I_{kmpq} A_{kj}^1 + A_{im}^2 I_{kmpq} A_{kj}^0 \\ &= A_{ip}^0 A_{qj}^2 + A_{ip}^1 A_{qj}^1 + A_{ip}^2 A_{qj}^0, \end{aligned} \quad (\text{C.97})$$

wobei $I_{ijpq} = dA_{ij}/dA_{pq} = \delta_{ip}\delta_{jq}$ verwendet wird. Allgemein gilt

$$\frac{d(\mathbf{A}^n)_{ij}}{d(\mathbf{A})_{pq}} = \sum_{k=0}^{n-1} A_{ip}^k A_{qj}^{n-1-k}, \quad (\text{C.98})$$

und damit für die Ableitung der Exponentialabbildung $\exp(\mathbf{A}) = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{1}{r!} \mathbf{A}^r$:

$$\frac{d(\exp(\mathbf{A}))_{ij}}{d(\mathbf{A})_{pq}} = \sum_{r=1}^{\infty} \frac{1}{r!} \frac{d(\mathbf{A}^r)_{ij}}{d(\mathbf{A})_{pq}} = \sum_{r=1}^{\infty} \frac{1}{r!} \sum_{k=0}^{r-1} A_{ip}^k A_{qj}^{r-1-k}. \quad (\text{C.99})$$

Es wird gezeigt, dass

$$\exp'(\mathbf{A}) : \mathbf{A} = \exp(\mathbf{A}) \mathbf{A} \quad (\text{C.100})$$

gilt. Dies folgt aus (C.99):

$$\begin{aligned} \frac{d(\exp(\mathbf{A}))_{ij}}{d(\mathbf{A})_{pq}} A_{pq} &= \sum_{r=1}^{\infty} \frac{1}{r!} \sum_{k=0}^{r-1} A_{ip}^k A_{qj}^{r-1-k} A_{pq} = \sum_{r=1}^{\infty} \frac{1}{r!} \sum_{k=0}^{r-1} A_{ip}^k A_{pj}^{r-k} = \sum_{r=1}^{\infty} \frac{1}{r!} \sum_{k=0}^{r-1} A_{ij}^r \\ &= \sum_{r=1}^{\infty} \frac{r}{r!} A_{ij}^r = \sum_{r=1}^{\infty} \frac{1}{(r-1)!} A_{ij}^r = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{1}{r!} A_{ij}^{r+1} = (\exp(\mathbf{A}))_{ik} A_{kj}. \end{aligned} \quad (\text{C.101})$$

Zu beachten ist $\exp'(\mathbf{A}) : \mathbf{B} \neq \exp(\mathbf{A}) \mathbf{B}$ für $\mathbf{A} \neq \mathbf{B}$.

C.6.2 Determinante

Die Ableitung der Determinante $J = \det(\mathbf{F})$ eines Tensors zweiter Stufe \mathbf{F} lautet

$$d_{\mathbf{F}} J = J \mathbf{F}^{-T}, \quad (\text{C.102})$$

s. TRUESDELL & NOLL [68], S. 26. Entsprechend gilt für \mathbf{C} mit $\det(\mathbf{C}) = J^2$ die Ableitung $d_{\mathbf{C}}(J^2) = J^2 \mathbf{C}^{-1}$. Mit $d_{\mathbf{C}}(J^2) = 2J d_J \mathbf{C}$ folgt

$$d_{\mathbf{C}} J = \frac{1}{2} J \mathbf{C}^{-1}. \quad (\text{C.103})$$

Eine Anwendung von (C.102) liegt in der plastische Volumenerhaltung

$$J^{\mathbf{P}} = \det(\mathbf{F}^{\mathbf{P}}) = 1, \quad (\text{C.104})$$

welche automatisch von der Evolutionsgleichung $\mathbf{L}^{\mathbf{P}} = \gamma \partial_{\Sigma} \phi$ (3.4) erfüllt werden muss. Mit $\mathbf{L}^{\mathbf{P}}$ (C.41) folgt für die Ableitung

$$\dot{J}^{\mathbf{P}} = J^{\mathbf{P}} \mathbf{F}^{\mathbf{P}-T} : \dot{\mathbf{F}}^{\mathbf{P}} = J^{\mathbf{P}} \dot{\mathbf{F}}^{\mathbf{P}} : \mathbf{F}^{\mathbf{P}-T} = J^{\mathbf{P}} \text{tr} \left[\dot{\mathbf{F}}^{\mathbf{P}} \mathbf{F}^{\mathbf{P}-1} \right] = J^{\mathbf{P}} \text{tr} [\mathbf{L}^{\mathbf{P}}]. \quad (\text{C.105})$$

Aus $\text{tr} [\mathbf{L}^{\mathbf{P}}] = 0$ folgt mit dem Anfangswert $J^{\mathbf{P}}(t_0) = 1$ die plastische Volumenerhaltung $J^{\mathbf{P}}(t) = 1$ für $t_0 \leq t \leq T$. Eine Fließfunktion mit der Eigenschaft $\text{tr} [\partial_{\Sigma} \phi] = 0$ erhält also das plastische Volumen.

C.6.3 Divergenz

Es wird gezeigt, dass die Divergenz des Tensors erster Stufe $\boldsymbol{\eta}$, welche in der Momentankonfiguration die Spur des Gradienten ist, in der Referenzkonfiguration

$$\text{div} [\boldsymbol{\eta}] = \text{tr} [\nabla \boldsymbol{\eta}] = \frac{1}{2} \dot{\mathbf{C}} [\boldsymbol{\eta}] : \mathbf{C}^{-1} \quad (\text{C.106})$$

lautet. Dazu wird zuerst (C.37) verwendet und dann die Symmetrie von \mathbf{C}^{-1} ausgenutzt. Anschlie-

Send werden die Identitäten (C.1)₃ und (C.1)₁ verwendet. Mit dem Gradienten (C.23) ergibt sich

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{2}\dot{\mathbf{C}}[\boldsymbol{\eta}] : \mathbf{C}^{-1} &= \frac{1}{2} \left(\text{GRAD}^T[\boldsymbol{\eta}] \mathbf{F} + \mathbf{F}^T \text{GRAD}[\boldsymbol{\eta}] \right) : \mathbf{C}^{-1} \\
 &= \mathbf{F}^T \text{GRAD}[\boldsymbol{\eta}] : \mathbf{C}^{-1} = \mathbf{F}^T \text{GRAD}[\boldsymbol{\eta}] : \mathbf{F}^{-1} \mathbf{F}^{-T} \\
 &= \text{GRAD}[\boldsymbol{\eta}] : \mathbf{F}^{-T} = \text{GRAD}[\boldsymbol{\eta}] \mathbf{F}^{-1} : \mathbf{1} \\
 &= \frac{d\boldsymbol{\eta}}{d\mathbf{X}} \frac{d\mathbf{X}}{dx} : \mathbf{1} = \frac{d\boldsymbol{\eta}}{dx} : \mathbf{1} = \text{div}[\boldsymbol{\eta}].
 \end{aligned} \tag{C.107}$$

In der Referenzkonfiguration lautet die Divergenz $\text{DIV}[\boldsymbol{\eta}] = J \text{div}[\boldsymbol{\eta}]$, wie es sich aus

$$\int_{\Omega_t} \text{div}[\boldsymbol{\eta}] J dV = \int_{\Omega} \text{DIV}[\boldsymbol{\eta}] dV \tag{C.108}$$

ergibt.

C.6.4 Unimodulare Tensoren

Unimodulare Tensoren zweiter Stufe sind für die Beschreibung volumenerhaltender Deformationen von Bedeutung. Die unimodularen Tensoren

$$\tilde{\mathbf{F}} = J^{-1/n_{dim}} \mathbf{F}, \quad \tilde{\mathbf{C}} = J^{-2/n_{dim}} \mathbf{C} \tag{C.109}$$

haben die Eigenschaft $\det \tilde{\mathbf{F}} = 1$ und $\det \tilde{\mathbf{C}} = 1$. Der zugehörige Green-Tensor lautet

$$\tilde{\mathbf{E}} = \frac{1}{2}(\tilde{\mathbf{C}} - \mathbf{1}). \tag{C.110}$$

Zu den unimodularen Tensoren gehört auch der Schädigungstensor

$$\tilde{\mathbf{B}} = b^{-1} \mathbf{B} \tag{C.111}$$

mit $b = \det(\mathbf{B})^{\frac{1}{n_{dim}}}$, der die Eigenschaft $\det(\tilde{\mathbf{B}}) = 1$ hat.

Es wird (C.109)₂ nach \mathbf{C} abgeleitet. Mit $\partial_{\mathbf{C}} J = \frac{1}{2} J \mathbf{C}^{-1}$, siehe (C.103), folgt für die Ableitung von $\tilde{\mathbf{C}}$, wobei $\mathbf{H} = \dot{\mathbf{C}}$ ein beliebiger Tensor zweiter Stufe ist,

$$\begin{aligned}
 \partial_{\mathbf{C}} \tilde{\mathbf{C}} : \mathbf{H} &= -\frac{2}{n_{dim}} J^{-\frac{2}{n_{dim}}-1} (\partial_{\mathbf{C}} J : \mathbf{H}) \mathbf{C} + J^{-\frac{2}{n_{dim}}} \partial_{\mathbf{C}} \mathbf{C} : \mathbf{H} \\
 &= -\frac{1}{n_{dim}} J^{-\frac{2}{n_{dim}}} (\mathbf{C}^{-1} : \mathbf{H}) \mathbf{C} + J^{-\frac{2}{n_{dim}}} \mathbf{I} : \mathbf{H} \\
 &= J^{-\frac{2}{n_{dim}}} \left(\mathbf{I} - \frac{1}{n_{dim}} \mathbf{C} \otimes \mathbf{C}^{-1} \right) : \mathbf{H}.
 \end{aligned} \tag{C.112}$$

\mathbf{H} wird nun verjüngend von links angewendet, wobei der Deviator (C.70) erscheint:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{H} : \partial_{\mathbf{C}} \tilde{\mathbf{C}} &= J^{-\frac{2}{n_{dim}}} \mathbf{H} : \left(\mathbf{I} - \frac{1}{n_{dim}} \mathbf{C} \otimes \mathbf{C}^{-1} \right) \\
 &= J^{-\frac{2}{n_{dim}}} \left(\mathbf{I} - \frac{1}{n_{dim}} \mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{C} \right) : \mathbf{H} \\
 &= J^{-\frac{2}{n_{dim}}} \text{DEV}_{\mathbf{C}^{-1}}[\mathbf{H}].
 \end{aligned} \tag{C.113}$$

C.6.5 Inverse Tensoren zweiter Stufe

Es wird die Identität $\mathbf{A}\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{1}$, in Indexschreibweise $A_{ik}^{-1}A_{kj} = \delta_{ij}$, nach dem inversen Tensor zweiter Stufe \mathbf{A}^{-1} abgeleitet,

$$\frac{\partial A_{ik}^{-1}}{\partial A_{pq}} A_{kj} = -A_{ik}^{-1} \frac{\partial A_{kj}}{\partial A_{pq}} = -A_{ik}^{-1} \delta_{kp} \delta_{jq}, \quad (\text{C.114})$$

wobei die Ableitung von $\mathbf{1}$ verschwindet. Umstellen liefert

$$\begin{aligned} \frac{\partial A_{ik}^{-1}}{\partial A_{pq}} A_{kj} A_{jm}^{-1} &= -A_{ik}^{-1} \delta_{kp} \delta_{jq} A_{jm}^{-1}, \\ \frac{\partial A_{ik}^{-1}}{\partial A_{pq}} \delta_{km} &= -A_{ip}^{-1} A_{qm}^{-1}, \\ \frac{\partial A_{im}^{-1}}{\partial A_{pq}} &= -A_{ip}^{-1} A_{qm}^{-1}. \end{aligned} \quad (\text{C.115})$$

Für die Ableitung von \mathbf{A}^{-T} wird von $A_{ik}^{-T} A_{kj}^T = \delta_{ij}$ ausgegangen,

$$\frac{\partial A_{ik}^{-T}}{\partial A_{pq}} A_{kj}^T = -A_{ik}^{-T} \frac{\partial A_{kj}^T}{\partial A_{pq}} = -A_{ik}^{-T} \delta_{kp} \delta_{jq}. \quad (\text{C.116})$$

Umstellen liefert

$$\begin{aligned} \frac{\partial A_{ik}^{-T}}{\partial A_{pq}} A_{kj}^T A_{jm}^{-T} &= -A_{ik}^{-T} \delta_{kp} \delta_{jq} A_{jm}^{-T}, \\ \frac{\partial A_{ik}^{-T}}{\partial A_{pq}} \delta_{km} &= -A_{iq}^{-T} A_{pm}^{-T}, \\ \frac{\partial A_{im}^{-T}}{\partial A_{pq}} &= -A_{qi}^{-1} A_{mp}^{-1} = -A_{mp}^{-1} A_{qi}^{-1}. \end{aligned} \quad (\text{C.117})$$

Bei der Ableitung eines symmetrischen inversen Tensors zweiter Stufe $(\partial_C \mathbf{C}^{-1})_{ijkm} = -C_{ik}^{-1} C_{jm}^{-1}$ (C.115) ist zu beachten, ob die symmetrisierende Wirkung von Bedeutung ist:

$$\begin{aligned} \partial_C \mathbf{C}^{-1} &= -\mathbf{I}_{C^{-1}}, \\ (\partial_C \mathbf{C}^{-1})_{ijkm} &= -\frac{1}{2} (C_{ik}^{-1} C_{jm}^{-1} + C_{im}^{-1} C_{jk}^{-1}) = -(\mathbf{I}_{C^{-1}})_{ijkm}. \end{aligned} \quad (\text{C.118})$$

Eine Anwendung von (C.115) und (C.117) ergibt sich in der Ableitung von $C_{ij}^e = F_{ki}^{\mathbb{P}-1} C_{km} F_{mj}^{\mathbb{P}-1}$ (C.32) nach $\mathbf{F}^{\mathbb{P}}$:

$$\begin{aligned} (\partial_{F^{\mathbb{P}}} \mathbf{C}^e)_{ijpq} &= \left(d_{F^{\mathbb{P}}} \mathbf{F}^{\mathbb{P}-1} \right)_{kipq} C_{km} F_{mj}^{\mathbb{P}-1} + F_{ki}^{\mathbb{P}-1} C_{km} \left(d_{F^{\mathbb{P}}} \mathbf{F}^{\mathbb{P}-1} \right)_{mjq} \\ &= -F_{kp}^{\mathbb{P}-1} F_{qi}^{\mathbb{P}-1} C_{km} F_{mj}^{\mathbb{P}-1} - F_{ki}^{\mathbb{P}-1} C_{km} F_{mp}^{\mathbb{P}-1} F_{qj}^{\mathbb{P}-1} \\ &= -C_{pj}^e F_{qi}^{\mathbb{P}-1} - C_{ip}^e F_{qj}^{\mathbb{P}-1}. \end{aligned} \quad (\text{C.119})$$

Für einen Tensor zweiter Stufe $\mathbf{H} = \mathbf{H}^T$ und $\mathbf{C} = \text{konst.}$, $\mathbf{C}^e(\mathbf{C}, \mathbf{F}^{\mathbb{P}})$ (C.32), gilt allgemein $\mathbf{H} : \dot{\mathbf{C}}^e = \mathbf{H} : \partial_{F^{\mathbb{P}}} \mathbf{C}^e : \dot{\mathbf{F}}^{\mathbb{P}}$. Es wird nun die Ableitung (C.119) eingesetzt:

$$\begin{aligned}
 H_{ij}(\partial_{F^p} C^e)_{ijpq} &= - \left[H_{ij} C_{ip}^e F_{jq}^{p-1} + H_{ij} C_{jp}^e F_{iq}^{p-1} \right] \\
 &= - \left[C_{pi}^e H_{ij} F_{jq}^{p-1} + C_{pj}^e H_{ji} F_{iq}^{p-1} \right] \\
 &= -2C_{pi}^e H_{ij} F_{jq}^{p-1}.
 \end{aligned} \tag{C.120}$$

Es gilt also unter den genannten Voraussetzungen

$$\mathbf{H} : \dot{\mathbf{C}}^e = -2\mathbf{C}^e \mathbf{H} \mathbf{F}^{p-1} : \dot{\mathbf{F}}^p. \tag{C.121}$$

Mit $\mathbf{A} = -2\mathbf{C}^e \mathbf{H} \mathbf{F}^{p-1}$ folgt $\mathbf{H} = -\frac{1}{2}\mathbf{C}^{e-1} \mathbf{A} \mathbf{F}^p$ und damit

$$\mathbf{A} : \dot{\mathbf{F}}^p = -\frac{1}{2}\mathbf{C}^{e-1} \mathbf{A} \mathbf{F}^p : \dot{\mathbf{C}}^e. \tag{C.122}$$

Als eine Anwendung für (C.119) wird gezeigt, dass für eine skalare Funktion Ψ unter der Bedingung $\mathbf{C} = \text{konst.}$ gilt:

$$d_{C^e} \Psi = -\frac{1}{2}\mathbf{C}^{e-1} d_{F^p} \Psi \mathbf{F}^{pT}. \tag{C.123}$$

Es wird (C.119) angewendet. Die Bedingung $\mathbf{C} = \text{konst.}$ ist in der partiellen Ableitung $\partial_{F^p} C^e$ enthalten:

$$\begin{aligned}
 (d_{F^p} \Psi)_{pq} &= (d_{C^e} \Psi)_{ij} (\partial_{F^p} C^e)_{ijpq} \\
 &= -(d_{C^e} \Psi)_{ij} \left[C_{pj}^e F_{qi}^{p-1} + C_{ip}^e F_{qj}^{p-1} \right] \\
 &= -C_{pj}^e (d_{C^e} \Psi)_{ji} F_{qi}^{p-1} - C_{ip}^e (d_{C^e} \Psi)_{ij} F_{qj}^{p-1} \\
 &= -2C_{pj}^e (d_{C^e} \Psi)_{ji} F_{iq}^{p-T}.
 \end{aligned} \tag{C.124}$$

C.6.6 Vollständiges Differential

Gegeben sind die einmal differenzierbaren Funktionen $\mathbf{y}(\mathbf{x})$ und $\mathbf{f}(\mathbf{y}(\mathbf{x}), \mathbf{x})$. \mathbf{x}_0 ist eine Lösung von

$$\mathbf{f}(\mathbf{y}(\mathbf{x}), \mathbf{x}) = \mathbf{0}. \tag{C.125}$$

Die vollständige Ableitung an der Stelle \mathbf{x}_0 lautet

$$\frac{d}{d\mathbf{x}} \mathbf{f}(\mathbf{y}(\mathbf{x}_0), \mathbf{x}_0) = \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}} \mathbf{f}(\mathbf{y}(\mathbf{x}_0), \mathbf{x}_0) \circ \frac{d}{d\mathbf{x}} \mathbf{y}(\mathbf{x}_0) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{f}(\mathbf{y}(\mathbf{x}_0), \mathbf{x}_0) = \mathbf{0}. \tag{C.126}$$

Nach dem Satz über die implizite Funktion existiert die Ableitung

$$\frac{d}{d\mathbf{x}} \mathbf{y}(\mathbf{x}_0) = - \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{y}} \mathbf{f}(\mathbf{y}(\mathbf{x}_0), \mathbf{x}_0) \right]^{-1} \circ \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{f}(\mathbf{y}(\mathbf{x}_0), \mathbf{x}_0), \tag{C.127}$$

wenn \mathbf{f} differenzierbar ist. (C.127) wird noch einmal so geschrieben, wie die Gleichung in der Arbeit verwendet wird:

$$d_x \mathbf{y} = - [d_y \mathbf{f}]^{-1} \circ \partial_x \mathbf{f}. \tag{C.128}$$

(C.128) beruht also auf der Voraussetzung $\mathbf{f}(\mathbf{y}(\mathbf{x}_0), \mathbf{x}_0) = \mathbf{0}$.

C.7 Materialmodelle

C.7.1 Fließfunktion

Es wird die Fließfunktion modelliert.

Plastische Volumenerhaltung

Damit das plastische Volumen (C.104) erhalten bleibt, darf von Σ nur $\text{dev}[\Sigma]$ (C.68) in die Fließfunktion eingehen: $\phi(\Sigma) = \phi(\text{dev}[\Sigma])$. Mit einem Tensor zweiter Stufe \mathbf{A} lässt sich zeigen:

$$\partial_{\Sigma}\phi : \mathbf{A} = \partial_{\text{dev}[\Sigma]}\phi : \text{dev}[\mathbf{A}] = \text{dev}\left(\partial_{\text{dev}[\Sigma]}\phi\right) : \mathbf{A}. \quad (\text{C.129})$$

Damit folgt $\text{tr}[\partial_{\Sigma}\phi] = 0$.

Invarianz unter Basistransformation

Die Fließfunktion darf allein von den Basisinvarianten von $\text{dev}[\Sigma]$ abhängen, vgl. Abschnitt C.3.2. Die einfachste Form ist also

$$\hat{\phi} = I_2(\text{dev}[\Sigma]) = \text{tr}[(\text{dev}[\Sigma])^2] \quad (\text{C.130})$$

Statt I_2 kann eine anisotrope Funktion $\hat{\phi}(\text{dev}[\Sigma]) = \psi(\text{dev}[\Sigma], \dots)$ (C.49) verwendet werden.

Von-Mises-Fließkriterium

Bei einem einachsigen Zugversuch in 1-Richtung sind alle Komponenten der Spannung Σ (C.61) gleich Null außer Σ_{11} . Das Material beginnt zu fließen, wenn die Spannungskomponente Σ_{11} die Fließgrenze σ_Y erreicht. Für $\Sigma_{11} < \sigma_Y$ ist es elastisch. Der Zustand $\Sigma_{11} > \sigma_Y$ kann nicht angenommen werden. Aus $\Sigma_{11} = \sigma_Y$ folgt im Dreidimensionalen $I_2(\text{dev}[\Sigma]) = \frac{2}{3}\sigma_Y^2$ und im Zweidimensionalen $I_2(\text{dev}[\Sigma]) = \frac{1}{2}\sigma_Y^2$. Das Fließkriterium nach von Mises erweitert nun den einachsigen Zugversuch auf einen allgemeinen Spannungszustand in der Form

$$\phi(\Sigma) = I_2(\text{dev}[\Sigma]) - n_{\phi}^2 \sigma_Y^2 \leq 0 \quad (\text{C.131})$$

mit $n_{\phi} = \sqrt{\frac{2}{3}}$ (3D) bzw. $n_{\phi} = \sqrt{\frac{1}{2}}$ (2D).

C.7.1 Bemerkung. Für einen Tensor zweiter Stufe \mathbf{A} gilt: $\text{tr}[\mathbf{A}^2] = A_{ik}A_{kj}\delta_{ij} = A_{ik}A_{ki} = \mathbf{A} : \mathbf{A}^T$. Für $\mathbf{A} \neq \mathbf{A}^T$ kann also $\text{tr}[\mathbf{A}^2] < 0$ vorkommen. In den Fällen $\Sigma = \Sigma^T$ oder $I_2(\text{dev}(\Sigma)) \geq 0$ ist (C.131) äquivalent zu

$$\phi(\Sigma) = \sqrt{I_2(\text{dev}[\Sigma])} - n_{\phi}\sigma_Y \leq 0 \quad (\text{C.132})$$

Für $\Sigma = \Sigma^T$ lautet die Fließfunktion

$$\phi(\Sigma) = |\text{dev}[\Sigma]| - n_{\phi}\sigma_Y \leq 0. \quad (\text{C.133})$$

Es könnte nun die Fließfunktion (C.132) verwendet werden, wobei der extreme Fall $I_2(\text{dev}[\Sigma]) < 0$ jedoch nicht auftreten darf. Stattdessen wird in dieser Arbeit die allgemeine Fließfunktion (C.131) verwendet.

Erweiterung um isotrope Verfestigung

Die isotrope Verfestigung (C.142) bewirkt, dass die Fließgrenze erhöht wird:

$$\phi(\boldsymbol{\Sigma}, \alpha) = I_2(\text{dev}[\boldsymbol{\Sigma}]) - n_\phi^2(\sigma_Y - q(\alpha))^2 \leq 0. \quad (\text{C.134})$$

Mit Blick auf den temperaturabhängigen Fall erfolgt die Zusammenfassung

$$y(\Theta, \alpha) := \sigma_Y(\Theta) - q(\Theta, \alpha). \quad (\text{C.135})$$

C.7.2 Bemerkung. Die Erweiterung von (C.133) sei ebenfalls erwähnt:

$$\phi(\boldsymbol{\Sigma}, \alpha) = \sqrt{I_2(\text{dev}[\boldsymbol{\Sigma}])} - n_\phi(\sigma_Y - q(\alpha)) \leq 0. \quad (\text{C.136})$$

Erweiterung um kinematische Verfestigung und Schädigung

Der Sättigungsterm der kinematische Verfestigung und das Schädigungspotential stehen nicht wie q in (C.134) unter dem Quadrat, sondern außerhalb:

$$\phi = I_2\left(\text{dev}\left[\boldsymbol{\Sigma} - \mathbf{Q}^k\right]\right) + \beta_{AF} I_2(\mathbf{Q}^k) - n_\phi^2 y^2(\Theta, \alpha) + \varphi(\boldsymbol{\Delta}, \mathbf{B}) \leq 0 \quad (\text{C.137})$$

Die Begründung erfolgt in Abschnitt 3.3.

Hauptachsendarstellung im Fall $\boldsymbol{\Sigma} = \boldsymbol{\Sigma}^T$

Im Fall $\boldsymbol{\Sigma} = \boldsymbol{\Sigma}^T$ lässt sich die isotrope Fließfunktion mit dem Deviator (C.68), hier für $n_{dim} = 3$, über die Basisinvarianten I_k (C.14) und die Hauptinvarianten J_k (C.16),

$$\begin{aligned} |\text{dev} \boldsymbol{\Sigma}|^2 &= \left[\boldsymbol{\Sigma} - \frac{1}{3}(\text{tr} \boldsymbol{\Sigma})\mathbf{1} \right] : \left[\boldsymbol{\Sigma} - \frac{1}{3}(\text{tr} \boldsymbol{\Sigma})\mathbf{1} \right] = \text{tr}(\boldsymbol{\Sigma}^2) - \frac{1}{3}\text{tr}^2(\boldsymbol{\Sigma}) = I_2(\boldsymbol{\Sigma}) - \frac{1}{3}I_1^2(\boldsymbol{\Sigma}) \\ &= J_1^2(\boldsymbol{\Sigma}) - 2J_2(\boldsymbol{\Sigma}) - \frac{1}{3}J_1^2(\boldsymbol{\Sigma}) = \frac{2}{3}J_1^2(\boldsymbol{\Sigma}) - 2J_2(\boldsymbol{\Sigma}), \end{aligned} \quad (\text{C.138})$$

in den Eigenwerten Σ_A (C.17) von $\boldsymbol{\Sigma}$ darstellen. Es gilt also $\hat{\phi}^{iso} = \hat{\phi}^{iso}(\Sigma_1, \Sigma_2, \Sigma_3)$ oder

$$\hat{\phi}^{iso} = \hat{\phi}^{iso}(\Sigma_A). \quad (\text{C.139})$$

C.7.2 Isotrope Verfestigung

Aus der Annahme einer konstanten Wärmekapazität folgt in Abschnitt 5.4, dass das isotrope Verfestigungspotential \mathcal{H} eine lineare Funktion der Temperatur Θ ist. Das isotrope Verfestigungspotential lautet

$$\mathcal{H}(\alpha, \Theta) = \frac{1}{2}K(\Theta)\alpha^2 + (\tau_\infty(\Theta) - \tau_0(\Theta)) \left(\alpha + \frac{1}{\delta} \exp[-\delta\alpha] \right), \quad (\text{C.140})$$

wobei

$$\begin{aligned} \tau_0(\Theta) &= \tau_0(\Theta_0)[1 - \omega_0(\Theta - \Theta_0)], \\ \tau_\infty(\Theta) &= \tau_\infty(\Theta_0)[1 - \omega_h(\Theta - \Theta_0)], \\ K(\Theta) &= K(\Theta_0)[1 - \omega_h(\Theta - \Theta_0)]. \end{aligned} \quad (\text{C.141})$$

$K(\Theta_0)$, $\tau_\infty(\Theta_0)$, $\tau_0(\Theta_0)$ und δ sind Materialkonstanten, ebenso ω_0 und ω_h . Die Fließgrenze σ_Y ist gleich $\tau_0(\Theta)$. Für $\tau_\infty(\Theta) = \tau_0(\Theta)$ verfestigt das Material linear, für $\Theta = \Theta_0$ ist das Materialmodell isotherm. Die negative Ableitung $-\partial_\alpha \mathcal{H}$ ergibt die konjugierte Verfestigungsvariable q (5.23), (3.2):

$$q(\alpha, \Theta) = -\partial_\alpha \mathcal{H}(\alpha, \Theta) = -K(\Theta)\alpha - (\tau_\infty(\Theta) - \tau_0(\Theta))(1 - \exp[-\delta\alpha]). \quad (\text{C.142})$$

Die verwendeten Materialparameter stehen in Tabelle D.6.

C.7.3 Kinematischer Verfestigung

Es wird ein kinematisches Verfestigungspotential in der Form

$$\mathcal{I}(\boldsymbol{\alpha}^k) = \frac{C^{hm}}{3} I_2(\boldsymbol{\alpha}^k) \quad (\text{C.143})$$

eingeführt, wobei C^{hm} der kinematische Verfestigungsmodul ist, siehe Tabelle D.6. Für eine anisotrope Funktion steht $\mathcal{I}(\boldsymbol{\alpha}^k) = \bar{\psi}(\boldsymbol{\alpha}^k)$ (C.49) zur Verfügung. Die negative Ableitung ergibt die konjugierte kinematische Verfestigungsvariable $\mathbf{Q}^k = -d_{\boldsymbol{\alpha}^k} \mathcal{I}(\boldsymbol{\alpha}^k)$ (3.2), (5.23). Die kinematische Verfestigung $\boldsymbol{\alpha}^k$ ist i. Allg. asymmetrisch, weil sich die Asymmetrie von $\boldsymbol{\Sigma}$ über (3.4)₄ auf $\boldsymbol{\alpha}^k$ überträgt. Wegen (C.15) ist auch \mathbf{Q}^k asymmetrisch.

D Symbolverzeichnis

Für Materialparameter siehe Tabelle D.6. Formelzeichen, die nur in einem lokalen Kontext verwendet werden, wie dies vor allem in Abschnitt 2 der Fall ist, werden nicht aufgelistet.

Symbol	Bezeichnung	Def.
\mathbf{C}	rechter Cauchy-Green-Tensor	(C.26)
\mathbf{C}^e	elastischer r. Cauchy-Green-Tensor	(C.32)
$\bar{\mathbf{C}}$	skalierter r. C.-G.-Tensor (nur in Ab. 2.1 verwendet)	(2.1)
$\bar{\mathbf{C}}^e$	skal. elast. r. C.-G.-Tensor (nur in Ab. 2.1 verwendet)	(2.3)
$\tilde{\mathbf{C}}^e$	nicht-lokaler r. Cauchy-Green-Tensor	(4.1)
$\tilde{\mathbf{C}}$	unimodularer r. Cauchy-Green-Tensor	(C.109)
$\tilde{\mathbf{C}}^e$	unimodularer elastischer r. Cauchy-Green-Tensor	(2.4)
$\dot{\mathbf{C}}(\mathbf{u})[\boldsymbol{\eta}] = \mathbb{B}[\boldsymbol{\eta}]$	(erste) Rate von \mathbf{C}	(C.37)
$\ddot{\mathbf{C}}[\boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\xi}] = \mathbb{G}[\boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\xi}]$	zweite Rate von \mathbf{C}	(C.38)
$\mathbb{B}^{\text{as}}[\boldsymbol{\eta}]$	<i>Assumed-Strain</i> -Formulierung von \mathbb{B}	(2.56)
$\mathbb{G}^{\text{as}}[\boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\xi}]$	<i>Assumed-Strain</i> -Formulierung von \mathbb{G}	(2.56)
$\partial_t \mathbf{C}$	Zeitableitung von \mathbf{C}	(5.13)
\mathbf{F}	Deformationsgradient	(C.24)
\mathbf{F}^e	elastischer Deformationsgradient	(C.30)
\mathbf{F}^p	plastischer Deformationsgradient	(C.30)
$\bar{\mathbf{F}}^p$	nicht-lokaler plastischer Deformationsgradient	(4.14)
$\tilde{\mathbf{F}}$	unimodularer Deformationsgradient	(C.109)
\mathbf{E}	Green-Verzerrungs-Tensor	(C.34)
$\tilde{\mathbf{E}}$	unimodularer Green-Verzerrungs-Tensor	(C.110)
\mathbf{E}^e	elastischer Green-Verzerrungs-Tensor	(C.34)
$\boldsymbol{\epsilon}$	linearisierter Green-Verzerrungs-Tensor	(C.36)
\mathbf{R}	Rotationstensor	(C.28)
\mathbf{U}	rechter Strecktensor	(C.28)
\mathbf{L}^p	plastischer Geschwindigkeitsgradient	(C.41)
\mathbf{D}^p	sym. plastischer Geschwindigkeitsgradient	(C.42)
\mathbf{W}^p	plastischer Spin	(C.42)

Tabelle D.1: Deformation und Deformationsraten

Symbol	Bezeichnung	Def.
$\boldsymbol{\sigma}$	Cauchy-Spannung	(C.50)
$\boldsymbol{\tau}$	Kirchhoff-Spannung	(C.51)
\boldsymbol{S}	Zweiter Kirchhoff-Spannungstensor	(C.57)
\boldsymbol{P}	Erster Kirchhoff-Spannungstensor	(C.54)
$\bar{\boldsymbol{S}}$	elastischer zweiter Kirchhoff-Spannungstensor	(C.58)
$\boldsymbol{\Sigma}$	Mandel-Spannung	(C.61)

Tabelle D.2: Spannungen

Symbol	Bezeichnung	Def.
\mathbf{u}	Verschiebung	(1.5)
\mathbf{v}	Geschwindigkeit	(1.5)
\mathbf{a}	Parametervektor zur <i>Enhanced-Strain</i> -Formulierung	(2.35)
Θ	Temperatur	(5.5)
$\boldsymbol{\omega}$	Vektor der inneren Variablen	3.4
\mathbf{y}	Vektor der globalen Variablen	6.1
α	isotrope Verfestigung	(3.1)
q	konjugierte isotrope Verfestigung	(3.2)
\mathbf{B}	lokaler Schädigungstensor	(3.1)
$\mathbf{\Delta}$	konjugierter lokaler Schädigungstensor	(3.2)
$\bar{\mathbf{B}}$	nicht-lokaler Schädigungstensor	(4.1)
b	lokaler Schädigungsskalar	(3.34)
δ	konjugierter lokaler Schädigungsskalar	(3.35)
\bar{b}	nicht-lokaler Schädigungsskalar	(4.1)
$\boldsymbol{\alpha}^k$	kinematische Verfestigung	(3.1)
\mathbf{Q}^k	konjugierte kinematische Verfestigung	(3.2)
\hat{r}	globales Residuum	(6.2)
$\bar{r} = \int_T \hat{r} dt$	Residuum über die Zeit integriert	(6.3)
$\mathbf{w} = (\Theta, \bar{\mathbf{B}}, \dots)$	sämtliche globale Variablen außer der Verschiebung, die nicht eliminiert werden	(6.39)
$\mathbf{x} = (\mathbf{u}, \mathbf{w})$	globale Variablen, die nicht eliminiert werden	(6.43)
$\mathbf{y} = (\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{a}, \mathbf{w}) = (\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{a})$	sämtliche globale Variablen	6.1
\mathbf{z}	duale Lösung	(7.5)
J	Zielfunktional	(7.5)
$\boldsymbol{\xi} = (\mathbf{y}, \mathbf{z})$	Paar aus primaler und dualer Lösung	7.4
\mathcal{L}	Lagrange-Funktional	(7.5)

Tabelle D.3: Variablen

Symbol	Bezeichnung	Def.
n_ϕ	konjugierte isotrope Verfestigung	(C.57)

Tabelle D.4: Konstanten

Symbol	Bezeichnung	Def.
Ψ	Freie Energie	(1.7)
E	Innere Energie	(5.1)
\bar{W}	Elastische Energie	(1.7)
\widetilde{W}	deviatorische elastische Energie	(1.14)
U	volumetrische elastische Energie	(1.14)
$\bar{\psi}$	anisotrope skalarwertige Funktion	3.7
\mathcal{I}	kinematisches Verfestigungspotential	(3.1)
\mathcal{H}	isotropes Verfestigungspotential	(3.1)
φ	Schädigungspotential	3.6.3
ϕ	Fließfunktion	(C.131)
$\hat{\phi}$	Fließfunktion	(C.130)
Ψ_{grad}^{nloc}	nicht-lokales Gradientenpotential	(4.1)
Ψ_{plt}^{nloc}	nicht-lokales Penalty-Potential	(4.1)
\mathcal{D}_{int}	innere Dissipation	(3.2)
\mathcal{D}_{conv}	konvektive Dissipation	(5.7)
\mathcal{D}_{mech}	mechanische Dissipation	(5.17)
\mathcal{H}_{heat}^e	elastische Wärmeproduktion	(5.13)
Ξ	Entropieproduktion	(5.5)
H	Entropie	(5.5)
H^e	elastische Entropie	(5.9)
H^p	plastische Entropie	(5.9)
R	Wärmezufuhr	(5.1)
\mathbf{Q}	Wärmestrom	(5.1)
\mathbf{f}_V	Volumenkraft	(5.1)
\mathbf{T}	Flächenkraft	(5.1)
\mathbf{t}	Flächenkraft	(C.61)
\mathbf{n}	Normale	(C.61)
\mathbf{n}_0	Normale	(C.61)

Tabelle D.5: Energie und Potentiale

D.1 Materialparameter

Kompressionsmodul	κ	175	GPa		(1.17)
Schubmodul	μ	80.769	GPa		(1.35)
Dichte	ρ_0	7850	$\frac{kg}{m^3}$	$10^{-9} \frac{kg}{mm^3}$	(1.5)
Referenztemperatur	Θ_0	293.15	K		
Fließgrenze	τ_0	0.460	GPa		C.7.2
	τ_∞	0.656	GPa		
Verfestigungsexponent	δ	5.820	-		
	K	0	-		
	ω_0	0.002	K^{-1}		
	ω_h	0.002	K^{-1}		
Expansionskoeffizient	α_{ex}	10^{-5}	K^{-1}		5.4.2
spezifische Wärmekapazität	c	502	$\frac{m^2}{s^2K}$	$\frac{mm^2}{ms^2K}$	5.2.2
Wärmeleitungskoeffizient	k	43	$\frac{N}{sK}$	$10^{-6} \frac{kN}{msK}$	
kinematischer Verfestigungsmodul	C^{hm}	7.377	GPa		C.7.3
kinematische Sättigungsparameter	β_{AF}	1	-		(C.137)
Koeffizient im Gradienten-Potential	c_1^B	10^{-4}	-		(4.8)
Koeffizient im Penalty-Potential	c_2^B	1(10)	-		

Tabelle D.6: Materialparameter. Es wird die Spannung in GPa , die Kraft in kN , die Masse in kg , die Länge in mm , die Zeit in ms und die Temperatur in K angegeben. In der vorletzten Spalte werden die Einheiten in dieses System umgerechnet. Die Materialparameter der ersten 8 Zeilen entsprechen einem hochfesten Umformstahl. Die weiteren Parameter entsprechen nur allgemein Stahl. Die Skalierung des Schädigungspotentials und die Koeffizienten im Gradienten- und Penalty-Potential sind frei gewählt. In Modell 5 wird $c_2^B = 1$ und in Modell 6 $c_2^B = 10$ gewählt.

Literaturverzeichnis

- [1] AINSWORTH, M.; ODEN, J. T. [2000]: “A Posteriori Error Estimation in Finite Element Analysis”, Wiley
- [2] ANDELFINGER, U. [1991]: “Untersuchungen zur Zuverlässigkeit hybrid-gemischter Finite Elemente für Flächentragwerke”, Universität Stuttgart, Institut für Baustatik, Dissertation
- [3] APEL, N. [2004]: “Approaches to the description of anisotropic material behaviour at finite elastic and plastic deformations”, Dissertation Universität Stuttgart
- [4] ARMERO, F. [2006]: “Energy-dissipative momentum-conserving time-stepping algorithms for finite strain multiplicative plasticity”, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 195, 4862-4889
- [5] ARMERO, F.; ZAMBRANA-ROJAS, C. [2007]: “Volume-preserving energy-momentum schemes for isochoric multiplicative plasticity”, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 196, 4130-4159
- [6] ASARO, R. J; NEEDLEMAN, A. [1985]: “Texture development and strain hardening in rate dependent polycrystals”, *Acta metall.* Vol. 33. No. 6, pp. 923-953
- [7] AUBRY D.; JAY, G.; TIE, B.; MUZZOLINI, R. [2003]: “A combined mesh and model adaptive strategy for the scaling issues in the numerical modelling of the ductile damage in thin panels”, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 192, 3285-3300
- [8] BATHE, K. J.; DVORKIN, E. N. [1985]: “Short communication. A four-node plate bending element based on Mindlin / Reissner plate theory and a mixed interpolation”, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 21, 367-383
- [9] BANGERTH, W.; HEISTER, T.; HELTAI, L.; KANSCHAT, G.; KRONBICHLER, M.; MAIER, M.; TURCK SIN, B.; YOUNG, T.D: “The deal.II Library, Version 8.1”, <http://www.dealii.org>
- [10] BECKER, R. [2001]: “An optimal control approach to a posteriori error estimation in finite element methods”, Institut für Angewandte Mathematik, Universität Heidelberg
- [11] BETSCH, P.; STEIN, E. [1995]: “An assumed strain approach avoiding artificial thickness straining for a nonlinear 4-node shell element”, *Communications in Applied Numerical Methods*, Vol. 11, 899-909
- [12] BILLADE, N.; VEMAGANTI, K. [2007], “Hierarchical models of thin elastic structures: Overview and recent advances in error estimation and adaptivity”, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 196, 3508-3523
- [13] BLUM, H.; SUTTMEIER, FT. [2000], ”Weighted error estimates for finite element solutions of variational inequalities”, *Computing* (2000) 65: 119. doi:10.1007/s006070070015
- [14] BOHINC, U. [2011]: “Adaptive modeling of plate structures”, Doctoral thesis, ENS Cachan
- [15] BRAACK M., A. ERN, A. [2003]: “A posteriori control of modeling errors and discretization errors”, *Multiscale Model. Simul.* Vol. 1, No. 2, pp 221-238
- [16] BRAACK M., A. ERN, A. [2003]: “Adaptive Computation of Reactive Flows with Local Mesh Refinement and Model Adaptation”, *Numerical Mathematics and Advanced Applications*, pp 159-168

- [17] BRAESS, D. [2003]: “Finite Elemente. Theorie, schnelle Löser und Anwendungen in der Elastizitätstheorie”, Springer
- [18] CIARLET, P. G. [1988]: “Mathematical Elasticity I: Three-Dimensional Elasticity”, North-Holland, Amsterdam
- [19] DELALONDRE, F.; SMITH, C; SHEPHARD, M.S. [2010]: “Collaborative software infrastructure for adaptive multiple model simulation”, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 199, 1352-1370
- [20] DÜSTER, A.; SCHOLZ, D.; RANK, E. [2007]: ”pq-Adaptive solid finite elements for three-dimensional plates and shells”, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 197, 243-254
- [21] DVORKIN, E. N.; BARTHE, K. J. [1984]: “A continuum mechanics based four-node shell element for general nonlinear analysis”, *Engineering computations*, Vol. 1, 77-88
- [22] ECKSTEIN, A. [1999]: “Zur Theorie und Finite-Elemente-Simulation von Schalen mit großen inelastischen Dehnungen und duktilen Schädigungen”, Ruhr-Universität Bochum, Lehrstuhl für Statik und Dynamik, Dissertation
- [23] ELLEITHY, W. [2008]: “Analysis of problems in elasto-plasticity via an adaptive FEM-BEM coupling method”, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 197, 3687-3701
- [24] FISH, J.; FILONOVA, V.; YUAN Z. [2012]: “Reduced order computational continua”, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 221-222, 104-116
- [25] HAUPT, P. [2000]: “Continuum mechanics and theory of materials”, *Advanced texts in physics*, Springer, Berlin Heidelberg New York
- [26] HEINTZ, D.; HANSBO, P. [2010]:, “A two-model adaptive finite element method for plates”, preprint 2010:45, University of Gothenburg
- [27] HEINTZ, D. [2008]: “Model adaptivity in elasticity”, PhD thesis Chalmers University of Technology and University of Gothenburg
- [28] HERNÁNDEZ, J.A.; OLIVER, J.; HUESPE, A.E.; CAICEDO, M.A.; CANTE, J.C. [2014]: “High-performance model reduction techniques in computational multiscale homogenization”, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 276, 149-189
- [29] HUGHES, T. J. R. [1987]: “The Finite Element Method: Linear Static and Dynamic Finite Element Analysis”, Prentice Hall
- [30] JOHANSEN, L. [2009]: “Failure optimization of geometrically linear/nonlinear laminated composite structures using a two-step hierarchical model adaptivity”, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 198, 2421-2438
- [31] KERFRIDEN, P.; GOSSELET, P.; ADHIKARI, S.; BORDAS, S.P.A. [2011]: “Bridging proper orthogonal decomposition methods and augmented Newton-Krylov algorithms: An adaptive model order reduction for highly nonlinear mechanical problems”, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 200, 850-866
- [32] KUHL, E.; RAMM, E. [1999]: “Simulation of strain localization with gradient enhanced damage models”, *Computational Materials Science* 16, 176-185
- [33] LARSSON, F. [2006]: “Adaptive computational meso-macro-scale modeling of elastic composites”, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 195, 324-338
- [34] LEMAITRE, J.; DESMORAT R. [2005]: “Engineering Damage Mechanics”, Springer

- [35] LIAN, Y.P.; ZHANG, X.; LIU, Y. [2012]: “An adaptive finite element material point method and its application in extreme deformation problems”, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 241-244, 275-285
- [36] CHAMOIN, L.; DESVILLETES, L. [2013]: “Control of modeling errors in the coupling of linear transport and diffusion models”, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 261-262, 83-95
- [37] MEIDNER, D.; VEXLER, B. [2007]: ”Adaptive space-time finite element methods for parabolic optimization problems”, *SIAM J. control. optim.* Vol. 46, No. 1, pp. 116-142
- [38] MEIDNER, D. [2008]: “Adaptive space-time finite element methods for optimization problems governed by nonlinear parabolic systems”, Dissertation Universität Heidelberg
- [39] MENG, X.N.; LAURSEN, T.A. [2002]: “Energy consistent algorithms for dynamic finite deformation plasticity”, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 191, 1639-1675
- [40] MENZEL, A. [2007]: “Frontiers in inelastic continuum mechanics”, Habilitationsschrift TU Kaiserslautern
- [41] MENZEL, A.; STEINMANN, P. [2001]: “A theoretical and computational framework for anisotropic continuum damage mechanics at large strains”, *Int. J. Solids Structures* 38, 9505-9523
- [42] MENZEL, A.; STEINMANN, P. [2001]: “On the comparison of two strategies to formulate orthotropic hyperelasticity”, *Journal of Elasticity* 62, 171-201
- [43] MIRABELLA, L. [2011]: “An a posteriori error estimator for model adaptivity in electrocardiology”, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 200, 2727-2737
- [44] MOHR, R.; STEINMANN, P. [2008]: “Consistent time-integration of finite elasto-plastodynamics”, Dissertation TU Kaiserslautern
- [45] MOSLER, J. [2010]: “Variationally consistent modeling of finite strain plasticity theory with non-linear kinematic hardening”, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 199, 2753-2764
- [46] MÜLLER, B. [2014]: “Mixed Least Squares Finite Element Methods Based on Inverse Stress - Strain Relations in Hyperelasticity”, Dissertation Universität Duisburg-Essen
- [47] ODEN, J.T.; PRUDHOMME, S. [2002]: “Estimation of Modeling error in computational mechanics”, *J. Comp. Phys.* 182, 496-515
- [48] ODEN, J.T.; PRUDHOMME, S.; HAMMERAND, D.C.; KUCZMA, M.S. [2001]: “Modeling error and adaptivity in nonlinear continuum mechanics”, *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* 190, 6663-6684
- [49] ODEN, J.T. [2006]: “Multiscale modeling of physical phenomena: adaptive control of models”, *SIAM J. Sci. Comput.* Vol. 28, No. 6, pp. 2359-2389
- [50] VAN OPSTAL, T.M.; BAUMAN, P.T.; PRUDHOMME, S.; VAN BRUMMELEN, E.H. [2015]: “Goal-oriented model adaptivity for viscous incompressible flows”, *Comp. Mech.* Volume 55, Issue 6, pp 1181-1190
- [51] PRUDHOMME, S.; CHAMOIN, L.; DHIA, H.B.; BAUMAN, P.T. [2009]: “An adaptive strategy for the control of modeling error in two-dimensional atomic-to-continuum coupling simulations”, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 198, 1887-1901
- [52] PEERLINGS, R.; DE BORST, R.; BREKELMANS, W.; DE VREE, J. [1996]: “Gradient enhanced damage for quasi-brittle materials”, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 39, 3391-3403

- [53] PESZYŃSKA, M. [2010]: “Adaptive modeling of methane hydrates”, *Procedia Computer Science* 00 1-10
- [54] RANK E.; DÜSTER, A.; NÜBEL V.; PREUSCH, K.; BRUHNS, O.T. [2005]: “High order finite elements for shells”, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 194, 2494-2512
- [55] RANK, E.; SCHOLZ, D.; DÜSTER, A. [2005] “Model-adaptive fluid-structure interaction using high order structural elements”, *Int. Conf. on Computational Methods for Coupled Problems in Science and Engineering*
- [56] REPIN, S.; SAUTER, S.A. [2010]: “Estimates of the modeling error for the Kirchhoff-Love plate model”, *C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I* 348, 1039-1043
- [57] RÜTER, M. [2006]: “Goal-oriented a posteriori error estimates in linear elastic fracture mechanics”, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 196, 251-278
- [58] SANSOUR, C.; KARSAY, I.; SORIC, J. [2007]: “On anisotropic flow rules in multiplicative elastoplasticity at finite strains”, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 196, 1294-1309
- [59] SCHRÖDER, J.; GRUTTMANN, F.; LÖBLEIN, J. [2002]: “A simple orthotropic finite elastoplasticity model based on generalized stress-strain measures”, *Comput. Mech.* 30, 48-64
- [60] SIMÓ, J. [1998]: “Numerical Analysis and Simulation of Plasticity” in: P. G. Ciarlet and J.L. Lions (Editors): *Handbook of Numerical Analysis (Volume VI)*, North Holland
- [61] SIMÓ, J., RIFAI, M. [1998]: “A class of mixed assumed strain methods and the method of incompatible modes”, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol 29, 1595-1638
- [62] SOYARSLAN, C.; TEKKAYA, A.E. [2010]: “Finite deformation plasticity coupled with isotropic damage: Formulation in principal axes and applications”, *Finite Elements in Analysis and Design* 46, 668-683
- [63] STEIN, E.; OHNIMUS, S. [1996]: “Dimensional adaptivity in linear elasticity with hierarchical test-spaces for h- and p-refinement processes”, *Engineering with Computers* 12: 107-119
- [64] STEIN, E.; OHNIMUS, S. [1999]: “Anisotropic discretization- and model-error estimation in solid mechanics by local Neumann-problems”, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 176, 363-385
- [65] STEIN, E.; RÜTER, M.; OHNIMUS, S. [2011]: “Implicit upper bound error estimates for combined expansive model and discretization adaptivity”, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 200, 2626-2638
- [66] STEINMANN, P. [1998]: “A model adaptive strategy to capture strong discontinuities at large inelastic strains”, *Comput. Mech.*
- [67] TAYLOR, G. I. [1938], *J. Inst. Metals* 62, 307
- [68] TRUESDELL, C.; NOLL, W. [1992]: “The non-linear field theories of mechanics”, Springer, Berlin Heidelberg New York
- [69] ULZ, M. [2009]: “A Green-Naghdi approach to finite anisotropic rate-independent and rate-dependent thermo-plasticity in logarithmic Lagrangean strain-entropy space”, Dissertation Technische Universität Graz
- [70] VERNEREY, F.J.; KABIRI, M. [2014]: “Adaptive concurrent multiscale model for fracture and crack propagation in heterogeneous media”, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 276, 566-588

- [71] WAFFENSCHMIDT, T.; POLINDARA, C.; MENZEL, A.; BLANCO, S. [2014]: “A gradient-enhanced large-deformation continuum damage model for fibre-reinforced materials“, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 268, 801-842
- [72] WOOD, W.L. [1990]: “Practical Time-stepping Schemes”, Oxford University Press
- [73] YIN Q. AT AL. [2012]: “A cyclic twin bridge shear test for the identification of kinematic hardening parameters”, *Int. J. Mech. Sci.*
- [74] ZBOINSKI, G.[2013]: “Adaptive hpq finite element methods for the analysis of 3D-based models of complex structures. Part 2. A posteriori error estimation”, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 267 531-565