

Phasenfeldmodellierung mechanisch getriebener Grenzflächenbewegungen in mehrphasigen Systemen

Zur Erlangung des akademischen Grades
Doktor der Ingenieurwissenschaften
der Fakultät für Maschinenbau
Karlsruher Institut für Technologie (KIT)

genehmigte
Dissertation

von

Dipl.-Phys. Daniel Schneider

Tag der mündlichen Prüfung:
Hauptreferent:
Korreferent:

14. Dezember 2016
Prof. Dr. rer. nat. Britta Nestler
Prof. Dr.-Ing. habil. Thomas Böhlke



Dieses Werk ist lizenziert unter einer Creative Commons Namensnennung –
Weitergabe unter gleichen Bedingungen 3.0 Deutschland Lizenz
(CC BY-SA 3.0 DE): <http://creativecommons.org/licenses/by-sa/3.0/de/>

Kurzfassung

Auf der Phasenfeldmethode basierende numerische Verfahren zur Modellierung der mikrostrukturellen Evolution haben sich zu einem unentbehrlichen Werkzeug in der Materialwissenschaft und Physik entwickelt. Die Modelle arbeiten in der Regel auf der mesoskopischen Längenskala und liefern durch Abbildung der Grenzflächenbewegung wichtige Informationen zu strukturellen Veränderungen in Materialien. Die spezielle Gebietsparametrisierung der Methode erschwert jedoch das Erfüllen von Sprungbedingungen und die Formulierung der treibenden Kräfte an den Grenzflächen, da sich die scharfe Grenzfläche über einen volumetrischen Bereich erstreckt. In der vorliegenden Arbeit werden lokale Homogenisierungsmethoden für mechanische Materialparameter untersucht und Verfahren vorgestellt, die die Erfüllung der Sprungbedingungen an den diffus parametrisierten Grenzflächen garantieren und die mechanischen Konfigurationskräfte abbilden. Es werden Methoden für infinitesimale sowie für finite Deformationen vorgestellt und am Beispiel des martensitischen Phasenumwandlungsprozesses angewendet. Zu den mechanisch getriebenen Grenzflächenbewegungen zählt auch die Ausbreitung und Entstehung von Rissen. Zur Untersuchung dieser Prozesse wird ein Multiphasenfeldmodell vorgestellt, das die Modellierung der Rissausbreitung in polykristallinen Materialien gekoppelt mit einem Phasenumwandlungsprozess ermöglicht. Dieses Modell wird auf ein polykristallines Material angewendet und dabei der Einfluss des heterogenen Risswiderstands sowie der Grenzflächenenergie zwischen den Festphasen auf den resultierenden Risspfad demonstriert.

Abstract

Computational models based on the phase-field method have become an indispensable tool for modeling the microstructural evolution in material science and physics. The models typically operate on a mesoscopic length scale and provide through describing the interface motion valuable information about structural changes in materials. The specific parametrization method of the model complicates to satisfy the jump conditions and the formulation of the driving forces at the interfaces, since the sharp interface is stretched over a volumetric region. In the present work local homogenization methods of mechanical material parameters are analyzed and a method is presented that guarantee the fulfillment of the mechanical jump conditions and reflects the mechanical configuration forces at diffuse parameterized interfaces. Methods for infinitesimal and for finite deformations are presented and applied to the martensitic phase transformation process. The mechanically driven interface motion also include the propagation and development of cracks. For the study of these processes a multiphase field model is presented to study the crack propagation in polycrystalline materials coupled with a phase transformation process. The model is applied to a polycrystalline material and the influence of a heterogeneous crack resistance and the interfacial energy between the solid phases on the resulting crack path is demonstrated.

Danksagung

Zunächst möchte ich mich bei Prof. Dr. rer. nat. Britta Nestler für die Betreuung der Promotion, für die spannenden Diskussionen und Impulse, für das große Vertrauen und für die Freiheiten, die ich während der Promotionszeit genießen konnte, bedanken. Ebenso bedanke ich mich bei Prof. Dr.-Ing. habil. Thomas Böhlke für die fruchtbare Zusammenarbeit, für die wertvollen Anregungen und selbstverständlich für die Übernahme des Korreferats.

Der Deutschen Forschungsgesellschaft danke ich für die finanzielle Unterstützung während der Promotionszeit.

Ich bedanke mich bei allen meinen Kollegen für die zahlreichen interessanten Diskussionen, die für mich außerordentlich wichtig beim Entwickeln von Lösungsansätzen waren und sind. Für die Hilfsbereitschaft bei komplexeren Programmieraufgaben bedanke ich mich insbesondere bei M. Selzer, M. Berghoff, A. Reiter und M. Reichert. Bei M. Berghoff bedanke ich mich für die vielen hilfreichen \LaTeX -Vorlagen und insbesondere für die wertvolle Vorlage, die dieser Arbeit zugrunde liegt. Für die enge Zusammenarbeit und für die Hilfestellungen in der Endphase der Promotion sowie für die Parameteridentifikation bei der Durchführung der Simulationsstudien zur martensitischen Transformation möchte ich mich besonders bei meinem Kollegen E. Schoof bedanken. Ich danke auch meinen Kollegen insbesondere L. Geisen für die freundliche Unterstützung beim Korrekturlesen dieser Arbeit

Ich danke von Herzen meiner Familie für die Unterstützung, für den Zuspruch und die Motivation während der Promotionszeit. Ganz besonders danke ich meiner Frau Elena und meiner Tochter Zoe für die Liebe, für die Geduld, für das Verständnis und die Zeit, die ich mir zum Zusammenschreiben dieser Arbeit nehmen konnte.

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	1
2. Ausgewählte kontinuumsmechanische und numerische Grundlagen	3
2.1. Terminologie und Notation	3
2.2. Kinematik	4
2.3. Bilanzgleichung auf regulären Punkten und singulären Flächen	6
2.3.1. Bilanz der Massen	7
2.3.2. Impuls- und Drehimpulsbilanz	8
2.3.3. Energiebilanz	10
2.3.4. Entropiebilanz und die Clausius-Duhem Ungleichung	11
2.3.5. Kinematische Kompatibilitätsbedingung	12
2.4. Hyperelastizität	13
2.4.1. Gleichgewichtsbedingung der Formänderungsenergie-dichte in regulären Punkten	13
2.4.2. Energie-Impuls-Tensor der Elastostatik	15
2.4.3. Leistungskonjugierte Verzerrungs- und Spannungsmaße	16
2.4.4. Bilanz der Konfigurationskräfte	17
2.5. Geometrische Linearisierung	19
2.5.1. Reduktion auf zwei Dimensionen	22
2.6. Plastizitätstheorie für infinitesimale Deformationen	22
2.6.1. Fließfunktion und Verfestigung	23
2.6.2. Fließregel	23
2.6.3. Return-Mapping-Algorithmus	24
2.7. Finite-Differenzen-Methode	25
2.7.1. Diskretisierung	26
3. Phasenfeldmethode zur Modellierung der Mikrostrukturevolution mehrphasiger Systeme	29
3.1. Multiphasenfeldmodell	29
3.1.1. Evolutionsgleichungen der Ordnungsparameter für das Multiphasenfeldmodell	33
3.1.2. Reduktion auf ein binäres System	36
3.1.3. Gleichgewichtsprofil der Ordnungsparameter und die resultierende Grenzflächenenergie	36
3.1.4. Bilanz der Konfigurationskräfte Im Phasenfeldkontext	38
4. Mechanisches Multiphasenfeldmodell für infinitesimale Deformationen	41
4.1. Literaturüberblick der Homogenisierungsansätze zur Berechnung der Spannung im Übergangsbereich	42

4.2.	Folgerungen der Homogenisierungsmethoden auf die Evolutionsgleichung der Ordnungsparameter	46
4.3.	Binäres Phasenfeldmodell basierend auf mechanischen Sprungbedingungen	51
4.3.1.	Kontinuierliche Variablen	52
4.3.2.	Mechanische Konfigurationskräfte im Phasenfeldkontext	54
4.3.3.	Berechnung der effektiven Materialparameter	58
4.3.4.	Ergänzung der inelastischen Dehnungsanteile	59
4.3.5.	Berechnung der Spannungen	60
4.4.	Validierung des Modells	62
4.4.1.	Serielle und parallele materielle Kette	62
4.4.2.	Validierung der Spannungsberechnung in einem zweidimensionalen System	64
4.4.3.	Validierung der treibenden Kraft über den Gibbs-Thomson-Effekt	66
4.5.	Erweiterung des Modells auf Anwendungen in polykristallinen Systemen	67
4.5.1.	Bestimmung des effektiven Normalenvektors	68
4.5.2.	Bestimmung des Potentials und der Spannungen in polykristallinen Systemen	69
4.6.	Validierung des Modells in einem Mehrphasengebiet	71
4.7.	Anwendungsbeispiel: Martensittransformation in einem Mehrkorngebiet	73
4.8.	Charakterisierung des Phasenfeldmodells für den martensitischen Phasenumwandlungsprozess	74
4.8.1.	Martensitbildung in einem Vielkornsystem	75
5.	Berechnung der plastischen Dehnungen im Phasenfeldkontext	79
5.1.	Ansatz zur Berechnung der phasenanteiligen plastischen Dehnungen	80
5.2.	Berechnung der plastischen Dehnungen aus den lokal homogenisierten Spannungen	82
5.3.	Vergleich der Ansätze zur Berechnung der plastischen Dehnungen	83
5.4.	Einfluss von Inhomogenitäten auf die mechanischen Eigenschaften von Materialien	84
6.	Mechanisches Multiphasenfeldmodell für finite Deformationen	87
6.1.	Das Multiphasenfeldmodell in der Eulerschen Darstellung	88
6.2.	Berechnung der Spannungen im Übergangsbereich unter Berücksichtigung der Sprungbedingungen	89
6.2.1.	Spannungsberechnung im Übergangsbereich zweier Phasen	90
6.2.2.	Spannungsberechnung in einem Multiphasensystem	92
6.2.3.	Berechnung von Grenzflächennormalenvektoren im Multiphasenbereich	95
6.3.	Validierung der Spannungsberechnung	96
6.3.1.	Validierung des Modells über eindimensionale Sonderfälle	96
6.3.2.	Vergleich mit theoretischen Vorhersagen	97
6.3.3.	Validierung der Spannungsberechnung in mehrphasigen Bereichen	99
6.3.4.	Deformation eines Multiphasensystems und Konvergenzverhalten des Newtonschen Verfahrens	101
6.4.	Mechanische Konfigurationskräfte im Phasenfeldkontext	103
6.4.1.	Mechanischer Beitrag zur Evolutionsgleichung im Zweiphasenfall	103
6.4.2.	Mechanische treibende Kräfte im Multiphasensystem	105
6.5.	Simulationsbeispiel: Martensitische Transformation	106

7. Modellierung der Rissausbreitung mit der Phasenfeldmethode	109
7.1. Ausgewählte Grundlagen der linear elastischen Bruchmechanik	110
7.1.1. Rissspitzenfeld	111
7.1.2. Das Griffithsche Kriterium für Rissfortschritt	113
7.1.3. J-Integral	113
7.2. Literaturüberblick der Phasenfeldansätze zur Modellierung der Rissausbreitung . .	114
7.2.1. Physikalische Modellansätze	114
7.2.2. Mechanische Modellansätze	116
7.2.3. Vergleich des Einmuldenpotentials mit dem Zweimuldenpotential	119
7.3. Phasenfeldmodell für Rissausbreitung basierend auf der Ginzburg-Landau-Theorie mit Anwendungen	121
7.3.1. Validierung des Rissspitzenfeldes	123
7.3.2. Rissausbreitung in Gläsern unter Wasserdruck	125
7.3.3. Einfluss der plastischen Zone an der Rissspitze	127
7.4. Zweiphasenmodell für die Beschreibung der Rissausbreitung mit einem Einzelhin- dernispotential	130
7.4.1. Einfluss der Krümmung auf das Griffithsche Kriterium	132
7.5. Validierung des Modells in einem Zweiphasensystem	135
7.6. Multiphasenfeldmodell für Rissausbreitung basierend auf der Griffithschen Theorie	136
7.7. Rissausbreitung in polykristallinen Materialien	138
7.7.1. Einfluss einer horizontalen Grenzfläche auf die Rissausbreitung	139
7.7.2. Rissausbreitung im polykristallinen System	141
7.7.3. Einfluss der Grenzflächenenergie auf den effektiven energetischen Risswi- derstand und den resultierenden Risspfad	141
8. Zusammenfassung und Ausblick	145
A. Anhang	149
A.1. Transformationsmatrizen	149
A.2. Berechnung der Koeffizientenmatrix für das Newtonsche Verfahren in Abschnitt 6.2.2	150
A.3. Erweiterung des Modells aus Abschnitt 4.3 für Anwendungen mit finiten Defor- mationen	151
A.3.1. Berücksichtigung der inelastischen Dehnungen	154
A.4. Methode der komplexen Spannungsfunktionen	156
A.4.1. Abbildungsfunktion	158
A.4.2. Das Rissspitzenfeld einer Platte mit halbelliptischer Kerbe	159
Abbildungsverzeichnis	164
Symbol- und Abkürzungsverzeichnis	165
Literatur	169

1

Einleitung

Die Mikrostruktur der meisten Materialien besteht aus Körnern oder Domänen, die sich in ihrer Struktur, in ihrer Orientierung und in ihrer chemischen Zusammensetzung unterscheiden. Sowohl die Evolution dieser Körner oder Domänen als auch die daraus resultierende heterogene Mikrostruktur, inklusive möglicher Defekte, haben einen entscheidenden Einfluss auf die physikalischen und mechanischen Eigenschaften von Materialien [1–3]. Daher ist das Verständnis der Mechanismen, die für die Bildung und Evolution der Mikrostruktur und der Defekte in Materialien verantwortlich sind, in der Materialwissenschaft von großer Wichtigkeit. Allerdings ist die Bewegung von Grenzflächen ein komplizierter Prozess, bei dem unterschiedliche physikalische Kräfte einen Einfluss haben. Die Phasenfeldmethode bietet hervorragende Eigenschaften, nicht nur zur akkuraten Abbildung der Grenzflächenbewegung, sondern auch zur Kopplung unterschiedlichster treibender Kräfte, die für die Bewegung verantwortlich sind. Daher hat sich diese Methode bei der Modellierung von mikrostrukturellen Evolutionsprozessen, wie Erstarrung, fest-fest Phasenumwandlung, Wachstum und Vergrößerung von Ausscheidungen, Kornwachstum, aber auch von Rissausbreitung etabliert [2, 4]. Typisch für die Phasenfeldmethode ist ein diffuser Übergangsbereich zwischen den physikalisch abgetrennten Regionen. Dies ersetzt die explizite Grenzflächenverfolgung [1, 5], verhindert die Bildung von großen Gradienten in den physikalischen Feldern, die zu Instabilitäten führen können, und macht großskalige mikrostrukturelle Simulationen unter Berücksichtigung der Evolution von Grenzflächen rechnerisch handhabbar [5].

Im Phasenfeldkontext werden die physikalisch abgetrennten Regionen Phasen genannt. Da es sich bei den Phasen sowohl um Fest-, Flüssig- oder Gasregionen handeln kann, werden Gebiete mit mehreren physikalisch abgetrennten Regionen in der vorliegenden Arbeit als mehrphasige Systeme bezeichnet. An den Grenzflächen zwischen den Phasen gelten Sprungbedingungen, welche zur Berechnung von Gleichgewichtszuständen physikalischer Felder erfüllt werden müssen. Des Weiteren wirken an den Grenzflächen Konfigurationskräfte, die gegebenenfalls zur Grenzflächenbewegung führen können [6–8]. Die spezielle Gebietsparametrisierung bei der Phasenfeldmethode mit diffusem Übergang zwischen den Phasen erschwert das Erfüllen von Sprungbedingungen und die Formulierung der treibenden Kräfte an den Grenzflächen, da sich die scharfe Grenzfläche über einen volumetrischen Bereich erstreckt [9–11]. Dies sind die ersten beiden Kernpunkte der vorliegenden Arbeit, wobei der Fokus auf den mechanischen Sprungbedingungen und Konfigurationskräften

liegt. Es werden lokale Homogenisierungsmethoden für Materialparameter entwickelt, die garantieren, dass die mechanischen Sprungbedingungen an den diffus parametrisierten Grenzflächen erfüllt werden. Dabei werden Homogenisierungsmethoden für Festphasenübergänge sowohl für infinitesimale als auch für finite Deformationen vorgestellt und die entwickelten Homogenisierungsmethode für Übergänge zwischen Festphasen zu Luft untersucht. Darüber hinaus werden Formulierungen der treibenden Kräfte entwickelt, die die mechanischen Konfigurationskräfte an den Grenzflächen reflektieren. Zur mechanisch getriebenen Grenzflächenbewegungen zählt auch die Ausbreitung und Entstehung von Rissen in Materialien. Die Modellierung der Rissausbreitung in mehrphasigen Systemen mithilfe der Phasenfeldmethode ist ein weiterer Kernpunkt der vorliegenden Arbeit. Daher wurde der Titel dieser Arbeit als *”Phasenfeldmodellierung mechanisch getriebener Grenzflächenbewegungen in mehrphasigen Systemen”* gewählt.

Gliederung der Arbeit

Die vorliegende Arbeit gliedert sich in acht Kapitel. Das Einleitungskapitel definiert die Kernpunkte der Arbeit. In Kapitel 2 werden die notwendigen Grundlagen der Kontinuumsmechanik sowie die verwendeten Methoden der numerischen Mathematik eingeführt. Des Weiteren werden in diesem Kapitel mechanische treibende Kräfte auf Grenzflächen gemäß der Vorarbeiten von Eshelby [12], Johnson [7] und Gurtin [8] hergeleitet. Kapitel 3 befasst sich mit der Phasenfeldmethode. Hier wird das verwendete Multikomponenten- und Multiphasenfeldmodell von Nestler et al. [13] vorgestellt, die notwendigen Eigenschaften dieses Modells für die weiteren Kapitel abgeleitet und die Verbindung zu scharfen Grenzflächenmodellen hergestellt. In Kapitel 4 wird nach einer Untersuchung der bekannten Techniken zur Berechnung effektiver Materialparameter eine lokale Homogenisierungsmethode vorgestellt, welche die mechanischen Sprungbedingungen im scharfen Grenzflächenkontext erfüllt. Darüber hinaus werden in diesem Kapitel die mechanischen treibenden Kräfte im Phasenfeldkontext abgeleitet und es wird gezeigt, dass diese im scharfen Grenzflächenkontext den mechanischen Konfigurationskräften entsprechen. Diese Methoden werden sowohl für Zweiphasen- als auch für Mehrphasensysteme hergeleitet, validiert und auf den martensitischen Phasenumwandlungsprozess angewendet. Ein notwendiger Bestandteil des mechanischen Materialverhaltens sind Plastifizierungseffekte. Für die Untersuchung dieser Effekte werden in Kapitel 5 Techniken zur Berechnung der plastischen Dehnungen im Phasenfeldkontext vorgestellt. Kapitel 6 befasst sich mit der Modellierung der Grenzflächenbewegung bei finiten Deformationen. Hier wird eine implizite Methode zur Erfüllung der mechanischen Sprungbedingungen an den Grenzflächen vorgestellt, validiert und ebenfalls auf den martensitischen Phasenumwandlungsprozess angewendet. Die Modellierung der Rissausbreitung wird in Kapitel 7 beschrieben. Nach einer Untersuchung der bekannten Modelle zur Modellierung der Rissausbreitung unter Verwendung der Phasenfeldmethode wird eine neue Methode zur Modellierung der Rissausbreitung in mehrphasigen Systemen vorgestellt, validiert und auf die Modellierung der Rissausbreitung in polykristallinen Gefügen angewendet. In Kapitel 8 werden die Ergebnisse zusammengefasst und ein Ausblick gegeben.

2

Ausgewählte kontinuumsmechanische und numerische Grundlagen

Ziele dieses Kapitels sind es, die notwendigen Grundlagen der Kontinuumsmechanik sowie die verwendeten Methoden der numerischen Mathematik für die nachfolgenden Kapitel einzuführen und die mechanischen treibenden Kräfte auf Inhomogenitäten, die für die Bewegung der Grenzflächen verantwortlich sind, abzuleiten. Versetzungen, Leerstellen, Hohlräume, Risse aber auch Einschlüsse in einem Medium sind Beispiele für solche Inhomogenitäten. J. D. Eshelby studierte die Evolution der Inhomogenitäten in elastischen Medien und führte 1975 einen Tensor ein, der die wirkenden Kräfte auf Inhomogenitäten abbildet [12]. Dieser Tensor ist in der Literatur als Energie-Impuls-Tensor der Elastostatik bekannt.

Zunächst werden in diesem Kapitel die Terminologie und Notation notiert. Anschließend werden die nötigen kinematischen Größen in Abschnitt 2.2 definiert und in Abschnitt 2.3 die kinematischen Bilanzgleichungen in regulären Punkten und auf singulären Flächen abgeleitet. In Abschnitt 2.4 wird der Energie-Impuls-Tensor der Elastostatik eingeführt. Danach wird die Bilanz der Konfigurationskräfte abgeleitet und anschließend der Zusammenhang zwischen dem Energie-Impuls-Tensor und den treibenden Kräften auf Singularitäten herausgearbeitet. In Abschnitt 2.5 wird die Linearisierung der gewonnenen Zusammenhänge für die Anwendung bei infinitesimalen Deformationen durchgeführt und die verwendeten Ansätze der Plastizitätstheorie vorgestellt. Im letzten Abschnitt dieses Kapitels wird die Finite-Differenzen-Methode zum Lösen partieller Differentialgleichungen eingeführt.

2.1. Terminologie und Notation

Die vorliegende Arbeit hält sich an die Terminologie und Notation von Truesdell und Noll [14]. Außerdem wird die Einsteinsche Summenkonvention verwendet, d. h. es wird über doppelt vorkommenden Indizes summiert.

Skalare werden nicht hervorgehoben, dagegen werden *Vektoren* und *Punkte* fett geschrieben ($\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{p}, \mathbf{P}$ sind Beispiele für Vektoren und Punkte). Das innere Produkt (engl. *inner product*), auch skalares Produkt genannt, wird durch einen (\cdot) , wie bei $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$, gekennzeichnet. Damit lässt sich der *Betrag* eines Vektors folgendermaßen angeben $|\mathbf{a}| = \sqrt{\mathbf{a} \cdot \mathbf{a}}$. Mittels des *Levi-Civita-Symbols*

$$\varepsilon_{ijk} = \begin{cases} 1, & \text{bei zyklischen Permutationen der Indizes,} \\ -1, & \text{bei antizyklischen Permutationen der Indizes,} \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

wird das *Kreuzprodukt* zweier Vektoren mit kartesischen Komponenten definiert durch $(\mathbf{a} \times \mathbf{b})_i = \varepsilon_{ijk} a_j b_k$. *Tensoren* sind lineare Abbildungen von Vektoren auf Vektoren und werden groß und fett geschrieben. Außerdem können griechische fettgedruckte Buchstaben ebenfalls Tensoren darstellen ($\mathbf{A}, \mathbf{B}, \boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\varepsilon}$ sind Beispiele für Tensoren). Das *dyadische Produkt* $\mathbf{a} \otimes \mathbf{b}$ (engl. *outer product*) zweier Vektoren ist ein Tensor definiert durch

$$(\mathbf{a} \otimes \mathbf{b})\mathbf{u} = (\mathbf{b} \cdot \mathbf{u})\mathbf{a},$$

für beliebige Vektoren \mathbf{u} . Bildet eine lineare Abbildung einen Vektor auf sich selbst ab, so wird diese als *Einheitstensor* \mathbf{I} bezeichnet. \mathbf{A}^\top , $\text{sp}(\mathbf{A})$, \mathbf{A}^{-1} und $\det(\mathbf{A})$ sind die *Transponierte*, *Spur*, *Inverse* und *Determinante* von \mathbf{A} . Das skalare Produkt zweier Tensoren ist definiert durch $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = \text{sp}(\mathbf{A}^\top \mathbf{B})$. Damit lässt sich die Norm eines Tensors durch $|\mathbf{A}| = \sqrt{\mathbf{A} \cdot \mathbf{A}}$ angeben. Außerdem werden folgende Identitäten notiert:

$$\mathbf{u} \cdot (\mathbf{A}\mathbf{v}) = (\mathbf{A}^\top \mathbf{u}) \cdot \mathbf{v}$$

für beliebige Vektoren \mathbf{u} und \mathbf{v} sowie

$$\mathbf{U} \cdot (\mathbf{A}\mathbf{V}) = (\mathbf{A}^\top \mathbf{U}) \cdot \mathbf{V} \tag{2.1}$$

für beliebige Tensoren \mathbf{U} und \mathbf{V} . Tensoren vierter Stufe werden groß, fett und in kalligraphischer Schrift geschrieben (\mathcal{C} oder \mathcal{S} sind Beispiele für Tensoren vierter Stufe). Die Multiplikation eines Tensors vierter Stufe mit einem Tensor zweiter Stufe wird durch $(\mathcal{C}[\mathbf{E}])_{ij} = \mathcal{C}_{ijkl} E_{kl}$ angegeben.

2.2. Kinematik

Betrachtet wird die Bewegung einer dreidimensionalen *Mannigfaltigkeit*, eine Menge an materiellen Punkten, die auch als *Körper* bezeichnet wird, im euklidischen Raum. Zum Zeitpunkt $t = 0$ befindet sich der Körper in der *Anfangsplatzierung* oder *Bezugsplatzierung*. Verschiebt sich der Körper zum Zeitpunkt $t > 0$ aus der Ruhelage, so befindet er sich in der *Momentanplatzierung*. Die zugehörigen Ortsvektoren der materiellen Punkte werden in der Anfangsplatzierung als \mathbf{X} und in der Momentanplatzierung als \mathbf{x} bezeichnet. Die Funktion $\chi(\mathbf{X}, t)$ beschreibt die Bewegung der Punkte von der Bezugsplatzierung zu der Momentanplatzierung, folglich ist

$$\mathbf{x} = \chi(\mathbf{X}, t). \tag{2.2}$$

Die Umkehrfunktion $\chi^{-1}(\mathbf{x}, t) = \boldsymbol{\xi}(\mathbf{x}, t)$ der stetigen Funktion χ beschreibt die inverse Bewegung von der Momentanplatzierung zur Anfangsplatzierung, daher gilt

$$\mathbf{X} = \boldsymbol{\xi}(\mathbf{x}, t) = \chi^{-1}(\mathbf{x}, t). \tag{2.3}$$

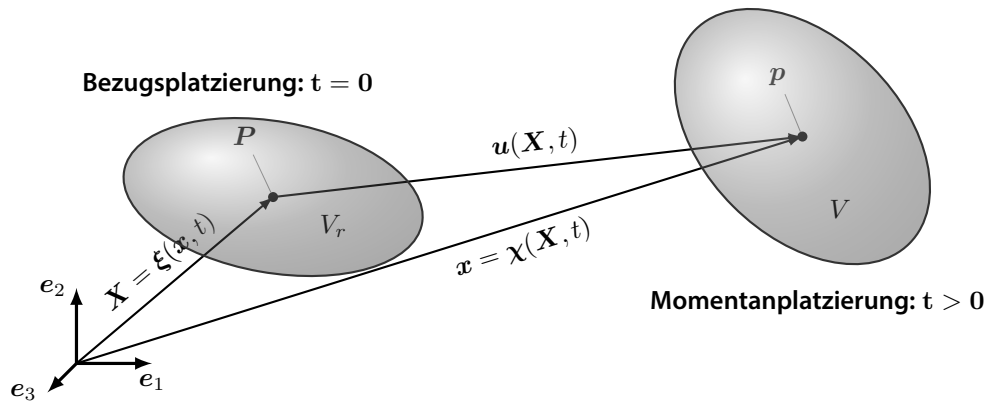


Abbildung 2.1.: Bewegung der materiellen Punkte im euklidischen Raum.

In der Anfangsplatzierung wird das Volumen eines Körpers als V_r und in der Momentanplatzierung als V gekennzeichnet. Die Differenz der zugehörigen Vektoren eines materiellen Punktes zum Anfangszeitpunkt $t = 0$ und zum momentanen Zeitpunkt $t > 0$ wird als *Verschiebung*

$$\mathbf{u} = \boldsymbol{\chi}(\mathbf{X}, t) - \mathbf{X} = \mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}(\mathbf{x}, t)$$

bezeichnet. Dieser Zusammenhang wird in Abbildung 2.1 verdeutlicht.

Wird eine Feldgröße $\psi_L(\mathbf{X}, t)$ bezüglich der Anfangsplatzierung ausgedrückt, so bezeichnet man dies als die *Lagrangesche Darstellung*. Dagegen ist $\psi_E(\mathbf{x}, t)$ die Beschreibung der Feldgröße ψ in der *Eulerschen Darstellung*. Unter Anwendung der stetigen Funktionen (2.2) und (2.3) folgt für die Umrechnung der Feldgrößen

$$\psi_L(\mathbf{X}, t) = \psi_L(\boldsymbol{\xi}(\mathbf{x}, t), t), \quad \psi_E(\mathbf{x}, t) = \psi_E(\boldsymbol{\chi}(\mathbf{X}, t), t).$$

Auch die *materielle Zeitableitung* der Feldgröße ψ lässt sich in der Lagrangeschen oder Eulerschen Darstellung ausdrücken

$$\begin{aligned} \dot{\psi}_L(\mathbf{X}, t) &= \frac{\partial \psi_L(\mathbf{X}, t)}{\partial t} = \frac{\partial \psi_L(\boldsymbol{\xi}(\mathbf{x}, t), t)}{\partial t} + \frac{\partial \psi_L(\boldsymbol{\xi}(\mathbf{x}, t), t)}{\partial \mathbf{x}} \cdot \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t}, \\ \dot{\psi}_E(\mathbf{x}, t) &= \frac{\partial \psi_E(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \frac{\partial \psi_E(\mathbf{x}, t)}{\partial \mathbf{x}} \cdot \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t} = \frac{\partial \psi_E(\boldsymbol{\chi}(\mathbf{X}, t), t)}{\partial t}. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Der erste Term der Zeitableitung in der Eulerschen Darstellung $\partial \psi_E(\mathbf{x}, t) / \partial t$ ist die lokale Änderung und der zweite Term $\partial \psi_E(\mathbf{x}, t) / \partial \mathbf{x} \cdot \partial \mathbf{x} / \partial t$ die konvektive Änderung von ψ_E . Damit lassen sich die *Geschwindigkeit* $\mathbf{v} = \dot{\mathbf{x}}$ und die *Beschleunigung*

$$\mathbf{a}(\mathbf{x}, t) = \dot{\mathbf{v}}(\mathbf{x}, t) = \frac{\partial \mathbf{v}(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{v}(\mathbf{x}, t)}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$$

eines materiellen Punktes einführen.

Der Gradient der Bewegungsfunktion $\boldsymbol{\chi}(\mathbf{X}, t)$ in der Momentanplatzierung ist ein Tensor zweiter Stufe und wird als *Deformationsgradient* bezeichnet

$$\mathbf{F} = \frac{\partial \boldsymbol{\chi}(\mathbf{X}, t)}{\partial \mathbf{X}}. \quad (2.5)$$

In der Eulerschen Darstellung wird der Deformationsgradient entsprechend mit dem Gradienten der inversen Bewegung $\xi(\mathbf{x}, t)$ berechnet. Allerdings ist $\partial\xi(\mathbf{x}, t)/\partial\mathbf{x}$ die inverse Abbildung von der Momentanplatzierung zur Anfangsplatzierung. Daher gilt für den Deformationsgradienten in der Eulerschen Darstellung

$$\mathbf{F} = \left[\frac{\partial\xi(\mathbf{x}, t)}{\partial\mathbf{x}} \right]^{-1}.$$

In der vorliegenden Arbeit werden die rechtsseitigen Ableitungen angewendet, daher ergibt sich mit kartesischen Komponenten für den Deformationsgradienten $F_{ij} = \partial\chi_i/\partial X_j$ und dessen Inverse $F_{ij}^{-1} = \partial\xi_i/\partial x_j$. Für den Gradienten kann auch die Kurzschreibweise $\partial/\partial\mathbf{X} = \nabla_{\mathbf{X}}$ oder entsprechend in der Eulerschen Darstellung $\partial/\partial\mathbf{x} = \nabla_{\mathbf{x}}$ verwendet werden. Ist die benutzte Darstellung klar ersichtlich, so wird nur ∇ für die örtliche Ableitung verwendet.

Die Einführung des Deformationsgradienten über eine stetige Bewegungsfunktion impliziert, dass auch eine Inverse dieser Abbildung existieren muss [15]. Dies bedeutet, dass \mathbf{F} eine reguläre Abbildung ist. Daher existiert eine polare Zerlegung des Deformationsgradienten

$$\mathbf{F} = \mathbf{R}\mathbf{U} = \mathbf{V}\mathbf{R}. \tag{2.6}$$

Dabei beschreiben $\mathbf{U} = \sqrt{\mathbf{F}^T\mathbf{F}}$ und $\mathbf{V} = \sqrt{\mathbf{F}\mathbf{F}^T}$ die Streckung eines Volumenelementes und werden als der *rechte* und der *linke Strecktensor* bezeichnet. $\mathbf{R} = \mathbf{F}\mathbf{U}^{-1} = \mathbf{V}^{-1}\mathbf{F}$ ist der orthogonale Anteil von \mathbf{F} und beschreibt die mittlere Rotation eines Volumenelementes [15]. Des Weiteren lässt sich der Deformationsgradient in einen Gestaltänderungsanteil $\bar{\mathbf{F}} = J^{-\frac{1}{3}}\mathbf{F}$ und in einen Volumenänderungsanteil $J^{\frac{1}{3}}\mathbf{I}$ zerlegen

$$\mathbf{F} = \det(\mathbf{F})^{\frac{1}{3}} \det(\mathbf{F})^{-\frac{1}{3}} \mathbf{F} = J^{\frac{1}{3}} \bar{\mathbf{F}}.$$

Dabei ist $J = \det(\mathbf{F})$ die Determinante von \mathbf{F} . Über die zeitliche Ableitung des Deformationsgradienten

$$\dot{\mathbf{F}} = \frac{\partial\dot{\mathbf{x}}}{\partial\mathbf{X}} = \frac{\partial\dot{\mathbf{x}}}{\partial\mathbf{X}} \frac{\partial\mathbf{x}}{\partial\mathbf{x}} = \frac{\partial\dot{\mathbf{x}}}{\partial\mathbf{x}} \frac{\partial\mathbf{x}}{\partial\mathbf{X}} = \frac{\partial\mathbf{v}}{\partial\mathbf{x}} \mathbf{F}$$

wird der *Geschwindigkeitsgradient* \mathbf{L} eingeführt

$$\mathbf{L} = \dot{\mathbf{F}}\mathbf{F}^{-1} = \frac{\partial\mathbf{v}}{\partial\mathbf{x}} = \nabla_{\mathbf{x}}\mathbf{v}. \tag{2.7}$$

2.3. Bilanzgleichung auf regulären Punkten und singulären Flächen

Für die Herleitung der Bilanzgleichungen wird zunächst das *Reynoldsche Transporttheorem* in der Eulerschen Darstellung gemäß [16] notiert

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{V(t)} \psi_{\mathbf{E}}(\mathbf{x}, t) dV = \int_{V(t)} \frac{\partial\psi_{\mathbf{E}}(\mathbf{x}, t)}{\partial t} dV + \int_{\partial V(t)} \psi_{\mathbf{E}}(\mathbf{x}, t) \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dA. \tag{2.8}$$

Es erlaubt, die Zeitableitung eines Volumenintegrals mit einem zeitabhängigen Volumen $V(t)$ über ein Volumenintegral der lokalen Änderung von $\psi(\mathbf{x}, t)$ und dessen Fluss über den Rand $\partial V(t)$ mit

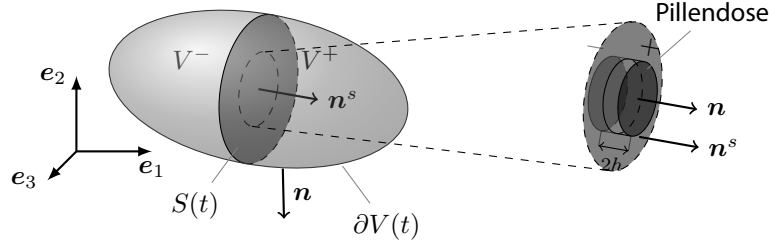


Abbildung 2.2.: Aufteilung des Volumens $V(t)$ in die Teilvolumina V^+ und V^- durch die singuläre Fläche $S(t)$ und Visualisierung des Pillendosenargumentes.

der Normalen \mathbf{n} zu spezifizieren. Des Weiteren wird der Satz von Gauß, dass ein Volumenintegral der Divergenz eines Vektorfeldes $\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{q}(\mathbf{x}, t)$ mit dessen Fluss über den Rand verknüpft [16], notiert

$$\int_{V(t)} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{q}(\mathbf{x}, t) dV = \int_{\partial V(t)} \mathbf{q}(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{n} dA. \quad (2.9)$$

Befindet sich in dem Volumen $V(t)$ eine singuläre Fläche $S(t)$, siehe Abbildung 2.2, wird sowohl das Transporttheorem (2.8) als auch der Gaußsche Satz (2.9) um entsprechende Flussterme durch die Fläche $S(t)$ ergänzt. Mit $[[\psi_E(\mathbf{x}, t)]] = \psi_E^+(\mathbf{x}, t) - \psi_E^-(\mathbf{x}, t)$ als dem Sprung von $\psi_E(\mathbf{x}, t)$ gemäß der Abbildung 2.2 folgt für das verallgemeinerte Transporttheorem

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_{V(t)} \psi_E(\mathbf{x}, t) dV &= \int_{V(t)} \frac{\partial \psi_E(\mathbf{x}, t)}{\partial t} dV + \int_{\partial V(t)} \psi_E(\mathbf{x}, t) \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dA \\ &\quad - \int_{S(t)} [[\psi_E(\mathbf{x}, t)]] \mathbf{v}^s \cdot \mathbf{n}^s dA, \end{aligned} \quad (2.10)$$

mit \mathbf{n}^s als der Normalen auf der singulären Fläche $S(t)$ und \mathbf{v}^s als deren Geschwindigkeit. Entsprechend wird der Satz von Gauß erweitert

$$\int_{V(t)} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{q}(\mathbf{x}, t) dV = \int_{\partial V(t)} \mathbf{q}(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{n} dA - \int_{S(t)} [[\mathbf{q}(\mathbf{x}, t)]] \cdot \mathbf{n}^s dA. \quad (2.11)$$

Wird das Transporttheorem (2.10) oder der Gaußsche Satz (2.11) in der Bezugsplatzierung benötigt, so lassen sich das Volumenelement mittels $dV = JF^{-1}dV_r$ und das Flächenelement mittels der Piola-Transformation

$$\mathbf{n} dA = JF^{-T} \mathbf{n}_r dA_r \quad (2.12)$$

in die Referenzplatzierung überführen (siehe z. B. [15]).

2.3.1. Bilanz der Massen

Die Masse eines Körpers ändert sich nicht in der Zeit. Daher folgt unter Anwendung des verallgemeinerten Transporttheorems (2.10)

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial}{\partial t} \int_{V(t)} \rho(\mathbf{x}, t) dV \\ &= \int_{V(t)} \frac{\partial \rho(\mathbf{x}, t)}{\partial t} dV + \int_{\partial V(t)} \rho(\mathbf{x}, t) \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dA - \int_{S(t)} [[\rho(\mathbf{x}, t)]] \mathbf{v}^s \cdot \mathbf{n}^s dA, \end{aligned} \quad (2.13)$$

mit $\rho(\mathbf{x}, t)$ als Massendichte. Für reguläre Körper verschwindet der Sprung $[[\rho(\mathbf{x}, t)]]$. Unter der Forderung, dass die Gleichung (2.13) für beliebige Volumina $V(t)$ gelten muss, und unter Anwendung des Gaußschen Satzes (2.9) folgt die Bilanz der Masse in regulären Punkten

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\rho(\mathbf{x}, t)\mathbf{v}) = 0. \quad (2.14)$$

Für die Ableitung der Massenbilanz auf singulären Flächen $S(t)$ wird das *Pillendosenargument* verwendet. Es wird ein pillendosenähnlichen Körper, siehe Abb. 2.2, mit der Höhe h auf der singulären Fläche $S(t)$ betrachtet und wendet die Bilanzgleichung (2.13) darauf an. Für den Grenzfall $h \rightarrow 0$ verschwindet der erste Term in Gleichung (2.13) und die beiden Normalen \mathbf{n} und \mathbf{n}^s fallen zusammen. Der Fluss durch den Randbereich wird zum Sprung des Flusses auf der singulären Fläche und es folgt

$$\begin{aligned} 0 &= \int_{S(t)} [[\rho(\mathbf{x}, t)\mathbf{v}]] \cdot \mathbf{n} dA - \int_{S(t)} [[\rho(\mathbf{x}, t)]] \mathbf{v}^s \cdot \mathbf{n}^s dA \\ &= \int_{S(t)} [[\rho(\mathbf{x}, t)(\mathbf{v} - \mathbf{v}^s)]] \cdot \mathbf{n} dA. \end{aligned}$$

Damit ergibt sich für die Bilanz der Masse auf singulären Flächen

$$[[\rho(\mathbf{x}, t)(\mathbf{v} - \mathbf{v}^s)]] = 0. \quad (2.15)$$

Für den Sonderfall materieller singulärer Flächen sind die Geschwindigkeiten \mathbf{v} und \mathbf{v}^s gleich. Dies bedeutet, dass es keine Restriktion für den Sprung der Masse auf materiellen singulären Flächen gibt.

Eine alternative Vorgehensweise für die Herleitung der Massenbilanz auf singulären Flächen ist das Ersetzen des Flussterms über den Gebietsrand $\partial V(t)$ in Gleichung (2.13), unter Anwendung des Gaußschen Satzes (2.11). Es folgt die verallgemeinerte integrale Form der Massenbilanz

$$0 = \int_{V(t)} \left(\frac{\partial \rho(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\rho(\mathbf{x}, t)\mathbf{v}) \right) dV + \int_{S(t)} [[\rho(\mathbf{x}, t)(\mathbf{v} - \mathbf{v}^s)]] \cdot \mathbf{n}^s dA.$$

Damit ergeben sich die lokalen Bilanzen der Masse sowohl für die regulären Punkte (2.14) als auch auf singulären Flächen (2.15).

2.3.2. Impuls- und Drehimpulsbilanz

Die Impulsbilanz folgt aus einem der wichtigsten Sätze in der Physik, dem *Impulserhaltungssatz*. Dieser wiederum ist eine Folge des *dritten Newtonschen Axioms* "actio=reactio" das besagt, dass der Gesamtimpuls eines Systems erhalten bleibt. Gemäß des *zweiten Newtonschen Axioms* ist die zeitliche Änderung des Gesamtimpulses eines Körpers gleich der auf dem Körper wirkenden äußeren Kräfte. In der Kontinuumsmechanik wird postuliert, dass dabei zwei Arten von Kräften, *Volumenkräfte* und *Oberflächenkräfte*, zu berücksichtigen sind.

Die Volumenkräfte werden durch die Kraftdichte $\rho \mathbf{b}$, die proportional zur Massendichte ρ und der Kraft pro Masseneinheit \mathbf{b} ist, beschrieben. Die Flächenkraft lässt sich über den *Cauchyschen Spannungstensor* $\boldsymbol{\sigma}$ in der Eulerschen Darstellung berechnen

$$\mathbf{f} = \int_{\partial V} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} dA = \int_{\partial V} \mathbf{t} dA.$$

Dabei greift der *Spannungsvektor* \mathbf{t} auf eine Schnittebene mit der Normalen \mathbf{n} an. Wird das Flächenelement mithilfe der Piola-Transformation (2.12) in die Bezugsplatzierung transformiert, so folgt für die Flächenkraft

$$\mathbf{f} = \int_{\partial V_r} \boldsymbol{\sigma} J \mathbf{F}^{-\top} \mathbf{n}_r dA_r = \int_{\partial V_r} \mathbf{P} \mathbf{n}_r dA_r. \quad (2.16)$$

\mathbf{P} ist der *erste Piola-Kirchhoffsche Spannungstensor*. Wird zusätzlich der Kraftvektor $d\mathbf{f} = \mathbf{t} dA$ mittels \mathbf{F}^{-1} in die Referenzplatzierung transformiert, so folgt der *zweite Piola-Kirchhoffscher Spannungstensor*

$$\mathbf{S} = \mathbf{F}^{-1} \mathbf{P} = \mathbf{F}^{-1} \boldsymbol{\sigma} J \mathbf{F}^{-\top}. \quad (2.17)$$

Dieser gibt den Spannungszustand in der Bezugsplatzierung an.

Unter Berücksichtigung der Volumenkraftdichte $\rho \mathbf{b}$ und der Flächenkräfte \mathbf{f} ist die zeitliche Änderung des Gesamtimpulses gegeben durch

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{V(t)} \rho \mathbf{v} dV = \int_{V(t)} \rho \mathbf{b} dV + \int_{\partial V(t)} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} dA. \quad (2.18)$$

Mit dem Transporttheorem (2.10) und dem Satz von Gauß (2.11) folgt für die linke Seite der Gleichung (2.18)

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_{V(t)} \rho \mathbf{v} dV &= \int_{V(t)} \frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} dV + \int_{\partial V(t)} (\rho \mathbf{v}) \otimes \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dA - \int_{S(t)} \llbracket \rho \mathbf{v} \rrbracket \otimes \mathbf{v}^s \cdot \mathbf{n}^s dA \\ &= \int_{V(t)} \left(\frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla_x \cdot ((\rho \mathbf{v}) \otimes \mathbf{v}) \right) dV + \int_{S(t)} \llbracket \rho \mathbf{v} \otimes (\mathbf{v} - \mathbf{v}^s) \rrbracket \cdot \mathbf{n}^s dA. \end{aligned} \quad (2.19)$$

Entsprechend ergibt sich für die rechte Seite von Gleichung (2.18)

$$\int_{V(t)} \rho \mathbf{b} dV + \int_{\partial V(t)} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} dA = \int_{V(t)} (\rho \mathbf{b} + \nabla_x \cdot \boldsymbol{\sigma}) dV + \int_{S(t)} \llbracket \boldsymbol{\sigma} \rrbracket \mathbf{n}^s dA. \quad (2.20)$$

Unter der Voraussetzung, dass die Impulsbilanz für beliebige Volumina gelten soll, sowie unter der Verwendung der Massenbilanz (2.14), ergibt sich die Impulsbilanz für reguläre Punkte

$$\frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla_x \cdot ((\rho \mathbf{v}) \otimes \mathbf{v}) = \rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{L} \mathbf{v} \right) = \rho \mathbf{b} + \nabla_x \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (2.21)$$

\mathbf{L} ist dabei der Geschwindigkeitsgradient (2.7). Im Sonderfall der Statik ergibt sich die Gleichgewichtsbedingung

$$\mathbf{0} = \rho \mathbf{b} + \nabla_x \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (2.22)$$

Wendet man die Gleichungen (2.19) und (2.20) auf singuläre Flächen $S(t)$ mit der Normalen \mathbf{n} an, so folgt die Sprungbedingung für den Spannungsvektor \mathbf{t}

$$\llbracket \rho \mathbf{v} \otimes (\mathbf{v} - \mathbf{v}^s) \rrbracket \cdot \mathbf{n} = \llbracket \boldsymbol{\sigma} \rrbracket \mathbf{n} = \llbracket \mathbf{t} \rrbracket. \quad (2.23)$$

Und im Falle materieller singulärer Flächen ($\mathbf{v} = \mathbf{v}^s$) folgt

$$\mathbf{0} = \llbracket \mathbf{t} \rrbracket. \quad (2.24)$$

Die Drehimpulsbilanz besagt, dass die zeitliche Änderung des Drehimpulses, bezogen auf einen festen Punkt, gleich der Summe aller von außen auf den Körper angreifenden Momente ist. Damit ergibt sich für die globale Drehimpulsbilanz in regulären Punkten bezüglich eines Punktes \mathbf{p} mit dem Ortsvektor \mathbf{x}_p

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{V(t)} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \times (\rho \mathbf{v}) dV = \int_{V(t)} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \times (\rho \mathbf{b}) dV + \int_{\partial V(t)} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \times \boldsymbol{\sigma} n dA. \quad (2.25)$$

Für die weiteren Schritte wird ein Vektor $\mathbf{y} = \mathbf{x} - \mathbf{x}_p$ definiert und die Identität $\nabla_{\mathbf{x}} \cdot ((\mathbf{y} \times (\rho \mathbf{v})) \otimes \mathbf{v}) = (\mathbf{y} \times \mathbf{v})(\nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\rho \mathbf{v})) + \mathbf{y} \times (\rho \mathbf{L} \mathbf{v})$ notiert. Damit folgt unter der Berücksichtigung des Transporttheorems (2.10), des Satzes von Gauß (2.11) und der Massenbilanz (2.14), für die linke Seite der globalen Drehimpulsbilanz (2.25)

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_{V(t)} \mathbf{y} \times (\rho \mathbf{v}) dV &= \int_{V(t)} \left(\frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{y} \times (\rho \mathbf{v})) + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot ((\mathbf{y} \times (\rho \mathbf{v})) \otimes \mathbf{v}) \right) dV \\ &= \int_{V(t)} \left(\mathbf{y} \times \left(\frac{\partial(\rho \mathbf{v})}{\partial t} + \rho \mathbf{L} \mathbf{v} \right) + (\mathbf{y} \times \mathbf{v})(\nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\rho \mathbf{v})) \right) dV \\ &= \int_{V(t)} \left(\rho \mathbf{y} \times \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{L} \mathbf{v} \right) + (\mathbf{y} \times \mathbf{v}) \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\rho \mathbf{v}) \right) \right) dV \\ &= \int_{V(t)} \rho \mathbf{y} \times \mathbf{a} dV. \end{aligned}$$

Entsprechend ergibt sich für die rechte Seite der Gleichung (2.25)

$$\int_{V(t)} \mathbf{y} \times (\rho \mathbf{b}) dV + \int_{\partial V(t)} \mathbf{y} \times \boldsymbol{\sigma} n dA = \int_{V(t)} \mathbf{y} \times (\rho \mathbf{b} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \boldsymbol{\sigma}) + \mathbf{I} \times \boldsymbol{\sigma} dV,$$

wobei $(\mathbf{I} \times \boldsymbol{\sigma})_k = \epsilon_{ijk} \delta_{il} \sigma_{jl}$ ein Kreuzprodukt zwischen zwei Tensoren darstellt. Damit folgt für die globale Drehimpulsbilanz (2.25) in regulären Punkten

$$\int_{V(t)} (\mathbf{y} \times (\rho \mathbf{a} - \rho \mathbf{b} - \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \boldsymbol{\sigma}) - \mathbf{I} \times \boldsymbol{\sigma}) dV = 0.$$

Mit der Impulsbilanz (2.21) verschwindet der erste Term dieser Gleichung und es folgt die lokale Konsequenz für den Spannungstensor in regulären Punkten

$$\mathbf{I} \times \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0} \Rightarrow \boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}^T. \quad (2.26)$$

Demnach ist der Cauchysche Spannungstensor symmetrisch. Ausgehend von der Definition des zweiten Piola-Kirchhoffschen Spannungstensors (2.17) folgt, dass auch dieser symmetrisch ist. Betrachtet man allerdings den ersten Piola-Kirchhoffschen Spannungstensor (2.17), so ergibt sich

$$\mathbf{P} \mathbf{F}^T = \mathbf{F} \mathbf{P}^T.$$

2.3.3. Energiebilanz

Wärme und Arbeit, die einem geschlossenen System zugeführt werden, bewirken eine Erhöhung der kinetischen und inneren Energie des Systems. Mit e als der *inneren Energiedichte*, w als der

massenspezifischen Wärmequellichte, \mathbf{q} als dem Wärmestrom sowie der Anwendung des Gaußschen Satzes (2.9) ergibt sich für die Bilanz der Gesamtenergie in regulären Punkten

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + \rho e \right) = \rho w - \nabla_x \cdot \mathbf{q} + \rho \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} + \nabla_x \cdot (\boldsymbol{\sigma}^T \mathbf{v}).$$

Abzüglich der kinetischen Energiebilanz, die sich aus einer Multiplikation der Impulsbilanz in regulären Punkten (2.21) mit der Geschwindigkeit \mathbf{v} ergibt, folgt die Bilanz der inneren Energie

$$\rho \dot{e} = \rho w + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L} - \nabla_x \cdot \mathbf{q}. \quad (2.27)$$

Diese Gleichung repräsentiert den *ersten Hauptsatz der Thermodynamik* (siehe z. B. [17]).

2.3.4. Entropiebilanz und die Clausius-Duhem Ungleichung

Einige thermodynamische Prozesse sind nicht umkehrbar und werden daher als *irreversibel* bezeichnet. Für die Charakterisierung der Irreversibilität dieser Prozesse wird die *Entropie*

$$H_\eta = \int_V \rho \eta dV$$

als eine physikalische Zustandsgröße über einen Volumenintegral der *massenspezifischen Entropie* η eingeführt. Die zeitliche Änderung der Entropie H_η setzt sich aus einer Entropiezufuhr Z_η und der Entropieproduktion P_η infolge irreversibler Prozesse zusammen. Damit ist die globale Entropiebilanz gegeben durch

$$\dot{H}_\eta = Z_\eta + P_\eta.$$

Die Entropieproduktion P_η ist ein Maß für die Irreversibilität eines Prozesses und darf nach dem *zweiten Hauptsatz der Thermodynamik* nicht negativ sein (siehe z. B. [17]). Damit folgt für die Entropieproduktion

$$P_\eta = \dot{H}_\eta - Z_\eta \geq 0.$$

In Anlehnung an die Gleichgewichtsthermodynamik wird in der *rationalen Thermodynamik* die Entropiezufuhr Z_η angesetzt als

$$Z_\eta = \int_V \frac{\rho w}{T} dV + \int_{\partial V} \frac{\mathbf{q}}{T} \cdot \mathbf{n} dA = \int_V \frac{\rho w}{T} - \nabla_x \cdot \left(\frac{\mathbf{q}}{T} \right) dV,$$

mit T als der absoluten Temperatur (siehe z. B. [18]). Damit impliziert der zweite Hauptsatz der Thermodynamik folgende Ungleichung

$$\rho \dot{\eta} + \nabla_x \cdot \left(\frac{\mathbf{q}}{T} \right) - \frac{\rho w}{T} \geq 0.$$

Durch die Berücksichtigung der Energiebilanz (2.27) wird die Elimination der lokalen Wärmezufuhr ermöglicht und es ergibt sich

$$T \dot{\eta} - \dot{e} - \frac{\nabla_x T \cdot \mathbf{q}}{\rho T} + \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L}}{\rho} \geq 0. \quad (2.28)$$

Diese Ungleichung wird als die *Clausius-Duhem Ungleichung* bezeichnet. In Hinblick auf die Formulierung eines thermodynamisch konsistenten Materialmodells, stellt die Clausius-Duhem Ungleichung (2.28) eine Restriktion für die verwendeten Feldgleichungen dar. Dabei wird bei der Modellierung häufig die *freie Helmholtzsche Energiedichte*

$$f = e - T\eta \quad (2.29)$$

verwendet, mit der die Clausius-Duhem Ungleichung (2.28) folgende Gestalt annimmt

$$-\dot{f} - \dot{T}\eta - \frac{\nabla_x T \cdot \mathbf{q}}{\rho T} + \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L}}{\rho} \geq 0. \quad (2.30)$$

Für isotherme Prozesse, auf welche sich die vorliegende Arbeit beschränkt, reduziert sich die Clausius-Duhem Ungleichung (2.30) auf die Form

$$\rho \dot{f} - \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L} \leq 0. \quad (2.31)$$

Das Gleichheitszeichen in der Gleichung (2.31) repräsentiert den Gleichgewichtszustand eines Systems. Nach Gleichung (2.22) verschwindet in diesem Fall auch die Spannungsleistung $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L}$. Um thermodynamische Konsistenz isothermer Prozesse zu gewährleisten, muss damit die freie Energie im Gleichgewicht ein Minimum erreichen.

2.3.5. Kinematische Kompatibilitätsbedingung

Die Bewegung eines materiellen Punktes wird durch die Bewegungsfunktion $\boldsymbol{\chi}(\mathbf{X}, t)$ beschrieben. Da $\boldsymbol{\chi}(\mathbf{X}, t)$ für ihre bijektiven Eigenschaften stetig sein muss, gilt für $\boldsymbol{\chi}(\mathbf{X}, t)$ der Satz von Schwarz [19]

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \boldsymbol{\chi}(\mathbf{X}, t)}{\partial \mathbf{X}} \right) &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{X}} \left(\frac{\partial \boldsymbol{\chi}(\mathbf{X}, t)}{\partial t} \right) \\ \dot{\mathbf{F}}(\mathbf{X}, t) &= \frac{\partial \mathbf{v}(\mathbf{X}, t)}{\partial \mathbf{X}}. \end{aligned}$$

Dies ist die kinematische Kompatibilitätsbedingung in regulären Punkten.

Wird der Deformationsgradient über einen materiellen Bereich eines Körpers mit einer singulären Fläche in der Bezugspitzierung integriert, so folgt unter Verwendung des Gaußschen Satzes (2.11)

$$\int_{V_r} \mathbf{F}(\mathbf{X}, t) dV_r = \int_{V_r} \frac{\partial \boldsymbol{\chi}(\mathbf{X}, t)}{\partial \mathbf{X}} dV_r = \int_{\partial V_r} \boldsymbol{\chi}(\mathbf{X}, t) \otimes \mathbf{n}_r^s dA_r.$$

Leitet man nun beide Seiten nach der Zeit ab, so ergibt sich

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{V_r} \mathbf{F}(\mathbf{X}, t) dV_r = \frac{\partial}{\partial t} \int_{\partial V_r} \boldsymbol{\chi}(\mathbf{X}, t) \otimes \mathbf{n}_r^s dA_r = \int_{\partial V_r} \mathbf{v} \otimes \mathbf{n}_r^s dA_r. \quad (2.32)$$

Für das weitere Vorgehen wird die Formulierung des Transporttheorems (2.10) in der Lagrangeschen Darstellung benötigt. Da sich das Referenzvolumen V_r in der Zeit nicht ändert, muss lediglich

der Flussterm über die bewegte singuläre Fläche $S(t)$ berücksichtigt werden. Daher folgt für die Gleichung (2.32)

$$\int_{V_r} \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{X}, t)}{\partial t} dV_r - \int_{S(t)} \llbracket \mathbf{F}(\mathbf{X}, t) \rrbracket \mathbf{v}^s \cdot \mathbf{n}_r^s dA_r = \int_{\partial V_r} \mathbf{v} \otimes \mathbf{n}_r^s dA_r.$$

Angewendet auf die singuläre Fläche folgt nach [20] für die kinematische Kompatibilitätsbedingung

$$-\llbracket \mathbf{F}(\mathbf{X}, t) \rrbracket \mathbf{v}^s \cdot \mathbf{n}_r^s = \llbracket \mathbf{v} \rrbracket \otimes \mathbf{n}_r^s. \quad (2.33)$$

Diese Bedingung wird auch als *Hadamardsche Sprungbedingung* bezeichnet [15]. Wird die Geschwindigkeit in Normalenrichtung $v_n = \mathbf{v}^s \cdot \mathbf{n}_r^s$ und der Sprung des Deformationsgradienten in Normalenrichtung $\mathbf{a} = \llbracket \mathbf{F} \mathbf{n}_r^s \rrbracket$ eingeführt, dann wird die Hadamardsche Bedingung zu

$$\llbracket \mathbf{v} \rrbracket = -v_n \mathbf{a}, \quad \llbracket \mathbf{F} \rrbracket = \mathbf{a} \otimes \mathbf{n}_r^s. \quad (2.34)$$

2.4. Hyperelastizität

Ein Materialverhalten wird als elastisch bezeichnet, wenn der momentane Spannungszustand allein vom momentanen Deformationszustand und von der momentanen Konfiguration abhängt. Diese Materialeigenschaft gilt unabhängig vom gewählten Bezugssystem und charakterisiert das *Cauchy-elastische* Materialverhalten. Zu dem momentanen Deformationszustand kann man allerdings auf unterschiedlichen Wegen gelangen, daher hängt die von den Spannungen geleistete Arbeit im Allgemeinen von der Deformationsgeschichte ab. Das Cauchy-elastische Materialverhalten ist somit nicht konservativ und ihm kann keine eindeutige Potentialfunktion zugeordnet werden. Eine spezielle Materialdefinition fordert die Reversibilität einer elastischen Formänderung. Dieses Materialverhalten wird als *Green-elastisch* oder *hyperelastisch* bezeichnet. Die Reversibilität des Deformationsprozesses setzt die Existenz eines Potentials voraus, aus dem man den aktuellen Spannungszustand bestimmen kann [21]. Dieses Potential ist ein Maß für die gespeicherte elastische Energie und wird als *Formänderungsenergiedichte* W bezeichnet. Sofern nicht ausdrücklich darauf hingewiesen wird, wird in Rahmen der vorliegenden Arbeit die Formänderungsenergiedichte W als der elastische Beitrag der freien Helmholtzschen Energiedichte (2.29) verwendet.

2.4.1. Gleichgewichtsbedingung der Formänderungsenergiedichte in regulären Punkten

Unter Berücksichtigung der Konfiguration ist die Formänderungsenergiedichte $W(\mathbf{x}, \mathbf{F}, \mathbf{X})$ als elastischer Beitrag der freien Helmholtzschen Energiedichte (2.29) im Allgemeinen von der aktuellen Lage \mathbf{x} , von dem Deformationsgradienten \mathbf{F} und von der ursprünglichen Position im Medium \mathbf{X} abhängig. Mit $\mathbf{x} = \boldsymbol{\chi}(\mathbf{X})$ und $\mathbf{F} = \partial \boldsymbol{\chi}(\mathbf{X}) / \partial \mathbf{X} = \nabla_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\chi}(\mathbf{X})$, nach Gleichung (2.3) und (2.5) in der Lagrangeschen Darstellung, ist das Potential eine Funktion von der Bewegungsfunktion $\boldsymbol{\chi}(\mathbf{X})$, deren örtlichen Ableitung $\nabla_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\chi}(\mathbf{X})$ und der ursprünglichen Position \mathbf{X} . Die Formänderungsenergie eines Körpers mit dem Volumen V_r ist gegeben durch

$$E(\boldsymbol{\chi}(\mathbf{X})) = \int_{V_r} W(\boldsymbol{\chi}(\mathbf{X}), \nabla_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\chi}(\mathbf{X}), \mathbf{X}) dV_r. \quad (2.35)$$

Nach der Clausius-Duhem Ungleichung isothermer Prozesse (2.31) muss im Gleichgewicht die freie Helmholtzsche Energie ein Minimum erreichen, um thermodynamische Konsistenz zu gewährleisten. Damit ist im vorliegenden Fall das Minimum der Formänderungsenergie (2.35) als dem elastischen Beitrag der freien Helmholtzischen Energie unter Variation der Bewegungsfunktion $\chi(\mathbf{X})$ gesucht. Angenommen $\chi(\mathbf{X})$ minimiert das Funktional (2.35), dann ist eine kleine Störung von $\chi(\mathbf{X})$ durch $\delta\chi(\mathbf{X}) = \hat{\epsilon}\eta(\mathbf{X})$ gegeben. Dabei ist $\hat{\epsilon}$ ein infinitesimaler, skalarer Wert und $\eta(\mathbf{X})$ ist eine differenzierbare Funktion mit der Bedingung, dass η am Rand ∂V_r verschwindet. Mit der angebrachten Störung wird das Funktional (2.35) zu

$$E(\chi + \hat{\epsilon}\eta) = \int_{V_r} W(\chi + \hat{\epsilon}\eta, \nabla_X(\chi + \hat{\epsilon}\eta), \mathbf{X}) dV_r.$$

Damit ist die Formänderungsenergie E eine Funktion von $\hat{\epsilon}$. Mit $\chi_{\hat{\epsilon}}(\mathbf{X}) := \chi(\mathbf{X}) + \delta\chi(\mathbf{X}) = \chi(\mathbf{X}) + \hat{\epsilon}\eta(\mathbf{X})$ folgt für das Minimum der Energie

$$\left[\frac{\partial E(\chi_{\hat{\epsilon}}(\mathbf{X}))}{\partial \hat{\epsilon}} \right]_{\hat{\epsilon}=0} = 0.$$

Für das Lösen dieser Gleichung wird zunächst die Ableitung der Energie nach dem skalaren Wert $\hat{\epsilon}$ betrachtet

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial \hat{\epsilon}} &= \int_{V_r} \left(\frac{\partial W(\chi_{\hat{\epsilon}}, \nabla_X \chi_{\hat{\epsilon}}, \mathbf{X})}{\partial \chi_{\hat{\epsilon}}} \frac{\partial \chi_{\hat{\epsilon}}}{\partial \hat{\epsilon}} + \frac{\partial W(\chi_{\hat{\epsilon}}, \nabla_X \chi_{\hat{\epsilon}}, \mathbf{X})}{\partial \nabla_X \chi_{\hat{\epsilon}}} \frac{\partial \nabla_X \chi_{\hat{\epsilon}}}{\partial \hat{\epsilon}} \right) dV_r \\ &= \int_{V_r} \left(\frac{\partial W(\chi_{\hat{\epsilon}}, \nabla_X \chi_{\hat{\epsilon}}, \mathbf{X})}{\partial \chi_{\hat{\epsilon}}} \eta + \frac{\partial W(\chi_{\hat{\epsilon}}, \nabla_X \chi_{\hat{\epsilon}}, \mathbf{X})}{\partial \nabla_X \chi_{\hat{\epsilon}}} \nabla_X \eta \right) dV_r. \end{aligned}$$

Mit partieller Integration des zweiten Teils und der Bedingung, dass η auf dem Rand ∂V_r verschwindet, folgt

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial \hat{\epsilon}} &= \int_{V_r} \left(\frac{\partial W}{\partial \chi_{\hat{\epsilon}}} \eta - \left(\nabla_X \cdot \frac{\partial W}{\partial \nabla_X \chi_{\hat{\epsilon}}} \right) \eta \right) dV_r + \int_{\partial V_r} \frac{\partial W}{\partial \nabla_X \chi_{\hat{\epsilon}}} \eta \cdot \mathbf{n}_r dA_r \\ &= \int_{V_r} \left(\frac{\partial}{\partial \chi_{\hat{\epsilon}}} - \nabla_X \cdot \frac{\partial}{\partial \nabla_X \chi_{\hat{\epsilon}}} \right) W \eta dV_r. \end{aligned}$$

Mit der Forderung, dass die Gleichgewichtsbedingung für beliebige η erfüllt sein muss, ergibt sich für das Minimum des Funktionals (2.35)

$$\begin{aligned} \frac{\delta E(\chi)}{\delta \chi} &:= \left[\frac{\partial E(\chi_{\hat{\epsilon}}(\mathbf{X}), \nabla_X \chi_{\hat{\epsilon}}(\mathbf{X}), \mathbf{X})}{\partial \hat{\epsilon}} \right]_{\hat{\epsilon}=0} = 0 \\ &= \int_{V_r} \left[\left(\frac{\partial}{\partial \chi_{\hat{\epsilon}}} - \nabla_X \cdot \frac{\partial}{\partial \nabla_X \chi_{\hat{\epsilon}}} \right) W(\chi_{\hat{\epsilon}}(\mathbf{X}), \nabla_X \chi_{\hat{\epsilon}}(\mathbf{X}), \mathbf{X}) \eta \right]_{\hat{\epsilon}=0} dV_r = 0 \\ &= \left(\frac{\partial}{\partial \chi} - \nabla_X \cdot \frac{\partial}{\partial \nabla_X \chi} \right) W(\chi(\mathbf{X}), \nabla_X \chi(\mathbf{X}), \mathbf{X}) = 0. \end{aligned} \quad (2.36)$$

Dabei ist $\delta E/\delta \chi$ die Variation von E nach χ [22]. Befindet sich ein System im Gleichgewicht, muss die Variationsableitung verschwinden. Daher muss für ein Gleichgewicht gelten

$$\begin{aligned} \frac{\partial W(\chi(\mathbf{X}), \nabla_X \chi(\mathbf{X}), \mathbf{X})}{\partial \chi} &= \nabla_X \cdot \frac{\partial W(\chi(\mathbf{X}), \nabla_X \chi(\mathbf{X}), \mathbf{X})}{\partial \nabla_X \chi} \\ \frac{\partial W(\mathbf{x}, \mathbf{F}, \mathbf{X})}{\partial \mathbf{x}} &= \nabla_X \cdot \frac{\partial W(\mathbf{x}, \mathbf{F}, \mathbf{X})}{\partial \mathbf{F}}. \end{aligned} \quad (2.37)$$

Diese notwendige Bedingung für ein Minimum eines Funktionals, das von einer Funktion und deren Ableitung abhängt, wird als Euler-Lagrange-Gleichung bezeichnet [22]. Daher ist die Bedingung (2.37) die Gleichgewichtsbedingung für die Formänderungsenergiedichte $W(\mathbf{x}, \mathbf{F}, \mathbf{X})$ in regulären Punkten [15].

2.4.2. Energie-Impuls-Tensor der Elastostatik

Wie in Abschnitt 2.4.1 besprochen, ist die Formänderungsenergiedichte im Allgemeinen eine Funktion der aktuellen Lage \mathbf{x} , der ursprünglichen Position im Medium \mathbf{X} und des Deformationsgradienten \mathbf{F} . Ausgehend von der expliziten Abhängigkeit von der ursprünglichen Position im Medium \mathbf{X} berechnete J. D. Eshelby den Energie-Impuls-Tensor. Die explizite Abhängigkeit wird durch

$$\left. \frac{\partial W(\mathbf{x}, \mathbf{F}, \mathbf{X})}{\partial \mathbf{X}} \right|_{\text{expl.}} \quad (2.38)$$

notiert. Wobei (expl.) bedeutet, dass bei der Ableitung die übrigen Variablen \mathbf{x} und \mathbf{F} konstant gehalten werden. Für die Ableitung (2.38) resultiert komponentenweise

$$\frac{\partial W}{\partial X_l} = \frac{\partial W}{\partial x_i} \frac{\partial x_i}{\partial X_l} + \frac{\partial W}{\partial F_{ij}} \frac{\partial F_{ij}}{\partial X_l} + \left. \frac{\partial W}{\partial X_l} \right|_{\text{expl.}}. \quad (2.39)$$

$\partial x_i / \partial X_l$ sind nach Gleichung (2.5) die Komponenten des Deformationsgradienten F_{il} . Ausgehend vom Gleichgewichtszustand folgt für die Euler-Lagrange-Gleichung (2.37) komponentenweise

$$\frac{\partial W}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial X_j} \frac{\partial W}{\partial F_{ij}}.$$

Unter zusätzlicher Verwendung der Identität (2.1) ergibt sich für Gleichung (2.39)

$$\begin{aligned} \frac{\partial W}{\partial X_l} &= \left(\frac{\partial}{\partial X_j} \frac{\partial W}{\partial F_{ij}} \right) F_{il} + \frac{\partial W}{\partial F_{ij}} \left(\frac{\partial F_{ij}}{\partial X_l} \right) + \left. \frac{\partial W}{\partial X_l} \right|_{\text{expl.}} \\ &= \left(\frac{\partial F_{ji}^\top}{\partial X_l} \right) \frac{\partial W}{\partial F_{ij}} + F_{li}^\top \left(\frac{\partial}{\partial X_j} \frac{\partial W}{\partial F_{ij}} \right) + \left. \frac{\partial W}{\partial X_l} \right|_{\text{expl.}} \\ &= \frac{\partial}{\partial X_j} \left(F_{li}^\top \frac{\partial W}{\partial F_{ij}} \right) + \left. \frac{\partial W}{\partial X_l} \right|_{\text{expl.}}. \end{aligned}$$

Mit $\partial W / \partial X_l = \partial / \partial X_j (W \delta_{lj})$ für die linke Seite, folgt für den expliziten Gradienten von W

$$\left. \frac{\partial W}{\partial X_l} \right|_{\text{expl.}} = \frac{\partial}{\partial X_j} \underbrace{\left(W \delta_{lj} - F_{li}^\top \frac{\partial W}{\partial F_{ij}} \right)}_{\Sigma_{lj}}.$$

Der Ausdruck in den Klammern ist der *Energie-Impuls-Tensor der Elastostatik* Σ [12]. Dieser wurde 1975 von J. D. Eshelby auf ähnliche Weise abgeleitet. Daher wird Σ in der Literatur auch als *Eshelby-Tensor* bezeichnet. In der Tensorarstellung nimmt Σ folgende Form an

$$\Sigma = W \mathbf{I} - \mathbf{F}^\top \frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}}. \quad (2.40)$$

2.4.3. Leistungskonjugierte Verzerrungs- und Spannungsmaße

Gemäß der Definition von hyperelastischen Materialien ist die Formänderungsenergiedichte W ein Potential, aus dem man den Spannungszustand eindeutig bestimmen kann [21]. Entsprechend den Abhängigkeiten von W muss auch die Funktion zur Berechnung der Spannungen $\mathbf{p}(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{F}, \mathbf{X})$ von der aktuellen Lage $\boldsymbol{\chi}$, von dem Deformationsgradienten \mathbf{F} und von der ursprünglichen Position im Medium \mathbf{X} abhängen. Wird das *Prinzip der Spannungsinvarianz unter superponierten Starrkörperbewegungen* [16] ausgenutzt und wird eine Translation \mathbf{c} und eine Rotation \mathbf{R}^* als Starrkörperbewegung betrachtet, so muss folgende Relation für die Spannungsfunktion gelten

$$\mathbf{p}(\mathbf{R}^* \boldsymbol{\chi} + \mathbf{c}, \mathbf{R}^* \mathbf{F}, \mathbf{X}) \stackrel{!}{=} \mathbf{R}^* \mathbf{p}(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{F}, \mathbf{X}) \mathbf{R}^{*\top}.$$

Für den Sonderfall $\mathbf{R}^* = \mathbf{I}$ folgt, dass \mathbf{p} unabhängig von $\boldsymbol{\chi}$ sein muss. Um die Eindeutigkeit der Formänderungsenergiedichte zu gewährleisten, muss auch diese unabhängig von der momentanen Lage $\boldsymbol{\chi}$ sein. Somit ist die Formänderungsenergiedichte

$$W = W(\mathbf{F}, \mathbf{X}) \quad (2.41)$$

eine Funktion des Deformationsgradienten \mathbf{F} und der ursprünglichen Position im Medium \mathbf{X} . Mit der speziellen Wahl $\mathbf{R}^* = \mathbf{R}^\top$ und der polaren Zerlegung des Deformationsgradienten (2.6) folgt

$$\mathbf{p}(\mathbf{R}^\top \mathbf{F}, \mathbf{X}) = \mathbf{p}(\mathbf{R}^\top \mathbf{R} \mathbf{U}, \mathbf{X}) = \mathbf{p}(\mathbf{U}, \mathbf{X}) = \mathbf{R}^\top \mathbf{p}(\mathbf{F}, \mathbf{X}) \mathbf{R}.$$

Dies impliziert, dass sowohl die Spannungsfunktion $\mathbf{p}(\mathbf{U}, \mathbf{X})$ als auch die Formänderungsenergiedichte $W(\mathbf{U}, \mathbf{X})$ alleine durch Verzerrungen \mathbf{U} oder \mathbf{V} beschrieben werden können. Eine solche Darstellung der Materialgleichungen wird als *reduzierte Form* bezeichnet.

Die Leistungsdichte ist die zeitliche Änderung der Energiedichte, folglich ist die Spannungsleistung P die zeitliche Änderung der Formänderungsenergiedichte W . Wird die allgemeine Darstellung der Formänderungsenergiedichte $W = W(\mathbf{F}, \mathbf{X})$ betrachtet, ergibt sich für die Spannungsleistung

$$P = \dot{W} = \frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}} \cdot \dot{\mathbf{F}} = \mathbf{J} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L} = \mathbf{J} \boldsymbol{\sigma} \cdot \dot{\mathbf{F}} \mathbf{F}^{-1} = \mathbf{J} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{F}^{-\top} \cdot \dot{\mathbf{F}}. \quad (2.42)$$

Es folgt für die Cauchysche Spannung und für den ersten sowie den zweiten Piola-Kirchhoffschen Spannungstensor (siehe Gl. (2.16) und (2.17) für die Umrechnung der Spannungsmaße)

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{1}{J} \frac{\partial W(\mathbf{F}, \mathbf{X})}{\partial \mathbf{F}} \mathbf{F}^\top, \quad \mathbf{P} = \frac{\partial W(\mathbf{F}, \mathbf{X})}{\partial \mathbf{F}}, \quad \mathbf{S} = \mathbf{F}^{-1} \frac{\partial W(\mathbf{F}, \mathbf{X})}{\partial \mathbf{F}}. \quad (2.43)$$

Unter Berücksichtigung der Gleichung (2.42) und der Voraussetzung der reduzierten Form, können Spannungsmaße und zugehörige kinematische Variablen bestimmt werden. Diese werden als *leistungskonjugiertes Paar* bezeichnet und werden für Definitionen von konstitutiven Gleichungen verwendet. Ein Beispiel für ein solches Paar ist der zweite Piola-Kirchhoffsche Spannungstensor \mathbf{S} (2.17) und der *Greensche Verzerrungstensor*

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2} (\mathbf{F}^\top \mathbf{F} - \mathbf{I}). \quad (2.44)$$

Das entsprechende physikalisch lineare und geometrisch nicht lineare Materialgesetz ist das *St. Venant-Kirchhoff-Gesetz* (siehe z. B. Bertram [16])

$$\mathbf{S} = \mathcal{C}[\mathbf{E}]. \quad (2.45)$$

Den linearen Zusammenhang zwischen der Referenzspannung \mathbf{S} und der Greenschen Dehnung \mathbf{E} beschreibt der Steifigkeitstensor \mathcal{C} .

Bei der Gleichung (2.45) handelt es sich um eine physikalisch lineare und geometrisch nicht lineare konstitutive Gleichung. Der lineare Zusammenhang hängt stark von der Wahl der Spannungs- und Dehnungsmaße ab. Bei den vielen existierenden hyperelastischen konstitutiven Gleichungen haben Bertram et al. [23] gezeigt, dass die resultierende Formänderungsenergie dichte der konstitutiven Gleichungen in reduzierter Form nicht konvex ist. Daher führen die Materialgesetze zu Instabilitäten bei großen Dehnungen [16].

2.4.4. Bilanz der Konfigurationskräfte

In Abschnitt 2.4.1 wurde gezeigt, dass die Forderung der thermodynamischen Konsistenz und somit des Minimums der freien Helmholtzschen Energie in regulären Punkten im rein elastischen Fall zu der Euler-Lagrange-Gleichung (2.37) führt. In Abschnitt 2.4.3 wurde abgeleitet, dass die Formänderungsenergie dichte W als mechanischer Beitrag der freien Helmholtzschen Energie unabhängig von der momentanen Lage im Medium sein muss. Des Weiteren wurde in diesem Abschnitt gezeigt, dass die Ableitung der Formänderungsenergie dichte W nach dem Deformationsgradienten \mathbf{F} zu den Spannungsmaßen führt (siehe Gleichung (2.43)). Unter Berücksichtigung der Gleichungen (2.36), (2.41) und (2.43) folgt für die Variation der Formänderungsenergie eines regulären Körpers mit dem Volumen V_r

$$\begin{aligned} \delta E(\boldsymbol{\chi}) &= \int_{V_r} \frac{\partial W(\mathbf{F}, \mathbf{X})}{\partial \mathbf{F}} \cdot \nabla_{\mathbf{X}} \delta \boldsymbol{\chi} dV_r \\ &= \int_{V_r} -\nabla_{\mathbf{X}} \cdot \mathbf{P} \cdot \delta \boldsymbol{\chi} dV_r + \int_{\partial V_r} \mathbf{P} \delta \boldsymbol{\chi} \cdot \mathbf{n}_r dA_r \\ &= \int_{V_r} -\nabla_{\mathbf{X}} \cdot \mathbf{P} \cdot \delta \boldsymbol{\chi} dV_r. \end{aligned} \quad (2.46)$$

Mit $\delta \boldsymbol{\chi}$ als Variation der Bewegungsfunktion $\boldsymbol{\chi}$ und unter Berücksichtigung, dass $\delta \boldsymbol{\chi}$ am Rand ∂V_r verschwindet, wie in Abschnitt 2.4.1 besprochen.

Für die Bestimmung eines lokalen Kriteriums des Energieminimums auf singulären Flächen wird ein Körper betrachtet, der durch eine singuläre Fläche S in zwei Teilvolumina V^+ und V^- geteilt ist, wie in Abbildung 2.2 dargestellt ist. Die Formänderungsenergie des Körpers ist gegeben durch

$$E(\boldsymbol{\chi}, S) = \int_{V_r^+} W(\mathbf{F}, \mathbf{X}) dV_r + \int_{V_r^-} W(\mathbf{F}, \mathbf{X}) dV_r. \quad (2.47)$$

Die Variation der singulären Fläche $S(\mathbf{X})$ ist die Variation eines jeden Punktes auf der singulären Fläche in Richtung deren Normalen \mathbf{n}^s . Mit einem gestörten Ortsvektor $\tilde{\mathbf{X}}_{\hat{\epsilon}} := \mathbf{X} + \hat{\epsilon} \mathbf{v}_{\hat{\epsilon}}^s$ ist die Variation der singulären Fläche $S(\tilde{\mathbf{X}}_{\hat{\epsilon}})$ gegeben durch

$$\delta S = \left[\frac{\partial}{\partial \hat{\epsilon}} \tilde{\mathbf{X}}_{\hat{\epsilon}} \cdot \mathbf{n}^s \right]_{\hat{\epsilon}=0} = [\mathbf{v}_{\hat{\epsilon}}^s \cdot \mathbf{n}^s]_{\hat{\epsilon}=0}.$$

Unter Anwendung des verallgemeinerten Transporttheorems (2.10) folgt für die Variation der Formänderungsenergie (2.47) nach der singulären Fläche

$$\delta E(S) = - \int_S \llbracket W(\mathbf{F}, \mathbf{X}) \rrbracket \mathbf{v}_\epsilon^s \cdot \mathbf{n}_r^s dA_r = - \int_S \llbracket W(\mathbf{F}, \mathbf{X}) \rrbracket \delta S dA_r,$$

wobei die zeitliche Ableitung durch die Ableitung $\partial/\partial\hat{e}$ ersetzt wurde. Mit diesem Resultat und der Gleichung (2.46) für die Variation der regulären Teilkörper V^+ und V^- ergibt sich für die totale Variation der Formänderungsenergie (2.47)

$$\begin{aligned} \delta E(\chi, S) &= \int_{V_r^+} \left(\frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}} \right) \cdot \nabla_X \delta \chi dV_r + \int_{V_r^-} \left(\frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}} \right) \cdot \nabla_X \delta \chi dV_r - \int_S \llbracket W \rrbracket \delta S dA_r \\ &= \int_{V_r^+} -\nabla_X \cdot \mathbf{P} \cdot \delta \chi dV_r + \int_{V_r^-} -\nabla_X \cdot \mathbf{P} \cdot \delta \chi dV_r \\ &\quad - \int_S \llbracket \mathbf{P} \mathbf{n}_r^s \cdot \delta \chi \rrbracket dA_r - \int_S \llbracket W \rrbracket \delta S dA_r. \end{aligned}$$

Für die Charakterisierung des Variations Springs $\llbracket \delta \chi \rrbracket$ wird die Hadamardsche Bedingung (2.33) verwendet. Mit einer Ersetzung der zeitlichen Ableitung durch $\partial/\partial\hat{e}$ und einer Multiplikation der Gleichung mit \mathbf{n}_r^s auf der rechten Seite folgt

$$\begin{aligned} (\llbracket \mathbf{v} \rrbracket \otimes \mathbf{n}_r^s) \mathbf{n}_r^s &= -\mathbf{v}^s \cdot \mathbf{n}_r^s \llbracket \mathbf{F} \rrbracket \mathbf{n}_r^s \\ \llbracket \mathbf{v} \rrbracket &= -\mathbf{v}^s \cdot \mathbf{n}_r^s \llbracket \mathbf{F} \rrbracket \mathbf{n}_r^s \\ \llbracket \delta \chi \rrbracket &= -\delta S \llbracket \mathbf{F} \mathbf{n}_r^s \rrbracket. \end{aligned} \tag{2.48}$$

Unter Anwendung der Gleichung (2.48) und der Identität $\llbracket fg \rrbracket = \llbracket f \rrbracket \langle g \rangle + \langle f \rangle \llbracket g \rrbracket$, wobei $\langle f \rangle = (f^+ + f^-)/2$ der Mittelwert der Größe f ist, ergibt sich für den Sprung

$$\begin{aligned} \llbracket \mathbf{P} \mathbf{n}_r^s \cdot \delta \chi \rrbracket &= \llbracket \mathbf{P} \mathbf{n}_r^s \rrbracket \cdot \langle \delta \chi \rangle + \langle \mathbf{P} \mathbf{n}_r^s \rrbracket \cdot \llbracket \delta \chi \rrbracket \\ &= \llbracket \mathbf{P} \mathbf{n}_r^s \rrbracket \cdot \langle \delta \chi \rangle - \langle \mathbf{P} \mathbf{n}_r^s \rrbracket \cdot \llbracket \mathbf{F} \mathbf{n}_r^s \rrbracket \delta S. \end{aligned}$$

Damit resultiert gemäß Gurtin [24, 25] für die totale Variation der Formänderungsenergie

$$\begin{aligned} -\delta E(\chi, S) &= \int_{V_r^+} \nabla_X \cdot \mathbf{P} \cdot \delta \chi dV_r + \int_{V_r^-} \nabla_X \cdot \mathbf{P} \cdot \delta \chi dV_r \\ &\quad + \int_S \llbracket \mathbf{P} \mathbf{n}_r^s \rrbracket \cdot \langle \delta \chi \rangle + (\llbracket W \rrbracket - \langle \mathbf{P} \mathbf{n}_r^s \rrbracket \cdot \llbracket \mathbf{F} \mathbf{n}_r^s \rrbracket) \delta S dA_r. \end{aligned}$$

Unter der Forderung, dass $\delta E(\chi, S) = 0$ für beliebige und voneinander unabhängige Variationen von $\delta \chi$ und δS gelten muss, folgen die Gleichgewichtsbedingungen in regulären Punkten und singulären Flächen. Für reguläre Punkte resultiert

$$\nabla_X \cdot \mathbf{P} = \mathbf{0}.$$

Für singuläre Flächen folgt das Kräftegleichgewicht

$$\llbracket \mathbf{P} \rrbracket \mathbf{n}_r^s = \mathbf{0} \tag{2.49}$$

und eine zusätzliche Bedingung

$$\llbracket W \rrbracket - \llbracket \mathbf{P} \mathbf{n}_r^s \cdot \mathbf{F} \mathbf{n}_r^s \rrbracket = 0. \tag{2.50}$$

Diese zusätzliche Bedingung ist in der Literatur als *Maxwell-Relation* bekannt [8, 24] und wurde 1981 von James [26] eingeführt. Verwendet man den Eshelby-Tensor (2.40), dann ist die Maxwell-Relation äquivalent zu

$$\begin{aligned} \mathbf{n}_r^s \cdot \llbracket \boldsymbol{\Sigma} \rrbracket \mathbf{n}_r^s &= 0 \\ \mathbf{n}_r^s \cdot \llbracket W\mathbf{I} - \mathbf{F}^T \mathbf{P} \rrbracket \mathbf{n}_r^s &= 0 \\ \llbracket W \rrbracket - \llbracket \mathbf{F} \mathbf{n}_r^s \cdot \mathbf{P} \mathbf{n}_r^s \rrbracket &= 0. \end{aligned} \quad (2.51)$$

Die Bedingung (2.51) ist die energetische Gleichgewichtsbedingung auf singulären Flächen. Die Hadamardsche Bedingung (2.33) impliziert, dass der Sprung von \mathbf{F} in tangentialer Grenzflächenrichtung \mathbf{t} verschwindet ($\llbracket \mathbf{F} \rrbracket \mathbf{t} = \mathbf{0}$). Damit ist auch $\mathbf{t} \cdot \llbracket \boldsymbol{\Sigma} \rrbracket \mathbf{n}_r^s = 0$. Daher kann die Gleichgewichtsbedingung (2.51) nach [8] verallgemeinert werden zu

$$\llbracket \boldsymbol{\Sigma} \rrbracket \mathbf{n}_r^s = \mathbf{0}.$$

Für eine Ableitung der energetischen Gleichgewichtsbedingung, unter Berücksichtigung der Grenzflächenenergie, muss die Formänderungsenergie des Systems (2.47) entsprechend mit

$$\int_S \gamma dA_r$$

erweitert werden. γ ist dabei die Energie der Grenzfläche pro Flächeneinheit. Die Variation der Grenzfläche, bezogen auf die Referenzgrenzfläche, wird nach Johnson [27] durch die Integration der doppelten mittleren Krümmung $\kappa = \nabla_{\mathbf{X}} \cdot \mathbf{n}_r$ berücksichtigt. Der Zusammenhang ist auch als die *Young-Laplace-Gleichung* bekannt. Damit folgt für die totale Variation der Formänderungsenergie

$$\begin{aligned} -\delta E(\boldsymbol{\chi}, S) &= \int_{V_r^+} \nabla_{\mathbf{X}} \cdot \mathbf{P} \cdot \delta \boldsymbol{\chi} dV_r + \int_{V_r^-} \nabla_{\mathbf{X}} \cdot \mathbf{P} \cdot \delta \boldsymbol{\chi} dV_r \\ &+ \int_S \llbracket \mathbf{P} \mathbf{n}_r^s \rrbracket \cdot \langle \delta \boldsymbol{\chi} \rangle + (\mathbf{n}_r^s \cdot \llbracket \boldsymbol{\Sigma} \rrbracket \mathbf{n}_r^s + \gamma \kappa) \delta S dA_r. \end{aligned}$$

Die resultierende energetische Sprungbedingung auf singulären Flächen wird damit zu

$$\mathbf{n}_r^s \cdot \llbracket \boldsymbol{\Sigma} \rrbracket \mathbf{n}_r^s + \gamma \kappa = 0. \quad (2.52)$$

Die Gleichung (2.52) wird als *Bilanz der Konfigurationskräfte* bezeichnet [8]. Vernachlässigt man die chemischen Konfigurationskräfte, so wird die Gleichung (2.52) äquivalent zu der verallgemeinerten *Gibbs-Thomson-Gleichung*, die 1986 von Johnson [27] abgeleitet wurde. Die Gibbs-Thomson-Gleichung bilanziert alle wirkenden Konfigurationskräfte auf Inhomogenitäten in einem Körper. Nach [29] sind die gesamten Konfigurationskräfte auf Inhomogenitäten gegeben durch

$$\mathbf{f}_{\Sigma} = \int_S \boldsymbol{\Sigma} \mathbf{n}_r^s dA_r.$$

Wobei \mathbf{f}_{Σ} als *generalisierte Kraft* auf Inhomogenitäten bezeichnet wird.

2.5. Geometrische Linearisierung

In Falle von infinitesimalen Verformungen ist eine geometrisch lineare Beschreibung der Körperbewegung möglich. Die Charakterisierung infinitesimaler Verformungen geschieht durch den *Verschiebungsgradienten*

$$\mathbf{H} = \nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{u} = \mathbf{F} - \mathbf{I}.$$

Wird die Bedingung

$$|\mathbf{H}| = \sqrt{\mathbf{H} \cdot \mathbf{H}} \ll 1$$

erfüllt, so ist die *geometrische Linearisierung* zulässig. In diesem Fall sind die Gradienten in der Lagrangeschen und Eulerschen Darstellung nahezu äquivalent (siehe z. B. [16])

$$\nabla_X = \nabla_x \mathbf{F} = \nabla_x (\mathbf{H} + \mathbf{I}) \approx \nabla_x.$$

Daher wird in der vorliegenden Arbeit bei geometrisch linearer Beschreibung ∇ für den Gradienten verwendet. Da die Gradienten in der Lagrangeschen und Eulerschen Darstellung nahezu äquivalent sind, müssen die Verzerrungen des Gitters vernachlässigbar klein sein. Dies bedeutet, dass auch die konvektiven Anteile der zeitlichen Ableitung (siehe (2.4)) vernachlässigbar klein sind. Die Zeitableitung einer Feldgröße ψ reduziert sich zu

$$\dot{\psi}_E(\mathbf{x}, t) = \frac{\partial \psi_E(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \frac{\partial \psi_E(\mathbf{x}, t)}{\partial \mathbf{x}} \cdot \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t} \approx \frac{\partial \psi_E(\mathbf{x}, t)}{\partial t}.$$

Aus diesem Grund muss nicht mehr zwischen der Lagrangeschen und Eulerschen Betrachtungsweise unterschieden werden. Die Massenbilanz (2.14) reduziert sich zu $\rho(\mathbf{x}, t) = \text{const.}$ Und für die Impulsbilanz (2.21) folgt

$$\rho \dot{\mathbf{v}} = \rho \ddot{\mathbf{u}} = \rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} = \rho \mathbf{b} + \text{div}(\boldsymbol{\sigma}).$$

Der Greensche Verzerrungstensor (2.44)

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2}(\mathbf{F}^T \mathbf{F} - \mathbf{I}) = \frac{1}{2}(\mathbf{H} + \mathbf{H}^T + \mathbf{H}^T \mathbf{H}) \approx \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) + \mathcal{O}(\mathbf{H}^2)$$

kann in einen linearen Anteil und einen Anteil der Ordnung $\mathcal{O}(\mathbf{H}^2)$, der für die korrekte Beschreibung von Drehungen notwendig ist, aufgespalten werden. In Falle von infinitesimalen Verformungen können alle quadratischen Anteile vernachlässigt werden und der Greensche Verzerrungstensor wird zum *infinitesimalen Verzerrungstensor*

$$\boldsymbol{\varepsilon} := \frac{1}{2}(\mathbf{H} + \mathbf{H}^T) = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) = \text{sym}(\nabla \mathbf{u}), \quad (2.53)$$

der von Cauchy in der klassischen Elastizitätstheorie eingeführt wurde [20]. Auch der Henckysche Verzerrungstensor sowie alle geometrisch nichtlinearen Verzerrungstensoren stimmen in diesem Fall mit dem linearen Verzerrungstensor (2.53) überein [16]. Wie in Abschnitt 2.2 beschrieben, lässt sich der Deformationsgradient \mathbf{F} polar zerlegen (siehe (2.6)). Mit $\mathbf{F} = \mathbf{I} + \mathbf{H}$ und der Taylorreihe für $\sqrt{1+x}$ (siehe z. B. [19]) folgt für den rechten Strecktensor

$$\mathbf{U} = \sqrt{\mathbf{F}^T \mathbf{F}} \approx \mathbf{I} + \frac{1}{2}(\mathbf{H} + \mathbf{H}^T) + \mathcal{O}(\mathbf{H}^2) = \mathbf{I} + \boldsymbol{\varepsilon} + \mathcal{O}(\mathbf{H}^2)$$

und für den Rotationstensor

$$\mathbf{R} = \mathbf{F} \mathbf{U}^{-1} \approx \mathbf{I} + \frac{1}{2}(\mathbf{H} - \mathbf{H}^T) + \mathcal{O}(\mathbf{H}^2) = \mathbf{I} + \boldsymbol{\omega} + \mathcal{O}(\mathbf{H}^2).$$

$\boldsymbol{\omega}$ ist dabei der *infinitesimale Rotationstensor*. Damit folgt für den Deformationsgradienten in der geometrischen Linearisierung

$$\mathbf{F} = \mathbf{R}\mathbf{U} \approx \mathbf{I} + \boldsymbol{\varepsilon} + \boldsymbol{\omega} + \mathcal{O}(\mathbf{H}^2).$$

Die Spannungsmaße können in einer geometrisch linearen Näherung durch die Cauchysche Spannung approximiert werden. Mit $\mathbf{F}^{-1} \approx \mathbf{I} - \mathbf{H} \approx \mathbf{I}$ und $J = \det(\mathbf{F}) \approx 1$ folgt für den ersten (2.16) und zweiten (2.17) Piola-Kirchhoffschen Spannungstensor

$$\begin{aligned} \mathbf{P} &= J\boldsymbol{\sigma}\mathbf{F}^{-\top} \approx \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{I} - \mathbf{H})^{-\top} \approx \boldsymbol{\sigma}, \\ \mathbf{S} &= J\mathbf{F}^{-1}\boldsymbol{\sigma}\mathbf{F}^{-\top} \approx (\mathbf{I} - \mathbf{H})\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{I} - \mathbf{H})^{\top} \approx \boldsymbol{\sigma}. \end{aligned} \quad (2.54)$$

Daher reduzieren sich die physikalisch linearen und geometrisch nichtlinearen konstitutiven Gleichungen zum geometrisch und physikalisch linearen *Hookeschen Gesetz* (siehe z. B. [30])

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathcal{C}[\boldsymbol{\varepsilon}]. \quad (2.55)$$

Aufgrund der Symmetrie der Cauchyschen Spannung (siehe Gl. (2.26)) und der Symmetrie des infinitesimalen Verzerrungstensors (2.53) kann nach George Green (1793–1841) die Komplexität des Steifigkeitstensors \mathcal{C} von 81 auf 21 unabhängige Konstanten reduziert werden. Gabriel Lamé (1795–1870) wies darauf hin, dass im Falle der Isotropie nur zwei Materialkennwerte λ und μ notwendig sind. Diese werden als *Lamésche Materialparameter* bezeichnet. Und das Hookesche Gesetz (2.55) reduziert sich zu

$$\boldsymbol{\sigma} = \lambda \text{sp}(\boldsymbol{\varepsilon})\mathbf{I} + 2\mu\boldsymbol{\varepsilon}.$$

Die Laméschen Materialparameter werden aus dem *Youngschen Modul* \mathcal{E} und der *Querkontraktion* ν bestimmt

$$\lambda = \frac{\nu\mathcal{E}}{(1-\nu)(1-2\nu)}, \quad \mu = \frac{\mathcal{E}}{2(1+\nu)}.$$

Die Hadamardsche Bedingung (2.34) kann folgendermaßen umgeschrieben werden

$$\llbracket \mathbf{F} \rrbracket = \llbracket \mathbf{H} \rrbracket = \mathbf{a} \otimes \mathbf{n}_r^s.$$

Im geometrisch linearen Fall sind die Normalen der singulären Fläche \mathbf{n}_r^s und \mathbf{n}^s ungefähr gleich. Daher folgt für den Sprung der infinitesimalen Dehnung

$$\llbracket \boldsymbol{\varepsilon} \rrbracket = \frac{1}{2}(\mathbf{a} \otimes \mathbf{n}^s + \mathbf{n}^s \otimes \mathbf{a}). \quad (2.56)$$

Mit der Gleichung (2.54) und der Sprungbedingung $\llbracket \boldsymbol{\sigma} \rrbracket \mathbf{n}^s = \mathbf{0}$ (siehe Gl. (2.24)) ergibt sich für die Sprungbedingung der Konfigurationskräfte (2.52)

$$\begin{aligned} \mathbf{n}^s \cdot \llbracket \boldsymbol{\Sigma} \rrbracket \mathbf{n}^s &= -\gamma\kappa \\ \llbracket W \rrbracket - \mathbf{n}^s \cdot \llbracket \mathbf{F}^{\top} \boldsymbol{\sigma} \rrbracket \mathbf{n}^s &= -\gamma\kappa \\ \llbracket W \rrbracket - \llbracket \mathbf{F} \rrbracket \mathbf{n}^s \cdot \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}^s &= -\gamma\kappa. \end{aligned} \quad (2.57)$$

Unter Ausnutzung der Symmetrie des Cauchyschen Spannungstensors kann gemäß [25, 31] im geometrisch linearen Fall die Sprungbedingung der Konfigurationskräfte (2.52) wie folgt approximiert werden

$$[[W]] - [[\boldsymbol{\varepsilon}]] \mathbf{n}^s \cdot \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}^s = -\gamma \kappa. \quad (2.58)$$

Diese Gleichung stellt die Bilanz der mechanischen Konfigurationskräfte und der Konfigurationskräfte der Grenzfläche für infinitesimale Verformungen dar.

2.5.1. Reduktion auf zwei Dimensionen

Das dreidimensionale Modell des elastischen Körpers kann mittels Symmetrieanahmen auf zwei Dimensionen reduziert werden. Verschwindet die Spannung in eine Richtung, z. B. in Z-Richtung, was bei einer dünnen Scheibe der Fall ist, so verschwinden auch entsprechend die Spannungskomponenten $\sigma_{zz} = \sigma_{xz} = \sigma_{yz} = 0$. Dieser Fall wird als *ebener Spannungszustand* (ESZ) bezeichnet. Ein *ebener Verzerrungszustand* (EVZ) liegt vor, wenn die Verschiebungskomponente in eine der Raumrichtungen, z. B. die Z-Richtung u_z , verschwindet. Damit gilt auch $\varepsilon_{zz} = \varepsilon_{xz} = \varepsilon_{yz}$. Ein solcher Zustand tritt bei mechanischen Systemen auf, bei denen sich die Belastung in Z-Richtung nicht ändert und bei denen eine Längenänderung in Z-Richtung verhindert wird. Ein dickes Rohr unter Innendruck, das sich in Längsrichtung nicht ausdehnen kann, ist ein geeignetes Beispiel.

2.6. Plastizitätstheorie für infinitesimale Deformationen

Beim Überschreiten von kritischen Spannungen und damit verbundenen Deformation kann es in Materialien zu irreversiblen Verformungen kommen. In diesem Fall wird von *plastischen* Deformationen gesprochen. Auf atomarer Skala sind diese Deformationen an die Bewegung der Ebenen des Kristallgitters gegeneinander gebunden. Für eine genauere Beschreibung der Plastifizierungsmechanismen wird auf Standardliteratur wie z. B. Gottstein [32] verwiesen. Im Folgenden werden nur die im Rahmen der vorliegenden Arbeit verwendeten phänomenologischen Ansätze zur mathematischen Beschreibung der Plastifizierung für infinitesimale Deformationen besprochen.

Unter der Annahme von infinitesimalen Deformationen lässt sich der Dehnungstensor

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}_{el} + \boldsymbol{\varepsilon}_{pl}$$

additiv in einen elastischen $\boldsymbol{\varepsilon}_{el}$ und einen plastischen $\boldsymbol{\varepsilon}_{pl}$ Anteil zerlegen. Damit ergibt sich für die konstitutive Gleichung (2.55)

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C}[\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_{pl}]$$

und entsprechend für die Formänderungsenergiegedichte

$$W(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\varepsilon}_{pl}) = \frac{1}{2}(\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_{pl}) \cdot \mathbf{C}[\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_{pl}].$$

2.6.1. Fließfunktion und Verfestigung

Fließfunktionen vereinen den vorliegenden Spannungszustand mit einem charakteristischen Spannungsgrenzwert des Materials. Im Allgemeinen ist dieser Spannungsgrenzwert anisotrop und zug-druck abhängig. Wird ein isotropes und zug-druck unabhängiges Materialverhalten angenommen, so kann der Spannungsgrenzwert durch die *von Mises-Fließbedingung* $\sigma_F = \sigma_{\text{mises}}$ charakterisiert werden. Dabei ist σ_F die *Fließspannung* und die *von Mises-Vergleichsspannung* ist wie folgt definiert

$$\sigma_{\text{mises}} = \sqrt{\frac{3}{2}|\boldsymbol{\sigma}'|}, \quad (2.59)$$

mit $\boldsymbol{\sigma}' = \boldsymbol{\sigma} - (\text{sp}(\boldsymbol{\sigma})/3)\mathbf{I}$ als deviatorischen Spannungsanteil. Im dreidimensionalen Hauptspannungsraum definiert die Fließbedingung eine *Fließfläche*. Liegt ein Spannungszustand auf der Fließfläche, so tritt plastische Deformation ein. Spannungszustände außerhalb dieser Fließfläche sind bei ratenunabhängigen Plastizitätsmodellen nicht möglich.

Verfestigungsgesetze definieren die Entwicklung der Fließfläche in Abhängigkeit des plastischen Verformungszustandes. Sie ändern die Größe, Lage und Form der Fließfläche im Hauptspannungsraum und gehen in die Fließfunktion mit weiteren Verfestigungsparametern ein. Man spricht von idealer Plastizität, wenn sich die Fließfläche nicht ändert. Ein kinematisches Verfestigungsgesetz ändert die Lage und ein isotropes Verfestigungsgesetz ändert die Form der Fließfläche im Hauptspannungsraum. Im Rahmen dieser Arbeit wird ein isotropes Verfestigungsgesetz verwendet. Demnach ist die Fließspannung $\sigma_F(\bar{\boldsymbol{\epsilon}}_{\text{pl}})$ eine Funktion von der *akkumulierten plastischen Dehnung* $\bar{\boldsymbol{\epsilon}}_{\text{pl}} = \sqrt{2/3} \int |\dot{\boldsymbol{\epsilon}}_{\text{pl}}| dt$. In Kombination mit der von Mises-Fließbedingung ergibt sich die folgende Form für die Fließbedingung

$$f_F(\boldsymbol{\sigma}', \bar{\boldsymbol{\epsilon}}_{\text{pl}}) = |\boldsymbol{\sigma}'| - \sqrt{\frac{2}{3}}\sigma_F(\bar{\boldsymbol{\epsilon}}_{\text{pl}}) \leq 0. \quad (2.60)$$

Ist die Verfestigung isotrop und linear, so folgt $\sigma_F(\bar{\boldsymbol{\epsilon}}_{\text{pl}}) = \sigma_{F_0} + H\bar{\boldsymbol{\epsilon}}_{\text{pl}}$ mit H als Verfestigungsparameter und σ_{F_0} als initiale Fließspannung.

2.6.2. Fließregel

Die *Fließregel* bestimmt die zeitliche Entwicklung der plastischen Dehnung. Zur Bestimmung der Fließrichtung wird das Prinzip der maximalen Dissipation verwendet. Ausgehend vom ersten und zweiten Hauptsatz der Thermodynamik (siehe Abschnitte 2.3.3 und 2.3.4) folgt entsprechend Simo und Hughes [33] für den mechanischen Beitrag der lokalen Clausius-Duhem-Ungleichung (2.31)

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \dot{\boldsymbol{\epsilon}} - \dot{W}_{\text{ges.}}(\boldsymbol{\epsilon}, \boldsymbol{\epsilon}_{\text{pl}}, \boldsymbol{\alpha}_{\text{pl}}) \geq 0. \quad (2.61)$$

Der erste Beitrag der Gleichung (2.61) ist die Spannungsleistung P und $W_{\text{ges.}}(\boldsymbol{\epsilon}, \boldsymbol{\epsilon}_{\text{pl}}, \boldsymbol{\alpha}_{\text{pl}})$ beinhaltet sowohl den elastischen $W(\boldsymbol{\epsilon}, \boldsymbol{\epsilon}_{\text{pl}})$ als auch den plastischen $W_{\text{pl}}(\boldsymbol{\alpha}_{\text{pl}})$ Beitrag der freien Energiedichte. Wobei $\boldsymbol{\alpha}_{\text{pl}}$ die inneren plastischen Variablen beinhaltet. Unter Anwendung der Kettenregel folgt für

die Clausius-Duhem-Ungleichung (2.61)

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma} \cdot \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} - \frac{\partial W(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\varepsilon}_{\text{pl}})}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} \cdot \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} - \frac{\partial W(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\varepsilon}_{\text{pl}})}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_{\text{pl}}} \cdot \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{pl}} - \frac{\partial W_{\text{pl}}(\boldsymbol{\alpha}_{\text{pl}})}{\partial \boldsymbol{\alpha}_{\text{pl}}} \cdot \dot{\boldsymbol{\alpha}}_{\text{pl}} &\geq 0 \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{pl}} - \frac{\partial W_{\text{pl}}(\boldsymbol{\alpha}_{\text{pl}})}{\partial \boldsymbol{\alpha}_{\text{pl}}} \cdot \dot{\boldsymbol{\alpha}}_{\text{pl}} &\geq 0. \end{aligned} \quad (2.62)$$

Dabei wurde die Relation $\partial W(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\varepsilon}_{\text{pl}})/(\partial \boldsymbol{\varepsilon}_{\text{pl}}) = -\boldsymbol{\sigma}$ verwendet. Die linke Seite der Gleichung (2.62) ist die Dissipationsdichte. Damit ist die *mechanische Dissipation* definiert durch

$$D(\boldsymbol{\sigma}, \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{pl}}) = \int_V \boldsymbol{\sigma} \cdot \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{pl}} - \frac{\partial W_{\text{pl}}(\boldsymbol{\alpha}_{\text{pl}})}{\partial \boldsymbol{\alpha}_{\text{pl}}} \cdot \dot{\boldsymbol{\alpha}}_{\text{pl}} dV. \quad (2.63)$$

Man kann zeigen, dass das Prinzip der maximalen plastischen Dissipation (siehe z.B. [33]) in Kombination mit der Forderung, dass die Fließfläche konvex ist, zu einer Evolutionsgleichung der plastischen Dehnung in Form einer Normalengleichung führt. Eine solche Fließregel wird als *assoziativ* bezeichnet. Damit ergibt sich unter Verwendung der Mises-Fließbedingung in Kombination mit isotroper Verfestigung für die Fließregel und damit für die Zustandsgleichung der plastischen Dehnungen

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{pl}} = \dot{\gamma} \frac{\partial f_{\text{F}}(\boldsymbol{\sigma}', \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{pl}})}{\partial \boldsymbol{\sigma}'}. \quad (2.64)$$

$\dot{\gamma}$ ist dabei ein *Konsistenzparameter*, der unter Verwendung der Konsistenzbedingung $\dot{f}_{\text{F}} \stackrel{!}{=} 0$ berechnet werden kann.

2.6.3. Return-Mapping-Algorithmus

Bei isotropen Materialien kann der *Return-Mapping-Algorithmus* angewendet werden, um den Konsistenzparameter $\dot{\gamma}$ zu bestimmen [33]. Hierzu wird zum Zeitschritt $n + 1$ eine Testspannung

$$\boldsymbol{\sigma}'_{\text{test}}{}^{n+1} = \mathcal{C}(\boldsymbol{\varphi})[\boldsymbol{\varepsilon}^{n+1} - \boldsymbol{\varepsilon}_{\text{pl}}^n]$$

berechnet. Dabei wird die plastische Dehnung des vorherigen Zeitschritts n verwendet. Anschließend wird überprüft, ob die Testspannung die Fließbedingung (2.60) erfüllt. Wird die Fließbedingung verletzt, nämlich $f_{\text{F}}(\boldsymbol{\sigma}'_{\text{test}}{}^{n+1}, \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{pl}}^n) > 0$, so wird der Konsistenzparameter $\dot{\gamma}$ über die Bedingung $f_{\text{F}}(\boldsymbol{\sigma}'_{\text{test}}{}^{n+1}, \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{pl}}^{n+1}) \stackrel{!}{=} 0$ bestimmt. Nach [34] wird dabei der Konsistenzparameter zu

$$\Delta\gamma = \frac{f_{\text{F}}(\boldsymbol{\sigma}'_{\text{test}}{}^{n+1}, \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{pl}}^n)}{2\mu + \frac{2}{3}H}.$$

Dabei ist μ die Querkontraktion und H ist der Verfestigungsparameter. Im Anschluss wird die Gleichung (2.64) verwendet, um die plastischen Dehnungen von Zeitschritt $n + 1$ zu bestimmen. Dabei wird bei Isotropie ausgenutzt, dass die Fließrichtung $\partial f_{\text{F}}(\boldsymbol{\sigma}', \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{pl}})/\partial \boldsymbol{\sigma}'$ gleich der Richtung der Testspannung ist und es ergibt sich für die inneren Variablen von Zeitschritt $n + 1$

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{\text{pl}}^{n+1} = \boldsymbol{\varepsilon}_{\text{pl}}^n + \Delta\gamma \frac{\boldsymbol{\sigma}'_{\text{test}}{}^{n+1}}{|\boldsymbol{\sigma}'_{\text{test}}{}^{n+1}|}, \quad \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{pl}}^{n+1} = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{pl}}^n + \sqrt{\frac{2}{3}} \Delta\gamma.$$

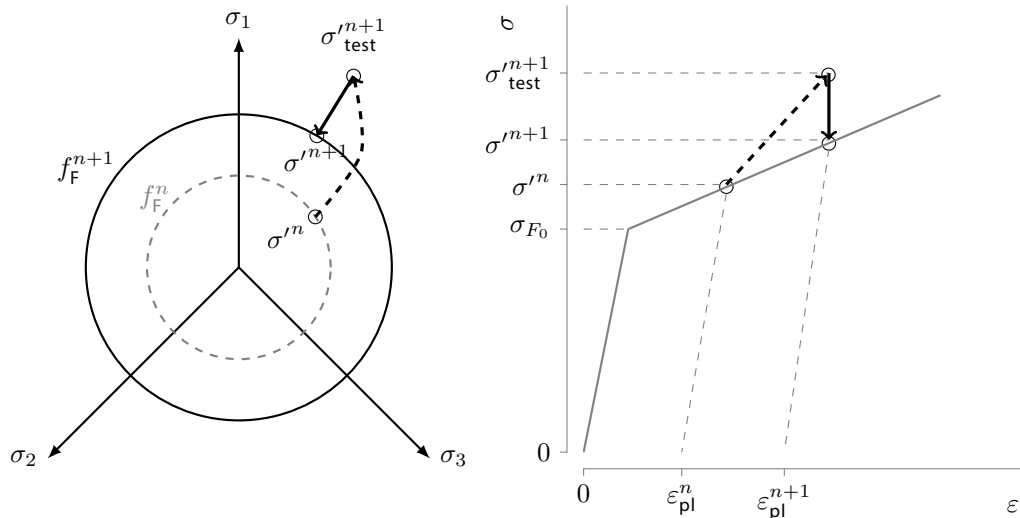


Abbildung 2.3.: Return-Mapping-Algorithmus in Deviatorebene des Hauptspannungsraumes (links) und Spannungs-Dehnungs-Diagramm eines einachsigen Zugversuches (rechts).

Das Verfahren und die durchgeführten Schritte sind in der Abbildung 2.3 sowohl im Hauptspannungsraum als auch anhand eines Spannungs-Dehnungs-Diagramms eines einachsigen Zugversuches visualisiert.

2.7. Finite-Differenzen-Methode

Die mechanische Impulsbilanz (2.21) stellt eine der wichtigsten Bilanzgleichungen der Kontinuumsmechanik dar. Durch sie lassen sich Spannungen, Deformationen und Dehnungen in komplexen Geometrien ermitteln. In der Phasenfeldmethode, die im Kapitel 3 vorgestellt wird, stellt die Evolutionsgleichung der Ordnungsparameter (3.17) die zugrundeliegende Differentialgleichung dar. Die analytische Berechnung dieser partiellen Differentialgleichung ist allerdings nur in speziellen Sonderfällen möglich. Komplexe Bauteilgeometrie oder Heterogenität der Mikrostruktur sind einige der Gründe für analytische Unlösbarkeit dieser Differentialgleichung. Da die experimentelle Bestimmung der Kenngrößen vieler Bauteilgeometrien oder komplexer Mikrostrukturen nicht möglich ist, ist man auf numerische Approximationsverfahren angewiesen. Es existieren mehrere numerische Verfahren zur Lösung partieller Differentialgleichungen. Zu nennen sind speziell die *Finite-Elemente-*, die *Finite-Volumen-* und die *Finite-Differenzen-Methode*. Griebel et al. [35] bieten einen umfassenden Überblick über diese numerischen Methoden. Alle diese Methoden approximieren die Lösung der partiellen Differentialgleichungen indem der Ortsraum und die Zeit diskretisiert wird. So entsteht eine Aufteilung der Lösung sowohl in ein örtliches als auch in ein zeitliches Berechnungsgitter. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wird die Finite-Differenzen-Methode zur Lösung partieller Differentialgleichungen angewandt.

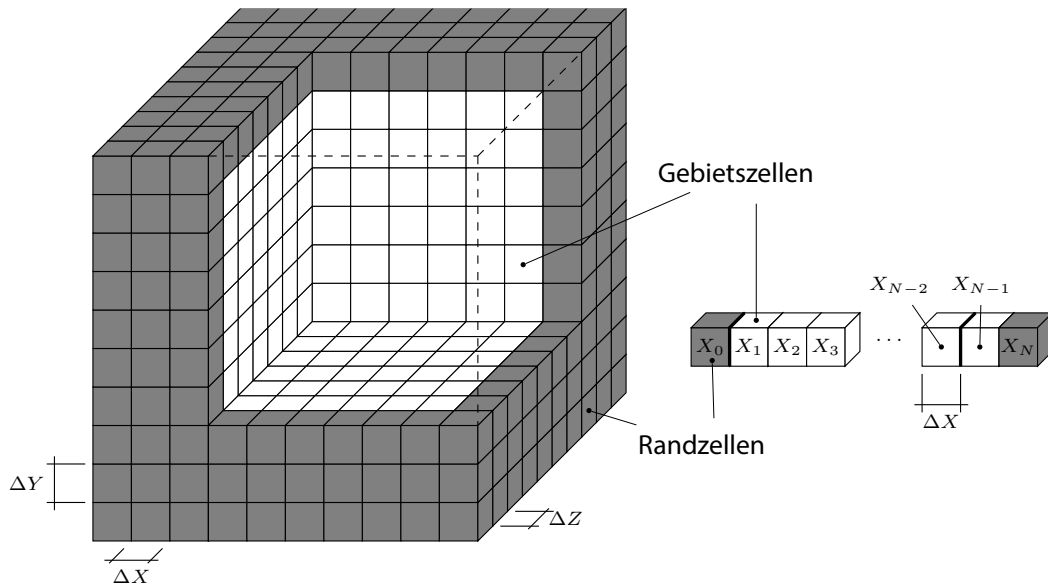


Abbildung 2.4.: Parametrisierung eines dreidimensionalen Gebietes (links) und eines eindimensionalen Gebietes mit äquidistanten Gitter (rechts) gemäß [36]

2.71. Diskretisierung

Bei der Finite-Differenzen-Methode wird der Ortsraum mit einem äquidistanten Gitter und die Zeit mit äquidistanten Zeitschritten aufgeteilt. In der Abbildung 2.4 ist die Aufteilung eines dreidimensionalen und eines eindimensionalen Gebietes mit äquidistantem Gitter dargestellt. Für die Herleitung der örtlichen Ableitungen wird eine beliebige Feldgröße $\psi(X, t)$, die von dem Ort X und der Zeit t abhängt, in dem eindimensionalen Gebiet der Abbildung 2.4 betrachtet. Wird eine Taylorreihe bis zur zweiten Ordnung an der Position X_2 zwischen X_1 und X_3 gemäß der Abbildung gebildet, so folgt nach [37]

$$\begin{aligned}\psi(X_1) &= \psi(X_2) - \Delta X \frac{\partial \psi(X_2)}{\partial X} + \frac{(\Delta X)^2}{2} \frac{\partial^2 \psi(X_2)}{\partial X^2} - \dots, \\ \psi(X_3) &= \psi(X_2) + \Delta X \frac{\partial \psi(X_2)}{\partial X} + \frac{(\Delta X)^2}{2} \frac{\partial^2 \psi(X_2)}{\partial X^2} + \dots\end{aligned}$$

mit $\Delta X = X_2 - X_1 = X_3 - X_2$. Nach Addition bzw. Subtraktion der beiden Gleichungen ergibt sich für die diskreten Ableitungen der Feldgröße $\psi(X, t)$ an der Position X_2

$$\begin{aligned}\frac{\partial \psi(X_2)}{\partial X} &= \frac{\psi(X_3) - \psi(X_1)}{2\Delta X}, \\ \frac{\partial^2 \psi(X_2)}{\partial X^2} &= \frac{\psi(X_1) - 2\psi(X_2) + \psi(X_3)}{(\Delta X)^2}.\end{aligned}$$

Auf eine ähnliche Weise können auch die zeitlichen Ableitungen diskretisiert werden und es ergibt sich mit $\Delta t = t_2 - t_1 = t_3 - t_2$ für die Ableitungen zum Zeitpunkt t_2

$$\frac{\partial \psi(t_2)}{\partial t} = \frac{\psi(t_3) - \psi(t_1)}{2\Delta t},$$

$$\frac{\partial^2 \psi(t_2)}{\partial t^2} = \frac{\psi(t_1) - 2\psi(t_2) + \psi(t_3)}{(\Delta t)^2}.$$

Damit können sowohl die örtlichen als auch die zeitlichen Ableitungen numerisch diskretisiert werden. Allerdings sollte bei der Wahl von ΔX und Δt die *Courant-Friedrich-Levi-Bedingung*

$$v_X \leq \frac{\Delta X}{\Delta t} \quad (2.65)$$

erfüllt bleiben, um numerische Instabilitäten zu vermeiden (siehe z. B. [35]). Nach dieser Bedingung werden die Simulationen instabil, wenn die Geschwindigkeit v_X einer Zustandsänderung der diskretisierten Größe $\psi(X, t)$ bewirkt, dass die Information in der Zeit Δt einen größeren Weg als ΔX zurücklegen muss. Im Mehrdimensionalen erweitert sich die Bedingung (2.65) entsprechend in alle betrachteten Raumrichtungen.

Eine weitere Notwendigkeit beim Lösen von partiellen Differentialgleichungen ist die Charakterisierung der Randbedingungen. Die Anfangsbedingungen werden zum Zeitpunkt t_0 festgelegt. Bei den Randbedingungen werden die Randzellen (siehe Abb. (2.4)) verwendet, um an den Rändern des Gebietes die entsprechenden Randbedingungen zu realisieren. In dem eindimensionalen Gebiet der Abbildung (2.4) sind X_0 und X_N die Randzellen und der Gebietsrand ist zwischen den Zellen X_0 und X_1 bzw. zwischen X_{N-1} und X_N hervorgehoben.

3

Phasenfeldmethode zur Modellierung der Mikrostrukturevolution mehrphasiger Systeme

Die Phasenfeldmethode hat ihren Ursprung in den fundamentalen Arbeiten von van der Waals [38], Ginzburg und Landau [39], Cahn und Hilliard [40] und Halperin et al. [41]. Typisch für die Phasenfeldmethode ist ein diffuser Übergangsbereich zwischen den physikalisch abgetrennten Regionen. Dies ersetzt die explizite Grenzflächenverfolgung [1, 5], beugt der Bildung von großen Gradienten in den physikalischen Feldern, die zu Instabilitäten führen können, vor und macht großskalige mikrostrukturelle Simulationen unter Berücksichtigung der Evolution von Grenzflächen rechnerisch handhabbar [5]. Daher hat sich diese Methode bei der Modellierung von mikrostrukturellen Evolutionsprozessen, wie Erstarrung, fest–fest Phasenumwandlung, Wachstum und Vergrößerung von Ausscheidungen, Kornwachstum aber auch Rissausbreitung etabliert [2, 4].

Die Basis für das in der vorliegenden Arbeit verwendete und weiterentwickelte Modell ist das Multikomponenten- und Multiphasenfeldmodell, das von Nestler et al. [13] vorgestellt wurde. Dieses Modell besitzt durch seine Allgemeingültigkeit die Flexibilität, sowohl reine krümmungsgetriebene Prozesse in Vielkornsystemen als auch Phasenübergänge unter Berücksichtigung unterschiedlichster treibender Kräfte zu beschreiben. Im Folgenden wird das verwendete Multiphasenfeldmodell vorgestellt, die resultierende Evolutionsgleichung abgeleitet und die Verbindung zu Modellen mit scharfen Grenzflächen hergestellt.

3.1. Multiphasenfeldmodell

Die meisten Materialien sind heterogen auf der *mesoskopischen* Skala, die sich zwischen der atomistischen und der makroskopischen Längenskala befindet. Das Multiphasenfeldmodell [13] beschreibt auf der mesoskopischen Längenskala die Evolution der Mikrostruktur in Multikomponenten- und Multiphasensystemen. Dabei wird die Parametrisierung des Gebietes durch die *Ordnungsparameter* $\varphi_\alpha(\mathbf{X}, t)$, $\alpha = 1 \dots N$, mit N als Anzahl der Ordnungsparameter, realisiert. Jeder der

Ordnungsparameter ist Teil des N -Tupels $\boldsymbol{\varphi}(\mathbf{X}, t) = \varphi_1, \dots, \varphi_N$ und repräsentiert die jeweilige Volumenfraktion der einzelnen Phasen. Die Heterogenität der Materialparameter äußert sich bei den meisten Materialien durch Sprünge an der Grenzfläche zwischen den Körnern oder Domänen. Innerhalb der physikalisch abgetrennten Bereiche, die als *Phasen* bezeichnet werden [42], sind die Materialparameter homogen. Daher kann jeder Phase ein Ordnungsparameter zugeordnet werden. Der Ordnungsparameter nimmt den Wert $\varphi_\alpha(\mathbf{X}, t) = 1$ innerhalb des ihm zugeordneten Bereichs an und $\varphi_\alpha(\mathbf{X}, t) = 0$ außerhalb. Im Gegensatz zu Modellen mit scharfen Grenzflächen ist der Übergang zwischen den Phasen diffus. Das bedeutet, es existiert ein volumetrischer Übergangsbereich, der als *Interface* bezeichnet wird, bei dem die Ordnungsparameter koexistieren können. In dem Übergangsbereich ändert sich der Wert der Ordnungsparameter kontinuierlich in dem Bereich $0 < \varphi_\alpha(\mathbf{X}, t) < 1$, wie auf der rechten Seite der Abbildung 3.1 dargestellt ist. Damit werden die Phasen zu kontinuierlichen Feldern, die durch einen Übergangsbereich der Breite l getrennt sind. Daher kommt für diese Art der Modellierung die Bezeichnung *Phasenfeldmethode* [43]. Da die Ordnungsparameter die jeweilige Volumenfraktion der einzelnen Phasen darstellen, muss die lokale Bedingung $\sum_{\alpha=1}^N \varphi_\alpha(\mathbf{X}, t) = 1$ stets erfüllt sein.

Im Allgemeinen ist die freie Energie eines Systems in der Lagrangeschen Darstellung gegeben durch

$$\mathcal{F}(t, \dots) = \int_{S_r} f_{se}(\mathbf{X}, t, \dots) dA_r + \int_{V_r} f_{bulk}(\mathbf{X}, t, \dots) dV_r. \quad (3.1)$$

$f_{bulk}(\mathbf{X}, t, \dots)$ ist die Energiedichte an der Referenzposition und $f_{se}(\mathbf{X}, t, \dots)$ ist die Oberflächenenergie an der singulären Fläche $S_r(\mathbf{X}, t)$ zwischen den einzelnen Phasen. Wobei (\dots) die möglichen Abhängigkeiten der einzelnen Energiebeiträge darstellen soll. Die Kenntnis der Anfangsplatzierung $\mathbf{X} = \boldsymbol{\xi}(\mathbf{x}, t)$ ist notwendig für die Charakterisierung von möglichen Inhomogenitäten in der Struktur des Materials.

Führt man die Parametrisierung des gesamten Gebietes durch Ordnungsparameter aus, so kann die freie Energie (3.1) folgendermaßen beschrieben werden

$$\mathcal{F}(\boldsymbol{\varphi}, \dots) = \sum_{\alpha, \beta > \alpha} \int_{S_r^{\alpha\beta}} f_{se}^{\alpha\beta}(\varphi_\alpha, \varphi_\beta, \dots) dA_r + \sum_{\alpha} \int_{V_r^\alpha} f_{bulk}^\alpha(\varphi_\alpha, \dots) dV_r. \quad (3.2)$$

$f_{bulk}^\alpha(\varphi_\alpha, t, \dots)$ ist die Energiedichte innerhalb der Phase α und $f_{se}^{\alpha\beta}(\varphi_\alpha, \varphi_\beta, t, \dots)$ der Beitrag der Grenzflächenenergie zwischen der Phasen α und β . Die singuläre Fläche $S_r^{\alpha\beta}$ ist die Grenzfläche zwischen den Phasen α und β an der Position $\varphi_\alpha = \varphi_\beta$, wie auf der rechten Seite der Abbildung 3.1 dargestellt ist. Die Summe $\sum_{\alpha, \beta > \alpha} := \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\beta=\alpha+1}^N$ ist die Summe über alle möglichen Permutationen der Paarungen von α und β unter Ausschluss von Paarung mit sich selbst.

Da sich das Interface zwischen den Ordnungsparametern, und somit zwischen Phasen, über einen volumetrischen Bereich erstreckt, wie in Abbildung 3.1 abgebildet ist, kann das Oberflächenintegral mit einer geschickten Wahl des Integranden durch ein Volumenintegral ersetzt werden. Dies führt zu einem Integral nach Art von Ginzburg und Landau [39]. Nestler et al. [13] ist es gelungen, das Phasenfeldmodell mit einer ausreichenden Anzahl von Freiheitsgraden auszustatten, um die Physik an jeder auftretenden Grenzfläche eines Systems aus N Phasen und die Wechselwirkung von je zwei benachbarten Phasen einzeln zu behandeln [44]. Dies ermöglicht die Bildung eines Integrals nach Ginzburg-Landau Art für Multiphasensysteme. Damit wird die freie Energie (3.2) eines Systems zu

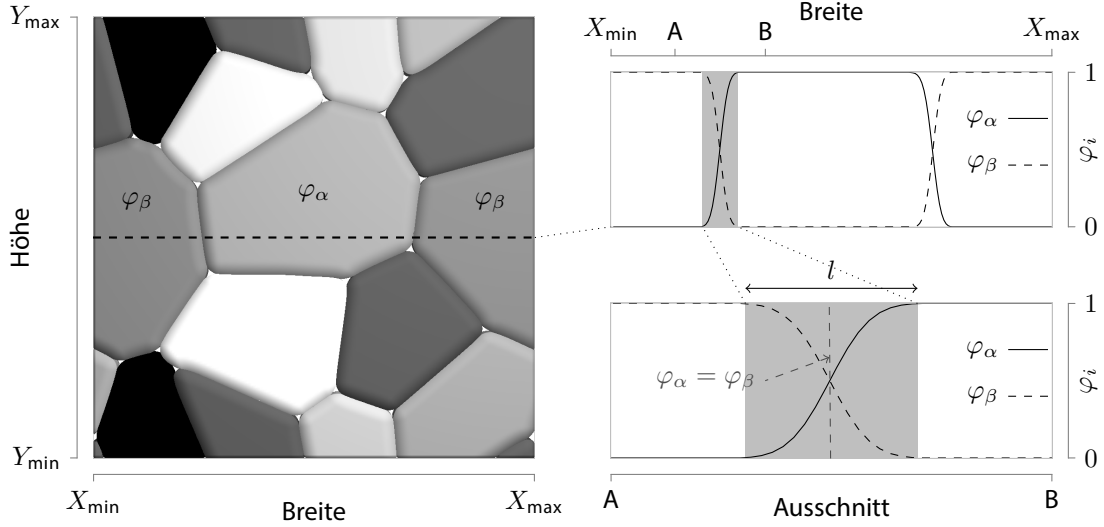


Abbildung 3.1.: Parametrisierung eines polykristallines Gefüges mit Ordnungsparametern: (links) polykristallines Gefüge und (rechts) diffuser Übergangsbereich zwischen den Phasen

$$\mathcal{F}(\boldsymbol{\varphi}, \nabla_X \boldsymbol{\varphi}, \dots) = \int_{V_r} \underbrace{\epsilon a(\boldsymbol{\varphi}, \nabla_X \boldsymbol{\varphi}) + \frac{1}{\epsilon} \omega_{\text{ob}}(\boldsymbol{\varphi}) + f_{\text{bulk}}(\boldsymbol{\varphi}, \dots)}_{f(\boldsymbol{\varphi}, \nabla_X \boldsymbol{\varphi}, \dots)} dV_r. \quad (3.3)$$

Dabei wird die Interfacebreite l durch den Parameter ϵ charakterisiert, wobei der explizite Zusammenhang zwischen ϵ und l in Abschnitt 3.1.3 abgeleitet ist. Mit $\gamma_{\alpha\beta}$ als Oberflächenenergie am α - β -Interface ist der Beitrag der Grenzflächenenergie durch die Interaktion zwischen der Gradientenenergiedichte

$$a(\boldsymbol{\varphi}, \nabla_X \boldsymbol{\varphi}) = \sum_{\alpha, \beta > \alpha} \gamma_{\alpha\beta} |\mathbf{Q}_{\alpha\beta}|^2 = \sum_{\alpha, \beta > \alpha} \gamma_{\alpha\beta} |\varphi_\alpha \nabla_X \varphi_\beta - \varphi_\beta \nabla_X \varphi_\alpha|^2 \quad (3.4)$$

und dem Energiepotential

$$\omega_{\text{ob}}(\boldsymbol{\varphi}) = \frac{16}{\pi^2} \sum_{\alpha, \beta > \alpha} \gamma_{\alpha\beta} \varphi_\alpha \varphi_\beta + \sum_{\alpha, \beta > \alpha, \delta > \beta} \gamma_{\alpha\beta\delta} \varphi_\alpha \varphi_\beta \varphi_\delta \quad \text{oder} \quad (3.5)$$

$$\omega_{\text{we}}(\boldsymbol{\varphi}) = 9 \sum_{\alpha, \beta > \alpha} \gamma_{\alpha\beta} \varphi_\alpha^2 \varphi_\beta^2 + \sum_{\alpha, \beta > \alpha, \delta > \beta} \gamma_{\alpha\beta\delta} \varphi_\alpha^2 \varphi_\beta^2 \varphi_\delta^2 \quad (3.6)$$

repräsentiert. Bei Verwendung des Hindernispotentials wird $\omega_{\text{ob}}(\boldsymbol{\varphi}) = \infty$ gesetzt, wenn das N -Tupel $\boldsymbol{\varphi}$ nicht innerhalb des *Gibbs-Simplex*

$$\mathcal{G} = \left\{ \boldsymbol{\varphi} \in \mathbb{R}^N : \sum_{\alpha} \varphi_\alpha = 1, \varphi_\alpha \geq 0 \right\}$$

bleibt, wie es in Nestler et al. [13] vorgestellt ist. Die Abgrenzung der einzelnen Dualbeiträge der Grenzflächenenergie ermöglicht der generalisierte α - β -Gradient

$$\mathbf{Q}_{\alpha\beta} = \varphi_\alpha \nabla_X \varphi_\beta - \varphi_\beta \nabla_X \varphi_\alpha. \quad (3.7)$$

Bei der Wahl des Potentials hat man die Wahl zwischen dem *Multihindernispotential* $\omega_{\text{ob}}(\boldsymbol{\varphi})$ (aus dem Engl. *multi-obstacle*) und *Multimuldenpotential* $\omega_{\text{we}}(\boldsymbol{\varphi})$ (aus dem Engl. *multi-well*). In der vorliegenden Arbeit wird allerdings das Multihindernispotential (3.5) als das energetische Potential verwendet. Der zusätzliche Dreiphasenbeitrag in den Potentialen (3.5) und (3.6) verhindert die unphysikalische Bildung der sogenannten Drittphasen [13, 45] in Zweiphasenbereichen. Eine umfangreiche Diskussion für die Wahl der $\gamma_{\alpha\beta\delta}$ -Parameter ist in Hötzer et al. [46] zu finden. Auf die Wechselwirkung zwischen der Gradientenenergiedichte (3.4) und dem freien Energiepotential (3.5) wird in Abschnitt 3.1.3 eingegangen.

Mithilfe der *Interpolationsfunktionen* $h^\alpha(\boldsymbol{\varphi})$ der einzelnen lokal vorliegenden Phasen wird jedem Punkt im System die freie Energiedichte innerhalb der Phasen zugewiesen

$$f_{\text{bulk}}(\boldsymbol{\varphi}, \dots) = \sum_{\alpha} f_{\text{bulk}}^{\alpha}(\dots) h^{\alpha}(\boldsymbol{\varphi}).$$

Je nach Anwendungsfall kann der jeweilige Ordnungsparameter φ_{α} für die Interpolationsfunktion $h^{\alpha}(\boldsymbol{\varphi})$ oder eine Variante mit einem schärferen Übergang zwischen den einzelnen Bereichen verwendet werden [13]. Dabei ist sicherzustellen, dass die Bedingung $\sum_{\alpha} h^{\alpha}(\boldsymbol{\varphi}) = 1$ stets erfüllt wird [47]. Ausgehend von Interpolationsfunktionen für Zweiphasensysteme

$$\tilde{h}^{\alpha}(\varphi_{\alpha}) = \begin{cases} \tilde{h}_1^{\alpha} = \varphi_{\alpha} \\ \tilde{h}_2^{\alpha} = \varphi_{\alpha}^2(3 - 2\varphi_{\alpha}) \\ \tilde{h}_3^{\alpha} = \varphi_{\alpha}^3(6\varphi_{\alpha}^2 - 15\varphi_{\alpha} + 10) \end{cases} \quad (3.8)$$

ergibt sich für die Interpolationsfunktionen in polykristallinen Systemen

$$h_i^{\alpha}(\boldsymbol{\varphi}) = \frac{\tilde{h}_i^{\alpha}(\varphi_{\alpha})}{\sum_{\beta} \tilde{h}_i^{\beta}(\varphi_{\beta})}. \quad (3.9)$$

In der Abbildung 3.2 sind die einzelnen Interpolationsfunktionen in einem Zwei- und Dreiphasenbereich gegenübergestellt.

Garcke et al. [45] haben gezeigt, dass sich die Oberflächenenergie am α - β -Interface $f_{\text{se}}^{\alpha\beta}$ im Gleichgewicht durch die Gradientenenergiedichte (3.4) und das freie Energiepotential (3.5) approximieren lässt. Das Linienintegral über die jeweiligen Dualbeiträge α - β der beiden Potentiale in Richtung der Normalen \mathbf{n}_r zur Grenzfläche ergibt die Oberflächenenergie

$$f_{\text{se}}^{\alpha\beta}(\varphi_{\alpha}, \varphi_{\beta}, \dots) = \int_I \left(\epsilon \gamma_{\alpha\beta} |\mathbf{Q}_{\alpha\beta}|^2 + \frac{1}{\epsilon} \frac{16}{\pi^2} \gamma_{\alpha\beta} \varphi_{\alpha} \varphi_{\beta} \right) \mathbf{n}_r \cdot d\mathbf{X}. \quad (3.10)$$

Für einen eindimensionalen Zweiphasenfall wird dieser Zusammenhang in Abschnitt 3.1.3 hergeleitet. Damit sind die beiden Darstellungen der freien Energie, die Repräsentation durch scharfe Grenzflächen (3.1) und die Darstellung mit diffusen Grenzübergängen (3.3), äquivalent. Für die Berechnung der freien Energie in der scharfen Grenzflächendarstellung ist die genaue Parametrisierung der singulären Fläche S_r notwendig. Ändert sich die singuläre Fläche, so muss die Parametrisierung erneut durchgeführt werden. In der Darstellung der freien Energie mit diffusen Grenzübergängen (3.3) wird die Charakterisierung der jeweiligen Energiedichtebeiträge alleine durch Ordnungsparameter realisiert. Auch die Verfolgung der singulären Fläche geschieht durch die Ordnungsparameter automatisch.

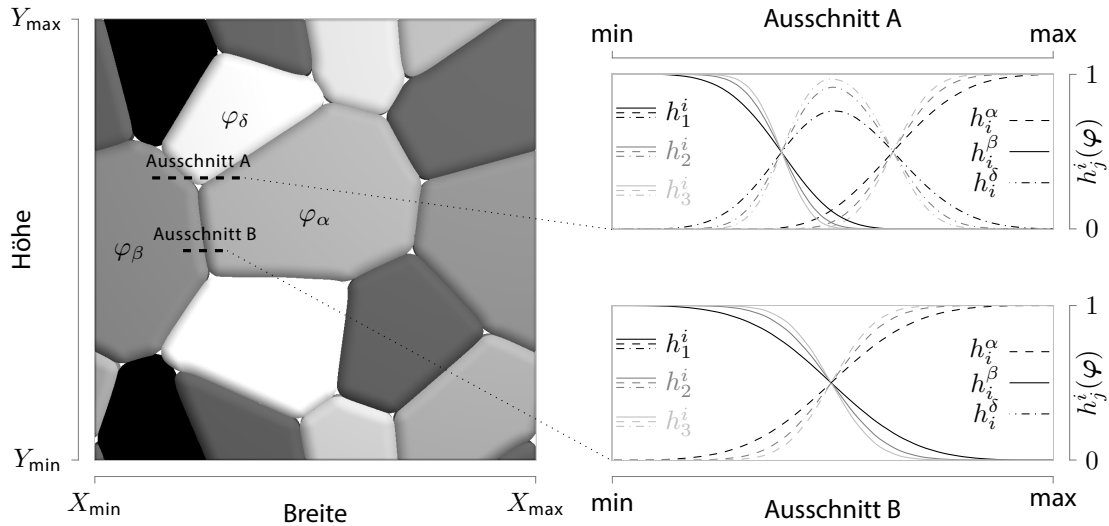


Abbildung 3.2.: Visualisierung der Verläufe von Interpolationsfunktionen: (links) polykristallines Gefüge mit Hervorhebung des Bereiches für die Plots der Interpolationsfunktionen, die (rechts) für eine Grenzfläche und eine Tripelpunktregion dargestellt sind

3.1.1. Evolutionsgleichungen der Ordnungsparameter für das Multiphasenfeldmodell

In Abschnitt 2.4.1 wurde mithilfe der Variationsableitung die Euler-Lagrange-Gleichung der Mechanik (2.37) abgeleitet. Und in Abschnitt 2.4.4 wurde mit dem gleichen Ansatz die energetische Gleichgewichtsbedingung auf singulären Flächen, die als Bilanz der Konfigurationskräfte (2.52) bezeichnet wird, hergeleitet. Hierzu war eine zusätzliche Variation der singulären Fläche notwendig. In diesem Abschnitt wird die energetische Gleichgewichtsbedingung auf singulären Flächen oder die Euler-Lagrange-Gleichung im Phasenfeldkontext alleine durch die Variation der Ordnungsparameter abgeleitet und daraus auf die Evolutionsgleichung der Ordnungsparameter geschlossen. Die besondere Parametrisierung des Gebietes durch Ordnungsparameter führt zu kontinuierlichen Feldern. Daher erübrigt sich die zusätzliche Variation der singulären Fläche im Phasenfeldkontext.

Das Funktional der freien Energie (3.3) ist von den jeweiligen Ordnungsparametern der einzelnen Phasen, die in dem N -Tupel $\varphi(\mathbf{X}, t)$ gebündelt sind, und deren Gradienten $\nabla_{\mathbf{X}}\varphi(\mathbf{X}, t)$ abhängig. Wie im Abschnitt 2.3.4 besprochen, muss im Gleichgewicht die freie Energie ihr Minimum erreichen um thermodynamische Konsistenz zu gewährleisten. Damit ist der Gleichgewichtszustand des Systems ist durch die Variation des Funktionals (3.3) nach den Ordnungsparameter gegeben. Angenommen das N -Tupel $\varphi(\mathbf{X}, t)$ minimiert das Funktional $\mathcal{F}(\varphi, \nabla_{\mathbf{X}}\varphi, \dots)$, dann ist eine infinitesimale Abweichung von $\varphi(\mathbf{X}, t)$ gegeben durch $\delta\varphi(\mathbf{X}) = \hat{\epsilon}\eta(\mathbf{X})$. Dabei ist $\hat{\epsilon} = \hat{\epsilon}_1, \dots, \hat{\epsilon}_N$ ein N -Tupel von infinitesimal kleinen skalaren Werten und $\eta(\mathbf{X})$ ein N -Tupel von differenzierbaren Funktionen mit der zusätzlichen Bedingung $\eta(\partial V) = \mathbf{0}$. Damit wird das Funktional der freien Energie (3.3) zu

$$\mathcal{F}(\varphi + \hat{\epsilon}\eta, \nabla_{\mathbf{X}}(\varphi + \hat{\epsilon}\eta), \dots) = \int_{V_r} f(\varphi + \hat{\epsilon}\eta, \nabla_{\mathbf{X}}(\varphi + \hat{\epsilon}\eta), \dots) dV_r. \quad (3.11)$$

Das Funktional $\mathcal{F}(\boldsymbol{\varphi} + \hat{\boldsymbol{\epsilon}}\boldsymbol{\eta}, \nabla_{\mathbf{X}}(\boldsymbol{\varphi} + \hat{\boldsymbol{\epsilon}}\boldsymbol{\eta}), \dots)$ ist also eine Funktion von $\hat{\boldsymbol{\epsilon}}$ und wird minimal bei $\hat{\boldsymbol{\epsilon}} = \mathbf{0}$ für beliebige $\boldsymbol{\eta}$. Äquivalent zum Abschnitt 2.4.1 ist die Variationsableitung des Funktionals (3.3) bzw. (3.11) nach φ_α gegeben durch

$$\frac{\delta\mathcal{F}(\boldsymbol{\varphi}, \nabla_{\mathbf{X}}\boldsymbol{\varphi}, \dots)}{\delta\varphi_\alpha} = \left[\frac{\partial\mathcal{F}(\boldsymbol{\varphi} + \hat{\boldsymbol{\epsilon}}\boldsymbol{\eta}, \nabla_{\mathbf{X}}(\boldsymbol{\varphi} + \hat{\boldsymbol{\epsilon}}\boldsymbol{\eta}), \dots)}{\partial\hat{\epsilon}_\alpha} \right]_{\hat{\epsilon}_\alpha=0}.$$

Unter Anwendung der partiellen Integration, der Bedingung $\delta\boldsymbol{\varphi}(\partial V) = \mathbf{0}$ und dem Gaußschen Satz in regulären Punkten (2.9), wie in Abschnitt 2.4.1 besprochen, folgt für die Variation des Funktionals für alle $\varphi_\alpha, \alpha = 1, \dots, N$,

$$\begin{aligned} \delta\mathcal{F}(\boldsymbol{\varphi}, \nabla_{\mathbf{X}}\boldsymbol{\varphi}, \dots) &= \int_{V_r} \frac{\partial f(\boldsymbol{\varphi}, \nabla_{\mathbf{X}}\boldsymbol{\varphi}, \dots)}{\partial\varphi_\alpha} \delta\varphi_\alpha + \frac{\partial f(\boldsymbol{\varphi}, \nabla_{\mathbf{X}}\boldsymbol{\varphi}, \dots)}{\partial\nabla_{\mathbf{X}}\varphi_\alpha} \cdot \nabla_{\mathbf{X}}\delta\varphi_\alpha dV_r \\ &= \int_{V_r} \left(\frac{\partial f(\boldsymbol{\varphi}, \nabla_{\mathbf{X}}\boldsymbol{\varphi}, \dots)}{\partial\varphi_\alpha} - \nabla_{\mathbf{X}} \cdot \frac{\partial f(\boldsymbol{\varphi}, \nabla_{\mathbf{X}}\boldsymbol{\varphi}, \dots)}{\partial\nabla_{\mathbf{X}}\varphi_\alpha} \right) \delta\varphi_\alpha \\ &\quad + \underbrace{\int_{\partial V_r} \frac{\partial f(\boldsymbol{\varphi}, \nabla_{\mathbf{X}}\boldsymbol{\varphi}, \dots)}{\partial\nabla_{\mathbf{X}}\varphi_\alpha} \delta\varphi_\alpha \cdot \mathbf{n}_r dA_r}_{=0, \text{ da } \boldsymbol{\eta}(\partial V)=\mathbf{0}} \\ &= \int_{V_r} \left(\frac{\partial f(\boldsymbol{\varphi}, \nabla_{\mathbf{X}}\boldsymbol{\varphi}, \dots)}{\partial\varphi_\alpha} - \nabla_{\mathbf{X}} \cdot \frac{\partial f(\boldsymbol{\varphi}, \nabla_{\mathbf{X}}\boldsymbol{\varphi}, \dots)}{\partial\nabla_{\mathbf{X}}\varphi_\alpha} \right) \delta\varphi_\alpha dV_r. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Mit der Forderung, dass die Gleichung (3.12) für beliebige Variationen $\delta\varphi_\alpha$ gelten muss, folgt der Satz der Gleichgewichtsbedingung für das Funktional (3.3)

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\delta\mathcal{F}(\boldsymbol{\varphi}, \nabla_{\mathbf{X}}\boldsymbol{\varphi}, \dots)}{\delta\varphi_\alpha} \\ &= \left(\frac{\partial}{\partial\varphi_\alpha} - \nabla_{\mathbf{X}} \cdot \frac{\partial}{\partial\nabla_{\mathbf{X}}\varphi_\alpha} \right) f(\boldsymbol{\varphi}, \nabla_{\mathbf{X}}\boldsymbol{\varphi}, \dots), \quad \forall \varphi_\alpha, \alpha = 1, \dots, N. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Dies ist die Euler-Lagrange-Gleichung im Phasenfeldkontext mit der Variationsableitung des Funktionals \mathcal{F} nach dem Ordnungsparameter φ_α , die folgendermaßen definiert ist

$$\frac{\delta\mathcal{F}(\boldsymbol{\varphi}, \nabla_{\mathbf{X}}\boldsymbol{\varphi}, \dots)}{\delta\varphi_\alpha} = \left(\frac{\partial}{\partial\varphi_\alpha} - \nabla_{\mathbf{X}} \cdot \frac{\partial}{\partial\nabla_{\mathbf{X}}\varphi_\alpha} \right) f(\boldsymbol{\varphi}, \nabla_{\mathbf{X}}\boldsymbol{\varphi}, \dots).$$

Lässt man das System mit einer Mobilität M in das Minimum relaxieren, folgen die Evolutionsgleichungen für jeden einzelnen Ordnungsparameter φ_α

$$\frac{\partial\varphi_\alpha(\mathbf{X}, t)}{\partial t} = -M \left(\frac{\partial}{\partial\varphi_\alpha} - \nabla_{\mathbf{X}} \cdot \frac{\partial}{\partial\nabla_{\mathbf{X}}\varphi_\alpha} \right) f(\boldsymbol{\varphi}, \nabla_{\mathbf{X}}\boldsymbol{\varphi}, \dots). \quad (3.14)$$

Diese Gleichung wurde erstmals von Ginzburg und Landau [39] abgeleitet und wird daher als *Ginzburg-Landau-Gleichung* bezeichnet. Im Phasenfeldkontext ist diese Gleichung auch als *Allen-Cahn-Gleichung* bekannt [48].

Bei der Variation der Ordnungsparameter φ_α muss die Bedingung $\sum_\alpha \varphi_\alpha = 1$ stets erfüllt bleiben. Daher folgt mit der zusätzlichen Nebenbedingung $g(\boldsymbol{\varphi}) = \sum_\alpha \varphi_\alpha - 1 = 0$ für die Variationsableitung

$$\begin{aligned} \frac{\delta(\mathcal{F}(\boldsymbol{\varphi}, \nabla_X \boldsymbol{\varphi}, \dots) - \Lambda G(\boldsymbol{\varphi}))}{\delta \varphi_\alpha} &= \frac{\partial f}{\partial \varphi_\alpha} - \Lambda \frac{\partial g}{\partial \varphi_\alpha} - \nabla_X \cdot \left(\frac{\partial f}{\partial \nabla_X \varphi_\alpha} - \Lambda \frac{\partial g}{\partial \nabla_X \varphi_\alpha} \right) \\ &= \left(\frac{\partial f}{\partial \varphi_\alpha} - \nabla_X \cdot \frac{\partial f}{\partial \nabla_X \varphi_\alpha} \right) - \Lambda \\ &= \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \varphi_\alpha} - \Lambda = 0, \quad \forall \varphi_\alpha, \alpha = 1, \dots, N, \end{aligned} \quad (3.15)$$

wobei $G(\boldsymbol{\varphi}) = \int_V g(\boldsymbol{\varphi}) dV_r$ das Volumenintegral der Nebenbedingung $g(\boldsymbol{\varphi})$ repräsentiert. Die Bedingung (3.15) muss für alle φ_α erfüllt bleiben. Unter der Annahme, dass alle Ordnungsparameter gleichwertig behandelt werden können, ergibt sich für den *Lagrangeschen Multiplikator* Λ

$$\sum_\alpha \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \varphi_\alpha} - \sum_\alpha \Lambda = 0 \implies \Lambda = \frac{1}{N} \sum_\alpha \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \varphi_\alpha},$$

das von Nestler et al. [13] eingeführt wurde. Für das Minimum des Funktionals $\mathcal{F}(\boldsymbol{\varphi}, \nabla_X \boldsymbol{\varphi}, \dots)$ folgt mit der zusätzlichen Nebenbedingung $\sum_\alpha \varphi_\alpha = 1$

$$\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \varphi_\alpha} - \Lambda = \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \varphi_\alpha} - \frac{1}{N} \sum_\beta \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \varphi_\beta} = 0, \quad \forall \varphi_\alpha, \alpha = 1, \dots, N. \quad (3.16)$$

Ein Set an Ordnungsparametern $\boldsymbol{\varphi}$, das die Differentialgleichung (3.16) erfüllt, minimiert das Funktional $\mathcal{F}(\boldsymbol{\varphi}, \nabla_X \boldsymbol{\varphi}, \dots)$. Das Minimum wird ebenfalls erreicht, wenn die einzelnen Variationen in Dualinteraktionen aufgespalten werden

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \varphi_\alpha} - \frac{1}{N} \sum_\beta \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \varphi_\beta} = \frac{N-1}{N} \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \varphi_\alpha} - \frac{1}{N} \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \varphi_\beta} \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\beta \neq \alpha} \left(\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \varphi_\alpha} - \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \varphi_\beta} \right). \end{aligned}$$

Führt man für jede Grenzfläche zweier Phasen eine Mobilität $M_{\alpha\beta}$ ein, folgt ausgehend von der Ginzburg-Landau-Gleichung (3.14) die Evolutionsgleichung für jeden einzelnen Ordnungsparameter φ_α

$$\dot{\varphi}_\alpha(\mathbf{X}, t) = -\frac{1}{N} \sum_{\beta \neq \alpha} M_{\alpha\beta} \left(\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \varphi_\alpha} - \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \varphi_\beta} \right), \quad \forall \varphi_\alpha, \alpha = 1, \dots, N. \quad (3.17)$$

Dies ist die Evolutionsgleichung für das N -Tupel von Ordnungsparametern $\boldsymbol{\varphi}$ und wurde erstmals von Steinbach und Pezzolla [49] auf eine alternative Weise abgeleitet. Befindet sich ein System nicht im Gleichgewicht, so erfahren die Ordnungsparameter eine Änderung, die durch die Allen-Cahn-Gleichung (3.17) gegeben ist. Diese Formulierung der Evolutionsgleichung garantiert dass die Konfigurationskräfte der Grenzflächenenergie (siehe Gl. (2.52)) exakt abgebildet werden, was in Abschnitt (3.1.4) gezeigt wird. Eine Transformation der Allen-Cahn-Gleichung (3.17) in die Eulersche Darstellung ist im Zusammenhang der finiten Deformationen notwendig und wird in Abschnitt 6.1 durchgeführt.

3.1.2. Reduktion auf ein binäres System

Die freie Energie eines Multiphasensystems und die Evolution der entsprechenden Ordnungsparameter wird durch die Gleichungen (3.3) und (3.17) beschrieben. Im Zweiphasenfall wird das N -Tupel von Ordnungsparametern zu $\varphi = (\varphi_\alpha, \varphi_\beta)$. Daher reduziert sich der Satz der Evolutionsgleichungen (3.17) zu zwei Gleichungen der Form

$$\dot{\varphi}_\alpha = -\frac{M_{\alpha\beta}}{2} \left(\frac{\delta\mathcal{F}}{\delta\varphi_\alpha} - \frac{\delta\mathcal{F}}{\delta\varphi_\beta} \right), \quad \forall \varphi_\alpha, \alpha = 1, 2. \quad (3.18)$$

Mit der Gradientenenergiedichte (3.4) und dem Multihindernispotential (3.5) folgt für die Variationen des Funktionals (3.3)

$$\begin{aligned} \frac{\delta\mathcal{F}}{\delta\varphi_\alpha} &= \epsilon\gamma_{\alpha\beta} \left(2(\nabla_X \varphi_\beta) \cdot \mathbf{Q}_{\alpha\beta} - \nabla_X \cdot (2(-\varphi_\beta)\mathbf{Q}_{\alpha\beta}) \right) + \frac{1}{\epsilon} \frac{16}{\pi^2} \gamma_{\alpha\beta} \varphi_\beta + f_{\text{bulk}}^\alpha \frac{\partial h^\alpha}{\partial \varphi_\alpha}, \\ \frac{\delta\mathcal{F}}{\delta\varphi_\beta} &= \epsilon\gamma_{\alpha\beta} \left(2(-\nabla_X \varphi_\alpha) \cdot \mathbf{Q}_{\alpha\beta} - \nabla_X \cdot (2(\varphi_\alpha)\mathbf{Q}_{\alpha\beta}) \right) + \frac{1}{\epsilon} \frac{16}{\pi^2} \gamma_{\alpha\beta} \varphi_\alpha + f_{\text{bulk}}^\beta \frac{\partial h^\beta}{\partial \varphi_\beta}. \end{aligned}$$

Da die Summe der Ordnungsparameter immer 1 sein muss, kann φ_β durch $1 - \varphi_\alpha$ ersetzt werden. Mit $\nabla_X \varphi_\beta = -\nabla_X \varphi_\alpha$ folgt zusätzlich für den generalisierten α - β -Gradienten $\mathbf{Q}_{\alpha\beta} = \varphi_\alpha \nabla_X \varphi_\beta - \varphi_\beta \nabla_X \varphi_\alpha = -\nabla_X \varphi_\alpha$. Eingesetzt in Gleichung (3.18) ergeben sich die Evolutionsgleichungen für ein binäres System

$$\begin{aligned} \frac{1}{M_{\alpha\beta}} \dot{\varphi}_\alpha &= -\frac{1}{2} \left(2\epsilon\gamma_{\alpha\beta} (-\nabla_X \cdot \nabla_X \varphi_\alpha) + \frac{\gamma_{\alpha\beta}}{\epsilon} \frac{16}{\pi^2} (1 - 2\varphi_\alpha) + \left(f_{\text{bulk}}^\alpha \frac{\partial h^\alpha}{\partial \varphi_\alpha} - f_{\text{bulk}}^\beta \frac{\partial h^\beta}{\partial \varphi_\beta} \right) \right) \quad (3.19) \\ &= \epsilon\gamma_{\alpha\beta} \Delta_X \varphi_\alpha - \frac{\gamma_{\alpha\beta}}{2\epsilon} \frac{16}{\pi^2} (1 - 2\varphi_\alpha) - \frac{1}{2} \left(f_{\text{bulk}}^\alpha - f_{\text{bulk}}^\beta \right) \frac{\partial h^\alpha}{\partial \varphi_\alpha}. \end{aligned}$$

Dabei ist $\Delta_X = \nabla_X \cdot \nabla_X$ der Laplace-Operator. Außerdem wurde ausgenutzt, dass die folgende Relation aus der Symmetrie der Interpolationsfunktionen folgen muss $\partial h^\alpha / (\partial \varphi_\alpha) = \partial h^\beta / (\partial \varphi_\beta)$.

3.1.3. Gleichgewichtsprofil der Ordnungsparameter und die resultierende Grenzflächenenergie

Gleichung (3.19) beschreibt die Evolution der Ordnungsparameter für ein binäres System. Befindet sich das System im Gleichgewicht, so verschwindet die lokale Änderung der Ordnungsparameter $\partial \varphi_\alpha / \partial t = 0$. Für die Berechnung des Profils der Ordnungsparameter im Übergangsbereich wird ein eindimensionales System der Länge $2L$ mit einem Phasenübergang in der Mitte des Gebietes bei $X = 0$ betrachtet und die Energien innerhalb der Zellen vernachlässigt. In diesem Fall reduziert sich die Gleichung (3.19) zu

$$\frac{\partial^2 \varphi_\alpha}{\partial X^2} = \frac{16}{\epsilon^2 \pi^2} \frac{(1 - 2\varphi_\alpha)}{2}. \quad (3.20)$$

Wird diese Gleichung von beiden Seiten mit $\partial\varphi_\alpha/(\partial X)$ multipliziert und anschließend von 0 bis X integriert, so folgt

$$\begin{aligned} \int_0^X \frac{\partial\varphi_\alpha}{\partial X} \left(\frac{\partial^2\varphi_\alpha}{\partial X^2} \right) dX &= \int_0^X \frac{\partial\varphi_\alpha}{\partial X} \frac{16}{\epsilon^2\pi^2} \frac{(1-2\varphi_\alpha)}{2} dX \\ \int_0^X \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial X} \left(\frac{\partial\varphi_\alpha}{\partial X} \right)^2 dX &= \int_0^{\varphi_\alpha} \frac{16}{\epsilon^2\pi^2} \frac{(1-2\varphi_\alpha)}{2} d\varphi_\alpha \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial\varphi_\alpha}{\partial X} \right)^2 &= \frac{16}{\epsilon^2\pi^2} \frac{\varphi_\alpha(1-\varphi_\alpha)}{2} \\ \frac{\partial\varphi_\alpha}{\partial X} &= \pm \frac{1}{\epsilon} \sqrt{\frac{16}{\pi^2} \varphi_\alpha(1-\varphi_\alpha)}. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Daraus lässt sich die Breite und das Profil des Übergangsbereiches durch Trennung der Variablen berechnen. Es ergibt sich für die Breite des Übergangsbereiches

$$\begin{aligned} \int_0^l dX &= \int_0^1 \frac{\epsilon}{\pm \sqrt{\frac{16}{\pi^2} \varphi_\alpha(1-\varphi_\alpha)}} d\varphi_\alpha \\ l &= -\frac{\epsilon\pi}{4} \arcsin(1-2\varphi_\alpha) \Big|_0^1 = \frac{\epsilon\pi^2}{4}. \end{aligned} \quad (3.22)$$

Entsprechend folgt für das Profil der Ordnungsparameter im Übergangsbereich

$$\begin{aligned} \int_0^X dX &= \int_0^{\varphi_\alpha} \frac{\epsilon}{\pm \sqrt{\frac{16}{\pi^2} \varphi_\alpha(1-\varphi_\alpha)}} d\varphi_\alpha \\ X &= -\frac{\epsilon\pi}{4} \arcsin(1-2\varphi_\alpha) \\ \Rightarrow \varphi_\alpha(X) &= \frac{1}{2} \left(1 + \sin\left(\frac{4}{\epsilon\pi} X\right) \right), \quad -\frac{l}{2} < X < \frac{l}{2}. \end{aligned} \quad (3.23)$$

Die Grenzflächenenergie ist das Linienintegral über die Gradientenenergiedichte (3.4) und das Energiepotential (3.5) in Richtung der Interfacenormalen (siehe Gleichung (3.10)). Mit $\varphi_\beta = 1 - \varphi_\alpha$, $\nabla_X \varphi_\beta = -\nabla_X \varphi_\alpha$ und der Steigung $\partial\varphi_\alpha/\partial X$, die durch die Gleichung (3.21) gegeben ist, ergibt sich für den eindimensionalen Fall [50]

$$\begin{aligned} f_{se}^{\alpha\beta}(\varphi_\alpha, \varphi_\beta) &= \gamma_{\alpha\beta} \int_{-L}^L \left(\epsilon |\mathbf{q}_{\alpha\beta}|^2 + \frac{1}{\epsilon} \frac{16}{\pi^2} \varphi_\alpha \varphi_\beta \right) dX \\ &= \gamma_{\alpha\beta} \int_{-L}^L \left(\epsilon \left(\frac{\partial\varphi_\alpha}{\partial X} \right)^2 + \frac{1}{\epsilon} \frac{16}{\pi^2} \varphi_\alpha(1-\varphi_\alpha) \right) dX \\ &= \gamma_{\alpha\beta} \int_{-L}^L \left(\frac{1}{\epsilon} \frac{16}{\pi^2} \varphi_\alpha(1-\varphi_\alpha) + \frac{1}{\epsilon} \frac{16}{\pi^2} \varphi_\alpha(1-\varphi_\alpha) \right) dX \\ &= \gamma_{\alpha\beta} \int_0^1 2 \frac{1}{\epsilon} \frac{16}{\pi^2} \varphi_\alpha(1-\varphi_\alpha) \frac{\partial X}{\partial\varphi_\alpha} d\varphi_\alpha \\ &= \gamma_{\alpha\beta} \frac{8}{\pi} \int_0^1 \sqrt{\varphi_\alpha(1-\varphi_\alpha)} d\varphi_\alpha = \gamma_{\alpha\beta} \frac{8}{\pi} \left(\frac{\pi}{16} + \frac{\pi}{16} \right) = \gamma_{\alpha\beta}. \end{aligned} \quad (3.24)$$

Wobei das letzte Integral mithilfe von Bronstein et al. [19] ausgewertet wurde. Das energetische Potential (3.5) wurde so konstruiert, dass die Beziehung (3.24) erfüllt wird. Damit repräsentieren die

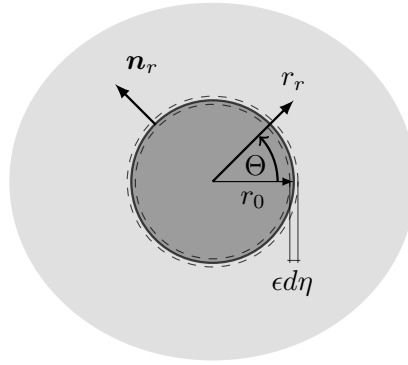


Abbildung 3.3.: Zweidimensionales System mit einem kreisförmigen Einschluss

Gradientenenergiedichte (3.4) und das Energiepotential (3.5) im Kontext von scharfen Grenzflächen exakt die Grenzflächenenergie. Allerdings wurde bei der Berechnung ausgenutzt, dass das Profil des Übergangsbereiches dem Gleichgewichtsprofil (3.23) entspricht. Werden treibende Kräfte verwendet, die zu Überschussenergie führen, so wird das Profil der Ordnungsparameter verzerrt und damit auch die resultierende Grenzflächenenergie verändert [9]. In Abschnitt 4.2 wird auf diesen Zusammenhang näher eingegangen.

3.1.4. Bilanz der Konfigurationskräfte Im Phasenfeldkontext

Die Evolution der Ordnungsparameter und damit der Phasen wird in der Lagrangeschen Darstellung durch Gleichung (3.19) beschrieben. Wie schon im vorhergehendem Abschnitt besprochen, verschwindet die lokale Änderung der Ordnungsparameter $\partial\varphi_\alpha/\partial t = 0$, wenn sich das System im Gleichgewicht befindet. Daher folgt aus der Gleichung (3.19) für den Gleichgewichtszustand eines binären Systems

$$\frac{1}{2} \llbracket f_{\text{bulk}} \rrbracket \frac{\partial h^\alpha}{\partial \varphi_\alpha} = -\gamma_{\alpha\beta} \left(\epsilon \Delta_X \varphi_\alpha - \frac{16}{\epsilon \pi^2} \frac{(1-2\varphi_\alpha)}{2} \right). \quad (3.25)$$

Für die Interpretation dieser Gleichung im Kontext von scharfen Grenzflächen muss ein Linienintegral durch das Interface in Richtung der Normalen ausgewertet werden. Hierzu wird ein zweidimensionales System mit einem kreisförmigen Einschluss betrachtet, wie in Abbildung 3.3 dargestellt ist. Unter Verwendung von Polarkoordinaten wird die Richtung der Normalen zur radialen Richtung.

Ähnlich wie in Abschnitt 3.1.3, wird die Gleichung (3.25) von beiden Seiten mit $\partial\varphi_\alpha/\partial r_r$ multipliziert und anschließend von 0 bis ∞ integriert. Für die linke Seite der Gleichgewichtsbedingung (3.25) folgt

$$\frac{1}{2} \int_0^\infty \llbracket f_{\text{bulk}} \rrbracket \frac{\partial h^\alpha}{\partial \varphi_\alpha} \frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial r} dr_r = \frac{1}{2} \int_0^1 \llbracket f_{\text{bulk}} \rrbracket \frac{\partial h^\alpha}{\partial \varphi_\alpha} d\varphi_\alpha = \frac{1}{2} \llbracket f_{\text{bulk}} \rrbracket.$$

Augenscheinlich repräsentiert die linke Seite der Gleichung (3.25) in scharfen Grenzflächenkontext den Sprung $\llbracket f_{\text{bulk}} \rrbracket / 2$. Entsprechend folgt für die Gleichgewichtsbedingung (3.25)

$$\frac{1}{2} \llbracket f_{\text{bulk}} \rrbracket = -\gamma_{\alpha\beta} \int_0^\infty \frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial r_r} \left(\epsilon \Delta_X \varphi_\alpha - \frac{16}{\epsilon \pi^2} \frac{(1-2\varphi_\alpha)}{2} \right) dr_r. \quad (3.26)$$

Der in Abschnitt 3.1.3 eingeführte Parameter für die Breite des Übergangsbereiches ϵ wird für die Auswirkung der rechten Seite der Gleichung (3.26) benötigt. So werden alle relevanten Größen in ϵ -Termen entwickelt. Mit $r_r = r_0 + \epsilon d\eta$, $dr_r = \epsilon d\eta$, $1/r \approx 1/r_0 - \epsilon d\eta/r_0^2$ und dem Laplace-Operator in Polarkoordinaten [19] folgt

$$\frac{\epsilon}{2} \llbracket f_{\text{bulk}} \rrbracket \approx -\gamma_{\alpha\beta} \int_0^\infty \frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial \eta} \left(\left(\frac{\partial^2}{\partial \eta^2} + \frac{\epsilon}{r_0} \frac{\partial}{\partial \eta} + \frac{\epsilon^2}{r_0^2} (\dots) \right) \varphi_\alpha - \frac{16}{\pi^2} \frac{(1-2\varphi_\alpha)}{2} \right) d\eta. \quad (3.27)$$

Für eine Näherung erster Ordnung werden die Terme der Ordnung $\mathcal{O}(\epsilon^2/r_0^2)$ vernachlässigt. Für die Ordnung $\mathcal{O}(\epsilon^0/r_0^0)$ resultiert

$$0 = -\gamma_{\alpha\beta} \int_0^\infty \frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial \eta} \left(\frac{\partial^2 \varphi_\alpha}{\partial \eta^2} - \frac{16}{\pi^2} \frac{(1-2\varphi_0)}{2} \right) d\eta.$$

Die beiden Terme in der Klammer sind äquivalent zu der Gleichgewichtsbedingung (3.20) eines planaren Übergangsbereiches ohne Störung. Daher heben diese sich gegenseitig auf (siehe Abschnitt 3.1.3). Mit einer ähnlichen Vorgehensweise wie in Abschnitt 3.1.3 folgt für den Beitrag der Ordnung $\mathcal{O}(\epsilon/r_0)$ von der Gleichung (3.27)

$$\begin{aligned} \frac{\epsilon}{2} \llbracket f_{\text{bulk}} \rrbracket &\approx -\gamma_{\alpha\beta} \int_0^\infty \frac{\epsilon}{r_0} \frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial \eta} \frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial \eta} d\eta = -\gamma_{\alpha\beta} \int_0^1 \frac{\epsilon}{r_0} \left(\frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial \eta} \right) d\varphi_\alpha \\ \frac{1}{2} \llbracket f_{\text{bulk}} \rrbracket &\approx -\gamma_{\alpha\beta} \frac{1}{r_0} \int_0^1 \sqrt{\frac{16}{\pi^2} \varphi_\alpha (1-\varphi_\alpha)} d\varphi_\alpha = -\gamma_{\alpha\beta} \frac{1}{2r_0} \\ \llbracket f_{\text{bulk}} \rrbracket &\approx -\gamma_{\alpha\beta} \kappa. \end{aligned}$$

$\kappa = 1/r_0$ ist dabei die zweifache mittlere Krümmung und kann im Phasenfeldkontext folgendermaßen berechnet werden

$$\kappa = \nabla_X \cdot \left(\frac{\nabla_X \varphi_\alpha}{|\nabla_X \varphi_\alpha|} \right).$$

Die Berechnungen in diesem Abschnitt zeigen, dass die Gleichgewichtsbedingung (3.25) äquivalent zu der Bilanz der Konfigurationskräfte (2.52) bzw. (2.58) ist. Eine notwendige Voraussetzung ist allerdings, dass der Sprung der inneren Energien $\llbracket f_{\text{bulk}} \rrbracket$ den entsprechenden Konfigurationskräften entspricht. Für Erstarrungsprozesse entspricht dies dem Sprung der Großkanonischen Potentiale [9]. Werden bei der Evolution mechanische Energien einbezogen, so muss ein mechanisches Potential formuliert werden, dessen Sprung der mechanischen Konfigurationskraft $\mathbf{n}_r \llbracket \boldsymbol{\Sigma} \rrbracket \mathbf{n}_r$ bzw. $\llbracket W \rrbracket - \llbracket \boldsymbol{\epsilon} \mathbf{n} \rrbracket \cdot \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}$ entspricht [11]. Die Formulierung eines solchen Potentials und die resultierenden Berechnungen der Spannungen im Übergangsbereich sind in Abschnitt 4.3 zu finden. Des Weiteren wurde in diesem Abschnitt gezeigt, dass die Evolutionsgleichung der Ordnungsparameter (3.17) die kapillaren Kräfte $(-\gamma\kappa)$ in der Lagrangeschen Darstellung abbildet. Für die Verwendung der Eulerschen Darstellung muss diese entsprechenden transformiert werden.

4

Mechanisches Multiphasenfeldmodell für infinitesimale Deformationen

Bereits 1957 zeigte Eshelby [6], dass Inhomogenitäten einen entscheidenden Einfluss auf die mechanischen Eigenschaften von Festkörpern haben. Daher sind Simulationen auf der mesoskopischen Längenskala für Vorhersagen von mechanischen Eigenschaften und zur Beschreibung der mikrostrukturellen Evolution von Materialien unverzichtbar. Die nötigen Bilanzgleichungen, Sprungbedingungen und Konfigurationskräfte für mikrostrukturelle Simulationen wurden in Kapitel 2 zusammengefasst. Die konventionellen Methoden für die Modellierung des elastischen oder des elasto-plastischen Materialverhaltens auf der mesoskopischer Längenskala basieren auf der Finite-Elemente-Methode. Allerdings erfordert eine zusätzliche Kopplung mit einer Evolution der Phasengrenzen eine explizite Verfolgung der Grenzflächen und ist sehr unpraktisch bei der Modellierung von komplexen dreidimensionalen Mikrostrukturen. In diesem Zusammenhang stellt die Phasenfeldmethode, die in Kapitel 3 vorgestellt wurde, eine Alternative dar, da die Notwendigkeit der Grenzflächenverfolgung durch die Parametrisierung mit Ordnungsparametern redundant wird [1, 5]. Diese spezielle Parametrisierung erschwert allerdings das Lösen von Sprungbedingungen im Übergangsbereich, da sich die scharfe Grenzfläche über einen volumetrischen Bereich erstreckt. Daher werden Homogenisierungsansätze verwendet, um die effektiven Materialparameter in jedem Punkt des Übergangsbereiches zwischen den lokal überlappenden Phasen zu berechnen [51]. Allerdings erfüllen die Homogenisierungsmethoden im Allgemeinen nicht die mechanischen Sprungbedingungen an Grenzflächen [11]. Es entstehen Abweichungen, die zu Überschussenergie und damit zu einer Verzerrung des Ordnungsparameterprofils und der Grenzflächenenergie führen [10, 11].

In diesem Kapitel werden zunächst in Abschnitt 4.1 die verwendeten Techniken im Phasenfeldkontext zur Berechnung der effektiven Materialparameter im volumetrischen Übergangsbereich vorgestellt. Anschließend werden in Abschnitt 4.2 die Folgerungen der verwendeten Homogenisierungsmethoden auf die Evolution der Ordnungsparameter herausgearbeitet. Basierend auf mechanischen Sprungbedingungen an Diskontinuitäten, die in Kapitel 2 vorgestellt wurden, wird in Abschnitt 4.3 ein Modell für binäre Systeme und infinitesimale Deformationen vorgestellt,

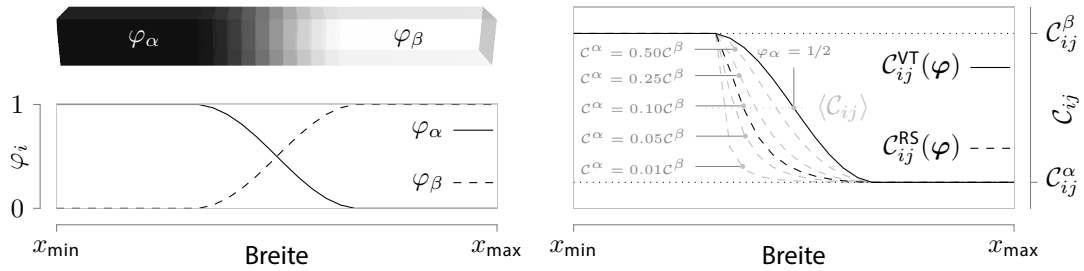


Abbildung 4.1.: Vergleich von Homogenisierungsmethoden der Materialparameter: (links) Ein eindimensionales Gebiet mit einem Phasenübergang in der Mitte und der Verlauf der entsprechenden Ordnungsparameter, (rechts) Verlauf der linearen und harmonischen Interpolation der Materialparameter $C_{ij}(\varphi)$. Zum Vergleich sind harmonische Interpolationen für unterschiedliche Verhältnisse $C_{ij}^\alpha/C_{ij}^\beta$ und die Mittelwertlinie $\langle C_{ij} \rangle$ in Grau dargestellt.

dass die mechanischen Sprungbedingungen erfüllt. Im nachfolgenden Abschnitt wird der quantitative Charakter des Modells sowohl für die Berechnung der Spannungen und Dehnungen im Übergangsbereich als auch für die Beschreibung der für die Phasengrenzenevolution notwendigen Konfigurationskräfte gezeigt. Im letzten Abschnitt dieses Kapitels wird das vorgestellte Modell für Anwendungen in polykristallinen Systemen erweitert. Im gesamten Kapitel werden infinitesimale Deformationen vorausgesetzt. Daher wird auf die Unterscheidung zwischen der Lagrangeschen und der Eulerschen Darstellung verzichtet und es wird die vereinfachte Notation aus Abschnitt 2.5 verwendet. Einige Ergebnisse dieses Kapitels wurden in Schneider et al. [11] veröffentlicht und es wurde ein weiteres Manuskript aus den Ergebnissen dieses Kapitels angefertigt, das zeitnah eingereicht wird.

4.1. Literaturüberblick der Homogenisierungsansätze zur Berechnung der Spannung im Übergangsbereich

Für die Beschreibung von Festkörpertransformationsprozessen oder für die Vorhersagen von mechanischen Eigenschaften ist eine genaue Berechnung der Spannungen und der mechanischen Konfigurationskräfte im Übergangsbereich unverzichtbar. Da die Ordnungsparameter und somit auch die Phasen im Interface koexistieren können, werden Homogenisierungsansätze verwendet, um die effektiven Materialparameter in jedem Punkt des Übergangsbereiches zwischen den lokal überlappenden Phasen zu berechnen. Ammar et al. [51] geben einen Überblick über die verwendeten Ansätze. Der Ansatz von Khachaturyan [52] ist in Phasenfeldanwendungen weit verbreitet. In Abwesenheit von inelastischen Dehnungen ist das Modell von Khachaturyan [52] gleich dem Homogenisierungsschema von Voigt [53], das im Folgenden als Voigt / Taylor-Ansatz (VT) bezeichnet wird. Die grundlegende Annahme des VT-Ansatzes ist, dass die Gesamtdehnungen zwischen den überlappenden Phasen als gleich angenommen werden. Die Folgerung dieser Annahme für die Berechnung des effektiven Steifigkeitstensors ist die lineare Interpolation

$$C^{VT}(\varphi) = \sum_{\alpha} C^{\alpha} h^{\alpha}(\varphi).$$

Dieser Ansatz ist beispielsweise in den Modellformulierungen von Spatschek et al. [54], Mennerich et al. [55] und Schneider et al. [56, 57] zu finden. Im Gegensatz zu dem Homogenisierungsschema

von Voigt [53] steht das Homogenisierungsschema von Reuss [58], das im Folgenden als Reuss / Sachs-Schema (RS) bezeichnet wird. Die grundlegende Annahme des RS ist, dass die Spannungen zwischen den überlappenden Phasen als gleich angenommen werden. Dies resultiert in der harmonischen Interpolation des Steifigkeitstensors

$$\mathbf{C}^{\text{RS}}(\boldsymbol{\varphi}) = \left[\sum_{\alpha} \mathbf{S}^{\alpha} h^{\alpha}(\boldsymbol{\varphi}) \right]^{-1}.$$

\mathbf{S} ist dabei der Nachgiebigkeitstensor. Im Phasenfeldkontext wurde dieses Homogenisierungsschema in den Arbeiten von Steinbach und Apel [59] und Apel et al. [60] diskutiert. Sowohl Ammar et al. [51] als auch Durga et al. [10] vergleichen die unterschiedlichen Methoden. Die resultierten interpolierten Steifigkeiten beider lokalen Homogenisierungsansätze für einen binären Übergangsbereich ist in Abbildung 4.1 dargestellt. Zum Vergleich ist der Verlauf von harmonisch interpolierten Materialparametern für unterschiedliche Verhältnisse von C_{ij}^{α} zu C_{ij}^{β} und die Mittelwertlinie $\langle C_{ij} \rangle$ abgebildet. Die jeweilige Position des Mittelwertes $\langle C_{ij} \rangle(\boldsymbol{\varphi})$ ist stark vom $C_{ij}^{\alpha}/C_{ij}^{\beta}$ -Verhältnis abhängig, was eine allgemeine Eigenschaft der harmonischen Interpolation ist.

Geht man von infinitesimalen Deformationen aus, so führen die physikalisch linearen konstitutiven Gleichungen zu dem Hookeschen Gesetz (2.55). Werden die inelastischen Dehnungen $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\alpha}$ für die jeweilige Phase α berücksichtigt, so ergibt sich für die Berechnung der Causchyschen Spannung mit dem VT-Ansatz im geometrisch linearen Fall

$$\boldsymbol{\sigma}^{\text{VT}}(\boldsymbol{\varphi}) = \sum_{\alpha} \mathbf{C}^{\alpha} [\boldsymbol{\varepsilon} - \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\alpha}] h^{\alpha}(\boldsymbol{\varphi}). \quad (4.1)$$

Entsprechend folgt für die Berechnung der Causchyschen Spannung mit der RS-Approximation

$$\boldsymbol{\sigma}^{\text{RS}}(\boldsymbol{\varphi}) = \left[\sum_{\alpha} \mathbf{S}^{\alpha} h^{\alpha}(\boldsymbol{\varphi}) \right]^{-1} \left[\boldsymbol{\varepsilon} - \sum_{\alpha} \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\alpha} h^{\alpha}(\boldsymbol{\varphi}) \right]. \quad (4.2)$$

Jedoch repräsentieren die VT- und RS-Ansätze lediglich die obere und untere Schranke der realen Materialparameter im Interface. Nur in speziellen eindimensionalen Fällen werden die effektiven Materialparameter richtig wiedergeben. In Abschnitt 2 wurden die Sprungbedingungen an Diskontinuitäten hergeleitet. Die Hadamardsche Sprungbedingung (2.34) besagt, dass der Sprung des Deformationsgradienten $[[\mathbf{F}]] = \mathbf{a} \otimes \mathbf{n}^s$ nur Normalanteile zur singulären Fläche besitzt. Folglich verschwindet der Sprung der Tangentialanteile. Daher ist die VT-Approximation nur für eine eindimensionale parallele materielle Kette, bei der nur die Tangentialanteile relevant sind, gültig. Aus der Impulsbilanz wurde in Abschnitt 2.3.2 die Sprungbedingung für den Spannungsvektor $[[\mathbf{t}]] = [[\boldsymbol{\sigma}]] \mathbf{n}^s$ (siehe Gleichung (2.24)) abgeleitet. Diese besagt, dass der Spannungsvektor in Normalenrichtung auf der singulären Fläche homogen ist, was dem Kräftegleichgewicht entspricht. Damit ist die RS-Approximation nur bei Sonderfällen ohne tangentialen Anteile gültig. Dies entspricht der eindimensionalen seriellen materiellen Kette. Für den geometrisch linearen Fall sind beide eindimensionalen Sonderfälle, die parallele und die serielle materielle Kette, in Abbildung 4.2 dargestellt. Ein eindimensionales Gebiet der Breite b mit einem Phasenübergang in der Mitte der Domäne wird einachsrig belastet. In Falle der seriellen materiellen Kette, die auf der linken Seite der Abbildung 4.2 dargestellt ist, wird das Gebiet in Normalenrichtung des Übergangsbereiches mit konstanter Spannung σ_0 belastet. In Falle der parallelen materiellen Kette, die auf der rechten

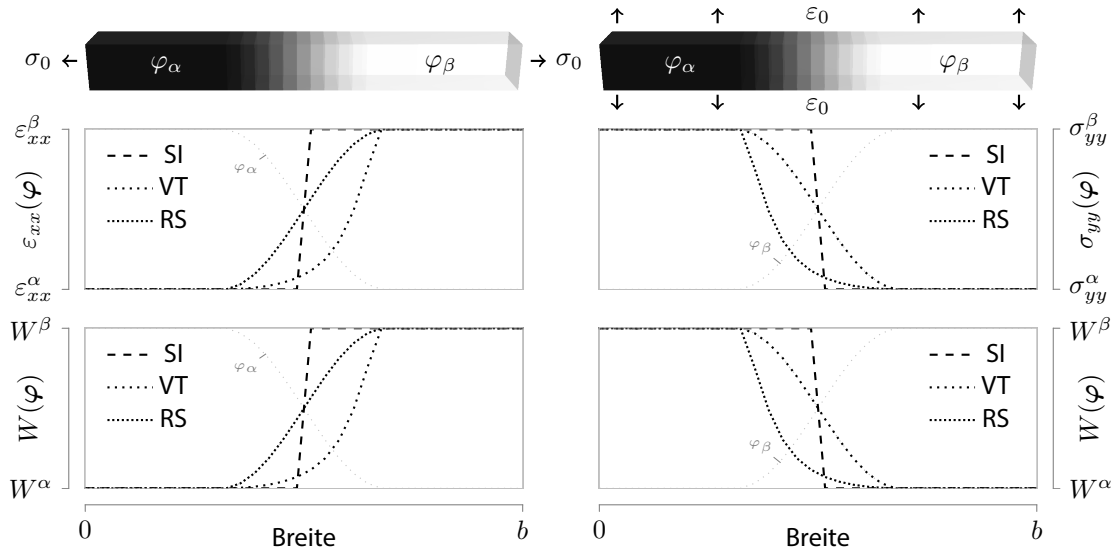


Abbildung 4.2.: Serielle Kette (links) und parallele materielle Kette (rechts). Ein eindimensionales Gebiet mit einem Phasenübergang bei $b/2$ wird bei einer seriellen materiellen Kette in x -Richtung mit konstanter Spannung σ_0 und bei einer parallelen materiellen Kette mit konstanter Dehnung in y -Richtung belastet. Die resultierenden Verläufe der Dehnung $\varepsilon_{xx}(\varphi)$ bzw. der Spannung $\sigma_{yy}(\varphi)$ und der Formänderungsenergie $W(\varphi)$ beider Approximationen (VT und RS) sind mit der SI-Lösung verglichen.

Seite der Abbildung 4.2 abgebildet ist, wird das Gebiet mit einer konstanten Dehnung ε_0 tangential zum Übergangsbereich belastet. Für beide Sonderfälle sind die resultierenden Verläufe der Dehnung $\varepsilon_{xx}(\varphi)$ bzw. der Spannung $\sigma_{yy}(\varphi)$ und der Verlauf der Formänderungsenergie $W(\varphi) = (\varepsilon(\varphi) \cdot \sigma(\varphi))/2$ dargestellt. Zusätzlich zu den resultierenden Verläufen der VT- und RS-Approximation sind zum Vergleich die resultierenden Verläufe einer Domäne mit einer scharfen Grenzfläche, die mit SI (aus dem Englischen *sharp interface*) gekennzeichnet sind, dargestellt.

Sowohl bei der seriellen als auch bei der parallelen materiellen Kette befindet sich der Sprung der Dehnung $[\varepsilon_{xx}]$ bzw. der Spannung $[\sigma_{yy}]$ und der Sprung der Formänderungsenergie $[W]$ bei der SI-Lösung in der Mitte des Gebietes. Damit befinden sich auch die Mittelwerte $\langle \varepsilon_{xx} \rangle = (\varepsilon_{xx}^\alpha + \varepsilon_{xx}^\beta)/2$ bzw. $\langle \sigma_{yy} \rangle$ und $\langle W \rangle$ in der Mitte der Domäne. Da die Werte innerhalb der einzelnen Phasen konstant sind, folgt für die gesamte Formänderungsenergie der seriellen materiellen Kette für die SI-Lösung

$$E_{\text{ser.}}^{\text{SI}} = \int_0^b \frac{1}{2} \sigma_0 \varepsilon_{xx}(\varphi) dx = \frac{b}{2} \sigma_0 \langle \varepsilon_{xx} \rangle.$$

Entsprechend folgt für die gesamte Formänderungsenergie der parallelen materiellen Kette

$$E_{\text{par.}}^{\text{SI}} = \int_0^b \frac{1}{2} \sigma_{yy}(\varphi) \varepsilon_0 dx = \frac{b}{2} \varepsilon_0 \langle \sigma_{yy} \rangle.$$

Unter Vernachlässigung der nicht elastischen Dehnungen reduziert sich die Gleichung (4.1) für die Berechnung der Cauchyschen Spannung in einem binären Fall zu

$$\sigma^{\text{VT}}(\varphi) = (\mathbf{C}^\alpha [\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{VT}}]) h^\alpha(\varphi) + (\mathbf{C}^\beta [\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{VT}}]) h^\beta(\varphi) = \sigma^\alpha h^\alpha(\varphi) + \sigma^\beta h^\beta(\varphi). \quad (4.3)$$

Damit resultiert die VT-Approximation in einer linearen Interpolation der Spannungen. Reduziert man die Gleichung (4.3) entsprechend dem Fall der parallelen materiellen Kette, ergibt sich

$$\sigma_{yy}^{\text{VT}}(\boldsymbol{\varphi}) = (2\mu^\alpha h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}) + 2\mu^\beta h^\beta(\boldsymbol{\varphi}))\varepsilon_0 = \sigma_{yy}^\alpha h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}) + \sigma_{yy}^\beta h^\beta(\boldsymbol{\varphi}).$$

Dies ist eine lineare Interpolation der Spannungen mit der Interpolationsfunktion $h^\alpha(\boldsymbol{\varphi})$, wie auf der rechten Seite der Abbildung 4.2 zu sehen ist. Da sowohl die Ordnungsparameter als auch die entsprechenden Interpolationsfunktionen im Gleichgewicht antisymmetrisch um $\varphi_\alpha = 0.5$ sind (siehe Gleichung (3.21)), folgt sofort für die gesamte Formänderungsenergie der VT-Lösung

$$E_{\text{par.}}^{\text{VT}} = \frac{b}{2}\varepsilon_0\langle\sigma_{yy}\rangle.$$

Da die Lösung äquivalent zu der SI-Lösung ist, ist die VT-Approximation im Falle der parallelen materiellen Kette exakt. Stellt man allerdings die Gleichung (4.3) nach $\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{VT}}$ um, so folgt für den eindimensionalen Fall der seriellen materiellen Kette eine harmonische Interpolation der Dehnungen

$$\begin{aligned} \varepsilon_{xx}^{\text{VT}}(\boldsymbol{\varphi}) &= [(\lambda^\alpha + 2\mu^\alpha)h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}) + (\lambda^\beta + 2\mu^\beta)h^\beta(\boldsymbol{\varphi})]^{-1}\sigma_0 & (4.4) \\ &= \left[\frac{1}{(\lambda^\alpha + 2\mu^\alpha)^{-1}\sigma_0} h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}) + \frac{1}{(\lambda^\beta + 2\mu^\beta)^{-1}\sigma_0} h^\beta(\boldsymbol{\varphi}) \right]^{-1} \\ &= \left[\frac{1}{\varepsilon_{xx}^\alpha} h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}) + \frac{1}{\varepsilon_{xx}^\beta} h^\beta(\boldsymbol{\varphi}) \right]^{-1}. \end{aligned}$$

Ein entsprechender Verlauf der Dehnung und der resultierenden Formänderungsenergiegedichte ist auf der linken Seite der Abbildung 4.2 zu erkennen. Sowohl die Position der Mittelwerte $\langle\varepsilon_{xx}\rangle$ und $\langle W\rangle$ als auch das Resultat der gesamten Formänderungsenergie deckt sich nicht mit der SI-Lösung. Die Abweichungen sind stark vom Verhältnis der Dehnung $\varepsilon_{xx}^\alpha/\varepsilon_{xx}^\beta$, respektive vom Verhältnis der Materialparameter $(\lambda^\alpha + 2\mu^\alpha)/(\lambda^\beta + 2\mu^\beta)$, abhängig. Erst bei dem trivialen Fall, wenn die Materialparameter $\lambda^\alpha + 2\mu^\alpha$ und $\lambda^\beta + 2\mu^\beta$ nahezu äquivalent sind, ist $\varepsilon_{xx}^{\text{VT}}(\varphi_\alpha = 0.5) \approx \langle\varepsilon_{xx}\rangle$ (siehe Abbildung 4.1) und die VT-Lösung ist mit der SI-Lösung vergleichbar.

Werden die inelastischen Dehnungen vernachlässigt, so folgt für die Berechnung der Cauchyschen Spannung mit der RS-Approximation

$$\boldsymbol{\sigma}^{\text{RS}}(\boldsymbol{\varphi}) = \left[\sum_\alpha \boldsymbol{\mathcal{S}}^\alpha h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}) \right]^{-1} [\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{RS}}]. \quad (4.5)$$

Angewendet auf den eindimensionalen Fall der parallelen materiellen Kette ergibt sich

$$\sigma_{yy}^{\text{RS}}(\boldsymbol{\varphi}) = \left[\frac{1}{2\mu^\alpha\varepsilon_0} h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}) + \frac{1}{2\mu^\beta\varepsilon_0} h^\beta(\boldsymbol{\varphi}) \right]^{-1} = \left[\frac{1}{\sigma_{yy}^\alpha} h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}) + \frac{1}{\sigma_{yy}^\beta} h^\beta(\boldsymbol{\varphi}) \right]^{-1}. \quad (4.6)$$

Damit resultiert die RS-Approximation bei homogenen Dehnungen in einer harmonischen Interpolation der Spannungen. Entsprechend sieht der Verlauf der Spannung und der resultierenden Formänderungsenergiegedichte in Abbildung 4.2 aus. Auch hier stimmt weder die Position der Mittelwerte $\langle\sigma_{yy}\rangle$ und $\langle W\rangle$ noch die resultierende Energie E^{RS} mit der scharfen Grenzflächenlösung überein. Stellt man allerdings die Gleichung (4.5) nach $\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{RS}}$ um und reduziert diese entsprechend

dem eindimensionalen Fall der seriellen materiellen Kette, so folgt eine lineare Interpolation der Dehnung

$$\varepsilon_{xx}^{\text{RS}}(\varphi) = (\lambda^\alpha + 2\mu^\alpha)^{-1} \sigma_0 h^\alpha(\varphi) + (\lambda^\beta + 2\mu^\beta)^{-1} \sigma_0 h^\beta(\varphi) = \varepsilon_{xx}^\alpha h^\alpha(\varphi) + \varepsilon_{xx}^\beta h^\beta(\varphi).$$

Sowohl die Position der entsprechenden Sprunggrößen als auch die resultierende Formänderungsenergie

$$E_{\text{ser.}}^{\text{RS}} = \frac{b}{2} \sigma_0 \langle \varepsilon_{xx} \rangle$$

deckt sich mit der erwarteten SI-Lösung, wie auf der linken Seite der Abbildung 4.2 zu sehen ist.

Keine der beiden lokalen Homogenisierungsmethoden erfüllt die Hadamardsche Bedingung (2.34) und das Kräftegleichgewicht (2.24) gleichzeitig. Für die Erfüllung beider Sprungbedingungen bedarf es einer gemischten Interpolationsmethode [10, 11]. In Abschnitt 4.3 wird ein solches Modell vorgestellt, das auf mechanischen Sprungbedingungen an Diskontinuitäten basiert.

4.2. Folgerungen der Homogenisierungsmethoden auf die Evolutionsgleichung der Ordnungsparameter

Im vorhergehenden Abschnitt wurde gezeigt, dass bei der Berechnung der Spannungen die lokalen Homogenisierungsmethoden nur in speziellen eindimensionalen Sonderfällen zufriedenstellende Ergebnisse liefern. Das Approximationsschema von Voigt / Taylor (VT) liefert exakte Ergebnisse für die parallele materielle Kette und das Approximationsschema von Reuss / Sachs (RS) entsprechend für die serielle materielle Kette. Für allgemeine Zustände ergeben sich Abweichungen für beide Schemata, die von dem Größenunterschied der jeweiligen Materialparameter \mathcal{C}^α abhängig sind. Die Folgen der Abweichungen auf die Evolutionsgleichung der Ordnungsparameter (3.17) werden im Folgenden besprochen.

Die Formänderungsenergiegedichte $W(\varphi, \varepsilon, \sigma)$ ist im Phasenfeldkontext von den Dehnungen ε , von den Spannungen σ und von den Ordnungsparametern φ abhängig. Mit $W^\alpha(\varepsilon^\alpha, \sigma^\alpha)$ als Formänderungsenergiegedichte der Phase α ergibt sich für die homogenisierte Formänderungsenergiegedichte

$$W(\varphi, \varepsilon, \sigma) = \sum_{\alpha} W^\alpha(\varepsilon^\alpha, \sigma^\alpha) h^\alpha(\varphi). \quad (4.7)$$

Unter Berücksichtigung der Formänderungsenergiegedichte ist die freie Energie des Systems gegeben durch (siehe Abschnitt 3.1)

$$\mathcal{F}(\varphi, \nabla \varphi, \varepsilon, \sigma) = \int_V \varepsilon a(\varphi, \nabla \varphi) + \frac{1}{\varepsilon} \omega_{\text{ob}}(\varphi) + W(\varphi, \varepsilon, \sigma) dV. \quad (4.8)$$

Für die Berechnung der Grenzflächenenergie muss ein Linienintegral in Richtung der Interfacenormalen über die Gradientenenergiegedichte $\varepsilon a(\varphi, \nabla \varphi)$ und das energetische Potential $\omega_{\text{ob}}(\varphi)/\varepsilon$ des Funktionals (4.8) ausgewertet werden. In Abschnitt 3.1.3 wurde gezeigt, dass die beiden Potentiale so konstruiert wurden, dass ein solches Integral in Abwesenheit weiterer treibender Kräfte exakt $\gamma_{\alpha\beta}$ ergibt. Dabei wurde ausgenutzt, dass das Profil der Ordnungsparameter im Gleichgewicht genau die Form (3.21) hat.

Für die Berechnung des Gleichgewichtsprofils unter Einfluss der Formänderungsenergie $W(\boldsymbol{\varphi}, \boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\sigma})$ wird ein eindimensionales binäres System mit einem Phasenübergang in der Mitte des Gebietes betrachtet. Die Evolutionsgleichung (3.19) der jeweiligen Ordnungsparameter nimmt dabei die folgende Form an

$$\tau \varepsilon \frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial t} = \varepsilon \gamma_{\alpha\beta} \frac{\partial^2 \varphi_\alpha}{\partial x^2} - \frac{\gamma_{\alpha\beta} 16}{2\varepsilon \pi^2} (1 - 2\varphi_\alpha) - \frac{1}{2} (W^\alpha(\boldsymbol{\varepsilon}^\alpha, \boldsymbol{\sigma}^\alpha) - W^\beta(\boldsymbol{\varepsilon}^\beta, \boldsymbol{\sigma}^\beta)) \frac{\partial h^\alpha}{\partial \varphi_\alpha},$$

wobei $W^\alpha(\boldsymbol{\varepsilon}^\alpha, \boldsymbol{\sigma}^\alpha)$ und $W^\beta(\boldsymbol{\varepsilon}^\beta, \boldsymbol{\sigma}^\beta)$ die Formänderungsenergiegedichten der jeweiligen Phasen sind. Im Gleichgewicht verschwindet die lokale Änderung der Ordnungsparameter $\dot{\varphi}_\alpha$, daher folgt für das Gleichgewichtsprofil

$$\frac{\partial^2 \varphi_\alpha}{\partial x^2} = \frac{16}{\varepsilon^2 \pi^2} \frac{(1 - 2\varphi_\alpha)}{2} - \frac{1}{2\gamma_{\alpha\beta} \varepsilon} (W^\alpha(\boldsymbol{\varepsilon}^\alpha, \boldsymbol{\sigma}^\alpha) - W^\beta(\boldsymbol{\varepsilon}^\beta, \boldsymbol{\sigma}^\beta)) \frac{\partial h^\alpha}{\partial \varphi_\alpha}. \quad (4.9)$$

Auf die gleiche Weise wie in Abschnitt 3.1.3 wird die Gleichung (4.9) erst von beiden Seiten mit $\partial \varphi_\alpha / \partial x$ multipliziert und anschließend von 0 bis x integriert. Für das Profil der Ordnungsparameter ergibt sich

$$\begin{aligned} \int_0^x \frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial x} \left(\frac{\partial^2 \varphi_\alpha}{\partial x^2} \right) dx &= \int_0^x \frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial x} \left(\frac{16}{\varepsilon^2 \pi^2} \frac{(1 - 2\varphi_\alpha)}{2} + \frac{1}{2\gamma_{\alpha\beta} \varepsilon} (W^\alpha(\boldsymbol{\varepsilon}^\alpha, \boldsymbol{\sigma}^\alpha) - W^\beta(\boldsymbol{\varepsilon}^\beta, \boldsymbol{\sigma}^\beta)) \right) dx \\ \left(\frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial x} \right)^2 &= \frac{16}{\varepsilon^2 \pi^2} \varphi_\alpha (1 - \varphi_\alpha) + \frac{1}{\gamma_{\alpha\beta} \varepsilon} \int_0^{\varphi_\alpha} (W^\alpha(\boldsymbol{\varepsilon}^\alpha, \boldsymbol{\sigma}^\alpha) - W^\beta(\boldsymbol{\varepsilon}^\beta, \boldsymbol{\sigma}^\beta)) \frac{\partial h^\alpha}{\partial \varphi_\alpha} d\varphi_\alpha. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Um die ursprüngliche Form für das Profil der Ordnungsparameter zu erhalten, muss das Integral über die Differenz der Potentiale $W^\alpha(\boldsymbol{\varepsilon}^\alpha, \boldsymbol{\sigma}^\alpha) - W^\beta(\boldsymbol{\varepsilon}^\beta, \boldsymbol{\sigma}^\beta)$ im Gleichgewicht verschwinden. Ist das nicht der Fall so wird das Profil der Ordnungsparameter durch den zusätzlichen Beitrag verzerrt. Da für die Berechnung der Interfacebreite l und der Oberflächenenergie $f_{se}^{\alpha\beta}$ ein unverzerrtes Profil notwendig ist, siehe Gleichungen (3.22) und (3.24), spiegelt sich entsprechend eine Verzerrung des Profils in der resultierenden Interfacebreite l und in der resultierenden Oberflächenenergie $f_{se}^{\alpha\beta}$ wider. Dieser zusätzliche Beitrag in der Oberflächenenergie wird als *Überschussenergie* (aus dem Englischen *interfacial excess energy*) bezeichnet. Da die Formulierung der freien Energie durch die Gleichung (4.8) mit einem diffusen Übergangsbereich die freie Energie des Systems mit scharfen Grenzflächen approximieren soll, ist die Überschussenergie die Differenz der Energie innerhalb der Phasen eines Systems mit scharfen Grenzflächen (siehe Gleichung (3.2)) und der Formulierung mit diffusen Übergangsbereich (4.8) [40]. Für eindimensionale Systeme, die in Abschnitt 4.1 besprochen wurden, ergibt sich daher nach [10, 40] für die Überschussenergie

$$E_{exc.} = \int_0^b W(\boldsymbol{\varphi}, \boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\sigma}) dx - E^{SI}. \quad (4.11)$$

Somit führen jegliche Abweichungen der resultierenden Formänderungsenergie zu der Lösung mit scharfen Grenzflächen und zu einer Überschussenergie im Interface.

Die grundlegende Annahme der VT-Approximation ist, dass die phasenanteiligen Dehnungen im Übergangsbereich gleich sind (siehe Abschnitt 4.1). Für die Berechnung der Cauchyschen Spannung $\boldsymbol{\sigma}^{VT}(\boldsymbol{\varphi})$ im Übergangsbereich folgt aus dieser Annahme die Gleichung (4.1). Da unter der

VT-Annahme die Gesamtdehnung $\boldsymbol{\varepsilon}$ phasenunabhängig und somit homogen ist, kann diese zur Formulierung der Formänderungsenergiedichte verwendet werden. Entsprechend den Modellformulierungen in [54–57] folgt damit die Formulierung der Formänderungsenergiedichte für infinitesimale Deformationen

$$W^{\text{VT}}(\boldsymbol{\varphi}, \boldsymbol{\varepsilon}) = \sum_{\alpha} W^{\text{VT}^{\alpha}} h^{\alpha}(\boldsymbol{\varphi}) = \sum_{\alpha} \frac{1}{2} (\boldsymbol{\varepsilon} - \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\alpha}) \cdot \mathbf{C}^{\alpha} [\boldsymbol{\varepsilon} - \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\alpha}] h^{\alpha}(\boldsymbol{\varphi}). \quad (4.12)$$

Dagegen ist die Annahme der RS-Approximation, dass die phasenanteiligen Spannungen im Übergangsbereich gleich sind. Da die Spannungen im Übergangsbereich homogen sind, können sie für die Formulierung der Formänderungsenergiedichte $W^{\text{RS}}(\boldsymbol{\varphi}, \boldsymbol{\sigma})$ verwendet werden. Ausgehend von der Formulierung der Formänderungsenergiedichte mit der VT-Approximation, die durch die Gleichung (4.12) gegeben ist, folgt $W^{\text{RS}}(\boldsymbol{\varphi}, \boldsymbol{\sigma})$ für die RS-Approximation durch eine Legendre-Transformation. Mit $\partial W^{\text{VT}^{\alpha}}(\boldsymbol{\sigma}) / \partial \boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C}^{\alpha} (\boldsymbol{\varepsilon} - \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\alpha}) \Rightarrow \boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{S}^{\alpha} [\boldsymbol{\sigma}] + \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\alpha}$ ergibt sich für die Formänderungsenergiedichte der Phase α

$$\begin{aligned} W^{\text{RS}^{\alpha}}(\boldsymbol{\sigma}) &= \frac{\partial W^{\text{VT}^{\alpha}}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} - W^{\text{VT}^{\alpha}} \\ &= \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} - \frac{1}{2} (\boldsymbol{\varepsilon} - \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\alpha}) \cdot \mathbf{C}^{\alpha} [\boldsymbol{\varepsilon} - \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\alpha}] \\ &= \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{S}^{\alpha} [\boldsymbol{\sigma}] + \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\alpha}) - \frac{1}{2} (\mathbf{S}^{\alpha} [\boldsymbol{\sigma}] + \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\alpha} - \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\alpha}) \cdot \mathbf{C}^{\alpha} [\mathbf{S}^{\alpha} [\boldsymbol{\sigma}] + \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\alpha} - \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\alpha}] \\ &= \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{S}^{\alpha} [\boldsymbol{\sigma}] + \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\alpha}) - \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{S}^{\alpha} [\boldsymbol{\sigma}] \\ &= \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{S}^{\alpha} [\boldsymbol{\sigma}] + \boldsymbol{\sigma} \cdot \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\alpha}. \end{aligned} \quad (4.13)$$

$\boldsymbol{\sigma}$ ist dabei die Cauchysche Spannung, die durch die Gleichung (4.2) gegeben ist. Damit folgt die Formänderungsenergiedichte entsprechend der RS-Approximation in einem Multiphasensystem

$$W^{\text{RS}}(\boldsymbol{\varphi}, \boldsymbol{\sigma}) = \sum_{\alpha} W^{\text{RS}^{\alpha}} h^{\alpha}(\boldsymbol{\varphi}) = \sum_{\alpha} \left(\frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{S}^{\alpha} [\boldsymbol{\sigma}] + \boldsymbol{\sigma} \cdot \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\alpha} \right) h^{\alpha}(\boldsymbol{\varphi}). \quad (4.14)$$

Reduziert man das Potential (4.14) auf das eindimensionale System der seriellen materiellen Kette, das in Abbildung 4.2 links dargestellt ist, und wählt $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\beta} = 0$, so folgt die Bedingung für einen Gleichgewichtszustand $W^{\alpha} = W^{\beta}$

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sigma_0^2 \frac{1}{\lambda^{\alpha} + 2\mu^{\alpha}} + \sigma_0 \tilde{\varepsilon}_{xx}^{\alpha} &= \frac{1}{2} \sigma_0^2 \frac{1}{\lambda^{\beta} + 2\mu^{\beta}} \\ \tilde{\varepsilon}_{xx}^{\alpha} &= \frac{1}{2} \sigma_0 \left(\frac{1}{\lambda^{\beta} + 2\mu^{\beta}} - \frac{1}{\lambda^{\alpha} + 2\mu^{\alpha}} \right). \end{aligned} \quad (4.15)$$

In Abbildung 4.3 sind die Formänderungsenergiedichten beider Approximationen für das Beispiel der seriellen materiellen Kette und den Gleichgewichtszustand $W^{\alpha} = W^{\beta} = W^{\text{SI}}$ dargestellt. Da die Potentiale $W^{\text{RS}^{\alpha}}(\sigma_{xx})$ und $W^{\text{RS}^{\beta}}(\sigma_{xx})$ nur von den Spannungen σ_{xx} abhängen und für die serielle materielle Kette gilt $\sigma_{xx}^{\alpha} = \sigma_{xx}^{\beta} = \sigma_0$, ist der Gleichgewichtszustand für die RS-Approximation eindeutig bestimmt, wie auf der rechten Seite der Abbildung 4.3 zu sehen ist. Für die Potentiale der VT-Approximation entspricht dieses Gleichgewicht einer Gleichgewichtslinie $W^{\text{VT}}(\varepsilon_{xx}(\boldsymbol{\varphi}))$, die

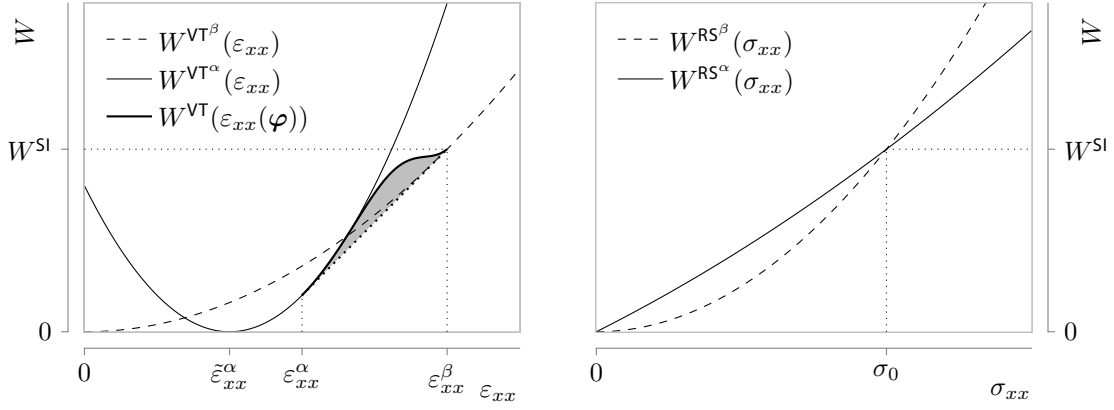


Abbildung 4.3.: Vergleich der Formänderungsenergiegedichten der VT- und RS-Approximation am Beispiel der seriellen materiellen Kette, die in Abbildung 4.2 links dargestellt ist. Die Bedingungen des Gleichgewichtszustandes $W^{RS^\alpha} = W^{RS^\beta} = W^{SI}$ und $\sigma_{xx}^\alpha = \sigma_{xx}^\beta = \sigma_0$ sind mit gepunkteten Linien hervorgehoben. Die resultierende Überschussenergie der VT-Approximation E_{exc}^{VT} ist grau markiert.

auf der linken Seite der Abbildung 4.3 dargestellt ist. Der Verlauf der entsprechenden Dehnung $\varepsilon_{xx}(\varphi)$ folgt dem Verlauf einer harmonisch interpolierten Größe, wie in der Gleichung (4.4) gezeigt wurde. Dies führt zu einer Abweichung des resultierenden Potentials $W^{VT}(\varepsilon_{xx}(\varphi))$ zum Gleichgewichtsverlauf, das in Abbildung 4.3 gepunktet hervorgehoben ist. Und dies wiederum führt zu einer Überschussenergie, die mit der Gleichung (4.11) berechnet werden kann. In Abbildung 4.3 wurde die Überschussenergie grau hervorgehoben.

Für den Fall der parallelen materiellen Kette, die in Abbildung 4.2 rechts dargestellt ist, ist der Gleichgewichtszustand $W^\alpha = W^\beta = W^{SI}$ mithilfe der Potentiale der VT-Approximation durch die folgende Bedingung erfüllt

$$\begin{aligned}
 W^{VT^\alpha} &= W^{VT^\beta} \\
 \frac{1}{2}(\varepsilon_0 - \tilde{\varepsilon}_{yy}^\alpha)^2(\lambda^\alpha + 2\mu^\alpha) &= \frac{1}{2}\varepsilon_0^2(\lambda^\beta + 2\mu^\beta) \\
 \tilde{\varepsilon}_{yy}^\alpha &= \varepsilon_0 \left(1 - \sqrt{\frac{\lambda^\beta + 2\mu^\beta}{\lambda^\alpha + 2\mu^\alpha}} \right), \tag{4.16}
 \end{aligned}$$

wobei $\tilde{\varepsilon}_{yy}^\alpha = 0$ gewählt wurde. Der Verlauf der Formänderungsenergiegedichten für diesen Fall der parallelen materiellen Kette ist in Abbildung 4.4 dargestellt. Der Gleichgewichtszustand $W^\alpha = W^\beta = W^{SI}$ und $\varepsilon_{yy}^\alpha = \varepsilon_{yy}^\beta = \varepsilon_0$ ist diesmal für den Potentialverlauf der VT-Approximation eindeutig definiert, was auf der linken Seite der Abbildung 4.4 zu sehen ist. Für die Potentiale der RS-Approximation führt dieser Gleichgewichtszustand zu der Gleichgewichtslinie $W^{RS}(\sigma_{yy}(\varphi))$, wobei der Verlauf von $\sigma_{yy}(\varphi)$ durch die Gleichung (4.6) gegeben ist. Entsprechend führen die Abweichungen des W^{RS} -Verlaufs zu W^{SI} zu einer Überschussenergie, die in Abbildung 4.4 grau hervorgehoben ist.

Die resultierenden Verläufe der Ordnungsparameter beider Gleichgewichtszustände sind in Abbildung 4.5 dargestellt. In Fall der seriellen materiellen Kette führt die Überschussenergie der VT-Approximation E_{exc}^{VT} zu einer Verschmälerung des Übergangsbereiches, was auf der linken

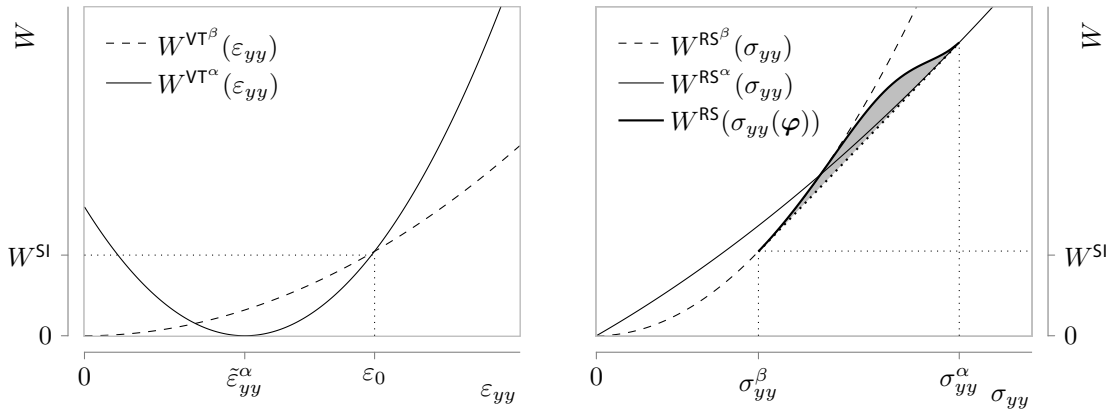


Abbildung 4.4.: Vergleich der Formänderungsenergiegedichten der VT- und RS-Approximation am Beispiel der parallelen materiellen Kette, die in Abbildung 4.2 rechts dargestellt ist. Die Bedingungen des Gleichgewichtszustandes $W^\alpha = W^\beta = W^{SI}$ und $\varepsilon_{yy}^\alpha = \varepsilon_{yy}^\beta = \varepsilon_0$ sind mit gepunkteten Linien hervorgehoben. Die resultierende Überschussenergie der RS-Approximation E_{exc}^{RS} ist grau markiert.

Seite der Abbildung 4.5 erkennbar ist. Und im Fall der parallelen materiellen Kette führt die Überschussenergie der RS-Approximation E_{exc}^{RS} zu einer Verbreiterung des Interfaces. Dies ist auf der rechten Seite der Abbildung 4.5 zu sehen. Mit der Gleichung (4.10) wurde die Überschussenergie mit der nichtverschwindenden Differenz der jeweiligen Potentiale W^α und W^β im Übergangsbereich verknüpft. Daher wird die Wirkung der Überschussenergie durch die aufgeführte Differenz der W^α - und W^β -Potentiale im unteren Bereich der Abbildung 4.5 nochmals hervorgehoben.

Die nichtverschwindende Differenz der jeweiligen Beträge der Formänderungsenergiegedichten W^β und W^α zeigt auch, dass ein zusätzliches Potential am Gleichgewichtszustand der Gradientenenergiegedichte $a(\nabla\varphi, \varphi)$ und des Potentials $\omega_{ob}(\varphi)$ mitwirkt. Daher kann die nichtverschwindende Differenz der jeweiligen Formänderungsenergiegedichten als ein Beitrag zu dem energetischen Potential aufgefasst werden. Anknüpfend an die Berechnungen in der Gleichung (4.10) folgt daher

$$\begin{aligned} \varepsilon\gamma_{\alpha\beta}\left(\frac{\partial\varphi_\alpha}{\partial x}\right)^2 &= \frac{\gamma_{\alpha\beta}}{\varepsilon}\left(\frac{16}{\pi^2}\varphi_\alpha(1-\varphi_\alpha) + \frac{\varepsilon}{\gamma_{\alpha\beta}}\int_0^{\varphi_\alpha}(W^\alpha(\varepsilon^\alpha, \sigma^\alpha) - W^\beta(\varepsilon^\beta, \sigma^\beta))\frac{\partial h^\alpha}{\partial\varphi_\alpha}d\varphi_\alpha\right) \\ &=: \frac{1}{\varepsilon}\omega'_{ob}(\varphi). \end{aligned}$$

$\omega'_{ob}(\varphi)$ ist das veränderte energetische Potential unter dem Einfluss der Überschussenergie. Damit folgt aus den Berechnungen in der Gleichung (3.24) für die Grenzflächenenergie in den betrachteten eindimensionalen Systemen

$$\begin{aligned} f_{se}^{\alpha\beta}(\varphi_\alpha, \varphi_\beta) &= \int_0^b\left(\varepsilon\gamma_{\alpha\beta}\left(\frac{\partial\varphi_\alpha}{\partial x}\right)^2 + \frac{1}{\varepsilon}\omega'_{ob}(\varphi)\right)dx \\ &= \int_0^b 2\varepsilon\gamma_{\alpha\beta}\left(\frac{\partial\varphi_\alpha}{\partial x}\right)^2 dx = 2\int_0^b \varepsilon a(\nabla\varphi, \varphi)dx. \end{aligned} \quad (4.17)$$

Unabhängig davon welche Größen das System beeinflussen, kann die resultierende Grenzflächenenergie im Gleichgewicht zwischen zwei Phasen mit einem Integral über die Gradientenenergiegedichte $a(\nabla\varphi, \varphi)$ berechnet werden. In Abbildung 4.6 sind die resultierenden Grenzflächenenergien,

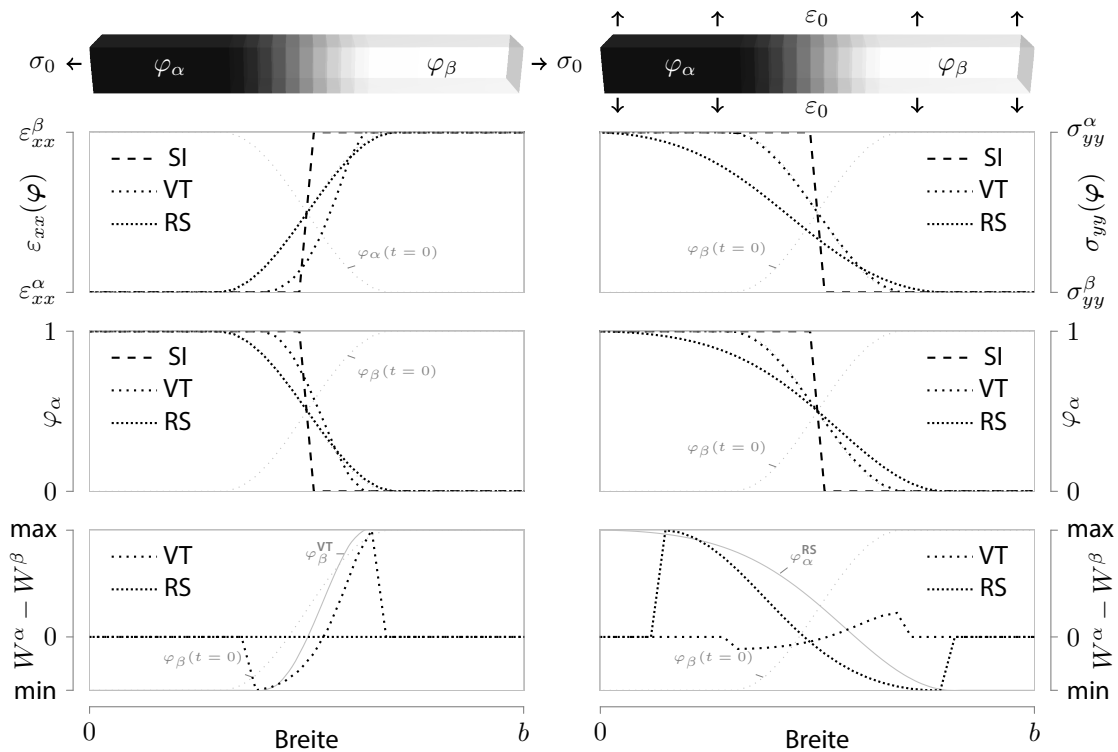


Abbildung 4.5.: Vergleich der Verläufe von ϵ_{xx} bzw. σ_{yy} , φ_α und $W^\alpha - W^\beta$ für die Gleichgewichtszustände der seriellen Kette (links) und parallelen materiellen Kette (rechts). Für die Gleichgewichtszustände gilt $W^\alpha = W^\beta = W^{SI}$ und $\sigma_{xx}^\alpha = \sigma_{xx}^\beta = \sigma_0$ bzw. $\epsilon_{yy}^\alpha = \epsilon_{yy}^\beta = \epsilon_0$. Die Gleichgewichtsbedingungen sind durch die Gleichungen (4.15) bzw. (4.16) gegeben. Die Differenz der resultierenden Potentiale W^α und W^β führt zu einer Verzerrung der Profile der Ordnungsparameter, wie in der Berechnung (4.10) gezeigt wurde.

die mit der Gleichung (4.17) berechnet wurden, für die betrachteten Systeme der seriellen und parallelen materiellen Kette aufgetragen. Die angreifenden mechanischen Kräfte wurden dabei variiert. Bei Systemen ohne eine Überschussenergie ist keine Abhängigkeit der Grenzflächenenergie von der Formänderungsenergie zu erkennen. Tritt Überschussenergie auf, so kann die besprochene Verzerrung des Profils der Ordnungsparameter (siehe Gleichung (4.10)) eine Veränderung der resultierenden Grenzflächenenergie $f_{se}^{\alpha\beta}$ bis zum Faktor drei bewirken. Zusätzlich sind in Abbildung 4.6 die resultierenden Breiten des Übergangsbereiches l aufgetragen, die ebenfalls mit dem Profil der Ordnungsparameter verknüpft sind (siehe Gleichung (3.22)).

4.3. Binäres Phasenfeldmodell basierend auf mechanischen Sprungbedingungen

In Abschnitt 4.1 wurde gezeigt, dass die üblichen lokalen Homogenisierungsmethoden zur Berechnung der effektiven Materialparameter nur in speziellen eindimensionalen Sonderfällen ihre Gültigkeit haben. Weder die VT- noch die RS-Approximation erfüllen die Hadamardsche Bedingung (2.33) und das Kräftegleichgewicht (2.24) gleichzeitig [10, 11]. Im Allgemeinen führen beide

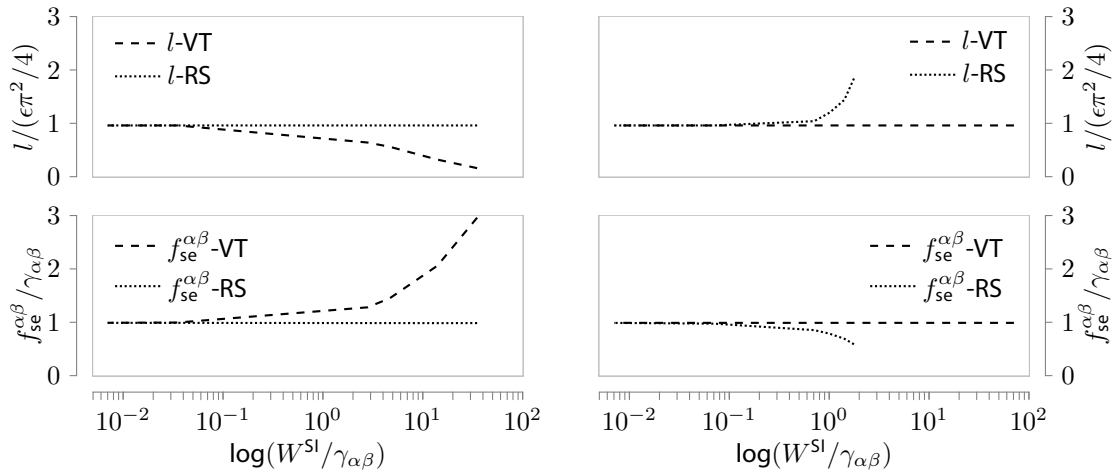


Abbildung 4.6.: Resultierende Interfacebreiten l und Grenzflächenenergien $f_{se}^{\alpha\beta}$ bei einer Variation von W^{SI} für die serielle Kette (links) und die parallele materielle Kette (rechts). l und $f_{se}^{\alpha\beta}$ wurden mit theoretischen Sollwerten $l = \epsilon\pi^2/4$ und $f_{se}^{\alpha\beta} = \gamma_{\alpha\beta}$ (siehe Gleichung (3.22) bzw. (3.24)) normiert.

lokalen Homogenisierungstechniken zu Abweichungen, die ihrerseits zur Überschussenergie im Übergangsbereich führen [10, 11], was in Abschnitt 4.2 besprochen wurde. Basierend auf mechanischen Sprungbedingungen an Diskontinuitäten wird in den folgenden Abschnitten ein Modell vorgestellt, das beide Sprungbedingungen erfüllt. Aus Gründen der Übersichtlichkeit werden zunächst die inelastischen Dehnungsanteile $\tilde{\epsilon}$ vernachlässigt und in Abschnitt 4.3.4 hinzugefügt.

4.3.1. Kontinuierliche Variablen

Wie schon angesprochen, sind die mechanischen Sprungbedingungen an Diskontinuitäten die Basis des nun vorgestellten Modells. Für den Sonderfall der materiellen singulären Fläche reduziert sich die Sprungbedingung des Spannungsvektors auf der singulären Fläche (2.23) zum Kräftegleichgewicht

$$[[\boldsymbol{\sigma}]] \mathbf{n}^s = \mathbf{0}. \tag{4.18}$$

\mathbf{n}^s ist dabei der Normalenvektor auf der singulären Fläche. Ausgehend von der Stetigkeit der Bewegungsfunktion $\boldsymbol{\chi}(\mathbf{X}, t)$ wurde die Hadamardsche Bedingung in Abschnitt 2.3.5 abgeleitet. Im geometrisch linearen Fall reduziert sich diese kinematische Kompatibilitätsbedingung gemäß Gleichung (2.56) zu einer Sprungbedingung für den infinitesimalen Dehnungstensor

$$[[\boldsymbol{\epsilon}]] = \frac{1}{2}(\mathbf{a} \otimes \mathbf{n}^s + \mathbf{n}^s \otimes \mathbf{a}). \tag{4.19}$$

Der Sprung des Dehnungstensors $[[\boldsymbol{\epsilon}]]$ verschwindet also in tangentielle Richtungen \mathbf{t}^s und \mathbf{s}^s zur singulären Fläche, wobei $\mathbf{n}^s \cdot \mathbf{t}^s = \mathbf{n}^s \cdot \mathbf{s}^s = \mathbf{t}^s \cdot \mathbf{s}^s = 0$ gilt.

Beide Sprungbedingungen (4.18) und (4.19) sind von der Normalen \mathbf{n}^s zur singulären Fläche abhängig. Im Phasenfeldkontext ist die Normale im Übergangsbereich zwischen zwei Phasen α

und β durch den Gradienten der Ordnungsparameter gegeben

$$\mathbf{n}(\nabla\varphi) = \frac{\nabla\varphi_\alpha}{|\nabla\varphi_\alpha|} = -\frac{\nabla\varphi_\beta}{|\nabla\varphi_\beta|} \hat{=} \mathbf{n}^s \quad (4.20)$$

und entspricht der Normalen auf der singulären Fläche \mathbf{n}^s . Mit der Kenntnis der Normalen werden zunächst die Variablen in eine Basis $\mathbf{B} = \{\mathbf{n}, \mathbf{t}, \mathbf{s}\}$ transformiert, wobei $\mathbf{n} \cdot \mathbf{t} = \mathbf{n} \cdot \mathbf{s} = \mathbf{t} \cdot \mathbf{s} = 0$ gilt. Für die Transformation der Spannungen folgt

$$\sigma'_B(\mathbf{n}) = \mathbf{Q}\sigma\mathbf{Q}^\top = \begin{pmatrix} \sigma_{nn} & \sigma_{nt} & \sigma_{ns} \\ \sigma_{nt} & \sigma_{tt} & \sigma_{ts} \\ \sigma_{ns} & \sigma_{ts} & \sigma_{ss} \end{pmatrix}, \quad (4.21)$$

mit einer lokal definierten orthogonalen Transformationsmatrix

$$\mathbf{Q}(\mathbf{n}) = \begin{pmatrix} n_x & n_y & n_z \\ t_x & t_y & t_z \\ s_x & s_y & s_z \end{pmatrix}.$$

In dieser Basisdarstellung folgt für den Spannungsvektor $\sigma\mathbf{n}$ in der Komponentendarstellung

$$\begin{pmatrix} \sigma_{nn} & \sigma_{nt} & \sigma_{ns} \\ \sigma_{nt} & \sigma_{tt} & \sigma_{ts} \\ \sigma_{ns} & \sigma_{ts} & \sigma_{ss} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_{nn} \\ \sigma_{nt} \\ \sigma_{ns} \end{pmatrix}.$$

Mit dieser Relation in der Basis \mathbf{B} folgt aus der Kontinuität des Spannungsvektors, die durch das Kräftegleichgewicht (4.18) gegeben ist, die Kontinuität der Komponenten σ_{nn} , σ_{nt} und σ_{ns} des Spannungstensors σ_B . Auf gleiche Weise folgt aus der Sprungbedingung des Dehnungstensors (4.19) die Kontinuität der Dehnungskomponenten ε_{tt} , ε_{ss} und ε_{ts} . Damit können die Sprungbedingungen (4.18) und (4.19) in der Basisdarstellung \mathbf{B} folgendermaßen zusammengefasst werden

$$\llbracket \sigma'_B(\mathbf{n}) \rrbracket = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \llbracket \sigma_{tt} \rrbracket & \llbracket \sigma_{ts} \rrbracket \\ 0 & \llbracket \sigma_{ts} \rrbracket & \llbracket \sigma_{ss} \rrbracket \end{pmatrix}, \quad \llbracket \varepsilon'_B(\mathbf{n}) \rrbracket = \begin{pmatrix} \llbracket \varepsilon_{nn} \rrbracket & \llbracket \varepsilon_{nt} \rrbracket & \llbracket \varepsilon_{ns} \rrbracket \\ \llbracket \varepsilon_{nt} \rrbracket & 0 & 0 \\ \llbracket \varepsilon_{ns} \rrbracket & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.22)$$

Das bedeutet, dass die Komponenten nn , nt und ns des Spannungstensors σ'_B und die Komponenten tt , ss und ts des Dehnungstensors ε'_B kontinuierlich sind.

Unter Verwendung der Notation von Voigt [61] für symmetrische Tensoren wird die Transformation (4.21) und eine entsprechende Transformation für den Dehnungstensor zu

$$\begin{aligned} \sigma_B^v(\mathbf{n}) &= \mathbf{M}_\sigma^v \sigma^v, \\ \varepsilon_B^v(\mathbf{n}) &= \mathbf{M}_\varepsilon^v \varepsilon^v \end{aligned} \quad (4.23)$$

mit \mathbf{M}_σ^v und \mathbf{M}_ε^v als Transformationsmatrizen, die in Anhang A.1 definiert sind. Stellt man die Komponenten des Spannungs- und Dehnungstensors in der Voigtschen Darstellung um, so können die kontinuierlichen Variablen, die durch die Sprungbedingungen (4.22) gegeben sind, von den diskontinuierlichen Variablen separiert werden

$$\begin{aligned} \sigma_B^\alpha(\mathbf{n}) &:= \left(\underbrace{\sigma_{nn}, \sigma_{nt}, \sigma_{ns}}_{=: \sigma_n}, \underbrace{\sigma_{tt}^\alpha, \sigma_{ss}^\alpha, \sigma_{ts}^\alpha}_{=: \sigma_t^\alpha} \right)^\top = (\sigma_n, \sigma_t^\alpha)^\top, \\ \varepsilon_B^\alpha(\mathbf{n}) &:= \left(\underbrace{\varepsilon_{nn}^\alpha, 2\varepsilon_{nt}^\alpha, 2\varepsilon_{ns}^\alpha}_{=: \varepsilon_n^\alpha}, \underbrace{\varepsilon_{tt}, \varepsilon_{ss}, 2\varepsilon_{ts}}_{=: \varepsilon_t} \right)^\top = (\varepsilon_n^\alpha, \varepsilon_t)^\top. \end{aligned} \quad (4.24)$$

In σ_n und ε_t sind die kontinuierlichen Spannungs- bzw. Dehnungsvariablen zusammengefasst und in σ_t^α und ε_n^α die entsprechenden diskontinuierlichen Variablen. Das hochgestellte α deutet an, dass es sich um eine diskontinuierliche und damit phasenabhängige Variable handelt. Mit dieser Umsortierung der Komponenten in der Voigtschen Darstellung ändern sich auch die entsprechenden Transformationsmatrizen. So folgt für die Transformation des Spannungs- und Dehnungstensors

$$\begin{aligned}\sigma_B(\mathbf{n}) &= \mathbf{M}_\sigma(\mathbf{n})\sigma^v, \\ \varepsilon_B(\mathbf{n}) &= \mathbf{M}_\varepsilon(\mathbf{n})\varepsilon^v.\end{aligned}\quad (4.25)$$

Mit den definierten Notationen und der Relation $\mathbf{M}_\sigma^{-1} = \mathbf{M}_\varepsilon^T$ [62] wird die Formänderungsenergie-dichte zu

$$\begin{aligned}W(\varepsilon^v) &= \frac{1}{2}(\varepsilon^v \cdot \mathbf{C}^v \varepsilon^v) = \frac{1}{2}(\mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \varepsilon_B \cdot \mathbf{C}^v \mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \varepsilon_B) \\ &= \frac{1}{2}(\varepsilon_B \cdot \mathbf{M}_\varepsilon^{-T} \mathbf{C}^v \mathbf{M}_\varepsilon^{-1} \varepsilon_B) = \frac{1}{2}(\varepsilon_B \cdot \underbrace{\mathbf{M}_\sigma \mathbf{C}^v \mathbf{M}_\sigma^T}_{=: \mathbf{C}_B} \varepsilon_B) = W(\varepsilon_B).\end{aligned}$$

Für eine Vereinfachung der folgenden Berechnungen wird der Steifigkeitstensor \mathbf{C}_B in Blöcke unterteilt

$$\mathbf{C}_B(\mathbf{n}) = \begin{pmatrix} C_{nnnn} & C_{nnnt} & C_{nnns} & C_{nntt} & C_{nnss} & C_{nnts} \\ C_{ntnn} & C_{ntnt} & C_{ntns} & C_{nttt} & C_{ntss} & C_{ntts} \\ C_{nsnn} & C_{nsnt} & C_{nsns} & C_{nstt} & C_{nsss} & C_{nsts} \\ C_{ttnn} & C_{ttnt} & C_{ttns} & C_{tttt} & C_{ttss} & C_{ttts} \\ C_{ssnn} & C_{ssnt} & C_{ssns} & C_{sstt} & C_{ssss} & C_{sstt} \\ C_{tsnn} & C_{tsnt} & C_{tsns} & C_{tstt} & C_{tsss} & C_{tsts} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{C}_{nn} & \mathbf{C}_{nt} \\ \mathbf{C}_{tn} & \mathbf{C}_{tt} \end{pmatrix}. \quad (4.26)$$

Mit \mathbf{C}_{nn} und \mathbf{C}_{tt} als symmetrische Matrizen der Dimension 3×3 . \mathbf{C}_{nt} und \mathbf{C}_{tn} sind 3×3 Matrizen, für welche die Bedingung $\mathbf{C}_{tn} = \mathbf{C}_{nt}^T$ erfüllt ist.

4.3.2. Mechanische Konfigurationskräfte im Phasenfeldkontext

Mit dem Gradienten der Ordnungsparameter im Übergangsbereich wird die Orientierung der Basis \mathbf{B} vorgegeben. Die Basis \mathbf{B} gibt die Richtungen für die Zerlegung der Spannungen und Dehnungen in kontinuierliche σ_n bzw. ε_t und diskontinuierliche σ_t^α bzw. ε_n^α Variablen vor (siehe Gleichung (4.24)). Mit den Notationen, die im vorhergehenden Abschnitt besprochen wurden, kann die Formänderungsenergie-dichte der VT-Approximation für die jeweilige Phase folgendermaßen formuliert werden

$$\begin{aligned}W^\alpha(\varepsilon_B^\alpha) &= \frac{1}{2}(\varepsilon_B^\alpha \cdot \mathbf{C}_B^\alpha \varepsilon_B^\alpha) \\ &= \frac{1}{2}((\varepsilon_n^\alpha \cdot \mathbf{C}_{nn}^\alpha \varepsilon_n^\alpha) + (\varepsilon_n^\alpha \cdot \mathbf{C}_{nt}^\alpha \varepsilon_t) + (\varepsilon_t \cdot \mathbf{C}_{tn}^\alpha \varepsilon_n^\alpha) + (\varepsilon_t \cdot \mathbf{C}_{tt}^\alpha \varepsilon_t)).\end{aligned}\quad (4.27)$$

Dabei wird als Ausgangspotential die Formänderungsenergie-dichte der VT-Approximation $W^\alpha = W^{VT^\alpha}$ verwendet. Damit ist die phasenanteilige Formänderungsenergie-dichte eine Funktion von kontinuierlichen ε_t und diskontinuierlichen ε_n^α Variablen. Wie in Abschnitt 4.2 diskutiert wurde, ist die gesamte Formänderungsenergie-dichte durch die lineare Interpolation der Potentiale der

lokal existierenden Phasen mit den jeweiligen Interpolationsfunktionen gegeben. Gemäß der Gleichung (4.7) folgt für die Formänderungsenergiedichte für ein binäres System

$$W(\boldsymbol{\varepsilon}_B) = W^\alpha(\boldsymbol{\varepsilon}_B^\alpha)h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}) + W^\beta(\boldsymbol{\varepsilon}_B^\beta)(1 - h^\alpha(\boldsymbol{\varphi})).$$

Für die Berechnung der Evolutionsgleichung der Ordnungsparameter ist eine Variation der freien Energie (4.8) notwendig. Die Beiträge der Gradientenenergiedichte und des Energiepotentials zu der Evolutionsgleichung wurden in Abschnitt 3.1 ausgiebig diskutiert. Daher wird in diesem Abschnitt der Beitrag der Formänderungsenergie hergeleitet. Dieser Beitrag ist durch die Variation der Formänderungsenergie E nach den jeweiligen Ordnungsparametern gegeben

$$\frac{\delta E}{\delta \varphi_\alpha} = \frac{\partial W(\boldsymbol{\varepsilon}_B)}{\partial \varphi_\alpha} - \nabla \cdot \frac{\partial W(\boldsymbol{\varepsilon}_B)}{\partial \nabla \varphi_\alpha}. \quad (4.28)$$

Für den ersten Beitrag der Variationsableitung (4.28) folgt bei konstantem $\boldsymbol{\varepsilon}_B$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial W(\boldsymbol{\varepsilon}_B)}{\partial \varphi_\alpha} \right)_{\boldsymbol{\varepsilon}_B} &= (W^\alpha - W^\beta) \frac{\partial h^\alpha(\boldsymbol{\varphi})}{\partial \varphi_\alpha} + \frac{\partial W^\alpha}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_n^\alpha} \cdot \frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_n^\alpha}{\partial \varphi_\alpha} h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}) + \frac{\partial W^\beta}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_n^\beta} \cdot \frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_n^\beta}{\partial \varphi_\alpha} (1 - h^\alpha(\boldsymbol{\varphi})) \\ &\quad + \frac{\partial W^\alpha}{\partial \boldsymbol{C}_B^\alpha} \cdot \frac{\partial \boldsymbol{C}_B^\alpha}{\partial \varphi_\alpha} h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}) + \frac{\partial W^\beta}{\partial \boldsymbol{C}_B^\beta} \cdot \frac{\partial \boldsymbol{C}_B^\beta}{\partial \varphi_\alpha} (1 - h^\alpha(\boldsymbol{\varphi})). \end{aligned} \quad (4.29)$$

Die Steifigkeitstensoren \boldsymbol{C}_B^α bzw. \boldsymbol{C}_B^β sind in den jeweiligen Phasen konstant. Daher verschwinden die letzten zwei Beiträge der Ableitung. Aus dem Kräftegleichgewicht (4.18) folgt für die Normalkomponenten des Dehnungstensors

$$\boldsymbol{\varepsilon}_n = \boldsymbol{\varepsilon}_n^\alpha h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}) + \boldsymbol{\varepsilon}_n^\beta (1 - h^\alpha(\boldsymbol{\varphi})). \quad (4.30)$$

Da für die weitere Auswertung eine partielle Ableitung der Dehnungsbeiträge bei konstanten $\boldsymbol{\varepsilon}_B$ benötigt wird, wird die Gleichung (4.30) von beiden Seiten nach φ_α abgeleitet. Dies liefert die folgende Relation

$$-\left(\boldsymbol{\varepsilon}_n^\alpha - \boldsymbol{\varepsilon}_n^\beta \right) \frac{\partial h^\alpha(\boldsymbol{\varphi})}{\partial \varphi_\alpha} = \frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_n^\alpha}{\partial \varphi_\alpha} h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}) + \frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_n^\beta}{\partial \varphi_\alpha} (1 - h^\alpha(\boldsymbol{\varphi})).$$

Wird diese Relation in die Gleichung (4.29) substituiert und die Bedingung verwendet, dass die Ableitungen der Formänderungsenergiedichten nach den jeweiligen Normalkomponenten der Dehnungen die entsprechenden Normalkomponenten der Spannungen ergeben und $\boldsymbol{\sigma}_n$ phasenunabhängig sind $\boldsymbol{\sigma}_n = \partial W^\alpha / \partial \boldsymbol{\varepsilon}_n^\alpha = \partial W^\beta / \partial \boldsymbol{\varepsilon}_n^\beta$, folgt für die Ableitung (4.29)

$$\left(\frac{\partial W}{\partial \varphi_\alpha} \right)_{\boldsymbol{\varepsilon}_B} = (W^\alpha - W^\beta) \frac{\partial h^\alpha(\boldsymbol{\varphi})}{\partial \varphi_\alpha} - \boldsymbol{\sigma}_n \cdot \left(\boldsymbol{\varepsilon}_n^\alpha - \boldsymbol{\varepsilon}_n^\beta \right) \frac{\partial h^\alpha(\boldsymbol{\varphi})}{\partial \varphi_\alpha}.$$

Sortiert man die einzelnen Beiträge um, so folgt für die Ableitung der Formänderungsenergiedichte

W nach φ_α

$$\begin{aligned}
 \left(\frac{\partial W}{\partial \varphi_\alpha} \right)_{\varepsilon_B} &= \left((W^\alpha - \sigma_n \cdot \varepsilon_n^\alpha) - (W^\beta - \sigma_n \cdot \varepsilon_n^\beta) \right) \frac{\partial h^\alpha(\varphi)}{\partial \varphi_\alpha} \\
 &= \left(\underbrace{\left(W^\alpha - \frac{\partial W^\alpha}{\partial \varepsilon_n^\alpha} \cdot \varepsilon_n^\alpha \right)}_{=: \Psi^\alpha(\sigma_n, \varepsilon_t)} - \underbrace{\left(W^\beta - \frac{\partial W^\beta}{\partial \varepsilon_n^\beta} \cdot \varepsilon_n^\beta \right)}_{=: \Psi^\beta(\sigma_n, \varepsilon_t)} \right) \frac{\partial h^\alpha(\varphi)}{\partial \varphi} \\
 &= \frac{\partial}{\partial \varphi_\alpha} \left(\Psi^\alpha(\sigma_n, \varepsilon_t) h^\alpha(\varphi) + \Psi^\beta(\sigma_n, \varepsilon_t) (1 - h^\alpha(\varphi)) \right).
 \end{aligned}$$

$\Psi^\alpha(\sigma_n, \varepsilon_t)$ und $\Psi^\beta(\sigma_n, \varepsilon_t)$ sind die Potentiale der einzelnen Phasen, die nur kontinuierliche Variablen σ_n und ε_t beinhalten. Diese Potentiale können mit einer Legendre-Transformation aus den jeweiligen Formänderungsenergiedichten W^α berechnet werden

$$\Psi^\alpha(\sigma_n, \varepsilon_t) = W^\alpha(\varepsilon_n^\alpha(\sigma_n, \varepsilon_t), \varepsilon_t) - \frac{\partial W^\alpha(\varepsilon_n^\alpha(\sigma_n, \varepsilon_t), \varepsilon_t)}{\partial \varepsilon_n^\alpha} \cdot \varepsilon_n^\alpha(\sigma_n, \varepsilon_t). \quad (4.31)$$

Als Ausgangspotential wird dabei die Formänderungsenergiedichte der VT-Approximation verwendet. Ausgehend von der Formänderungsenergiedichte der RS-Approximation kann $\Psi^\alpha(\sigma_n, \varepsilon_t)$ folgendermaßen berechnet werden

$$\Psi^\alpha(\sigma_n, \varepsilon_t) = W^{\text{RS}^\alpha}(\sigma_n, \sigma_t^\alpha(\sigma_n, \varepsilon_t)) - \frac{\partial W^{\text{RS}^\alpha}(\sigma_n, \sigma_t^\alpha(\sigma_n, \varepsilon_t))}{\partial \sigma_t^\alpha} \cdot \sigma_t^\alpha(\sigma_n, \varepsilon_t). \quad (4.32)$$

Für den zweiten Teil der Variationsableitung (4.28) folgt für die x -Komponente der Ableitung der Formänderungsenergiedichte nach $\nabla \varphi_\alpha$ bei konstantem ε_B

$$\begin{aligned}
 \left(\frac{\partial W}{\partial \varphi_x} \right)_{\varepsilon_B} &= W^\alpha \frac{\partial h^\alpha(\varphi)}{\partial \varphi_x} + W^\beta \frac{\partial (1 - h^\alpha(\varphi))}{\partial \varphi_x} \\
 &+ \frac{\partial W^\alpha}{\partial \varepsilon_t} \cdot \frac{\partial \varepsilon_t}{\partial \varphi_x} h^\alpha(\varphi) + \frac{\partial W^\beta}{\partial \varepsilon_t} \cdot \frac{\partial \varepsilon_t}{\partial \varphi_x} (1 - h^\alpha(\varphi)) \\
 &+ \frac{\partial W^\alpha}{\partial \varepsilon_n^\alpha} \cdot \frac{\partial \varepsilon_n^\alpha}{\partial \varphi_x} h^\alpha(\varphi) + \frac{\partial W^\beta}{\partial \varepsilon_n^\beta} \cdot \frac{\partial \varepsilon_n^\beta}{\partial \varphi_x} (1 - h^\alpha(\varphi)) \\
 &+ \frac{\partial W^\alpha}{\partial \mathcal{C}_B^\alpha} \cdot \frac{\partial \mathcal{C}_B^\alpha}{\partial \varphi_x} h^\alpha(\varphi) + \frac{\partial W^\beta}{\partial \mathcal{C}_B^\beta} \cdot \frac{\partial \mathcal{C}_B^\beta}{\partial \varphi_x} (1 - h^\alpha(\varphi)),
 \end{aligned} \quad (4.33)$$

mit $\varphi_x = (\nabla \varphi_\alpha)_x$. Ähnliche Ausdrücke folgen für die y - und z -Komponenten der Ableitung nach $\nabla \varphi_\alpha$. Die ersten zwei Terme der Gleichung (4.33) verschwinden, da die Interpolationsfunktionen (3.9) unabhängig von $\nabla \varphi$ sind. Die Ableitung wurde bei konstanten $\varepsilon_B = (\varepsilon_n, \varepsilon_t)^\top$ durchgeführt, daher verschwinden auch die partiellen Ableitungen $\partial \varepsilon_t / \partial \varphi_x$. Mit $\mathcal{C}_B^\alpha = \mathbf{M}_\sigma \mathcal{C}^\alpha \mathbf{M}_\sigma^\top$ ergibt sich

$$\frac{\partial \mathcal{C}_B^\alpha}{\partial \varphi_x} = \frac{\partial \mathcal{C}_B^\alpha}{\partial \mathbf{M}_\sigma} \frac{\partial \mathbf{M}_\sigma}{\partial \varphi_x} + \frac{\partial \mathcal{C}_B^\alpha}{\partial \mathbf{M}_\sigma^\top} \frac{\partial \mathbf{M}_\sigma^\top}{\partial \varphi_x} + \underbrace{\frac{\partial \mathcal{C}_B^\alpha}{\partial \mathcal{C}^\alpha} \frac{\partial \mathcal{C}^\alpha}{\partial \varphi_x}}_{=0}. \quad (4.34)$$

Ein entsprechender Beitrag ergibt sich für die Ableitung von \mathcal{C}_B^β . Da die Transformationsmatrizen \mathbf{M}_σ und \mathbf{M}_σ^\top mit $\mathbf{n} = \nabla\varphi_\alpha/|\nabla\varphi_\alpha|$ konstruiert wurden, verschwinden die ersten zwei Beiträge in der Gleichung (4.34) im Allgemeinen nicht. Bei isotropen Materialeigenschaften ändern sich die Steifigkeitstensoren bei der Transformation nicht und es gilt $\mathcal{C}_B^\alpha = \mathcal{C}^\alpha$ bzw. $\mathcal{C}_B^\beta = \mathcal{C}^\beta$. Da die Materialparameter in der jeweiligen Phase konstant sind, verschwinden im Falle der Isotropie die Ableitungen $\partial\mathcal{C}^\alpha/\partial\varphi_x = \mathcal{C}^\beta/\partial\varphi_x = 0$ und damit auch die letzten zwei Terme in der Gleichung (4.33). Für die Auswertung der übrigen Beiträge wird die Gleichung (4.30) von beiden Seiten nach φ_x bei konstantem ε_n abgeleitet. Es ergibt sich

$$\mathbf{0} = \left(\frac{\partial\varepsilon_n^\alpha}{\partial\varphi_x} h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}) + \frac{\partial\varepsilon_n^\beta}{\partial\varphi_x} (1 - h^\alpha(\boldsymbol{\varphi})) \right).$$

Unter Verwendung dieser Relation und $\sigma_n = \partial W^\alpha/\partial\varepsilon_n^\alpha = \partial W^\beta/\partial\varepsilon_n^\beta$ folgt, dass die Ableitung der Formänderungsenergiedichte W nach $\nabla\varphi_\alpha$, die mit der Berechnung (4.33) gesucht wurde, im Falle der Isotropie verschwindet $\partial W/(\partial\nabla\varphi_\alpha) = \mathbf{0}$.

Daher ist der Beitrag der Formänderungsenergie zu der treibenden Kraft der Ordnungsparameter im Falle der Isotropie gegeben durch

$$\frac{\delta E}{\delta\varphi_\alpha} = \left(\Psi^\alpha(\boldsymbol{\sigma}_n, \boldsymbol{\varepsilon}_t) - \Psi^\beta(\boldsymbol{\sigma}_n, \boldsymbol{\varepsilon}_t) \right) \frac{\partial h^\alpha(\boldsymbol{\varphi})}{\partial\varphi_\alpha}.$$

Dabei können die jeweiligen Potentiale durch die Gleichung (4.31) oder (4.32) berechnet werden. Beide Potentiale, gewichtet mit den jeweiligen Interpolationsfunktionen $h^\alpha(\boldsymbol{\varphi})$ bzw. $(1 - h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}))$, ergeben ein Gesamtpotential der Form

$$\Psi(\boldsymbol{\varphi}, \nabla\boldsymbol{\varphi}, \boldsymbol{\sigma}_n, \boldsymbol{\varepsilon}_t) = \Psi^\alpha(\boldsymbol{\sigma}_n, \boldsymbol{\varepsilon}_t) h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}) + \Psi^\beta(\boldsymbol{\sigma}_n, \boldsymbol{\varepsilon}_t) (1 - h^\alpha(\boldsymbol{\varphi})). \quad (4.35)$$

Die Abhängigkeit des Potentials Ψ von $\nabla\boldsymbol{\varphi}$ kommt zustande, da die Aufspaltung der Variablen in kontinuierliche und diskontinuierliche Variablen mit der Information der Normalen $\mathbf{n} = \nabla\varphi_\alpha/|\nabla\varphi_\alpha|$ und damit mit dem Gradienten der Ordnungsparameter geschieht. Eine Beschreibung der Variation der Formänderungsenergie mit der Formänderungsenergiedichte $W(\boldsymbol{\varepsilon}_B)$ ist äquivalent zu der Beschreibung mit dem Gesamtpotential $\Psi(\boldsymbol{\varphi}, \nabla\boldsymbol{\varphi}, \boldsymbol{\sigma}_n, \boldsymbol{\varepsilon}_t)$

$$\frac{\delta E}{\delta\varphi_\alpha} = \frac{\partial W(\boldsymbol{\varepsilon}_B)}{\partial\varphi_\alpha} = \frac{\partial\Psi(\boldsymbol{\varphi}, \nabla\boldsymbol{\varphi}, \boldsymbol{\sigma}_n, \boldsymbol{\varepsilon}_t)}{\partial\varphi_\alpha} = \llbracket\Psi(\boldsymbol{\sigma}_n, \boldsymbol{\varepsilon}_t)\rrbracket \frac{\partial h^\alpha(\boldsymbol{\varphi})}{\partial\varphi_\alpha}. \quad (4.36)$$

Für anisotrope Materialparameter \mathcal{C}^α oder \mathcal{C}^β muss ein zusätzlicher Beitrag zu der Evolutionsgleichung berücksichtigt werden (siehe Berechnung (4.34)).

Die Evolution der Ordnungsparameter in einem binären System wird durch Gleichung (3.19) beschrieben. Wie in Abschnitt 3.1.3 besprochen, verschwindet die lokale Änderung $\partial\varphi_\alpha/\partial t = 0$, wenn sich das System im Gleichgewicht befindet. Die Variation der Formänderungsenergie ist durch die Gleichung (4.36) gegeben und kann direkt mit dem Potential $\Psi(\boldsymbol{\varphi}, \nabla\boldsymbol{\varphi}, \boldsymbol{\sigma}_n, \boldsymbol{\varepsilon}_t)$ beschrieben werden. Damit folgt unter Berücksichtigung der Formänderungsenergie für den Gleichgewichtszustand eines binären Systems

$$\frac{1}{2} \llbracket\Psi(\boldsymbol{\sigma}_n, \boldsymbol{\varepsilon}_t)\rrbracket \frac{\partial h^\alpha}{\partial\varphi_\alpha} = -\gamma_{\alpha\beta} \left(\varepsilon \Delta_x \varphi_\alpha - \frac{16}{\varepsilon\pi^2} \frac{(1 - 2\varphi_\alpha)}{2} \right). \quad (4.37)$$

Für die Auswertung dieses Gleichgewichtszustandes, im Kontext von scharfen Grenzflächen, muss ein Linienintegral in Richtung der Normalen \mathbf{n} ausgewertet werden, wie es in Abschnitt (3.1.4) durchgeführt wurde. Da das Potential $\Psi(\boldsymbol{\varphi}, \nabla \boldsymbol{\varphi}, \boldsymbol{\sigma}_n, \boldsymbol{\varepsilon}_t)$ nur kontinuierliche Variablen beinhaltet, wie bei der Berechnung in Abschnitt (3.1.4) gefordert, ist die Bedingung (4.37) äquivalent zu

$$\llbracket \Psi(\boldsymbol{\sigma}_n, \boldsymbol{\varepsilon}_t) \rrbracket = \llbracket W - \frac{\partial W}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_n} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_n \rrbracket = \llbracket W \rrbracket - \boldsymbol{\sigma}_n \cdot \llbracket \boldsymbol{\varepsilon}_n \rrbracket = \llbracket W \rrbracket - \llbracket \boldsymbol{\varepsilon} \rrbracket \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} = -\gamma_{\alpha\beta\kappa}. \quad (4.38)$$

Damit ist die Bedingung für den Gleichgewichtszustand (4.37) im geometrisch linearen Fall äquivalent zu der Bilanz der Konfigurationskräfte (2.58). Außerdem zeigen die Berechnungen in der Gleichung (2.57), dass der Sprung der Potentiale $\llbracket \Psi(\boldsymbol{\sigma}_n, \boldsymbol{\varepsilon}_t) \rrbracket$ gleich dem Sprung der Eshelby-Tensoren (2.40) in nn -Richtung im geometrisch linearen Fall ist

$$\llbracket \Psi(\boldsymbol{\sigma}_n, \boldsymbol{\varepsilon}_t) \rrbracket = \mathbf{n} \cdot \llbracket \boldsymbol{\Sigma} \rrbracket \mathbf{n}.$$

Somit wird unter Verwendung des Potentials $\Psi(\boldsymbol{\varphi}, \nabla \boldsymbol{\varphi}, \boldsymbol{\sigma}_n, \boldsymbol{\varepsilon}_t)$ die Bilanz der Konfigurationskräfte (2.58) im Phasenfeldkontext exakt abgebildet.

4.3.3. Berechnung der effektiven Materialparameter

Das phasenanteilige Potential (4.31), das nur kontinuierliche Variablen $\boldsymbol{\sigma}_n$ und $\boldsymbol{\varepsilon}_t$ beinhaltet, ist durch eine Legendre-Transformation der Formänderungsenergiedichte W^α gegeben. Damit sind alle Diskontinuitäten aus den Variablen substituiert und können durch Sprünge der Materialparameter ausgedrückt werden. In diesem Abschnitt wird ein Ausdruck für die effektiven Materialparameter im Übergangsbereich basierend auf dem Gesamtpotential $\Psi(\boldsymbol{\varphi}, \nabla \boldsymbol{\varphi}, \boldsymbol{\sigma}_n, \boldsymbol{\varepsilon}_t)$ hergeleitet.

Als Basispotential wird hier die Formänderungsenergiedichte $W^\alpha = W^{VT^\alpha}$ der VT-Approximation verwendet. Ausgehend von der Formulierung der Formänderungsenergiedichte in der Basis \mathbf{B} (siehe Gl. (4.27)) ergibt sich

$$\frac{\partial W^\alpha(\boldsymbol{\varepsilon}_n^\alpha, \boldsymbol{\varepsilon}_t)}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_n^\alpha} = \mathbf{C}_{nn}^\alpha \boldsymbol{\varepsilon}_n^\alpha + \mathbf{C}_{nt}^\alpha \boldsymbol{\varepsilon}_t = \boldsymbol{\sigma}_n.$$

Damit folgt für die diskontinuierliche Variable

$$\boldsymbol{\varepsilon}_n^\alpha = (\mathbf{C}_{nn}^\alpha)^{-1} (\boldsymbol{\sigma}_n - \mathbf{C}_{nt}^\alpha \boldsymbol{\varepsilon}_t).$$

Wird dieser Ausdruck für $\boldsymbol{\varepsilon}_n^\alpha$ in die Berechnungsvorschrift für $\Psi^\alpha(\boldsymbol{\sigma}_n, \boldsymbol{\varepsilon}_t)$ substituiert, folgt

$$\Psi^\alpha(\boldsymbol{\sigma}_n, \boldsymbol{\varepsilon}_t) = \frac{1}{2} (\boldsymbol{\sigma}_n \cdot ((-\mathbf{S}_{nn}^\alpha) \boldsymbol{\sigma}_n + \mathbf{S}_{nn}^\alpha \mathbf{C}_{nt}^\alpha \boldsymbol{\varepsilon}_t) + \boldsymbol{\varepsilon}_t \cdot (\mathbf{C}_{tn}^\alpha \mathbf{S}_{nn}^\alpha \boldsymbol{\varepsilon}_t \boldsymbol{\sigma}_n + (\mathbf{C}_{tt}^\alpha - \mathbf{C}_{tn}^\alpha \mathbf{S}_{nn}^\alpha \mathbf{C}_{nt}^\alpha) \boldsymbol{\varepsilon}_t)),$$

dabei sind $(\mathbf{C}_{nn}^\alpha)^{-1} =: \mathbf{S}_{nn}^\alpha$ und $(\mathbf{C}_{nt}^\alpha)^\top = \mathbf{C}_{tn}^\alpha$. Fasst man die kontinuierliche Variablen $\boldsymbol{\sigma}_n$ und $\boldsymbol{\varepsilon}_t$ zu einer Größe

$$\boldsymbol{\zeta} = (\sigma_{nn}, \sigma_{nt}, \sigma_{ns}, \varepsilon_{tt}, \varepsilon_{ss}, 2\varepsilon_{ts})^\top = (\boldsymbol{\sigma}_n, \boldsymbol{\varepsilon}_t)^\top \quad (4.39)$$

zusammen, so folgt für das Potential, welches nur von kontinuierlichen Variablen abhängt

$$\Psi^\alpha(\boldsymbol{\sigma}_n, \boldsymbol{\varepsilon}_t) = \frac{1}{2} (\boldsymbol{\zeta} \cdot \boldsymbol{\mathcal{T}}^\alpha \boldsymbol{\zeta}). \quad (4.40)$$

Dabei ist \mathcal{T}^α eine Proportionalitätsmatrix zwischen den kontinuierlichen und diskontinuierlichen Variablen für die Phase α mit der folgenden Definition

$$\mathcal{T}^\alpha = \begin{pmatrix} -\mathcal{S}_{nn}^\alpha & \mathcal{S}_{nn}^\alpha \mathcal{C}_{nt}^\alpha \\ \mathcal{C}_{tn}^\alpha \mathcal{S}_{nn}^\alpha & \mathcal{C}_{tt}^\alpha - \mathcal{C}_{tn}^\alpha \mathcal{S}_{nn}^\alpha \mathcal{C}_{nt}^\alpha \end{pmatrix}. \quad (4.41)$$

Das Gesamtpotential $\Psi(\boldsymbol{\varphi}, \nabla \boldsymbol{\varphi}, \boldsymbol{\sigma}_n, \boldsymbol{\varepsilon}_t)$ setzt sich nach Gleichung (4.35) aus den phasenanteiligen Beiträgen $\Psi^\alpha(\boldsymbol{\sigma}_n, \boldsymbol{\varepsilon}_t)$ und $\Psi^\beta(\boldsymbol{\sigma}_n, \boldsymbol{\varepsilon}_t)$ und den entsprechenden Interpolationsfunktionen $h^\alpha(\boldsymbol{\varphi})$ und $h^\beta(\boldsymbol{\varphi})$ zusammen. Daher folgt mit der Definition der einzelnen Beiträge nach Gleichung (4.40) für das Gesamtpotential

$$\begin{aligned} \Psi(\boldsymbol{\varphi}, \nabla \boldsymbol{\varphi}, \boldsymbol{\zeta}) &= \Psi^\alpha(\boldsymbol{\zeta}) h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}) + \Psi^\beta(\boldsymbol{\zeta}) (1 - h^\alpha(\boldsymbol{\varphi})) \\ &= \frac{1}{2} (\boldsymbol{\zeta} \cdot \mathcal{T}^\alpha(\mathbf{n}) \boldsymbol{\zeta}) h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}) + \frac{1}{2} (\boldsymbol{\zeta} \cdot \mathcal{T}^\beta(\mathbf{n}) \boldsymbol{\zeta}) (1 - h^\alpha(\boldsymbol{\varphi})) \\ &= \frac{1}{2} (\boldsymbol{\zeta} \cdot \mathcal{T}(\mathbf{n}) \boldsymbol{\zeta}), \end{aligned}$$

mit der lokal zwischen den Phasen interpolierten Proportionalitätsmatrix

$$\mathcal{T}(\mathbf{n}) = \mathcal{T}^\alpha(\mathbf{n}) h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}) + \mathcal{T}^\beta(\mathbf{n}) (1 - h^\alpha(\boldsymbol{\varphi})). \quad (4.42)$$

Auf dieselbe Weise, wie der Steifigkeitstensor in Blöcke aufgespalten wurde (siehe Gl. (4.26)), wird auch die Proportionalitätsmatrix (4.42) in Blöcke unterteilt

$$\mathcal{T} = \begin{pmatrix} \mathcal{T}_{nn} & \mathcal{T}_{nt} \\ \mathcal{T}_{nt}^\top & \mathcal{T}_{tt} \end{pmatrix}.$$

Wobei die entsprechenden Beiträge folgendermaßen definiert sind

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_{nn} &:= \sum_{\alpha=1}^2 \mathcal{T}_{nn}^\alpha h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}) := -\mathcal{S}_{nn}^\alpha h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}) - \mathcal{S}_{nn}^\beta (1 - h^\alpha(\boldsymbol{\varphi})) \\ \mathcal{T}_{nt} &:= \sum_{\alpha=1}^2 \mathcal{T}_{nt}^\alpha h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}) := \mathcal{S}_{nn}^\alpha \mathcal{C}_{nt}^\alpha h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}) + \mathcal{S}_{nn}^\beta \mathcal{C}_{nt}^\beta (1 - h^\alpha(\boldsymbol{\varphi})) \\ \mathcal{T}_{tt} &:= \sum_{\alpha=1}^2 \mathcal{T}_{tt}^\alpha h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}) := (\mathcal{C}_{tt}^\alpha - \mathcal{C}_{tn}^\alpha \mathcal{S}_{nn}^\alpha \mathcal{C}_{nt}^\alpha) h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}) + (\mathcal{C}_{tt}^\beta - \mathcal{C}_{tn}^\beta \mathcal{S}_{nn}^\beta \mathcal{C}_{nt}^\beta) (1 - h^\alpha(\boldsymbol{\varphi})). \end{aligned} \quad (4.43)$$

4.3.4. Ergänzung der inelastischen Dehnungsanteile

Die bisherigen Formulierungen der Potentiale wurde ohne Berücksichtigung von inelastischen Dehnungsanteilen $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}$ durchgeführt. Inelastische Dehnungen können phasenspezifische konstante Dehnungen $\boldsymbol{\varepsilon}_0^\alpha$, konzentrations- oder temperaturabhängige Dehnungsbeiträge $\boldsymbol{\varepsilon}_0^\alpha(C(\mathbf{x}))$ bzw. $\boldsymbol{\varepsilon}_0^\alpha(T(\mathbf{x}))$, ortsabhängige plastische Dehnungen $\boldsymbol{\varepsilon}_{pl}^\alpha(\mathbf{x})$ oder auch die Summe all dieser Dehnungen sein

$$\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^\alpha = \boldsymbol{\varepsilon}_0^\alpha + \boldsymbol{\varepsilon}_0^\alpha(C(\mathbf{x})) + \boldsymbol{\varepsilon}_0^\alpha(T(\mathbf{x})) + \boldsymbol{\varepsilon}_{pl}^\alpha(\mathbf{x}) + \dots$$

Mit den Notationen, die in Abschnitt 4.3.1 eingeführt wurden, folgt für die Formänderungsenergie-
dichte der jeweiligen Phase unter Berücksichtigung der nicht elastischen Dehnungsbeiträge

$$\begin{aligned} W^\alpha(\boldsymbol{\varepsilon}_B) &= \frac{1}{2}((\boldsymbol{\varepsilon}_B^\alpha - \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_B^\alpha) \cdot \mathbf{C}_B^\alpha(\boldsymbol{\varepsilon}_B^\alpha - \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_B^\alpha)) \\ &= \frac{1}{2}((\boldsymbol{\varepsilon}_n^\alpha - \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_n^\alpha) \cdot \mathbf{C}_{nn}^\alpha(\boldsymbol{\varepsilon}_n^\alpha - \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_n^\alpha) + (\boldsymbol{\varepsilon}_n^\alpha - \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_n^\alpha) \cdot \mathbf{C}_{nt}^\alpha(\boldsymbol{\varepsilon}_t - \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_t^\alpha) \\ &\quad + (\boldsymbol{\varepsilon}_t - \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_t^\alpha) \cdot \mathbf{C}_{tn}^\alpha(\boldsymbol{\varepsilon}_n^\alpha - \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_n^\alpha) + (\boldsymbol{\varepsilon}_t - \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_t^\alpha) \cdot \mathbf{C}_{tt}^\alpha(\boldsymbol{\varepsilon}_t - \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_t^\alpha)). \end{aligned} \quad (4.44)$$

Mit denselben Berechnungen, die in Abschnitt 4.3.3 durchgeführt wurden, ergibt sich für die
Komponenten der Spannungen bzw. der Dehnungen in n -Richtung

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma}_n &= \mathbf{C}_{nn}^\alpha(\boldsymbol{\varepsilon}_n^\alpha - \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_n^\alpha) + \mathbf{C}_{nt}^\alpha(\boldsymbol{\varepsilon}_t - \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_t^\alpha), \\ \boldsymbol{\varepsilon}_n^\alpha &= \mathbf{S}_{nn}^\alpha(\boldsymbol{\sigma}_n - \mathbf{C}_{nt}^\alpha(\boldsymbol{\varepsilon}_t - \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_t^\alpha)) + \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_n^\alpha. \end{aligned}$$

Substituiert man die $\boldsymbol{\varepsilon}_n^\alpha$ -Abhängigkeit aus der Formulierung der Formänderungsenergie-
dichte (4.44) mit einer Legendre-Transformation, ergibt sich ein Potential, welches nur von konti-
nuierlichen Variablen $\boldsymbol{\sigma}_n$ und $\boldsymbol{\varepsilon}_t$ abhängt

$$\Psi^\alpha(\boldsymbol{\sigma}_n, \boldsymbol{\varepsilon}_t) = \frac{1}{2} \left(\begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma}_n \\ \boldsymbol{\varepsilon}_t - \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_t^\alpha \end{pmatrix} \cdot \mathcal{T}^\alpha \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma}_n \\ \boldsymbol{\varepsilon}_t - \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_t^\alpha \end{pmatrix} \right) - \boldsymbol{\sigma}_n \cdot \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_n^\alpha. \quad (4.45)$$

Separiert man den Betrag der inelastischen Dehnungsanteile von dem Potential (4.45), folgt

$$\begin{aligned} \Psi^\alpha(\boldsymbol{\sigma}_n, \boldsymbol{\varepsilon}_t) &= \frac{1}{2} \left(\boldsymbol{\zeta} \cdot \begin{pmatrix} \mathcal{T}_{nn}^\alpha & \mathcal{T}_{nt}^\alpha \\ \mathcal{T}_{tn}^\alpha & \mathcal{T}_{tt}^\alpha \end{pmatrix} \boldsymbol{\zeta} \right) \\ &\quad - \left(\boldsymbol{\zeta} \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathcal{T}_{nt}^\alpha \\ \mathbf{0} & \mathcal{T}_{tt}^\alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_n^\alpha \\ \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_t^\alpha \end{pmatrix} \right) + \frac{1}{2} (\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_t^\alpha \cdot \mathcal{T}_{tt}^\alpha \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_t^\alpha). \end{aligned} \quad (4.46)$$

Dabei ist $\boldsymbol{\zeta} = (\boldsymbol{\sigma}_n, \boldsymbol{\varepsilon}_t)^\top$, wie es in der Gleichung (4.39) definiert ist, und $(\mathbf{0})_{ij} = 0$ ist eine 3×3
Nullmatrix. Entsprechend ergibt sich für das Gesamtpotential im Übergangsbereich

$$\begin{aligned} \Psi(\boldsymbol{\varphi}, \nabla \boldsymbol{\varphi}, \boldsymbol{\zeta}) &= \Psi^\alpha(\boldsymbol{\zeta}) h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}) + \Psi^\beta(\boldsymbol{\zeta})(1 - h^\alpha(\boldsymbol{\varphi})) \\ &= \frac{1}{2} (\boldsymbol{\zeta} \cdot \mathcal{T} \boldsymbol{\zeta}) \\ &\quad - \boldsymbol{\zeta} \cdot \left(\begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathcal{T}_{nt}^\alpha \\ \mathbf{0} & \mathcal{T}_{tt}^\alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_n^\alpha \\ \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_t^\alpha \end{pmatrix} h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}) - \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathcal{T}_{nt}^\beta \\ \mathbf{0} & \mathcal{T}_{tt}^\beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_n^\beta \\ \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_t^\beta \end{pmatrix} (1 - h^\alpha(\boldsymbol{\varphi})) \right) \\ &\quad + \frac{1}{2} \left((\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_t^\alpha \cdot \mathcal{T}_{tt}^\alpha \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_t^\alpha) h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}) + (\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_t^\beta \cdot \mathcal{T}_{tt}^\beta \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_t^\beta) (1 - h^\alpha(\boldsymbol{\varphi})) \right). \end{aligned} \quad (4.47)$$

4.3.5. Berechnung der Spannungen

Die Berechnungen in den vorhergehenden Abschnitten 4.3.2– 4.3.4 wurden in der Basis \mathbf{B} , die
durch die Normale \mathbf{n} und den entsprechenden tangentialen Vektoren \mathbf{t} und \mathbf{s} zum Interface definiert
ist, durchgeführt. Ausgehend von dem Gesamtpotential $\Psi(\boldsymbol{\varphi}, \nabla \boldsymbol{\varphi}, \boldsymbol{\zeta})$ wird in diesem Abschnitt die
Vorschrift zur Berechnung der Spannungen $\boldsymbol{\sigma}$ im kartesischen Koordinatensystem hergeleitet.

Unter Berücksichtigung der inelastischen Dehnungsanteile $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}$ ist das Gesamtpotential $\Psi(\boldsymbol{\varphi}, \nabla \boldsymbol{\varphi}, \boldsymbol{\zeta})$ mit der Gleichung (4.47) gegeben. Daraus lassen sich die die Dehnungen in Richtung der Normalen folgendermaßen berechnen

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\varepsilon}_n &= -\frac{\partial \Psi(\boldsymbol{\varphi}, \nabla \boldsymbol{\varphi}, \boldsymbol{\zeta})}{\partial \boldsymbol{\sigma}_n} \\ &= -\mathcal{T}_{nn} \boldsymbol{\sigma}_n - \mathcal{T}_{nt} \boldsymbol{\varepsilon}_t + \tilde{\boldsymbol{\chi}}_n,\end{aligned}$$

mit $\tilde{\boldsymbol{\chi}}_n$ als Eigendehnungsbeitrag in Normalrichtung

$$\tilde{\boldsymbol{\chi}}_n = \left(\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_n^\alpha + \mathcal{T}_{nt}^\alpha \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_t^\alpha \right) h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}) + \left(\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_n^\beta + \mathcal{T}_{nt}^\beta \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_t^\beta \right) (1 - h^\alpha(\boldsymbol{\varphi})).$$

Hieraus lassen sich die Normalkomponenten der Spannungen berechnen

$$\boldsymbol{\sigma}_n = -\mathcal{T}_{nn}^{-1} (\boldsymbol{\varepsilon}_n + \mathcal{T}_{nt} \boldsymbol{\varepsilon}_t - \tilde{\boldsymbol{\chi}}_n). \quad (4.48)$$

Entsprechend sind die tangentialen Anteile der Spannung durch die folgende Ableitung gegeben

$$\boldsymbol{\sigma}_t = \frac{\partial \Psi(\boldsymbol{\varphi}, \nabla \boldsymbol{\varphi}, \boldsymbol{\zeta})}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_t} = \mathcal{T}_{nt}^\top \boldsymbol{\sigma}_n + \mathcal{T}_{tt} \boldsymbol{\varepsilon}_t - \tilde{\boldsymbol{\chi}}_t,$$

mit $\tilde{\boldsymbol{\chi}}_t$ als tangentiale Anteile der inelastischen Dehnungen

$$\tilde{\boldsymbol{\chi}}_t = \mathcal{T}_{tt}^\alpha \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_t^\alpha h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}) + \mathcal{T}_{tt}^\beta \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_t^\beta (1 - h^\alpha(\boldsymbol{\varphi})).$$

Werden die Normalanteile der Spannung mithilfe der Gleichung (4.48) substituiert, folgt der tangentiale Anteil der Spannung

$$\boldsymbol{\sigma}_t = -\mathcal{T}_{nt}^\top \mathcal{T}_{nn}^{-1} (\boldsymbol{\varepsilon}_n + \mathcal{T}_{nt} \boldsymbol{\varepsilon}_t - \tilde{\boldsymbol{\chi}}_n) + \mathcal{T}_{tt} \boldsymbol{\varepsilon}_t - \tilde{\boldsymbol{\chi}}_t. \quad (4.49)$$

Fasst man die Gleichungen (4.48) und (4.49) zusammen, ergibt sich für die Spannungen in der Basis \mathbf{B}

$$\boldsymbol{\sigma}_B = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma}_n \\ \boldsymbol{\sigma}_t \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} -\mathcal{T}_{nn}^{-1} & -\mathcal{T}_{nn}^{-1} \mathcal{T}_{nt} \\ -\mathcal{T}_{tn} \mathcal{T}_{nn}^{-1} & \mathcal{T}_{tt} - \mathcal{T}_{tn} \mathcal{T}_{nn}^{-1} \mathcal{T}_{nt} \end{pmatrix}}_{\mathcal{K}_B(\boldsymbol{\varphi})} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\varepsilon}_n \\ \boldsymbol{\varepsilon}_t \end{pmatrix} + \underbrace{\begin{pmatrix} \mathcal{T}_{nn}^{-1} & \mathbf{0} \\ \mathcal{T}_{tn} \mathcal{T}_{nn}^{-1} & -\mathbf{I} \end{pmatrix}}_{\tilde{\boldsymbol{\sigma}}_B} \begin{pmatrix} \tilde{\boldsymbol{\chi}}_n \\ \tilde{\boldsymbol{\chi}}_t \end{pmatrix}. \quad (4.50)$$

$\mathcal{K}_B(\boldsymbol{\varphi})$ ist die effektive Steifigkeitsmatrix im Übergangsbereich und $\tilde{\boldsymbol{\sigma}}_B$ sind die Spannungsanteile, die aus den inelastischen Dehnungen resultieren. Unter Verwendung der Transformationsmatrizen, die im Anhang A.1 definiert sind, lassen sich die effektive Steifigkeitsmatrix und die effektiven Eigenspannungen in der Voigtschen Notation in das kartesische Koordinatensystem transformieren

$$\begin{aligned}\mathcal{K}(\boldsymbol{\varphi}) &= \mathbf{M}_\varepsilon^\top \mathcal{K}_B(\boldsymbol{\varphi}) \mathbf{M}_\varepsilon, \\ \tilde{\boldsymbol{\sigma}}^v(\boldsymbol{\varphi}) &= \mathbf{M}_\varepsilon^\top \tilde{\boldsymbol{\sigma}}_B(\boldsymbol{\varphi}).\end{aligned} \quad (4.51)$$

Damit resultiert das Hookesche Gesetz im kartesischen Koordinatensystem und der Voigtschen Darstellung zwischen den lokal überlappenden Phasen

$$\boldsymbol{\sigma}^v = \mathcal{K}(\boldsymbol{\varphi}) \boldsymbol{\varepsilon}^v + \tilde{\boldsymbol{\sigma}}^v(\boldsymbol{\varphi}).$$

Dabei ist $\boldsymbol{\varepsilon}^v$ die totale Dehnung in der Voigtschen Darstellung

$$\boldsymbol{\varepsilon}^v = (\varepsilon_{xx}, \varepsilon_{yy}, \varepsilon_{zz}, 2\varepsilon_{yz}, 2\varepsilon_{xz}, 2\varepsilon_{xy})^\top.$$

4.4. Validierung des Modells

In Abschnitt 4.1 wurden die Sonderfälle der seriellen und parallelen materiellen Kette eingeführt (siehe Abbildung 4.2). Anhand der beiden Sonderfälle wurde gezeigt, dass die VT-Approximation für den Sonderfall der parallelen materiellen Kette und die RS-Approximation für den Sonderfall der seriellen materiellen Kette zufriedenstellende Ergebnisse für die Berechnung der Spannungen, Dehnungen und folglich für die Formänderungsenergiedichte im Übergangsbereich liefern. Für allgemeine Zustände ergeben sich Abweichungen für beide Schemata, die gravierende Folgen für die Evolutionsgleichung der Ordnungsparameter haben, was in Abschnitt 4.2 gezeigt wurde. Daher wird in den folgenden Unterabschnitten zunächst das Verhalten des vorgestellten Modells für die beiden Sonderfälle untersucht. Anschließend werden die Untersuchungen auf eine zweidimensionale Platte mit einem Einschluss erweitert und anhand dieses Beispiels nachgewiesen, dass das vorgestellte Modell die Bilanz der Konfigurationskräfte (2.58) exakt wiedergibt.

4.4.1. Serielle und parallele materielle Kette

Das Simulationssetup für die serielle und parallele materielle Kette wurde in Abschnitt 4.1 vorgestellt und in Abbildung 4.2 visualisiert. Bei dem eindimensionalen Sonderfall der seriellen materiellen Kette sind nur die nn -Komponenten der Spannungen und Dehnungen ungleich null. Entsprechend reduziert sich die Vorschrift für die Spannungsberechnung (4.50) des vorgestellten Modells zu

$$\begin{aligned}\sigma_{nn} &= -\mathcal{T}_{nnnn}^{-1} \left(\varepsilon_{nn} - \left(\tilde{\varepsilon}_{nn}^{\alpha} h^{\alpha}(\boldsymbol{\varphi}) + \tilde{\varepsilon}_{nn}^{\beta} h^{\beta}(\boldsymbol{\varphi}) \right) \right) \\ &= \left[\sum_{\alpha=1}^2 \mathcal{S}_{nn}^{\alpha} h^{\alpha}(\boldsymbol{\varphi}) \right]_{nn}^{-1} \left(\varepsilon_{nn} - \left(\tilde{\varepsilon}_{nn}^{\alpha} h^{\alpha}(\boldsymbol{\varphi}) + \tilde{\varepsilon}_{nn}^{\beta} h^{\beta}(\boldsymbol{\varphi}) \right) \right).\end{aligned}$$

Es ergibt sich eine harmonische Interpolation der Steifigkeitskomponenten \mathcal{S}_{nn} und eine lineare Interpolation der nicht elastischen Dehnungsanteile $\tilde{\varepsilon}_{nn}$. Für isotrope Materialien ist dies äquivalent zu der Berechnungsvorschrift der Spannungen entsprechend der RS-Approximation (siehe Gl. (4.2)). Entsprechend reduziert sich das Potential $\Psi(\boldsymbol{\varphi}, \nabla \boldsymbol{\varphi}, \boldsymbol{\zeta})$ (siehe Gl.(4.47)) in diesem eindimensionalen Fall zu

$$\begin{aligned}\Psi(\boldsymbol{\varphi}, \nabla \boldsymbol{\varphi}, \boldsymbol{\zeta}) &= \frac{1}{2} \left(\sigma_{nn} \mathcal{T}_{nnnn}^{-1} \sigma_{nn} \right) - \sigma_{nn} \left(\tilde{\varepsilon}_{nn}^{\alpha} h^{\alpha}(\boldsymbol{\varphi}) + \tilde{\varepsilon}_{nn}^{\beta} h^{\beta}(\boldsymbol{\varphi}) \right) \\ &= -\frac{1}{2} \sigma_{nn} \left[\sum_{\alpha=1}^2 \mathcal{S}_{nn}^{\alpha} h^{\alpha}(\boldsymbol{\varphi}) \right]_{nn}^{-1} \sigma_{nn} - \sigma_{nn} \left(\sum_{\alpha=1}^2 \tilde{\varepsilon}_{nn}^{\alpha} h^{\alpha}(\boldsymbol{\varphi}) \right).\end{aligned}\tag{4.52}$$

Bis auf das Vorzeichen ist das Potential äquivalent zu der Berechnungsvorschrift der Formänderungsenergiedichte entsprechend der RS-Approximation (siehe Gl. (4.14)). Das Vorzeichen ergibt sich aus der Wahl der Legendre-Transformation. Bei der Berechnung der Formänderungsenergiedichte der RS-Approximation wurde $W^{\text{RS}}(\boldsymbol{\sigma}) = (\partial W^{\text{VT}} / \partial \boldsymbol{\varepsilon}) \cdot \boldsymbol{\varepsilon} - W^{\text{VT}}$ gewählt (siehe Gl. (4.13)). Dies ermöglichte den Vergleich der Formänderungsenergiedichten zwischen der RS- und VT-Approximation in den Abbildungen 4.3 und 4.4. Um den Vergleich mit der Bilanz der Konfigurationskräfte (2.58) sicherzustellen, wurde bei dem vorgestellten Modell $\Psi = W^{\text{VT}} - (\partial W^{\text{VT}} / \partial \boldsymbol{\varepsilon}_n) \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_n$ verwendet. Beide Transformationen sind zulässig und erklären das abweichende Vorzeichen beim Vergleich der Potentiale (4.52) und (4.14). Damit ist gezeigt, dass für den eindimensionalen Sonderfall der seriellen materiellen Kette das vorgestellte Modell äquivalent zu der RS-Approximation ist.

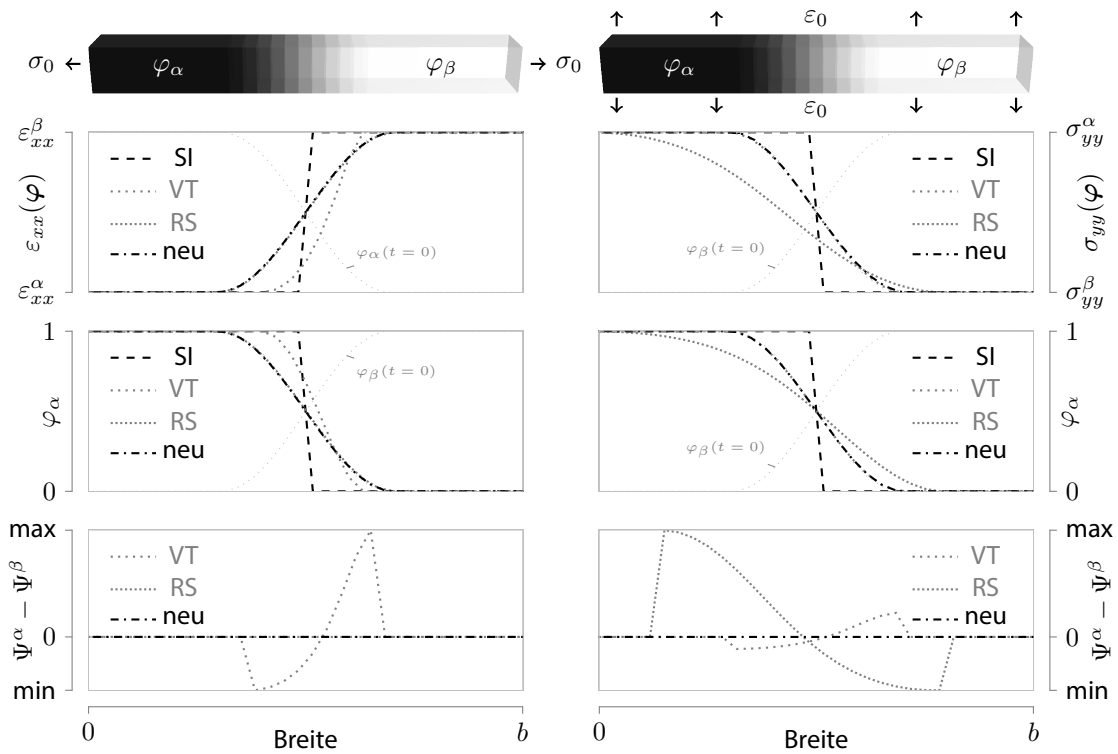


Abbildung 4.7.: Vergleich der Verläufe von ε_{xx} bzw. σ_{yy} , φ_α und $\Psi^\alpha - \Psi^\beta$ für die Gleichgewichtszustände der seriellen Kette (links) und parallelen materiellen Kette (rechts). Für die Gleichgewichtszustände gilt $W^\alpha = W^\beta = W^{SI}$ und $\sigma_{xx}^\alpha = \sigma_{xx}^\beta = \sigma_0$ bzw. $\varepsilon_{yy}^\alpha = \varepsilon_{yy}^\beta = \varepsilon_0$. Die Gleichgewichtsbedingungen sind durch die Gleichungen (4.15) bzw. (4.16) gegeben. Zum Vergleich wurden die entsprechenden Verläufe der VT- und RS-Approximation aus der Abbildung 4.5 gegenübergestellt.

Bei dem Sonderfall der parallelen materiellen Kette sind nur die tt -Komponenten der Spannungen und Dehnungen ungleich null. Entsprechend reduziert sich das Potential (4.47) zu

$$\begin{aligned} \Psi(\boldsymbol{\varphi}, \nabla \boldsymbol{\varphi}, \boldsymbol{\zeta}) &= \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^2 (\varepsilon_{tt}(\mathcal{T}_{tt}^\alpha)_{tt} \varepsilon_{tt} - 2\varepsilon_{tt}(\mathcal{T}_{tt}^\alpha)_{tt} \tilde{\varepsilon}_{tt}^\alpha + \tilde{\varepsilon}_{tt}^\alpha(\mathcal{T}_{tt}^\alpha)_{tt} \tilde{\varepsilon}_{tt}^\alpha) h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}) \quad (4.53) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^2 ((\varepsilon_{tt} - \tilde{\varepsilon}_{tt}^\alpha)(\mathcal{T}_{tt}^\alpha)_{tt} (\varepsilon_{tt} - \tilde{\varepsilon}_{tt}^\alpha)) h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}). \end{aligned}$$

Da \mathcal{T}_{tt}^α gleich \mathcal{C}_{tt}^α ist für isotrope Materialien, ist das Potential (4.53) äquivalent zu der Formänderungsenergiedichte nach der VT-Approximation (siehe Gl. (4.12)). Entsprechend ist auch die Berechnungsvorschrift der Spannungen äquivalent zu der VT-Approximation.

Unter der Annahme von isotropen Steifigkeiten der jeweiligen Phasen ist das vorgestellte Modell im Falle der seriellen materiellen Kette äquivalent zu der RS-Approximation und im Falle der parallelen materiellen Kette äquivalent zu der VT-Approximation. Dies ist auch an den resultierenden Spannungs- bzw. Dehnungsverläufen in Abbildung 4.7 zu erkennen. Für eine genauere Analyse der resultierenden Dehnungen bzw. Spannungen wird auf den Abschnitt 4.1 verwiesen.

In Abschnitt 4.2 wurden die Folgen der Abweichungen der VT- und RS-Approximation für die serielle und parallele materielle Kette untersucht. Es wurde gezeigt, dass eine Differenz der Potentiale

$W^\alpha - W^\beta$ im Gleichgewichtszustand zu einer Überschussenergie im Übergangsbereich führt (siehe Berechnungen (4.10) und (4.11)). Es konnte gezeigt werden, dass die Differenz der Potentiale $W^\alpha - W^\beta$ in Falle der seriellen materiellen Kette bei der RS-Approximation verschwindet und in Falle der parallelen materiellen Kette verschwindet die Potentialdifferenz bei der VT-Approximation. Bei Erstarrungsprozessen konnten Kim et al. [63], Plapp [64] und Choudhury und Nestler [9] zeigen, dass die Verwendung von Potentialen für die Evolutionsgleichung der Ordnungsparameter, die nur aus kontinuierlichen Variablen bestehen, die Bildung von Überschussenergie vermeidet. Beim vorgestellten Modell werden nur kontinuierliche Variablen zur Formulierung der jeweiligen Potentiale verwendet. Entsprechend verschwindet die Potentialdifferenz $\Psi^\alpha - \Psi^\beta$ sowohl bei der seriellen als auch bei der parallelen Materialkette, was in Abbildung 4.7 zu erkennen ist. Da sich keine Überschussenergie im Übergangsbereich bildet behält das Gleichgewichtsprofil der Ordnungsparameter seine ursprüngliche Form.

4.4.2. Validierung der Spannungsberechnung in einem zweidimensionalen System

Die Simulationen aus Abschnitt 4.4.1 zeigen, dass das vorgestellte Modell in eindimensionalen Systemen, in denen nur normale oder tangential Anteile der Spannungen oder Dehnungen eine Rolle spielen, die theoretischen Vorhersagen exakt wiedergibt. Ähnliche Ergebnisse wurden bereits mit dem Modell von Durga et al. [10] erzielt. Allerdings werden dort die Scheranteile der Spannungen und Dehnungen komplett vernachlässigt. Daher ist das Modell von Durga et al. [10] nicht auf allgemeine Systeme anwendbar. Bei dem vorgestellten Modell werden alle Komponenten der Dehnungen bei der Berechnung der Spannungen (4.50) verwendet und bei der Berechnung des Potentials (4.47) werden alle Komponenten der Spannungen bzw. der Dehnungen verwendet. Des Weiteren werden bei dem vorgestellten Modell die inelastischen Dehnungsanteile berücksichtigt. Zur Validierung des Modells in realistischen Systemen, werden die resultierenden Spannungen und Dehnungen einer Platte mit einem kreisförmigen Einschluss unter hydrostatischer Zugbelastung mit theoretischen Vorhersagen verglichen.

Das verwendete Simulationssetup ist in Abbildung (4.8) links oben dargestellt. Ein zweidimensionales Gebiet der Größe 1300×1300 Zellen im ebenen Dehnungszustand mit einem kreisförmigen Einschluss in der Mitte des Gebietes wird von allen Seiten mit konstanter Spannung σ_0 belastet. Entsprechende theoretische Berechnungen unter Annahme von scharfen Grenzflächen sind in Mai und Singh [65] zu finden. Für die Matrix wurde ein isotroper Steifigkeitstensor mit einem \mathcal{E} -Modul von $\mathcal{E}_m = 210$ GPa und einer Querkontraktion von $\nu_m = 0.3$ gewählt. Der kreisförmige Einschluss hat einen Radius von $r = 100$ Zellen und eine ebenfalls isotrope Steifigkeit von $\mathcal{C}^i = 0.1\mathcal{C}^m$. Der Übergangsbereich ist $l \approx 2.5\epsilon \approx 12$ Zellen breit, wie es in der Gleichung (3.22) berechnet wurde. Das Gebiet wird von allen Seiten mit $\sigma_0 = 100$ MPa belastet. Die zugrundeliegende zylindrische Symmetrie ermöglicht die Aufspaltung der Spannungen und Dehnungen in Normal- und Tangentialanteile. Unter Verwendung von Zylinderkoordinaten folgt für die Normalanteile $\sigma_{nn} = \sigma_{rr}$ und $\epsilon_{nn} = \epsilon_{rr}$. Entsprechend ergibt sich für die Tangentialanteile $\sigma_{tt} = \sigma_{\theta\theta}$ und $\epsilon_{tt} = \epsilon_{\theta\theta}$. Für die Validierung des vorgestellten Modells sind die Spannungs- und Dehnungsverläufe in der Übergangsregion zwischen der Matrix und dem Einschluss von Interesse. Daher wurden die entsprechenden Verläufe der Felder entlang der im Simulationssetup hervorgehobenen Linie gezeichnet. Zum Vergleich sind die Verläufe der theoretischen Felder nach Mai und Singh [65] und die Verläufe der resultierenden Felder der VT- und RS-Approximation gegenübergestellt.

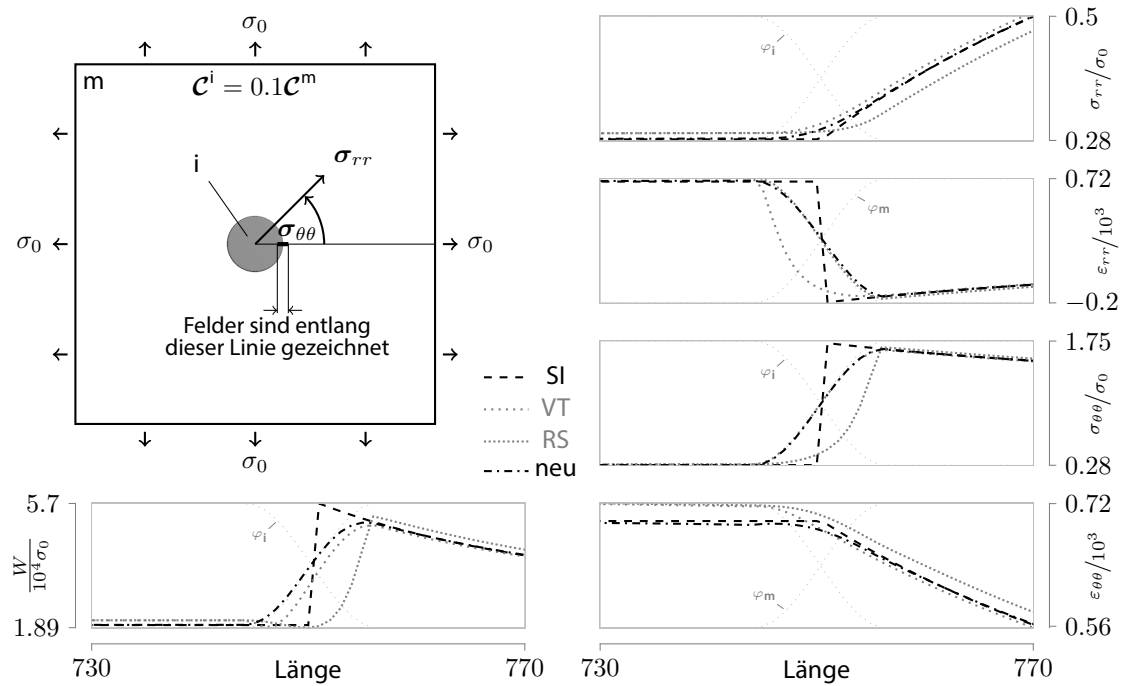


Abbildung 4.8.: Spannungs- und Dehnungsverläufe berechnet mit dem vorgestellten Modell und den VT- und RS-Approximationen für eine Platte mit einem runden Einschluss ($\mathcal{E}^i = 0.1\mathcal{E}^m$) unter hydrostatischer Zugbelastung. Zum Vergleich sind die theoretischen Vorhersagen von Mai und Singh [65] gegenübergestellt. Die Felder sind im Bereich der fett hervorgehobenen Linie im Simulationssetup gezeichnet, das auf der linken Seite dargestellt ist.

Wie schon in den eindimensionalen Systemen, die in Abschnitt 4.4.1 untersucht wurden, ergeben sich Abweichungen in den nicht kontinuierlichen Variablen σ_{tt} und ε_{rr} , wenn man die VT- oder entsprechend die RS-Approximationen verwendet. In diesen zweidimensionalen Simulationen ergeben sich des Weiteren Abweichungen bei σ_{nn} , ε_{tt} und entsprechend in dem Verlauf der Formänderungsenergie W im Vergleich zu den theoretischen Werten im Inneren des Einschlusses, wenn man die beiden Approximationen verwendet. Die Abweichungen sind abhängig von der Krümmung $\kappa = 1/r_1$ und der Breite $l = 2.5\varepsilon$ des Übergangsbereiches. Für die zugrundeliegenden Parameter mit $\kappa l \approx 0.12$ ergibt sich eine Abweichungen von 7.3 % für die VT-Approximation und eine Abweichung von 7.4 % für die RS-Approximation. Für größere Werte von $\kappa l \approx 0.8$ steigt die Abweichung auf bis zu 29 % für die VT- und auf bis zu 27 % für die RS-Approximation.

Im Vergleich zu den Ergebnissen der VT- bzw. der RS-Approximation passen die Profile der resultierende Spannungs-, Dehnungs- und Felder der Formänderungsenergie sowohl für die kontinuierlichen als auch für die diskontinuierlichen Variablen sehr gut zu den theoretischen Vorgaben. Die Abweichungen der Felder im Inneren des Einschlusses sind vernachlässigbar klein. Für $\kappa l \approx 0.12$ ergibt sich lediglich eine Abweichung von $\approx 0.2\%$. Und für $\kappa l \approx 0.8$, was ein Extremwert für die Beschreibung gekrümmter Übergangsbereiche ist, ist die Abweichung $\approx 6\%$ groß.

Wie schon am Anfang dieses Kapitels erwähnt, haben Durga et al. [10] ebenfalls ein Modell präsentiert, das sehr gute Ergebnisse in den eindimensionalen Systemen liefert. In diesem Modell

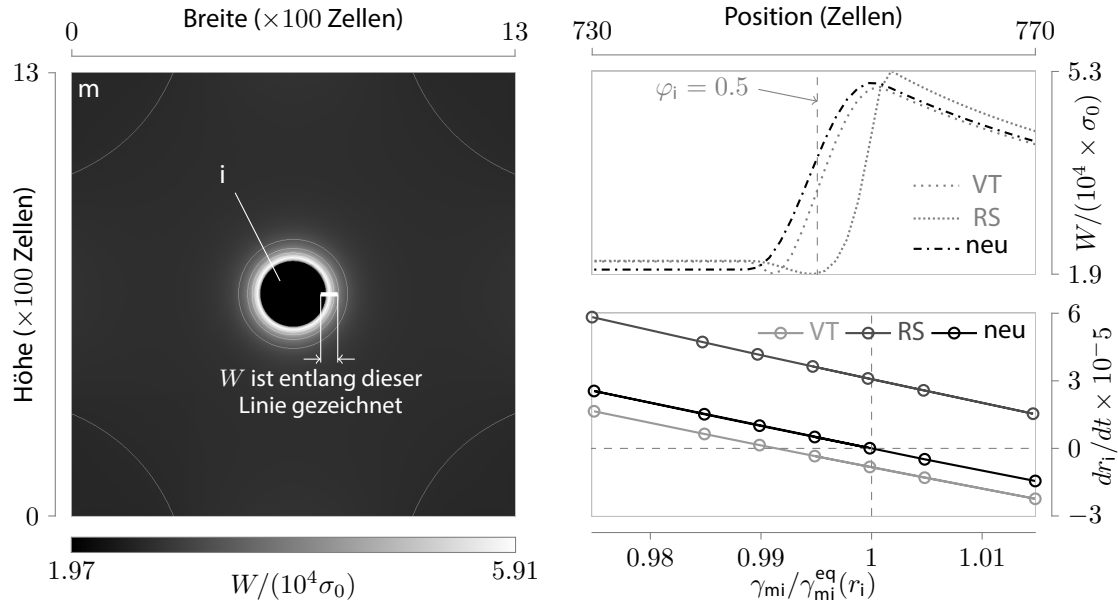


Abbildung 4.9.: Validierung des vorgeschlagenen Modells über den Gibbs-Thomson-Effekt. Die resultierende Formänderungsenergie-dichte ist links in Falschfarben dargestellt. Die Profile der Formänderungsenergie-dichte auf der rechten Seite gehören zu dem Fall $\gamma_{mi}/\gamma_{mi}^{eq}(r_i) = 1$ und sind entlang der grün hervorgehobenen Linie aufgetragen. Die Geschwindigkeit des Wachstums und des Schrumpfens des Einschlusses zu den unterschiedlichen Grenzflächenenergien γ_{si} ist rechts unten dargestellt.

werden zunächst die Lösungen der VT- und RS-Approximation berechnet und anschließend die resultierenden Spannungen und Dehnungen bei der Berechnung der Formänderungsenergie-dichte folgendermaßen kombiniert

$$W^{Durga} = \frac{1}{2} \left(\sigma_{nn}^{RS} \frac{S_{nnnn} \sigma_{nn}^{RS} + S_{nntt} C_{tttt} \varepsilon_{tt}^{VT}}{1 - S_{nntt} C_{nntt}} + \frac{C_{tttt} \varepsilon_{tt}^{VT} + C_{nntt} S_{nnnn} \sigma_{nn}^{RS}}{1 - S_{nntt} C_{nntt}} \varepsilon_{tt}^{VT} \right).$$

Diese Vorgehensweise liefert ein besseres Ergebnis in dem Profil der Formänderungsenergie-dichte im Übergangsbereich, allerdings sind die Abweichungen im Inneren des Einschlusses immer noch sehr hoch. Für $\kappa l \approx 0.12$ ergibt sich eine Abweichung von $\approx 4\%$ im Vergleich zu den theoretischen Werten.

4.4.3. Validierung der treibenden Kraft über den Gibbs-Thomson-Effekt

In einem zweidimensionalen Fall kann ein Gleichgewichtszustand über den Gibbs-Thomson-Effekt beschrieben werden. Für einen kreisförmigen Einschluss mit einem Radius r_i , der in eine Matrixphase eingebettet ist, ist der Gleichgewichtszustand erreicht, wenn die beteiligten Konfigurationskräfte im Gleichgewicht sind. Nach [27, 28, 31] wird dies durch die folgende lokale Bedingung erreicht

$$\omega^m - \omega^i - \mathbf{n}^s (\boldsymbol{\varepsilon}^m - \boldsymbol{\varepsilon}^i) \boldsymbol{\sigma}^i \mathbf{n}^s = 2\kappa \Gamma_{mi}, \tag{4.54}$$

mit ω^m, ω^i als die Großkanonischen Potentiale der Matrix und des Einschlusses. $\kappa = 1/r_i$ ist die mittlere Krümmung und Γ_{mi} die Großkanonische Grenzflächenenergie. $\boldsymbol{\varepsilon}^m - \boldsymbol{\varepsilon}^i = \llbracket \boldsymbol{\varepsilon} \rrbracket$ ist

der Dehnungssprung und σ^i ist die entsprechende Spannung. Werden nur mechanische Beträge berücksichtigt, reduziert sich der Sprung der Großkanonischen Potentiale $\omega^m - \omega^i = \llbracket \omega \rrbracket = \llbracket W \rrbracket$ auf den Sprung der Formänderungsenergiegedichten auf scharfen Grenzflächen. Daher vereinfacht sich die Gleichgewichtsbedingung (4.54) für einen zweidimensionalen Fall und bei rein mechanischen Konfigurationskräften zu folgender Form

$$\llbracket W \rrbracket - \llbracket \varepsilon_n \rrbracket \cdot \sigma_n = \kappa \gamma_{mi}, \quad (4.55)$$

mit γ_{mi} als Grenzflächenenergiegedichte zwischen der Matrix und dem Einschluss. ε_n und σ_n sind die Normalkomponenten der Dehnung und der Spannung entsprechend der Notation, die in Abschnitt 4.3.1 eingeführt wurde. Die linke Seite der Gleichung (4.55) ist äquivalent zu der Konfigurationskraft des vorgestellten Modells (4.38). Dies wurde in Abschnitt 4.3.2 gezeigt.

Das gewählte Simulationssetup ist äquivalent zu dem Simulationssetup, das in Abschnitt 4.4.2 besprochen wurde und auf der linken Seite der Abbildung 4.8 zu erkennen ist. Ein zweidimensionales Gebiet mit einem Einschluss in der Mitte des Gebiets wird hydrostatisch belastet. Unter Verwendung der theoretisch berechneten Spannungs- und Dehnungsfelder von Mai und Singh [65] und Polarkoordinaten folgt für den Gleichgewichtszustand

$$\gamma_{mi}^{\text{eq}}(r_i) = \frac{r_i}{2} \left(\llbracket \sigma_{\theta\theta}^{\text{th}}(r_i) \rrbracket \varepsilon_{\theta\theta}^{\text{th}}(r_i) - \sigma_{rr}^{\text{th}}(r_i) \llbracket \varepsilon_{rr}^{\text{th}}(r_i) \rrbracket \right).$$

$\gamma_{mi}^{\text{eq}}(r_i)$ ist die Grenzflächenenergie, bei der sich der Gleichgewicht einstellen muss. $\varepsilon_{\theta\theta}^{\text{th}}(r_i)$ und $\sigma_{\theta\theta}^{\text{th}}(r_i)$ sind die theoretisch vorhergesagten Werte am scharfen Übergang zwischen der Matrix und dem Einschluss. Die theoretischen Vorhersagen von Mai und Singh [65] benötigen eine im Unendlichen angelegte Spannung σ_∞ . Für die Anpassung dieser Spannung an die angelegte Spannung σ_0 wurde sichergestellt, dass die äußere Verformungsenergie der Simulation mit den theoretischen Werten in einem entsprechenden Abstand übereinstimmen. Mit einer Wahl von $\sigma_\infty = 1.009712\sigma_0 = 1.009712 \times 100 \text{ MPa}$, ist diese Bedingung erfüllt.

Die Abbildung 4.9 zeigt die resultierende Formänderungsenergiegedichte nahe am Gleichgewicht auf der linken Seite. Die Geschwindigkeit des Wachstums des Einschlusses ist auf der rechten Seite für unterschiedlich gewählte γ_{mi} abgebildet. Es ist deutlich zu erkennen, dass mit dem vorgestellten Modell die Wachstumsgeschwindigkeit des Einschlusses bei gewähltem $\gamma_{mi} = \gamma_{mi}^{\text{eq}}(r_i)$ verschwindend klein ist. Damit ist gezeigt, dass das vorgestellte diffuse Grenzflächenmodell die theoretischen Vorhersagen scharfer Grenzflächen sehr gut abbildet.

4.5. Erweiterung des Modells auf Anwendungen in polykristallinen Systemen

In den Abschnitten 4.3 und 4.4 wurde ein binäres Phasenfeldmodell vorgestellt, das beide Sprungbedingungen, sowohl die Hadamardsche Bedingung (2.33) als auch das Kräftegleichgewicht (2.24), erfüllt. Außerdem wurde in diesen Abschnitten gezeigt, dass dieses Modell die Bilanz der Konfigurationskräfte (2.58) exakt wiedergibt. Damit sind die Voraussetzungen geschaffen, um den Einfluss der mechanischen Konfigurationskräfte auf Phasenumwandlungs- und Kornwachstumsprozesse auf der Basis des eingeführten Modells zu untersuchen. Die notwendige Erweiterung des Modells auf Anwendungen in polykristallinen Systemen wird im Folgendem vorgestellt.

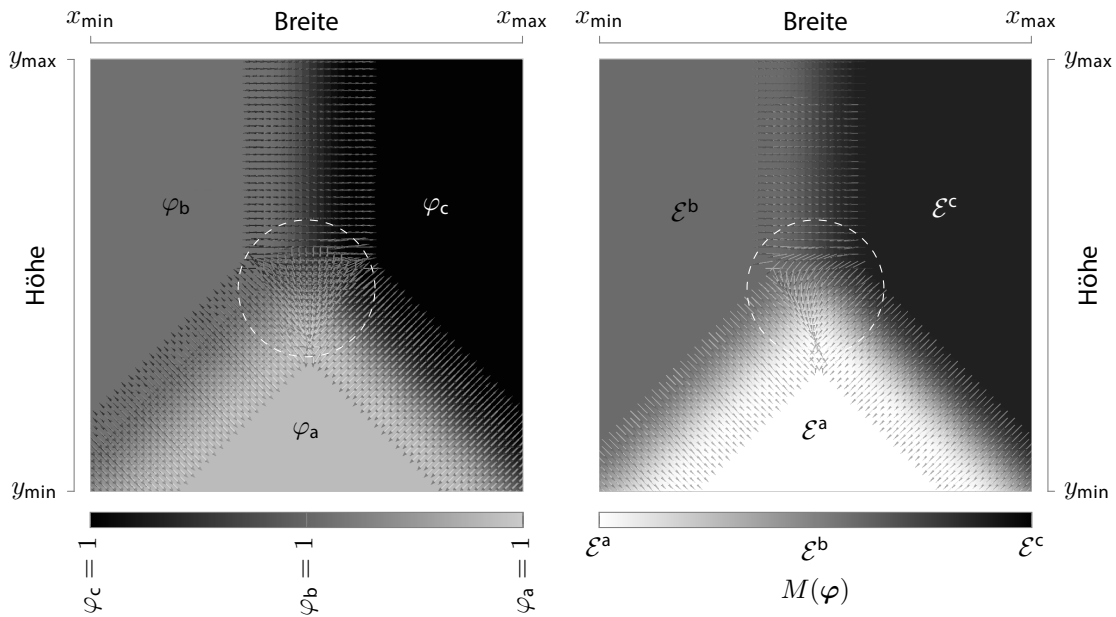


Abbildung 4.10.: In einem Gebiet mit drei Phasen φ_a , φ_b und φ_c sind die Normalen $\mathbf{n}_i = \nabla \varphi_i / |\nabla \varphi_i|$ der jeweiligen Phasen links dargestellt. In dem hervorgehobenen Bereich koexistieren die drei Phasen. Daher ist keine eindeutige Normale definierbar. Rechts sind $M(\varphi)$ (siehe Gl. (4.56)) und die Normalen \mathbf{n} (siehe Gl. (4.57)) dargestellt. Dabei wurden $\varepsilon^b = 0.5\varepsilon^a$ und $\varepsilon^c = 0.25\varepsilon^a$ gewählt. In jedem Punkt ist \mathbf{n} eindeutig bestimmbar.

4.5.1. Bestimmung des effektiven Normalenvektors

Sowohl für die Anwendung der Sprungbedingungen (siehe Gl. (2.24) und (2.33)) als auch für die Berechnung der Konfigurationskräfte (2.58) ist die Kenntnis des Normalenvektors im Übergangsbereich notwendig. Bis auf die Singularitäten, wie z. B. dem Quadrupelpunkt oder der Tripellinie bzw. Tripelpunkt im Zweidimensionalen, ist der Normalenvektor bei einer Parametrisierung des Gebietes mit scharfen Grenzflächen eindeutig bestimmbar. Ist der Übergangsbereich diffus, so existiert ein volumetrischer Bereich bei dem mehrere Phasen koexistieren können (siehe Abschnitt 3.1). Mithilfe der Ordnungsparameter kann trotz dieser Koexistenz zu jeder Phase $\varphi_\alpha(\mathbf{x}, t)$ und zu jedem Punkt im Gebiet ein Normalenvektor $\mathbf{n}_\alpha = \nabla \varphi_\alpha / |\nabla \varphi_\alpha|$ zugeordnet werden. Koexistieren in einem Punkt im Gebiet nur zwei Phasen, so ist der Normalenvektor eindeutig bestimmbar, denn $\mathbf{n}_\alpha = -\mathbf{n}_\beta = -\nabla \varphi_\beta / |\nabla \varphi_\beta|$. Bei einer Koexistenz von mehr als zwei Phasen ist der Normalenvektor nicht mehr eindeutig bestimmbar, wie es auf der linken Seite der Abbildung 4.10 zu erkennen ist. In dem hervorgehobenen Bereich koexistieren drei Phasen. Daher gibt es in jedem Punkt des Bereiches drei unterschiedliche Normalen \mathbf{n}_i . Ein eindeutiger Normalenvektor kann alleine mit der Information der Morphologie nicht mehr eindeutig zugeordnet werden.

Sowohl bei den Sprungbedingungen (2.24) und (2.33) als auch bei der Maxwell-Relation (2.50), die zu der Bilanz der Konfigurationskräfte (2.58) führt, wird die singuläre Fläche durch den Sprung der Materialparameter \mathcal{C}^i charakterisiert. Für isotrope Materialien reicht der Sprung der Laméschen Konstanten $[[\lambda]]$, $[[\mu]]$ oder der Sprung des Youngschen Moduls $[[\mathcal{E}]]$ und der Querkontraktion $[[\nu]]$ für die eindeutige Definition der singulären Fläche. Daher kann eine oder mehrere dieser Größen

für die Bestimmung eines skalaren Feldes $M(\boldsymbol{\varphi})$ verwendet werden, dessen Gradient die singuläre Fläche charakterisiert. Unter Verwendung des Youngschen Moduls wird $M(\boldsymbol{\varphi})$ folgendermaßen definiert

$$M(\boldsymbol{\varphi}) = \sum_{\alpha} \mathcal{E}^{\alpha} \varphi_{\alpha}. \quad (4.56)$$

Mit dieser skalaren Feldgröße kann ein eindeutiger Normalenvektor berechnet werden

$$\mathbf{n}(M(\boldsymbol{\varphi})) = \frac{\nabla M(\boldsymbol{\varphi})}{|\nabla M(\boldsymbol{\varphi})|}. \quad (4.57)$$

Damit ist auch für ein System mit beliebig vielen Phasen ein eindeutiger Normalenvektor in jedem Punkt bestimmbar. Wenn nur zwei Phasen in einem Bereich koexistieren, reduziert sich $\mathbf{n}(M(\boldsymbol{\varphi}))$ zu der Formulierung im binären Modell (gegeben durch Gl. (4.20))

$$\mathbf{n}(M(\boldsymbol{\varphi})) = \frac{\nabla(\mathcal{E}^{\alpha} \varphi_{\alpha} + \mathcal{E}^{\beta} \varphi_{\beta})}{|\nabla(\mathcal{E}^{\alpha} \varphi_{\alpha} + \mathcal{E}^{\beta} \varphi_{\beta})|} = \frac{\mathcal{E}^{\alpha} \nabla \varphi_{\alpha} - \mathcal{E}^{\beta} \nabla \varphi_{\alpha}}{|\mathcal{E}^{\alpha} \nabla \varphi_{\alpha} - \mathcal{E}^{\beta} \nabla \varphi_{\alpha}|} = \frac{[[\mathcal{E}]] \nabla \varphi_{\alpha}}{|[[\mathcal{E}]] \nabla \varphi_{\alpha}|} = \frac{\nabla \varphi_{\alpha}}{|\nabla \varphi_{\alpha}|}. \quad (4.58)$$

Auf der rechten Seite der Abbildung 4.10 sind $M(\boldsymbol{\varphi})$ und die Normalenvektoren für das betrachtete Dreiphasengebiet dargestellt. Im Vergleich der beiden Methoden ist zu erkennen, dass sich die Richtungen der Normalen in den Zweiphasenbereichen nicht unterscheiden, wie durch die Gleichung (4.58) gezeigt wurde. Wenn drei Phasen in einem Bereich koexistieren, sind über die Gleichung (4.57) deutliche Vorteile der Normalenberechnung zu erkennen. Denn $\mathbf{n}(M(\boldsymbol{\varphi}))$ ist stets eindeutig und kann somit in Multiphasensystemen verwendet werden. Allerdings wird die Normale in der Dreiphasenregion gewichtet berechnet. \mathcal{E}^{α} ist der größte Youngsche Modul, entsprechend wird die Richtung $\nabla \varphi_{\alpha}$ bevorzugt. Verschwindet der Sprung der Materialparameter zwischen zwei Phasen, dann verschwindet auch die Normale $\mathbf{n}(M(\boldsymbol{\varphi})) = \mathbf{0}$. Somit existiert für diesen Fall auch keine singuläre Fläche. Dies ist ein weiterer Vorteil dieser Methode und kann verwendet werden, um die komplexe Berechnung von Spannungen in solchen Übergangsbereichen auf das Hookesche Gesetz (2.55) zu reduzieren.

Im Allgemeinen wird die singuläre Fläche durch den Sprung des gesamten Steifigkeitstensors $[[\mathbf{C}]]$ und die Sprünge der nicht elastischen Dehnungsanteile $[[\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}]]$ charakterisiert. Daher kann im Allgemeinen die folgende Form für die Berechnung des skalaren Feldes $M(\boldsymbol{\varphi})$ verwendet werden

$$M(\boldsymbol{\varphi}) = \sum_{\alpha, \beta > \alpha} \left(\frac{\sum_{i, j > i} (C_{ij}^{\alpha} - C_{ij}^{\beta})}{\sum_{\alpha, \beta > \alpha} \sum_{i, j > i} (C_{ij}^{\alpha} - C_{ij}^{\beta})} + \frac{\sum_k (\tilde{\varepsilon}_k^{\alpha} - \tilde{\varepsilon}_k^{\beta})}{\sum_{\alpha, \beta > \alpha} \sum_k (\tilde{\varepsilon}_k^{\alpha} - \tilde{\varepsilon}_k^{\beta})} \right) \varphi_{\alpha} \varphi_{\beta}.$$

Nur wenn die Sprünge aller Komponenten des Steifigkeitstensors $[[C_{ij}]]$ und aller Komponenten der nicht elastischen Dehnungen $[[\tilde{\varepsilon}_k]]$ verschwinden, verschwindet auch die Normale $\mathbf{n}(M(\boldsymbol{\varphi})) = \mathbf{0}$ und damit die singuläre Fläche.

4.5.2. Bestimmung des Potentials und der Spannungen in polykristallinen Systemen

In Abschnitt 4.3.2 wurden die mechanischen Konfigurationskräfte im Phasenfeldkontext für Zweiphasensysteme abgeleitet. Dabei wurden die Variablen mithilfe der Normalen \mathbf{n} zunächst in kontinuierliche $\boldsymbol{\sigma}_n$ bzw. $\boldsymbol{\varepsilon}_t$ und diskontinuierliche $\boldsymbol{\sigma}_t^{\alpha}$ bzw. $\boldsymbol{\varepsilon}_n^{\alpha}$ Anteile aufgespalten. Für polykristalline

Systeme ist eine eindeutige Normale mit der Definition (4.57) gegeben. Mit der Notation, die in Abschnitt 4.3.1 eingeführt wurde, folgt entsprechend den Gleichungen (4.31) und (4.46) für das Potential der jeweiligen Phasen

$$\begin{aligned}\Psi^\alpha(\zeta) &= W^\alpha(\boldsymbol{\varepsilon}_n^\alpha(\boldsymbol{\sigma}_n, \boldsymbol{\varepsilon}_t), \boldsymbol{\varepsilon}_t) - \frac{\partial W^\alpha(\boldsymbol{\varepsilon}_n^\alpha(\boldsymbol{\sigma}_n, \boldsymbol{\varepsilon}_t), \boldsymbol{\varepsilon}_t)}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_n^\alpha} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_n^\alpha(\boldsymbol{\sigma}_n, \boldsymbol{\varepsilon}_t) \\ &= \frac{1}{2}(\zeta \cdot \mathcal{T}^\alpha \zeta) - \left(\zeta \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathcal{T}_{nt}^\alpha \\ \mathbf{O} & \mathcal{T}_{tt}^\alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_n^\alpha \\ \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_t^\alpha \end{pmatrix} \right) + \frac{1}{2}(\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_t^\alpha \cdot \mathcal{T}_{tt}^\alpha \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_t^\alpha),\end{aligned}\quad (4.59)$$

dabei ist $W^\alpha(\boldsymbol{\varepsilon}_n^\alpha, \boldsymbol{\varepsilon}_t)$ die Formänderungsenergiegedichte der VT-Approximation, $\zeta = (\boldsymbol{\sigma}_n, \boldsymbol{\varepsilon}_t)^\top$ fasst die kontinuierlichen Variablen zusammen und \mathcal{T}^α ist eine Proportionalitätsmatrix mit ihren Anteilen \mathcal{T}_{ij}^α zwischen den kontinuierlichen und diskontinuierlichen Variablen (siehe Gleichungen (4.12), (4.39) und (4.41)). Das Gesamtpotential, das mit der jeweiligen Interpolationsfunktion gewichtet ist, ist die Summe der phasenabhängigen Beiträge $\Psi^\alpha(\zeta)$

$$\begin{aligned}\Psi(\boldsymbol{\varphi}, \nabla \boldsymbol{\varphi}, \zeta) &= \sum_\alpha \Psi^\alpha(\zeta) h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}) \\ &= \frac{1}{2}(\zeta \cdot \mathcal{T} \zeta) - \sum_\alpha \left(\zeta \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathcal{T}_{nt}^\alpha \\ \mathbf{O} & \mathcal{T}_{tt}^\alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_n^\alpha \\ \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_t^\alpha \end{pmatrix} + \frac{1}{2}(\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_t^\alpha \cdot \mathcal{T}_{tt}^\alpha \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_t^\alpha) \right) h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}).\end{aligned}\quad (4.60)$$

Ähnlich wie im Zweiphasenfall (siehe Gl. (4.43)) sind die Beiträge der lokal gemittelten, zwischen den Phasen interpolierten Proportionalitätsmatrix $\mathcal{T}(\boldsymbol{n})$ folgendermaßen definiert

$$\begin{aligned}\mathcal{T}_{nn} &= \sum_\alpha \mathcal{T}_{nn}^\alpha h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}) = - \sum_\alpha \mathcal{S}_{nn}^\alpha h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}) \\ \mathcal{T}_{nt} &= \sum_\alpha \mathcal{T}_{nt}^\alpha h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}) = \sum_\alpha \mathcal{S}_{nn}^\alpha \mathcal{C}_{nt}^\alpha h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}) \\ \mathcal{T}_{tt} &= \sum_\alpha \mathcal{T}_{tt}^\alpha h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}) = \sum_\alpha (\mathcal{C}_{tt}^\alpha - \mathcal{C}_{tn}^\alpha \mathcal{S}_{nn}^\alpha \mathcal{C}_{nt}^\alpha) h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}).\end{aligned}$$

Äquivalent zu Abschnitt 4.3.5 lässt sich aus diesem Potential die Berechnungsvorschrift für die Spannungen ableiten. Damit ergibt sich für die Spannung in einem polykristallinen System

$$\boldsymbol{\sigma}_B = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma}_n \\ \boldsymbol{\sigma}_t \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} -\mathcal{T}_{nn}^{-1} & -\mathcal{T}_{nn}^{-1} \mathcal{T}_{nt} \\ -\mathcal{T}_{tn} \mathcal{T}_{nn}^{-1} & \mathcal{T}_{tt} - \mathcal{T}_{tn} \mathcal{T}_{nn}^{-1} \mathcal{T}_{nt} \end{pmatrix}}_{\mathcal{K}_B(\boldsymbol{\varphi})} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\varepsilon}_n \\ \boldsymbol{\varepsilon}_t \end{pmatrix} + \underbrace{\begin{pmatrix} \mathcal{T}_{nn}^{-1} & \mathbf{O} \\ \mathcal{T}_{tn} \mathcal{T}_{nn}^{-1} & -\mathbf{I} \end{pmatrix}}_{\tilde{\boldsymbol{\sigma}}_B} \begin{pmatrix} \tilde{\boldsymbol{\chi}}_n \\ \tilde{\boldsymbol{\chi}}_t \end{pmatrix}.$$

Mit $\tilde{\boldsymbol{\chi}}_n$ und $\tilde{\boldsymbol{\chi}}_t$ als normale und tangente Anteile der inelastischen Dehnungen, die folgendermaßen definiert sind

$$\begin{aligned}\tilde{\boldsymbol{\chi}}_n &= \sum_\alpha (\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_n^\alpha + \mathcal{T}_{nt}^\alpha \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_t^\alpha) h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}), \\ \tilde{\boldsymbol{\chi}}_t &= \sum_\alpha \mathcal{T}_{tt}^\alpha \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_t^\alpha h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}).\end{aligned}$$

Mit den Transformationen $\mathcal{K}(\boldsymbol{\varphi}) = \mathbf{M}_\varepsilon^\top \mathcal{K}_B(\boldsymbol{\varphi}) \mathbf{M}_\varepsilon$ und $\tilde{\boldsymbol{\sigma}}^\vee(\boldsymbol{\varphi}) = \mathbf{M}_\sigma^\top \tilde{\boldsymbol{\sigma}}_B(\boldsymbol{\varphi})$ (siehe Gl. (4.51)) folgt schließlich für die Spannungen in der Voigtschen Darstellung und im kartesischen Koordinatensystem

$$\boldsymbol{\sigma}^\vee = \mathcal{K}(\boldsymbol{\varphi}) \boldsymbol{\varepsilon}^\vee + \tilde{\boldsymbol{\sigma}}^\vee(\boldsymbol{\varphi}). \quad (4.61)$$

4.6. Validierung des Modells in einem Mehrphasengebiet

Sowohl die Spannungsberechnung (4.61) als auch die Berechnung des Potentials (4.60) reduzieren sich in Zweiphasenbereichen auf die Berechnungsvorschriften des binären Modells. In Abschnitt 4.4 wurde das Modell in Zweiphasensystemen ausgiebig getestet. Daher wird in diesem Abschnitt nur auf die Validierung des Modells in Bereiche eingegangen, bei denen mehr als zwei Phasen koexistieren.

Bei einer Gebietsparametrisierung mit scharfen Übergängen zwischen den Ordnungsparametern, wie es für die Berechnung der freien Energie in der Gleichung (3.2) getan wurde, ist keine Homogenisierung der Materialparameter notwendig und die Berechnungsvorschrift für die Spannungen reduziert sich auf das Hookesche Gesetz (2.55). Wird zusätzlich eine kubisch symmetrische Gebietsaufteilung gewählt, wie links oben in Abbildung 4.11 dargestellt ist, können keine Artefakte durch die Finite-Differenzen-Diskretisierung entstehen und die scharfe Grenzflächenlösung kann für die Validierung verwendet werden. An allen Seiten des zweidimensionalen Gebietes wurde die makroskopische Spannungsrandbedingung, die eine mittlere Spannung $\bar{\sigma} = (\int \sigma(\mathbf{x})dV)/V$ garantiert, angewendet. Die resultierende von Mises-Spannung σ_{mises} der scharfen und diffusen Grenzflächenlösung ist im unteren Bereich der Abbildung 4.11 zu erkennen. Ein Vergleich der beiden Lösungen zeigt eine qualitative Übereinstimmung der von Mises-Spannung σ_{mises} .

Für eine detaillierte Validierung der Spannungen am Quadrupelpunkt sind die Profile der von Mises-Spannung entlang der Diagonalen, die durch die Normalen $\mathbf{n}_1 = (1, 1, 0)^T/\sqrt{2}$ und $\mathbf{n}_2 = (1, -1, 0)^T/\sqrt{2}$ charakterisiert sind, oben rechts in Abbildung 4.11 dargestellt. Im Vergleich zu der SI-Lösung werden die Spannungsspitzen am Quadrupelpunkt mit dem vorgestellten Modell nicht reproduziert. Die Interpolation der Materialparameter garantiert jedoch, dass die Spannungen außerhalb des Übergangsbereiches exakt übereinstimmen. Daher kann man davon ausgehen, dass das neue Modell auch im Mehrphasenbereich die SI-Lösung richtig approximiert.

Der Sprung des Eshelby-Tensors (2.40) in die nn -Richtung führt nach Gleichung (2.57) zu den Konfigurationskräften. Nach Gleichung (2.58) folgt entlang der Gebietsdiagonale, die durch $\mathbf{n}_1 = (1, 1, 0)^T/\sqrt{2}$ charakterisiert ist,

$$\begin{aligned}\Psi_{n_1} &= W - \boldsymbol{\varepsilon} \mathbf{n}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}_1 \\ &= \frac{1}{2}(\sigma_{11}\varepsilon_{11} + 2\sigma_{12}\varepsilon_{12} + \sigma_{22}\varepsilon_{22}) - \frac{1}{2}((\sigma_{11} + \sigma_{12})(\varepsilon_{11} + \varepsilon_{12}) + (\sigma_{12} + \sigma_{22})(\varepsilon_{12} + \varepsilon_{22})) \\ &= -\frac{1}{2}(\sigma_{11}\varepsilon_{12} + \sigma_{12}\varepsilon_{11} + \sigma_{12}\varepsilon_{22} + \sigma_{22}\varepsilon_{12}),\end{aligned}$$

entsprechend folgt für das Potential Ψ_{n_2} entlang der Diagonale (mit $\mathbf{n}_2 = (1, -1, 0)^T/\sqrt{2}$)

$$\begin{aligned}\Psi_{n_2} &= W - \boldsymbol{\varepsilon} \mathbf{n}_2 \cdot \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}_2 \\ &= \frac{1}{2}(\sigma_{11}\varepsilon_{11} + 2\sigma_{12}\varepsilon_{12} + \sigma_{22}\varepsilon_{22}) - \frac{1}{2}((\sigma_{11} - \sigma_{12})(\varepsilon_{11} - \varepsilon_{12}) + (\sigma_{12} - \sigma_{22})(\varepsilon_{12} - \varepsilon_{22})) \\ &= \frac{1}{2}(\sigma_{11}\varepsilon_{12} + \sigma_{12}\varepsilon_{11} + \sigma_{12}\varepsilon_{22} + \sigma_{22}\varepsilon_{12}).\end{aligned}$$

Ψ_{n_1} und Ψ_{n_2} sind äquivalent zu dem Potential $\Psi(\boldsymbol{\varphi}, \nabla \boldsymbol{\varphi}, \boldsymbol{\zeta}_n)$ des vorgestellten Modells entlang der entsprechenden Diagonale und führen in Falle einer Singularität zu der mechanischen Konfigurationskraft. Daher wurden für die Validierung der treibenden Kräfte unterhalb der Spannungsprofile

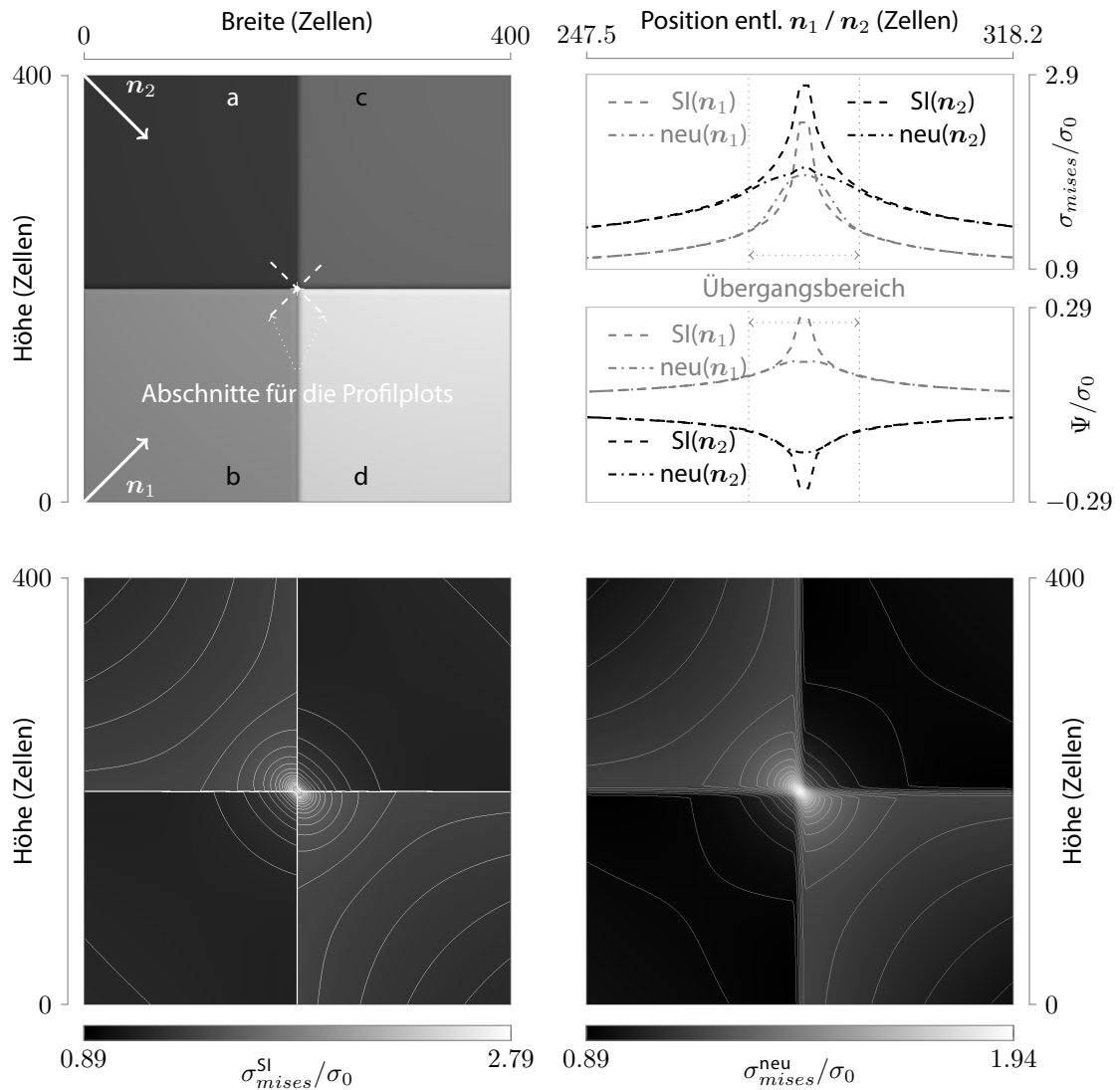


Abbildung 4.11.: Validierung der Spannung σ_{mises} und der Potentiale Ψ_{n_1} bzw. Ψ_{n_2} in einem Quadrupelpunkt. Das Gebiet mit vier Phasen mit $\mathcal{E}^a = \mathcal{E}^d = 2\mathcal{E}^b = 2\mathcal{E}^c$ ist oben links dargestellt. An allen Seiten wurde die makroskopische Spannungsrandbedingung mit $\bar{\sigma}_{xx} = \bar{\sigma}_{yy} = \sigma_0$ und $\bar{\sigma}_{zz} = \bar{\sigma}_{xy} = \bar{\sigma}_{xz} = \bar{\sigma}_{yz} = 0$ angewendet. Die Lösungen des vorgestellten Modells mit diffusen Grenzflächenparametrisierung (gekennzeichnet mit "neu") sind den Lösungen einer Parametrisierung mit scharfen Grenzflächen (gekennzeichnet mit "SI") gegenübergestellt. Ein Vergleich der von Mises-Spannung σ_{mises} des gesamten Gebiet ist im unteren Bereich der Abbildung zu erkennen. Ein detaillierter Vergleich der Profile von σ_{mises} und des Potentials Ψ_{n_1} bzw. Ψ_{n_2} entlang der gestrichelten Linien in Richtung n_1 zwischen den Punkten (175, 175, 0) und (225, 225, 0) und entsprechend zwischen den Punkten (175, 225, 0) und (225, 175, 0) in Richtung n_2 ist ober rechts dargestellt.

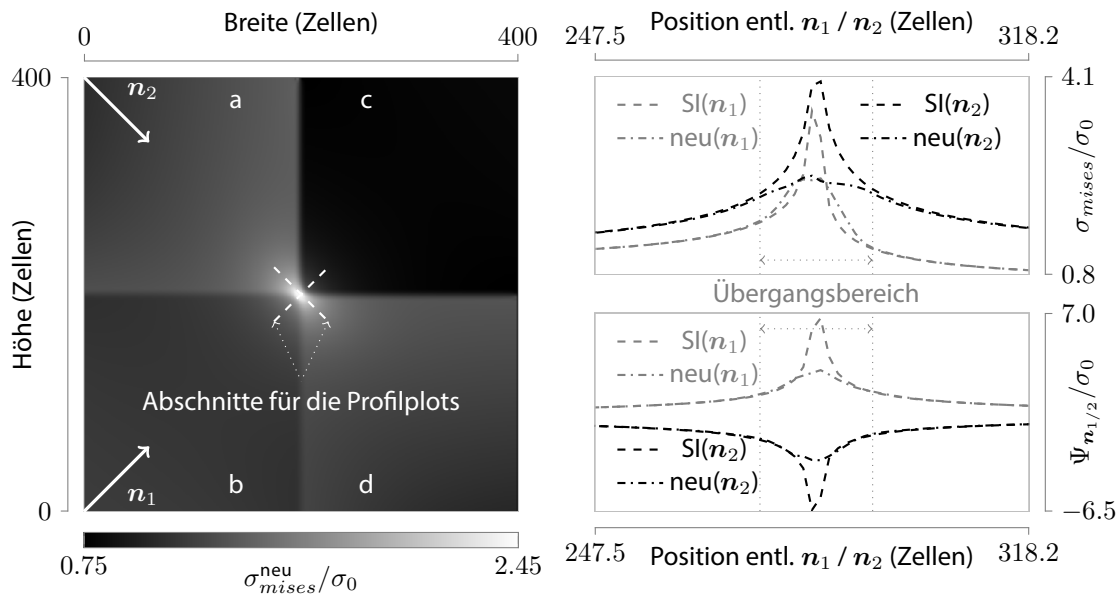


Abbildung 4.12.: Validierung der Spannung σ_{mises} und der Potentiale Ψ_{n_1} und Ψ_{n_2} in einem Quadrupelpunkt mit unterschiedlichen Materialparametern. Das Gebiet mit vier Phasen mit $\mathcal{E}^a = 2\mathcal{E}^b = 4\mathcal{E}^c = 4/3\mathcal{E}^d$ ist oben links in der Abb. (4.11) dargestellt. Ein detaillierter Vergleich der Profile von σ_{mises} und des Potentials Ψ_{n_1} bzw. Ψ_{n_2} entlang der gestrichelten Linien in Richtung n_1 und in Richtung n_2 ist rechts dargestellt.

in Abbildung 4.11 die Profile der Potentiale Ψ_{n_1} und Ψ_{n_2} entlang der entsprechenden Diagonalen dargestellt. Im Vergleich zu der SI-Lösung stimmen die Profile des vorgestellten Modells außerhalb der Übergangsbereiche sehr gut überein.

In der Abbildung 4.12 ist ein mehr realistischer Validierungsfall des Quadrupelpunktes dargestellt. Da alle Materialparameter der entsprechenden Phasen unterschiedlich gewählt sind, existiert ein Sprung sowohl für die resultierende von Mises-Spannung σ_{mises} als auch für die Potentiale Ψ_{n_1} und Ψ_{n_2} entlang der Diagonalen am Quadrupelpunkt. Außerhalb des Übergangsbereiches ist eine gute Übereinstimmung der Profile von σ_{mises} im Vergleich zu SI-Lösung zu erkennen. Auch die Profile von Ψ_{n_1} und Ψ_{n_2} stimmen mit der SI-Lösung bis kurz vor dem Quadrupelpunkt überein.

Damit wurde gezeigt, dass die mechanischen Konfigurationskräfte einer scharfen Grenzflächenbeschreibung mit dem vorgestellten diffusen Grenzflächenmodell auch im Mehrphasenbereich sehr gut abgebildet werden. Daher kann dieses Modell verwendet werden, um den Einfluss der mechanischen Konfigurationskräfte auf Phasenumwandlungs- und Kornwachstumsprozesse in Multiphasensystemen zu untersuchen.

4.7. Anwendungsbeispiel: Martensittransformation in einem Mehrkorngebiet

Martensitbildung ist eine der wichtigsten Verfestigungsmechanismen bei der Wärmebehandlung von metallischen Werkstoffen. Die hohe Festigkeit von martensitischen Stählen wird von der

starken Mischkristallverfestigung und der komplizierten Mikrostruktur, die durch den schnellen martensitischen Phasenumwandlungsprozess entsteht, verursacht [66]. Die hohe Transformationsgeschwindigkeit erschwert die experimentelle Untersuchung des rein displaziven Umwandlungsprozesses. Daher bieten die numerische Methoden eine leistungsfähige Möglichkeit, einen detaillierten Einblick in das Transformationsverhalten zu erhalten und ein besseres Verständnis der zugrunde liegenden Mechanismen zu gewinnen. Unter der Nutzung der herkömmlichen Interpolationsverfahren für die Materialparameter hat sich die Phasenfeldmethode für die numerische Untersuchung des Prozesses etabliert [67, 68]. Jedoch, wie es im Abschnitt 4.2 diskutiert wurde, verursachen die herkömmlichen Interpolationsverfahren wie VT oder RS eine Verzerrung des Übergangsbereiches. Die mechanischen Sprungbedingungen werden nicht abgebildet und die treibenden Kräfte werden verfälscht. Das Modell, das in dem vorhergehenden Abschnitten hergeleitet und validiert wurde, weist diese Defizite nicht auf. Die Anwendbarkeit des Modells auf den martensitischen Phasenumwandlungsprozess wird in diesem Abschnitt vorgestellt. Bereits 1951 wurden von Eshelby [29] die Konfigurationskräfte, welche das vorgestellte Modell abbildet, als die mechanischen treibenden Kräfte für die Bewegung der Grenzflächen identifiziert. Der Einfluss der treibenden Kräfte auf die resultierende Mikrostruktur wird in diesem Abschnitt ebenfalls präsentiert.

4.8. Charakterisierung des Phasenfeldmodells für den martensitischen Phasenumwandlungsprozess

Martensit entsteht aus einem komplizierten Zusammenspiel von drei treibenden Kräften [69]. Getrieben wird die Transformation durch einen großen Temperaturunterschied, der verglichen mit Austenit eine niedrigere chemische Energiedichte $W_{\text{chem}}(T)$ von Martensit verursacht. Im Allgemeinen ist die chemische Energiedichte auch von der Konzentration abhängig. Da nur der displazive Umwandlungsprozess im Vordergrund steht, wird diese Abhängigkeit in den folgenden Simulationsstudien vernachlässigt. Den chemischen treibenden Kräften wirken die mechanischen Kräfte entgegen, die durch die transformationsinduzierten Eigendehnungen in Martensit ansteigen. Darüber hinaus muss eine neue Grenzfläche zwischen Martensit und Austenit aufgebaut werden, die mit der Kraft von $\gamma\kappa$ gegen die Bildung von martensitischen Phasen wirkt. Daher nimmt das Funktional der freien Energie im Phasenfeldkontext folgende Form an

$$\mathcal{F}(\boldsymbol{\varphi}, \nabla\boldsymbol{\varphi}, T, \boldsymbol{\varepsilon}) = \int_V \epsilon a(\boldsymbol{\varphi}, \nabla\boldsymbol{\varphi}) + \frac{1}{\epsilon} \omega_{\text{ob}}(\boldsymbol{\varphi}) + W_{\text{chem}}(\boldsymbol{\varphi}, T) + W_{\text{mech}}(\boldsymbol{\varphi}, \boldsymbol{\varepsilon}) dV. \quad (4.62)$$

Dabei ist $a(\boldsymbol{\varphi}, \nabla\boldsymbol{\varphi})$ die Gradientenenergiedichte (3.4), $\omega_{\text{ob}}(\boldsymbol{\varphi})$ ist das Energiepotential (3.5), ϵ ist ein Parameter für die Breite des Übergangsbereiches, $W_{\text{chem}}(\boldsymbol{\varphi}, T) = \sum_{\alpha} W_{\text{chem}}^{\alpha}(T) h^{\alpha}(\boldsymbol{\varphi})$ ist die chemische Energiedichte mit $h^{\alpha}(\boldsymbol{\varphi})$ als Interpolationsfunktion (3.2) und $W_{\text{mech}}(\boldsymbol{\varphi}, \boldsymbol{\varepsilon})$ ist die Formänderungsenergiedichte (4.7).

Vom kristallografischen Gesichtspunkt kann jedes Austenitkorn in 24 unterschiedliche martensitische Varianten, die sich in ihrer Orientierung und Verzerrung unterscheiden, transformieren. Der Einfachheit halber können die martensitischen Varianten in drei Haupttypen, als *Bain-Varianten* bekannt, gruppiert werden [66]. Nach Artemev et al. [70] werden die folgenden *Bainschen Dehnungen*

als transformationsinduzierte Eigendehnungen verwendet

$$\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^1 = \begin{pmatrix} \varepsilon_3 & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_1 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_1 \end{pmatrix}, \quad \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^2 = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_3 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_1 \end{pmatrix}, \quad \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^3 = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_1 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_3 \end{pmatrix}, \quad (4.63)$$

dabei sind $\varepsilon_1 = (a - a_c)/a_c$ und $\varepsilon_3 = (c - a_c)/a_c$ von den martensitischen (a , c) und austenitischen (a_c) Kristallgitterparametern abhängig.

Es ist experimentell bewiesen, dass das Wachstum der martensitischen Varianten an den Korngrenzen endet [71]. Um dieses Verhalten abzubilden, wird jedes Austenitkorn mit den drei Bain-Varianten als ein eigenständiger Satz an Ordnungsparametern behandelt. Damit wird das N -Tupel $\boldsymbol{\varphi}$ folgendermaßen unterteilt

$$\boldsymbol{\varphi} = (\varphi_{a1}, \varphi_{a1v1}, \varphi_{a1v2}, \varphi_{a1v3}, \varphi_{a2}, \varphi_{a2v1}, \varphi_{a2v2}, \varphi_{a2v3}, \dots),$$

mit φ_{ai} als Ordnungsparameter für die austenitischen Körner und $\varphi_{ai v1}$, $\varphi_{ai v2}$ und $\varphi_{ai v3}$ als Ordnungsparameter für die entsprechenden martensitischen Varianten.

Es wird angenommen, dass die Unterkühlung in Bezug auf Raum und Zeit konstant ist, sodass der Unterschied in den chemischen Energiedichten zwischen Austenit und Martensit als ein phasenabhängiger konstanter Wert modelliert werden kann. Damit ist die ausschlaggebende Größe für die chemischen treibenden Kräfte die Differenz von konstanten chemischen Energiedichten zwischen Austenit und Martensit $\Delta W_{\text{chem}}^{a-v} = W_{\text{chem}}^a - W_{\text{chem}}^v$. Wenn zusätzliche Abhängigkeiten von Konzentrationsunterschieden berücksichtigt werden müssen, wie beispielsweise bei der *bainitischen Transformation* [72], wird die chemische treibende Kraft zur Differenz der großkanonischen Potentiale [9]. Die martensitische Transformation ist allerdings ein rein displaziver Prozess. Daher wird die Konzentrationsabhängigkeit vernachlässigt.

Für die Modellierung einer Keimbildung von martensitischen Varianten wurde die Evolutionsgleichung für die Ordnungsparameter (3.17) um einen zusätzlichen Rauschterm ϑ erweitert

$$\dot{\varphi}_\alpha = -\frac{1}{N} \sum_{\beta \neq \alpha} \left[M_{\alpha\beta} \left(\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \varphi_\alpha} - \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \varphi_\beta} \right) \right] + \vartheta. \quad (4.64)$$

Der Rauschterm repräsentiert das thermische Rauschen und ist nur im diffusen Übergangsbereich aktiv. Dies ist konsistent mit experimentellen Befunden, dass martensitische Varianten nur heterogen keimen [73]. Zusätzlich ermöglicht dieser Term eine autokatalytische Keimbildung an den Grenzflächen zwischen Austenit und Martensit. Die Grenzflächenmobilität $M_{\alpha\beta}$ wird so gewählt, dass das gegenseitige Wachstum zwischen austenitischen Körnern und das Wachstum von martensitischen Varianten in fremden Austenitkörnern unterbunden ist.

4.8.1. Martensitbildung in einem Vielkornsystem

Als anfängliche Mikrostruktur wurde ein zweidimensionales Simulationsgebiet, das in Abbildung (4.13) a) zu sehen ist, mit 50 Körnern gewählt. Diese Mikrostruktur ist das Ergebnis einer Kornreifungssimulation mit gleichen Grenzflächenenergien und repräsentiert ein Gefüge aus austenitischen Körnern mit unterschiedlicher Orientierung der Gitterstruktur. Für alle Feldgrößen wurden die periodischen Randbedingungen angesetzt und für alle Austenit–Martensit- als auch für

die Martensit–Martensit-Grenzflächen wurde eine gleiche Grenzflächenenergie von $\gamma_{\alpha\beta} = 0.1 \text{ J/m}^2$ und $\gamma_{\alpha\beta\delta} = 15\gamma_{\alpha\beta}$ verwendet. Eine detaillierte Diskussion für die Wahl der $\gamma_{\alpha\beta\delta}$ -Parameter ist in Hötzer et al. [46] zu finden. Die chemischen treibenden Kräfte wurden entsprechend der Unterkühlung folgendermaßen ermittelt

$$\Delta W_{chem}^{a-v} = \frac{Q(T_0 - T)}{T_0},$$

dabei ist $Q = 3.5 \times 10^8 \text{ J/m}^3$ die latente Wärme, $T_0 = 405 \text{ K}$ die spannungsfreie Gleichgewichtstemperatur und $T = 254 \text{ K}$ die angesetzte Temperatur bei der Umwandlung. Entsprechend Schmidt und Gross [74] wurden sowohl für die austenitischen Körner, als auch für die martensitischen Varianten eine anisotrope Steifigkeit

$$\mathbf{C}^{\text{kubisch}} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{pmatrix},$$

mit

$$C_{11} = \mu \left(\frac{2(2 + A_z)}{1 + A_z} - \frac{1 - 4\nu}{1 - 2\nu} \right),$$

$$C_{12} = \mu \left(\frac{2A_z}{1 + A_z} - \frac{1 - 4\nu}{1 - 2\nu} \right),$$

$$C_{44} = \mu \frac{2A_z}{1 + A_z},$$

verwendet. Dabei sind $\mu = 28 \text{ GPa}$ der Schubmodul, $\nu = 0.375$ die Querkontraktion und $A_z = 2C_{44}/(C_{11} - C_{12}) = 2$ repräsentiert die Stärke der Anisotropie. Da in dieser Simulationsstudie die Plastifizierungseffekte nicht berücksichtigt werden, wurden die Parameter für die Eigendehnungen (4.63) auf die Werte $\varepsilon_1 = 0.07$ und $\varepsilon_3 = -0.07$ reduziert, um unphysikalisch hohe Spannungsspitzen zu vermeiden. Sowohl die Steifigkeiten als auch die Eigendehnungen wurden entsprechend der Orientierung des Musterkorns rotiert.

Das Simulationsgebiet mit 500×500 Zellen entspricht einer physikalischen Ausdehnung von $0.65 \times 0.65 \mu\text{m}^2$. Der Parameter für die Breite des Übergangsbereiches $\varepsilon = 2.5 \Delta x$ wurde so gesetzt, dass die Interfacebreite sechs Zellen nicht unterschreitet. Der Rauschterm ϑ in der Evolutionsgleichung (4.64) wurde bei jedem hundertsten Zeitschritt mit einer Amplitude von 0.2 angewendet. Allerdings wurde im ersten Zeitschritt eine 2.5-fach höhere Amplitude für den ersten Keimungsprozess verwendet. Die Evolutionsgleichung (4.64) wurde auf einem Finite-Differenzen-Gitter mit einem expliziten Eulerschen Verfahren gelöst. Dabei wurde bei jedem Zeitschritt das mechanische Gleichgewicht $\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0}$ durch einen impliziten Schritt garantiert. Kim et al. [75] haben gezeigt, dass eine Koexistenz von mehr als sechs Phasen in einem lokalen Punkt sehr unwahrscheinlich ist und somit entsprechend reduziert werden kann. Dieser angewendete Algorithmus wird als *Locally Reduced Order Parameter (LROP)* [76] bezeichnet.

Die zeitliche Entwicklung der martensitischen Mikrostruktur ist in den Abbildungen (4.13) a)-d) zu erkennen. Zum initialen Zeitpunkt (Abbildungen (4.13) a)) sind keine martensitische Varianten vorhanden. Durch das heterogene Rauschen keimen an den Austenitgrenzen martensitische Varianten

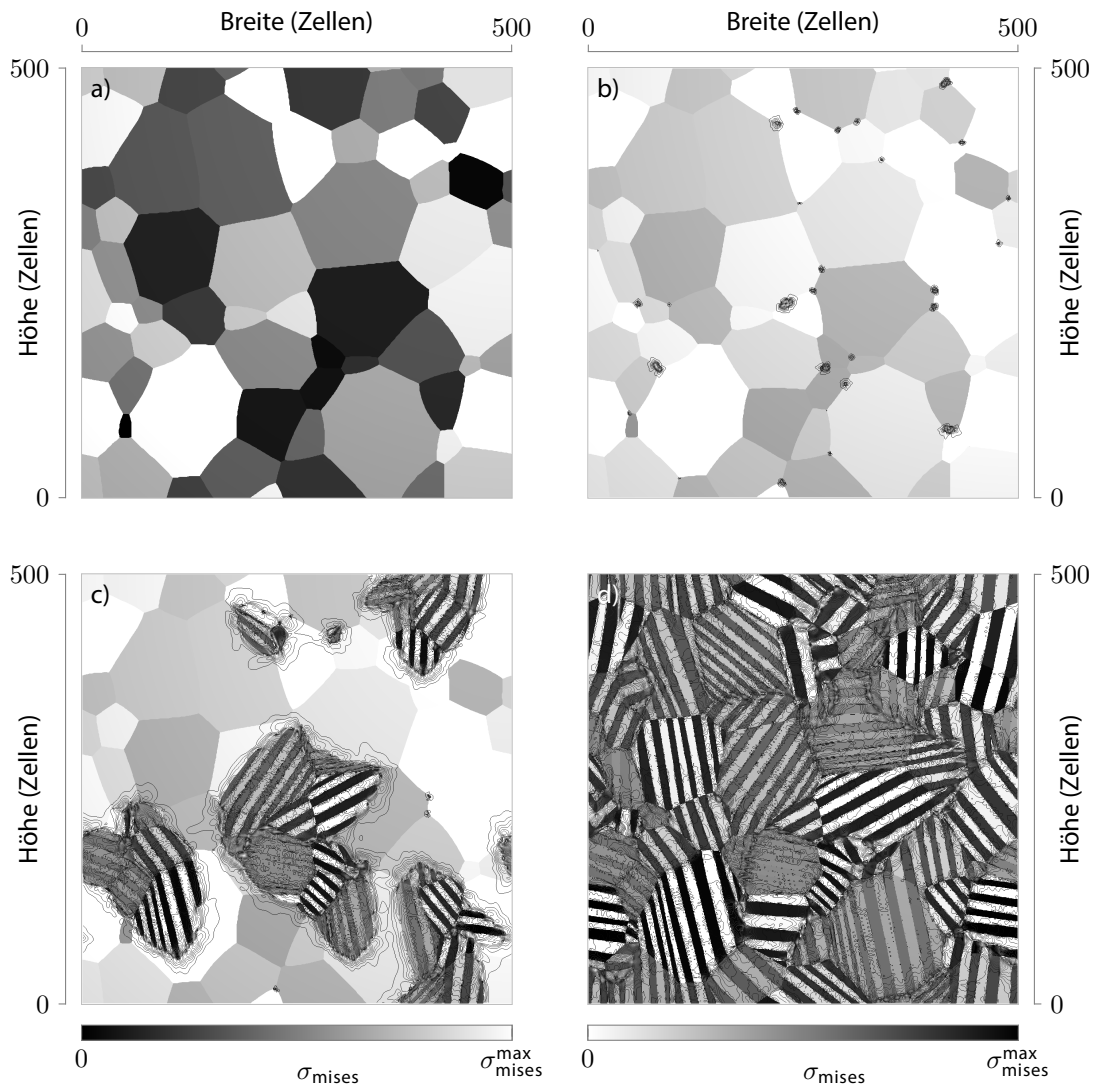


Abbildung 4.13.: Initiale austenitische Mikrostruktur a) der erste Keimungszeitschritt b) und der weitere zeitliche Verlauf beim Wachstum von martensitischen Varianten c) und d). In b)-d) werden die austenitischen Körner gegenüber den martensitischen Varianten heller dargestellt. Die Isolinien stellen den Verlauf der Mises-Spannung σ_{mises} dar. Obwohl die Korngrenzen scharf dargestellt werden, sind die Übergangsregionen diffus und haben eine Breite von mindestens sechs Zellen.

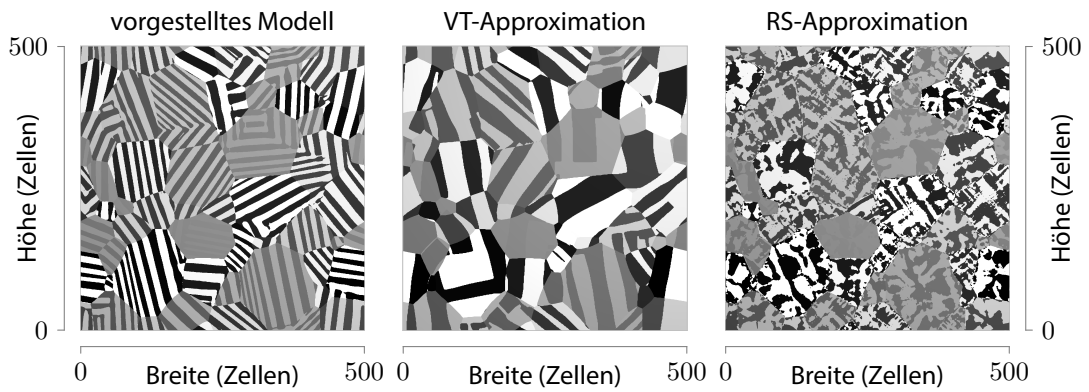


Abbildung 4.14.: Resultierende Mikrostrukturen bei Variation der Interpolationsschemata. Bei allen Simulationen wurden die initiale Mikrostruktur aus Abbildung 4.13 b), gleiche Rahmenbedingungen und gleiche Materialparameter verwendet.

sowohl an den Tripelpunkten als auch an den Zweiphasenkorgrenzen, wie in Abbildungen (4.13) b) zu erkennen ist. Der Keimungsprozess ist nur dann möglich, wenn die zwei entgegengesetzt verzehrten Varianten zusammenwachsen, um die elastische Energie zu reduzieren [77]. Wenn die Keimbarriere nicht überwunden wurde, verschwinden die Phasenanteile wieder, welche durch den Rauschalgorithmus induziert wurden. Wächst eine der Varianten, dann sinkt gleichzeitig die Keimbarriere für die zweite durch die mitgeführten Eigendehnungen. Bei jedem hundertsten Zeitschritt induziert der Rauschalgorithmus die autokatalytische Keimbildung und die typische martensitische lamellare Mikrostruktur, die in den Abbildungen (4.13) c) und d) zu erkennen ist. Dabei variiert die Breite der entstehenden Lamellen nur geringfügig.

Um den Einfluss der treibenden Kräfte auf die resultierende Mikrostruktur zu demonstrieren, wurde dieses numerische Beispiel auch unter Verwendung des VT- und RS-Interpolationsschemas (siehe Abschnitt 4.1) durchgeführt. Um die Vergleichbarkeit zu gewährleisten, wurden gleiche Bedingungen angesetzt und für beide Simulationen wurde die Mikrostruktur mit den ersten Keimzellen aus der Abbildung (4.13) b) als anfängliche Mikrostruktur verwendet. Das Ergebnis ist in Abbildung 4.14 zu erkennen. Es ist klar ersichtlich, dass die resultierenden Mikrostrukturen vollkommen unterschiedlich sind, obwohl die Berechnungsvorschriften für die Spannungen bei gleichen Steifigkeiten äquivalent sind, was durch einen Vergleich der Gleichungen (4.1), (4.2) und (4.50) zu erkennen ist. Alleine die Unterschiede in den Formulierungen der Potentiale für die Berechnung der treibenden Kräfte (vgl. Gl. (4.47), (4.12) und, (4.14)) führen zu den vollkommen unterschiedlichen Resultaten.

5

Berechnung der plastischen Dehnungen im Phasenfeldkontext

Metallische Materialien reagieren meistens homogen auf der makroskopischen Längenskala. Auf der mesoskopischen Skala bestehen die Materialien jedoch aus einer Vielzahl von unterschiedlich orientierten Körnern, Einschlüssen oder Poren unterschiedlicher Größe und Form. Diese auf mesoskopischer Skala physikalisch abgetrennten Bereiche unterscheiden sich in ihren Materialparametern und verursachen daher schon bei geringen Belastungen große Spannungsspitzen in den Übergangsbereichen und ihrer Umgebung. Die meisten dieser Spannungsspitzen übersteigen die plastische Fließgrenze und werden durch Plastifizierung abgefangen bevor die Materialien versagen [78]. Phasenumwandlungsprozesse wie die martensitische oder bainitische Transformation verursachen alleine durch die Gitterverspannung Dehnungen und entsprechend auch Spannungen, die weit über die Fließgrenze hinausreichen [70]. Aber auch bei Abkühlung oder Erstarrung von heterogenen Materialien werden durch unterschiedliche thermische Ausdehnungskoeffizienten Spannungen induziert, die plastische Effekte verursachen. Daher ist die Berücksichtigung der plastischen Effekte und deren Wirkung für die Vorhersagen mechanischer Eigenschaften heterogener Materialien bei der Beschreibung displaziver Phasenumwandlungsprozesse oder der Abbildung der Grenzflächenbewegung unter Berücksichtigung mechanischer Konfigurationskräfte unentbehrlich.

Die konventionellen Methoden für die Modellierung von elasto-plastischem Materialverhalten auf der mesoskopischen Längenskala sind die auf finiten Elementen basierenden Kristallplastizitätmethoden (Roters et al. [79] bietet einen umfangreichen Überblick über diese Methoden). Allerdings benötigt eine zusätzliche Betrachtung von Grenzflächenbewegung eine explizite Verfolgung der exakten Position der Grenzflächen, was numerisch sehr aufwendig ist. Wie bereits in Kapitel 3 besprochen, stellt die Phasenfeldmethode in diesen Zusammenhang eine Alternative dar, da eine explizite Grenzflächenverfolgung redundant wird [1, 5]. Zugleich erschwert der diffuse Übergangsbereich die Erfüllung der Sprungbedingungen an den Grenzflächen. In Abschnitt 4.2 wurde bereits diskutiert, dass die Homogenisierung der Materialparameter dabei eine entscheidende Rolle spielt. Sind die lokalen inelastischen Dehnungen bekannt, so bietet die Methode, die in Abschnitt 4.3

eingeführt wurde, eine Berechnungsvorschrift für die Spannungen, die die mechanischen Sprungbedingungen reflektiert. Allerdings sind die plastischen Dehnungen im Allgemeinen nicht bekannt und müssen aus dem vorliegenden Spannungszustand berechnet werden. Die Berechnung der plastischen Dehnungen wird zusätzlich durch unterschiedliche Materialparameter im diffusen Übergangsbereich zwischen den Phasen erschwert.

Aufbauend auf dem Grundlagenabschnitt 2.6 werden in diesem Abschnitt zwei Methoden vorgestellt, die es erlauben, trotz einer lokalen Überlappung von mehreren Phasen die plastische Dehnung zu berechnen. Dabei wird der Fokus auf die Lösung im Übergangsbereich gelegt. Bei beiden Methoden wird das Prandtl-Reuss-Modell mit dem Return-Mapping-Algorithmus aus Abschnitt 2.6.3 umgesetzt, um die phasenanteiligen bzw. effektiven plastischen Dehnungen zu berechnen. Die vorgestellten Modelle gehen von infinitesimalen Deformationen aus. Daher wird in diesen Kapitel auf die Unterscheidung zwischen der Lagrangeschen und der Eulerschen Darstellung verzichtet.

Für beide Ansätze wird die freie Energie (4.8) um einen plastischen Beitrag $W_{pl}(\boldsymbol{\varphi}, \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{pl})$ erweitert

$$\mathcal{F}(\boldsymbol{\varphi}, \nabla \boldsymbol{\varphi}, \boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\sigma}) = \int_V \varepsilon a(\boldsymbol{\varphi}, \nabla \boldsymbol{\varphi}) + \frac{1}{\varepsilon} \omega_{ob}(\boldsymbol{\varphi}) + W(\boldsymbol{\varphi}, \boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\sigma}) + W_{pl}(\boldsymbol{\varphi}, \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{pl}) dV, \quad (5.1)$$

wobei $W_{pl}(\boldsymbol{\varphi}, \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{pl})$ und die resultierende plastische Dissipation (2.63) in den einzelnen Unterabschnitten definiert wird.

5.1. Ansatz zur Berechnung der phasenanteiligen plastischen Dehnungen

In den Abschnitten 4.3.4 und 4.3.5 wurden Berechnungsformschriften vorgestellt, die es erlauben, bei der Kenntnis von phasenanteiligen inelastischen Dehnungen sowohl die Konfigurationskräfte als auch effektive Spannungen zu berechnen. Eine der Voraussetzungen ist allerdings, dass die inelastischen Dehnungen $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^\alpha$ für die lokal vorliegenden Phasen bekannt sind. Bei den plastischen Dehnungen ist das im Allgemeinen nicht der Fall. Diese müssen aus den lokal vorliegenden Spannungen berechnet werden.

Jede lokal vorliegende Phase kann sich unabhängig von den anderen Phasen plastisch deformieren. Für die Berechnung dieser Deformation sind phasenanteilige Spannungen notwendig. Ausgehend von den mechanischen Sprungbedingungen wurden in Abschnitt 4.3.1 die lokal vorliegenden Spannungen zunächst in kontinuierliche $\boldsymbol{\sigma}_n$ - und diskontinuierliche $\boldsymbol{\sigma}_t^\alpha$ -Anteile aufgeteilt (siehe Gl. (4.24)). Gemäß der Sprungbedingung (4.18) sind die kontinuierlichen Bestandteile $\boldsymbol{\sigma}_n$ sprunghfrei und damit phasenübergreifend. Die diskontinuierlichen Anteile $\boldsymbol{\sigma}_t^\alpha$ können aus dem Potential $p^\alpha(\boldsymbol{\sigma}_n, \boldsymbol{\varepsilon}_t)$ (siehe Gl. (4.59)) für die jeweilige Phase berechnet werden. Demnach folgt für die diskontinuierlichen Anteile der Spannung

$$\boldsymbol{\sigma}_t^\alpha = \frac{\partial p^\alpha(\boldsymbol{\sigma}_n, \boldsymbol{\varepsilon}_t)}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_t} = \mathcal{T}_{tn}^\alpha \boldsymbol{\sigma}_n + \mathcal{T}_{tt}^\alpha (\boldsymbol{\varepsilon}_t - \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_t^\alpha).$$

Damit sind beide Bestandteile der phasenanteiligen Spannung $\sigma_B^\alpha = (\sigma_n, \sigma_t^\alpha)^\top$ im Basiskoordinatensystem \mathbf{B} (siehe Abschnitt 4.3.5 für die Definition) bekannt. Mit der Transformationsvorschrift (4.25) und der Relation $M_\sigma^{-1} = M_\varepsilon^\top$ [62] folgt für die Spannungen im kartesischen Koordinatensystem und der Voigtschen Notation

$$\sigma^{\alpha,v} = M_\varepsilon^\top \sigma_B^\alpha.$$

Diese phasenanteiligen Spannungen können nun verwendet werden, um die phasenanteiligen plastischen Dehnungen ε_{pl}^α zu berechnen. Dabei können pro Phase beliebige Modelle zur Berechnung der plastischen Dehnungen angewendet werden. Sogar unterschiedliche Berechnungsvorschriften pro lokal vorliegende Phase sind denkbar.

Einfachheitshalber wird das Prandtl-Reuss-Modell (siehe z. B. [33]), bestehend aus der von Mises-Fließbedingung (2.59) mit isotroper Verfestigung und der assoziativen Fließregel (2.64), zur Berechnung der phasenanteiligen plastischen Dehnungen ε_{pl}^α angewendet. Für die Fließfunktion der jeweiligen Phase folgt

$$f_F^\alpha((\sigma^\alpha)', \bar{\varepsilon}_{pl}^\alpha) = |(\sigma^\alpha)'| - \sqrt{\frac{2}{3}} (\sigma_{F_0}^\alpha + H^\alpha \bar{\varepsilon}_{pl}^\alpha) \leq 0.$$

$\sigma_{F_0}^\alpha$ ist dabei die initiale Fließspannung, H^α der entsprechende Verfestigungsparameter und $\bar{\varepsilon}_{pl}^\alpha$ ist die akkumulierte plastische Dehnung der Phase α . Übersteigt $|(\sigma^\alpha)'|$ die Fließspannung $\sigma_F^\alpha(\bar{\varepsilon}_{pl}^\alpha) = \sigma_{F_0}^\alpha + H^\alpha \bar{\varepsilon}_{pl}^\alpha$ beginnt die Phase α sich plastisch zu verformen. Die Annahme einer assoziativen Fließregel, die aus dem Prinzip der maximalen Dissipation berechnet werden kann, führt zu der folgenden Zustandsgleichung der phasenanteiligen plastischen Dehnungen

$$\dot{\varepsilon}_{pl}^\alpha = \dot{\gamma}^\alpha \frac{\partial f_F^\alpha((\sigma^\alpha)', \bar{\varepsilon}_{pl}^\alpha)}{\partial (\sigma^\alpha)'}$$

Ist der Steifigkeitstensor der jeweiligen Phase \mathbf{C}^α isotrop, so kann der Return-Mapping-Algorithmus, der in Abschnitt 2.6.3 eingeführt wurde, angewendet werden, um die Konsistenzbedingung $\dot{f}_F^\alpha = 0$ zu erfüllen und die plastischen Dehnungen der jeweiligen Phase zu berechnen.

Mit den phasenanteiligen plastischen Dehnungen wird der plastische Beitrag zu dem Funktional der freien Energie (5.1) wie folgt definiert

$$W_{pl}(\boldsymbol{\varphi}, \bar{\varepsilon}_{pl}) = \frac{1}{2} \sum_\alpha H^\alpha (\bar{\varepsilon}_{pl}^\alpha)^2 h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}).$$

Damit ergibt sich für die plastische Dissipation (2.63)

$$\begin{aligned} D(\boldsymbol{\sigma}, \dot{\varepsilon}_{pl}) &= \int_V \sum_\alpha \left(\boldsymbol{\sigma}^\alpha \cdot \dot{\varepsilon}_{pl}^\alpha - \frac{\partial W_{pl}^\alpha(\bar{\varepsilon}_{pl}^\alpha)}{\partial \bar{\varepsilon}_{pl}^\alpha} \cdot \dot{\bar{\varepsilon}}_{pl}^\alpha \right) h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}) dV \\ &= \sum_\alpha \int_V (\boldsymbol{\sigma}^\alpha \cdot \dot{\varepsilon}_{pl}^\alpha - H^\alpha \bar{\varepsilon}_{pl}^\alpha \dot{\bar{\varepsilon}}_{pl}^\alpha) h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}) dV. \end{aligned}$$

Die gesamte plastische Dissipation ist die volumetrisch gemittelte Summe der phasenanteiligen Dissipationsbeiträge.

5.2. Berechnung der plastischen Dehnungen aus den lokal homogenisierten Spannungen

Die im letzten Unterabschnitt vorgestellte Methode erlaubt eine unabhängige Betrachtung der Plastifizierungseffekte in jeder einzelnen Phase. Damit kann die Plastifizierung in polykristallinen Materialien sehr gut approximiert werden. Allerdings ist diese Methode aus numerischer Sicht eine Herausforderung, denn für jede einzelne Phase müssen die inneren Variablen im gesamten Simulationsgebiet berechnet und entsprechend auch gespeichert werden. Um diesen numerischen Aufwand zu verringern, können die inneren Variablen auch aus den bereits homogenisierten Spannungen $\sigma(\varphi)$ berechnet werden. Bei dieser Methode sind die phasenanteiligen plastischen Dehnungen $\varepsilon_{\text{pl}}^\alpha$ nicht bekannt. Daher werden bei der Berechnung des infinitesimalen Verzerrungstensors (2.53) die effektiven plastischen Dehnungen abgezogen

$$\hat{\varepsilon} = \text{sym}(\nabla \mathbf{u}) - \varepsilon_{\text{pl}}.$$

Anschließend werden die Spannungen mit der Gleichung (4.61) berechnet, wobei $\hat{\varepsilon}$ als Verzerrungstensor verwendet wird. Die übrigen inelastischen Dehnungen werden gemäß Gleichung (4.61) behandelt.

Auch in diesem Fall wird einfachheitshalber das Prandtl-Reuss-Modell (siehe z. B. [33]) verwendet. Hierzu wird eine Fließfunktion der Form

$$f_{\text{F}}(\boldsymbol{\sigma}'(\boldsymbol{\varphi}), \bar{\varepsilon}_{\text{pl}}) = |\boldsymbol{\sigma}'(\boldsymbol{\varphi})| - \sqrt{\frac{2}{3}} \left(\sigma_{\text{F}_0}(\boldsymbol{\varphi}) + H(\boldsymbol{\varphi}) \bar{\varepsilon}_{\text{pl}} \right) \leq 0$$

formuliert, wobei $\sigma_{\text{F}_0}(\boldsymbol{\varphi})$ die effektive initiale Fließspannung und $H(\boldsymbol{\varphi})$ der effektive Verfestigungsparameter sind und folgendermaßen definiert sind

$$\sigma_{\text{F}_0}(\boldsymbol{\varphi}) = \sum_{\alpha} \sigma_{\text{F}_0}^{\alpha} h^{\alpha}(\boldsymbol{\varphi}), \quad H(\boldsymbol{\varphi}) = \sum_{\alpha} H^{\alpha} h^{\alpha}(\boldsymbol{\varphi}). \quad (5.2)$$

Übersteigt der deviatorische Anteil der Mises-Spannung die Fließspannung, beginnt sich das Material plastisch mit der Zustandsgleichung

$$\dot{\varepsilon}_{\text{pl}} = \dot{\gamma} \frac{\partial f_{\text{F}}(\boldsymbol{\sigma}', \bar{\varepsilon}_{\text{pl}})}{\partial \boldsymbol{\sigma}'}$$

zu verformen. Der Return-Mapping-Algorithmus aus Abschnitt 2.6.3 wird angewendet, um bei Isotropie den Konsistenzparameter $\dot{\gamma}$ zu bestimmen.

Unter Verwendung des Prandtl-Reuss-Modells folgt nach Simo und Hughes [33] für den plastischen Beitrag der freien Energie (5.1)

$$W_{\text{pl}}(\boldsymbol{\varphi}, \bar{\varepsilon}_{\text{pl}}) = \frac{1}{2} H(\boldsymbol{\varphi}) \bar{\varepsilon}_{\text{pl}}^2.$$

Nach Schneider et al. [56] resultiert damit für die plastische Dissipation (2.63)

$$D(\boldsymbol{\sigma}, \dot{\varepsilon}_{\text{pl}}) = \int_V \boldsymbol{\sigma} \cdot \dot{\varepsilon}_{\text{pl}} - H(\boldsymbol{\varphi}) \bar{\varepsilon}_{\text{pl}} \dot{\varepsilon}_{\text{pl}} dV.$$

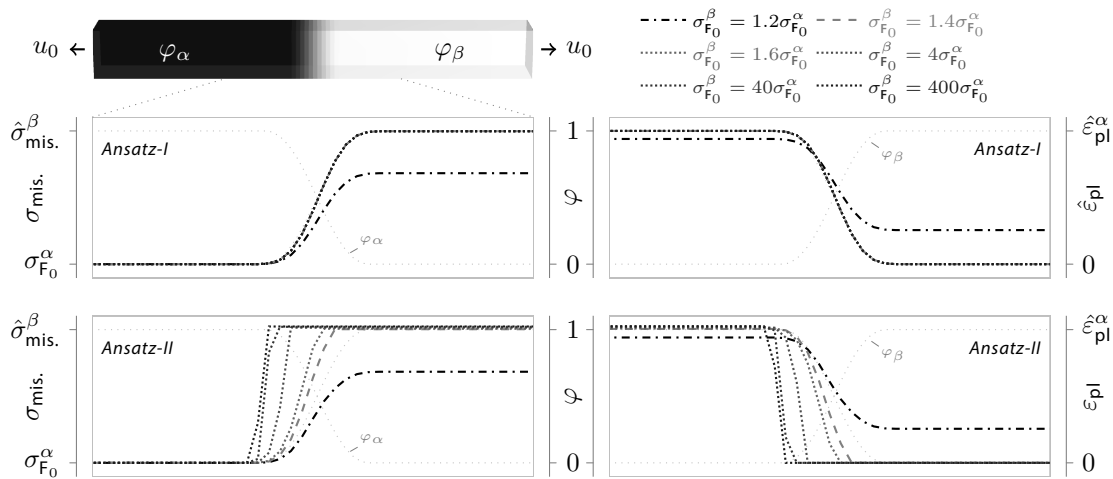


Abbildung 5.1.: Vergleich der Ansätze zur Berechnung der plastischen Dehnungen. Das Modell aus Abschnitt 5.1 wird als *Ansatz-I* und das Modell aus Abschnitt 5.2 als *Ansatz-II* bezeichnet. $\sigma_{F_0}^\alpha$ wurde bei allen Simulationen konstant gehalten und $\sigma_{F_0}^\beta$ variiert. Die Referenzwerte $\hat{\sigma}_{mis.}^\beta$ und $\hat{\epsilon}_{pl}^\alpha$ entsprechen den Werten innerhalb der jeweiligen Zelle zu dem Fall $\sigma_{F_0}^\beta = 1.4\sigma_{F_0}^\alpha$. Beim *Ansatz-II* wurde als plastische Dehnung $\hat{\epsilon}_{pl} = \epsilon_{pl}^\alpha h^\alpha(\varphi) + \epsilon_{pl}^\beta h^\beta(\varphi)$ dargestellt. Bei dem Fall $\sigma_{F_0}^\beta = 1.2\sigma_{F_0}^\alpha$ verformen sich beide Phasen plastisch, ansonsten fließt nur die Phase α .

5.3. Vergleich der Ansätze zur Berechnung der plastischen Dehnungen

Zum Vergleich der vorgestellten Ansätze zur Berechnung der plastischen Dehnungen aus den Abschnitten 5.1 und 5.2 wird die Plastifizierung eines eindimensionalen Gebietes untersucht. Das Simulationsgebiet mit einem diffusen Phasenübergang zwischen den Phasen φ_α und φ_β ist oben links in Abbildung 5.1 dargestellt. Das Gebiet wurde in x -Richtung mit konstanter Verschiebung $\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_x = u_0$ belastet und bei den restlichen Rändern wurde $\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_y = \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_z = 0$ angesetzt. In beiden Bereichen wurde ein ideal plastisches Materialverhalten mit gleichen Steifigkeiten $\mathbf{C}^\alpha = \mathbf{C}^\beta$ angesetzt. Zur Untersuchung des Verhaltens beider Modelle an der Grenzfläche wurde die initialen Fließspannung $\sigma_{F_0}^\alpha$ festgehalten und $\sigma_{F_0}^\beta$ variiert.

Die resultierenden Mises-Spannungen σ_{mises} und plastischen Dehnungen ϵ_{pl} beider Ansätze sind äquivalent, wenn sich beide Phasen plastisch verformen, was bei der Wahl der Fließspannungen $\sigma_{F_0}^\beta = 1.2\sigma_{F_0}^\alpha$ der Fall ist. Sowohl das Profil von σ_{mises} als auch das Profil von ϵ_{pl} in Abbildung 5.1 folgen in diesem Fall der Volumenfraktion der jeweiligen Phasen und entsprechen somit der scharfen Grenzflächenlösung (vgl. Abschnitt 4.1). Verformt sich allerdings nur eine der Phasen plastisch, so sind deutliche Unterschiede zwischen den Ansätzen zu erkennen. Während sich das Verhalten der nicht plastisch fließenden Phase beim Ansatz aus Abschnitt 5.1 nicht ändert, hängt das Verhalten beim Ansatz aus Abschnitt 5.2 stark von der Wahl der Fließspannung $\sigma_{F_0}^\beta$ ab. Der Grund für die Abweichungen ist, dass bei diesem Ansatz nach Gleichung (5.2) eine effektive Fließspannung ermittelt wird und entsprechend ist diese effektive Fließspannung im Übergangsbereich von den Fließspannungen aller lokal vorliegenden Phasen abhängig. Anhand dieser effektiven

Fließspannung wird die Plastifizierung schon sehr früh im Übergangsbereich abgeschnitten, wenn $\sigma_{F_0}^\beta$ weit über der lokalen Mises-Spannung σ_{mises} liegt. Daher werden die Verläufe der plastischen Dehnung und der Mises-Spannung verzerrt, was im unteren Bereich der Abbildung 5.1 zu sehen ist. Liegen die gewählten Fließspannungen in der gleichen Größenordnung, so sind nur geringfügige Abweichungen von idealem Verhalten zu erkennen.

5.4. Einfluss von Inhomogenitäten auf die mechanischen Eigenschaften von Materialien

Die folgenden Simulationsstudien sollen die Anwendbarkeit des Modells aus Abschnitt 5.2 zur Berechnung der effektiven mechanischen Eigenschaften von Materialien demonstrieren. Hierzu wurden zyklische Zugbelastungstests auf einem zylindrischen Gusseisengebiet der Größe 300 Zellen mit einer physikalischen Größe jeder Zelle von $1 \mu\text{m}^3$ durchgeführt. Die verwendete Mikrostruktur, dargestellt im linken Inlay der Abbildung 5.2 a), besteht aus einer ferritisch-perlitischen Matrix mit einer zufälligen Verteilung von Graphitlamellen mit einem Gesamtvolumenanteil von etwa 6.1%. Nach Schmauder [80] wurde für die Matrix eine isotrope Steifigkeit mit einem Youngschen Modul von $\mathcal{E}_m = 210 \text{ GPa}$, einer Querkontraktion von $\nu_m = 0.288$, einer initialen Fließspannung $\sigma_{F_0}^m = 275 \text{ MPa}$ und einem Verfestigungsparameter $H_m = 0.1 \text{ MPa}$ gewählt. Die Graphiteinschlüsse wurden rein elastisch mit einem Youngschen Modul von $\mathcal{E}_i = 10 \text{ GPa}$ und einer Querkontraktion von $\nu_i = 0.288$ modelliert. Da für die Anwendbarkeit des verwendeten Modells für alle Phasen plastische Materialparameter definiert werden müssen, wurden für die Graphiteinschlüsse eine Fließspannung von $\sigma_{F_0}^i = 10^3 \sigma_{F_0}^m$ und ein Verfestigungsparameter von $H_i = H_m$ verwendet. Das zylindrische Gusseisengebiet und ein Vergleichsgebiet ohne Einschlüsse, das im rechten Inlay der Abbildung 5.2 a) zu sehen ist, wurde in z -Richtung (siehe rechtes Inlay der Abbildung 5.2 a)) mit einer Verschiebung zyklisch belastet. Bei jedem Anstieg der Belastung wurde das mechanische Gleichgewicht $\nabla_x \cdot \sigma = \mathbf{0}$ sichergestellt. Da bei diesen Simulationsstudien die mechanischen treibenden Kräfte zur Phasenumwandlung keine Rolle spielen, wird der Einfachheit halber bei der Berechnung der Spannungen das VT-Homogenisierungsschema (4.1) verwendet.

Die resultierenden Spannungs-Dehnungs-Diagramme beider untersuchten Gebiete sind in Abbildung 5.2 a) dargestellt. Erwartungsgemäß resultiert für das Gebiet ohne Einschlüsse ein lineares Verhalten im elastischen Bereich mit einer linearen Verfestigung bei der Plastifizierung. Das Spannungs-Dehnungs-Diagramm des Gusseisengebietes weicht bereits im elastischen Bereich von dem idealen Verhalten ab. Der Grund dafür sind die lokalen Spannungsspitzen, die im Bereich der Graphiteinschlüsse entstehen. Diese Spannungsspitzen führen zu lokaler Plastifizierung, wie im linken Inlay der Abbildung 5.2 a) anhand einer Momentaufnahme der akkumulierten plastischen Dehnung $\bar{\epsilon}_{\text{pl}}$ zu erkennen ist. Entsprechend beeinflussen diese lokalen Plastifizierungseffekte das gesamte Spannungs-Dehnungs-Diagramm des Gusseisengebietes.

Um den Einfluss der Einschlüsse genauer zu analysieren, wurden Gebiete mit unterschiedlichen Verteilungen der Einschlüsse, die in den Inlays der Abbildung 5.2 b) dargestellt sind, generiert. Die Gebietsgröße, die Volumenfraktion der Einschlüsse, die verwendeten Randbedingungen und die Materialparameter für die Matrix und die Einschlüsse entsprechen dem letzten Simulationsbeispiel. Die zugehörigen Spannungs-Dehnungs-Diagramme zu den entsprechenden Mikrostrukturen sind in Abbildung 5.2 b) dargestellt. Obwohl als Materialmodell das Prandtl-Reuss-Modell (siehe Abschnitt 5.2) verwendet wurde, das zu einem sprunghaften Übergang zwischen den elastischen

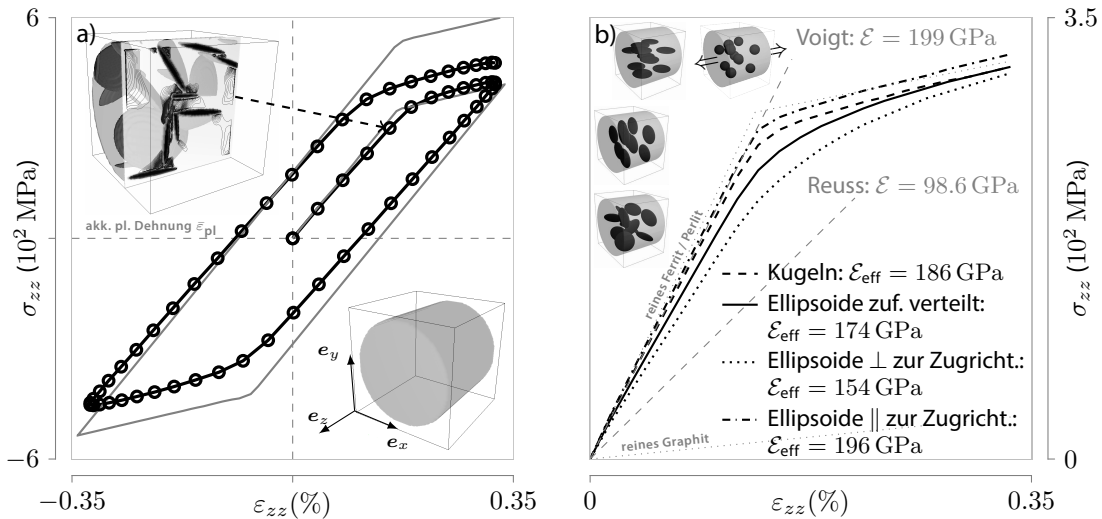


Abbildung 5.2.: Einfluss der Inhomogenitäten auf effektive mechanische Eigenschaften: a) Spannungsdehnungsdiagramme zyklischer Zugversuche eines Simulationsgebietes mit und ohne Inhomogenitäten und b) Einfluss der Form und Orientierung der Inhomogenitäten auf die mechanischen Eigenschaften. In a) sind zusätzlich die Isolinien der akkumulierten plastischen Dehnung $\bar{\varepsilon}_{pl}$ für eine Schnittebene am Anfang des plastischen Fließens dargestellt.

und plastischen Bereichen führen sollte, ist für alle untersuchten Gebiete ein kontinuierlicher Übergang erkennbar. Der Grund sind die bereits angesprochenen lokalen Plastifizierungen an den Einschlüssen. Der Einfluss der Einschlüsse und sogar die Orientierung der Einschlüsse zur Zugbelastung wirkt sich bereits im elastischen Bereich aus. Abhängig von der Orientierung der Einschlüsse ändert sich der effektive Youngsche Modul $\mathcal{E}_{eff} = 196$ GPa. Die größte Veränderung erfährt das Gebiet mit orthogonal zur Zugrichtung orientierten Einschlüssen, da in diesem Fall die Ausbildung der Spannungsspitzen am höchsten ausgeprägt ist. Entsprechend haben die Einschlüsse, die parallel zur Zugrichtung orientiert sind, den kleinsten Einfluss auf den effektiven Youngschen Modul $\mathcal{E}_{eff} = 186$ GPa. Zum Vergleich sind in Abbildung 5.2 b) die Voigt- und Reuss-Grenzen (siehe z. B. [78]) eingezeichnet. Es ist deutlich zu erkennen, dass die resultierten Spannungs-Dehnungs-Diagramme stark von diesen theoretischen Approximationen abweichen. Lediglich bei den Gebieten mit orthogonal zur Zugrichtung orientierten Einschlüssen und kreisförmigen Einschlüssen ist eine Vergleichbarkeit mit der Voigt-Grenze zu erkennen.

Damit ist gezeigt, dass das in Abschnitt 5.2 vorgestellte Modell zur Untersuchung von effektiven mechanischen Eigenschaften von Materialien gut geeignet ist. Allerdings wurden bei diesen Simulationsbeispielen sehr unterschiedliche plastische Materialparameter verwendet. Diese führen bei dem verwendeten Modell zu Verzerrungen im Übergangsbereich, was im Unterabschnitt 5.3 gezeigt wurde. Bei der Berechnung von effektiven Materialparametern haben diese Abweichungen einen geringen Einfluss, da die Volumenfraktion des Übergangsbereiches gering ist. Werden allerdings zusätzliche Phasenumwandlungsprozesse untersucht, so haben diese Verzerrungen einen großen Einfluss auf die mechanischen treibenden Kräfte und die effektiven Grenzflächenenergien (vgl. Abschnitt 4.2). Daher sollte bei der Untersuchung von Phasenumwandlungsprozessen im elasto-plastischen Materialien das Modell aus Abschnitt 5.1 verwendet werden.

6

Mechanisches Multiphasenfeldmodell für finite Deformationen

In Kapitel 4 wurde ein mechanisches Phasenfeldmodell vorgestellt, das die Sprungbedingungen erfüllt und die Konfigurationskräfte bei der Evolution der Ordnungsparameter exakt abbildet. Damit ist die Basis für die Modellierung mikro- und makromechanischer Prozesse, bei denen die mechanischen Konfigurationskräfte berücksichtigt werden müssen, geschaffen. Typische mikromechanische Beispiele wären die Untersuchung der Mikrostrukturevolution bei Dualphasen-, TRIP- (aus dem Engl. *TRansformation Induced Plasticity*) oder TWIP-Stählen (aus dem Engl. *TWinning Induced Plasticity*). Für die Modellierung dieser Prozesse ist die Abbildung martensitischer Phasenumwandlungsprozesse notwendig. In der Literatur ist die Modellierung martensitischer Phasenumwandlungen mit geometrisch linearen Ansätzen weit verbreitet [68]. Die starke Verzerrung der martensitischen Phase erfordert allerdings die Berücksichtigung einer Eigendehnung, die im Bereich der finiten Deformationen liegt [70]. Daher erfordert eine quantitative Modellierung der martensitischen Phasenumwandlung die Berücksichtigung von finiten Deformationen. Ein umfassender Überblick der Modellierungsansätze mit der Phasenfeldmethode unter Berücksichtigung der finiten Deformationen ist in [81, 82] zu finden. Ein mit mechanischen Sprungbedingungen konsistentes und auf finite Deformationen ausgelegtes Modell für die Berechnung der Spannungen im diffusen Übergangsbereich wurde erstmals von Mosler et al. [83] vorgestellt. Allerdings ist das Modell auf zwei Phasen beschränkt. Eine Erweiterung des verwendeten Variationsansatzes für die Berechnung der Spannungen und der treibenden Kräfte für Anwendungen in polykristallinen Systemen fehlt bis dato in der Literatur.

Nach einer Verallgemeinerung des Multiphasenfeldmodells von Nestler et al. [13] (siehe Kapitel 3.1) für Betrachtungen in der Eulerschen Darstellung wird im Abschnitt 6.2 eine Methode zur Spannungsberechnung vorgestellt, die unabhängig von der konstitutiven Gleichung in Multiphasensystemen angewendet werden kann. Im nachfolgenden Abschnitt wird diese Methode sowohl anhand theoretisch berechneter Spannungen in Zweiphasengebieten als auch in Multiphasensystemen anhand scharfer Grenzflächenlösungen validiert. In Abschnitt 6.4 werden die mechanischen Konfigurationskräfte im Phasenfeldkontext berechnet und eine Formulierung der treibenden Kräfte für Anwendungen in Multiphasensystemen hergeleitet. Im letzten Abschnitt dieses Kapitels wird

die Anwendbarkeit des Modells in Multiphasensystemen anhand eines Simulationsbeispiels zur martensitischen Transformation demonstriert.

6.1. Das Multiphasenfeldmodell in der Eulerschen Darstellung

Das Multiphasenfeldmodell wurde in Abschnitt 3.1 eingeführt. Dabei wurde die Evolutionsgleichung der Ordnungsparameter (3.17) in der Lagrangeschen Darstellung hergeleitet. Diese Formulierung der Evolutionsgleichung garantiert, dass die Konfigurationskräfte der Grenzflächenenergie exakt abgebildet werden (siehe Abschnitt (3.1.4)). Allerdings ist die Formulierung der Variationsableitung (3.13) und der Evolutionsgleichung (3.17) mit Bezug auf die Referenzplatzierung formuliert. Unter der Annahme der infinitesimalen Deformationen bzw. unter der Verwendung der Lagrange-schen Darstellung, können diese Formulierungen direkt verwendet werden. Allerdings müssten in diesem Fall die zusätzlich betrachteten physikalischen Felder ebenfalls in der Lagrangeschen Darstellung vorliegen. Daher ist es bei manchen Problemstellungen von Vorteil, die Berechnungen in der Eulersche Darstellung durchzuführen. Hierzu muss die Allen-Cahn-Gleichung (3.17) in die Eulersche Darstellung transformiert werden.

Aus Gründen der Übersicht wird zunächst der Beitrag der Gradientenenergiedichte (3.4) der Evolutionsgleichung betrachtet. Für die Ableitung der Gradientenenergiedichte nach den Gradienten der Ordnungsparameter folgt

$$\begin{aligned} \frac{\partial a(\boldsymbol{\varphi}, \nabla_X \boldsymbol{\varphi})}{\partial \nabla_X \varphi_\alpha} &= \sum_{\beta \neq \alpha} -2\gamma_{\alpha\beta} \mathbf{Q}_{\alpha\beta} \varphi_\beta = \sum_{\beta \neq \alpha} -2\gamma_{\alpha\beta} (\varphi_\alpha \nabla_X \varphi_\beta - \varphi_\beta \nabla_X \varphi_\alpha) \varphi_\beta \\ &= \sum_{\beta \neq \alpha} -2\gamma_{\alpha\beta} \mathbf{F}^\top (\varphi_\alpha \nabla_x \varphi_\beta - \varphi_\beta \nabla_x \varphi_\alpha) \varphi_\beta = \sum_{\beta \neq \alpha} -2\gamma_{\alpha\beta} \mathbf{F}^\top \mathbf{q}_{\alpha\beta} \varphi_\beta \\ &= \mathbf{F}^\top \frac{\partial a_E(\boldsymbol{\varphi}, \nabla_x \boldsymbol{\varphi})}{\partial \nabla_x \varphi_\alpha}, \end{aligned}$$

mit $\mathbf{q}_{\alpha\beta} = \varphi_\alpha \nabla_x \varphi_\beta - \varphi_\beta \nabla_x \varphi_\alpha$ als generalisierter α - β -Gradient bezüglich der momentanen Platzierung und der Gradientenenergiedichte in der Eulerschen Darstellung

$$a_E(\boldsymbol{\varphi}, \nabla_x \boldsymbol{\varphi}) = \sum_{\alpha, \beta > \alpha} \gamma_{\alpha\beta} |\mathbf{q}_{\alpha\beta}|^2.$$

Damit ergibt sich für den Divergenzanteil der Variationsableitung (3.13)

$$\begin{aligned} \nabla_X \cdot \frac{\partial a(\boldsymbol{\varphi}, \nabla_X \boldsymbol{\varphi})}{\partial \nabla_X \varphi_\alpha} &= \nabla_X \cdot \left(\mathbf{F}^\top \frac{\partial a_E(\boldsymbol{\varphi}, \nabla_x \boldsymbol{\varphi})}{\partial \nabla_x \varphi_\alpha} \right) = \nabla_X \cdot \left(J \mathbf{F}^{-1} \frac{1}{J} \mathbf{F} \mathbf{F}^\top \frac{\partial a_E(\boldsymbol{\varphi}, \nabla_x \boldsymbol{\varphi})}{\partial \nabla_x \varphi_\alpha} \right) \quad (6.1) \\ &= \nabla_X \cdot \left(J \mathbf{F}^{-1} \frac{1}{J} \mathbf{V}^2 \frac{\partial a_E(\boldsymbol{\varphi}, \nabla_x \boldsymbol{\varphi})}{\partial \nabla_x \varphi_\alpha} \right) \\ &= (\nabla_X \cdot (J \mathbf{F}^{-1})) \cdot \frac{1}{J} \mathbf{V}^2 \frac{\partial a_E(\boldsymbol{\varphi}, \nabla_x \boldsymbol{\varphi})}{\partial \nabla_x \varphi_\alpha} + J \mathbf{F}^{-1} \cdot \nabla_X \left(\frac{1}{J} \mathbf{V}^2 \frac{\partial a_E(\boldsymbol{\varphi}, \nabla_x \boldsymbol{\varphi})}{\partial \nabla_x \varphi_\alpha} \right) \\ &= \mathbf{F}^\top \nabla_x \cdot (J \mathbf{F}^{-1}) \cdot \frac{1}{J} \mathbf{V}^2 \frac{\partial a_E(\boldsymbol{\varphi}, \nabla_x \boldsymbol{\varphi})}{\partial \nabla_x \varphi_\alpha} + J \mathbf{F}^{-1} \cdot \mathbf{F}^\top \nabla_x \left(\frac{1}{J} \mathbf{V}^2 \frac{\partial a_E(\boldsymbol{\varphi}, \nabla_x \boldsymbol{\varphi})}{\partial \nabla_x \varphi_\alpha} \right). \end{aligned}$$

Wegen der Piola-Identität (siehe z. B. [15])

$$\nabla_x \cdot (JF^{-1}) = \nabla_x \cdot (JIF^{-1}) = \nabla_x \cdot (\text{cof}(F)^T FF^{-1}) = \nabla_x \cdot \text{cof}(F)^T = 0$$

verschwindet der erste resultierende Term aus Gleichung (6.1). Vorausgesetzt, dass die Gradientenenergiedichte der einzige Beitrag der Energiedichte $f_E(\boldsymbol{\varphi}, \nabla_x \boldsymbol{\varphi}, \dots)$ ist, der von den Gradienten der Ordnungsparameter abhängt, folgt für den Divergenzanteil der Variationsableitung

$$\begin{aligned} \nabla_X \cdot \frac{\partial a(\boldsymbol{\varphi}, \nabla_X \boldsymbol{\varphi})}{\partial \nabla_X \varphi_\alpha} &= JF^{-1} \cdot F^T \nabla_x \cdot \left(\frac{1}{J} V^2 \frac{\partial a_E(\boldsymbol{\varphi}, \nabla_x \boldsymbol{\varphi})}{\partial \nabla_x \varphi_\alpha} \right) = JFF^{-1} \cdot \nabla_x \cdot \left(\frac{1}{J} V^2 \frac{\partial a_E(\boldsymbol{\varphi}, \nabla_x \boldsymbol{\varphi})}{\partial \nabla_x \varphi_\alpha} \right) \quad (6.2) \\ &= J \nabla_x \cdot \left(\frac{1}{J} V^2 \frac{\partial a_E(\boldsymbol{\varphi}, \nabla_x \boldsymbol{\varphi})}{\partial \nabla_x \varphi_\alpha} \right) = J \nabla_x \cdot \left(\frac{1}{J} V^2 \frac{\partial f_E(\boldsymbol{\varphi}, \nabla_x \boldsymbol{\varphi}, \dots)}{\partial \nabla_x \varphi_\alpha} \right). \end{aligned}$$

Entsprechend ergibt sich für die Ableitung der Gradientenenergiedichte (3.4) nach den jeweiligen Ordnungsparametern in der Eulerschen Darstellung

$$\begin{aligned} \frac{\partial a(\boldsymbol{\varphi}, \nabla_X \boldsymbol{\varphi})}{\partial \varphi_\alpha} &= \sum_{\beta \neq \alpha} 2\gamma_{\alpha\beta} \nabla_X \varphi_\beta \cdot \mathbf{Q}_{\alpha\beta} = \sum_{\beta \neq \alpha} 2\gamma_{\alpha\beta} (F^T \nabla_x \varphi_\beta) \cdot F^T \mathbf{q}_{\alpha\beta} \quad (6.3) \\ &= \sum_{\beta \neq \alpha} 2\gamma_{\alpha\beta} (V^2 \nabla_x \varphi_\beta) \cdot \mathbf{q}_{\alpha\beta}. \end{aligned}$$

Vorausgesetzt, dass die übrigen Terme des Funktionals (3.3) frei von Gradienten sind, ändern sich ihre Beiträge in der Euler-Lagrange-Gleichung (3.13) durch die Transformation in die Eulersche Darstellung nicht. Allerdings muss hierbei sichergestellt sein, dass die benötigten physikalischen Feldgrößen in der Eulerschen Darstellung vorliegen. Unter Verwendung von Gleichung (2.4) für die Transformation der zeitlichen Ableitung resultiert für die Evolutionsgleichung der Ordnungsparameter in der Eulerschen Darstellung

$$\frac{\partial \varphi_\alpha(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \nabla_x \varphi_\alpha(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{v} = -\frac{1}{N} \sum_{\beta \neq \alpha} \left(\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \varphi_\alpha} - \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \varphi_\beta} \right), \quad \forall \varphi_\alpha, \alpha = 1, \dots, N.$$

Die Beiträge der Gradientenenergiedichte in der Variationsableitung (3.13) müssen entsprechend durch Gleichung (6.2) und (6.3) ersetzt werden.

6.2. Berechnung der Spannungen im Übergangsbereich unter Berücksichtigung der Sprungbedingungen

In Abschnitt 4.3 wurde eine Methode zur Berechnung der mechanischen treibenden Kräfte und Spannungen im Übergangsbereich für infinitesimale Deformationen vorgestellt. Die Voraussetzung dieser Methodik ist, dass ein Potential aus kontinuierlichen Variablen existiert. Diese Variablen müssen ein leistungskonjugiertes Paar ergeben und in der verwendeten konstitutiven Gleichung müssen diese Variablen einen linearen Zusammenhang aufweisen. Unter Berücksichtigung der mechanischen Sprungbedingungen (2.49) bzw. in der Eulerschen Darstellung (2.24) und (2.33) sind die kontinuierlichen Variablen die Normalbeiträge des ersten Piola-Kirchhoffschen Spannungstensors \mathbf{P}_{n_r} bzw. der Cauchyschen Spannung $\boldsymbol{\sigma}_n$ und die Tangentialbeiträge des Deformationsgradienten

\mathbf{F}_{t_r} . Es lässt sich zeigen (siehe Gl. (A.1) und (A.2)), dass die Tangentialbeiträge des rechten Cauchy-Green-Tensors \mathbf{C}_{t_r} und die Tangentialbeiträge der Greenschen Dehnung \mathbf{E}_{t_r} ebenfalls kontinuierlich sind. Für Dehnungen mit nichtlinearen Beiträgen in \mathbf{C} ist dies im Allgemeinen nicht der Fall. Damit sind die möglichen Dehnungskandidaten für die Bildung der konstitutiven Gleichung auf die Greensche Dehnung \mathbf{E} beschränkt. Das dazugehörige leistungskonjugierte Spannungsmaß ist die zweite Piola-Kirchhoffsche Spannung \mathbf{S} . Allerdings ist \mathbf{S} eine sprungbehaftete, diskontinuierliche Variable und kann nicht ohne weitere Annahmen für die Formulierung des Potentials verwendet werden. Trotz dieser Diskrepanz wird im Anhang in Abschnitt (A.3) die Verallgemeinerung der Methode 4.3 auf finite Deformationen der Vollständigkeit halber vorgestellt. Dabei sei angemerkt, dass diese Methode nur beschränkt anwendbar ist.

Eine vom Materialgesetz unabhängige Formulierung für die Berechnung der Spannungen im Übergangsbereich wird in diesem Abschnitt vorgestellt. Die Kernpunkte sind dabei die Berechnung der phasenanteiligen Deformationen und entsprechend der phasenanteiligen Spannungen. In den folgenden Teilabschnitten werden diese phasenanteiligen Größen zunächst in einem Übergangsbereich zweier Phasen und anschließend in einem mehrphasigen Übergangsbereich berechnet. Sind die phasenanteiligen Spannungen bekannt, so können diese gegebenenfalls zur Berechnung der plastischen Dehnungen verwendet und anschließend für die Impulsbilanz homogenisiert werden. Da die folgenden Methoden die Erfüllung der Sprungbedingungen garantieren und die sprungbehafteten Größen volumetrisch gemittelt werden dürfen, wie es in Abschnitt 4.2 besprochen wurde, kann die Gesamtspannung folgendermaßen berechnet werden

$$\mathbf{P} = \sum_{\alpha} \mathbf{P}^{\alpha} h^{\alpha}(\boldsymbol{\varphi}). \quad (6.4)$$

Dabei sind \mathbf{P}^{α} die phasenanteiligen Beiträge des ersten Piola-Kirchhoffschen Spannungstensors und $h^{\alpha}(\boldsymbol{\varphi})$ ist eine Interpolationsfunktion (3.9), welche die Volumenfraktion der jeweiligen Phasen widerspiegelt. Die Evolution der Bewegungsfunktion $\boldsymbol{\chi}(\mathbf{X}, t)$ ergibt sich aus der Impulsbilanz (2.21)

$$\rho_0 \ddot{\boldsymbol{\chi}} = \rho_0 \mathbf{b}_0 + \nabla_{\mathbf{X}} \cdot \mathbf{P}$$

in der Lagrangeschen Darstellung. Dabei ist ρ_0 die Massendichte und $\rho_0 \mathbf{b}_0$ die Volumenkraftdichte in der Referenzplatzierung.

6.2.1. Spannungsberechnung im Übergangsbereich zweier Phasen

An einem Übergang zweier physikalisch abgetrennter Bereiche repräsentieren die Ordnungsparameter φ_{α} und φ_{β} bzw. deren Interpolationsfunktionen $h^{\alpha}(\boldsymbol{\varphi})$ und $h^{\beta}(\boldsymbol{\varphi})$ die jeweiligen Volumenfraktionen in dem Referenzkonfigurationssystem. In diesem Übergangsbereich müssen die Sprungbedingungen (2.49) und (2.33) erfüllt werden. Da die Sprungbedingungen bezüglich der Referenzkonfiguration formuliert sind, wird entsprechend der Normalenvektor in der Referenzkonfiguration definiert

$$\mathbf{n}_r(\nabla_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\varphi}) = \frac{\nabla_{\mathbf{X}} \varphi_{\alpha}}{|\nabla_{\mathbf{X}} \varphi_{\alpha}|} = - \frac{\nabla_{\mathbf{X}} \varphi_{\beta}}{|\nabla_{\mathbf{X}} \varphi_{\beta}|} \hat{=} \mathbf{n}_r^s. \quad (6.5)$$

Damit folgt für die Aufspaltung des Deformationsgradienten in Normal- und Tangentialbeitrag

$$\mathbf{F} = \mathbf{F} \left(\mathbf{n}_r \otimes \mathbf{n}_r + \underbrace{(\mathbf{t}_r \otimes \mathbf{t}_r + \mathbf{s}_r \otimes \mathbf{s}_r)}_{\mathbf{I} - \mathbf{n}_r \otimes \mathbf{n}_r} \right) = \underbrace{\mathbf{F}(\mathbf{n}_r \otimes \mathbf{n}_r)}_{=: \mathbf{F}_{n_r}} + \underbrace{\mathbf{F}(\mathbf{I} - \mathbf{n}_r \otimes \mathbf{n}_r)}_{=: \mathbf{F}_{t_r}}. \quad (6.6)$$

Die Vektoren \mathbf{n}_r , \mathbf{t}_r und \mathbf{s}_r spannen eine orthonormal Basis $\mathbf{B}_r = \{\mathbf{n}_r, \mathbf{t}_r, \mathbf{s}_r\}$ auf, wobei $\mathbf{n}_r \cdot \mathbf{t}_r = \mathbf{n}_r \cdot \mathbf{s}_r = \mathbf{t}_r \cdot \mathbf{s}_r = 0$ gilt. Der Tangentialbeitrag \mathbf{F}_{t_r} ist am Übergang zweier Phasen sprungfrei und für den Normalbeitrag kann die Volumenmittelung $\mathbf{F}_{n_r} = \mathbf{F}_{n_r}^\alpha h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}) + \mathbf{F}_{n_r}^\beta h^\beta(\boldsymbol{\varphi})$ angewendet werden, wie in Abschnitt 4.2 besprochen wurde. Daher kann die Volumenmittelung auf den gesamten Deformationsgradienten ausgeweitet werden und es folgt für den Deformationsgradienten

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^\alpha h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}) + \mathbf{F}^\beta h^\beta(\boldsymbol{\varphi}). \quad (6.7)$$

Mit dieser volumetrischen Mittelung des Deformationsgradienten und der Hadamardschen Bedingung $[[\mathbf{F}]] = \mathbf{F}^\alpha - \mathbf{F}^\beta = \mathbf{a} \otimes \mathbf{n}_r$ können die phasenanteiligen Deformationen folgendermaßen ausgedrückt werden

$$\mathbf{F}^\alpha(\mathbf{a}) = \mathbf{F} + h^\beta(\boldsymbol{\varphi})\mathbf{a} \otimes \mathbf{n}_r, \quad \mathbf{F}^\beta(\mathbf{a}) = \mathbf{F} - h^\alpha(\boldsymbol{\varphi})\mathbf{a} \otimes \mathbf{n}_r. \quad (6.8)$$

Der Deformationsgradient $\mathbf{F}(\boldsymbol{\varphi}, \mathbf{X}, \mathbf{c}(\mathbf{X}), T(\mathbf{X}), \boldsymbol{\tau}(\mathbf{X}))$ ist im Allgemeinen von elastischen Deformationen $\mathbf{F}_{el}(\mathbf{X})$, von phasenspezifischen konstanten Deformationen $\mathbf{F}_0(\mathbf{X})$, von konzentrations- oder temperaturabhängigen Deformationen $\mathbf{F}_c(\boldsymbol{\varphi}, \mathbf{c}(\mathbf{X}))$ bzw. $\mathbf{F}_T(\boldsymbol{\varphi}, T(\mathbf{X}))$ oder von plastischen Deformationen $\mathbf{F}_{pl}(\boldsymbol{\varphi}, \mathbf{X}, \boldsymbol{\tau}(\mathbf{X}))$ abhängig, wobei $\boldsymbol{\tau}(\mathbf{X})$ der Kirchhoffsche Spannungstensor ist. Unter Verwendung der üblichen multiplikativen Zerlegung des Deformationsgradienten [84] werden die nicht elastischen Anteile in einem Beitrag $\tilde{\mathbf{F}}(\mathbf{F}_0, \mathbf{F}_c, \mathbf{F}_T, \mathbf{F}_{pl})$ gesammelt und es folgt

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_{el}\tilde{\mathbf{F}}. \quad (6.9)$$

Wird ein lokaler materieller Punkt vorbelastet, so verschwindet nach einer Entlastung des Materials der elastische Anteil der Deformation \mathbf{F}_{el} und der unbelastete Zustand wird durch $\tilde{\mathbf{F}}$ charakterisiert. Dieser lokale spannungsfreie Zustand wird als Zwischenplatzierung bezeichnet [16].

Entsprechend den verwendeten Materialgesetzen sind mit Kenntnis der phasenanteiligen elastischen Deformationen $\mathbf{F}_{el}^\alpha = \mathbf{F}^\alpha(\tilde{\mathbf{F}}^\alpha)^{-1}$ auch die phasenanteiligen Spannungen bekannt. Im Folgenden wird beispielhaft das St. Venant-Kirchhoff-Gesetz (2.45) für die Berechnung der Spannungen angesetzt. Damit sind $\mathbf{S}^\alpha = \mathbf{C}^\alpha[\mathbf{E}_{el}^\alpha]$ und $\mathbf{S}^\beta = \mathbf{C}^\beta[\mathbf{E}_{el}^\beta]$ Funktionen der phasenanteiligen Green'schen Dehnungen $\mathbf{E}_{el}^\alpha = ((\mathbf{F}_{el}^\alpha)^\top \mathbf{F}_{el}^\alpha - \mathbf{I})/2$ bzw. $\mathbf{E}_{el}^\beta = ((\mathbf{F}_{el}^\beta)^\top \mathbf{F}_{el}^\beta - \mathbf{I})/2$. Nach Gleichung (2.49) verschwindet der Sprung von \mathbf{P} in Normalenrichtung. Daher muss die folgende Bedingung erfüllt werden

$$\begin{aligned} \mathbf{P}^\alpha \mathbf{n}_r &= \mathbf{P}^\beta \mathbf{n}_r \\ \mathbf{F}^\alpha \mathbf{S}^\alpha \mathbf{n}_r &= \mathbf{F}^\beta \mathbf{S}^\beta \mathbf{n}_r \\ \mathbf{F}^\alpha \left(\mathbf{C}^\alpha \left[(\mathbf{F}_{el}^\alpha)^\top \mathbf{F}_{el}^\alpha - \mathbf{I} \right] \right) \mathbf{n}_r &= \mathbf{F}^\beta \left(\mathbf{C}^\beta \left[(\mathbf{F}_{el}^\beta)^\top \mathbf{F}_{el}^\beta - \mathbf{I} \right] \right) \mathbf{n}_r, \end{aligned} \quad (6.10)$$

damit die resultierenden Spannungen der Sprungbedingung (2.49) genügen. Mit der Definition der phasenanteiligen Deformationen nach Gleichung (6.8) ergibt die Bedingung (6.10) ein Gleichungssystem mit drei kubischen Gleichungen für die Komponenten von \mathbf{a} . Diese unbekanntenen Größen können beispielsweise mit einem Newtonschen Verfahren (siehe z. B. [19]) eindeutig bestimmt werden. Der dazugehörige Newtonsche Schritt für den Iterationsschritt $n + 1$ ist folgendermaßen definiert

$$\mathbf{a}^{n+1} = \mathbf{a}^n - \left(\frac{\partial \mathbf{g}(\mathbf{a}^n)}{\partial \mathbf{a}^n} \right)^{-1} \mathbf{g}(\mathbf{a}^n),$$

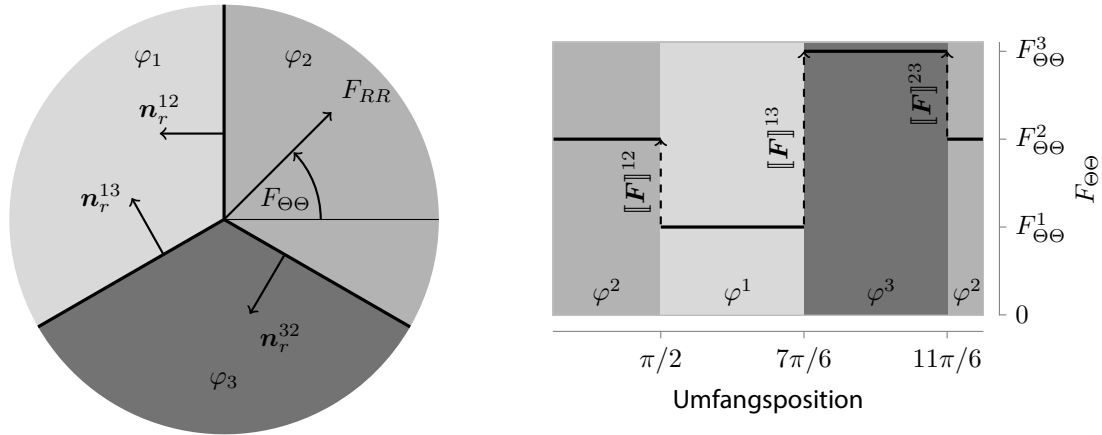


Abbildung 6.1.: Sprung des Deformationsgradienten um einen Tripelpunkt. Links ist eine Tripelpunktregion mit den drei Phasen φ_1 , φ_2 und φ_3 skizziert. Rechts ist der $F_{\Theta\Theta}$ -Anteil des Deformationsgradienten in Umfangsrichtung, in infinitesimaler Entfernung, um den Tripelpunkt herum dargestellt. Dabei wird angenommen, dass sich in dieser Entfernung $F_{\Theta\Theta}$ innerhalb einer Phase nicht ändert.

wobei der Tensor erster Stufe $\mathbf{g}(\mathbf{a})$ das Gleichungssystem (6.10) repräsentiert und folgende Gestalt hat

$$\mathbf{g}(\mathbf{a}) = \mathbf{P}^\alpha(\mathbf{a})\mathbf{n}_r - \mathbf{P}^\beta(\mathbf{a})\mathbf{n}_r.$$

Mit der Kenntnis von \mathbf{a} sind auch die phasenanteiligen Deformationen gemäß Gleichung (6.8) bekannt und die phasenanteiligen Spannungen können über die zugrundeliegenden Konstitutivgleichungen berechnet werden. Dabei wird garantiert, dass sowohl die Hadamardsche Bedingung (2.33) als auch die Kräftebilanz (2.49) an den Grenzflächen erfüllt werden. Ein ähnliches Verfahren wurde von Kabel et al. [85] zur analytische Berechnung der Deformationen in einem St. Vernant-Kirchhoff Laminat vorgestellt.

6.2.2. Spannungsberechnung in einem Multiphasensystem

Bevor eine allgemeine Methodik für die Spannungsberechnung in Multiphasensystemen vorgestellt wird, wird die Problematik anhand einer Tripelpunktregion, welche in Abbildung 6.1 a) skizziert ist, diskutiert. Betrachtet werden drei Phasen mit den jeweiligen Ordnungsparametern φ_1 , φ_2 und φ_3 , deren Grenzflächen sich vom Tripelpunkt aus radial ausdehnen. Im scharfen Grenzflächenkontext handelt es sich bei einem Tripelpunkt um eine Singularität, da die Sprungbedingungen (2.49) und (2.33) für die drei Dualinteraktionen nicht gleichzeitig erfüllt werden können. Im Phasenfeldkontext allerdings wird der Tripelpunkt zu einer Region in der die drei Phasen, die in die jeweiligen Volumenfraktionen aufgeteilt sind, koexistieren. Im Gegensatz zur Betrachtung im scharfen Grenzflächenkontext kann zwischen den Phasenpaaren in dieser Region ein Normalenvektor bestimmt werden. Damit ergeben sich die drei Hadamardschen Bedingungen für die jeweiligen Paare

$$[[\mathbf{F}]]^{12} = \mathbf{a}^{12} \otimes \mathbf{n}_r^{12}, \quad [[\mathbf{F}]]^{13} = \mathbf{a}^{13} \otimes \mathbf{n}_r^{13}, \quad [[\mathbf{F}]]^{23} = \mathbf{a}^{23} \otimes \mathbf{n}_r^{23}. \quad (6.11)$$

Dabei sind $\mathbf{a}^{\alpha\beta}$ die Sprünge der phasenanteiligen Deformationsgradienten $[[\mathbf{F}]]^{\alpha\beta} = (\mathbf{F}^\alpha - \mathbf{F}^\beta)$ an der α - β -Grenzfläche in die entsprechende $\mathbf{n}_r^{\alpha\beta}$ -Richtung. Die Möglichkeiten zur Berechnung

eines entsprechenden Normalenvektors $\tilde{\mathbf{n}}_r^{\alpha\beta}$ zweier Phasen in einem Multiphasenbereich wird in Abschnitt 6.2.3 diskutiert. Wird die Zweite der Gleichungen (6.11) nach \mathbf{F}^1 aufgelöst und in die erste Gleichung eingesetzt, so folgt $(\mathbf{F}^2 - \mathbf{F}^3) = \mathbf{a}^{13} \otimes \mathbf{n}_r^{13} - \mathbf{a}^{12} \otimes \mathbf{n}_r^{12}$. Durch einen Vergleich mit der Letzten der Gleichungen (6.11), ergibt sich $\mathbf{a}^{23} \otimes \mathbf{n}_r^{23} = \mathbf{a}^{13} \otimes \mathbf{n}_r^{13} - \mathbf{a}^{12} \otimes \mathbf{n}_r^{12}$. Die Dritte der Bedingungen (6.11) ist damit redundant. Dieser Zusammenhang wird auch in Abbildung 6.1 veranschaulicht. Es werden Polarkoordinaten verwendet. Daher sind die sprungbehafteten Deformationen durch die Umfangskomponente $F_{\Theta\Theta}$ charakterisiert. Der Verlauf von $F_{\Theta\Theta}$ in Umgangsrichtung, welcher auf der rechten Seite der Abbildung 6.1 zu sehen ist, unterstreicht die Notwendigkeit der Bedingung

$$[\mathbf{F}]^{23} = [\mathbf{F}]^{13} - [\mathbf{F}]^{12}$$

um die Kontinuität des Deformationsgradienten zu gewährleisten. Damit reduzieren sich die Unbekannten in diesem System auf \mathbf{a}^{12} und \mathbf{a}^{13} .

Wie schon im Zweiphasenfall kann auch hier die volumetrische Mittelung des Deformationsgradienten $\mathbf{F} = \sum_{\alpha} \mathbf{F}^{\alpha} h^{\alpha}(\boldsymbol{\varphi})$ angesetzt werden, da effektiv nur sprunghafte Anteile gemittelt werden. Damit folgt für die phasenanteiligen Deformationen

$$\begin{aligned} \mathbf{F}^1 &= \mathbf{F} + h^2(\boldsymbol{\varphi}) \mathbf{a}^{12} \otimes \mathbf{n}_r^{12} + h^3(\boldsymbol{\varphi}) \mathbf{a}^{13} \otimes \mathbf{n}_r^{13}, \\ \mathbf{F}^2 &= \mathbf{F} + h^1(\boldsymbol{\varphi}) \mathbf{a}^{12} \otimes \mathbf{n}_r^{12} + h^3(\boldsymbol{\varphi}) (\mathbf{a}^{13} \otimes \mathbf{n}_r^{13} - \mathbf{a}^{12} \otimes \mathbf{n}_r^{12}), \\ \mathbf{F}^3 &= \mathbf{F} + h^1(\boldsymbol{\varphi}) \mathbf{a}^{13} \otimes \mathbf{n}_r^{13} + h^2(\boldsymbol{\varphi}) (\mathbf{a}^{13} \otimes \mathbf{n}_r^{13} - \mathbf{a}^{12} \otimes \mathbf{n}_r^{12}). \end{aligned}$$

Dabei wurde ausgenutzt, dass $\mathbf{a}^{\alpha\beta} = \mathbf{a}^{\beta\alpha}$ gelten muss, denn es gilt: $[\mathbf{F}]^{\alpha\beta} = -[\mathbf{F}]^{\beta\alpha}$ und $\mathbf{n}^{\alpha\beta} = -\mathbf{n}^{\beta\alpha}$.

Um die Erfüllung der Sprungbedingung (2.49) zu gewährleisten, kann der Sprung des ersten Piola-Kirchhoffschen Spannungstensors an einer α - β -Grenzfläche auch folgendermaßen formuliert werden

$$[\mathbf{P}]^{\alpha\beta} = \hat{\mathbf{P}}^{\alpha\beta} (\mathbf{I} - \mathbf{n}_r^{\alpha\beta} \otimes \mathbf{n}_r^{\alpha\beta}).$$

Dabei sind $\hat{\mathbf{P}}^{\alpha\beta}$ die Sprünge von \mathbf{P} in die tangentialen Richtungen, die durch den Projektor $\mathbf{I} - \mathbf{n}_r^{\alpha\beta} \otimes \mathbf{n}_r^{\alpha\beta}$ definiert sind. Auf dieselbe Weise wie bei den Deformationsprüngen kann gezeigt werden, dass der Sprung $[\mathbf{P}]^{23} = [\mathbf{P}]^{13} - [\mathbf{P}]^{12}$ redundant wird und durch die anderen Sprünge ausgedrückt werden kann. Damit müssen lediglich die Bedingungen

$$\mathbf{P}^1 \mathbf{n}_r^{12} = \mathbf{P}^2 \mathbf{n}_r^{12} \quad \text{und} \quad \mathbf{P}^1 \mathbf{n}_r^{13} = \mathbf{P}^3 \mathbf{n}_r^{13}$$

erfüllt werden, damit die resultierenden Spannungen den jeweiligen Sprungbedingungen (2.49) genügen.

In einem Multiphasensystem mit N Phasen können theoretisch auch N Phasen in einem Bereich koexistieren. Allerdings haben Kim et al. [75] gezeigt, dass eine Koexistenz von mehr als sechs Phasen in einem lokalen Punkt sehr unwahrscheinlich ist. Daher kann die Anzahl der lokal vorliegenden Phasen durch den LROP-Algorithmus reduziert werden [75, 76]. Zusätzlich werden durch den LROP-Algorithmus die lokal vorliegenden Ordnungsparameter anhand der lokalen Volumenfraktion mit der höchsten beginnend sortiert. Dies erleichtert die folgenden Formulierungen, denn die Phase mit der höchsten Volumenfraktion ist die erste.

Anhand der Tripelpunktregion wurde gezeigt, dass die Anzahl der unbekannt Vektoren $\mathbf{a}^{\alpha\beta}$ in einem materiellen Punkt mit N_l lokal vorliegenden Phasen auf $N_l - 1$ reduziert werden kann. Da die erste Phase bei Verwendung von LROP die höchste Volumenfraktion einnimmt, werden auch bezüglich dieser Phase die unbekannt Vektoren formuliert. Entsprechend sind die unbekannt Vektoren gegeben als

$$\mathbf{a}^{12}, \mathbf{a}^{13}, \dots, \mathbf{a}^{1N_l}. \quad (6.12)$$

Mit der zusätzlichen Information der entsprechenden Normalen, sind die Sprünge des Deformationsgradienten bezüglich \mathbf{F}^1 vollständig definiert und es folgt

$$\mathbf{F}^1 = \mathbf{F} + \sum_{\beta \neq 1} h^\beta(\boldsymbol{\varphi}) \mathbf{a}^{1\beta} \otimes \mathbf{n}_r^{1\beta}.$$

Für die übrigen linear abhängigen Sprünge ergibt sich

$$\mathbf{a}^{\alpha\beta} \otimes \mathbf{n}_r^{\alpha\beta} = \mathbf{a}^{1\beta} \otimes \mathbf{n}_r^{1\beta} - \mathbf{a}^{1\alpha} \otimes \mathbf{n}_r^{1\alpha}, \quad \forall \alpha, \beta = 2, \dots, N_l \quad \text{und} \quad \alpha \neq \beta.$$

Damit können auch die übrigen phasenanteiligen Deformationsgradienten formuliert werden. Eine allgemeine Formulierung für den phasenanteiligen Deformationsgradienten nimmt die folgende Gestalt an

$$\begin{aligned} \mathbf{F}^\alpha &= \mathbf{F} + \sum_{\beta \neq \alpha} h^\beta(\boldsymbol{\varphi}) \mathbf{a}^{\alpha\beta} \otimes \mathbf{n}_r^{\alpha\beta} \\ &= \mathbf{F} + \sum_{\beta \neq \alpha \neq 1} h^\beta(\boldsymbol{\varphi}) \mathbf{a}^{\alpha\beta} \otimes \mathbf{n}_r^{\alpha\beta} - h^1(\boldsymbol{\varphi}) \mathbf{a}^{\alpha 1} \otimes \mathbf{n}_r^{\alpha 1} \\ &= \mathbf{F} + \sum_{\beta \neq \alpha \neq 1} h^\beta(\boldsymbol{\varphi}) \left(\mathbf{a}^{1\beta} \otimes \mathbf{n}_r^{1\beta} - \mathbf{a}^{1\alpha} \otimes \mathbf{n}_r^{1\alpha} \right) + h^1(\boldsymbol{\varphi}) \mathbf{a}^{1\alpha} \otimes \mathbf{n}_r^{1\alpha} \\ &= \mathbf{F} + \sum_{\beta \neq \alpha \neq 1} h^\beta(\boldsymbol{\varphi}) \mathbf{a}^{1\beta} \otimes \mathbf{n}_r^{1\beta} - \sum_{\delta \neq \alpha} h^\delta(\boldsymbol{\varphi}) \mathbf{a}^{1\alpha} \otimes \mathbf{n}_r^{1\alpha}, \quad \forall \alpha = 2, \dots, N_l. \end{aligned} \quad (6.13)$$

Somit sind alle Deformationsgradienten mit den unbekannt Vektoren (6.12) und den entsprechenden Normalen charakterisiert.

Für die Bestimmung der unbekannt Vektoren (6.12) werden die entsprechenden Sprungbedingungen (2.49) verwendet. Das ergibt ein Gleichungssystem mit $N_l - 1$ kubischen Gleichungen für die Komponenten der unbekannt Vektoren, das mit einem Newtonschen Verfahren (siehe z.B. [19]) gelöst werden kann. Hierzu werden sowohl die unbekannt Vektoren als auch die zu erfüllenden Bedingungen in Tupel aneinandergereiht. Für die Unbekannt ergibt sich

$$\hat{\mathbf{a}} = (\mathbf{a}^{12}, \mathbf{a}^{13}, \dots, \mathbf{a}^{1N_l})^\top. \quad (6.14)$$

Entsprechend folgt für das zu lösende Gleichungssystem

$$\hat{\mathbf{g}}(\hat{\mathbf{a}}) = \begin{pmatrix} \mathbf{g}^{12}(\hat{\mathbf{a}}) \\ \mathbf{g}^{13}(\hat{\mathbf{a}}) \\ \vdots \\ \mathbf{g}^{1N_l}(\hat{\mathbf{a}}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{P}^1(\hat{\mathbf{a}}) \mathbf{n}_r^{12} - \mathbf{P}^2(\hat{\mathbf{a}}) \mathbf{n}_r^{12} \\ \mathbf{P}^1(\hat{\mathbf{a}}) \mathbf{n}_r^{13} - \mathbf{P}^3(\hat{\mathbf{a}}) \mathbf{n}_r^{13} \\ \vdots \\ \mathbf{P}^1(\hat{\mathbf{a}}) \mathbf{n}_r^{1N_l} - \mathbf{P}^{N_l}(\hat{\mathbf{a}}) \mathbf{n}_r^{1N_l} \end{pmatrix} = \mathbf{0}. \quad (6.15)$$

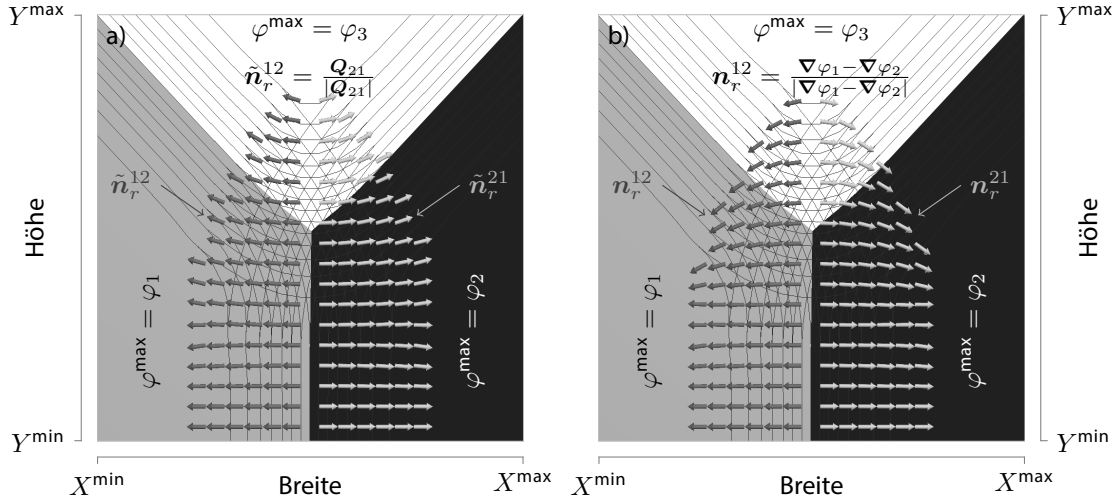


Abbildung 6.2.: Normalenvektor zwischen zwei Phasen in einer Tripelpunktregion. Normalenvektoren a) gemäß Gl. (6.18) und b) gemäß Gl. (6.19) sind gegenübergestellt.

Und der Newtonsche Schritt für den Iterationsschritt $n + 1$ ist gegeben durch

$$\hat{\mathbf{a}}^{n+1} = \hat{\mathbf{a}}^n - (\hat{\mathbf{G}}(\hat{\mathbf{a}}^n))^{-1} \hat{\mathbf{g}}(\hat{\mathbf{a}}^n). \quad (6.16)$$

Ein notwendiger Bestandteil für das Newtonsche Verfahren ist die Koeffizientenmatrix

$$\hat{\mathbf{G}}(\hat{\mathbf{a}}^n) = \frac{\partial \hat{\mathbf{g}}(\hat{\mathbf{a}}^n)}{\partial \hat{\mathbf{a}}^n}, \quad (6.17)$$

die invertiert werden muss. Die Berechnung dieser Koeffizientenmatrix ist im Anhang A.2 aufgeführt.

6.2.3. Berechnung von Grenzflächennormalenvektoren im Multiphasenbereich

Eine der Notwendigkeiten für die Realisierung des vorgestellten Modells in Abschnitt 6.2.2 ist ein eindeutiger Normalenvektor $\mathbf{n}_r^{\alpha\beta}$ zwischen zwei Phasen. In Zweiphasenbereichen ist dieser Normalenvektor mit der Gleichung (6.5) eindeutig definiert. Koexistieren in einem Bereich mehr als zwei Phasen, so definiert der Normalenvektor (6.5), ausgewertet über die Phase φ_α , lediglich die Normale zwischen der Phase φ_α gegenüber allen anderen Phasen. Zur Abgrenzung der einzelnen Dualbeiträge der Grenzflächenenergie wurde in Abschnitt 3.1 ein generalisierter Gradient (3.7) verwendet. Unter Verwendung des generalisierten α - β -Gradienten $\mathbf{Q}_{\alpha\beta}$ nimmt der Normalenvektor die folgende Form an

$$\tilde{\mathbf{n}}_r^{\alpha\beta} = \frac{\mathbf{Q}_{\beta\alpha}}{|\mathbf{Q}_{\beta\alpha}|} = \frac{\varphi_\beta \nabla_X \varphi_\alpha - \varphi_\alpha \nabla_X \varphi_\beta}{|\varphi_\beta \nabla_X \varphi_\alpha - \varphi_\alpha \nabla_X \varphi_\beta|}. \quad (6.18)$$

Eine weitere Möglichkeit ist die Verwendung des Gradienten der Isoflächen bei $\varphi_\alpha = \varphi_\beta$. Damit wird der Normalenvektor zu

$$\mathbf{n}_r^{\alpha\beta} = \frac{\nabla_X \varphi_\alpha - \nabla_X \varphi_\beta}{|\nabla_X \varphi_\alpha - \nabla_X \varphi_\beta|}. \quad (6.19)$$

Beide Berechnungsvorschriften (6.18) und (6.19) führen zu einem eindeutigen Normalenvektor in Multiphasenbereichen und reduzieren sich zur Gleichung (6.5) in den Bereichen einer Zweiphasenkoexistenz. In der Abbildung 6.2 sind beide Normalenvektoren $\tilde{\mathbf{n}}_r^{\alpha\beta}$ und $\mathbf{n}_r^{\alpha\beta}$ in einem Tripelpunktbereich gegenübergestellt. Die wesentlichen erkennbaren Unterschiede sind die entgegengesetzten Abweichungen zur Richtung $\mathbf{e}_X = (1, 0, 0)^\top$. Diese Unterschiede führen zu unwesentlichen Differenzen in den resultierenden Spannungen und Deformationen. In den Simulationsstudien hat sich allerdings gezeigt, dass sich mit der Berechnungsvorschrift (6.19) bei den resultierenden Spannungen und Deformationen glattere Übergänge von Zweiphasen- zu Mehrphasenbereichen ergeben. Daher wird der Normalenvektor $\mathbf{n}_r^{\alpha\beta}$ der Dualinteraktion zwischen der α - und β -Phase in den folgenden Simulationsbeispielen mit der Gleichung (6.19) berechnet.

6.3. Validierung der Spannungsberechnung

Zur Validierung des vorgestellten Modells werden zunächst die eindimensionalen Sonderfälle der seriellen und der parallelen materiellen Kette betrachtet. Anschließend werden die resultierenden Spannungen und Dehnungen mit den theoretischen Vorhersagen von Mai und Singh [65] für eine Platte mit einem Einschluss unter hydrostatischer Zugbelastung verglichen. Zur Validierung der Spannungsberechnung in Bereichen in denen mehr als zwei Phasen koexistieren, werden die resultierenden Spannungen mit den Spannungen aus einer scharfen Grenzflächenberechnungen an einem Quadrupelpunkt verglichen.

6.3.1. Validierung des Modells über eindimensionale Sonderfälle

Ein eindimensionales Gebiet der Breite B mit einem Phasenübergang in der Mitte des Gebietes, das in Abbildung 6.3 zu sehen ist, wird einachsigt belastet. Die Steifigkeiten beider Phasen wurden isotrop und um einen Faktor zehn unterschiedlich gewählt. In Falle der seriellen materiellen Kette wird eine konstante Zugbelastung $\mathbf{P}_0 = (P_0, 0, 0)^\top$ in Richtung der Normalen $\mathbf{n}_r = (1, 0, 0)^\top$ aufgebracht. Im Falle der parallelen materiellen Kette wird das gesamte Gebiet mit konstanter Verschiebung $\mathbf{u}_0 = (0, u_0, 0)^\top$ in tangentialer Richtung zum Interface belastet. Die Sprungbedingung (2.49) wird somit in Falle der seriellen materiellen Kette und die Sprungbedingung (2.33) in Falle der parallelen materiellen Kette direkt über die aufgebrachten Randbedingungen erfüllt. Die resultierenden Verläufe des Normalbeitrags des Deformationsgradienten F_{XX} und des Tangentialbeitrags des ersten Piola-Kirchhofschen Spannungstensors P_{YY} zeigen, dass die sprungbehafteten Größen linear mit der lokalen Volumenfraktion der jeweiligen Phase interpoliert werden. Dies bedeutet, dass das Modell die sprungbehafteten Größen richtig zuordnet und diese gemäß den Gleichungen (6.7) bzw. (6.4) linear mit den Interpolationsfunktionen $h^\alpha(\boldsymbol{\varphi})$ und $h^\beta(\boldsymbol{\varphi})$ interpoliert. Im mittleren Bereich der Abbildung 6.3 sind die phasenanteiligen Deformationen F_{XX}^α und F_{XX}^β bzw. Spannungen P_{YY}^α und P_{YY}^β dargestellt. Diese phasenanteiligen Größen werden innerhalb der Berechnungsmethode vor der Interpolation berechnet und sind im gesamten Übergangsbereich zugänglich. Wie der Abbildung 6.3 zu entnehmen ist, werden diese phasenanteiligen Größen richtig ermittelt und könnten zur Rekonstruktion der scharfen Grenzflächenlösung verwendet werden. Des Weiteren können diese phasenanteiligen Größen zur Berechnung der plastischen Deformation genutzt werden.

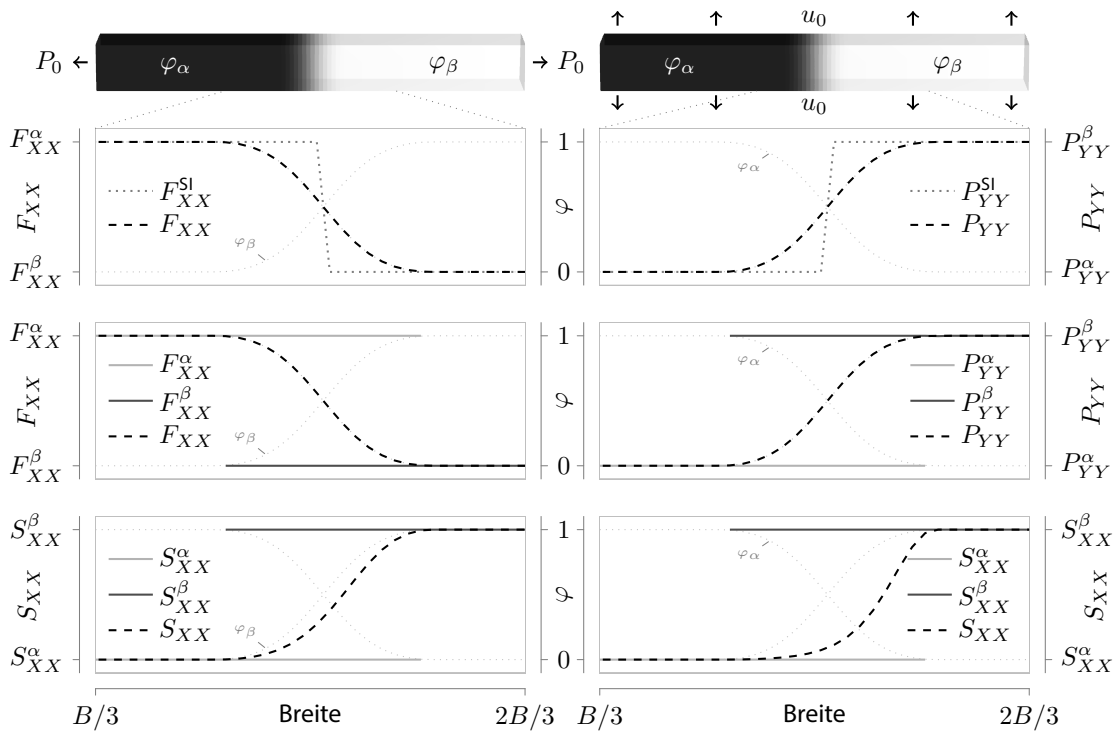


Abbildung 6.3.: Serielle Kette (links) und parallele materielle Kette (rechts). Ein eindimensionales Gebiet der Breite B mit einem Phasenübergang bei $B/2$ wird bei der seriellen materiellen Kette in x -Richtung mit konstanter Spannung P_0 und bei der parallelen materiellen Kette mit konstanter Verschiebung u_0 in y -Richtung belastet. Die resultierenden Verläufe von F_{XX} bzw. P_{YY} werden mit der SI-Lösung in der Anfangsplatzierung verglichen. Im unteren Diagramm sind die phasenanteiligen Größen F_{XX}^α und F_{XX}^β bzw. P_{YY}^α und P_{YY}^β zu erkennen.

Im unteren Bereich der Abbildung 6.3 sind zusätzlich die Verläufe einer Komponente des Normalbeitrags des zweiten Piola-Kirchhoffschen Spannungstensors S_{nr} dargestellt. Die Verläufe verdeutlichen, dass dies eine sprungbehaftete Variable ist und damit die Erweiterung des Modells für infinitesimale Deformationen, das die Kontinuität von S_{nr} voraussetzt und im Anhang A.3 gelistet ist, im Allgemeinen nicht angewendet werden darf.

6.3.2. Vergleich mit theoretischen Vorhersagen

Als zweites Simulationsbeispiel zur Validierung des vorgestellten Modells wird eine unendlich ausgedehnte Platte mit einem Einschluss in der Mitte betrachtet. Dieses Simulationsbeispiel wurde bereits in Abschnitt 4.4.2 zur Validierung des Modells für infinitesimale Deformationen vorgestellt. Verglichen werden die resultierenden Spannungen und Dehnungen mit den theoretischen Vorhersagen von Mai und Singh [65] und den Simulationsergebnissen des Modells für infinitesimale Deformationen, das in Abschnitt 4.3 zu finden ist. Um die Vergleichbarkeit zu gewährleisten, wurde die angebrachte Belastung entsprechend sehr klein gewählt.

Auf der linken Seite der Abbildung 6.4 ist der Simulationsaufbau dargestellt. Ein zweidimensiona-

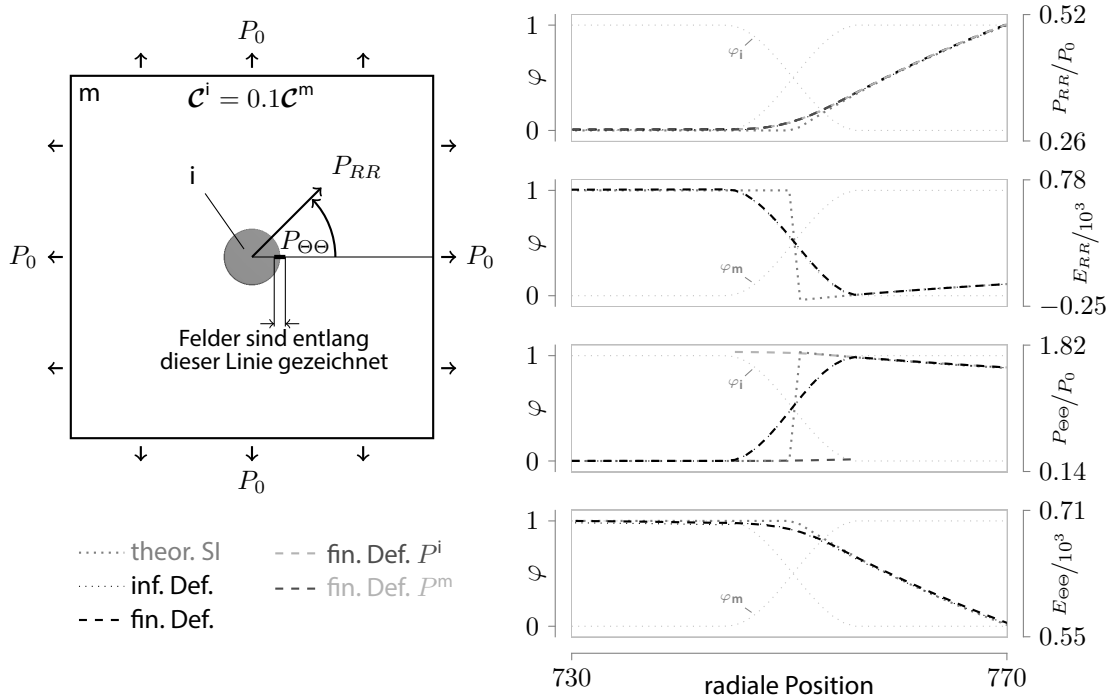


Abbildung 6.4.: Spannungs- und Dehnungsverläufe berechnet mit dem vorgestellten Modell einer Platte mit einem runden Einschluss ($\mathcal{E}^i = 0.1\mathcal{E}^m$) unter hydrostatischer Zugbelastung. Zum Vergleich sind die theoretischen Vorhersagen von Mai und Singh [65] und die Resultate des Modells für infinitesimale Deformationen (siehe Abschnitt 4.3) gegenübergestellt. Die Felder sind im Bereich der fett hervorgehobenen Linie im Simulationssetup gezeichnet, das auf der linken Seite der Abbildung dargestellt ist.

les Gebiet der Größe 1300×1300 Zellen im ebenen Dehnungszustand mit einem kreisförmigen Einschluss in der Mitte wird von allen Seiten mit konstanter Spannung $P_0 = 100$ MPa belastet. Für die Matrix, die mit dem Ordnungsparameter φ_m parametrisiert ist, wurde ein isotroper Steifigkeitstensor mit einem E-Modul von $\mathcal{E}_m = 210$ GPa und einer Querkontraktion von $\nu_m = 0.3$ verwendet. Der kreisförmige Einschluss, charakterisiert mit φ_i , hat einen Radius von $r = 100$ Zellen und eine ebenfalls isotrope Steifigkeit von $C^i = 0.1C^m$.

Unter der zugrundeliegenden radialen Symmetrie werden die Profile der Spannungen und Dehnungen entsprechend in Polarkoordinaten dargestellt. Zum Vergleich sind die Verläufe der analytischen Lösung nach Mai und Singh [65], die Verläufe der resultierenden Felder des Modells für infinitesimale Deformationen und die Profile des Modells für finite Deformationen im Übergangsbereich gegenübergestellt. Entsprechend den Sprungbedingungen (2.49) und (2.33) sind die Variablen P_{rr} und $E_{\theta\theta}$ im Übergangsbereich kontinuierlich und die Variablen $P_{\theta\theta}$ und E_{rr} diskontinuierlich. Anhand der Profilplots ist deutlich zu erkennen, dass sowohl die kontinuierlichen als auch die diskontinuierlichen Variablen außerhalb des Übergangsbereiches mit den analytischen Vorhersagen und mit den Ergebnissen des Modells für infinitesimale Deformationen sehr gut übereinstimmen. Die Sprünge der diskontinuierlichen Variablen E_{rr} und $P_{\theta\theta}$ folgen exakt den Profilen der jeweiligen Phasen φ_m und φ_i . Somit werden die sprungbehafteten Größen gemäß dem diffusen Grenzflächenmodell volumetrisch gemittelt. Auf die Verläufe der Profile außerhalb des Übergangsbereiches haben diese Mittelungen keinen Einfluss.

Des Weiteren sind in Abbildung 6.4 die Profile der phasenanteiligen Spannungen P^m und P^i dargestellt. Unabhängig von den durchgeführten volumetrischen Mittelungen der diskontinuierlichen Variablen folgen diese phasenanteiligen Beiträge im Übergangsbereich den theoretischen Vorhersagen und sind im gesamten Übergangsbereich zugänglich. Dies unterstreicht nochmals die Eigenschaften des vorgestellten Modells. Obwohl eine Parametrisierung des Gebietes mit diffusem Übergangsbereich zugrunde liegt, kann die scharfe Grenzflächenlösung reproduziert werden.

Für die Berechnung der phasenanteiligen plastischen Dehnungen sind diese phasenanteiligen Spannungen von extremer Wichtigkeit. Zwar können auch die lokal homogenisierten Spannungen zur Berechnung der plastischen Dehnungen verwendet werden, wie es in Abschnitt 5.2 gezeigt wurde, allerdings stellt dies eine nicht unwesentliche Vereinfachung dar. Bei stark unterschiedlichen plastischen Parametern führt dieses Verfahren zu Abweichungen an den Grenzflächen. Für genaue Berechnung der plastischen Dehnungen müssen die phasenanteiligen Spannungen vorliegen. Dann kann in jeder Phase separat die plastischen Dehnungen berechnet werden, wie in Abschnitt 5.1 erläutert wurde.

6.3.3. Validierung der Spannungsberechnung in mehrphasigen Bereichen

Zur Validierung der Deformations- und Spannungsberechnung mit dem vorgestellten Modell in mehrphasigen Bereichen werden die resultierenden Spannungen um einen Quadrupelpunkt mit den Spannungen einer scharfen Grenzflächenlösung verglichen. Ähnlich zum Abschnitt 4.6, wird hierzu ein Simulationsgebiet aus vier Phasen mit einer kubischen Anordnung, das in Abbildung 6.5 dargestellt ist, betrachtet. Diese kubisch symmetrische Gebietsaufteilung garantiert, dass keine Artefakte durch die Finite-Differenzen-Diskretisierung kombiniert mit einer scharfen Grenzflächenparametrisierung entstehen. Damit wird ein Vergleich der resultierenden Deformationen und Spannungen des vorgestellten Modells mit einer diffusen Grenzflächenparametrisierung mit einer scharfen Grenzflächenlösung ermöglicht. Das System wird im EDZ betrachtet und an den verbleibenden Rändern wird die makroskopische Spannungsrandbedingung, die eine mittlere Spannung $\bar{P} = (\int P(X)dV_r)/V_r$ garantiert, angebracht. Wie schon in Abschnitt 4.6 angesprochen, werden Spannungsschwankungen an den Rändern durch diese Randbedingung ermöglicht.

Rechts oben in Abbildung 6.5 sind die resultierenden Deformationen der SI- und der DI-Lösung gegenübergestellt. Es ist deutlich zu erkennen, dass die Randbereiche beider Lösungen in der Momentanplatzierung exakt übereinstimmen. Damit ist gezeigt, dass sogar bei Deformationen, die lokal bei 130 % liegen, der diffuse Grenzflächenbereich die Deformation innerhalb der Phasen nicht beeinflusst. Auch die Spannungen beider Lösungen stimmen sehr gut überein, wie es im unteren Bereich der Abbildung 6.5 zu erkennen ist. Hier werden beispielhaft für den gesamten Spannungszustand die P_{XX} -Spannungen beider Lösungen in der Anfangsplatzierung verglichen. Verursacht durch die diffuse Grenzflächenparametrisierung sind Abweichungen beider Spannungen im Übergangsbereichen zu erkennen. Diese Abweichungen haben allerdings keinen Einfluss auf den Spannungszustand außerhalb des Übergangsbereiches, was durch einen Vergleich der Isolinien beider Lösungen deutlich wird. Damit ist eine weitere Eigenschaft des vorgestellten Modells hervorgehoben. Spannungsspitzen haben weitreichende Auswirkungen auf den gesamten Spannungszustand. Daher ist es wichtig die Spannungsspitzen, die von lokalen Spannungs- und Dehnungssprüngen verursacht werden, so genau wie möglich abzubilden. Bei der diffusen Grenzflächenparametrisierung existieren keine lokale Sprünge in den homogenisierten Spannungs- und Dehnungsfeldern. Trotzdem wird der Einfluss der Sprünge in den Variablen auf den vorliegenden

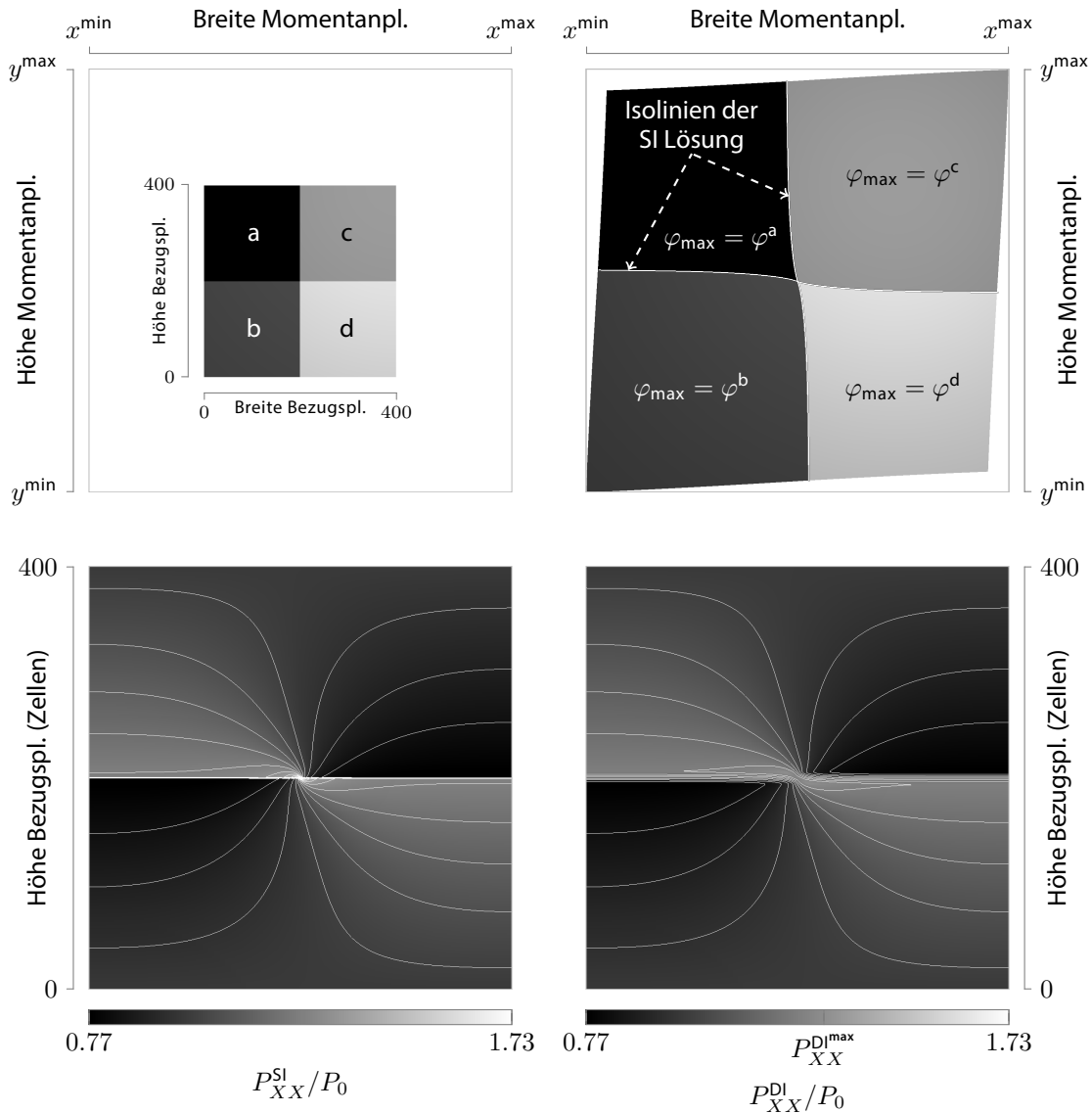


Abbildung 6.5.: Validierung der Deformations- und Spannungsberechnung am Quadrupelpunkt. Die Lösungen des vorgestellten Modells mit diffuser Grenzflächenparametrisierung (gekennzeichnet mit "DI") sind zu den Lösungen einer Parametrisierung mit scharfen Grenzflächen (gekennzeichnet mit "SI") gegenübergestellt. (Oben links) Simulationsgebiet im EDZ mit vier Phasen ($\mathcal{E}^a = \mathcal{E}^d = 2\mathcal{E}^b = 2\mathcal{E}^c$) unter makroskopischer Belastung $\bar{P}_{XX} = \bar{P}_{YY} = P_0$, (oben rechts) deformiertes Gebiet der DI-Lösung mit den Isolinien der Grenzbereiche der SI-Lösung und (unten) Vergleich von P_{XX}^{SI} und P_{XX}^{DI} in der Referenzkonfiguration.

Spannungszustand berücksichtigt, wie es bei dem Vergleich der P_{XX} -Spannungen in Abbildung 6.5 zu erkennen ist.

6.3.4. Deformation eines Multiphasensystems und Konvergenzverhalten des Newtonschen Verfahrens

Für die Umsetzung des vorgestellten Modells wird ein Newtonsches Verfahren verwendet. Die entsprechende Koeffizientenmatrix (6.17) des Newtonschen Schrittes hängt von der Anzahl der lokal vorliegenden Phasen ab. Daher wird für die Untersuchung des Konvergenzverhalten des Newtonschen Verfahrens ein polykristallines Simulationsgebiet, das in Abbildung 6.6 a) dargestellt ist, betrachtet. Dabei wurden die Materialparameter der jeweiligen Phasen zufällig variiert und an den Simulationsrändern wurde, wie schon bei dem letzten Simulationsbeispiel, die makroskopische Spannungsrandbedingung angewendet. Um die Wahrscheinlichkeit zu erhöhen, dass mehr Phasen in einem Bereich überlappen, wurde der Übergangsbereich mit $l \approx 20$ Zellen extrem breit gewählt.

Das deformierte Simulationsgebiet ist in Abbildung 6.6 b) abgebildet. Es ist deutlich zu erkennen, dass es bei der Deformation keine unphysikalischen Verschiebungen der Gebietsränder gegeneinander gegeben hat. Der Spannungszustand in Abbildung 6.6 c) sieht auch sehr glatt aus. Es sind keine unphysikalischen Sprünge zu erkennen, obwohl die Berechnungsvorschrift für die Spannungen in dem Gebiet teilweise von Zelle zu Zelle wechselt. Innerhalb der Phasen werden die Spannungen direkt über die konstitutive Gleichung berechnet, da es keine Notwendigkeit zur phasenanteiligen Aufteilung des Deformationsgradienten gibt. In Bereichen in denen zwei Phasen koexistieren, wird die Berechnungsvorschrift aus Abschnitt 6.2.1 angewendet. Dabei wird der Normalenvektor \mathbf{n}_r über den Gradienten einer der lokal vorliegenden Phasen mit der Gleichung (6.5) berechnet. In lokalen Bereichen mit einer Koexistenz von mehr als zwei Phasen wird die Berechnungsvorschrift aus Abschnitt 6.2.1 genutzt. Die jeweiligen Normalenvektoren werden durch die Gleichung (6.19) ausgewertet. Die Glattheit des Spannungsfeldes in Abbildung 6.6 c) beweist, dass diese unterschiedlichen Berechnungsvorschriften sehr gut miteinander harmonieren.

Entsprechend der Anzahl der Unbekannten in einem lokalen Punkt (siehe Abschnitt 6.2.1), ist die Größe der Koeffizientenmatrix $\hat{\mathbf{G}}(\hat{\mathbf{a}}^n)$ des Newtonschen Schrittes von den lokal vorliegenden Phasen N_l abhängig und beträgt $(N_l - 1) \times (N_l - 1)$. Dementsprechend variiert auch der numerische Aufwand in jedem lokalen Punkt im System. Gemessen an der Anzahl der Newtonschen Iterationsschritte ist der numerische Aufwand in Abbildung 6.6 d) für dieses Simulationsbeispiel dargestellt. Eine besonders auffallende Abhängigkeit von der Anzahl der koexistierenden Phasen N_l ist nicht erkennbar. Es werden maximal sechs Iterationsschritte zum Lösen des Gleichungssystems (6.15) benötigt, obwohl in diesem Simulationsbeispiel das numerische Abbruchkriterium $|\mathbf{g}^{\alpha\beta}(\hat{\mathbf{a}})| \leq 10^{-20}$ extrem niedrig gewählt wurde. Es besteht lediglich eine Abhängigkeit von den Sprüngen der Materialparameter. Je größer der Steifigkeitssprung, desto größer ist die Anzahl der notwendigen Newtonschen Schritte, um den unbekannt Sprung des Deformationsgradienten $\mathbf{a}^{\alpha\beta}$ in die entsprechende Normalenrichtung $\mathbf{n}^{\alpha\beta}$ zu finden.

In der Abbildung 6.6 d) in den Bereichen mit nur einer Iteration ist ein weiterer Vorteil des Verfahrens erkennbar. Die Steifigkeiten der vorliegenden Phasen sind identisch, daher ist das Gleichungssystem (6.15) direkt erfüllt und die Invertierung der Koeffizientenmatrix $\hat{\mathbf{G}}(\hat{\mathbf{a}}^n)$ (6.17) ist nicht mehr notwendig. Entsprechend wird das Gleichungssystem (6.15) in diesen Bereichen nur

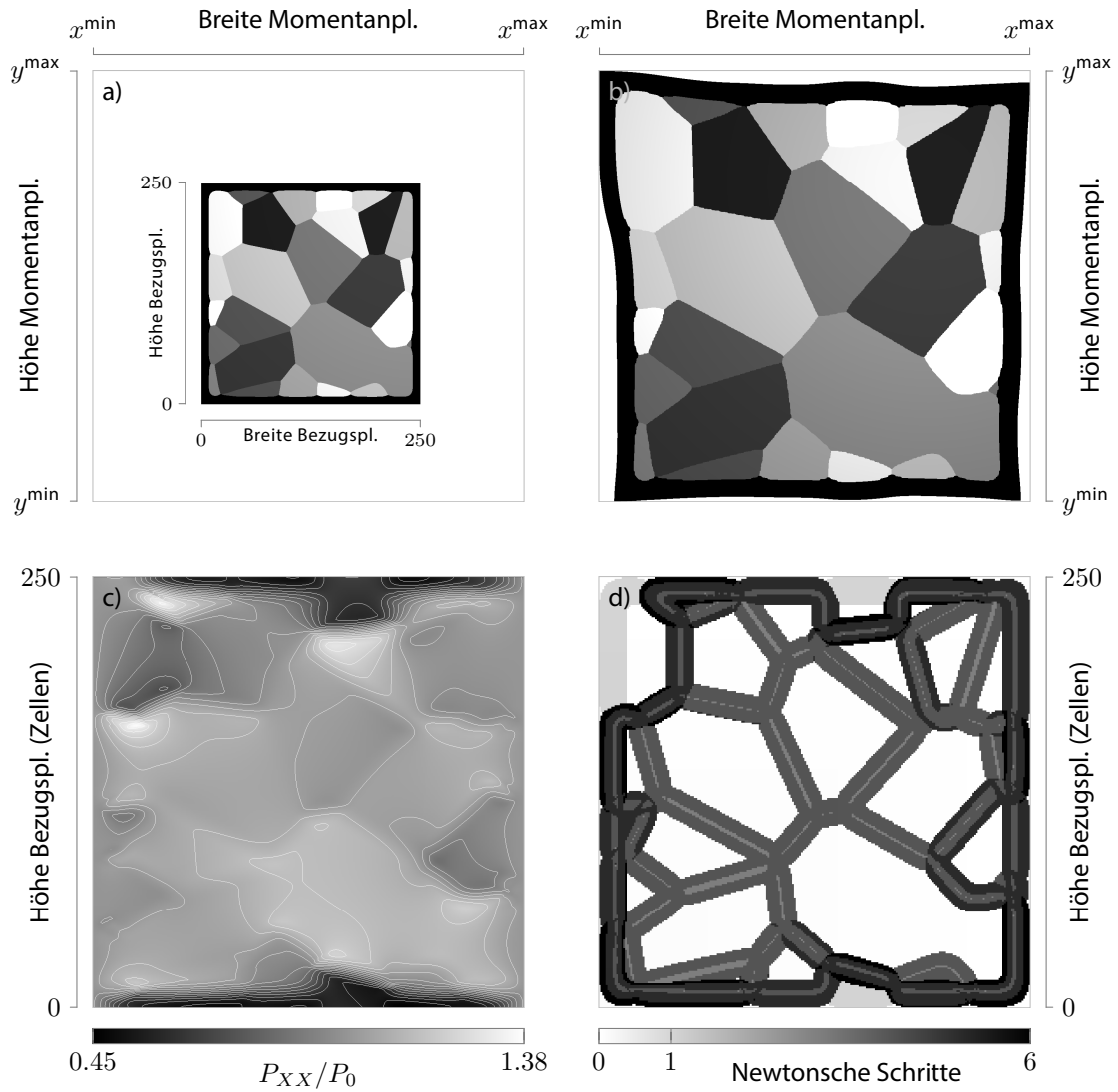


Abbildung 6.6.: Deformation eines Multiphasensystems: a) Simulationssgebiet im EDZ mit elf Phasen unter makroskopischer Belastung $\bar{P}_{XX} = \bar{P}_{YY} = P_0$, b) deformiertes Gebiet in der Momentanplatzierung, c) und d) P_{XX} und lokale Newtonsche Iterationsschritte gemäß Gl. (6.16) in der Anfangsplatzierung

einmal ausgewertet. Das bedeutet, das Verfahren erkennt eigenständig, ob ein für die Spannungsberechnung redundanter Phasenübergang vorliegt und numerische Ressourcen eingespart werden können.

6.4. Mechanische Konfigurationskräfte im Phasenfeldkontext

Der elastische Beitrag der Helmholtzschen freien Energiedichte $W(\mathbf{X}, \mathbf{F})$ ist von der Position \mathbf{X} und dem Deformationsgradienten \mathbf{F} abhängig. Wird die im Phasenfeldkontext übliche Parametrisierung des Gebietes mit den Ordnungsparametern $\boldsymbol{\varphi}(\mathbf{X}, t)$ verwendet, kann jeder einzelnen Phase α eine Formänderungsenergiedichte $W^\alpha(\mathbf{F})$ zugeordnet werden. Da die Ordnungsparameter die Volumenfraktionen jeder einzelnen Phase widerspiegeln, folgt für die volumetrisch gemittelte Formänderungsenergiedichte

$$W(\mathbf{X}, \mathbf{F}) = \sum_{\alpha} W^\alpha(\mathbf{F}) h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}(\mathbf{X}, t)), \quad (6.20)$$

mit $h^\alpha(\boldsymbol{\varphi})$ als Interpolationsfunktion (3.9) der jeweiligen Phasen. Diese Formänderungsenergiedichte geht als mechanischer Beitrag zur freien Energie des Systems in das Energiefunktional (3.3) ein. Die Variation des Funktionals der freien Energie $\mathcal{F}(\boldsymbol{\varphi}, \nabla_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\varphi}, \mathbf{F})$ nach den jeweiligen Ordnungsparametern führt zu deren Evolutionsgleichung (3.17) zum Gleichgewichtszustand. Entsprechend muss für den mechanischen Beitrag zur Bewegung der diffusen Übergangsbereiche die Ableitung der Formänderungsenergiedichte (6.20) nach dem Ordnungsparameter und dessen Gradienten ausgewertet werden. In Abschnitt 4.3.2 wurden diese Ableitungen für infinitesimale Deformationen abgeleitet und es wurde gezeigt, dass bereits die Ableitung der Formänderungsenergiedichte nach dem Ordnungsparameter zu den mechanischen Konfigurationskräften führt. Daher wird in den folgenden Abschnitten die Ableitung der Formänderungsenergiedichte (6.20) für finite Deformationen zuerst für den Zweiphasenfall abgeleitet und anschließend werden die resultierenden Beiträge zur Evolutionsgleichung der Ordnungsparameter für Anwendungen in Multiphasensystemen verallgemeinert. Die Abhängigkeit der Formänderungsenergiedichte (6.20) von dem Gradienten der Ordnungsparameter kommt nur durch die Aufspaltung der Variablen in Normal- und Tangentialbeiträge zustande und wird im Rahmen der vorliegenden Arbeit vernachlässigt.

6.4.1. Mechanischer Beitrag zur Evolutionsgleichung im Zweiphasenfall

In Abschnitt 6.2.1 wurde im Übergangsbereich die Aufspaltung des Deformationsgradienten (6.6) in seine normalen und tangentialen Anteile durchgeführt. Unter Verwendung der Hadamardschen Bedingung $[[\mathbf{F}]] = \mathbf{a} \otimes \mathbf{n}_r$ folgt für die Sprünge beider Anteile

$$\begin{aligned} [[\mathbf{F}_{n_r}]] &= [[\mathbf{F}]](\mathbf{n}_r \otimes \mathbf{n}_r) = (\mathbf{a} \otimes \mathbf{n}_r)(\mathbf{n}_r \otimes \mathbf{n}_r) = \mathbf{a} \otimes \mathbf{n}_r, \\ [[\mathbf{F}_{t_r}]] &= [[\mathbf{F}]](\mathbf{I} - \mathbf{n}_r \otimes \mathbf{n}_r) = (\mathbf{a} \otimes \mathbf{n}_r)(\mathbf{I} - \mathbf{n}_r \otimes \mathbf{n}_r) = \mathbf{0}, \end{aligned} \quad (6.21)$$

mit $\mathbf{0}$ als Nulltensor. Damit verschwinden die Sprünge von \mathbf{F}_{t_r} . Unter Verwendung der volumetrischen Mittelung des Deformationsgradienten ergibt sich für seine Anteile im Übergangsbereich

$$\mathbf{F}_{n_r} = \mathbf{F}_{n_r}^\alpha h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}) + \mathbf{F}_{n_r}^\beta h^\beta(\boldsymbol{\varphi}) \quad \text{und} \quad \mathbf{F}_{t_r}^\alpha = \mathbf{F}_{t_r}^\beta = \mathbf{F}_{t_r}.$$

Wird der Deformationsgradient \mathbf{F} festgehalten, so wie es bei der partiellen Ableitung bezüglich der Ordnungsparameter der Fall ist, muss die folgende Bedingung gelten

$$\frac{\partial \mathbf{F}_{n_r}^\alpha}{\partial \varphi_\alpha} h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}) + \frac{\partial \mathbf{F}_{n_r}^\beta}{\partial \varphi_\alpha} h^\beta(\boldsymbol{\varphi}) = -(\mathbf{F}_{n_r}^\alpha - \mathbf{F}_{n_r}^\beta) \frac{\partial h^\alpha(\boldsymbol{\varphi})}{\partial \varphi_\alpha}. \quad (6.22)$$

Die Formänderungsenergiedichte $W(\boldsymbol{\varphi}, \mathbf{F})$ ist nach Gleichung (6.20) der volumetrische Mittelwert beider phasenteiligen Beiträge. Daher ergibt sich für die Ableitung von $W(\boldsymbol{\varphi}, \mathbf{F})$ nach φ_α bei konstantem \mathbf{F}

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial W(\boldsymbol{\varphi}, \mathbf{F})}{\partial \varphi_\alpha} \right)_{\mathbf{F}} &= \llbracket W(\mathbf{F}) \rrbracket \frac{\partial h^\alpha(\boldsymbol{\varphi})}{\partial \varphi_\alpha} + \frac{\partial W^\alpha(\mathbf{F})}{\partial \mathbf{F}_{n_r}^\alpha} \cdot \frac{\partial \mathbf{F}_{n_r}^\alpha}{\partial \varphi_\alpha} h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}) \\ &\quad + \frac{\partial W^\beta(\mathbf{F})}{\partial \mathbf{F}_{n_r}^\beta} \cdot \frac{\partial \mathbf{F}_{n_r}^\beta}{\partial \varphi_\alpha} h^\beta(\boldsymbol{\varphi}). \end{aligned}$$

Unter Berücksichtigung der Bedingung $\mathbf{P}_{n_r} := \mathbf{P}(\mathbf{n}_r \otimes \mathbf{n}_r) = \partial W^\alpha / \partial \mathbf{F}_{n_r}^\alpha = \partial W^\beta / \partial \mathbf{F}_{n_r}^\beta$ und der Relation (6.22) resultiert die Ableitung

$$\left(\frac{\partial W(\boldsymbol{\varphi}, \mathbf{F})}{\partial \varphi_\alpha} \right)_{\mathbf{F}} = (\llbracket W(\mathbf{F}) \rrbracket - \mathbf{P}_{n_r} \cdot \llbracket \mathbf{F}_{n_r} \rrbracket) \frac{\partial h^\alpha(\boldsymbol{\varphi})}{\partial \varphi_\alpha}. \quad (6.23)$$

Da $\mathbf{P}_{n_r} \cdot \mathbf{F}_{n_r}^\alpha = \mathbf{P}(\mathbf{n}_r \otimes \mathbf{n}_r) \cdot \mathbf{F}^\alpha(\mathbf{n}_r \otimes \mathbf{n}_r) = \mathbf{P} \mathbf{n}_r \cdot \mathbf{F}^\alpha \mathbf{n}_r$ kann die Ableitung (6.23) folgendermaßen umschrieben werden

$$\left(\frac{\partial W(\boldsymbol{\varphi}, \mathbf{F})}{\partial \varphi_\alpha} \right)_{\mathbf{F}} = (\llbracket W(\mathbf{F}) \rrbracket - \mathbf{P} \mathbf{n}_r \cdot \llbracket \mathbf{F} \rrbracket \mathbf{n}_r) \frac{\partial h^\alpha(\boldsymbol{\varphi})}{\partial \varphi_\alpha}. \quad (6.24)$$

Die Evolution der Ordnungsparameter in einem Zweiphasensystem wird durch die Gleichung (3.19) beschrieben. Im Gleichgewicht verschwindet die lokale Änderung der Ordnungsparameter $\dot{\varphi}_\alpha = 0$ und es folgt für den Gleichgewichtszustand eines Zweiphasensystems in der Lagrangeschen Darstellung

$$\frac{1}{2} (\llbracket W(\mathbf{F}) \rrbracket - \mathbf{P} \mathbf{n}_r \cdot \llbracket \mathbf{F} \rrbracket \mathbf{n}_r) \frac{\partial h^\alpha}{\partial \varphi_\alpha} = -\gamma_{\alpha\beta} \left(\epsilon \Delta_X \varphi_\alpha - \frac{16}{\epsilon \pi^2} \frac{(1 - 2\varphi_\alpha)}{2} \right). \quad (6.25)$$

Für eine Interpretation dieser Gleichung im Kontext von scharfen Grenzflächen muss ein Linienintegral durch den Übergangsbereich in Richtung der Normalen \mathbf{n}_r ausgewertet werden. Mit einem Verweis auf die Berechnungen in Abschnitt 3.1.4, wo ein solches Integral ausgewertet wurde, entspricht die Gleichung (6.25) im Kontext der scharfen Grenzfläche dem folgenden Gleichgewichtszustand

$$\llbracket W(\mathbf{F}) \rrbracket - \mathbf{P} \mathbf{n}_r \cdot \llbracket \mathbf{F} \rrbracket \mathbf{n}_r \approx -\gamma_{\alpha\beta} \kappa.$$

κ ist dabei die zweifache mittlere Krümmung in der Referenzkonfiguration. Diese Bilanzgleichung ist äquivalent zu der Bilanz der Konfigurationskräfte (2.52), die in Abschnitt 2.4.4 aus der Variation der freien Energie nach der singulären Fläche im scharfen Grenzflächenkontext abgeleitet wurde.

Zur Überführung der mechanischen treibenden Kräfte in die Eulersche Darstellung wird die Ableitung (6.24) in phasenanteilige Bestandteile aufgespalten

$$\left(\frac{\partial W(\boldsymbol{\varphi}, \mathbf{F})}{\partial \varphi_\alpha} \right)_F = \underbrace{\left(W^\alpha(\mathbf{F}) - \mathbf{P}^\alpha \mathbf{n}_r \cdot \mathbf{F}^\alpha \mathbf{n}_r \right)}_{\Psi^\alpha(\mathbf{F})} - \underbrace{\left(W^\beta(\mathbf{F}) - \mathbf{P}^\beta \mathbf{n}_r \cdot \mathbf{F}^\beta \mathbf{n}_r \right)}_{\Psi^\beta(\mathbf{F})} \frac{\partial h^\alpha(\boldsymbol{\varphi})}{\partial \varphi_\alpha}.$$

Unter Verwendung der Gleichung (2.16), ergibt sich für die jeweiligen Potentiale in der Eulerschen Darstellung

$$\begin{aligned} \Psi^\alpha(\mathbf{F}) &= W^\alpha(\mathbf{F}) - J^\alpha \boldsymbol{\sigma}^\alpha(\mathbf{F}^\alpha)^{-\top} \mathbf{n}_r \cdot \mathbf{F}^\alpha \mathbf{n}_r \\ &= W^\alpha(\mathbf{F}) - J^\alpha \boldsymbol{\sigma}^\alpha(\mathbf{F}^\alpha)^{-\top} (\mathbf{F}^\alpha)^\top \mathbf{n} \cdot \mathbf{F}^\alpha (\mathbf{F}^\alpha)^\top \mathbf{n} \\ &= W^\alpha(\mathbf{F}) - \boldsymbol{\sigma}^\alpha \mathbf{n} \cdot J^\alpha \mathbf{B}^\alpha \mathbf{n}, \end{aligned}$$

mit $\mathbf{B} = \mathbf{F}\mathbf{F}^\top$ als dem linken Cauchy-Green-Tensor. Mit $[\boldsymbol{\sigma}]\mathbf{n} = \mathbf{0}$ folgt für den mechanischen Beitrag der treibenden Kräfte (6.24) in der Eulerschen Darstellung

$$\frac{\delta E}{\delta \varphi_\alpha} = ([W(\mathbf{F})] - \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} \cdot [J\mathbf{B}]\mathbf{n}) \frac{\partial h^\alpha(\boldsymbol{\varphi})}{\partial \varphi_\alpha}.$$

6.4.2. Mechanische treibende Kräfte im Multiphasensystem

Die treibenden Kräfte zur Ordnungsparameterevolution in Multiphasensystemen (3.17) werden in Binärinteraktionen $\Delta^{\alpha\beta} = (\delta\mathcal{F}/\delta\varphi_\alpha - \delta\mathcal{F}/\delta\varphi_\beta)/N$ zwischen zwei Phasen aufgespalten und mit den entsprechenden Mobilitäten $M_{\alpha\beta}$ der jeweiligen α - β -Grenzflächen gewichtet. Damit kann die Evolutionsgleichung der einzelnen Ordnungsparameter folgendermaßen geschrieben werden

$$\begin{aligned} \dot{\varphi}_\alpha &= - \sum_{\beta \neq \alpha} M_{\alpha\beta} \Delta^{\alpha\beta} \\ &= - \sum_{\beta \neq \alpha} M_{\alpha\beta} \left(\Delta_{\text{se}}^{\alpha\beta} + \Delta_{\text{mech}}^{\alpha\beta} + \dots \right), \quad \forall \varphi_\alpha, \alpha = 1, \dots, N, \end{aligned} \quad (6.26)$$

wobei $\Delta_{\text{se}}^{\alpha\beta}$ die jeweiligen treibenden Kräfte der Grenzflächenenergie repräsentieren. Unter Vernachlässigung einer Abhängigkeit der Formänderungsenergiedichte nach den Gradienten der Ordnungsparameter, ist der mechanische Beitrag zu der jeweiligen Binärinteraktionen $\Delta^{\alpha\beta}$ gegeben durch

$$\Delta_{\text{mech}}^{\alpha\beta} = \frac{1}{N} \left(\frac{\partial W(\boldsymbol{\varphi}, \mathbf{F})}{\partial \varphi_\alpha} - \frac{\partial W(\boldsymbol{\varphi}, \mathbf{F})}{\partial \varphi_\beta} \right).$$

In Anbetracht der Tatsache, dass in den Binärinteraktionen $\Delta^{\alpha\beta}$ nur die treibenden Kräfte zwischen den Phasen α und β bilanziert werden, werden auch nur die Abhängigkeiten von den Phasen α und β in der Ableitung berücksichtigt. Unter dieser Annahme sind die jeweiligen Ableitungen der Formänderungsenergiedichte nach dem Ordnungsparameter mit der Gleichung (6.24) gegeben. Dabei muss beachtet werden, dass die explizit aufgeführte kontinuierliche Variable \mathbf{P}_{n_r} in der

Gleichung (6.23) nur zwischen den in der Binärinteraktion agierenden Phasen kontinuierlich ist. Damit ergibt sich für die mechanischen Beiträge der Binärinteraktionen

$$\begin{aligned} \Delta_{\text{mech}}^{\alpha\beta} &= \frac{1}{N} \left(\left(\llbracket W(\mathbf{F}) \rrbracket^{\alpha\beta} - \mathbf{P}^\alpha \mathbf{n}_r^{\alpha\beta} \cdot \llbracket \mathbf{F} \rrbracket^{\alpha\beta} \mathbf{n}_r^{\alpha\beta} \right) \frac{\partial h^\alpha}{\partial \varphi_\alpha} \right. \\ &\quad \left. - \left(\llbracket W(\mathbf{F}) \rrbracket^{\beta\alpha} - \mathbf{P}^\beta \mathbf{n}_r^{\beta\alpha} \cdot \llbracket \mathbf{F} \rrbracket^{\beta\alpha} \mathbf{n}_r^{\beta\alpha} \right) \frac{\partial h^\beta}{\partial \varphi_\beta} \right) \\ &= \frac{1}{N} \left(\llbracket W(\mathbf{F}) \rrbracket^{\alpha\beta} - \mathbf{P}^\alpha \mathbf{n}_r^{\alpha\beta} \cdot \llbracket \mathbf{F} \rrbracket^{\alpha\beta} \mathbf{n}_r^{\alpha\beta} \right) \left(\frac{\partial h^\alpha}{\partial \varphi_\alpha} + \frac{\partial h^\beta}{\partial \varphi_\beta} \right). \end{aligned} \quad (6.27)$$

Dabei sind $\llbracket \mathbf{A} \rrbracket^{\alpha\beta} = \mathbf{A}^\alpha - \mathbf{A}^\beta$ Sprünge zwischen den phasenanteiligen Größen und $\mathbf{n}_r^{\alpha\beta} = -\mathbf{n}_r^{\beta\alpha}$ sind die jeweiligen Normalen, die mit der Gleichung (6.19) definiert sind. Mit der Gleichung (6.27) werden die mechanischen Konfigurationskräfte der jeweiligen Binärinteraktionen bilanziert und fließen gewichtet mit den jeweiligen Volumenfraktionen, die in den normierten Interpolationsfunktionen berücksichtigt sind, und der Mobilität der jeweiligen Grenzfläche in die Evolutionsgleichung der Ordnungsparameter (6.26) ein. Im Zweiphasenfall reduziert sich dieser Beitrag zu den treibenden Kräften der Gleichung (6.24), denn es gilt $\partial h^\beta / \partial \varphi_\beta = \partial h^\alpha / \partial \varphi_\alpha$.

6.5. Simulationsbeispiel: Martensitische Transformation

In Abschnitt 6.3 dieses Kapitels wurde demonstriert, dass die resultierenden Spannungen und die Deformationen des vorgestellten Modells richtig wiedergegeben werden. Bei infinitesimalen Deformationen sind die treibenden Kräfte des vorgestellten Modells äquivalent zu den treibenden Kräften des Modells aus Abschnitt 4.3, denn bei beiden Modellen wurde gezeigt, dass die mechanischen Konfigurationskräfte abgebildet werden (siehe Unterabschnitte 4.3.2 und 6.4.1). Das Modell für infinitesimale Deformationen wurde bereits im Abschnitt 4.4 bzw. 4.6 validiert, daher wird hier lediglich die Anwendbarkeit des Modells für finite Deformationen aus diesem Kapitel in Multiphasensystemen anhand eines Simulationsbeispiels zur martensitischen Transformation demonstriert.

Die Charakterisierung des Phasenfeldmodells für den martensitischen Phasenumwandlungsprozess wurde im Abschnitt 4.8 durchgeführt. Bei finiten Deformationen nimmt das Energiefunktional (4.62) folgende Form an

$$\mathcal{F}(\boldsymbol{\varphi}, \nabla_X \boldsymbol{\varphi}, T, \mathbf{F}) = \int_{V_r} \epsilon a(\boldsymbol{\varphi}, \nabla_X \boldsymbol{\varphi}) + \frac{1}{\epsilon} \omega_{\text{ob}}(\boldsymbol{\varphi}) + W_{\text{chem}}(\boldsymbol{\varphi}, T) + W_{\text{mech}}(\boldsymbol{\varphi}, \mathbf{F}) dV_r.$$

Dabei ist $a(\boldsymbol{\varphi}, \nabla_X \boldsymbol{\varphi})$ die Gradientenenergiedichte (3.4), $\omega_{\text{ob}}(\boldsymbol{\varphi})$ ist das Energiepotential (3.5), ϵ ist ein Parameter für die Breite des Übergangsbereiches, $W_{\text{chem}}(\boldsymbol{\varphi}, T)$ ist die chemische Energiedichte und $W_{\text{mech}}(\boldsymbol{\varphi}, \mathbf{F})$ ist die Formänderungsenergiedichte (6.20). Für die Abbildung der Bainschen Dehnungen wird nach [86] eine Eigendeformation der Form

$$\tilde{\mathbf{F}}^\alpha = \mathbf{F}_0^\alpha = \mathbf{R}^\alpha (\mathbf{I} + \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^\alpha)$$

eingeführt. Wobei $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^\alpha$ die Bainschen Dehnungen (4.63) und \mathbf{R}^α den Rotationsanteil des phasenanteiligen Deformationsgradienten \mathbf{F}^α (siehe Gl. (2.6)) darstellt. Für die Definition der übrigen Bestandteile des Modells wird auf Abschnitt 4.8 verwiesen.

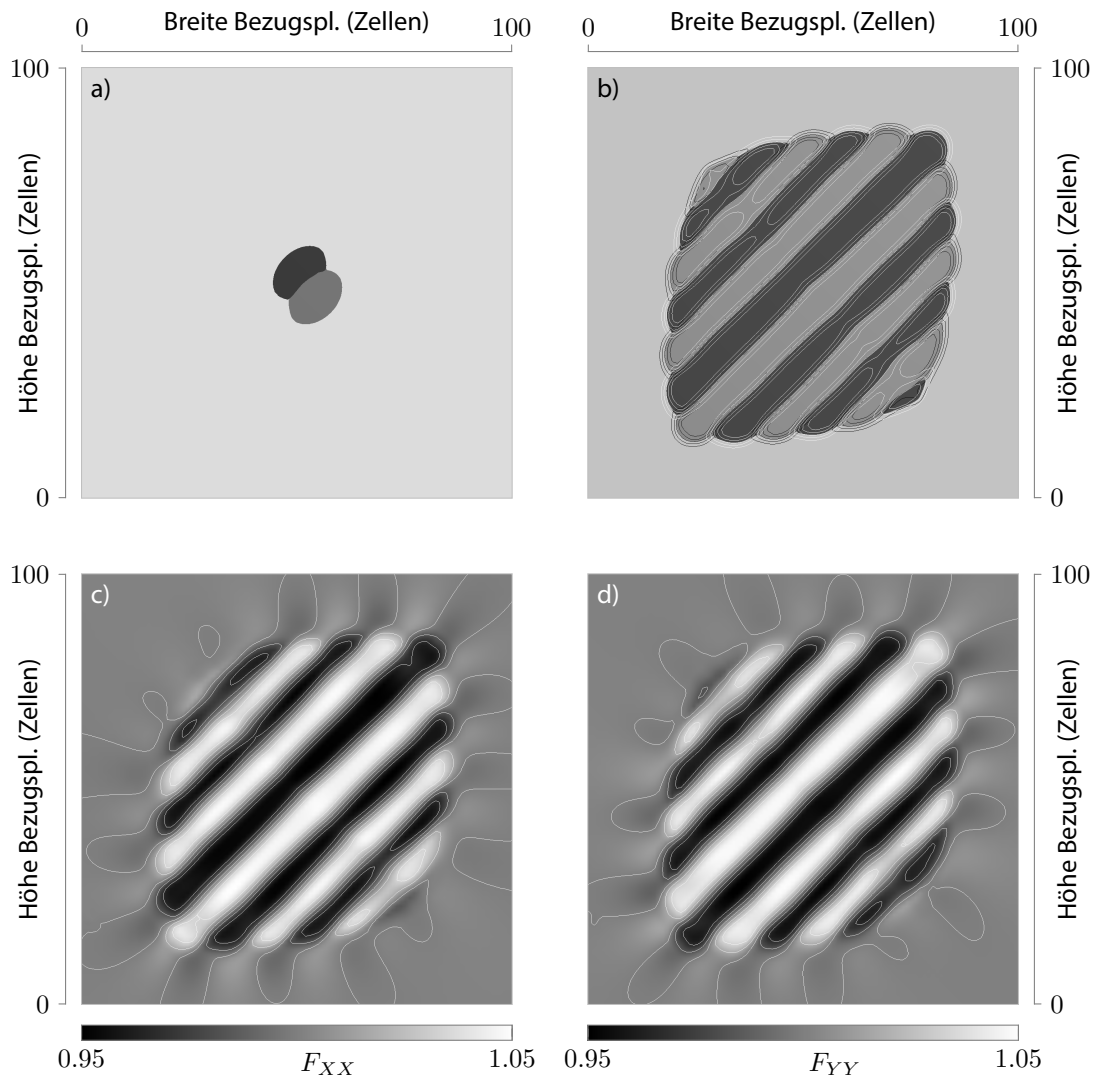


Abbildung 6.7: Wachstum von martensitischen Varianten in einer austenitischen Matrix: a) austenitische Matrix mit zwei initialen martensitischen Varianten, b) resultierende Variantenverteilung am Ende der Simulation mit Isolinien von Ordnungsparametern der Varianten c) und d) Deformationsgradienten F_{XX} und F_{YY} am Ende der Simulation.

Das Simulationsgebiet von 100×100 Zellen mit zwei martensitischen Varianten zum anfänglichen Zeitpunkt ist in der Abbildung 6.7 a) dargestellt und entspricht einer physikalischen Ausdehnung von $0.13 \mu\text{m}^2$. Die übrigen Parameter und Randbedingungen sind äquivalent zu den verwendeten Parametern der Simulationsbeispiele aus Abschnitt 4.8.1.

Die resultierende Verteilung der Varianten ist in der Abbildung 6.7 b) dargestellt. Es bildet sich eine für Martensit typische lamellare Mikrostruktur. Dabei bleibt die Breite des Übergangsbereiches zwischen den Varianten und zwischen den Varianten und der austenitischen Matrix nahezu konstant und der Übergangsbereich ist nicht verzerrt, was anhand der dargestellten Isolinien in Abbildung 6.7 b) zu erkennen ist. Mit dem unverzerrten Übergangsbereich ist gezeigt, dass das vorgestellte Modell keine zusätzliche Überschussenergien ausgehend von den treibenden Kräften produziert (siehe Abschnitt 4.2). Des Weiteren ist die mittlere Breite der Lamellen vergleichbar mit der Lamellenbreite der Simulation aus Abbildung 4.13 und liegt bei circa 130 nm. Dies zeigt, dass beide Modelle ein ähnliches Verhalten aufweisen und die resultierenden treibenden Kräfte an den Grenzflächen gleich groß sind, was bei den gewählten Eigendehnungen der Varianten von $\varepsilon_1 = 0.07$ und $\varepsilon_3 = -0.07$ (siehe Abschnitt 4.8.1) der Fall sein sollte. Da das Modell für infinitesimale Deformationen in Abschnitt 4.4 ausgiebig validiert wurde, ist im Umkehrschluss das Modell für finite Deformationen validiert und die Anwendbarkeit des Modells für Multiphasensysteme demonstriert.

Die Auswirkungen der geometrischen Nichtlinearitäten ist bei dieser Simulation nicht erkennbar, da die Eigendehnungen aufgrund der Vernachlässigung von Plastifizierungseffekten zu klein gewählt wurden (siehe Abschnitt 4.8.1). Die Verzerrungen der martensitischen Varianten spiegeln sich in den dargestellten Verläufen der Deformationsgradientenkomponenten F_{XX} und F_{YY} , dargestellt in der Abbildung 6.7 c) und d), wider. Für eine quantitative Aussage zu den Auswirkungen der geometrischen Nichtlinearitäten auf die Martensittransformation sollten Plastifizierungseffekte berücksichtigt werden. Dann könnten realistische Werte für die Bainschen Dehnungen, die beispielhaft für Fe-31%Ni bei $\varepsilon_1 = 0.1322$ und $\varepsilon_3 = -0.1994$ liegen [70], verwendet werden. Allerdings ist die Berücksichtigung der Plastifizierungseffekte auf die Martensittransformation in Rahmen der vorliegenden Arbeit nicht durchgeführt worden.

7

Modellierung der Rissausbreitung mit der Phasenfeldmethode

Die Modellierung der Rissausbreitung in Materialien ist seit langem eine bestehende Herausforderung in der Festkörperphysik und in der Materialwissenschaft [87, 88]. Dabei ist die gleichförmige Bewegung von Rissen im Rahmen der theoretischen Kontinuumsmechanik gut verstanden [89]. Die energetische Bilanz an der Rissfront wird dabei durch das Griffithsche Kriterium [3] beschrieben. Ein Riss propagiert, wenn die Energiefreisetzungsrates an der Rissfront höher ist als die Oberflächenenergie, die bei Rissfortschritt aufgebaut wird. Die konventionelle Methode zur Modellierung der Rissausbreitung ist die strikte Trennung des Materials in einen zerstörten und einen unzerstörten Bereich durch eine Grenzfläche. Dabei kann die lokale Grenzflächengeschwindigkeit mit einer Bilanzgleichung an der Grenzfläche beschrieben werden. Allerdings erfordert ein solches Verfahren eine explizite Verfolgung der genauen Position der Grenzfläche und ist sehr unpraktikabel bei der Modellierung komplexer dreidimensionaler Systeme [1]. Die Phasenfeldmethode hat einen entscheidenden Vorteil gegenüber scharfen Grenzflächenmodellen, da die explizite Grenzflächenverfolgung redundant wird [1].

Bei den Phasenfeldmodellen zur Beschreibung der Rissausbreitung wird zwischen physikalischen und mechanischen Modellansätzen unterscheiden. Die physikalischen Modellansätzen basieren auf der Ginzburg-Landau-Phasenumwandlung. Hingegen wird bei den mechanischen Ansätzen die Griffithsche Theorie als Basis verwendet. Ambati et al. [4] bieten einen ausführlichen Überblick über die verschiedenen Ansätze. Diese Modelle nutzen Ordnungsparameter, um zwischen beschädigtem und unbeschädigtem Material zu separieren, und durch die Minimierung der freien Energie des Systems beschreiben die Ansätze die Ausbreitung der Risse [90]. Die Modelle beschreiben die Rissausbreitung in homogenen Materialien unter unterschiedlichen Belastungen [91–93], inklusive plastischer Effekte [4, 94–96] und multiphysikalischer Probleme [57, 97, 98]. Für der Beschreibung der Rissausbreitung in polykristallinen Materialien gibt es allerdings nur wenige Modellansätze. Basierend auf der Griffithschen Theorie wurde von Hossain et al. [99] ein Modell mit ortsabhängigem Risswiderstand für Untersuchungen der effektiven Bruchfestigkeit in Materialien vorgestellt. Einer der ersten physikalischen mehrphasigen Modellansätze wurde von Spatschek et al. [54] vorgestellt. Erweiterungen des Ansatzes für Anwendungen, inklusive plastischer Effekte, wurde von Schneider

et al. [56] vorgeschlagen und ein Modell für Anwendungen bei ferroelektrischen Polykristallen wurde von Abdollahi und Arias [100] präsentiert. Ein ähnlicher physikalischer Ansatz wurde von Oshima et al. [101] formuliert. Allerdings haben diese physikalischen Ansätze einen entscheidenden Nachteil. Der Risswiderstand ist von der lokalen Krümmung abhängig, was für die Beschreibung der Phasenumwandlungsprozesse absolut notwendig ist [27, 28, 31]. Aber bei der Beschreibung der Rissausbreitung ist der Widerstand von der Krümmung unabhängig [3]. In Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde ein Modell realisiert, das den mechanischen Ansatz zur Beschreibung der Rissausbreitung mit dem physikalischen Ansatz zur Beschreibung der Phasenumwandlung verbindet [102].

In diesem Kapitel wird zunächst auf die Theorie der linear elastischen Bruchmechanik in Abschnitt 7.1 eingegangen. Nach einem Literaturüberblick in Abschnitt 7.2 werden der physikalische und der mechanische Modellansatz in Hinsicht auf die Beschreibung des Risswiderstandes diskutiert. In Abschnitt 7.3 wird der physikalische Modellansatz mit Anwendungen aus den Arbeiten Schneider et al. [57] und Schneider et al. [56] vorgestellt. Nach der Einführung eines Zweiphasenmodells mit einem Einzelhindernispotential in Abschnitt 7.4, das auf der Griffithschen Theorie basiert, wird die Erweiterung des Ansatzes für Anwendungen in polykristallinen Materialien in Abschnitt 7.6 diskutiert. Im Anschluss werden Simulationsergebnisse zur Rissausbreitung in polykristallinen Materialien vorgestellt. Einige Ergebnisse dieses Kapitels wurden bereits in Schneider et al. [57], Schneider et al. [56], Schneider et al. [102] und Nestler et al. [103] veröffentlicht.

Alle Modellausführungen und durchgeführten Simulationen in diesem Kapitel gehen von infinitesimalen Deformationen aus. Daher wird auf die Unterscheidung zwischen Referenz- und Momentankonfiguration bzw. zwischen der Eulerschen und der Lagrangeschen Darstellung verzichtet.

7.1. Ausgewählte Grundlagen der linear elastischen Bruchmechanik

Ziel dieses Abschnitts ist es, die notwendigen Grundlagen der Bruchmechanik für die nachfolgenden Betrachtungen zusammenzufassen. Für eine ausführliche Einführung in die Bruchmechanik wird z. B. auf das Buch von Gross und Seelig [78] verwiesen.

Die Ursachen und Erscheinungsformen eines Risses in polykristallinen Materialien sind stark von der vorliegenden Mikrostruktur, den Eigenschaften einzelner Körner und den Eigenschaften der Korngrenzen abhängig. Die einzelnen Körner haben gegebenenfalls stark anisotrope und von Korn zu Korn schwankende Eigenschaften. Zudem weichen die Eigenschaften der Korngrenzen aufgrund von möglichen Ausscheidungen von denen der Körner ab. Neben diesen Unregelmäßigkeiten enthalten die Materialien aufgrund des Herstellungsprozesses Einschlüsse mit stark abweichenden Materialeigenschaften, Hohlräume oder Mikrorisse. Zu den Defekten auf der mesoskopischen Längenskala enthalten die einzelnen Körner Defekte auf der mikroskopischen Skala. Zu diesen Fehlern im Kristallgitter auf der mikroskopischen Längenskala zählen auch Versetzungen oder die einzelnen Korngrenzen. Alle diese Defekte beeinflussen den lokalen Risswiderstand der Materialien und entsprechend den Risspfad. Abhängig vom heterogenen Risswiderstand kann es dazu führen, dass sich der Riss mitten durch die Körner ausbreitet. Solch ein Riss wird als *transkristallin* bezeichnet. Wählt sich der Riss den Pfad entlang der Korngrenzen, so wird er als *interkristallin* bezeichnet.

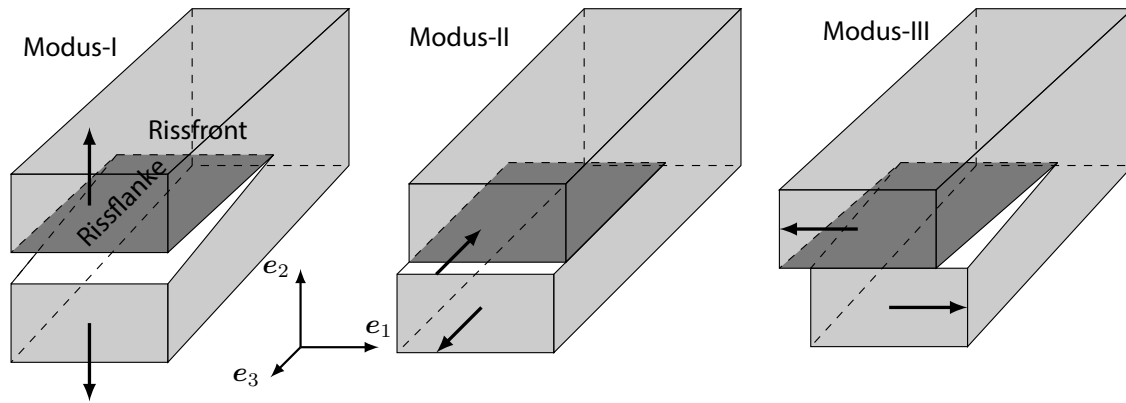


Abbildung 7.1.: Charakterisierung der Rissbereiche und Rissöffnungsarten

Aus makroskopischer Sicht ist ein Riss ein Schnitt durch einem Körper. Seine gegenüberliegenden Flächen werden als *Rissflanken* und das Ende des Risses als *Rissfront* bzw. als die *Risspitze* bezeichnet. Die Deformation eines Risses wird in drei unabhängigen Anteile, die in Abbildung 7.1 dargestellt sind, unterteilt. *Modus-I* ist eine Deformation des Risses orthogonal zu den Rissflanken. Dies ist die wichtigste Deformationsart für die praktischen Anwendungen. In *Modus-II* gleiten die beiden Rissflanken relativ zu einander und orthogonal zur Rissfront. Entsprechend verursacht diese Art der Deformation große Scherspannungen. Bei Deformationen in *Modus-III* gleiten die Rissflanken ebenfalls gegeneinander, allerdings parallel zu der Rissfront.

7.1.1. Rissspitzenfeld

Eine fundamentale Bedeutung in der Beschreibung der Rissausbreitung haben die Spannungen und Deformationen in der Umgebung der Risspitze. Diese werden als *Rissspitzenfelder* bezeichnet. Diese lokale Spannungskonzentration um einen Anriss wurde erstmals 1913 von Inglis [104] untersucht. Er fand heraus, dass die Spannung an der Risspitze bzw. Rissfront sehr viel größer sein kann als die angelegte Spannung weit entfernt am Bauteilrand. Er nutzte eine unendlich ausgehende Platte mit einer elliptischen Kerbe unter einer angelegten Spannung σ_∞ und zeigte, dass die Spannungskonzentration an der Position der maximalen Krümmung folgenden Wert annimmt

$$\sigma_{y_{\max}} = \sigma_\infty \left(1 + 2 \frac{a}{b} \right), \quad (7.1)$$

mit a und b als Halbachsen der Ellipse. Von einem anderen Standpunkt ging Griffith [3] an die Problematik heran. Sein Standpunkt war, dass die notwendige Energie, um eine neue Oberfläche zu generieren, von der relaxierten Formänderungsenergie kommen muss. Beide Energien hängen von der Risslänge ab. Entsprechend wächst der Riss ab einer kritischen Risslänge. Anstatt das gesamte Rissystem zu betrachten, untersuchte Irwin [105] das Spannungsfeld an der Risspitze. Mit den Resultaten von Sneddon [106] charakterisierte Irwin das Rissspitzenfeld eines scharfen Risses.

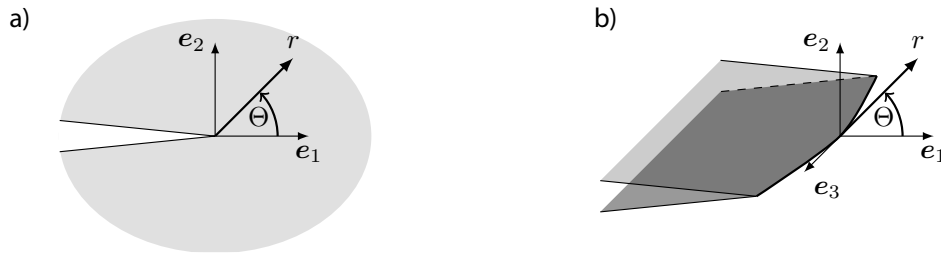


Abbildung 7.2.: Koordinatensysteme des Rissspitzenfeldes für die a) Risspitze und b) Rissfront

Abhängig von den Belastungsmodi ergibt sich für die Spannungen des Rissspitzenfeldes [78]

$$\text{Modus-I: } \begin{Bmatrix} \sigma_x^I \\ \sigma_y^I \\ \sigma_{xy}^I \end{Bmatrix} = \frac{K_I \cos(\theta/2)}{\sqrt{2\pi r}} \begin{Bmatrix} 1 - \sin(\theta/2) \sin(3\theta/2) \\ 1 + \sin(\theta/2) \sin(3\theta/2) \\ \sin(\theta/2) \sin(3\theta/2) \end{Bmatrix},$$

$$\text{Modus-II: } \begin{Bmatrix} \sigma_x^{II} \\ \sigma_y^{II} \\ \sigma_{xy}^{II} \end{Bmatrix} = \frac{K_{II}}{\sqrt{2\pi r}} \begin{Bmatrix} -\sin(\theta/2)(2 + \cos(\theta/2) \cos(3\theta/2)) \\ \sin(\theta/2) \cos(\theta/2) \cos(3\theta/2) \\ \cos(\theta/2)(1 - \sin(\theta/2) \sin(3\theta/2)) \end{Bmatrix},$$

$$\text{Modus-III: } \begin{Bmatrix} \sigma_{xz}^{III} \\ \sigma_{yz}^{III} \end{Bmatrix} = \frac{K_{III}}{\sqrt{2\pi r}} \begin{Bmatrix} -\sin(\theta/2) \\ \cos(\theta/2) \end{Bmatrix},$$

mit Polarkoordinaten r und θ entsprechend der Darstellung in Abbildung 7.2 a). K_{I-III} sind die sogenannten *Spannungsintensitätsfaktoren*, die von der Riss- und Bauteilgeometrie abhängig sind. Auf der Grundlage der Spannungsintensitätsfaktoren formulierte Irwin ein Kriterium für die Rissausbreitung. Ein Riss breitet sich aus, wenn der entsprechende kritische Spannungsintensitätsfaktor K_{I-III}^c überschritten wurde.

In Allgemeinen muss das dreidimensionale Rissspitzenfeld betrachtet werden. Wird in einem beliebigen Punkt der Rissfront ein lokales Koordinatensystem nach Abbildung 7.2 b) gelegt, dann gilt gemäß [78] für das Spannungsfeld

$$\sigma(\theta) = \sigma^I(\theta) + \sigma^{II}(\theta) + \sigma^{III}(\theta).$$

Die jeweiligen K -Faktoren können experimentell, numerisch oder bei einfachen Geometrien auch analytisch ermittelt werden. Für die Platte mit einer elliptischen Kerbe, deren maximale Spannung durch die Gleichung (7.1) charakterisiert ist, ergibt sich beispielsweise für den Spannungsintensitätsfaktor

$$K_{\text{Ellipse}}^I = \frac{\sigma_{y_{\max}}}{\sigma_{\infty}} = \left(1 + 2 \frac{a}{b}\right).$$

Eine der analytischen Methoden für die Berechnung des Rissspitzenfeldes ist die *Methode der komplexen Spannungsfunktionen*. Diese Methode wird in Abschnitt A.4 beschrieben. Zusätzlich wird in diesem Abschnitt das Rissspitzenfeld einer Platte mit einer halbelliptischen Kerbe berechnet. Diese Felder werden für die Validierung der resultierenden Spannungsfelder in Abschnitt 7.3.1 verwendet.

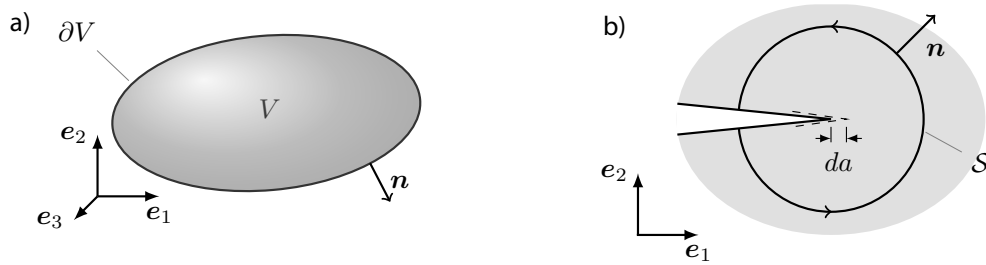


Abbildung 7.3.: Charakterisierung eines a) Flächenintegrals um einen defektfreien Körper und b) Charakterisierung eines Konturintegrals um eine Risspitze.

7.1.2. Das Griffithsche Kriterium für Rissfortschritt

Die Energiebilanz für den Fall einer Rissausbreitung wurde erstmals von Griffith [3] untersucht. Er bilanzierte die freigesetzte Energie bei einem Rissfortschritt und die notwendige Energie zur Bildung einer neuen Oberfläche. Die freigesetzte innere Energie Π bei einem infinitesimalen Rissfortschritt dA ist die *Energiefreisetzungsrate* (engl. energy release rate), gegeben durch

$$G = -\frac{\partial \Pi}{\partial A}. \quad (7.2)$$

In rein elastischen Fällen wird die innere Energie Π zur Formänderungsenergie E . Übersteigt die Energiefreisetzungsrate den materialspezifischen Risswiderstand G_c , breitet sich der Riss aus

$$G - G_c \leq 0. \quad (7.3)$$

Dieses Griffithsche Kriterium wurde erstmals 1921 von Griffith [3] aufgestellt. Es lässt sich zeigen, dass das Griffithsche Kriterium in der linearen Bruchmechanik äquivalent zu dem K-Konzept Kriterium für Rissfortschritt ist [78]. Mit einer Rissoberflächenenergie $\Gamma = G_c A$, die proportional zur Rissfläche ist, wird der Risswiderstand zu

$$G_c = \frac{\partial \Gamma}{\partial A}. \quad (7.4)$$

7.1.3. J-Integral

Bei der Einführung des Griffithschen Kriteriums (7.3) wurde bereits die Energiefreisetzungsrate verwendet. Unabhängig von Griffith hat Rice [107] das *J-Integral* als ein Maß für die Energiefreisetzungsrate eingeführt. Für ein homogenes, elastisches Material, dargestellt in Abbildung 7.3 a), ist der J-Integralvektor definiert als

$$J_j = \oint_{\partial V} \Sigma_{kj} n_j dA,$$

wobei Σ der Eshelby-Tensor (2.40), ∂V eine geschlossene Oberfläche und \mathbf{n} der Normalenvektor auf der Oberfläche ist [78]. Nach Gross und Seelig [78] vereinfacht sich der Eshelby-Tensor (2.40) bei infinitesimalen Deformationen zu

$$\Sigma = W\mathbf{I} - \mathbf{F}^T \mathbf{S} \approx W\mathbf{I} - (\nabla_x \mathbf{u})^T \boldsymbol{\sigma}.$$

Wird der J-Integralvektor J für jede beliebige Fläche ∂V bestimmt, die ein defektfreies Material ohne Singularitäten einschließt, so verschwindet dieser, denn die Divergenz von Σ wird zum Nullvektor. Befindet sich eine Singularität innerhalb der Fläche ∂V , so ist der J-Integralvektor J vom Nullvektor verschieden. Bei ebenen Problemen, wie der Rissausbreitung, reduziert sich der J-Integralvektor auf zwei Komponenten J_x und J_y und das Flächenintegral wird zu einem Konturintegral, gemäß Abbildung 7.3 b). Dann beschreiben J_x und J_y die Energiefreisetzung des Systems, wenn die Rissflanken zusammen mit der Risspitze in x - bzw. y -Richtung verschoben werden. Während eine Fortpflanzung des Risses in y -Richtung nur formal möglich ist, ist die Rissfortpflanzung in x -Richtung kinematisch möglich. Das dazugehörige Konturintegral lautet

$$J = J_x = \int_S \Sigma_{kx} n_x ds. \quad (7.5)$$

Dieses Konturintegral wird als das *J-Integral* bezeichnet, wobei der Index üblicherweise weggelassen wird. Das J-Integral ist in der linearen Bruchmechanik äquivalent zu K bzw. G (siehe z. B. [78])

$$J = -\frac{\partial \Pi}{\partial A} = G.$$

Ein großer Vorteil des J-Integrals ist seine Wegunabhängigkeit unter der Annahme von ebenen und unbelasteten Rissufern. Durch die Wahl des Integrationsweges S in hinreichender Entfernung von der Risspitze, kann auf eine aufwendige Berechnung der Feldgrößen im Rissspitzenbereich verzichtet werden.

Darüber hinaus kann das J-Integral auch bei inelastischem Materialverhalten für die Berechnung der Energiefreisetzungsrates verwendet werden. Allerdings wird das J-Integral im Falle einer Plastifizierung an der Risspitze wegabhängig, da ein erheblicher Anteil der Energie durch Plastifizierungsvorgänge dissipiert. Um die Wegunabhängigkeit wieder herzustellen, wurden unterschiedliche Modifikationen vorgeschlagen, die in der Arbeit von Carpenter et al. [108] verglichen werden.

7.2. Literaturüberblick der Phasenfeldansätze zur Modellierung der Rissausbreitung

Die Entwicklung von Phasenfeldmodellen zur Modellierung der Rissausbreitung reicht zurück in die späten Neunziger. Dabei wird zwischen den physikalischen und mechanischen Modellansätzen unterschieden. Die physikalischen Modellansätze basieren auf der Ginzburg-Landau-Phasenumwandlungstheorie. Hingegen wird bei den mechanischen Ansätzen die Griffithsche Theorie (siehe Abschnitt 7.1.2) als Basis verwendet [4]. Bei beiden Ansätzen wird ein Ordnungsparameter für den Rissbereich eingeführt, der einen kontinuierlichen Übergang zwischen intaktem und zerstörtem Material beschreibt. Im Folgenden werden zuerst die physikalischen und anschließend die mechanischen Modellansätze in chronologischer Reihenfolge beschrieben. Dabei wird bei den meisten Termen die Originalnotation der Autoren verwendet. Allerdings wurde in einigen Fällen die Notation abgeändert, um Vergleichbarkeit zu gewährleisten.

7.2.1. Physikalische Modellansätze

Einer der ersten physikalischen Phasenfeldansätze zur Modellierung der Rissausbreitung wurden von Aranson et al. [109] vorgestellt. Sie haben einen Ordnungsparameter $\rho(\mathbf{x}, t)$ eingeführt, der die

Dichte des Risses beschreibt und die Bewegungsgleichung des Risses mit der mechanischen Impulsbilanz (2.21) koppelt. Wie bei Phasenfeldansätzen wechselt der Ordnungsparameter seinen Wert kontinuierlich zwischen $\rho = 1$ innerhalb des Materials und $\rho = 0$ innerhalb des Rissbereiches. Da der Rissbereich spannungsfrei ist, kann der Youngsche Modul entsprechend mit dem Ordnungsparameter linear interpoliert werden $\mathcal{E}(\rho) = \mathcal{E}_0\rho$, mit \mathcal{E}_0 als Youngscher Modul des Materials. Damit ergibt sich für die lokale Caushysche Spannung für isotrope Materialien im zweidimensionalen Fall

$$\sigma_{ij} = \frac{\mathcal{E}(\rho)}{1 + \nu} \left(\varepsilon_{ij} + \frac{\nu}{1 - \nu} \varepsilon_{ll} \delta_{ij} \right) + \eta \dot{\rho} \delta_{ij}, \quad i, j = 1, 2. \quad (7.6)$$

ν ist dabei die Querkontraktion und ε_{ij} die Komponenten des infinitesimalen Dehnungstensors. Der letzte Term von Gleichung (7.6) berücksichtigt mit einer Konstanten η den Druckanstieg, der durch den neuen Rissbereich verursacht wird. Die Evolutionsgleichung der Ordnungsparameter folgt einem Relaxationsgesetz

$$\dot{\rho} = D\Delta\rho - \alpha\rho(1 - \rho)F(\rho, \mathbf{u}) + f(\rho)\nabla\rho \cdot \mathbf{u}. \quad (7.7)$$

In Analogie zur Allen-Cahn-Gleichung (3.17) der Phasenfeldmethode entspricht der erste Term von Gleichung (7.7) der Gradientenenergiedichte. Der zweite Term entspricht dem energetischen Potential und dem mechanischen Beitrag der treibenden Kräfte in der Übergangsregion. Der letzte advektive Term koppelt die Geschwindigkeit des Verschiebungsfeldes $\dot{\mathbf{u}}$ mit dem Ordnungsparameter und verursacht eine lokale Verengung des Materials während des Fortschreitens des Rissbereiches.

Das Modell von Aranson et al. [109] beschreibt das gleichmäßige Wachstum eines Risses, aber die Rissöffnung hängt logarithmisch von der Risslänge ab [110]. Karma, Kessler und Levine (KKL) haben 2001 einen alternativen Ansatz vorgestellt (siehe Karma et al. [90]). Dieses Modell verwendet den Ordnungsparameter anstatt der Dichte, wie im Ansatz von Aranson et al. [109], um den Status des Materials zu beschreiben. Karma et al. [90] studierten die Propagation der Risse unter der Modus-III-Belastung. Entsprechend taucht in dem mechanischen Beitrag der freien Energie nur die Lamé-Konstante μ auf

$$\mathcal{F}^{\text{KKL}}(\varphi, \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})) = \int_V \frac{1}{2} D_\varphi |\nabla\varphi|^2 + \omega_{\text{we}}(\varphi) + h(\varphi) \frac{\mu}{2} (\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})^2 - \boldsymbol{\varepsilon}_c^2) dV.$$

D_φ ist die Oberflächenenergie, $\omega_{\text{we}}(\varphi) = \varphi^2(1 - \varphi)^2/4$ ist das Zweimuldenpotential und der letzte Term mit der kritischen Dehnung $\boldsymbol{\varepsilon}_c$ und der Interpolationsfunktion $h(\varphi)$ ist der mechanische Betrag der freien Energie. Äquivalent zu dem vorgestellten Phansenfeldmodell in Abschnitt 3.1 wird in dem KKL-Modell die Evolution der Ordnungsparameter und des Verschiebungsfeldes mit einem Variationsansatz $\tau\dot{\varphi} = -\delta\mathcal{F}^{\text{KKL}}/\delta\varphi$ und $\rho\ddot{\mathbf{u}} = -\delta\mathcal{F}^{\text{KKL}}/\delta\mathbf{u}$ beschrieben.

Das KKL-Modell beschreibt das Risswachstum unter Modus-III-Belastung, aber der Prozess ist vollkommen reversibel d. h. der Riss kann heilen. Henry und Levine [111] haben das KKL-Modell für Anwendungen unter Modus-I und Modus-II-Belastung erweitert. Des Weiteren haben Henry und Levine [111] bereits 2004 eine Formulierung der treibenden Kraft vorgestellt, die Kompressionsbeiträge ausschließt. Hierzu haben sie folgendes Energiefunktional verwendet

$$\mathcal{F}^{\text{HL}}(\varphi, \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})) = \int_V \frac{1}{2} D_\varphi |\nabla\varphi|^2 + \omega_{\text{we}}(\varphi) + h(\varphi)(E_\varphi - \boldsymbol{\varepsilon}_c) dV. \quad (7.8)$$

Es gilt $E_\varphi = \frac{1}{2}\lambda\varepsilon_{ii}^2 + \mu\varepsilon_{ij}^2$, wenn $\text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}) > 0$, und $E_\varphi = \frac{1}{2}\lambda\varepsilon_{ii}^2 + \mu\varepsilon_{ij}^2 - \alpha K\varepsilon_{ii}^2$, wenn $\text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}) < 0$. K ist dabei der Kompressionsmodul und α eine Konstante größer als Eins. Um das Ausheilen des Rissbereiches zu verhindern, hat Henry [112] eine Evolutionsgleichung der Ordnungsparameter vorgeschlagen, die nur eine positive Änderung der Ordnungsparameter zulässt

$$\tau\dot{\varphi} = \min\left(-\frac{\delta\mathcal{F}^{\text{HL}}}{\delta\varphi}, 0\right).$$

Damit ist sichergestellt, dass sich der Rissbereich nur vergrößern kann und ein Ausheilen des Rissbereiches durch eine Minimierung der Gradientenenergie verhindert wird.

7.2.2. Mechanische Modellansätze

Unabhängig von der Entwicklung bei den physikalischen Modellen zur Rissausbreitung wurde von der mechanischen Gemeinschaft ein alternativer Ansatz verfolgt. Dieser Ansatz basiert auf dem Griffithschen Kriterium (7.3). Die Grundlage dieser Ansätze schafften die Arbeiten von Francfort und Marigo [113] und Bourdin et al. [114]. Entsprechend des Griffithschen Kriteriums (7.3) muss nach Francfort und Marigo (FM) das Funktional der freien Energie der Form

$$\mathcal{F}^{\text{FM}}(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}), A) = \int_V W(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}))dV + G_c \int_A dA$$

minimiert werden. Dabei ist $W(\mathbf{u})$ die Formänderungsenergiedichte, A die Rissfläche und G_c der energetische Risswiderstand (7.4). Um die numerische Anwendbarkeit zu gewährleisten, passte Bourdin, Francfort und Marigo (BFM) diese Funktional gemäß dem Phasenfeldkontext folgendermaßen an

$$\mathcal{F}^{\text{BFM}}(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}), \varphi) = \int_V (\varphi^2 + \eta) W(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})) + G_c \left(\frac{1}{\epsilon} \omega_{1\text{we}}(\varphi) + \epsilon |\nabla\varphi|^2 \right) dV. \quad (7.9)$$

Wie auch bei den physikalischen Modellen ist φ ein Ordnungsparameter für den Materialbereich und ϵ der Parameter für die Breite des Übergangsbereiches. η ist ein zusätzlicher Parameter der aus numerischen Gründen dem Rissbereich eine kleine Steifigkeit zuweist. Der wesentliche Unterschied zu den physikalischen Modellen ist die Formulierung des Energiepotentials $\omega_{1\text{we}}(\varphi)$. Anstatt des Zweimuldenpotentials $\omega_{\text{we}}(\varphi)$ wurde von Bourdin et al. [114] ein Einmuldenpotential $\omega_{1\text{we}}(\varphi)$ der Form

$$\omega_{1\text{we}}(\varphi) = \frac{1}{4}(1 - \varphi)^2 \quad (7.10)$$

verwendet. Dieses Potential sorgt für einen definierten Risswiderstand überall im Übergangsbereich. Sogar in Bereichen ohne lokale Krümmung ist ein Risswiderstand vorhanden, was bei Verwendung eines Zweimuldenpotentials $\omega_{\text{we}}(\varphi)$ nicht der Fall ist. Ein Vergleich der beiden Potentiale und die resultierenden Profile der Rissphase für eine eindimensionale Domäne sind in Abbildung 7.4 dargestellt. Die Eigenschaften der Potentiale werden in Abschnitt 7.2.3 untersucht. Kuhn und Müller [92, 115] formulierten auf der Basis des Funktionals (7.9) eine Evolutionsgleichung für den Ordnungsparameter φ vom Allen-Cahn-Typ $\dot{\varphi} = -M\delta\mathcal{F}^{\text{BFM}}/\delta\varphi$ und $\rho\ddot{\mathbf{u}} = -\delta\mathcal{F}^{\text{BFM}}/\delta\mathbf{u}$, mit M als Mobilität. Erstmals in der mechanischen Gemeinschaft bezeichneten Kuhn und Müller [115] ihr Modell als ein Phasenfeldmodell: *A phase field model for fracture*.

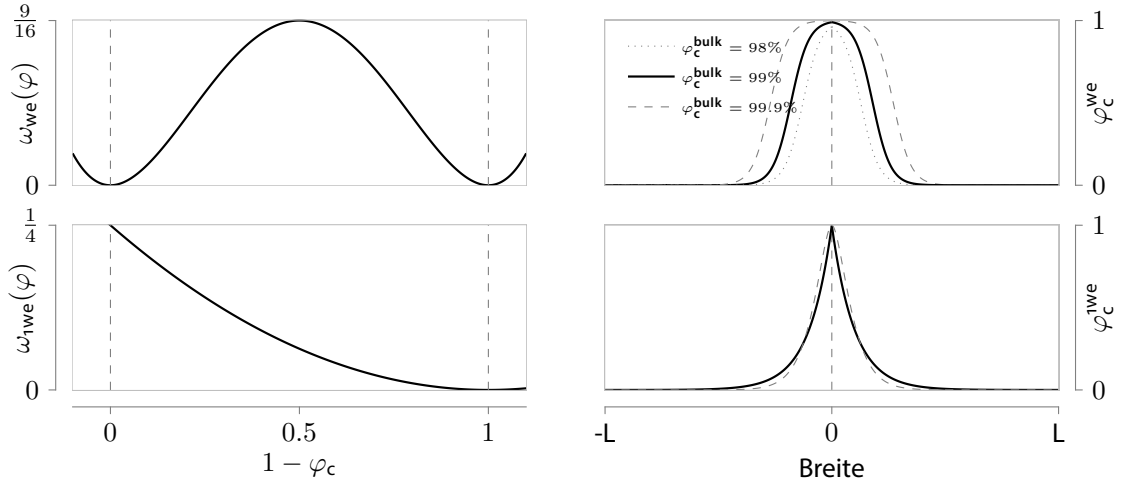


Abbildung 7.4.: Vergleich des Zweimuldenpotentials ω_{we} mit dem Einmuldenpotential ω_{1we} mithilfe der entsprechenden Gleichgewichtsprofile der Ordnungsparameter: (links) sind die Profile der Potentiale und (rechts) die entsprechenden Profile der Ordnungsparameter für einen zweiphasigen Fall gegenübergestellt. Die Profile entsprechen einer eindimensionalen Rissphase φ_c mit einer inneren Zelle in der Mitte des Gebietes. Dabei wurde $\epsilon = L/10$ gewählt. Da 100% des inneren Bereiches für das resultierende Profil des Zweimuldenpotentials erst im Unendlichen erreicht wird, sind die Profile des Rissbereiches für $\varphi_c = 98\%$, $\varphi_c = 99\%$ und $\varphi_c = 99.9\%$ des inneren Bereiches dargestellt. Das gestrichelte φ_c^{1we} -Profil resultiert bei Hinzunahme des Terms höherer Ordnung nach Borden et al. [117] im Funktional (7.15).

Da die Formulierung der mechanischen treibenden Kraft für Rissausbreitung nicht zwischen Kompressions- und Zugbelastung unterscheidet, spalteten Amor, Marigo und Maurini (AMM) die Formänderungsenergiedichte $W(\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u})) = \tilde{W}^+(\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u})) + \tilde{W}^-(\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u}))$ in einen volumetrischen $\tilde{W}^+(\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u}))$ und einen deviatorischen $\tilde{W}^-(\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u}))$ Anteil auf. Die entsprechenden Anteile sind folgendermaßen definiert

$$\begin{aligned}\tilde{W}^+(\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u})) &= \frac{1}{2}(\lambda + 2\mu)\langle \text{sp}(\boldsymbol{\epsilon}) \rangle_+^2 + \mu(\boldsymbol{\epsilon}^{\text{dev}} \cdot \boldsymbol{\epsilon}^{\text{dev}}) \\ \tilde{W}^-(\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u})) &= \frac{1}{2}(\lambda + 2\mu)\langle \text{sp}(\boldsymbol{\epsilon}) \rangle_-^2,\end{aligned}$$

dabei sind $\langle a \rangle_{\pm} = (a \pm |a|)/2$ und $\boldsymbol{\epsilon}^{\text{dev}} = \boldsymbol{\epsilon} - \text{sp}(\boldsymbol{\epsilon})\mathbf{I}/3$. Mit dieser Aufspaltung der Formänderungsenergiedichte formulierten Amor et al. [116] das Energiefunktional (7.9) folgendermaßen

$$\mathcal{F}^{\text{AMM}}(\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u}), \varphi) = \int_V (\varphi^2 + \eta) \tilde{W}^+(\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u})) + \tilde{W}^-(\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u})) + G_c \left(\frac{1}{\epsilon} \omega_{1we}(\varphi) + \epsilon |\nabla \varphi|^2 \right) dV.$$

Ähnlich wie beim Modell von Henry und Levine [111] werden auf diese Weise die Kompressionsbeiträge in der Evolutionsgleichung $\dot{\varphi} = -M \delta \mathcal{F}^{\text{AMM}} / \delta \varphi$ ausgeschlossen.

Miehe et al. [93] schlugen eine alternative Aufspaltung der Formänderungsenergiedichte vor. Sie nutzten die spektrale Aufspaltung des Dehnungstensors

$$\boldsymbol{\epsilon} = \sum_{i=1}^3 \lambda_i^{\epsilon} \mathbf{n}_i^{\epsilon} \otimes \mathbf{n}_i^{\epsilon},$$

mit λ_i^ε als Eigenwerte und \mathbf{n}_i^ε als entsprechende Eigenvektoren des Dehnungstensors, um zwischen Zug- und Kompressionsdehnung zu trennen. Für die Teilbeiträge der Formänderungsenergiegedichte $W(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})) = W^+(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})) + W^-(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}))$ folgt

$$W^\pm(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})) = \frac{1}{2} \lambda (\text{sp}(\boldsymbol{\varepsilon}))_\pm^2 + \mu \text{sp}(\boldsymbol{\varepsilon}_\pm^2), \quad (7.11)$$

dabei ist $\boldsymbol{\varepsilon}_\pm = \sum_i \langle \lambda_i^\varepsilon \rangle_\pm \mathbf{n}_i^\varepsilon \otimes \mathbf{n}_i^\varepsilon$. Außerdem nutzten Miehe et al. [93] erstmals den Ordnungsparameter für die Rissphase φ_c , um einen kontinuierlichen Übergang zwischen intaktem $\varphi_c = 0$ und zerstörtem $\varphi_c = 1$ im Material zu modellieren. Entsprechend ändert sich das Einmuldenpotential $\omega_{\text{Iwe}}(\varphi_c) = \varphi_c^2/4$ und es ergibt sich für das Energiefunktional nach Miehe, Welschinger und Hofacker (MWH)

$$\begin{aligned} \mathcal{F}^{\text{MWH}}(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}), \varphi_c) = \int_V & \left((1 - \varphi_c^2) + \eta \right) W^+(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})) + W^-(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})) \\ & + G_c \left(\frac{1}{\varepsilon} \omega_{\text{Iwe}}(\varphi_c) + \varepsilon |\nabla \varphi_c|^2 \right) dV. \end{aligned} \quad (7.12)$$

Um den Rissheilungsprozess zu unterdrücken, führten Miehe et al. [93] ein zusätzliches Feld der maximalen Referenzenergie

$$W^{\text{max}}(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}, t)) = \max_{\tau \in [0, t]} W^+(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}, \tau)) \quad (7.13)$$

ein. Anstatt W^+ wird das Referenzenergiefeld $W^{\text{max}}(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}, t))$ als der mechanische Beitrag der treibende Kraft verwendet. Damit ergibt sich für die Evolutionsgleichung der Rissphase

$$\dot{\varphi}_c = M \left(2(1 - \varphi_c) W^{\text{max}}(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}, t)) + G_c \left(\frac{1}{\varepsilon} \varphi_c - \varepsilon \Delta \varphi_c \right) \right). \quad (7.14)$$

Die Evolutionsgleichung des Verschiebungsfeldes bleibt dabei unverändert $\rho \ddot{\mathbf{u}} = -\delta \mathcal{F}^{\text{MWH}} / \delta \mathbf{u}$ und führt zu dem folgendem Ausdruck für die Spannung

$$\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}), \varphi_c) = (1 - \varphi_c)^2 \frac{\partial W^+(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}))}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} + \frac{\partial W^-(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}))}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}.$$

Zusammen mit der Evolutionsgleichung der Rissphase (7.14) wird dieses Gleichungssystem von Ambati et al. [4] als *anisotroper* Formalismus bezeichnet. Daher schlagen Ambati et al. [4] vor, für die Spannungsberechnung die ursprüngliche Formulierung von Bourdin et al. [114] zu verwenden

$$\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}), \varphi_c) = (1 - \varphi_c)^2 \frac{\partial W(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}))}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}.$$

Zusammen mit der Evolutionsgleichung (7.14) bezeichnen Ambati et al. [4] dieses Gleichungssystem als *hybrid*. Allerdings ist das hybride Gleichungssystem nicht mehr konform mit dem Variationsformalismus, denn $\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}), \varphi_c) \neq \delta \mathcal{F} / (\delta \nabla \mathbf{u})$.

Borden et al. [117] untersuchten, ob die Rissflächenenergie $\Gamma = G_c A$ durch die vorgeschlagenen Phasenfeldformulierungen wiedergegeben wird und zeigten, dass dies im Mehrdimensionalen nicht der Fall ist. Daher führten Borden, Hughes, Landis und Verhoosel (BHLV) einen Term höherer Ordnung in die Gradientenenergiegedichte ein. Damit wird das Energiefunktional zu

$$\begin{aligned} \mathcal{F}^{\text{BHLV}}(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}), \varphi_c) = \int_V & \left((1 - \varphi_c^2) + \eta \right) W^+(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})) + W^-(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})) \\ & + G_c \left(\frac{1}{\varepsilon} \omega_{\text{Iwe}}(\varphi_c) + \frac{\varepsilon}{2} |\nabla \varphi_c|^2 + \frac{\varepsilon^3}{4} (\Delta \varphi_c)^2 \right) dV. \end{aligned} \quad (7.15)$$

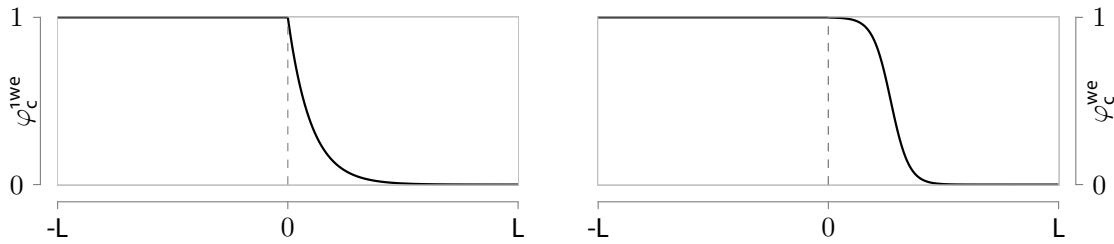


Abbildung 7.5.: Einseitige Gleichgewichtsprofile unter Verwendung des Einmuldenpotentials $\omega_{1we}(\varphi_s)$ (links) und des Zweimuldenpotentials $\omega_{we}(\varphi_s)$ (rechts). Damit $\varphi_s^{we}(0) = 0.999$ erreicht wird, wurde φ_s^{we} in positive Richtung verschoben.

Dieser Term höherer Ordnung verspricht eine genauere Approximation der Rissflächenenergie in mehrdimensionalen Systemen [117]. Das resultierende Gleichgewichtsprofil wird durch diesen Term höherer Ordnung geringfügig verändert, wie es in Abbildung 7.4 gezeigt ist. Allerdings führt das Funktional (7.15) in der Evolutionsgleichung der Rissphase zu einer Ableitung vierter Ordnung, was numerisch sehr unpraktikabel ist.

7.2.3. Vergleich des Einmuldenpotentials mit dem Zweimuldenpotential

Im den letzten zwei Teilabschnitten wurde besprochen, dass die mechanischen Modellansätze, die sich mittlerweile etabliert haben [4], das Einmuldenpotential $\omega_{1we}(\varphi)$ (siehe Gl. (7.10)) verwenden. Dieses Potential sorgt dafür, dass der Rissbereich stets zu der flachsten Form strebt. Erst wenn der Risswiderstand G_c durch treibende Kräfte überwunden wird, propagiert der Riss. Das Doppelmuldenpotential $\omega_{we}(\varphi)$ (siehe Gl. (3.6)) hingegen bietet in Bereichen ohne eine lokale Krümmung gar keinen Widerstand gegen Phasenumwandlung. Erst wenn lokal eine Krümmung vorhanden ist, existiert der Widerstand von der Seite der Oberflächenenergie. Durch einen Vergleich der Kräfte, die vom Potential ausgehen, wird dieser Zusammenhang erkenntlich.

Es wird ein eindimensionales System der Länge $2L$ mit einem einseitigen Phasenübergang bei $x = 0$ betrachtet. Verglichen wird ein physikalischer Ansatz mit einem Doppelmuldenpotential $\omega_{we} = 9\varphi_c^2(1 - \varphi_c)^2$ und ein mechanischer Ansatz mit einem Einmuldenpotential $\omega_{1we} = \varphi_c^2/4$. Beide Potentiale werden durch den Ordnungsparameter der Rissphase φ_c beschrieben. Die Ansätze sind an die Modelle von Henry und Levine [111] bzw. Bourdin et al. [114] und Miehe et al. [93] angelehnt. Allerdings wurde der Vorfaktor des Einmuldenpotentials derart angepasst, dass die Oberflächenenergie reproduziert wird (siehe Abschnitt 7.2.3). In Abbildung 7.5 sind die entsprechenden Gleichgewichtsprofile sowohl für das Doppelmuldenpotential als auch für das Einmuldenpotential dargestellt. Es wird nur die Wirkung der Potentiale untersucht, daher werden die mechanischen treibenden Kräfte vernachlässigt. Mit der energetischen Barriere G_c und dem Parameter für die Breite des Übergangsbereiches ϵ folgt für die freie Energie beider Ansätze

$$\mathcal{F}_{\text{ph/mech}}^c = \int G_c \left(\epsilon |\nabla \varphi_c|^2 + \frac{1}{\epsilon} \omega_{\text{we/1we}}(\varphi_c) \right) dV.$$

Es wird die übliche Annahme getroffen, dass das Profil des Ordnungsparameters φ_c dem unbelasteten Zustand entspricht. Damit ist das Profil der Ordnungsparameter durch den Gleichgewichtszustand $\delta \mathcal{F}_{\text{ph/mech}}^c / \delta \varphi_c = 0$ charakterisiert. Analog zu der Berechnung in Abschnitt 3.1.3 folgt für die

Gradienten von φ_c für den zugrundeliegenden eindimensionalen Fall

$$\begin{aligned}
 2\epsilon \frac{\partial^2 \varphi_c}{\partial x^2} &= \frac{1}{\epsilon} \frac{\partial \omega_{we/1we}(\varphi_c)}{\partial \varphi_c} & (7.16) \\
 \int_0^x 2 \frac{\partial \varphi_c}{\partial x} \left(\frac{\partial^2 \varphi_c}{\partial x^2} \right) dx &= \frac{1}{\epsilon^2} \int_0^x \frac{\partial \varphi_c}{\partial x} \frac{\partial \omega_{we/1we}(\varphi_c)}{\partial \varphi_c} dx \\
 \left(\frac{\partial \varphi_c}{\partial x} \right)^2 &= \frac{1}{\epsilon^2} \omega_{we/1we}(\varphi_c) \\
 \frac{\partial \varphi_c}{\partial x} &= \pm \sqrt{\frac{1}{\epsilon^2} \omega_{we/1we}(\varphi_c)}.
 \end{aligned}$$

Damit kann die resultierende Kraft entlang des Übergangsbereiches ausgehend von den Potentialen ω_{we} bzw. ω_{1we} ausgewertet werden. Unter Verwendung des Zweimuldenpotentials ist diese Kraft für den eindimensionalen Fall gegeben durch

$$\begin{aligned}
 \int_0^L \frac{G_c}{\epsilon} \frac{\partial \omega_{we}}{\partial \varphi_c} dx &= \int_0^1 \frac{G_c}{\epsilon} \frac{\partial \omega_{we}}{\partial \varphi_c} \frac{\partial x}{\partial \varphi_c} d\varphi_c \\
 &= \int_0^1 G_c \frac{12}{3} \frac{\varphi_c - 3\varphi_c^2 + 2\varphi_c^3}{\varphi_c(1-\varphi_c)} d\varphi_c \\
 &= 4G_c(\varphi_c - \varphi_c^2)|_0^1 = 0.
 \end{aligned}$$

Im eindimensionalen Fall existiert somit kein Widerstand gegen eine Phasenumwandlung von der Seite der Grenzflächenenergie. Erst im Zwei- oder Dreidimensionalen, wenn eine lokale Krümmung κ vorhanden ist, wird der Beitrag der Grenzflächenenergie zu $-G_c\kappa$. Dieser Beitrag kommt allerdings von der Gradientenenergiedichte und nicht von dem Potential. Eine Beweis hierfür ist in Abschnitt 3.1.4 zu finden. Daher ist beim Modell von Henry und Levine [111] und Henry [112] der mechanische Anteil der freien Energie so konstruiert, dass erst ein Beitrag existiert, wenn ein kritischer Wert überwunden wurde (siehe Gl. (7.8)). Treten weitere treibende Kräfte im System auf, wie z. B. die Krümmungsminimierung einer gekrümmten Rissfläche oder Energieminimierung an einem Tripelpunkt in Multiphasensystemen, so führen diese widerstandslos zur Bewegung der Rissufer und das ist unphysikalisch.

Analog folgt für die resultierende Kraft entlang des Übergangsbereiches für das Einmuldenpotential

$$\int_0^L \frac{G_c}{\epsilon} \frac{\partial \omega_{1we}}{\partial \varphi_c} dx = \int_0^1 G_c \frac{\varphi_c}{\varphi_c} d\varphi_c = G_c \varphi_c|_0^1 = G_c. \quad (7.17)$$

Somit ist sogar im Eindimensionalen eine vom Potential ausgehende treibende Kraft von G_c gegeben. Dadurch entsteht ein Widerstand gegen den Rissfortschritt. Erst wenn der Risswiderstand überwunden ist, propagiert der Riss. Allerdings führt diese treibende Kraft zu einem Zusammenschrumpfen des Rissbereiches. Da dieses Verhalten ebenfalls unphysikalisch ist, kann das Zusammenschrumpfen durch folgende Möglichkeiten unterbunden werden:

- Bedingung in der Evolutionsgleichung $\dot{\varphi}_c = \min(-\delta\mathcal{F}/\delta\varphi, 0)$ [92, 112],
- φ_c wird fixiert, wenn sein Wert nahezu Eins wird [92],
- Feld der maximalen Referenzenergie $W^{\max}(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}, t))$ (siehe Gl. (7.13)), das als ständige treibende Kraft wirkt [93].

Rissoberflächenenergie

Ein weiterer Unterschied beider Ansätze zeigt sich in der resultierenden Rissoberflächenenergie. Für den betrachteten eindimensionalen Fall folgt für die Rissoberflächenenergie Γ des physikalischen Ansatzes

$$\begin{aligned}\Gamma &= \int_0^L G_c \left(\epsilon \left(\frac{\partial \varphi_s}{\partial x} \right)^2 + \frac{1}{\epsilon} \omega_{we}(\varphi_c) \right) dx \\ &= \int_0^1 \frac{2G_c}{\epsilon} \omega_{we}(\varphi_c) \frac{\partial x}{\partial \varphi_c} d\varphi_c = \int_0^1 2G_c \sqrt{\omega_{we}(\varphi_c)} d\varphi_c \\ &= 2G_c \int_0^1 3\varphi_c(1-\varphi_c) d\varphi_c = G_c.\end{aligned}$$

Damit dieser Zusammenhang erfüllt wird, wurde der Vorfaktor vor dem Potential entsprechend gewählt. Bei der Berechnung wurde ein unbelasteter Gleichgewichtszustand vorausgesetzt und entsprechend Gleichung (7.16) ausgenutzt. Analog folgt für den Ansatz mit dem Einmuldenpotential

$$\begin{aligned}\Gamma &= \int_0^L G_c \left(\epsilon \left(\frac{\partial \varphi_c}{\partial x} \right)^2 + \frac{1}{\epsilon} \omega_{1we}(\varphi_c) \right) dx \tag{7.18} \\ &= \int_0^1 2G_c \sqrt{\omega_{1we}(\varphi_c)} d\varphi_c \\ &= G_c \int_0^1 \varphi_c d\varphi_c = \frac{G_c}{2}.\end{aligned}$$

Erst bei Überschreiten von zwei Übergangsbereichen wird der energetische Widerstand G_c erreicht. Dies ist konform mit dem energetischen Griffithschen Kriterium (7.3) für den Rissfortschritt [92, 93, 114].

Auch für den physikalischen Ansatz kann der Vorfaktor so angepasst werden, dass das Griffithsche Kriterium (7.3) erfüllt wird. Daher ist das wichtigste Kriterium für das mechanische Phasenfeldmodell, dass ein lokaler Widerstand gegen Phasenumwandlung auch ohne eine lokale Krümmung vorhanden ist.

7.3. Phasenfeldmodell für Rissausbreitung basierend auf der Ginzburg-Landau-Theorie mit Anwendungen

In Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde sowohl ein Phasenfeldmodell auf der Basis der Ginzburg-Landau-Phasenumwandlungstheorie als auch ein Multiphasenfeldmodell auf Basis der Griffithschen Theorie entwickelt und angewendet. In diesem Abschnitt wird entsprechend der physikalische Modeansatz kurz vorgestellt und Anwendungen zur Rissausbreitung in Gläsern, gekoppelt mit Diffusion von Wasser an den Rissufern, sowie Anwendungen zur Plastifizierung an der Risspitze gezeigt.

In Kapitel 3 wurde ein Multiphasenfeldmodell für die Beschreibung von Phasenumwandlungsprozessen vorgestellt. Wird in diesem Ansatz für eine der Phasen eine vernachlässigbare Steifigkeit

gewählt, was der Steifigkeit einer Rissphase φ_c entspricht, so kann mit diesem Ansatz die Rissausbreitung modelliert werden [54, 56, 57]. Dieser Ansatz kommt den physikalischen Modellen für Rissausbreitung, die in Abschnitt 7.2.1 beschrieben wurden, sehr nahe. Der wesentliche Unterschied ist die Verwendung eines Multihindernis- bzw. eines Zweihindernispotentials anstatt eines Zweimuldenpotentials, das üblicherweise verwendet wird [90, 109, 111, 112], und die verallgemeinerte Darstellung für ein Multiphasensystem. Ein weiterer Vorteil des Modells ist die Möglichkeit der Verwendung unterschiedlicher physikalischer Felder und deren Kopplung. So wurde in Schneider et al. [57] die Rissausbreitung unter Berücksichtigung von Wasserdiffusion in Gläsern untersucht und in Schneider et al. [56] eine Entwicklung der plastischen Zone an der Risspitze. Werden diese physikalischen Felder berücksichtigt, folgt für das Funktional der freien Energie der zugrundeliegende physikalische Ansatz

$$\mathcal{F}_{\text{ph}}^c(\boldsymbol{\varphi}, \boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{c}) = \int_V \varepsilon a(\boldsymbol{\varphi}, \nabla \boldsymbol{\varphi}) + \frac{1}{\varepsilon} \omega_{\text{ob}}(\boldsymbol{\varphi}) + W_{\text{chem}}(\boldsymbol{c}, \boldsymbol{\varphi}) + W_{\text{el}}(\boldsymbol{\varepsilon}_{\text{el}}, \boldsymbol{\varphi}) + W_{\text{pl}}(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{pl}}, \boldsymbol{\varphi}) dV. (7.19)$$

Das N -Tupel $\boldsymbol{\varphi}$ beinhaltet den Satz an N Ordnungsparametern, inklusive der Rissphase φ_c . Die Gradientenenergiedichte $a(\boldsymbol{\varphi}, \nabla \boldsymbol{\varphi})$ und das Multihindernispotential $\omega_{\text{ob}}(\boldsymbol{\varphi})$ wurden bereits mit den Gleichungen (3.4) und (3.5) definiert.

Neben den Ordnungsparametern ist der chemische Beitrag der freien Energiedichte $W_{\text{chem}}(\boldsymbol{c}, \boldsymbol{\varphi})$ eine Funktion von den Konzentrationen c_i ($i = 1, \dots, K$) der jeweiligen Komponente i , die in dem Tupel \boldsymbol{c} gesammelt sind. Dieser Beitrag wird abhängig vom zu modellierenden Phasenumwandlungsprozess gestaltet. Die elastische Formänderungsenergiedichte wurde in Abschnitt 4.2 vorgestellt, wobei in diesem Fall der Einfachheit halber die Voigt / Taylor (VT)-Approximation verwendet wird (siehe Gl. (4.12)). Für die Berechnung der plastischen Dehnung $\boldsymbol{\varepsilon}_{\text{pl}}$ wurde das Prandtl-Reuss-Modell verwendet. Daher folgt nach [33] für den plastischen Beitrag für die jeweilige Phase α

$$W_{\text{pl}}^{\alpha}(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{pl}}^{\alpha}) = \frac{1}{2} H^{\alpha} (\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{pl}}^{\alpha})^2.$$

H^{α} ist der Verfestigungsmodul und $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{pl}}^{\alpha}$ die akkumulierte plastische Dehnung der Phase α . Da bei der elastischen Formänderungsenergiedichte die VT-Approximation verwendet wird und entsprechend nur eine homogenisierte plastische Dehnung existiert, folgt nach [56] für den plastischen Beitrag der freien Energiedichte

$$W_{\text{pl}}(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{pl}}, \boldsymbol{\varphi}) = \sum_{\alpha} W_{\text{pl}}^{\alpha}(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{pl}}^{\alpha}) h^{\alpha}(\boldsymbol{\varphi}) = \frac{1}{2} \left(\sum_{\alpha} H^{\alpha} h^{\alpha}(\boldsymbol{\varphi}) \right) \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{pl}}^2.$$

Für die Berechnung der plastischen Dehnungen wird an dieser Stelle auf den Unterabschnitt 5.2 verwiesen.

Die Evolutionsgleichungen der Ordnungsparameter sind durch Gleichung (3.17) definiert. Ebenfalls folgt aus dem Variationsansatz die mechanische Impulsbilanz: $\varphi \ddot{\boldsymbol{u}} = -\partial \mathcal{F}_{\text{ph}}^c / (\partial \nabla \boldsymbol{u}) = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}$ für die Evolution des Verschiebungsfeldes \boldsymbol{u} . Aus dem Fluss und der zusätzlichen Annahme der Massenkonservierung lässt sich die Diffusionsgleichung herleiten [13]. Da die Temperatur T in den folgenden Beispielen keine Rolle spielt, wird ein isothermer Zustand angenommen und die dimensionslose Temperatur Eins gesetzt. Damit folgt für die Diffusionsgleichung der einzelnen K -Konzentrationsfelder

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = -\nabla \cdot \left(\sum_{j=1}^K L_{ij} \nabla \mu_j \right), \quad \forall c_i, i = 1, \dots, K.$$

Dabei ist $\mu_j = \partial W_{\text{chem}}(\mathbf{c}, \boldsymbol{\varphi}) / \partial c_j$ das jeweilige chemische Potential. L_{ij} sind die Mobilitätskoeffizienten, die durch Diffusivitäten D_i ausgedrückt werden können

$$L_{ij} = L_{ji} = D_i c_i \left(\delta_{ij} - \frac{D_j c_j}{\sum_{k=1}^K D_k c_k} \right), \quad (7.20)$$

dabei ist δ_{ij} das Kronecker-Symbol [13].

7.3.1. Validierung des Rissspitzenfeldes

Wie in Abschnitt 7.1.1 besprochen wurde, sind die Spannungen und Dehnungen in der Umgebung der Risspitze von fundamentaler Bedeutung. Diese sind ausschlaggebend für die Stärke der Energiefreisetzungsrates (7.2), die durch ein J-Integral (7.5) um die Risspitze berechnet werden kann. Daher ist es entscheidend, das Rissspitzenfeld so genau wie möglich abzubilden. Das Innere des Rissbereiches ist spannungsfrei. Daher müssen alle Spannungen aus dem Festphasenbereich beim Übergang zum Rissbereich zu Null abfallen. Damit ist der gesamte Spannungstensor eine sprungbehaftete Größe und im Phasenfeldkontext werden sprungbehaftete Größen linear mit der Interpolationsfunktion interpoliert, um die Sprungbedingungen zu erfüllen (vgl. Abschnitt 4.2). Um diese Hypothese zu untermauern, wurden simulierte Spannungsfelder einer Platte mit einer halbelliptischen Kerbe mit theoretischen Vorhersagen von Muskhelishvili [118] verglichen. Die verwendete Methode und die resultierenden Spannungsfunktionen sind in Anhang A.4 gelistet.

Ein zweidimensionales Simulationsgebiet von 800×800 Zellen im EDZ mit einer halbelliptischen Kerbe am unteren x -Rand wird in x -Richtung mit $\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}_x = (\sigma_0, 0, 0)^T$ belastet. Um die Resultate einer unendlich ausgedehnten Platte besser abzubilden, wurde sowohl für den oberen als auch für den unteren y -Rand die Bedingung $\nabla \mathbf{u} \mathbf{n}_y = \mathbf{0}$ verwendet. Die Spannungsfelder der theoretischen Vorhersagen wurden so angepasst, dass der Mittelwert der theoretischen $\sigma_{zz}^{\text{theor}}$ entlang des x -Randes mit σ_0 übereinstimmt. Um die Vergleichbarkeit zu gewährleisten, wurden die theoretischen Spannungsfelder mit dem Ordnungsparameter der Rissphase φ_c multipliziert. Diese Vorgehensweise verändert lediglich die Spannungsverläufe in einem sehr kleinen Bereich an der Rissphase und hat keinerlei Auswirkungen im Bereich der Festphase.

Die resultierenden Spannungsfelder sind in Abbildung 7.6 dargestellt. Qualitativ ist in den Teilbildern a)-f) eine gute Übereinstimmung der theoretischen und simulierten Spannungsfelder zu erkennen. Allerdings ist ein erheblicher Einfluss der Randbedingungen in der Nähe der Gebietsränder zu sehen. Um diesen Einfluss abzugrenzen, wurden in den Teilbildern g)-l) von Abbildung 7.6 die Spannungsfelder nur an der Risspitze gegenübergestellt. Hier ist eine sehr gute Übereinstimmung der Felder erkennbar.

Damit ist gezeigt, dass die lineare Interpolation des gesamten Spannungstensors, was der VT-Approximation (vgl. Gl. (4.1)) entspricht, zwischen dem Festphasenbereich und dem Rissbereich die richtige Strategie für die Modellierung des Rissbereiches mit der Phasenfeldmethode darstellt. Die vorgestellten Modelle im Literaturüberblick 7.2 und auch das vorgestellte Modell dieses Abschnitts verwenden die VT-Approximation sowohl für die Übergänge zwischen der Riss- und Festphase als auch bei den Mehrphasenmodellen für die Übergänge zwischen den Festphasen gegeneinander. Jedoch ist für die Erfüllung der Sprungbedingungen an den Festphasengrenzflächen eine gemischte Interpolationsmethode, die in Abschnitt 4.3 eingeführt wurde, ein impliziter Berechnungsschritt wie in Abschnitt 6.2 Anwendung findet oder eine andere alternative Möglichkeit notwendig. Daher ist

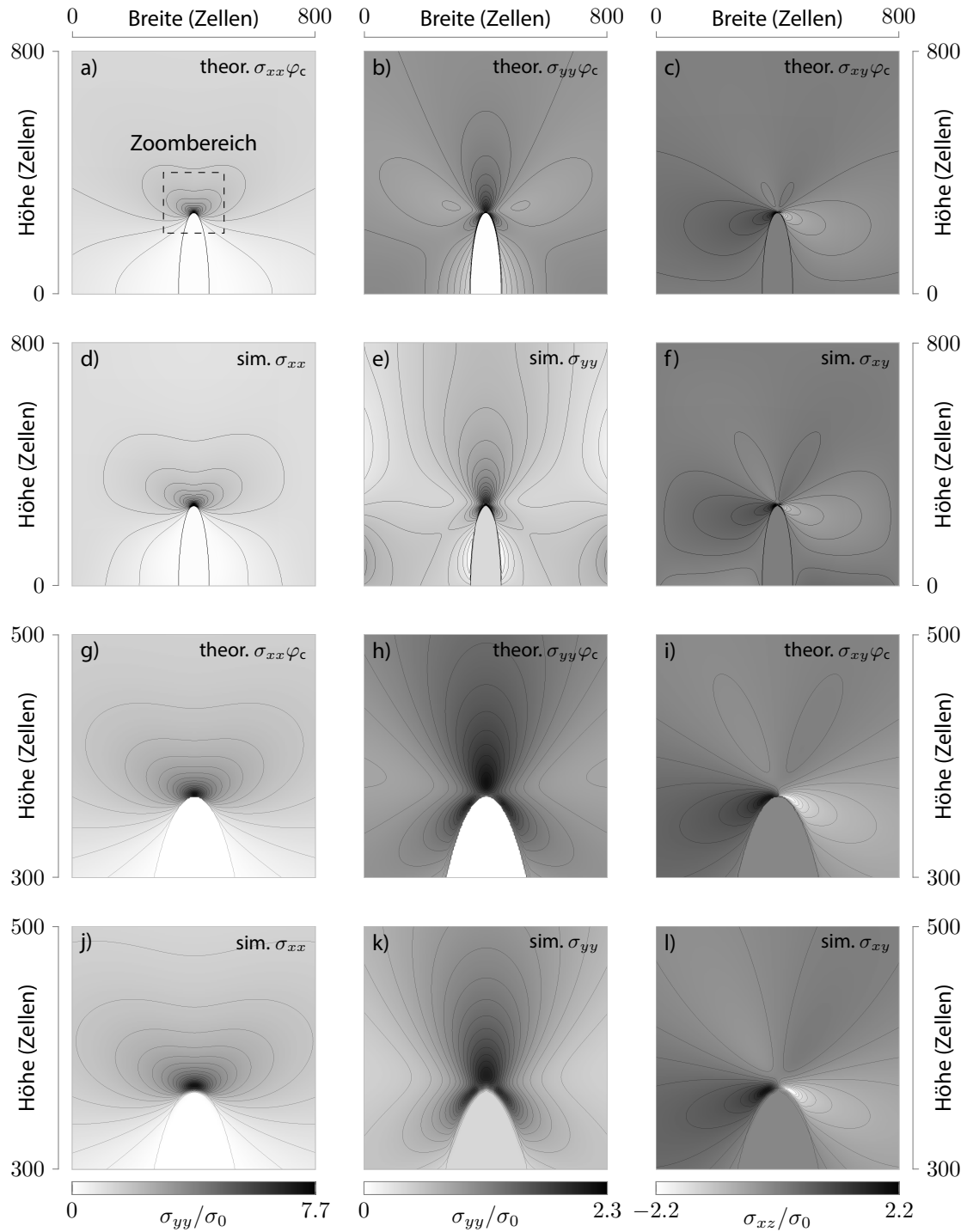


Abbildung 7.6.: Validierung des Rissspitzenfeldes: a)-c) theoretische Spannungsfelder einer Platte mit einer halb-elliptischen Kerbe gemäß Muskhelishvili [118], g)-i) Vergrößerung der Spannungsfelder an der Rissspitze, d)-e) simulierte Spannungsfelder und j)-l) Vergrößerung der simulierten Spannungsfelder. Der Vergrößerungsbereich ist in a) gestrichelt markiert.

eine entkoppelte Modellierung zwischen der Riss- und Festphase und den Festphasen gegeneinander notwendig, um sowohl den mechanischen Sprungbedingungen an den Festphasengrenzflächen als auch dem Spannungsabfall an den Rissflanken und der Risspitze gerecht zu werden. Ein solcher Ansatz wird in Abschnitt 7.6 zur Modellierung der Rissausbreitung in polykristallinen Materialien vorgestellt.

7.3.2. Rissausbreitung in Gläsern unter Wasserdruck

Die Auswirkungen von Wasser auf die Bruchfestigkeit von Gläsern ist noch nicht vollkommen verstanden und wird in der Literatur kontrovers diskutiert [119]. Wiederhorn et al. [120] betonen, dass die Diffusion von Wasser in Quarzgläsern eine starke Auswirkung auf verschiedene Eigenschaften, wie die Steifigkeit und die statische Dauerfestigkeit, bei niedrigen Belastungen hat und beobachten sogar eine Verschiebung der Rissflächen. Nach einem Anriss diffundiert Wasser in die Bruchflächen und verursacht eine Anschwellung, die wiederum zu Druckspannungen führt. Diese Erhöhung der Druckspannungen beeinflusst das unterkritische Risswachstum [121, 122].

Zur Modellierung der Rissausbreitung in Gläsern, gekoppelt mit Diffusion von Wasser in die Risspitzenzone, werden zwei Ordnungsparameter φ_s und φ_c , die repräsentative für die Fest- bzw. die Rissphase stehen, eingeführt. Zusätzlich werden zwei Konzentrationsfelder c_w und c_g für Wasser bzw. Glas verwendet. Das Anschwellen der penetrierten Zone wird durch einen zusätzlichen Eigendehnungsparameter

$$\tilde{\epsilon}_w(c_w^s) = \mathbf{I}(c_w^s - c_0^s), \quad (7.21)$$

der von der Wasserkonzentration in Glas c_w^s abzüglich der initialen Wasserkonzentration c_0^s abhängt, modelliert. Da Glas, speziell die Risspitzenzone von Glas, rein elastisch reagiert [123], müssen keine weiteren inelastischen Dehnungen berücksichtigt werden. Entsprechend fällt der plastische Beitrag im Funktional (7.19) weg. Des Weiteren müssen keine chemisch getriebenen Phasenumwandlungsprozesse berücksichtigt werden. Daher reduziert sich die Evolutionsgleichung der Ordnungsparameter (3.17) zu

$$\frac{\dot{\varphi}_s}{M_{sc}} = \gamma_{sc} \left(\epsilon \Delta \varphi_s - \frac{16}{2\epsilon\pi^2} (1 - 2\varphi_s) \right) - \frac{1}{2} (W_{el}^s - W_{el}^c) \frac{\partial h^s(\varphi)}{\partial \varphi_s}.$$

Ein idealer Löslichkeitsansatz führt innerhalb der Phasen zu einer freien Energie der Form

$$W_{chem}(\mathbf{c}, \varphi) = \sum_{\alpha=1}^2 \sum_{i=1}^2 \left(c_i L_i^\alpha \frac{1 - T_i^\alpha}{\alpha} h^\alpha(\varphi) \right) + c_w \ln(c_w) + c_g \ln(c_g),$$

mit T_i^α als Schmelztemperatur der i -ten Komponente in der Phase α und L_i^α als entsprechenden latente Wärme pro Einheitsvolumen [13]. Entsprechend der Gleichung (7.20) wird durch die gewählten Diffusionskonstanten D_i die Geschwindigkeit des Diffusionsprozesses maßgeblich beeinflusst. Dabei können die Diffusionskonstanten D_i^α für jede Komponente und jede Phase separat gewählt werden. Der Einfachheit halber wird für die lokale Homogenisierung der Diffusionskonstanten die lineare Interpolation $D_i(\varphi) = D_i^s h^s(\varphi) + D_i^c h^c(\varphi)$ mit der Interpolationsfunktion gewählt. Für die Abhängigkeit der Diffusionskonstante von der lokal vorliegenden Spannung wird der Ansatz von Nogami und Tomozawa [124] verwendet. Damit folgt für die Diffusionskonstante

$$D_i(\varphi) = D_{i_0}^s \exp(k\sigma_h) h^s(\varphi) + D_i^c h^c(\varphi). \quad (7.22)$$

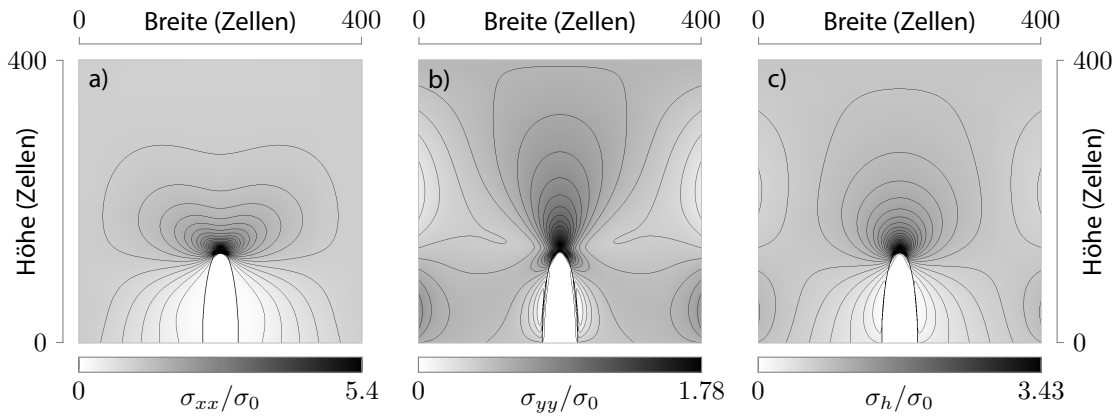


Abbildung 7.7: Spannungen des Rissspitzenfeldes einer Platte mit einer halbelliptischen Kerbe.

Dabei ist $\sigma_h = \text{sp}(\boldsymbol{\sigma})/3$ die lokal vorliegende hydrostatische Spannung, $D_{i_0}^s$ ist die spannungsfreie Diffusivität und die Konstante $k = \Delta V/(RT)$ wird durch das Aktivierungsvolumen ΔV , durch die Gaskonstante R und durch die Temperatur T bestimmt [57].

Wasser diffundiert von der Rissregion ins Glas, bis die maximale Löslichkeit c_{weq}^s von Wasser in Glas erreicht ist. Dieser Gleichgewichtszustand wird erreicht, wenn die folgenden Bedingungen erfüllt werden

$$\mu_w^s(c_{\text{weq}}^s) = \mu_w^c(c_{\text{weq}}^c) \quad (7.23)$$

und

$$f^s(c_{\text{weq}}^s) - \mu_w^s(c_{\text{weq}}^s) = f^c(c_{\text{weq}}^c) - \mu_w^c(c_{\text{weq}}^c). \quad (7.24)$$

Werden die Konstanten $L_w^s = L_g^s = L$, $L_w^c = L_g^c = 0$ und $T_g^s = 1.5$ gesetzt, dann können die übrigen Konstanten über die Gleichgewichtsbedingungen (7.23) und (7.24) bestimmt werden [57]. Alleine durch die Angabe der Löslichkeiten c_{weq}^c und c_{weq}^s ergibt sich somit für die fehlenden Parameter:

$$L = -3 \ln \left(\frac{1 - c_{\text{weq}}^c}{1 - c_{\text{weq}}^s} \right) \quad \text{und} \quad T_w^s = \frac{L}{L + \ln \left(c_{\text{weq}}^c / c_{\text{weq}}^s \right)}.$$

Glasplatte mit einer halbelliptischen Kerbe

Ein zweidimensionales Simulationsgebiet von 400×400 Zellen mit einer halbelliptischen Kerbe am unteren x -Rand wird in x -Richtung mit $\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}_x = (\sigma_0, 0, 0)^T$ belastet, wobei am unteren y -Rand $\nabla \mathbf{u} \mathbf{n}_y = \mathbf{0}$ gilt und der obere y -Rand spannungsfrei ist. Die Spannungen des Rissspitzenfeldes im mechanischen Gleichgewicht sind in Abbildung 7.7 dargestellt. Wasser von dem Rissbereich bzw. Kerbbereich diffundiert durch die Rissufer ins Glas bis die Gleichgewichtskonzentration c_{weq}^s , die der Löslichkeit von Wasser in Glas entspricht, erreicht ist. Dabei läuft dieser Prozess nicht gleichmäßig ab, sondern wird durch die Spannungsspitzen des Rissspitzenfeldes, genauer durch das Druckfeld σ_h , das in der Abbildung 7.7 c) dargestellt ist, gemäß Gleichung (7.22) beeinflusst.

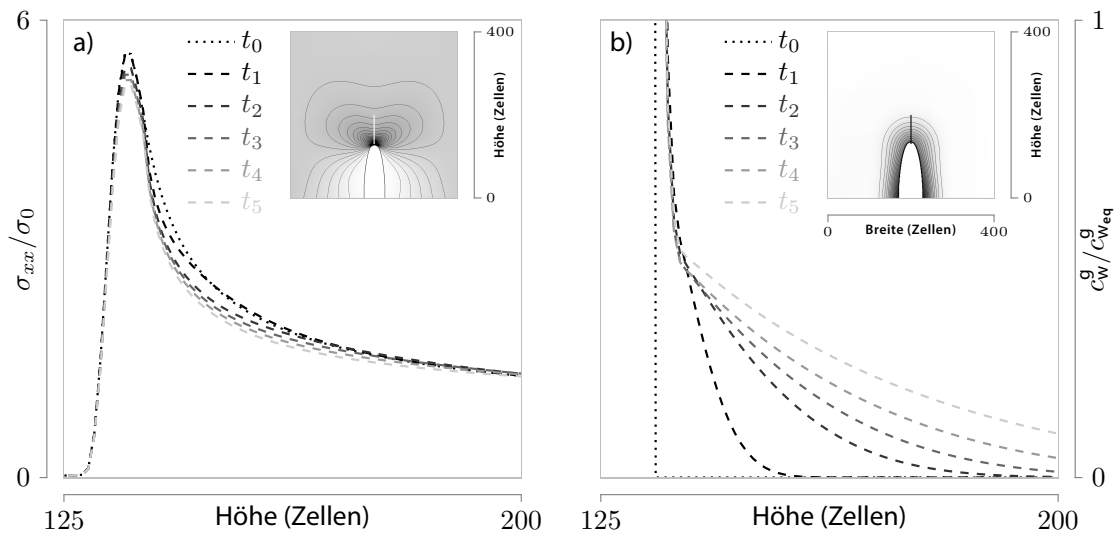


Abbildung 7.8.: a) Profile der σ_{xx} -Spannung entlang der zentralen Achse des Risses (dargestellt im Inlay) zu verschiedenen Zeiten und b) der entsprechende Fortschritt der Wasserkonzentration im Glas c_w^g .

Die Wasserkonzentration in Glas hingegen beeinflusst nach Gleichung (7.21) das Risspitzenfeld. Dieser Zusammenhang ist in der zeitlichen Evolution des Konzentrations- und Spannungsfeldes in Abbildung 7.8 dargestellt. Mit zunehmender Wasserkonzentration an der Risspitze schwillt das Material mehr an und entsprechend das Risspitzenfeld. Entsprechend ändert sich die resultierende Energiefreisetzungsrates und das unterkritische Risswachstum wird beeinflusst, so wie es in den experimentellen Untersuchungen beobachtet wurde [121, 122]. Abhängig von dem Aktivierungsvolumen ΔV und damit der Konstante k wird der Diffusionsprozess durch das Druckfeld σ_h beschleunigt. Da das Druckfeld an der Risspitze am höchsten ist, führt dies entsprechend zu einer höheren Wasserkonzentration und zu einem höheren Anschwellen des Materials in diesem Bereich. Daher wird dieser Bereich als Schwellzone bezeichnet [123]. In Abbildung 7.9 sind zwei Schwellzonen für ein höheres und ein niedriges Aktivierungsvolumen ΔV dargestellt. Eine stärkere Ausprägung der Schwellzone bei einem höheren Aktivierungsvolumen ΔV ist deutlich zu erkennen.

7.3.3. Einfluss der plastischen Zone an der Risspitze

Die Ausbreitung eines Risses in duktilem Material kann durch plastische Effekte gestoppt werden. Die Plastifizierung an der Risspitze vermindert die effektive Energiefreisetzungsrates G und kann bei entsprechender Ausprägung unter das kritische Niveau G_c fallen und damit die Rissausbreitung stoppen [78]. Für die Modellierung dieses Effektes wird ein Zweiphasensystem mit den Ordnungsparametern φ_s und φ_c betrachtet. Da chemische treibende Kräfte in diesen Fall keine Rolle spielen, werden diese vernachlässigt. Damit reduziert sich die Evolutionsgleichung für die Festphase φ_s

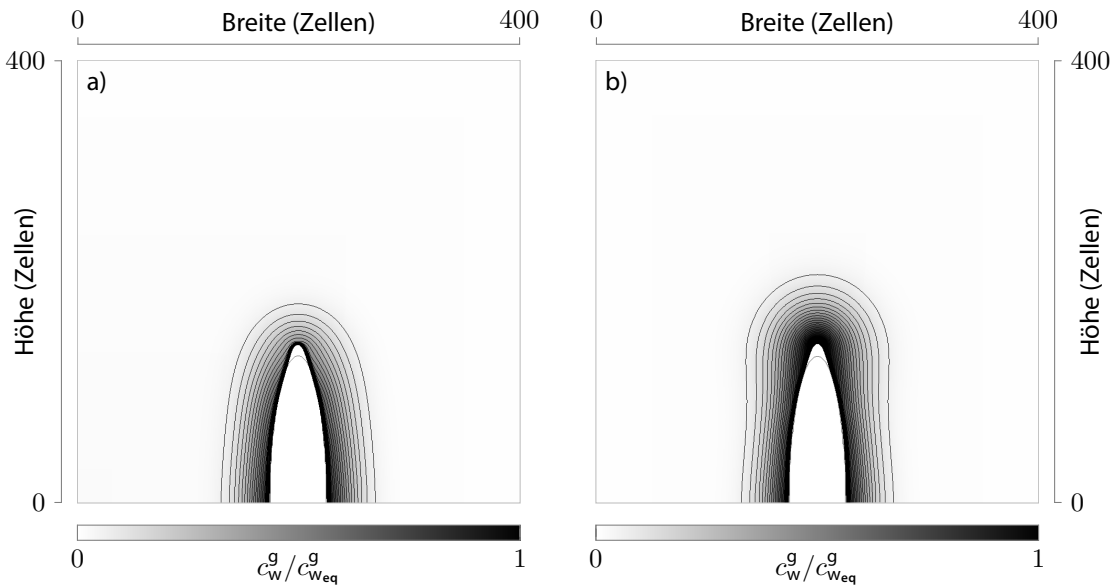


Abbildung 7.9.: Schwellzonen für unterschiedliche Aktivierungsvolumina ΔV bzw. Konstanten k . Im Teilbild a) ist k um einen Faktor 2.5 kleiner als im Teilbild b). Der initiale Zustand des Risses ist durch die schmale schwarze Linie gekennzeichnet.

entsprechend den Gleichungen (3.17) und (7.19) zu folgender Form

$$\frac{\dot{\varphi}_s}{M_{sc}} = \underbrace{\gamma_{sc} \left(\epsilon \Delta \varphi_s - \frac{16}{2\epsilon \pi^2} (1 - 2\varphi_s) \right)}_I - \underbrace{\frac{1}{2} (W_{el}^s - W_{el}^c)}_{II} \frac{\partial h^s(\varphi)}{\partial \varphi_s} - \underbrace{\frac{1}{2} (W_{pl}^s - W_{pl}^c)}_{III} \frac{\partial h^s(\varphi)}{\partial \varphi_s}. \quad (7.25)$$

Teil *I* repräsentiert den energetischen Risswiderstand. Der elastische und der plastische Beitrag, jeweils durch die Teile *II* und *III* verkörpert, müssen den energetischen Risswiderstand überwinden, um eine Umwandlung von Festphase φ_s zu Rissphase φ_c zu erreichen.

Platte mit halbelliptischer Kerbe

Ein zweidimensionales Simulationsgebiet von 400×400 Zellen und einer reellen Ausdehnung von $(400 \mu\text{m})^2$ mit einer halbelliptischen Kerbe am unteren y -Rand ($50 \times 133 \mu\text{m}$) wird in x -Richtung mit $\sigma \mathbf{n}_x = (\sigma_0, 0, 0)^T$ belastet, wobei in y -Richtung $\nabla \mathbf{u} \mathbf{n}_y = \mathbf{0}$ gilt. Für die Festphase wurden die Materialparameter von Stahl mit dem Youngschen Modul $\mathcal{E}_s = 210 \text{ GPa}$ und einer Querkontraktion von $\nu_s = 0.3$ gewählt. Die Steifigkeit der Rissphase ist um einen Faktor 10^{-4} kleiner als die der Festphase. Um einen Einfluss der Rissphase bei der Verfestigung zu verhindern, wurden gleiche Verfestigungsmodule $H_s = H_c$ gewählt. Damit verschwindet der plastische Beitrag (Teil *III*) in der Evolutionsgleichung (7.25). Eine Verkleinerung des effektiven Risswiderstandes durch die Erzeugung von Mikroporen in hoch plastifizierten Bereichen kann damit nicht untersucht werden.

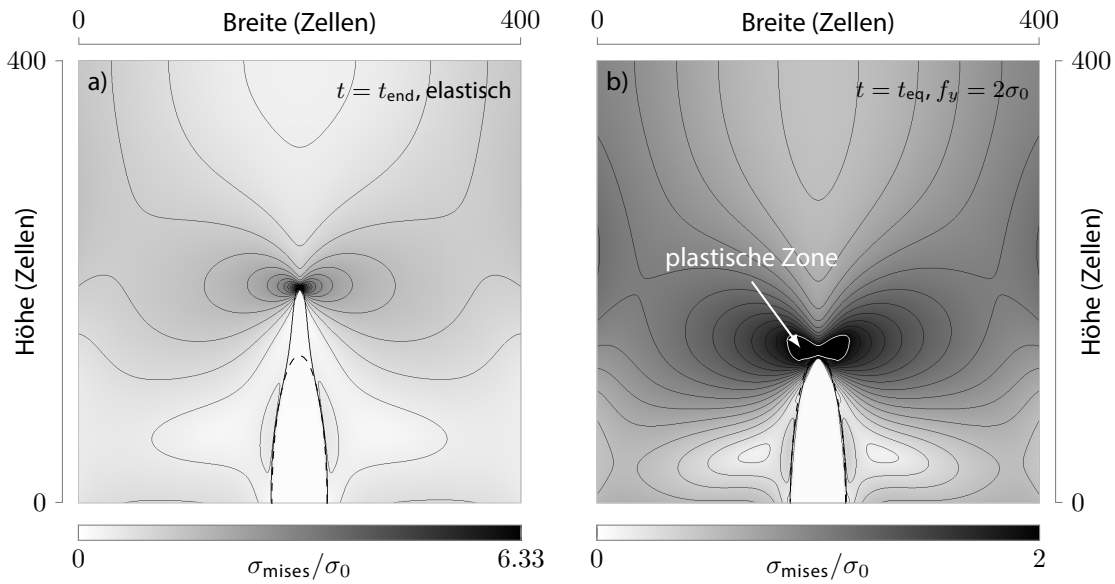


Abbildung 7.10.: Rissausbreitungssimulation für a) duktilen und b) sprödes ($f_y = 200 \text{ MPa}$) Material mit äquivalenten Randbedingungen. Es sind die Mises-Spannung σ_{mises} mit etlichen Isolinien, die 0.5 Isolinie der Rissphase (dick) und die Isolinie des initialen Zustandes (gestrichelt) dargestellt. Der gewählte Zeitschritt t_{end} ist für beide Simulationen gleich gewählt. Für b) entspricht dieser Zeitschritt dem Gleichgewichtszustand $t_{\text{end}} = t_{\text{eq}}$.

Unabhängig von der Wahl der Verfestigungsmodule kann dieser Effekt durch eine zusätzliche Indikatorfunktion, die von einem kritischen Wert der akkumulierten plastischen Dehnung abhängt, berücksichtigt werden. Ein derartiger Ansatz wurde bereits von Ulmer et al. [125] untersucht.

In Abbildung 7.10 a) und b) sind die Mises-Spannungen σ_{mises} für ein sprödes und ein duktilen Material dargestellt. Beim spröden Material ist die Energiefreisetzungsrates höher als der energetische Risswiderstand. Entsprechend breitet sich der Riss aus. Beim duktilen Material bildet sich eine plastische Zone an der Risspitze, wie in Abbildung 7.10 b) zu sehen ist. Durch diese plastische Zone werden Spannungsspitzen des Rissspitzenfeldes abgebaut. Die effektive Energiefreisetzungsrates fällt bis zum kritischen Niveau und es bildet sich ein Gleichgewichtszustand. Dieser Gleichgewichtszustand ist durch die Gleichung

$$\gamma_{\text{sc}} \left(\epsilon \Delta \varphi_s - \frac{16}{2\epsilon\pi^2} (1 - 2\varphi_s) \right) = \frac{1}{2} (W_{\text{el}}^s - W_{\text{el}}^c) \frac{\partial h^s(\varphi)}{\partial \varphi_s}$$

charakterisiert. Abbildung 7.10 b) zeigt das System zu dem Gleichgewichtszeitpunkt $t = t_{\text{eq}}$. Während im spröden Material der Riss unaufhaltsam propagiert, stoppt die plastische Zone den Riss im duktilen Material.

Eine genauere Darstellung der plastischen Zonen ist in Abbildung 7.11 durch die akkumulierte plastische Dehnung $\bar{\epsilon}_{\text{pl}}$ dargestellt. Eine typische Form der plastischen Zonen, entsprechend dem Kriterium nach von Mises, ist bei allen Teilbildern zu erkennen. Bei einer höheren Fließgrenze von $f_y = 2.2\sigma_0$ im Vergleich zu der Simulation, die in Abbildung 7.10 b) zu sehen ist, bildet sich entsprechend eine schwächer ausgeprägte plastische Zone (vgl. Abbildung 7.11 a) und b)). Aber sogar diese schwächer ausgeprägte plastische Zone führt zu einem Gleichgewicht. Wird eine kleinere

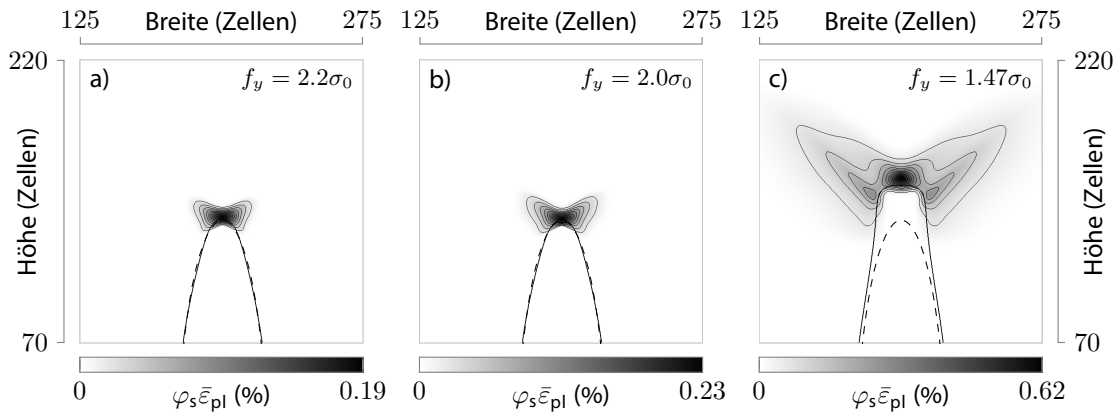


Abbildung 7.11.: Akkumulierte plastische Dehnung $\bar{\epsilon}_{pl}$ der Festphase mit der 0.5 Isolinie von φ_s (dick) und dem initialen Zustand der Rissphase (gestrichelt). a) und b) plastische Zonen im Gleichgewichtszustand bei unterschiedlichen Fließgrenzen f_y . c) gespreizte Risspitze und plastische Zone eines propagierenden Risses.

Fließgrenze $f_y = 1.47\sigma_0$ gewählt, breitet sich der Riss weiter aus und formt eine gespreizte Risspitze, wie es in Teilbild c) von Abbildung 7.11 gezeigt ist.

7.4. Zweiphasenmodell für die Beschreibung der Rissausbreitung mit einem Einzelhindernispotential

Das Einzelmuldenpotential besitzt hervorragende Eigenschaften für die Beschreibung der Rissausbreitung, wie in Abschnitt 7.2.3 besprochen wurde. Zum einen ermöglicht das Potential einen definierten Widerstand gegen den Rissvorschritt. Zum anderen wird die Rissoberflächenenergie derart abgebildet, dass das Griffithsche Kriterium (7.3) erfüllt wird. Allerdings verschwindet die Ableitung des Potentials an der Stelle $\varphi_c = 0$. Wie auch beim Doppelmuldenpotential führt dies zu einem weit ausgedehnten Profil der Ordnungsparameter, wie in Abbildungen 7.4 und 7.5 zu sehen ist. Ein derart breiter Übergangsbereich ist aus numerischer Sicht sehr ungünstig. Aus diesem Grund wurde das Multimuldenpotential von Nestler et al. [13] für die Beschreibung von Phasenumwandlungsprozessen durch das Multihindernispotential (3.5) ersetzt. Das Hindernispotential erfüllt die notwendigen Eigenschaften für die Beschreibung von Phasenumwandlungsprozessen, wie in Abschnitt 3.1 beschrieben wurde, und bietet gleichzeitig eine wohl definierte Breite des Übergangsbereiches (siehe Gl. (3.22)). Des Weiteren kann das *Einzelhindernispotential* $\omega_{lob}(\varphi_c)$ mit dem Multihindernispotential $\omega_{ob}(\varphi_s)$, das für die Modellierung des Festphasenbereiches φ_s verwendet wird, gekoppelt werden. Daher wird das folgende Einzelhindernispotential

$$\omega_{lob}(\varphi_c) = k_w \varphi_c$$

als Energiepotential für die Modellierung der energetischen Barriere zwischen dem Riss- und dem Festphasenbereich verwendet. k_w ist dabei eine Konstante, die ermittelt werden muss. Ähnliche Potentiale wurden bereits von Bourdin et al. [126] und Hossain et al. [99] verwendet. Angelehnt an

das Modell von Miehe et al. [93] (siehe Gl. (7.12)) folgt für das Energiefunktional eines Zweiphasensystems mit einer Rissphase φ_c

$$\mathcal{F}^c(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}), \varphi_c) = \int_V (1 - \varphi_c)^2 W^+(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})) + W^-(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})) + G_c k \left(\frac{1}{\epsilon} \omega_{10b}(\varphi_c) + \epsilon |\nabla \varphi_c|^2 \right) dV. \quad (7.26)$$

$W^\pm(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}))$ sind die Beiträge der aufgespaltenen Formänderungsenergiedichte (7.11) und k ist eine zusätzliche Konstante, die ermittelt werden muss.

Für die Ermittlung der unbekanntenen Konstanten k und k_w wird ein eindimensionales System der Länge $2L$ mit einem Phasenübergang bei $x = 0$ betrachtet, wie es in Abbildung 7.12 dargestellt ist. Zunächst wird k_w derart angepasst, dass die Interfacebreite der Interfacebreite des Multiphasenfeldmodells, das in Abschnitt 3.1 vorgestellt wurde, gleicht. Nach Gleichung (3.22) ist die Breite des Übergangsbereiches bei Verwendung des Multihindernispotentials gleich $\epsilon \pi^2 / 4$. Entsprechend folgt für die Konstante k_w

$$l = \frac{\pi^2 \epsilon}{4} = \int_0^1 \frac{\partial x}{\partial \varphi_c} d\varphi_c = \int_0^1 \frac{\epsilon}{\sqrt{k_w \varphi_c}} d\varphi_c = \frac{2\epsilon}{\sqrt{k_w}}, \quad \Rightarrow k_w = \left(\frac{8}{\pi^2} \right)^2. \quad (7.27)$$

Die physikalisch unwahrscheinliche Lösung wurde dabei vernachlässigt. Um das Griffithsche Kriterium zu erfüllen, muss die Bedingung (7.18) erfüllt sein. Diese Bedingung wird nun verwendet, um die zweite Konstante zu ermitteln

$$\begin{aligned} \frac{G_c}{2} &= \int_0^L G_c k \left(\epsilon \left(\frac{\partial \varphi_c}{\partial x} \right)^2 + \frac{1}{\epsilon} \omega_{obl}(\varphi_c) \right) dx \\ &= \int_0^1 2G_c k \sqrt{k_w \varphi_c} d\varphi_c = \frac{4}{3} G_c k \sqrt{k_w}. \end{aligned}$$

Damit ist mit der Wahl von

$$k = \frac{3}{8\sqrt{k_w}} = \frac{3\pi^2}{64}$$

das energetische Griffithsche Kriterium für den Rissfortschritt von der Seite der Rissoberflächenenergie erfüllt. Hossain et al. [99] nutzen nur eine Regularisierungskonstante $k = 3/8$. Entsprechend ist der vorgestellte Ansatz bei einer Wahl von $k_w = 1$ äquivalent zu dem Modell von Hossain et al. [99]. Für das Profil des Ordnungsparameters folgt

$$\varphi_c(x) = \left(1 - \frac{|x|}{l} \right)^2, \quad -l < x < l.$$

Die Potentiale $\omega_{1we}(\varphi_c)$ und $\omega_{10b}(\varphi_c)$ und die entsprechenden Gleichgewichtsprofile werden in Abbildung 7.12 verglichen. Das Einzelhindernispotential $\omega_{10b}(\varphi_c)$ garantiert ein wohl definiertes Profil mit einer definierten Breite des Übergangsbereiches von $2l$.

Analog zur Berechnung in Abschnitt 7.2.3 folgt für die resultierende Kraft entlang des Übergangsbereiches für das Einzelhindernispotential

$$\int_0^L \frac{G_c k}{\epsilon} \frac{\partial \omega_{10b}}{\partial \varphi_c} dx = \int_0^1 G_c k \sqrt{k_w} \frac{1}{\sqrt{\varphi_c}} d\varphi_c = \frac{3}{4} G_c. \quad (7.28)$$

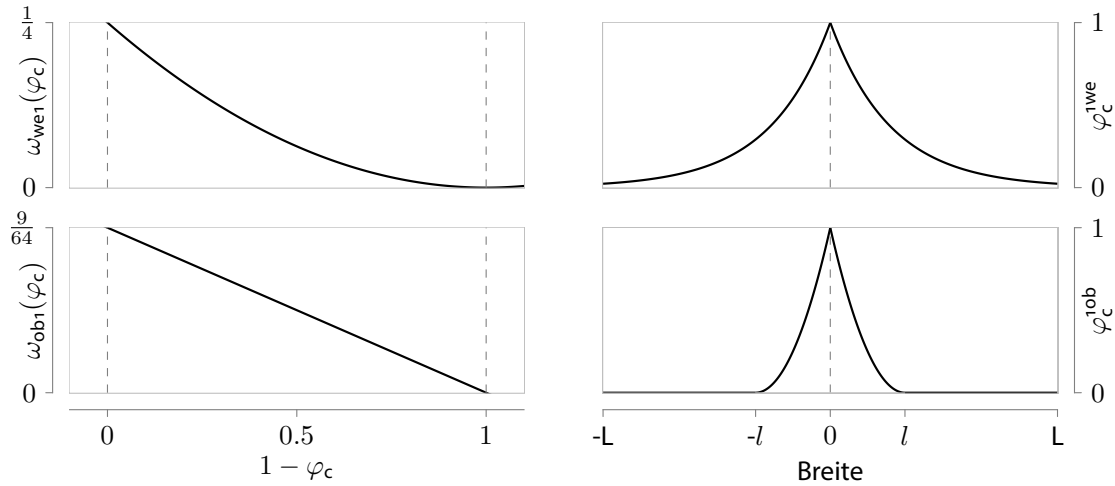


Abbildung 7.12.: Vergleich zwischen dem Einmuldenpotential ω_{1we} und dem Einzelhindernispotential ω_{1ob} (links) und der resultierenden Gleichgewichtsprofile von φ_c mit einer inneren Zelle in der Mitte eines Gebietes der Länge $2L = 15\epsilon$ (rechts).

Somit ist bei der Verwendung des Einzelhindernispotentials auch in den Bereichen ohne eine lokale Krümmung ebenfalls eine resultierende Kraft entlang des Übergangsbereiches vorhanden. Das Potential garantiert einen wohl definierten Übergangsbereich von der Breite $l = \epsilon\pi^2/4$ und das Griffithsche Kriterium (7.3) wird abgebildet.

7.4.1. Einfluss der Krümmung auf das Griffithsche Kriterium

Im letzten Abschnitt wurde ein Zweiphasenmodell für die Beschreibung der Rissausbreitung vorgestellt und es wurde analytisch gezeigt, dass das Modell im Eindimensionalen das Griffithsche Kriterium (7.3) erfüllt. Im Mehrdimensionalen gibt es allerdings Abweichungen bei der Abbildung der Rissoberflächenenergie [91, 117]. Zur Behebung dieser Abweichungen schlagen Bourdin et al. [91] und Hossain et al. [99] die Verwendung eines numerischen Risswiderstandes von

$$G_c^{\text{num}} = G_c \left(1 + \frac{\Delta x}{k\sqrt{k_w\epsilon}} \right) \quad (7.29)$$

vor, der von der Interfacebreite ϵ , den Regularisierungskonstanten k und k_w und der physikalischen Breite einer Zelle Δx abhängt. Borden et al. [117] verwenden einen Term höherer Ordnung, um die Abweichungen zu minimieren (siehe Gl. (7.15)).

Ein möglicher Grund dieser Abweichungen ist die lokale Krümmung der Rissphase $\kappa_c = \nabla \cdot (\nabla\varphi_c/|\nabla\varphi_c|)$ an der Rissspitze. Wie in Abschnitt 3.1.4 gezeigt wurde, entsteht durch die lokale Krümmung ein zusätzlicher Beitrag in der Bilanz der Konfigurationskräfte. Dieser Beitrag ist bei der Beschreibung von Phasenumwandlungsprozessen absolut notwendig und beschreibt krümmungsgetriebene Bewegungen der Grenzfläche. Nach dem Griffithschen Kriterium (7.3) ist der Risswiderstand nur von dem materialspezifischen kritischen Grenzwert G_c abhängig. Daher dürfen krümmungsgetriebene treibende Kräfte in der Evolutionsgleichung der Rissphase nicht vorhanden sein.

Ausgehend von dem Energiefunktional (7.26) eines Zweiphasensystems mit einer Rissphase φ_c ist ein lokaler Gleichgewichtszustand $-\delta\mathcal{F}^c/\delta\varphi_c = 0$ gegeben durch

$$2(\varphi_c - 1)W^+(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})) = G_c k \left(2\epsilon\Delta\varphi_c - \frac{k_w}{\epsilon} \right). \quad (7.30)$$

Die linke Seite dieser Gleichung gibt die mechanischen treibenden Kräfte wider. Die rechte Seite beinhaltet den Widerstand gegen den Rissfortschritt in einer planaren Grenzfläche und den krümmungsabhängigen Beitrag. Für die Berechnung dieses krümmungsabhängigen Beitrags muss ein Linienintegral durch eine gekrümmte Rissfläche in Richtung der Normalen \mathbf{n}_c ausgewertet werden. Angelehnt an die Berechnungen in Abschnitt 3.1.4 wird hierzu ein zweidimensionales System mit einer kreisförmigen Rissfläche betrachtet. Die Gleichung (7.30) wird zunächst von beiden Seiten mit $\partial\varphi_c/\partial r$ multipliziert und anschließend wird das Linienintegral ausgewertet. Mit $r = r_0 + dr$, $1/r \approx 1/r_0 - dr/r_0^2$ und dem Laplace-Operator in Polarkoordinaten [19] folgt für die rechte Seite

$$\begin{aligned} \int_0^\infty G_c k \frac{\partial\varphi_c}{\partial r} \left(2\epsilon\Delta\varphi_c - \frac{k_w}{\epsilon} \right) dr &= G_c k \int_0^1 \left(2\epsilon \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} (\dots) \right) \varphi_c - \frac{k_w}{\epsilon} \right) d\varphi_c \\ &= G_c k \int_0^1 \left(2\epsilon \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r_0} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r_0^2} (\dots) \right) \varphi_c - \frac{k_w}{\epsilon} \right) d\varphi_c. \end{aligned}$$

Für eine Näherung erster Ordnung werden die Terme der Ordnung $\mathcal{O}(1/r_0^2)$ vernachlässigt. Die Terme der Ordnung $\mathcal{O}(1/r_0^0)$ verschwinden

$$G_c k \int_0^1 \left(2\epsilon \frac{\partial^2 \varphi_c}{\partial r^2} - \frac{k_w}{\epsilon} \right) d\varphi_c = 0,$$

da diese der Gleichgewichtsbedingung (7.16) entsprechen. Für die Terme der Ordnung $\mathcal{O}(1/r_0)$ ergibt sich

$$G_c k \int_0^1 2\epsilon \frac{1}{r_0} \frac{\partial\varphi_c}{\partial r} d\varphi_c = G_c \frac{1}{r_0} \int_0^1 2k\sqrt{k_w\varphi_c} d\varphi_c = G_c \frac{1}{2r_0} = G_c \kappa_c. \quad (7.31)$$

Dieser Beitrag ist unabhängig von dem verwendeten Potential und den entsprechenden Vorfaktoren und ergibt sich nur aus der Form der Gradientenenergiedichte $a_c(\varphi_c) \propto |\nabla\varphi_c|^2$. Daher ist ein äquivalenter Beitrag bei allen Rissausbreitungsmodellen, die in Abschnitt 7.2 besprochen wurden, vorhanden. Für die Elimination der krümmungsabhängigen treibenden Kräfte wird der Beitrag (7.31) verteilt auf den gesamten Übergangsbereich abgezogen. Damit ergibt sich für die modifizierte Variation des Funktionals (7.26)

$$\left(\frac{\delta\mathcal{F}^c}{\delta\varphi_c} \right) = 2(\varphi_c - 1)W^+(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})) + G_c k \left(\frac{k_w}{\epsilon} - \epsilon(2\Delta\varphi_c - k_\kappa|\nabla\varphi_c|\kappa_c) \right). \quad (7.32)$$

Die zusätzliche Konstante k_κ kann zur Feinjustage des resultierenden numerischen Risswiderstandes verwendet werden. Bei $k_\kappa = 1$ wird lokal die Information der Krümmung komplett vernachlässigt und der Beitrag der Ordnung $\mathcal{O}(1/r_0)$ verschwindet (siehe Gl. (7.31)). Da die Krümmung $\kappa_c = \nabla \cdot (\nabla\varphi_c/|\nabla\varphi_c|)$ im Eindimensionalen nicht vorhanden ist, werden die Berechnungen, die in den vorhergehenden Abschnitten 7.2.3 und 7.4 durchgeführt wurden, durch diese Modifikation nicht beeinflusst. Phasenumwandlungsmodelle, die die lokale Krümmung explizit verwenden, wurden bereits von Folch et al. [127], Boettinger et al. [128] oder auch von Sun und Beckermann [129] vorgestellt.

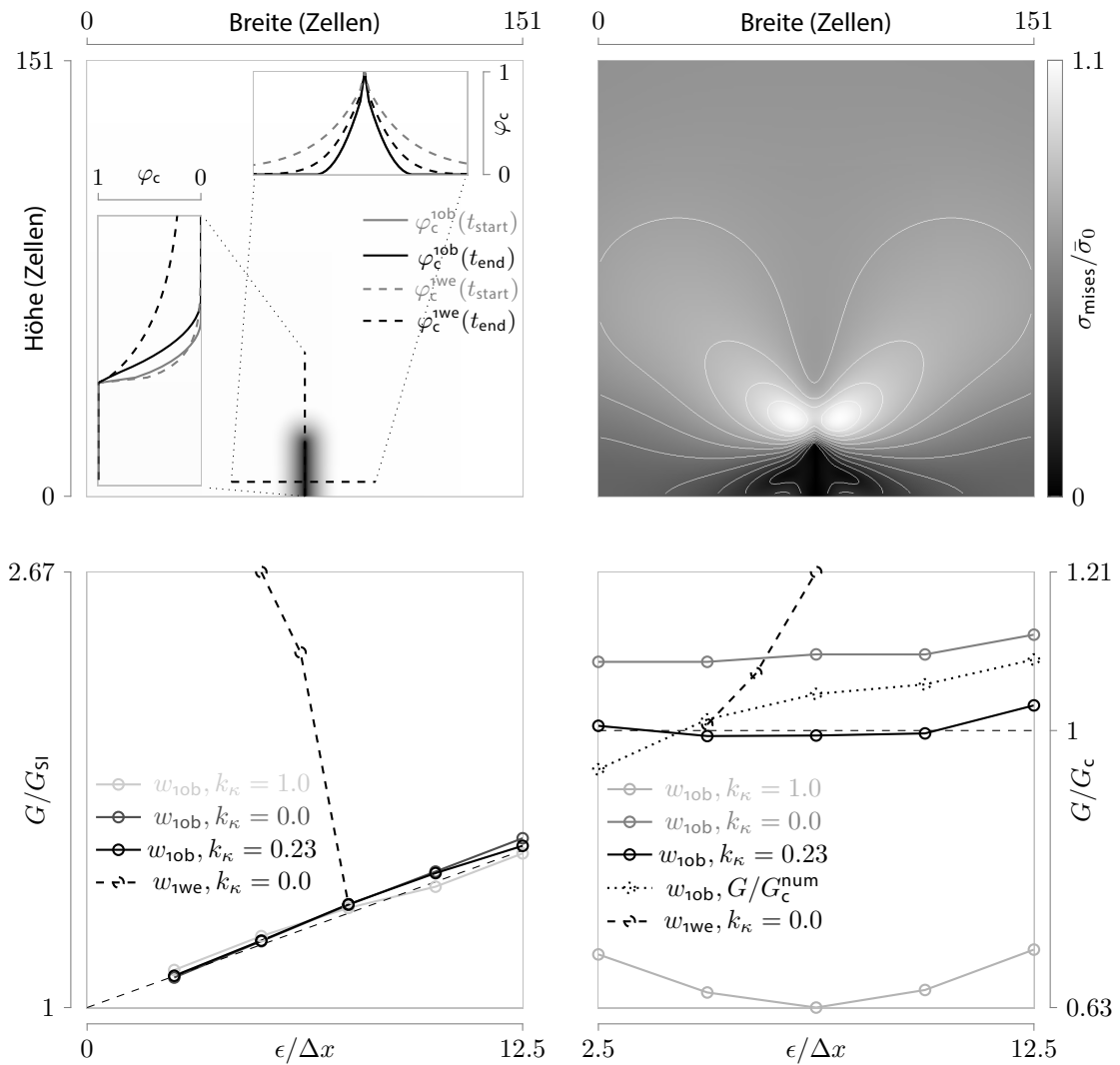


Abbildung 7.13.: Validierung des in Abschnitt 7.4 vorgestellten Modells über das Griffithsche Kriterium (7.3). Verglichen werden die Resultate unter Verwendung des Einzelhindernis- $\omega_{1ob}(\varphi_c)$ und Einzelmuldenpotentials $\omega_{1ob}(\varphi_c)$ und bei einer Variation von ϵ und der Konstante k_κ . Das Simulationssetup mit den entsprechenden Profilen von φ_c ist links oben dargestellt. Rechts oben ist die resultierende von Mises-Spannung σ_{mises} für den Fall $\omega = \omega_{1ob}(\varphi_c)$, $k_\kappa = 2.3$ und $\epsilon = 5\Delta x$ dargestellt. Im unteren Bereich sind die Energiefreisetzungsraten G , die über das J-Integral (7.5) berechnet wurden, und das Verhältnis G/G_c kurz vor dem Fortschreiten der Rissphase zu sehen. G_{Sl} entspricht dabei einem scharfen Grenzflächenresultat.

7.5. Validierung des Modells in einem Zweiphasensystem

Zur Validierung des vorgestellten Phasenfeldmodells zur Rissausbreitung wurde ein Simulationsssetup gemäß Abbildung 7.13 verwendet. Eine Platte mit einem Anriss am unterem y -Rand wird in der x -Richtung mit der makroskopischen Spannungsrandbedingung $\bar{\sigma} \mathbf{n}_x = (\int \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) \mathbf{n}_x dV)/V$ belastet. Der y -Rand bleibt dabei dehnungsfrei ($\varepsilon_{yj} = 0$) und es wird ein EVZ angesetzt. Gesucht wurde der kritische Risswiderstand G_c kurz vor dem Fortschreiten des Risses. Hierzu wurde G_c schrittweise bis zum Fortschreiten des Risses verkleinert. Dabei wurde sichergestellt, dass der mechanische Gleichgewichtszustand $\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0}$ stets erfüllt ist.

Es ist deutlich zu erkennen, dass das Profil der Rissphase φ_c^{lob} bei der Verwendung des Einzelhindernispotentials $\omega_{\text{lob}}(\varphi_c)$ einen wohl definierten Bereich einnimmt. Bei einer maximalen Belastung, die der Belastung kurz vor einem Fortschreiten des Risses entspricht, ändert sich das Profil nur geringfügig. Im Vergleich dazu ist das Rissphasenprofil bei der Verwendung des Einzelmuldenpotentials $\omega_{\text{lwe}}(\varphi_c)$ über das gesamte Simulationsgebiet ausgedehnt. Bei einer Belastung wird das Profil stark verzerrt und führt bei zu großen Übergangsbereichen zu unphysikalischen Phänomenen. Daher wurden nur eine kleine Bandbreite der Ergebnisse ausgewertet.

Beide Potentiale führen zu einer starken Abhängigkeit der Energiefreisetzungsraten von der Interfacebreite l bzw. von dem Parameter ϵ . Die Verwendung des Einzelhindernispotentials $\omega_{\text{lob}}(\varphi_c)$ in Kombination mit der verwendeten Interpolationsfunktion $h_c = (1 - \varphi_c)^2$ führt dabei zu einem linearen Zusammenhang. Dagegen ist die Abhängigkeit der Energiefreisetzungsraten von der Breite des Übergangsbereiches bei Verwendung des Einzelmuldenpotentials $\omega_{\text{lwe}}(\varphi_c)$ undefiniert und viel ausgeprägter.

Auch ein Anstieg des Risswiderstandes mit dem Parameter ϵ ist bei beiden Potentialen zu erkennen, daher wird die Abhängigkeit G zu ϵ teilweise kompensiert. Bei Verwendung des Einzelhindernispotentials $\omega_{\text{lob}}(\varphi_c)$ führt die Korrektur zu einem nahezu konstanten Zusammenhang zwischen dem Verhältnis G/G_c , das das Griffithsche Kriterium (7.3) widerspiegelt, und der Breite des Übergangsbereiches. Allerdings wird dabei das Griffithsche Kriterium um etwa 10 % überschätzt. Dieses Phänomen wurde bereits von Hossain et al. [99] untersucht. Für eine Korrektur schlugen die Autoren die Verwendung eines numerischen kritischen Risswiderstandes G_c^{num} (siehe Gl. (7.29)) vor, der von Bourdin et al. [91] berechnet wurde. Durch diese Korrektur wird G/G_c herabgesetzt, allerdings bleibt die Abhängigkeit von der Breite des Übergangsbereiches bestehen, was in Abbildung 7.13 deutlich erkennbar ist. Des Weiteren wird durch die Verwendung eines numerischen Risswiderstandes G_c^{num} die freie Energie des Systems verfälscht.

In Abschnitt 7.4.1 wurde gezeigt, dass die lokale Krümmung einen großen Beitrag zu den treibenden Kräften liefert. Diese krümmungsgetriebenen treibenden Kräfte können mit einer modifizierte Variationsableitung (7.32) des Ergiefunktional (7.26) und einer geschickten Wahl der Konstante k_κ ganz ($k_\kappa = 1$) oder teilweise ($0 \leq k_\kappa \leq 1$) entfernt werden. Wie in Abbildung 7.13 gezeigt ist, hat diese Modifikation keinen Einfluss auf die Energiefreisetzungsraten G . Werden die krümmungsgetriebenen treibenden Kräfte komplett entfernt, so wird das Griffithsche Kriterium (7.3) um etwa 35 % unterschätzt. Dies liegt an dem vom Potential ausgehenden Widerstand gegen Phasenumwandlung. Beim Einzelhindernispotential $\omega_{\text{lob}}(\varphi_c)$ fällt dieser Widerstand deutlich geringer aus als beim Einzelmuldenpotential $\omega_{\text{lwe}}(\varphi_c)$ (vgl. Gl. (7.28) und (7.17)). Mit einer geschickten Wahl der Konstante $k_\kappa = 0.23$ ist es möglich, das Griffithsche Kriterium (7.3) exakt abzubilden. Dabei bleibt das Verhältnis G/G_c nahezu unabhängig von der Breite des Übergangsbereiches. Die Verwendung

des Einzelmuldenpotentials $\omega_{1we}(\varphi_c)$ in Kombination mit $k_\kappa > 0$ führte zu Instabilitäten, daher wurden diese Simulationsergebnisse nicht ausgewertet.

7.6. Multiphasenfeldmodell für Rissausbreitung basierend auf der Griffithschen Theorie

Im letzten Abschnitt wurde ein Rissausbreitungsmodell für zwei Phasen vorgestellt. Im Gegensatz zu einem physikalischen Modellansatz (siehe Abschnitt 7.2.1) bildet das Modell das Griffithsche Kriterium (7.3) sehr gut ab, wie es in Abbildung 7.13 gezeigt ist. In diesem Abschnitt wird dieses Modell mit dem Multiphasenfeldmodell von Nestler et al. [13], das in Abschnitt 3.1 diskutiert wurde, für Anwendungen in Mehrkornsystemen kombiniert.

In einem System von N Phasen repräsentiert der Ordnungsparameter φ_c die Rissphase. Die übrigen $N - 1$ Phasen, die in dem Tupel $\boldsymbol{\varphi}_s = \varphi_1, \dots, \varphi_{\alpha \neq c}, \dots, \varphi_{N-1}$ gesammelt sind, repräsentieren die Festphasenregion mit den jeweiligen Körnern. Der energetische Risswiderstand $G_c(\boldsymbol{\varphi}_s)$ und auch die Formänderungsenergiedichte $W(\boldsymbol{\varphi}_s, \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}))$ sind im Allgemeinen von der lokal vorliegenden Festphasenkonfiguration $\boldsymbol{\varphi}_s$ abhängig. Dies führt zu einem Funktional der freien Energie der Form

$$\mathcal{F}^c(\boldsymbol{\varphi}, \mathbf{u}) = \int_V G_c(\boldsymbol{\varphi}_s) k \left(\frac{1}{\epsilon} \omega_{1ob}(\varphi_c) + \epsilon |\nabla \varphi_c|^2 \right) + (1 - \varphi_c)^2 W(\boldsymbol{\varphi}_s, \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})) + \epsilon a(\boldsymbol{\varphi}_s, \nabla \boldsymbol{\varphi}_s) + \frac{1}{\epsilon} \omega_{ob}(\boldsymbol{\varphi}_s) dV. \quad (7.33)$$

$a(\boldsymbol{\varphi}_s, \nabla \boldsymbol{\varphi}_s)$ und $\omega_{ob}(\boldsymbol{\varphi}_s)$ sind dabei die Gradientenenergiedichte und das Energiepotential für den Festphasenbereich, die bereits in Abschnitt 3.1 diskutiert wurden. In Anwesenheit einer Rissphase sind die beiden Funktionen gegeben durch

$$a(\boldsymbol{\varphi}_s, \nabla \boldsymbol{\varphi}_s) = \sum_{\alpha \neq c} \sum_{\beta > \alpha \neq c} \gamma_{\alpha\beta} |\varphi_\alpha \nabla \varphi_\beta - \varphi_\beta \nabla \varphi_\alpha|^2$$

und entsprechend das Potential

$$\omega_{ob}(\boldsymbol{\varphi}_s) = \frac{16}{\pi^2} \sum_{\alpha \neq c} \sum_{\beta > \alpha \neq c} \gamma_{\alpha\beta} \varphi_\alpha \varphi_\beta + \sum_{\alpha, \beta > \alpha, \delta > \beta} \gamma_{\alpha\beta\delta} \varphi_\alpha \varphi_\beta \varphi_\delta.$$

Der zusätzliche Beitrag im Potential verhindert die nicht physikalische Ausbildung der sogenannten Drittphasen [13] im Zweiphasenbereich. Dieser Beitrag und die entsprechende Wahl des Parameters $\gamma_{\alpha\beta\delta}$ wird ausführlich von Hötzer et al. [46] diskutiert. Die Kombination beider Hindernispotentiale, des Potentials für die Rissphase $\omega_{1ob}(\varphi_c)$ und des Potentials für den Festphasenbereich $\omega_{ob}(\boldsymbol{\varphi}_s)$ ist in Abbildung 7.14 für ein Dreiphasensystem dargestellt. Der Drittphasenbeitrag führt zu einer Erhöhung der Energiebarriere in der Dreiphasenregion. Daher wird dieser Bereich für die Evolution der Phasen energetisch ungünstig.

Da die Breite des Übergangsbereiches l bei beiden Modellen äquivalent ist (siehe Gl. (7.27)), wird in diesem Modell, im Gegensatz zu dem vorgestellten Ansatz in [102], nur ein Parameter ϵ verwendet. Wie schon angesprochen, definiert die lokal vorliegende Mikrostruktur den effektiven energetischen Risswiderstand $G_c(\boldsymbol{\varphi}_s)$ und auch die Formänderungsenergiedichte $W(\boldsymbol{\varphi}_s, \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}))$. Für die Interpolation dieser Terme werden die üblichen Interpolationsfunktionen (3.9) verwendet. Allerdings

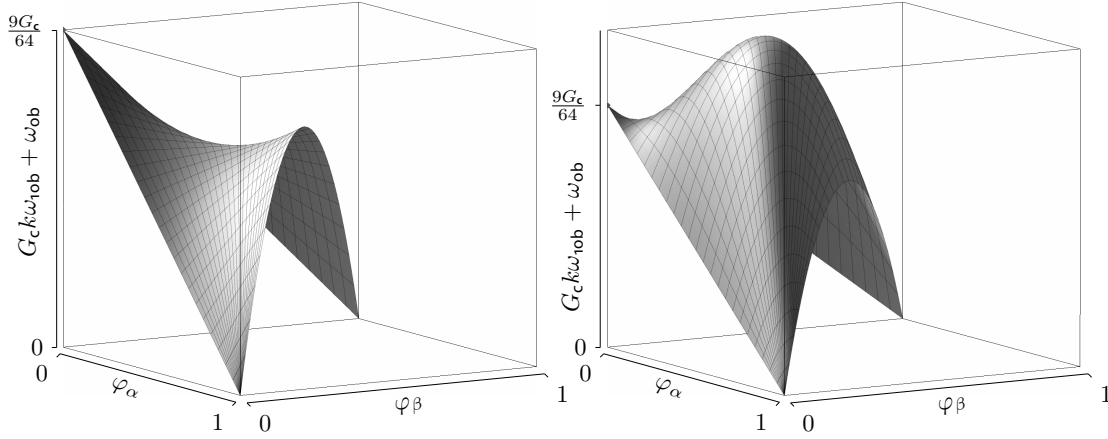


Abbildung 7.14.: Vergleich des resultierenden Gesamtpotentials $G_c k \omega_{10b}(\varphi_c) + \omega_{ob}(\varphi_s)$ für ein Dreiphasensystem ohne (links) und mit (rechts) dem Dritphasenterm.

muss in diesen Fall die Normierung durch die Summe aller Festphaseninterpolationsfunktionen durchgeführt werden, damit die Bedingung $\sum_{\alpha \neq c} h^\alpha(\varphi_s) = 1$ erfüllt wird. Daher wird die folgende Festphaseninterpolationsfunktion verwendet

$$h_i^\alpha(\varphi_s) = \frac{\tilde{h}_i^\alpha(\varphi_\alpha)}{\sum_{\beta \neq c} \tilde{h}_i^\beta(\varphi_\beta)},$$

wobei die möglichen zweiphasigen Interpolationsfunktionen durch die Gleichung (3.8) definiert sind. Dies führt zum folgenden Ausdruck für den energetischen Risswiderstand

$$G_c(\varphi_s) = \sum_{\alpha \neq c} G_c^\alpha h^\alpha(\varphi_s)$$

und entsprechend für die Formänderungsenergiedichte

$$W(\varphi_s, \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})) = \sum_{\alpha \neq c} W^\alpha(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})) h^\alpha(\varphi_s).$$

G_c^α ist der energetische Risswiderstand der jeweiligen Phase und $W^\alpha(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})) = W^{+\alpha}(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})) + W^{-\alpha}(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}))$ ist die entsprechende Formänderungsenergiedichte, wobei die Teilbeiträge durch die Gleichung (7.11) definiert sind. Werden Simulationen unter Modus-I-Belastung durchgeführt, so reduziert sich die Formänderungsenergiedichte zu $W^\alpha(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})) = W^{+\alpha}(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}))$. Des Weiteren wird für die Rissphase die Interpolationsfunktion $h_c = (1 - \varphi_c)^2$ verwendet. Diese wird in einem Quasi-Zweiphasenfall angewendet. Daher muss sie nicht gesondert normiert werden.

Die Herleitung der Allen-Cahn-Evolutionsgleichung der Ordnungsparameter wurde ausführlich in Abschnitt 3.1 besprochen und ist mit Gleichung (3.17) gegeben. Wird die Variationsableitung des Energiefunktionals (7.33) bezüglich der Rissphase φ_c durchgeführt, so ergibt sich für die modifizierte Version (siehe Abschnitt 7.4.1)

$$\begin{aligned} \left(\frac{\delta \mathcal{F}^c}{\delta \varphi_c} \right) &= \frac{\partial h_c(\varphi_c)}{\partial \varphi_c} W^+(\varphi_s, \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})) + \frac{G_c(\varphi_s) k k_w}{\epsilon} \\ &\quad - 2k\epsilon (\nabla \cdot (G_c(\varphi_s) \nabla \varphi_c) - k_\kappa G_c(\varphi_s) |\varphi_c| \kappa_c). \end{aligned} \quad (7.34)$$

Gemäß des Ansatzes von Miehe et al. [93] wurden bei den mechanischen treibenden Kräften für die Rissphase die Kompressionsbeiträge nicht berücksichtigt. Entsprechend folgt für die Variationsableitung des Funktionals (7.33) bezüglich einer der Festphasen

$$\begin{aligned} \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \varphi_\alpha} = & \frac{\partial G_c(\varphi_s)}{\partial \varphi_\alpha} k \left(\epsilon |\nabla \varphi_c|^2 + \frac{1}{\epsilon} \omega_c(\varphi_c) \right) + h_c(\varphi_c) \Psi^\alpha(\zeta) \frac{h(\varphi_s)}{\partial \varphi_\alpha} \\ & + \frac{\partial a(\varphi_s, \nabla \varphi_s)}{\partial \varphi_\alpha} - \nabla \cdot \frac{\partial a(\varphi_s, \nabla \varphi_s)}{\partial \nabla \varphi_\alpha} + \frac{\partial \omega_{\text{ob}}(\varphi_s)}{\partial \varphi_\alpha}. \end{aligned}$$

Das Potential $\Psi^\alpha(\zeta)$ (siehe Gl. (4.46) bzw. Gl. (4.59)) repräsentiert dabei die mechanischen treibenden Kräfte, die von der Phase φ_α ausgehen. Dieses Potential wurde ausführlich in den Abschnitten 4.3 und 4.5 besprochen. Dieser Ansatz ermöglicht sowohl die Evolution der Rissphase in einem Festphasenbereich als auch eine Evolution der Festphasen gegeneinander, unabhängig davon, ob ein Rissphasenanteil lokal vorhanden ist. In der Variationsableitung (7.34) bezüglich der Rissphase φ_c ist die Grenzflächenenergie der Festphasen $\gamma_{\alpha\beta}$ nicht explizit gelistet. Aber die Evolutionsgleichung der Ordnungsparameter (3.17) berücksichtigt alle Binärinteraktionen zwischen den treibenden Kräften. Daher wird die Grenzflächenenergie der Festphasen $\gamma_{\alpha\beta}$ bei der Evolution der Rissphase φ_c immer berücksichtigt, sogar wenn die Mobilitäten der Festphasengrenzflächen verschwinden.

Da nur die Variationsableitung bezüglich der Rissphase modifiziert wurde, wurde ein solcher Ansatz von Ambati et al. [4] als hybrid bezeichnet. Entsprechend den Berechnungen in Abschnitt 4.3.5 ergeben sich für die Spannungen in der Voigtschen Darstellung

$$\boldsymbol{\sigma}^v(\varphi_s, \varphi_c) = (\mathcal{K}(\varphi_s) \boldsymbol{\varepsilon}^v + \tilde{\boldsymbol{\sigma}}^v(\varphi_s)) h_c(\varphi_c). \quad (7.35)$$

Dabei sind $\tilde{\boldsymbol{\sigma}}^v(\varphi_s)$ die Eigenspannungen und $\mathcal{K}(\varphi_s)$ die effektive Steifigkeitsmatrix in einem polykristallinen Festphasenbereich, die mit den Gleichungen (4.50) und (4.51) definiert sind.

7.7. Rissausbreitung in polykristallinen Materialien

Die Berechnung der Spannungen im polykristallinen Festphasenbereich wurde in Abschnitt 4.4 bzw. 4.6 validiert. Der Spannungsabfall beim Übergang zur Rissphase wurde in Abschnitt 7.3.1 besprochen. Daher wird Gleichung (7.35) für die Spannungsberechnung im polykristallinen Festphasenbereich und in Anwesenheit einer Rissphase nicht gesondert validiert. Von besonderem Interesse in diesem Abschnitt ist der Einfluss eines phasenabhängigen und damit für den gesamten Festphasenbereich anisotropen energetischen Risswiderstand $G_c(\varphi_s)$ auf die Ausbreitung des Risses. Hierzu wird zunächst nur der Risswiderstand $G_c(\varphi_s)$ in einem zweiphasigen Festphasenbereich variiert und die Ausbreitungsgeschwindigkeit untersucht. Im Anschluss werden sowohl der energetische Risswiderstand G_c^α als auch die Steifigkeitstensoren \mathcal{C}^α der einzelnen Phasen variiert und die Ausbreitung des Risses in einem polykristallinen Material untersucht. Zum Abschluss wird der Einfluss der Grenzflächenenergien der Festphasen auf den resultierenden Risswiderstand und den resultierenden Risspfad untersucht.

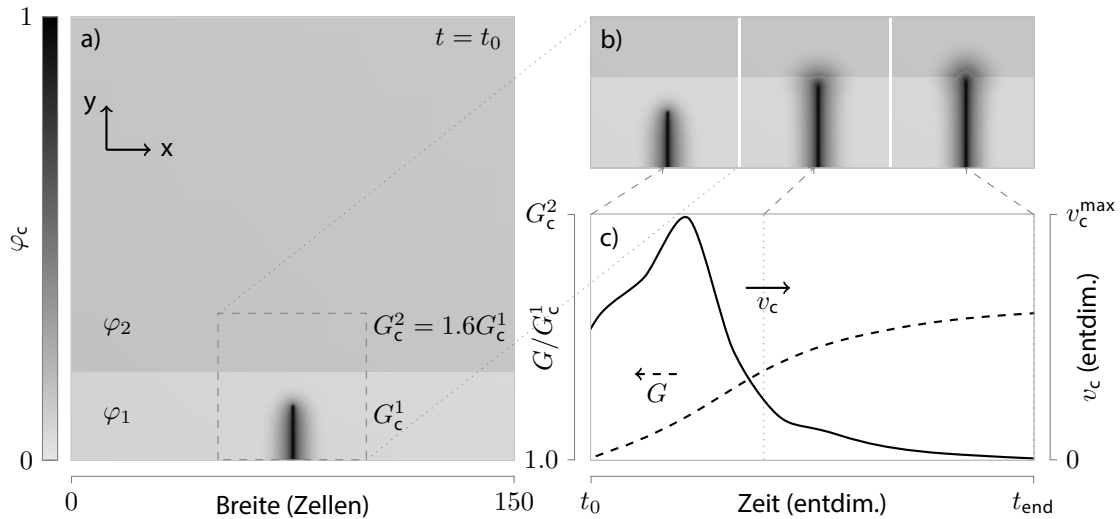


Abbildung 7.15.: Einfluss einer horizontalen Barriere auf die Rissausbreitung: a) Aufbau des Simulationsgebietes mit zwei Festphasen φ_1 und φ_2 zum Zeitpunkt $t = t_0$, b) Evolution der Rissphase φ_c und c) Energiefreisetzungsrate G und die Geschwindigkeit der Rissspitze v_c bei der Evolution.

7.7.1. Einfluss einer horizontalen Grenzfläche auf die Rissausbreitung

In einem Simulationsgebiet mit 150×150 Zellen sind zwei Phasen im Festphasenbereich φ_1 und φ_2 gemäß Abbildung 7.15 a) so positioniert, dass sich eine horizontale Korngrenze bildet. Die gewählte Grenzflächenenergie ist $\gamma_{12} = 0.1G_c^1$ und es wurden die Risswiderstände $G_c^2 = 1.6G_c^1$ verwendet. In einem EVZ ist die Belastung mit einer Verschiebungsrandbedingung $u_x = u_0$ in x -Richtung angebracht, wobei der Randbereich in y -Richtung dehnungsfrei bleibt. Für die Ordnungsparameter wurde an allen Rändern eine flussfreie Randbedingung $\nabla\varphi = \mathbf{0}$ verwendet. Beide Festphasen haben die gleichen Materialparameter von Stahl, mit dem Youngschen Modul $\mathcal{E}_0 = 210$ GPa und einer Querkontraktion von $\nu = 0.3$. Daher gibt es keinen Einfluss der Korngrenze auf die resultierende Spannung. Um eine Phasenumwandlung zwischen den Festphasen zu vermeiden, wurde die Mobilität $M_{12} = M_{c1}/100 = M_{c2}/100$ gewählt, wobei im initialen Zustand ein voll ausgebildeter Übergangsbereich sichergestellt wurde.

Die resultierende Energiefreisetzungsrate G wurde über das J-Integral (7.5) berechnet und ist in Abbildung 7.15 c) mit der Geschwindigkeit der Rissspitze v_c dargestellt. Da die Energiefreisetzungsrate G größer ist als der energetische Risswiderstand G_c^1 , breitet sich der Riss zunächst aus, bis die Korngrenze erreicht ist. In der Übergangsregion der Festphasen steigt der Risswiderstand $G_c(\varphi_s)$ kontinuierlich bis zu G_c^2 an. Da die Energiefreisetzungsrate G nicht ausreicht um G_c^2 zu überwinden, bleibt der Riss in der Übergangsregion der Festphasen stehen. Dabei hat die Rissphase nahezu keinen Einfluss auf die Position der Festphasen φ_1 und φ_2 zueinander, wie in den Teilbildern 7.15 b) zu sehen ist. Dies wurde mit der erwähnten Reduktion der Mobilität M_{12} und mit einer Wahl der Dritphasenkonstanten von $\gamma_{c12} = \gamma_{c21} = G_c(\varphi_s)$ erreicht.

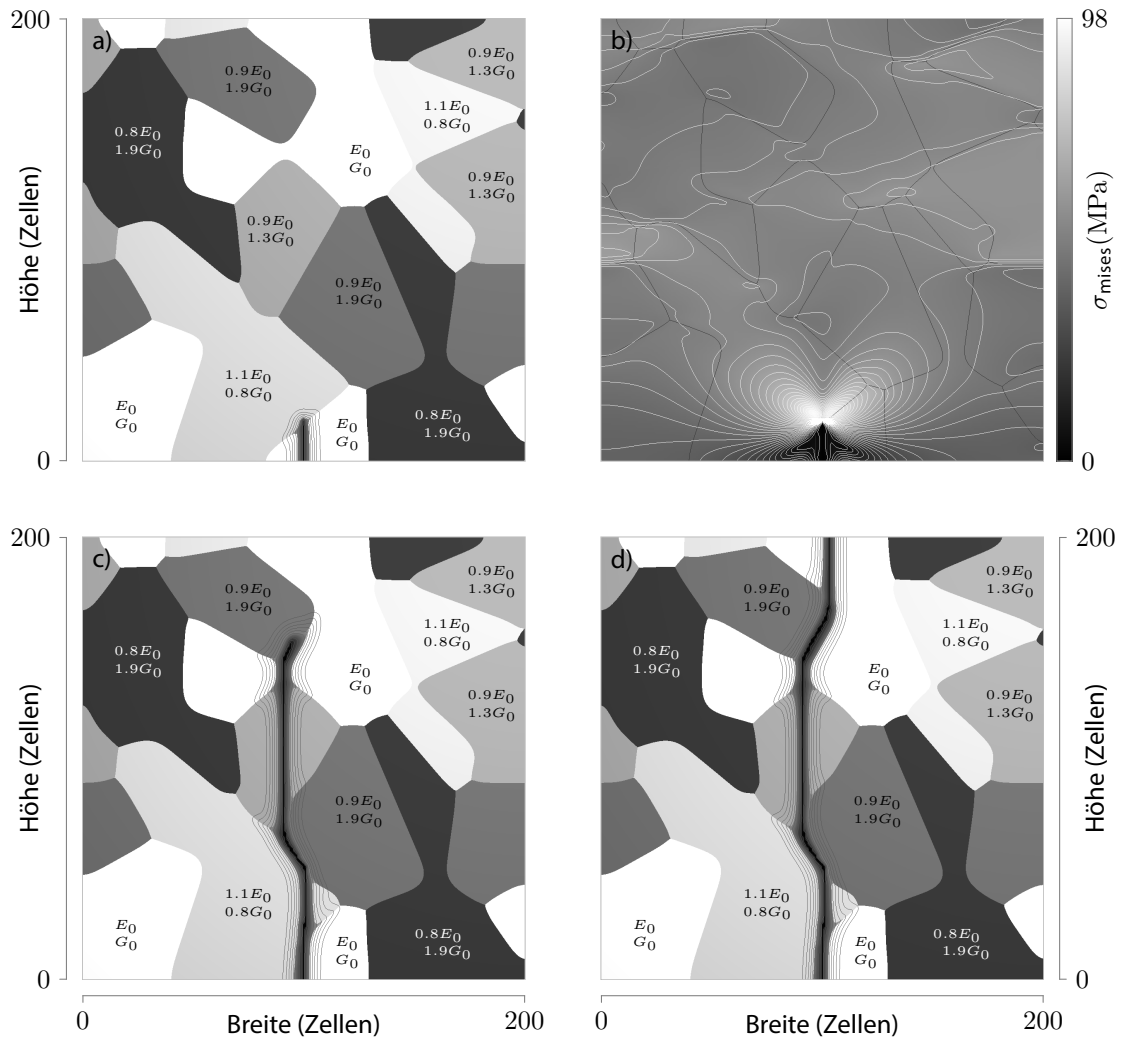


Abbildung 7.16.: Rissausbreitung in einem polykristallinen Material: a) Mikrostruktur des anfänglichen Zustandes mit den gewählten Materialparametern. Die hervorgehobenen Materialparameter sind Vielfache von $E_0 = 210 \text{ GPa}$ und $G_0 = 1.6 \text{ J/m}^2$. b) von Mises-Spannung σ_{mises} im anfänglichen Zustand und c-d) Evolution der schwarz markierten Rissphase mit den entsprechenden Isolinien von φ_c .

7.7.2. Rissausbreitung im polykristallinen System

Im zweiten Simulationsbeispiel wird die Rissausbreitung in einem polykristallinen Material demonstriert. Ein Simulationsgebiet mit fünf Festphasen mit unterschiedlichen Youngschen Modulen \mathcal{E}_α und unterschiedlichen energetischen Risswiderständen G_c^α wurde gemäß Abbildung 7.16 a) vorbereitet. Die gewählten Randbedingungen sind äquivalent zu dem Simulationsbeispiel, das in Abschnitt 7.7.1 besprochen wurde. Die von Mises-Spannung reflektiert die Steifigkeitssprünge zwischen den Festphasen, wie in Abbildung 7.16 b) zu erkennen ist. Im initialen Zustand wurde zunächst sichergestellt, dass der Übergangsbereich zwischen den Festphasen voll ausgebildet ist. Anschließend wurde die Mobilität der Festphasengrenzflächen um einen Faktor 100 kleiner gewählt als die Mobilität der Rissflächen ($M_{c\alpha} = M_{\alpha c} = 100M_{\alpha\beta}$, $\alpha, \beta \neq c$).

Der Riss wählt sich den energetisch günstigsten Pfad, der von der lokalen Formänderungsenergie-dichte $W(\mathbf{u}, \boldsymbol{\varphi}_s)$ und von dem lokalen energetischen Risswiderstand $G_c(\boldsymbol{\varphi}_s)$ abhängt. Zusätzlich wird die lokale Grenzflächenenergie $\gamma_{\alpha\beta}$ zwischen den Festphasen abgebaut, wenn der Riss die entsprechende Übergangsregion überschreitet. In Abbildung 7.16 a,c-d) ist der resultierende Risspfad dargestellt. Sowohl eine transkristalline als auch eine interkristalline Ausbreitung des Risses ist deutlich zu erkennen.

Die Modellierung der Rissausbreitung als ein Phasenumwandlungsprozess führt unvermeidlich zu einem Materialverlust bei einem Fortschreiten des Risses [56]. Daher sollte die Rissphase so klein wie möglich gehalten werden. Die Isolinien der Rissphase φ_c , die zusätzlich in Abbildung 7.16 a,c-d) dargestellt sind, zeigen, dass die innere Region von φ_c stets bei einer minimalen Breite von ein bis maximal zwei Zellen bleibt. Dies reduziert den unvermeidlichen Materialverlust auf ein Minimum.

Des Weiteren zeigen die Isolinien eine Verbreiterung der Rissphase φ_c in den Tripelpunktbereichen. Der Grund der Verbreiterung ist der zusätzliche Abbau der Grenzflächenenergie $\gamma_{\alpha\beta} = G_0/5$ zwischen den Festphasen. Der genaue Einfluss der Grenzflächenenergie auf den Risswiderstand wird im nächsten Simulationsbeispiel untersucht.

7.7.3. Einfluss der Grenzflächenenergie auf den effektiven energetischen Risswiderstand und den resultierenden Risspfad

Im letzten Simulationsbeispiel wurde gezeigt, dass die Grenzflächenenergie der Festphasen einen Einfluss auf die Breite der Rissphase φ_c in den Tripelpunktbereichen hat. Allerdings konnten bei dem komplexen Simulationsaufbau keine erkennbaren Auswirkungen der Grenzflächenenergie auf die Evolution der inneren Zellen von φ_c und damit auch auf den resultierenden energetischen Risswiderstand bestimmt werden. Daher wird für eine genauere Untersuchung des Grenzflächenenergieeinflusses auf den resultierenden Risswiderstand ein Simulationsaufbau mit nur einer Grenzfläche gewählt. In einem Simulationsgebiet mit 150×150 Zellen werden die zwei Festphasen φ_1 und φ_2 gemäß Abbildung 7.17 a) so positioniert, dass eine horizontale Korngrenze entsteht. Da hier nur der Einfluss der Grenzflächenenergie γ_{12} untersucht wird, wurden die energetischen Risswiderstände G_c^1 und G_c^2 und die Youngschen Module \mathcal{E}_1 und \mathcal{E}_2 gleich gewählt. Die gewählten Randbedingungen sind äquivalent zu dem Simulationsbeispiel, das in Abschnitt 7.7.1 besprochen wurde. Bei der Grenzflächenenergie $\gamma_{12} = f_y G_c^1$ wurde der Faktor f_y variiert. Die energetischen Risswiderstände $G_c^1 = G_c^2$ wurden dabei bei jeder Variation von f_y schrittweise bis zum Fortschreiten

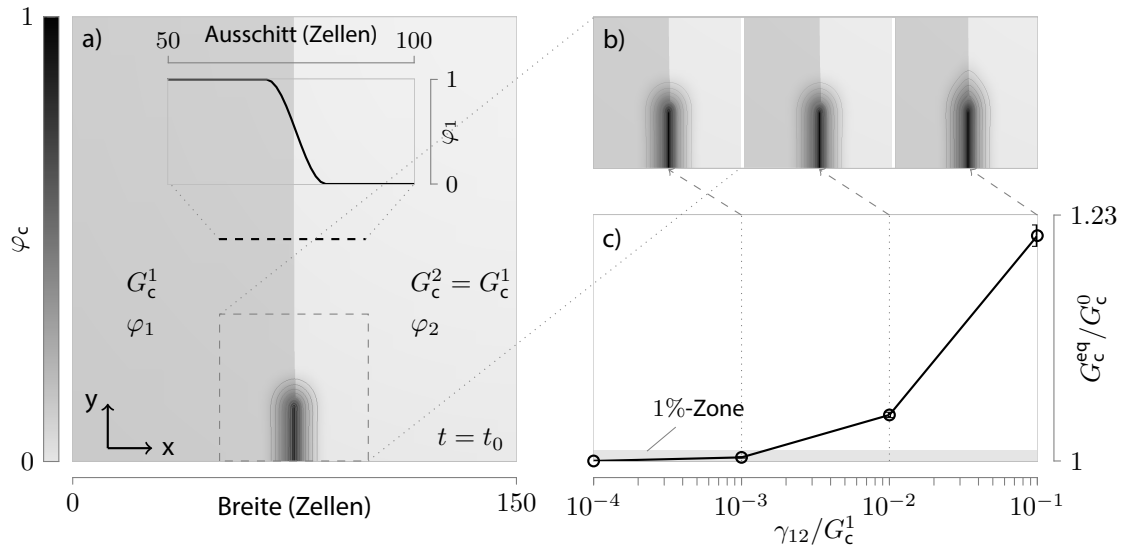


Abbildung 7.17: Einfluss einer Grenzfläche auf den effektiven Risswiderstand: a) Aufbau des Simulationsgebietes mit zwei Festphasen φ_1 und φ_2 im initialen Zustand ($t = t_0$), c) energetische Risswiderstände $G_c^1 = G_c^2 = G_c^{\text{eq}}$ am Griffiths-Punkt bei einer Variation der Grenzflächenenergie γ_{12} mit G_c^0 als energetische Risswiderstände am Griffiths-Punkt ohne eine Grenzfläche und b) entsprechende Profile von φ_c kurz vor dem Fortschreiten des Risses.

des Risses verkleinert und beim entstehenden Griffiths-Punkt ausgewertet. Dabei wurde der Parameter für die Vermeidung der Drittphasen jeweils $\gamma_{\alpha\beta c} = G_c^1$ gewählt und es wurde sichergestellt, dass der mechanische Gleichgewichtszustand $\nabla \cdot \sigma = \mathbf{0}$ stets erfüllt ist.

Eine Abhängigkeit des energetischen Risswiderstandes G_c^{eq} am Griffiths-Punkt ist deutlich zu erkennen. Der zusätzliche Abbau der Grenzflächenenergie γ_{12} führt zu einer Erhöhung der energetischen Risswiderstände $G_c^1 = G_c^2 = G_c^{\text{eq}}$ im Gleichgewicht, dargestellt in Abbildung 7.17 c). Zusätzlich ist ein Einfluss der Grenzflächenenergie auf das Profil der Rissphase φ_c zu erkennen. Teilbild b) von Abbildung 7.17 zeigt, dass der Abbau der Grenzflächenenergie zu einer Ausdehnung von φ_c in die Grenzfläche zwischen den Festphasen führt. Diese Ausdehnung der Rissphase in die Grenzfläche der Festphasen kann ab einem Verhältnis von $\gamma_{12} > G_c/10$ sogar bei sehr hohen Werten von γ_{c12} nicht mehr verhindert werden. Daher sollte bei der Wahl der Risswiderstände bzw. der Grenzflächenenergien das Verhältnis

$$\frac{\min(G_c^\alpha)}{\max(\gamma_{\alpha\beta})} \geq 10, \quad \alpha, \beta \neq c$$

nicht überschritten werden, um die Rissphase stabil zu halten. Die Abhängigkeit des effektiven Risswiderstandes von den Grenzflächenenergien, die in Abbildung 7.17 c) dargestellt ist, muss dabei berücksichtigt werden. Ist die Grenzflächenenergie unter einem Wert von $\gamma_{12} \leq G_c/100$, so hat diese nahezu keinen Einfluss auf den effektiven energetischen Risswiderstand. Höhere Grenzflächenenergien führen zu einer Verkleinerung des effektiven Risswiderstandes und zu einer Veränderung des Risspfades, wie es in dem nächsten Simulationsbeispiel gezeigt ist.

Eine der wichtigsten Eigenschaften des vorgestellten Modells ist die Möglichkeit, die Mobilitäten der Festphasengrenzen als Null zu wählen und trotzdem den Einfluss der Grenzflächenenergien auf die

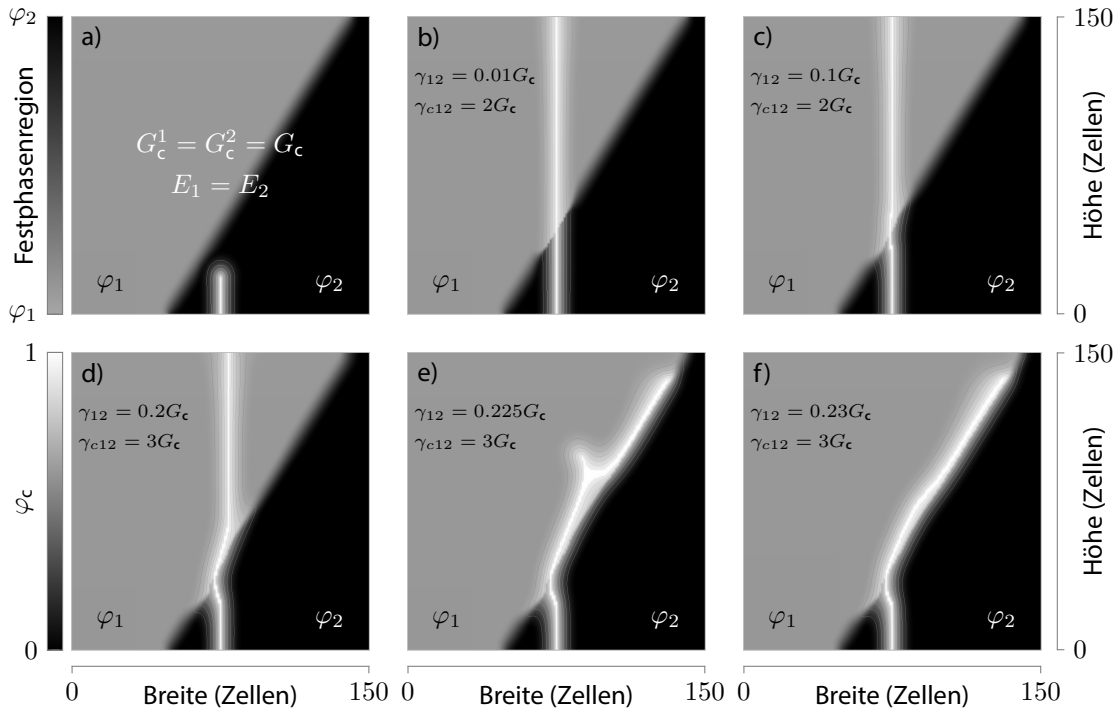


Abbildung 7.18.: Einfluss einer schiefen Grenzfläche: a) Simulationsgebiet mit zwei Festphasen φ_1 und φ_2 und einer Rissphase φ_c mit entsprechenden Isolinien zum anfänglichen Zeitpunkt, b)-f) Risspfad abhängig von der Grenzflächenenergie γ_{12} .

Evolution der Rissphase zu berücksichtigen. Diese Eigenschaft wird in diesem Simulationsbeispiel hervorgehoben. Hierzu wird eine schiefe Grenzfläche entlang des Risspfades gemäß Abbildung 7.18 a) gesetzt, gleiche Steifigkeiten sowie gleiche Risswiderstände $G_c^1 = G_c^2 = G_c$ für beide Festphasen φ_1 und φ_2 gewählt und die Grenzflächenenergie γ_{12} variiert. Die gewählten Randbedingungen sind äquivalent zum letzten Simulationsbeispiel und es wurde die Mobilität $M_{12} = 0$ gewählt, nachdem sich der Übergangsbereich der Festphasen voll ausgebildet hat.

Wie schon im letzten Simulationsbeispiel gezeigt wurde, hat eine kleine Grenzflächenenergie von $\gamma_{12} = 0.01G_c$ keinen Einfluss auf den effektiven Risswiderstand. Daher wird der Risspfad auch nicht beeinflusst, was in Abbildung 7.18 a) zu sehen ist. Sogar das Profil von φ_c wird durch die Gegenwart der Grenzfläche nicht beeinflusst, was an den dargestellten Isolinien zu erkennen ist. Mit steigender Grenzflächenenergie wird sowohl das Profil als auch der Risspfad in Richtung der Grenzfläche gezogen. In dem vorliegenden Simulationsaufbau liegt der kritische Wert zur interkristallinen Rissausbreitung bei etwa $\gamma_{12} \approx 0.225G_c$, wie in Abbildung 7.18 e) dargestellt ist. Sogar eine Aufspaltung des Risspfades ist in diesem Simulationsbeispiel zu erkennen. Größere Grenzflächenenergien führen zu einer reinen interkristallinen Ausbreitung des Risses.

8

Zusammenfassung und Ausblick

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit Fragestellungen der Phasenfeldmodellierung mit mechanischen treibenden Kräften. Folgende drei Kernpunkte stehen besonders im Fokus der Arbeit:

- Erfüllung der mechanischen Sprungbedingungen an den Grenzflächen bei der Berechnung von Spannungen in Multiphasensystemen, obwohl sich die Grenzflächen über volumetrische Bereiche erstrecken.
- Abbildung der mechanischen Konfigurationskräfte bei der Formulierung der mechanischen treibenden Kräfte in den volumetrischen Übergangsbereichen zwischen den Phasen.
- Erarbeitung eines Phasenfeldmodells, aufbauend auf den ersten beiden Kernpunkten, zur Modellierung der Rissausbreitung in Multiphasensystemen.

Die ersten beiden Kernpunkte wurden sowohl unter der Annahme von infinitesimalen Deformationen in Kapitel 4 als auch für finite Deformationen in Kapitel 6 bearbeitet. Dabei wurden zwei komplett unterschiedliche Vorgehensweisen vorgestellt. Beim Modell für infinitesimale Deformationen wurde zunächst ein Potential aus kontinuierlichen Variablen definiert. Anschließend wurden aus diesem Potential die lokalen Homogenisierungsmethoden für Materialparameter und die treibenden Kräfte abgeleitet. Das Modell für finite Deformationen basiert auf einer impliziten Berechnung der sprungbehafteten Anteile der Spannung und der Deformationsgradienten, die zu phasenanteiligen Größen führen. Mit der Kenntnis dieser phasenanteiligen Größen wurden anschließend die homogenisierten Spannungen zur Anwendung in der Impulsbilanz und die treibenden Kräfte zur Grenzflächenbewegung abgeleitet. Für beide Methoden wurden ähnliche Validierungsstudien zur Spannungsberechnung durchgeführt. Dabei wurde im Vergleich zu etablierten theoretischen Vorhersagen gezeigt, dass beide Methoden die scharfe Grenzflächenlösung abbilden und bei kleinen Verformungen zum selben Ergebnis führen. Obwohl beide Methoden mit diffusen Übergangsbereichen zwischen den Phasen arbeiten, wurde bei beiden Methoden gezeigt, dass die mechanischen Sprungbedingungen erfüllt werden und mechanische Konfigurationskräfte zur Grenzflächenbewegung verwendet werden. Einige der Ergebnisse aus Kapitel 4 wurden bereits in Schneider et al. [11] publiziert. Ein weiterer Artikel mit der vorgestellten Erweiterung des Modells für Anwendungen in Multiphasensystemen ist kurz vor der Einreichung. Das Modell für finite

Deformationen ist bis dato nicht publiziert. Unter anderem wurden in Kapitel 6 das Multiphasenfeldmodell und die formulierten treibenden Kräfte in die Eulersche Darstellung transformiert. Die resultierenden Formulierungen der Evolutionsgleichung der Ordnungsparameter weichen von denen in der Literatur bekannten [82, 130] ab.

Eine der notwendigen Bestandteile der Berechnung von Spannungen und treibenden Kräften ist die Berücksichtigung der inelastischen Dehnungs- bzw. Deformationsbeiträge. Beide behandelten Methoden sind so formuliert, dass jegliche Arten von inelastischen Dehnungen bzw. Deformationen berücksichtigt werden können. Zusätzlich sind in Kapitel 5 zwei Methoden zur Berechnung der plastischen Dehnungen im Phasenfeldkontext unter der Annahme von infinitesimalen Verformungen untersucht worden. Eine der Methoden mit den dazugehörigen Simulationsstudien wurde in Schneider et al. [56] veröffentlicht und ermöglicht die Berechnung von effektiven Materialeigenschaften in polykristallinen Systemen. Die andere Methode erlaubt die Berechnung von phasenanteiligen plastischen Dehnungen, die zur Formulierung der mechanischen Konfigurationskräfte notwendig sind.

Die übliche Vorgehensweise zur Validierung der treibenden Kräfte im Phasenfeldkontext ist die Bildung eines scharfen Übergangsbereichslimits [131]. Allerdings ist bei der Interpolation von mechanischen Materialparametern diese Methode nicht aussagekräftig, denn das scharfe Übergangsbereichslimit ist für die harmonische und die lineare Interpolationsmethode äquivalent. Dies ist direkt in Abbildung 4.1 erkennbar. Wird der Übergangsbereich unendlich klein, dann liegt der Sprung der Steifigkeiten für beide Methoden an der selben Position. Daher wurde in der vorliegenden Arbeit eine andere Methode verwendet. Es wurde untersucht, ob ein Integral mit einer entsprechenden interpolierten Größe über den Übergangsbereich in Richtung der Normalen zur scharfen Grenzflächenlösung konvergiert. Mit diesem Verfahren konnte gezeigt werden, dass die formulierten treibenden Kräfte den mechanischen Konfigurationskräften entsprechen.

Sowohl das Modell für infinitesimale Verformungen als auch das für finite Deformationen sind allgemeingültig und ohne eine Beschränkung auf eine spezielle Anwendung formuliert. Daher sind mögliche Anwendungen der Ansätze sehr vielfältig. Für jegliche Art von fest-fest Phasenumwandlungsprozessen, bei denen die mechanischen treibenden Kräfte eine Rolle spielen, wie sie beispielsweise bei der Wärmebehandlung von Stählen auftreten, finden die vorgestellten Modelle ihre Anwendung. Dazu gehören die martensitische Transformation, die bainitische Transformation sowie der Rekristallisationsprozess. Die Anwendbarkeit der Modelle für die Abbildung des martensitischen Phasenumwandlungsprozesses wurde in den Abschnitten 4.7 und 6.5 diskutiert. Im Gegensatz zu den gängigen Verfahren [67, 68] wurden bei diesen Simulationsbeispielen die mechanischen Konfigurationskräfte anstatt der Differenz der Formänderungsdichten als mechanische treibende Kräfte verwendet. Werden chemische treibende Kräfte [9, 13] mitberücksichtigt, so kann mit den vorgestellten Modellen auch der bainitische Phasenumwandlungsprozess [132] abgebildet werden. Über die Wachstumsmechanismen der Bainitnadeln im Austenit wird in der Literatur kontrovers diskutiert [133]. Bis zum jetzigen Zeitpunkt wurden bei der Abbildung des Rekristallisationsprozesses die mechanischen treibenden Kräfte nur empirisch hinzugefügt [134] und die Auswirkungen der mechanischen Konfigurationskräfte auf diesen Prozess noch nicht untersucht.

Der letzte Kernpunkt der vorliegenden Arbeit wurde in Kapitel 7 bearbeitet. Hier wurden die Möglichkeiten zur Modellierung der Rissausbreitung mit der Phasenfeldmethode auf der mesoskopischen Längenskala untersucht und als Ergebnis ein Modell zur Modellierung der Rissausbreitung in Multiphasensystemen vorgestellt. Zu diesem Zweck wurden zwei unterschiedliche Modellierungsansätze in einem Phasenfeldmodell erfolgreich verbunden. Das in den ersten beiden Kernpunkten

erarbeitete Multiphasenfeldmodell zur Beschreibung von Phasenumwandlungsprozessen wurde mit einem auf der Griffithschen Theorie basierenden Rissausbreitungsmodell gekoppelt. Dadurch wurde erstmalig die Modellierung der Rissausbreitung in polykristallinen Strukturen unter der Berücksichtigung des Griffithschen Kriteriums und der Grenzflächenenergien ermöglicht. Des Weiteren ermöglicht dieses Modell eine simultane Modellierung der Phasenumwandlungsprozesse und der Rissausbreitung in polykristallinen Strukturen. Einige Bestandteile der Untersuchung und des resultierenden Modells sind bereits in den referierten Publikationen Schneider et al. [57], Schneider et al. [56], Schneider et al. [102] und Nestler et al. [103] verarbeitet. Das gesamte Modell, inklusive der Kopplung mit der Spannungsberechnung und der Berechnung der treibenden Kräfte zwischen den Festphasen aus den ersten beiden Kernpunkten der Arbeit, ist bis dato nicht veröffentlicht.

Neben den vielfältigen Anwendungsmöglichkeiten bei der Untersuchungen der Rissausbreitung in heterogenen Strukturen hat dieses Modell einen weiteren Vorteil: Der diffuse Übergangsbereich zwischen den Festphasen ermöglicht eine gezielte Modifikation des energetischen Risswiderstandes an den Grenzübergängen, wie es bei Diffusivitäten von Ankit et al. [135] durchgeführt wurde. Eine derartige Modifikation des Risswiderstandes ist beispielsweise bei Materialien mit inkohärent- oder teilkohärent-gebundenen Einschlüssen oder bei Verbundwerkstoffen mit Ablöseverhalten der Verbindungskomponenten notwendig. Die Ablösung von Fasern in Faserverbundwerkstoffen ist hierfür ein Beispiel [136].

Alle vorgestellten Modelle wurden in Rahmen der vorliegenden Arbeit in das Pace3D-Softwarepaket implementiert. Mit diesem Softwarepaket wurden alle Simulationsstudien inklusive der Auswertungen dieser Arbeit durchgeführt. Für weitere Untersuchungen mit den vorgestellten Modellen stehen somit alle Parallelisierungstechniken des Softwarepakets, welche großskalige Simulationen [134, 137–141] möglich machen, zur Verfügung.

A

Anhang

A.1. Transformationsmatrizen

In der Voigtschen Notation folgt für die Spannungen und Dehnungen

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\sigma}^v &= (\sigma_{11}, \sigma_{22}, \sigma_{33}, \sigma_{23}, \sigma_{13}, \sigma_{12})^T, \\ \boldsymbol{\varepsilon}^v &= (\varepsilon_{11}, \varepsilon_{22}, \varepsilon_{33}, 2\varepsilon_{23}, 2\varepsilon_{13}, 2\varepsilon_{12})^T.\end{aligned}$$

Die Transformation (4.23) wird zu

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\sigma}_B^v(\mathbf{n}^s) &= \mathbf{M}_\sigma^v \boldsymbol{\sigma}^v, \\ \boldsymbol{\varepsilon}_B^v(\mathbf{n}^s) &= \mathbf{M}_\varepsilon^v \boldsymbol{\varepsilon}^v\end{aligned}$$

mit \mathbf{M}_σ^v und \mathbf{M}_ε^v als

$$\mathbf{M}_\sigma^v = \begin{pmatrix} n_1 n_1 & n_2 n_2 & n_3 n_3 & 2n_2 n_3 & 2n_1 n_3 & 2n_1 n_2 \\ t_1 t_1 & t_2 t_2 & t_3 t_3 & 2t_2 t_3 & 2t_1 t_3 & 2t_1 t_2 \\ s_1 s_1 & s_2 s_2 & s_3 s_3 & 2s_2 s_3 & 2s_1 s_3 & 2s_1 s_2 \\ t_1 s_1 & t_2 s_2 & t_3 s_3 & t_2 s_3 + t_3 s_2 & t_1 s_3 + t_3 s_1 & t_1 s_2 + t_2 s_1 \\ n_1 s_1 & n_2 s_2 & n_3 s_3 & n_2 s_3 + n_3 s_2 & n_1 s_3 + n_3 s_1 & n_1 s_2 + n_2 s_1 \\ n_1 t_1 & n_2 t_2 & n_3 t_3 & n_2 t_3 + n_3 t_2 & n_1 t_3 + n_3 t_1 & n_1 t_2 + n_2 t_1 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{M}_\varepsilon^v = \begin{pmatrix} n_1 n_1 & n_2 n_2 & n_3 n_3 & n_2 n_3 & n_1 n_3 & n_1 n_2 \\ t_1 t_1 & t_2 t_2 & t_3 t_3 & t_2 t_3 & t_1 t_3 & t_1 t_2 \\ s_1 s_1 & s_2 s_2 & s_3 s_3 & s_2 s_3 & s_1 s_3 & s_1 s_2 \\ 2t_1 s_1 & 2t_2 s_2 & 2t_3 s_3 & t_2 s_3 + t_3 s_2 & t_1 s_3 + t_3 s_1 & t_1 s_2 + t_2 s_1 \\ 2n_1 s_1 & 2n_2 s_2 & 2n_3 s_3 & n_2 s_3 + n_3 s_2 & n_1 s_3 + n_3 s_1 & n_1 s_2 + n_2 s_1 \\ 2n_1 t_1 & 2n_2 t_2 & 2n_3 t_3 & n_2 t_3 + n_3 t_2 & n_1 t_3 + n_3 t_1 & n_1 t_2 + n_2 t_1 \end{pmatrix}.$$

Werden die Spannungs- und Dehnungskomponenten umgeordnet, wie es in Abschnitt 4.3.1 benötigt wird, folgt

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\varepsilon}_B &:= (\varepsilon_{nn}, \varepsilon_{ns}, \varepsilon_{nt}, \varepsilon_{tt}, \varepsilon_{ss}, \varepsilon_{ts})^\top = (\boldsymbol{\varepsilon}_n, \boldsymbol{\varepsilon}_t)^\top, \\ \boldsymbol{\sigma}_B &:= (\sigma_{nn}, \sigma_{ns}, \sigma_{nt}, \sigma_{tt}, \sigma_{ss}, \sigma_{ts})^\top = (\boldsymbol{\sigma}_n, \boldsymbol{\sigma}_t)^\top.\end{aligned}$$

Mit dieser Umsortierung der Komponenten werden auch die Zeilen und Spalten der Transformationsmatrizen folgendermaßen zu folgender Form verändert

$$\begin{aligned}\mathbf{M}_\sigma &= \begin{pmatrix} n_1 n_1 & n_2 n_2 & n_3 n_3 & 2n_2 n_3 & 2n_1 n_3 & 2n_1 n_2 \\ n_1 t_1 & n_2 t_2 & n_3 t_3 & n_2 t_3 + n_3 t_2 & n_1 t_3 + n_3 t_1 & n_1 t_2 + n_2 t_1 \\ n_1 s_1 & n_2 s_2 & n_3 s_3 & n_2 s_3 + n_3 s_2 & n_1 s_3 + n_3 s_1 & n_1 s_2 + n_2 s_1 \\ t_1 t_1 & t_2 t_2 & t_3 t_3 & 2t_2 t_3 & 2t_1 t_3 & 2t_1 t_2 \\ s_1 s_1 & s_2 s_2 & s_3 s_3 & 2s_2 s_3 & 2s_1 s_3 & 2s_1 s_2 \\ t_1 s_1 & t_2 s_2 & t_3 s_3 & t_2 s_3 + t_3 s_2 & t_1 s_3 + t_3 s_1 & t_1 s_2 + t_2 s_1 \end{pmatrix}, \\ \mathbf{M}_\varepsilon &= \begin{pmatrix} n_1 n_1 & n_2 n_2 & n_3 n_3 & n_2 n_3 & n_1 n_3 & n_1 n_2 \\ 2n_1 t_1 & 2n_2 t_2 & 2n_3 t_3 & n_2 t_3 + n_3 t_2 & n_1 t_3 + n_3 t_1 & n_1 t_2 + n_2 t_1 \\ 2n_1 s_1 & 2n_2 s_2 & 2n_3 s_3 & n_2 s_3 + n_3 s_2 & n_1 s_3 + n_3 s_1 & n_1 s_2 + n_2 s_1 \\ t_1 t_1 & t_2 t_2 & t_3 t_3 & t_2 t_3 & t_1 t_3 & t_1 t_2 \\ s_1 s_1 & s_2 s_2 & s_3 s_3 & s_2 s_3 & s_1 s_3 & s_1 s_2 \\ 2t_1 s_1 & 2t_2 s_2 & 2t_3 s_3 & t_2 s_3 + t_3 s_2 & t_1 s_3 + t_3 s_1 & t_1 s_2 + t_2 s_1 \end{pmatrix}.\end{aligned}$$

Damit kann eine Transformation vom kartesischem Koordinatensystem direkt in die benötigte Form der Spannungen und Dehnungen erfolgen

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\sigma}_B &= \mathbf{M}_\sigma \boldsymbol{\sigma}^\vee, \\ \boldsymbol{\varepsilon}_B &= \mathbf{M}_\varepsilon \boldsymbol{\varepsilon}^\vee.\end{aligned}$$

A.2. Berechnung der Koeffizientenmatrix für das Newtonsche Verfahren in Abschnitt 6.2.2

In Abschnitt 6.2.2 wird ein Newtonsches Verfahren verwendet, dessen Koeffizientenmatrix $\hat{\mathbf{G}}(\hat{\mathbf{a}}^n)$ (siehe Gl. (6.17)) im Folgenden berechnet wird. Die Beiträge von $\hat{\mathbf{g}}(\hat{\mathbf{a}}^n)$ sind komponentenweise gegeben durch

$$\begin{aligned}g_v^{1\alpha} &= F_{vi}^1 2S_{ij}^1 n_j^{1\alpha} - F_{vi}^\alpha 2S_{ij}^\alpha n_j^{1\alpha} \\ &= F_{vi}^1 \mathcal{C}_{ijkl}^1 2E_{kl}^1 n_j^{1\alpha} - F_{vi}^\alpha \mathcal{C}_{ijkl}^\alpha 2E_{kl}^\alpha n_j^{1\alpha} \\ &= F_{vi}^1 \mathcal{C}_{ijkl}^1 (F_{mk}^1 F_{ml}^1 - \delta_{kl}) n_j^{1\alpha} - F_{vi}^\alpha \mathcal{C}_{ijkl}^\alpha (F_{mk}^\alpha F_{ml}^\alpha - \delta_{kl}) n_j^{1\alpha}.\end{aligned}$$

Dabei sind die aufgeführten Deformationsgradienten und entsprechend die Greenschen Dehnungen abhängig von dem Tupel der unbekanntenen Komponenten von $\hat{\mathbf{a}}$ (siehe Gl. (6.14)). Der Übersichtlichkeit halber werden im Folgenden die Komponenten des Normalenvektors in der

Referenzkonfiguration $\mathbf{n}_r^{1\alpha}$ als $n_i^{1\alpha}$ bezeichnet. Für die Ableitung von $\mathbf{g}^{1\alpha}(\hat{\mathbf{a}})$ nach $\mathbf{a}^{1\beta}$ und damit für die Komponenten der Koeffizientenmatrix $\hat{\mathbf{G}}(\hat{\mathbf{a}}^n)$ folgt

$$\frac{\partial g_v^{1\alpha}}{\partial a_h^{1\beta}} = 2 \left(\frac{\partial F_{vi}^1}{\partial a_h^{1\beta}} S_{ij}^1 - \frac{\partial F_{vi}^\alpha}{\partial a_h^{1\beta}} S_{ij}^\alpha + F_{vi}^1 C_{ijkl}^1 \frac{\partial E_{kl}^1}{\partial a_h^{1\beta}} - F_{vi}^\alpha C_{ijkl}^\alpha \frac{\partial E_{kl}^\alpha}{\partial a_h^{1\beta}} \right) n_j^{1\alpha}.$$

Dabei sind die Ableitungen der Deformationsgradienten (6.13) folgendermaßen gegeben

$$\frac{\partial F_{vi}^\alpha}{\partial a_h^{1\beta}} = H^{\alpha\beta} \delta_{vh} n_i^{1\beta}$$

und die Funktion $H^{\alpha\beta}$ ist definiert als

$$H^{\alpha\beta}(\alpha, \beta) = \begin{cases} h^\beta(\boldsymbol{\varphi}) & \text{falls } \alpha = 1 \text{ oder } \beta \neq \alpha \\ -\sum_{\delta \neq \alpha} h^\delta(\boldsymbol{\varphi}) & \text{falls } \beta = \alpha. \end{cases}$$

Entsprechend folgt für die Ableitung der Greenschen Dehnungen komponentenweise

$$\frac{\partial E_{kl}^\alpha}{\partial a_h^{1\beta}} = \frac{1}{2} H^{\alpha\beta} \left(n_k^{1\beta} F_{hl}^\alpha + F_{hk}^\alpha n_l^{1\beta} \right).$$

Die Beiträge $\partial \mathbf{g}^{1\alpha} / (\partial \mathbf{a}^{1\beta})$ der Koeffizientenmatrix $\hat{\mathbf{G}}(\hat{\mathbf{a}}^n)$ sind damit definiert. Mit diesen Beiträgen lässt sich die Koeffizientenmatrix folgendermaßen zusammensetzen

$$\hat{\mathbf{G}}(\hat{\mathbf{a}}^n) = \begin{pmatrix} \frac{\partial \mathbf{g}^{12}}{\partial \mathbf{a}^{12}} & \frac{\partial \mathbf{g}^{12}}{\partial \mathbf{a}^{13}} & \cdots & \frac{\partial \mathbf{g}^{12}}{\partial \mathbf{a}^{1N_I}} \\ \frac{\partial \mathbf{g}^{13}}{\partial \mathbf{a}^{12}} & \frac{\partial \mathbf{g}^{13}}{\partial \mathbf{a}^{13}} & \cdots & \frac{\partial \mathbf{g}^{13}}{\partial \mathbf{a}^{1N_I}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial \mathbf{g}^{1N_I}}{\partial \mathbf{a}^{12}} & \frac{\partial \mathbf{g}^{1N_I}}{\partial \mathbf{a}^{13}} & \cdots & \frac{\partial \mathbf{g}^{1N_I}}{\partial \mathbf{a}^{1N_I}} \end{pmatrix},$$

wobei die einzelnen Beiträge $\partial \mathbf{g}^{1\alpha} / \partial \mathbf{a}^{1\beta}$ jeweils 3×3 Matrizen repräsentieren.

A.3. Erweiterung des Modells aus Abschnitt 4.3 für Anwendungen mit finiten Deformationen

Die Formulierung des Materialgesetzes im Übergangsbereich ist vom Materialgesetz innerhalb der einzelnen Phasen abhängig. Bei der Modellierung eines hyperelastischen Materialverhaltens in Stählen wird verbreitet das St. Venant-Kirchhoff-Gesetz (2.45) angewendet. Dieses physikalisch lineare Materialgesetz beschreibt einen linearen Zusammenhang zwischen dem zweiten Piola-Kirchhoffschen Spannungstensor (siehe Gl. (2.17)) und dem Greenschen Verzerrungstensor (2.44) und wird im Folgenden angesetzt.

Der Greensche Verzerrungstensor ist eine Funktion des rechten Cauchy-Green-Tensors $\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \mathbf{F}$. Unter Berücksichtigung der Hadamardschen Bedingung (2.33) und der Identität $\llbracket fg \rrbracket = \llbracket f \rrbracket \langle g \rangle + \langle f \rangle \llbracket g \rrbracket$, folgt für den Sprung des rechten Cauchy-Green-Tensors

$$\begin{aligned} \llbracket \mathbf{C} \rrbracket &= \llbracket \mathbf{F}^T \rrbracket \langle \mathbf{F} \rangle + \langle \mathbf{F}^T \rrbracket \llbracket \mathbf{F} \rrbracket = (\mathbf{n}_r^s \otimes \mathbf{a}) \langle \mathbf{F} \rangle + \langle \mathbf{F}^T \rrbracket (\mathbf{a} \otimes \mathbf{n}_r^s) \\ &= \mathbf{n}_r^s \otimes \langle \mathbf{F}^T \mathbf{a} \rangle + \langle \mathbf{F}^T \mathbf{a} \rangle \otimes \mathbf{n}_r^s, \end{aligned}$$

mit einem beliebigen Vektor \mathbf{a} . Damit hat der Sprung des rechten Cauchy-Green-Tensors eine äquivalente Form zum Sprung der infinitesimalen Dehnung (4.19) und wird auf die gleiche Weise, unter Verwendung der Aufspaltung des Deformationsgradienten (6.6), in seine symmetrischen Normal- und Tangentialanteile zur singulären Fläche aufgeteilt

$$\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \mathbf{F} = (\mathbf{F}_{n_r}^T + \mathbf{F}_{t_r}^T)(\mathbf{F}_{n_r} + \mathbf{F}_{t_r}) = \underbrace{\mathbf{F}_{n_r}^T \mathbf{F}_{n_r} + \mathbf{F}_{n_r}^T \mathbf{F}_{t_r} + \mathbf{F}_{t_r}^T \mathbf{F}_{n_r}}_{=: \mathbf{C}_{n_r}} + \underbrace{\mathbf{F}_{t_r}^T \mathbf{F}_{t_r}}_{=: \mathbf{C}_{t_r}}. \quad (\text{A.1})$$

Da der Sprung des Tangentialanteils des Deformationsgradienten verschwindet (siehe Gl. (6.21)), verschwindet auch der Sprung des tangentialen Anteils des rechten Cauchy-Green-Tensors \mathbf{C}_{t_r} . Ist die Dehnung linear vom Cauchy-Green-Tensor \mathbf{C} abhängig, wie es bei der Greenschen Dehnung (2.44) der Fall ist, so folgt entsprechend für die kontinuierlichen Anteile der Dehnung

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{t_r} &= \mathbf{f}(\mathbf{C}_{t_r}) = (\mathbf{I} - \mathbf{n}_r \otimes \mathbf{n}_r) \mathbf{f}(\mathbf{C})(\mathbf{I} - \mathbf{n}_r \otimes \mathbf{n}_r) \\ &= (\mathbf{I} - \mathbf{n}_r \otimes \mathbf{n}_r) \mathbf{E} (\mathbf{I} - \mathbf{n}_r \otimes \mathbf{n}_r) =: ((\mathbf{I} - \mathbf{n}_r \otimes \mathbf{n}_r) \square (\mathbf{I} - \mathbf{n}_r \otimes \mathbf{n}_r))[\mathbf{E}] = \mathcal{P}[\mathbf{E}]. \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Dabei ist der Operator \square mit der Operation $(\mathbf{A} \square \mathbf{B})[\mathbf{C}] = \mathbf{ACB}$ definiert und \mathcal{P} ist ein Tensor vierter Stufe, der in der Indexnotation

$$\mathcal{P}_{ijkl} = ((\mathbf{I} - \mathbf{n}_r \otimes \mathbf{n}_r) \square (\mathbf{I} - \mathbf{n}_r \otimes \mathbf{n}_r))_{ijkl} = (\mathbf{I} - \mathbf{n}_r \otimes \mathbf{n}_r)_{ik} (\mathbf{I} - \mathbf{n}_r \otimes \mathbf{n}_r)_{lj}$$

lautet. Entsprechend wird auch der Normalanteil der Dehnung $\mathbf{E}_{n_r} = (\mathbf{I} \square \mathbf{I} - \mathcal{P})[\mathbf{E}] := \mathcal{N}[\mathbf{E}]$ abgespalten und es gilt für die Gesamtdehnung

$$\mathbf{E} = \mathcal{N}[\mathbf{E}] + \mathcal{P}[\mathbf{E}] = \mathbf{E}_{n_r} + \mathbf{E}_{t_r}. \quad (\text{A.3})$$

Äquivalent zu der Aufspaltung des Steifigkeitstensors in der Voigtschen Darstellung gemäß Gleichung (4.26) wird der Steifigkeitstensor mithilfe der Projektoren \mathcal{N} und \mathcal{P} additiv in vier Beiträge zerlegt

$$\begin{aligned} \mathbf{C} &= \mathcal{N} : \mathbf{C} : \mathcal{N} + \mathcal{N} : \mathbf{C} : \mathcal{P} + \mathcal{P} : \mathbf{C} : \mathcal{N} + \mathcal{P} : \mathbf{C} : \mathcal{P} \\ &=: \mathbf{C}_{nn} + \mathbf{C}_{nt} + \mathbf{C}_{tn} + \mathbf{C}_{tt}. \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Dabei gilt in der Indexnotation zwischen Tensoren vierter Stufe

$$(\mathbf{C} : (\mathbf{A} \square \mathbf{B}))_{ijkl} = C_{ijmn} (\mathbf{A} \square \mathbf{B})_{mnkl} = C_{ijmn} A_{mk} B_{ln}.$$

Ausgehend von einer quadratischen Form der Formänderungsenergiedichte $W = \mathbf{E} \cdot \mathbf{C}[\mathbf{E}]/2$ folgt mit den eingeführten Aufspaltungen (A.3) und (A.4)

$$\begin{aligned} W^\alpha &= \frac{1}{2} (\mathbf{E}_{n_r}^\alpha \cdot \mathbf{C}_{nn}^\alpha [\mathbf{E}_{n_r}^\alpha] + \mathbf{E}_{n_r}^\alpha \cdot \mathbf{C}_{nt}^\alpha [\mathbf{E}_{t_r}^\alpha] + \mathbf{E}_{t_r}^\alpha \cdot \mathbf{C}_{tn}^\alpha [\mathbf{E}_{n_r}^\alpha] + \mathbf{E}_{t_r}^\alpha \cdot \mathbf{C}_{tt}^\alpha [\mathbf{E}_{t_r}^\alpha]) \\ &= \frac{1}{2} (\mathbf{E}_{n_r}^\alpha \cdot \mathbf{C}_{nn}^\alpha [\mathbf{E}_{n_r}^\alpha] + 2\mathbf{E}_{n_r}^\alpha \cdot \mathbf{C}_{nt}^\alpha [\mathbf{E}_{t_r}^\alpha] + \mathbf{E}_{t_r}^\alpha \cdot \mathbf{C}_{tt}^\alpha [\mathbf{E}_{t_r}^\alpha]). \end{aligned}$$

Hierbei wurde die Symmetrie des Steifigkeitstensors ausgenutzt. Das hochgestellte α bei den Normalanteilen der Dehnung deutet an, dass es sich dabei um eine diskontinuierliche und damit phasenabhängige Variable handelt. Diese diskontinuierlichen Dehnungsanteile $\mathbf{E}_{n_r}^\alpha$ werden durch

eine Legendre-Transformation substituiert. Mit $\partial W^\alpha / \partial \mathbf{E}_{n_r}^\alpha = \mathbf{C}_{nn}^\alpha[\mathbf{E}_{n_r}^\alpha] + \mathbf{C}_{nt}^\alpha[\mathbf{E}_{t_r}] = \mathcal{N}[\mathbf{S}^\alpha] := \mathbf{S}_{n_r}^\alpha$ folgt für den Normalanteil der Dehnung

$$\mathbf{E}_{n_r}^\alpha = (\mathbf{C}_{nn}^\alpha)^{-1}[\mathbf{S}_{n_r}^\alpha - \mathbf{C}_{nt}^\alpha[\mathbf{E}_{t_r}]] = \mathbf{S}_{nn}^\alpha[\mathbf{S}_{n_r}^\alpha - \mathbf{C}_{nt}^\alpha[\mathbf{E}_{t_r}]].$$

$(\mathbf{C}_{nn}^\alpha)^{-1}$ bzw. \mathbf{S}_{nn}^α ist eine Pseudoinverse von \mathbf{C}_{nn}^α und ist nur in dem \mathcal{N} Projektionsraum definiert. Analog zu Abschnitt 4.3.3 ergibt sich damit für die Legendre-Transformation

$$\begin{aligned} \tilde{\Psi}^\alpha(\mathbf{S}_{n_r}^\alpha, \mathbf{E}_{t_r}^\alpha) &= W^\alpha - \frac{\partial W^\alpha}{\partial \mathbf{E}_{n_r}^\alpha} \cdot \mathbf{E}_{n_r}^\alpha & (A.5) \\ &= \frac{1}{2}(\mathbf{E}_{n_r}^\alpha \cdot \mathbf{C}_{nn}^\alpha[\mathbf{E}_{n_r}^\alpha] + 2\mathbf{E}_{n_r}^\alpha \cdot \mathbf{C}_{nt}^\alpha[\mathbf{E}_{t_r}] + \mathbf{E}_{t_r} \cdot \mathbf{C}_{tt}^\alpha[\mathbf{E}_{t_r}]) - \mathbf{S}_{n_r}^\alpha \cdot \mathbf{E}_{n_r}^\alpha \\ &= \frac{1}{2}\mathbf{S}_{nn}^\alpha[\mathbf{S}_{n_r}^\alpha - \mathbf{C}_{nt}^\alpha[\mathbf{E}_{t_r}]] \cdot \mathbf{C}_{nn}^\alpha : \mathbf{S}_{nn}^\alpha[\mathbf{S}_{n_r}^\alpha - \mathbf{C}_{nt}^\alpha[\mathbf{E}_{t_r}]] \\ &\quad + \mathbf{S}_{nn}^\alpha[\mathbf{S}_{n_r}^\alpha - \mathbf{C}_{nt}^\alpha[\mathbf{E}_{t_r}]] \cdot \mathbf{C}_{nt}^\alpha[\mathbf{E}_{t_r}] + \frac{1}{2}\mathbf{E}_{t_r} \cdot \mathbf{C}_{tt}^\alpha[\mathbf{E}_{t_r}] \\ &\quad - \mathbf{S}_{n_r}^\alpha \cdot \mathbf{S}_{nn}^\alpha[\mathbf{S}_{n_r}^\alpha - \mathbf{C}_{nt}^\alpha[\mathbf{E}_{t_r}]] \\ &= \frac{1}{2}(\mathbf{S}_{n_r}^\alpha \cdot (-\mathbf{S}_{nn}^\alpha[\mathbf{S}_{n_r}^\alpha] + \mathbf{S}_{nn}^\alpha : \mathbf{C}_{nt}^\alpha[\mathbf{E}_{t_r}]) \\ &\quad + \mathbf{E}_{t_r} \cdot (\mathbf{C}_{tn}^\alpha : \mathbf{S}_{nn}^\alpha[\mathbf{S}_{n_r}^\alpha] + (\mathbf{C}_{tt}^\alpha - \mathbf{C}_{tn}^\alpha : \mathbf{S}_{nn}^\alpha : \mathbf{C}_{nt}^\alpha)[\mathbf{E}_{t_r}])). \end{aligned}$$

Im Unterschied zur infinitesimalen Formulierung ist das Potential $\tilde{\Psi}^\alpha(\mathbf{S}_{n_r}^\alpha, \mathbf{E}_{t_r}^\alpha)$ nicht äquivalent zu $\Psi^\alpha(\mathbf{F})$, das in Abschnitt 6.4 für die Formulierung der treibenden Kräfte abgeleitet wurde. $\tilde{\Psi}^\alpha(\mathbf{S}_{n_r}^\alpha, \mathbf{E}_{t_r}^\alpha)$ ist lediglich ein Hilfspotential zur Formulierung der elastischen konstitutiven Gleichung im Übergangsbereich der Ordnungsparameter. Ein weiterer Unterschied zur infinitesimalen Formulierung ist, dass $\mathbf{S}_{n_r}^\alpha$ in Gegensatz zu σ_n (siehe Gl. (4.24)) im Allgemeinen keine kontinuierliche Variable ist, d. h. der Sprung von $\mathbf{S}_{n_r}^\alpha$ ist ungleich Null. Trotz dieser Diskontinuität, wird im Folgenden die Annahme getroffen, dass $\mathbf{S}_{n_r}^\alpha :=: \tilde{\mathbf{S}}_{n_r}^\alpha$ kontinuierlich ist und $\tilde{\mathbf{S}}_{n_r}^\alpha$ wird verwendet, um die diskontinuierlichen Dehnungsanteile zu substituieren.

Das Gesamtpotential im Übergangsbereich ist die lineare Interpolation der Einzelbeiträge $\tilde{\Psi}^\alpha$ und $\tilde{\Psi}^\beta$ gewichtet mit den entsprechenden Interpolationsfunktionen $h^\alpha(\boldsymbol{\varphi})$ bzw. $h^\beta(\boldsymbol{\varphi})$

$$\begin{aligned} \tilde{\Psi}(\tilde{\mathbf{S}}_{n_r}, \mathbf{E}_{t_r}^\alpha) &= \tilde{\Psi}^\alpha(\tilde{\mathbf{S}}_{n_r}, \mathbf{E}_{t_r}^\alpha)h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}) + \tilde{\Psi}^\beta(\tilde{\mathbf{S}}_{n_r}, \mathbf{E}_{t_r}^\beta)h^\beta(\boldsymbol{\varphi}) \\ &= \frac{1}{2}(\tilde{\mathbf{S}}_{n_r} \cdot (\mathcal{T}_{nn}[\tilde{\mathbf{S}}_{n_r}] + \mathcal{T}_{nt}[\mathbf{E}_{t_r}]) + \mathbf{E}_{t_r} \cdot (\mathcal{T}_{tn}[\tilde{\mathbf{S}}_{n_r}] + \mathcal{T}_{tt}[\mathbf{E}_{t_r}])). \end{aligned}$$

Dabei sind die einzelnen interpolierten Materialparameter ähnlich zu den Formulierungen infinitesimaler Deformationen (siehe Gl. (4.43)), allerdings als Tensoren vierter Stufe, folgendermaßen definiert

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_{nn} &:= \mathcal{T}_{nn}^\alpha h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}) + \mathcal{T}_{nn}^\beta h^\beta(\boldsymbol{\varphi}) = -\mathbf{S}_{nn}^\alpha h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}) - \mathbf{S}_{nn}^\beta h^\beta(\boldsymbol{\varphi}), & (A.6) \\ \mathcal{T}_{nt} &:= \mathcal{T}_{nt}^\alpha h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}) + \mathcal{T}_{nt}^\beta h^\beta(\boldsymbol{\varphi}) = \mathbf{S}_{nn}^\alpha : \mathbf{C}_{nt}^\alpha h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}) + \mathbf{S}_{nn}^\beta : \mathbf{C}_{nt}^\beta h^\beta(\boldsymbol{\varphi}), \\ \mathcal{T}_{tt} &:= \mathcal{T}_{tt}^\alpha h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}) + \mathcal{T}_{tt}^\beta h^\beta(\boldsymbol{\varphi}) \\ &= (\mathbf{C}_{tt}^\alpha - \mathbf{C}_{tn}^\alpha : \mathbf{S}_{nn}^\alpha : \mathbf{C}_{nt}^\alpha) h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}) + (\mathbf{C}_{tt}^\beta - \mathbf{C}_{tn}^\beta : \mathbf{S}_{nn}^\beta : \mathbf{C}_{nt}^\beta) h^\beta(\boldsymbol{\varphi}). \end{aligned}$$

Mit $\partial \tilde{\Psi} / \partial \tilde{\mathbf{S}}_{n_r} = \mathcal{T}_{nn}[\tilde{\mathbf{S}}_{n_r}] + \mathcal{T}_{nt}[\mathbf{E}_{t_r}] = -\mathbf{E}_{n_r}$ folgt für die Normalanteile der Spannungen

$$\tilde{\mathbf{S}}_{n_r} = \mathcal{T}_{nn}^{-1}[-\mathbf{E}_{n_r} - \mathcal{T}_{nt}[\mathbf{E}_{t_r}]].$$

Mit \mathcal{T}_{nn}^{-1} als pseudoinverse Matrix von \mathcal{T}_{nn} , die nur im \mathcal{N} Projektionsraum definiert ist. Damit ergibt sich für die inverse Legendre-Transformation des Potentials \tilde{P} nach $\tilde{\mathbf{S}}_{n_r}$,

$$\begin{aligned}
 W(\mathbf{E}_{n_r}, \mathbf{E}_{t_r}) &= \tilde{P}(\tilde{\mathbf{S}}_{n_r}, \mathbf{E}_{t_r}) - \frac{\partial \tilde{P}(\tilde{\mathbf{S}}_{n_r}, \mathbf{E}_{t_r})}{\partial \tilde{\mathbf{S}}_{n_r}} \cdot \tilde{\mathbf{S}}_{n_r} \\
 &= \frac{1}{2} (\mathcal{T}_{nn}^{-1}[-\mathbf{E}_{n_r} - \mathcal{T}_{nt}[\mathbf{E}_{t_r}]] \cdot (\mathcal{T}_{nn} : \mathcal{T}_{nn}^{-1}[-\mathbf{E}_{n_r} - \mathcal{T}_{nt}[\mathbf{E}_{t_r}]] + \mathcal{T}_{nt}[\mathbf{E}_{t_r}]) \\
 &\quad + \mathbf{E}_{t_r} \cdot (\mathcal{T}_{tn} : \mathcal{T}_{nn}^{-1}[-\mathbf{E}_{n_r} - \mathcal{T}_{nt}[\mathbf{E}_{t_r}]] + \mathcal{T}_{tt}[\mathbf{E}_{t_r}])) \\
 &\quad + \mathbf{E}_{n_r} \cdot \mathcal{T}_{nn}^{-1}[-\mathbf{E}_{n_r} - \mathcal{T}_{nt}[\mathbf{E}_{t_r}]] \\
 &= \frac{1}{2} (\mathbf{E}_{n_r} \cdot (-\mathcal{T}_{nn}^{-1})[\mathbf{E}_{n_r}] + 2\mathbf{E}_{n_r} \cdot (-\mathcal{T}_{nn}^{-1} : \mathcal{T}_{nt})[\mathbf{E}_{t_r}] \\
 &\quad + \mathbf{E}_{t_r} \cdot (\mathcal{T}_{tt} - \mathcal{T}_{tn} : \mathcal{T}_{nn}^{-1} : \mathcal{T}_{nt})[\mathbf{E}_{t_r}]).
 \end{aligned}$$

Unter Berücksichtigung der Projektionsvorschriften $\mathcal{N} : \mathcal{N} = \mathcal{N}$ und $\mathcal{P} : \mathcal{P} = \mathcal{P}$ folgt für die Spannungen im Übergangsbereich

$$\begin{aligned}
 \mathbf{S} &= (\mathcal{N} + \mathcal{P})[\mathbf{S}] = \tilde{\mathbf{S}}_{n_r} + \tilde{\mathbf{S}}_{t_r} = \frac{\partial W(\mathbf{E}_{n_r}, \mathbf{E}_{t_r})}{\partial \mathbf{E}_{n_r}} + \frac{\partial W(\mathbf{E}_{n_r}, \mathbf{E}_{t_r})}{\partial \mathbf{E}_{t_r}} \quad (\text{A.7}) \\
 &= -\mathcal{T}_{nn}^{-1}[\mathbf{E}_{n_r}] - \mathcal{T}_{nn}^{-1} : \mathcal{T}_{nt}[\mathbf{E}_{t_r}] - \mathcal{T}_{tn} : \mathcal{T}_{nn}^{-1}[\mathbf{E}_{n_r}] + (\mathcal{T}_{tt} - \mathcal{T}_{tn} : \mathcal{T}_{nn}^{-1} : \mathcal{T}_{nt})[\mathbf{E}_{t_r}] \\
 &= (-\mathcal{T}_{nn}^{-1} : \mathcal{N} - \mathcal{T}_{nn}^{-1} : \mathcal{T}_{nt} : \mathcal{P} - \mathcal{T}_{tn} : \mathcal{T}_{nn}^{-1} : \mathcal{N} + (\mathcal{T}_{tt} - \mathcal{T}_{tn} : \mathcal{T}_{nn}^{-1} : \mathcal{T}_{nt})\mathcal{P})[\mathbf{E}] \\
 &= \underbrace{(-\mathcal{T}_{nn}^{-1} - \mathcal{T}_{nn}^{-1} : \mathcal{T}_{nt} - \mathcal{T}_{tn} : \mathcal{T}_{nn}^{-1} + (\mathcal{T}_{tt} - \mathcal{T}_{tn} : \mathcal{T}_{nn}^{-1} : \mathcal{T}_{nt}))}_{=: \mathcal{K}(\varphi)}[\mathbf{E}].
 \end{aligned}$$

$\mathcal{K}(\varphi)$ ist der effektive Steifigkeitstensor im Übergangsbereich und ist in der Voigtschen Darstellung äquivalent zu dem effektiven Steifigkeitstensor, der für infinitesimale Deformationen im Übergangsbereich formuliert wurde (siehe Gl. (4.50) und (4.51)).

A.3.1. Berücksichtigung der inelastischen Dehnungen

Wie schon in Abschnitt 6.2 besprochen, wird als hyperelastische konstitutive Gleichung in der Lagrangeschen Darstellung das St. Venant-Kirchhoff-Gesetz (2.45) angesetzt. Da jegliche inelastische Deformation $\tilde{\mathbf{F}}$ (siehe Gl. (6.9)) spannungsfrei ist, muss für die Cauchy'sche Spannung gelten

$$\boldsymbol{\sigma} = J_{\text{el}} \mathbf{F}_{\text{el}} \mathbf{S}_{\text{el}} \mathbf{F}_{\text{el}}^{\top} = J_{\text{el}} \mathbf{F}_{\text{el}} \mathbf{C}_0 [\mathbf{E}_{\text{el}}] \mathbf{F}_{\text{el}}^{\top}. \quad (\text{A.8})$$

\mathbf{S}_{el} ist die Spannung bezogen auf die Zwischenplatzierung, \mathbf{E}_{el} ist die elastische Dehnung und \mathbf{C}_0 der Steifigkeitstensor in der ungestörten Konfiguration. Mit $\tilde{\mathbf{P}} := \tilde{\mathbf{F}}^{-1}$ folgt für den elastischen Anteil des Greenschen Verzerrungstensors

$$\begin{aligned}
 \mathbf{E}_{\text{el}} &= \frac{1}{2} (\mathbf{C}_{\text{el}} - \mathbf{I}) = \frac{1}{2} (\tilde{\mathbf{P}}^{\top} \mathbf{C} \tilde{\mathbf{P}} - \mathbf{I}) = \frac{1}{2} \tilde{\mathbf{P}}^{\top} (\mathbf{C} - \tilde{\mathbf{P}}^{-\top} \tilde{\mathbf{P}}^{-1}) \tilde{\mathbf{P}} \\
 &= \tilde{\mathbf{P}}^{\top} \left(\frac{1}{2} (\mathbf{C} - \mathbf{I}) - \frac{1}{2} (\tilde{\mathbf{C}} - \mathbf{I}) \right) \tilde{\mathbf{P}} = \tilde{\mathbf{P}}^{\top} (\mathbf{E} - \tilde{\mathbf{E}}) \tilde{\mathbf{P}}.
 \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

$\tilde{\mathbf{E}} := (\tilde{\mathbf{C}} - \mathbf{I})/2$ ist dabei die inelastische Dehnung und $\tilde{\mathbf{C}} := \tilde{\mathbf{F}}^{\top} \tilde{\mathbf{F}}$ der entsprechender inelastische rechter Cauchy-Green-Tensor. Unter Anwendung der Gleichung (A.8) und (A.9) folgt für die

Spannung in der Bezugsplatzierung [142]

$$\begin{aligned} \mathbf{S} &= \frac{J_{\text{el}}}{J} \mathbf{F}^{-1} \mathbf{F}_{\text{el}} \mathbf{C}_0 [\mathbf{E}_{\text{el}}] \mathbf{F}_{\text{el}}^{\text{T}} \mathbf{F}^{-\text{T}} = \tilde{J}^{-1} \tilde{\mathbf{P}} \mathbf{C}_0 [\tilde{\mathbf{P}}^{\text{T}} (\mathbf{E} - \tilde{\mathbf{E}}) \tilde{\mathbf{P}}] \tilde{\mathbf{P}}^{\text{T}} \\ &= \tilde{J}^{-1} (\tilde{\mathbf{P}} \star \mathbf{C}_0) [\mathbf{E} - \tilde{\mathbf{E}}] = \mathbf{C} [\mathbf{E} - \tilde{\mathbf{E}}] = \mathbf{C} [\mathbf{E}] - \mathbf{C} [\tilde{\mathbf{E}}]. \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

$\tilde{J} = J/J_{\text{el}} = \det(\tilde{\mathbf{F}})$ ist die Determinante des inelastischen Deformationsgradienten und $\mathbf{C} := \tilde{J}^{-1} \tilde{\mathbf{P}} \star \mathbf{C}_0$ ist der durch inelastische Deformationen verformte Steifigkeitstensor. Dabei wird mit $\tilde{\mathbf{P}} \star \mathbf{C}_0$ das Rayleigh-Produkt des inversen inelastischen Deformationsgradienten mit dem ungestörten Steifigkeitstensor gekennzeichnet. Mit kartesischen Komponenten gilt für den deformierten Steifigkeitstensor $C_{ijkl} = P_{im} P_{jn} P_{ko} P_{lp} C_{0mnop} / \tilde{J}$. Die Gleichung (A.10) zeigt, dass für das St. Venant-Kirchhoff-Gesetz die multiplikative Zerlegung des Deformationsgradienten zu einer additiven Aufspaltung in die Gesamtspannung $\mathbf{C}[\mathbf{E}]$ und den inelastischen Spannungsbeitrag $\mathbf{C}[\tilde{\mathbf{E}}]$ führt.

Ausgehend von der Spannungsbeschreibung (A.10) wird die Formänderungsenergiedichte der jeweiligen Phase zu

$$W^\alpha = \frac{1}{2} ((\mathbf{E}^\alpha - \tilde{\mathbf{E}}^\alpha) \cdot \mathbf{C}^\alpha [\mathbf{E}^\alpha - \tilde{\mathbf{E}}^\alpha]),$$

mit dem vordeformierten Steifigkeitstensor $\mathbf{C}^\alpha = (\tilde{\mathbf{P}}^\alpha \star \mathbf{C}_0^\alpha) / \tilde{J}^\alpha$. Diese Form der Formänderungsenergiedichte ist vergleichbar mit der Formänderungsenergiedichte für infinitesimale Deformationen (4.44). Anstatt der infinitesimalen elastischen Dehnungen ($\boldsymbol{\epsilon}^\alpha - \tilde{\boldsymbol{\epsilon}}^\alpha$) wird in der Beschreibung für finite Deformationen der elastische Beitrag der Greenschen Dehnung ($\mathbf{E}^\alpha - \tilde{\mathbf{E}}^\alpha$) verwendet. Außerdem müssen die möglichen Vordeformationen beim Steifigkeitstensor berücksichtigt werden. Trotz dieser Differenzen ist die Vorgehensweise für die Berechnung der Formänderungsenergiedichte und der Spannungen im Übergangsbereich eines Zweiphasensystems analog. Mit der eingeführten Aufspaltung der Dehnungen und des Steifigkeitstensors in Abschnitt 6.2 in Normal- und Tangentialanteile zum Interface und $\partial W^\alpha / \partial \mathbf{E}_{n_r}^\alpha = \mathbf{C}_{nn}^\alpha [\mathbf{E}_{n_r}^\alpha - \tilde{\mathbf{E}}_{n_r}^\alpha] + \mathbf{C}_{nt}^\alpha [\mathbf{E}_{t_r}^\alpha - \tilde{\mathbf{E}}_{t_r}^\alpha] = \tilde{\mathbf{S}}_{n_r}$, folgt für den diskontinuierlichen Anteil der Dehnung

$$\mathbf{E}_{n_r}^\alpha = \mathbf{S}_{nn}^\alpha [\tilde{\mathbf{S}}_{n_r} - \mathbf{C}_{nt}^\alpha [\mathbf{E}_{t_r}^\alpha - \tilde{\mathbf{E}}_{t_r}^\alpha]] + \tilde{\mathbf{E}}_{n_r}^\alpha.$$

Damit ergibt sich für das Hilfspotential $\tilde{\Psi}^\alpha$ (siehe Gl. (A.5)) unter Berücksichtigung der inelastischen Dehnungsbeiträge

$$\begin{aligned} \tilde{\Psi}^\alpha(\tilde{\mathbf{S}}_{n_r}, \mathbf{E}_{t_r}^\alpha) &= W^\alpha - \frac{\partial W^\alpha}{\partial \mathbf{E}_{n_r}^\alpha} \cdot \mathbf{E}_{n_r}^\alpha \\ &= \frac{1}{2} (\tilde{\mathbf{S}}_{n_r} \cdot (-\mathbf{S}_{nn}^\alpha [\tilde{\mathbf{S}}_{n_r}] + \mathbf{S}_{nn}^\alpha : \mathbf{C}_{nt}^\alpha [\mathbf{E}_{t_r}^\alpha - \tilde{\mathbf{E}}_{t_r}^\alpha]) \\ &\quad + (\mathbf{E}_{t_r}^\alpha - \tilde{\mathbf{E}}_{t_r}^\alpha) \cdot (\mathbf{C}_{tn}^\alpha : \mathbf{S}_{nn}^\alpha [\tilde{\mathbf{S}}_{n_r}] + (\mathbf{C}_{tt}^\alpha - \mathbf{C}_{tn}^\alpha : \mathbf{S}_{nn}^\alpha : \mathbf{C}_{nt}^\alpha) [\mathbf{E}_{t_r}^\alpha - \tilde{\mathbf{E}}_{t_r}^\alpha])) \\ &\quad - \tilde{\mathbf{S}}_{n_r} \cdot \tilde{\mathbf{E}}_{n_r}^\alpha. \end{aligned}$$

Entsprechend ergibt sich für das Gesamtpotential

$$\begin{aligned} \tilde{\Psi}(\tilde{\mathbf{S}}_{n_r}, \mathbf{E}_{t_r}) &= \tilde{\Psi}^\alpha h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}) + \tilde{\Psi}^\beta h^\beta(\boldsymbol{\varphi}) \\ &= \frac{1}{2} (\tilde{\mathbf{S}}_{n_r} \cdot (\mathcal{T}_{nn} [\tilde{\mathbf{S}}_{n_r}] + \mathcal{T}_{nt} [\mathbf{E}_{t_r}]) + \mathbf{E}_{t_r} \cdot (\mathcal{T}_{tn} [\tilde{\mathbf{S}}_{n_r}] + \mathcal{T}_{tt} [\mathbf{E}_{t_r}])) \\ &\quad - 2\tilde{\mathbf{S}}_{n_r} \cdot \tilde{\boldsymbol{\chi}}_{n_r} - 2\mathbf{E}_{t_r} \cdot \tilde{\boldsymbol{\chi}}_{t_r} + \tilde{\mathbf{E}}_{t_r}^\alpha \cdot \mathcal{T}_{tt}^\alpha [\tilde{\mathbf{E}}_{t_r}^\alpha] h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}) + \tilde{\mathbf{E}}_{t_r}^\beta \cdot \mathcal{T}_{tt}^\beta [\tilde{\mathbf{E}}_{t_r}^\beta] h^\beta(\boldsymbol{\varphi}) \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

mit dem Eigendehnungsanteil in die Normalrichtung

$$\begin{aligned}\tilde{\chi}_{n_r} &:= (\tilde{\mathbf{E}}_{n_r}^\alpha + \mathcal{T}_{nt}^\alpha[\tilde{\mathbf{E}}_{t_r}^\alpha])h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}) + (\tilde{\mathbf{E}}_{n_r}^\beta + \mathcal{T}_{nt}^\beta[\tilde{\mathbf{E}}_{t_r}^\beta])h^\beta(\boldsymbol{\varphi}) \\ &= \mathcal{N}\left[(\tilde{\mathbf{E}}^\alpha + \mathcal{T}_{nt}^\alpha[\tilde{\mathbf{E}}^\alpha])h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}) + (\tilde{\mathbf{E}}^\beta + \mathcal{T}_{nt}^\beta[\tilde{\mathbf{E}}^\beta])h^\beta(\boldsymbol{\varphi})\right]\end{aligned}\quad (\text{A.12})$$

und dem entsprechenden Tangentialbeitrag

$$\tilde{\chi}_{t_r} := \mathcal{T}_{tt}^\alpha[\tilde{\mathbf{E}}_{t_r}^\alpha]h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}) + \mathcal{T}_{tt}^\beta[\tilde{\mathbf{E}}_{t_r}^\beta]h^\beta(\boldsymbol{\varphi}) = \mathcal{T}_{tt}^\alpha[\tilde{\mathbf{E}}^\alpha]h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}) + \mathcal{T}_{tt}^\beta[\tilde{\mathbf{E}}^\beta]h^\beta(\boldsymbol{\varphi}). \quad (\text{A.13})$$

Dabei sind die einzelnen interpolierten Materialparameter in der Gleichung (A.6) definiert. Mit $\partial\tilde{P}/\partial\tilde{\mathbf{S}}_{n_r} = \mathcal{T}_{nn}[\tilde{\mathbf{S}}_{n_r}] + \mathcal{T}_{nt}[\mathbf{E}_{t_r}] - \tilde{\chi}_{n_r} = -\mathbf{E}_{n_r}$ folgt für die Normalanteile der Spannungen

$$\tilde{\mathbf{S}}_{n_r} = \mathcal{T}_{nn}^{-1}[-\mathbf{E}_{n_r} - \mathcal{T}_{nt}[\mathbf{E}_{t_r}] + \tilde{\chi}_{n_r}].$$

Durch die Rücktransformation des Gesamtpotentials (A.11) ergibt die Formänderungsenergie-dichte im Übergangsbereich eines Zweiphasensystems unter Berücksichtigung der inelastischen Dehnungen

$$\begin{aligned}W &= \tilde{\Psi}(\tilde{\mathbf{S}}_{n_r}, \mathbf{E}_{t_r}) - \frac{\partial\tilde{\Psi}(\tilde{\mathbf{S}}_{n_r}, \mathbf{E}_{t_r})}{\partial\tilde{\mathbf{S}}_{n_r}} \cdot \tilde{\mathbf{S}}_{n_r} \\ &= \frac{1}{2}(\mathbf{E}_{n_r} \cdot (-\mathcal{T}_{nn}^{-1}[\mathbf{E}_{n_r}] - \mathcal{T}_{nn}^{-1} : \mathcal{T}_{nt}[\mathbf{E}_{t_r}] + 2\mathcal{T}_{nn}^{-1}[\tilde{\chi}_{n_r}]) \\ &\quad + \mathbf{E}_{t_r} \cdot (-\mathcal{T}_{tn} : \mathcal{T}_{nn}^{-1}[\mathbf{E}_{n_r}] + (\mathcal{T}_{tt} - \mathcal{T}_{tn} : \mathcal{T}_{nn}^{-1} : \mathcal{T}_{nt})[\mathbf{E}_{t_r}] + 2\mathcal{T}_{tn} : \mathcal{T}_{nn}^{-1}[\tilde{\chi}_{n_r}] - 2\tilde{\chi}_{t_r}) \\ &\quad - \tilde{\chi}_{n_r} \cdot \mathcal{T}_{nn}^{-1}[\tilde{\chi}_{n_r}] + \tilde{\mathbf{E}}_{t_r}^\alpha \cdot \mathcal{T}_{tt}^\alpha[\tilde{\mathbf{E}}_{t_r}^\alpha]h^\alpha(\boldsymbol{\varphi}) + \tilde{\mathbf{E}}_{t_r}^\beta \cdot \mathcal{T}_{tt}^\beta[\tilde{\mathbf{E}}_{t_r}^\beta]h^\beta(\boldsymbol{\varphi})).\end{aligned}$$

Damit ergibt sich für den zweiten Piola-Kirchhoffschen Spannungstensor im Übergangsbereich

$$\begin{aligned}\mathbf{S} &= \frac{\partial W(\mathbf{E}_{n_r}, \mathbf{E}_{t_r})}{\partial \mathbf{E}_{n_r}} + \frac{\partial W(\mathbf{E}_{n_r}, \mathbf{E}_{t_r})}{\partial \mathbf{E}_{t_r}} \\ &= \mathcal{K}(\boldsymbol{\varphi})[\mathbf{E}] + (\mathcal{T}_{nn}^{-1} + \mathcal{T}_{tn} : \mathcal{T}_{nn}^{-1})[\tilde{\chi}_{n_r}] - \tilde{\chi}_{t_r}.\end{aligned}$$

Mit dem effektiven Steifigkeitstensor $\mathcal{K}(\boldsymbol{\varphi})$ (siehe Gl. (A.7)) und den interpolierten Dehnungsbeiträgen (A.12) und (A.13). Es wird nochmals darauf verwiesen, dass diese Methode zur Berechnung der interpolierten Spannungen im Übergangsbereich nur beschränkt anwendbar ist. Bei der Berechnung wurde die Kontinuität von \mathbf{S}_{n_r} vorausgesetzt, was im Allgemeinen nicht zutrifft.

A.4. Methode der komplexen Spannungsfunktionen

Zur Lösung von ebenen Problemen der linearen Elastizitätstheorie existieren eine Vielzahl verschiedener Methoden und Techniken. Eine sehr bedeutende Methode ist die *Methode der komplexen Spannungsfunktionen*, die von G. W. Kolosov und seinem Schüler Muskhelishvili [118] für infinitesimale Deformation entwickelt wurde. Diese Methode wurde in Abschnitt 7.3.1 verwendet, um die theoretischen Rissspitzenfelder einer Platte mit einer halb elliptischen Kerbe zu berechnen und wird im Folgenden vorgestellt. Es werden infinitesimale Deformationen vorausgesetzt, daher wird auf die Unterscheidung zwischen der Lagrangeschen und Eulerschen Darstellung verzichtet.

Ausgehend von der Impulsbilanz (2.22) folgt für das Gleichgewicht eines Körpers im ESZ

$$\frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial y} = 0, \quad \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial x} = 0.$$

Des Weiteren muss die folgende Kompatibilitätsbedingung für das Dehnungsfeld gelten

$$\frac{\partial^2 \varepsilon_{xx}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \varepsilon_{yy}}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 \varepsilon_{xy}}{\partial x \partial y}. \quad (\text{A.14})$$

Unter der Annahme eines isotropen Körpers folgt aus der Gleichung (A.14)

$$\frac{\partial^2}{\partial y^2}(\sigma_{xx} + \nu \sigma_{yy}) + \frac{\partial^2}{\partial x^2}(\sigma_y + \nu \sigma_{xx}) = 2(1 - \nu) \frac{\partial^2 \sigma_{xy}}{\partial x \partial y}, \quad (\text{A.15})$$

mit ν als Querkontraktion. Die Gleichungen (2.22), (A.15) und zusätzlichen Bedingungen für den Randbereich eines Körpers müssen von den gesuchten Spannungen erfüllt sein. G. B. Airy (1801-1892) führte eine skalare Funktion Φ ein, für die gilt

$$\sigma_{xx} = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2}, \quad \sigma_{yy} = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2}, \quad \sigma_{xy} = -\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x \partial y} \quad (\text{A.16})$$

Damit vereinfacht sich die Bedingung (A.15) zu

$$\frac{\partial^4 \Phi}{\partial y^4} + \frac{\partial^4 \Phi}{\partial x^4} + 2 \frac{\partial^4 \Phi}{\partial x^2 \partial y^2} = \Delta^2 \Phi = 0. \quad (\text{A.17})$$

Sei $z = x + iy = re^{i\theta}$ eine komplexe Zahl ausgedrückt in Abhängigkeit von x und y oder von $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ und $\theta = \arctan(y/x)$. Eine allgemeine komplexe Funktion mit einem Realteil α und einem Imaginärteil β ist gegeben durch

$$f(z) = \alpha(x, y) + i\beta(x, y),$$

wobei α und β Funktionen von x und y sind. $f(z)$ wird als eine holomorphe Funktion angesetzt. Daher gilt die Cauchy-Riemansche Bedingung

$$\frac{\partial \alpha}{\partial x} = \frac{\partial \beta}{\partial y}, \quad \frac{\partial \alpha}{\partial y} = -\frac{\partial \beta}{\partial x}.$$

Wird die linke Gleichung nach x und die rechte Gleichung nach y abgeleitet und werden die beiden Gleichungen anschließend addiert so folgt

$$\frac{\partial^2 \alpha}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \alpha}{\partial y^2} = \Delta \alpha = 0. \quad (\text{A.18})$$

Die gleiche Beziehung gilt auch für β . Jede Funktion, die die Laplace-Gleichung (A.18) erfüllt bezeichnet man als harmonisch. Wenn eine Funktion Φ die Bedingung (A.18) erfüllt, so muss auch eine Funktion $(x^2 + y^2)\Phi = r^2\Phi$ die Bedingung (A.18) und damit auch die Bedingung (A.17) erfüllen. Daher ist der allgemeine Ansatz für die gesuchte Spannungsfunktion

$$\Phi = \operatorname{Re}[(x - iy)\psi(z) + \chi(z)] = \operatorname{Re}[\bar{z}\psi(z) + \chi(z)], \quad (\text{A.19})$$

$\chi(z)$ und $\psi(z)$ sind dabei komplexe Potentialfunktionen und \bar{z} ist die konjugiert komplexe Zahl zu z . Der Zusammenhang zwischen den komplexen Potentialfunktionen $\psi(z)$ und $\chi(z)$ und den kartesischen Komponenten des Spannungstensors ergibt sich durch Ableitung von Φ gemäß Gl. (A.16). Es ergeben sich die *Kolosovschen Gleichungen*

$$\begin{aligned}\sigma_x + \sigma_y &= 2 \left[\psi'(z) + \overline{\psi'(z)} \right] \\ \sigma_y - \sigma_x + 2i\tau_{xy} &= 2 \left[\bar{z}\psi''(z) + \chi'(z) \right]\end{aligned}\tag{A.20}$$

mit $\bar{z} = x - iy$. Und in Polarkoordinaten

$$\begin{aligned}\sigma_r + \sigma_\theta &= 2 \left[\psi'(z) + \overline{\psi'(z)} \right], \\ \sigma_\theta - \sigma_r + 2i\tau_{r\theta} &= 2 \left[z\psi''(z) + \chi'(z) \frac{z}{\bar{z}} \right]\end{aligned}$$

mit $\bar{z} = re^{-i\theta}$.

A.4.1. Abbildungsfunktion

Ein Gebiet S in der z -Ebene des kartesischen Raumes kann durch eine winkeltreue oder konforme Abbildung in die ξ -Ebene transformiert werden. Seien z und ξ zwei komplexe Variablen, dann gilt für die konforme Abbildung

$$z = \omega(\xi).\tag{A.21}$$

Die Gleichung (A.21) weist also jeden Punkt ξ eindeutig einen Punkt z zu. Nach der konformen Transformation kann das Problem in dem vereinfachten Gebiet berechnet und durch anschließende Rücktransformation in den kartesischen Raum rücktransformiert werden.

Bei der Berechnung der Spannungskomponenten müssen die Kolosov-Gleichungen (A.20) modifiziert werden. Die Gleichung (A.19) ändert sich zu

$$\Phi(\omega(\xi)) = \text{Re} \left[\overline{\omega(\xi)}\psi(\omega(\xi)) + \chi(\omega(\xi)) \right].$$

Entsprechend ändern sich auch die Ableitungen nach x und y mit $\xi = x + iy = \rho e^{i\theta}$. Und es ergibt sich für die modifizierten Kolosov-Gleichungen

$$\begin{aligned}\sigma_x(\xi) + \sigma_y(\xi) &= 2 \left[\frac{\psi'(\xi)}{\omega'(\xi)} + \frac{\overline{\psi'(z)}}{\omega'(\xi)} \right], \\ \sigma_y(\xi) - \sigma_x(\xi) + 2i\tau_{xy}(\xi) &= \frac{2}{\omega'(\xi)} \left[\overline{\omega(\xi)} \left(\frac{\psi''(\xi)\omega'(\xi) - \psi'(\xi)\omega''(\xi)}{\omega'(\xi)^2} \right) + \chi'(\xi) \right]\end{aligned}\tag{A.22}$$

und in Polarkoordinaten

$$\begin{aligned}\sigma_r(\xi) + \sigma_\theta(\xi) &= 2 \left[\frac{\psi'(\xi)}{\omega'(\xi)} + \frac{\overline{\psi'(z)}}{\omega'(\xi)} \right], \\ \sigma_\theta(\xi) - \sigma_r(\xi) + 2i\tau_{r\theta}(\xi) &= \frac{2\xi^2}{\rho^2\omega'(\xi)} \left[\overline{\omega(\xi)} \left(\frac{\psi''(\xi)\omega'(\xi) - \psi'(\xi)\omega''(\xi)}{\omega'(\xi)^2} \right) + \chi'(\xi) \right].\end{aligned}$$

Nach der Berechnung der Spannungsfunktionen in der ξ -Ebene müssen die Spannungskomponenten mit $\omega^{-1}(\xi)$ in die z -Ebene transformiert werden.

A.4.2. Das Risspitzenfeld einer Platte mit halbelliptischer Kerbe

Gemäß Muskhelishvili [118] wird die Problemstellung einer unendlich ausgedehnten Platte mit einer halbelliptischen Kerbe mit Polarkoordinaten transformiert. Hierzu wird z auf ξ durch die konforme Abbildung

$$z = \omega(\xi) = R \left(\xi + \frac{m}{\xi} \right) \quad (\text{A.23})$$

abgebildet. Dabei gilt für die Halbachsen der Ellipse

$$a = R(1 + m), \quad b = R(1 - m).$$

Das komplizierte Problem einer Platte mit einem elliptischen Riss, das von Inglis [104] nur durch elliptische Koordinaten bewältigt wurde, wurde durch diese Transformation auf eine Platte mit einem halbrunden Loch reduziert. Die Randbedingung ändert sich wesentlich, da der Rand der Ellipse auf einen Halbkreis mit Radius $\rho = 1$ abgebildet wird. Im Unendlichen ändert sich die Randbedingung nicht, da konfokale Kegelschnitte des elliptischen Raumes im Unendlichen nahezu gleich den Kreisen sind. Mit den vereinfachten Randbedingungen erhielt Muskhelishvili [118] folgende Potentialfunktionen als Ergebnis

$$\psi(\xi) = \frac{\sigma_\infty R}{2} \left(\xi - \frac{m}{\xi} \right), \quad \chi(\xi) = -\sigma_\infty \frac{R(1 + m^2)\xi}{\xi^2 - m}.$$

Nach einer Addition bzw. Subtraktion der beiden Kolosov-Gleichungen (A.22) folgt

$$\begin{aligned} \sigma_y(\xi) + i\tau_{xy}(\xi) &= \frac{\psi'(\xi)}{\omega'(\xi)} + \frac{\overline{\psi'(\xi)}}{\overline{\omega'(\xi)}} + \left[\frac{\overline{\omega(\xi)}}{\omega'(\xi)} \left(\frac{\psi''(\xi)\omega'(\xi) - \psi'(\xi)\omega''(\xi)}{\omega'(\xi)^2} \right) + \frac{\chi'(\xi)}{\omega'(\xi)} \right], \\ \sigma_x(\xi) - i\tau_{xy}(\xi) &= \frac{\psi'(\xi)}{\omega'(\xi)} + \frac{\overline{\psi'(\xi)}}{\overline{\omega'(\xi)}} - \left[\frac{\overline{\omega(\xi)}}{\omega'(\xi)} \left(\frac{\psi''(\xi)\omega'(\xi) - \psi'(\xi)\omega''(\xi)}{\omega'(\xi)^2} \right) + \frac{\chi'(\xi)}{\omega'(\xi)} \right]. \end{aligned}$$

Dies bedeutet, dass man durch eine Aufspaltung der rechten Seite dieser Gleichungen in Real- und Imaginärteil die Spannungskomponenten berechnen kann. Diese Aufspaltung wurde mit *MATHEMATICA* durchgeführt. Mit $\xi = \rho e^{i\theta}$ ergibt sich für die Spannungskomponenten

$$\begin{aligned} \sigma_x(\xi) &= \frac{\sigma_\infty(m^2 - \rho^4)}{(m^2 + \rho^4 - 2m\rho^2 \cos(2\theta))^3} [-m^4 - \rho^4 m(3 + 4m + 3m^2) - \rho^8 + \\ &\quad + \rho^2((m^2(1 + 4m + m^2) + 4m^2\rho^2 + (1 + 4m + m^2)\rho^4) \cos(2\theta)) + \\ &\quad + m(-2m^2 + \rho^2(m - 1)^2 - 2\rho^4) \cos(4\theta)], \quad (\text{A.24}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sigma_y(\xi) &= \frac{\sigma_\infty(m^2 - \rho^4)}{(m^2 + \rho^4 - 2m\rho^2 \cos(2\theta))^3} [m^4 + \rho^4 m(-3 + 4m - 3m^2) + \rho^8 + \\ &\quad + \rho^2((m^2(1 - 4m + m^2) + 4m^2\rho^2 + (1 - 4m + m^2)\rho^4) \cos(2\theta)) + \\ &\quad + m(-2m^2 + \rho^2(m + 1)^2 - 2\rho^4) \cos(4\theta)], \quad (\text{A.25}) \end{aligned}$$

$$\tau_{xy}(\xi) = \frac{\sigma_{\infty} \rho^2 \sin(2\theta)}{(m^2 + \rho^4 - 2m\rho^2 \cos(2\theta))^3} [m^6 + \rho^8 + m^4(1 + 4\rho^2 - 6\rho^4) + m^2 \rho^4(\rho^4 + 4\rho^2 - 6) + 2m(\rho^6 - 2\rho^8 + m^4(\rho^2 - 2) + m^2(\rho^2 + \rho^6)) \cos(2\theta)]. \quad (\text{A.26})$$

Damit sind die Spannungskomponenten im Gebiet $|\xi| > 1$ vollständig beschrieben. Allerdings müssen σ_x , σ_y und τ_{xy} in Abhängigkeit von x und y dargestellt werden. Dazu muss die Umkehrfunktion der Abbildungsvorschrift (A.23) berechnet werden. Spaltet man die Gl. (A.23) nach dem Real- und Imaginärteil auf, ergibt sich

$$\begin{aligned} z = x + iy &= R \left(\rho e^{i\theta} + \frac{m}{\rho e^{i\theta}} \right) \\ &= R \left(\rho (\cos(\theta) + i \sin(\theta)) + \frac{m}{\rho} (\cos(\theta) - i \sin(\theta)) \right) \\ &= R \left(\underbrace{\rho + \frac{m}{\rho}}_{=x} \cos(\theta) + i \underbrace{R \left(\rho - \frac{m}{\rho} \right)}_{=y} \sin(\theta) \right). \end{aligned}$$

Die Umkehrfunktion ist eine Gleichung vierter Ordnung für ρ und eine Gleichung zweiter Ordnung für θ

$$\begin{aligned} \rho^8 R^2 - \rho^6 r^2 + \rho^4 2m(x^2 - y^2 - mR^2) - \rho^2 m^2 r^2 + R^2 m^4 &= 0 \\ \cos(\theta)^4 4R^2 m - \cos(\theta)^2 (r^2 + 4R^2 m) + x^2 &= 0 \end{aligned}$$

mit $r = \sqrt{x^2 + y^2}$. Mit einem geeigneten Verfahren, z. B. dem Newton-Verfahren, können die Nullstellen bestimmt werden. Allerdings ist die Lösung nicht eindeutig, denn es gibt insgesamt 16 nichttriviale Lösungskombinationen.

Eine alternative Vorgehensweise ist die Monte-Carlo-Suchmethode. Für jede Zelle die durch einen x - und y -Wert repräsentiert wird, wird mit der Methode iterativ ein ρ - und θ -Wert bestimmt. Dabei werden folgende Kriterien verwendet

$$\begin{aligned} \rho_{n+1} &= \rho_n^u - N(0, 1)(\rho_n^u - \rho_n^l), \\ \theta_{n+1} &= \theta_n^u - N(0, 1)(\theta_n^u - \theta_n^l) \end{aligned}$$

$N(0, 1)$ ist eine Zufallszahl zwischen 0 und 1, ρ^u die obere und ρ^l die untere Grenze und entsprechend für θ . Nach jedem Iterationsschritt werden die entsprechenden x - und y -Werte berechnet und die Grenzen folgendermaßen definiert

$$\begin{aligned} x_{n+1} < x_n \cap y_{n+1} < y_n &\Rightarrow \rho_{n+1}^l = \rho_{n+1}, \\ x_{n+1} > x_n \cap y_{n+1} > y_n &\Rightarrow \rho_{n+1}^u = \rho_{n+1}, \\ x_{n+1} > x_n \cap y_{n+1} < y_n &\Rightarrow \theta_{n+1}^u = \theta_{n+1}, \\ x_{n+1} < x_n \cap y_{n+1} > y_n &\Rightarrow \theta_{n+1}^l = \theta_{n+1}. \end{aligned}$$

Ist $\|x_{n+1} - x_n\| < 0.01 \cap \|y_{n+1} - y_n\| < 0.01$ hat man die passenden ρ - und θ -Werte für die Zelle gefunden. Die Wahl der Startwerte für ρ^l und ρ^u ist unkritisch. ρ^u kann als der maximal mögliche

und ρ^l als der minimal mögliche Wert gewählt werden. Bei den θ -Startwerten wird in einem Bereich $-\frac{\pi}{4} < \theta < \frac{\pi}{4}$ der passende Wert gesucht. Ist die Suche nicht erfolgreich, so wird der Bereich verkleinert. Bei jeder Iteration wird dabei ρ^l und ρ^u auf den Startwert gesetzt. Auf diese Weise findet man für die rechte Hälfte, $z \geq 0$, des gewählten Gitters die entsprechenden ρ - und θ -Werte. Da bei $z = 0$ für ρ eine Symmetrieebene ist, werden die Werte für die linke Hälfte, $z < 0$, gespiegelt. Bei den entsprechenden θ -Werten gilt bei der Spiegelung $\theta_{z \geq 0} = -\theta_{z < 0}$.

Mit der Kenntnis von ρ und θ für jeden Punkt ist man in der Lage, die Spannungskomponenten, Gl.(A.24), (A.25) und (A.26), abzubilden. Die resultierenden Spannungen des Rissspitzenfeldes sind in Abbildung 7.6 a)-c), g)-i) dargestellt.

Abbildungsverzeichnis

2.1.	Bewegung der materiellen Punkte im euklidischen Raum	5
2.2.	Aufteilung eines Volumens in die Teilvolumina durch eine singuläre Fläche	7
2.3.	Return-Mapping-Algorithmus	25
2.4.	Gebietsparametrisierung mit einem äquidistanten Gitter	26
3.1.	Parametrisierung eines polykristallinen Gefüges mit Ordnungsparametern	31
3.2.	Visualisierung der Verläufe von Interpolationsfunktionen	33
3.3.	Zweidimensionales System mit einem kreisförmigen Einschluss	38
4.1.	Vergleich von Homogenisierungsmethoden der Materialparameter	42
4.2.	Serielle und parallele materielle Kette	44
4.3.	Vergleich der Formänderungsenergiedichten der VT- und RS-Approximation am Beispiel der seriellen materiellen Kette	49
4.4.	Vergleich der Formänderungsenergiedichten der VT- und RS-Approximation am Beispiel der parallelen materiellen Kette	50
4.5.	Vergleich der Spannungs-, Dehnungs- und Formänderungsenergiedichteverläufe für die Gleichgewichtszustände der seriellen und parallelen materiellen Kette	51
4.6.	Resultierende Interfacebreiten und Grenzflächenenergien bei einer Variation von mechanischen treibenden Kräften für die serielle und parallele materielle Kette	52
4.7.	Vergleich der Spannungs-, Dehnungs- und Ordnungsparameterverläufe für die Gleichgewichtszustände der seriellen und parallelen materiellen Kette	63
4.8.	Vergleich der Spannungs- und Dehnungsverläufe einer Platte mit einem runden Einschluss mit theoretischen Vorhersagen (infinitesimale Deformationen)	65
4.9.	Validierung des vorgeschlagenen Modells über den Gibbs-Thomson-Effekt	66
4.10.	Visualisierung der Normalen in einer Tripelpunktregion	68
4.11.	Validierung der Spannung und der Potentiale in einem Quadrupelpunkt	72
4.12.	Validierung der Spannung und der Potentiale in einem Quadrupelpunkt mit unterschiedlichen Materialparametern	73
4.13.	Wachstum von martensitischen Varianten in einem polykristallinen austenitischen Gefüge	77
4.14.	Resultierende Mikrostrukturen bei Variation der Interpolationsschemata	78
5.1.	Vergleich der Ansätze zur Berechnung der plastischen Dehnungen	83
5.2.	Einfluss der Inhomogenitäten auf effektive mechanische Eigenschaften	85
6.1.	Sprung des Deformationsgradienten um einen Tripelpunkt	92
6.2.	Normalenvektor zwischen zwei Phasen in einer Tripelpunktregion	95
6.3.	Spannungs- und Deformationsverläufe für die serielle und parallele materielle Kette (finite Deformationen)	97

6.4.	Validierung der Spannungs- und Dehnungsverläufe einer Platte mit einem runden Einschluss mit theoretischen Vorhersagen (finite Deformationen)	98
6.5.	Validierung der Deformations- und Spannungsberechnung am Quadrupelpunkt .	100
6.6.	Deformation eines Multiphasensystems	102
6.7.	Wachstum von martensitischen Varianten in einer austenitischen Matrix	107
7.1.	Charakterisierung der Rissbereiche und Rissöffnungsarten	111
7.2.	Koordinatensysteme des Rissspitzenfeldes	112
7.3.	Charakterisierung eines Flächenintegrals und eines Konturintegrals	113
7.4.	Vergleich des Zweimuldenpotentials mit dem Einmuldenpotential mithilfe der entsprechenden Gleichgewichtsprofile der Ordnungsparameter	117
7.5.	Einseitige Gleichgewichtsprofile unter Verwendung des Einmulden- und Zweimuldenpotentials	119
7.6.	Validierung des Rissspitzenfeldes	124
7.7.	Spannungen des Rissspitzenfeldes einer Platte mit einer halb elliptischen Kerbe . .	126
7.8.	Profile der Spannung entlang der zentralen Achse des Risses	127
7.9.	Schwellzonen für unterschiedliche Aktivierungsvolumina	128
7.11.	Plastische Zonen um die Rissspitze im Gleichgewichtszustand bei unterschiedlichen Fließgrenzen	130
7.12.	Vergleich zwischen dem Einmulden- und Einzelhindernispotential mit den resultierenden Gleichgewichtsprofilen der Rissphasen	132
7.13.	Validierung des Zweiphasen-Rissmodells über das Griffithsche Kriterium	134
7.14.	Visualisierung der Potentiale für ein Dreiphasensystem	137
7.15.	Einfluss einer horizontalen Barriere auf die Rissausbreitung	139
7.16.	Rissausbreitung in einem polykristallinen Material	140
7.17.	Einfluss einer Grenzfläche auf den effektiven Risswiderstand	142
7.18.	Einfluss einer schiefen Grenzfläche auf den resultierenden Risspfad	143

Symbol- und Abkürzungsverzeichnis

E	Formänderungsenergie	13
G	Energiefreisetzungsrate (engl. energy release rate)	113
H	Verfestigungsparameter	23
H_η	Entropie	11
J	J-integral	114
$M_{\alpha\beta}$	Mobilität der α - β -Grenzfläche	35
P	Spannungsleistung	16
T	Temperatur	11
V	Volumen eines Körpers in der Momentanplatzierung	5
V_r	Volumen eines Körpers in der Anfangsplatzierung	5
W	Formänderungsenergiegedichte	13
\mathcal{C}	Steifigkeitstensor	17
Δ_{mech}	mechanische treibende Kräfte	105
Δ_{se}	treibende Kräfte der Grenzflächenenergie	105
Λ	Lagrangescher Multiplikator	35
\mathcal{N}	Normalprojektor für Tensoren zweiter Stufe	152
\mathcal{P}	Tangentialprojektor für Tensoren zweiter Stufe	152
Ψ	Potential aus kontinuierlichen Variablen	57
\mathcal{S}	Nachgiebigkeitstensor	43
\mathcal{T}	Proportionalitätsmatrix zwischen den kontinuierlichen und diskontinuierlichen Spannungen und Dehnungen	59
$\bar{\epsilon}_{\text{pl}}$	akkumulierte plastische Dehnung	23

\mathcal{F}	freie Energiefunktional	31
η	spezifischen Entropie	11
$\gamma_{\alpha\beta}$	Oberflächenenergie von α - β -Interface	31
κ	zweifache mittlere Krümmung	39
λ	Laméscher Materialparameter	21
\mathcal{E}	Youngscher Modul	21
μ	Laméscher Materialparameter	21
∇_X	Gradient bezüglich der Anfangsplatzierung	6
ν	Querkontraktion	21
∇_x	Gradient bezüglich der Momentanplatzierung	6
ω	Energiepotential	31
φ_α	Ordnungsparameter der Phase α	29
$\mathbf{q}_{\alpha\beta}$	generalisierter α - β -Gradient in der Eulerschen Darstellung	88
ρ	Massendichte in der Momentanplatzierung	8
ρ_0	Massendichte in der Anfangsplatzierung	8
σ_F	Fließspannung	23
σ_{F_0}	anfängliche Fließspannung	23
$\tilde{\Psi}$	Potential zur Berechnung der Spannungen für finite Deformationen	153
$\tilde{\chi}$	gemäß den Sprungbedingungen interpolierte Eigendehnungen	61
$\tilde{\mathbf{F}}$	inelastische Deformationen	91
$\tilde{\mathbf{P}}$	Inverse der inelastischen Deformationen	154
$\tilde{\epsilon}$	inelastischen infinitesimale Dehnungen	59
$\tilde{\sigma}$	Eigenspannungen	61
\tilde{h}^α	Interpolationsfunktion der Phase α für Zweiphasensysteme	32
ϵ	Parameter für die Interfacebreite	31
ϑ	Rauschterm in der Evolutionsgleichung der Ordnungsparameter	75

B	linker Cauchy-Green-Tensor	105
C	rechter Cauchy-Green-Tensor	151
E	Greenscher Verzerrungstensor	16
F	Deformationsgradient	5
H	Verschiebungsgradient	19
I	Einheitstensor	4
J	Determinante des Deformationsgradienten	6
L	Geschwindigkeitsgradient	6
M_ε	Transformationsmatrix für die Dehnung in der Voigtschen Darstellung	53
M_σ	Transformationsmatrix für die Spannung in der Voigtschen Darstellung	53
P	erster Piola-Kirchhoffscher Spannungstensor	9
$Q_{\alpha\beta}$	generalisierte α - β -Gradient in der Lagrangeschen Darstellung	31
R	mittlere Rotation eines Volumenelementes	6
S	zweiter Piola-Kirchhoffscher Spannungstensor	9
U	rechter Strecktensor	6
V	linker Strecktensor	6
X	Ortsvektor in der Anfangsplatzierung	4
Σ	Eshelbys Energie-Impuls-Tensor der Elastostatik	15
χ	Bewegungsfunktion von der Anfangsplatzierung zur Momentanplatzierung	4
ε	infinitesimaler Verzerrungstensor	20
\mathcal{K}	gemäß den Sprungbedingungen interpolierter Steifigkeitstensor	61
ω	infinitesimaler Rotationstensor	20
φ	N -Tupel von Ordnungsparametern	29
σ	Cauchysche Spannung	8
ξ	Bewegungsfunktion von der Momentanplatzierung zur Anfangsplatzierung	4
ζ	Variable aus kontinuierlichen Spannungen und Dehnungen	58

Symbol- und Abkürzungsverzeichnis

a	Beschleunigung eines materiellen Punktes	5
b	Volumenkraft pro Masseneinheit	8
f	Flächenkraft	8
f_{Σ}	generalisierte Kraft auf Inhomogenitäten	19
q	Wärmestrom	11
t	Spannungsvektor	8
u	Verschiebung eines materiellen Punktes aus der Anfangsplatzierung	5
v	Geschwindigkeit eines materiellen Punktes	5
x	Ortsvektor in der Momentanplatzierung	4
a	Gradientenenergiedichte	31
a_E	Gradientenenergiedichte in der Eulerschen Darstellung	88
e	innere Energiedichte	11
f	freie Helmholtzsche Energie	12
f_F	Fließbedingung	23
h^{α}	Interpolationsfunktion der Phase α	32
l	Breite des Übergangsbereiches	29
w	massenspezifische Wärmequellichte	11
ESZ	ebener Spannungszustand (engl. <i>plain stress</i>)	22
EVZ	ebener Verzerrungszustand (engl. <i>plain strain</i>)	22
LROP	Locally Reduced Order Parameter	76
RS	Reuss / Sachs-Homogenisierungsschema	43
VT	Voigt / Taylor-Homogenisierungsschema	42

Literatur

- [1] L. Q. Chen. *Phase-field models for microstructure evolution*. Annual Review of Materials Research 32 (1) (2002), 113 (siehe S. 1, 29, 41, 79, 109).
- [2] N. Moelans, B. Blanpain und P. Wollants. *An introduction to phase-field modeling of microstructure evolution*. Calphad 32 (2) (2008), 268 (siehe S. 1, 29).
- [3] A. A. Griffith. *The Phenomena of Rupture and Flow in Solids*. Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences 221 (582-593) (1921), 163 (siehe S. 1, 109 ff., 113).
- [4] M. Ambati, T. Gerasimov und L. De Lorenzis. *Phase-field modeling of ductile fracture*. Computational Mechanics 55 (5) (2015), 1017 (siehe S. 1, 29, 109, 114, 118 f., 138).
- [5] B. Nestler und A. Choudhury. *Phase-field modeling of multi-component systems*. Current Opinion in Solid State and Materials Science 15 (3) (2011), 93 (siehe S. 1, 29, 41, 79).
- [6] J. D. Eshelby. *The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems*. Proceedings of the Royal Society 241 (1226) (1957), 376 (siehe S. 1, 41).
- [7] A. Johnson. *Generalization of the gibbs-thomson*. Surface Science 3 (1965), 429 (siehe S. 1 f.).
- [8] M. E. Gurtin. *The nature of configurational forces*. Archive for Rational Mechanics and Analysis 131 (1) (1995), 67 (siehe S. 1 f., 19).
- [9] A. Choudhury und B. Nestler. *Grand-potential formulation for multicomponent phase transformations combined with thin-interface asymptotics of the double-obstacle potential*. Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics 85 (2) (2012), 1 (siehe S. 1, 38 f., 64, 75, 146).
- [10] A. Durga, P. Wollants und N. Moelans. *Evaluation of interfacial excess contributions in different phase-field models for elastically inhomogeneous systems*. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering 21 (5) (2013), 055018 (siehe S. 1, 41, 43, 46 f., 51 f., 64 f.).
- [11] D. Schneider, O. Tschukin, A. Choudhury, M. Selzer, T. Böhlke und B. Nestler. *Phase-field elasticity model based on mechanical jump conditions*. Computational Mechanics 55 (5) (2015), 887 (siehe S. 1, 39, 41 f., 46, 51 f., 145).
- [12] J. D. Eshelby. *The elastic energy-momentum tensor*. Journal of Elasticity 5 (3-4) (1975), 321 (siehe S. 2 f., 15).
- [13] B. Nestler, H. Garcke und B. Stinner. *Multicomponent alloy solidification: Phase-field modeling and simulations*. Physical Review E 71 (4) (2005), 041609 (siehe S. 2, 29–32, 35, 87, 122 f., 125, 130, 136, 146).
- [14] C. Truesdell und W. Noll. *The non-linear field theories of mechanics*. Springer-Verlag, 1965 (siehe S. 3).

- [15] M. Silhavy. *The Mechanics and Thermodynamics of Continuous Media*. Springer Verlag, 1997 (siehe S. 6 f., 13, 15, 89).
- [16] A. Bertram. *Elasticity and Plasticity of Large Deformations*. Springer-Verlag, 2005 (siehe S. 6 f., 16 f., 20, 91).
- [17] I. Müller. *Thermodynamik, Grundlagen der Materialtheorie*. Bertelsmann Universitätsverlag Düsseldorf, 1973, 273 (siehe S. 11).
- [18] I. Müller. *Thermodynamics*. Pitman, 1985, 521 (siehe S. 11).
- [19] I. N. Bronstein, K. A. Semendjajew, G. Musiol und H. Mühlig. *Taschenbuch der Mathematik*. Bd. 23. Harri Deutsch, 2008 (siehe S. 12, 20, 37, 39, 91, 94, 133).
- [20] I. Liu. *Continuum Mechanics*. Springer, 2002 (siehe S. 13, 20).
- [21] H. Parisch. *Festkörper-Kontinuumsmechanik*. Wiesbaden: Vieweg+Teubner Verlag, 2003 (siehe S. 13, 16).
- [22] T. Fließbach. *Mechanik: Lehrbuch zur Theoretischen Physik I (German Edition)*. Spektrum Akademischer Verlag, 2006 (siehe S. 14 f.).
- [23] A. Bertram, T. Böhlke und M. Šilhavý. *On the Rank 1 Convexity of Stored Energy Functions of Physically Linear Stress-Strain Relations*. *Journal of Elasticity* 86 (3) (2006), 235 (siehe S. 17).
- [24] M. E. Gurtin. *Two-phase deformations of elastic solids*. *Archive for Rational Mechanics and Analysis* 84 (1) (1983), 1 (siehe S. 18 f.).
- [25] M. E. Gurtin. *Configurational forces as basic concepts of continuum physics*. Springer Berlin Heidelberg, 2000 (siehe S. 18, 22).
- [26] R. D. James. *Finite deformation by mechanical twinning*. *Archive for Rational Mechanics and Analysis* 77 (2) (1981) (siehe S. 19).
- [27] W. C. Johnson. *Precipitate shape evolution under applied stress thermodynamics and kinetics*. *Metallurgical Transactions A* 18A (1987), 233 (siehe S. 19, 66, 110).
- [28] W. C. Johnson und J. I. D. Alexander. *Interfacial conditions for thermomechanical equilibrium in two-phase crystals*. *Journal of Applied Physics* 59 (8) (1986), 2735 (siehe S. 19, 66, 110).
- [29] J. D. Eshelby. *The force on an elastic singularity*. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 244 (877) (1951), 87 (siehe S. 19, 74).
- [30] H. A. Mang und G. Hofstetter. *Festigkeitslehre*. Springer, 2008 (siehe S. 21).
- [31] P. W. Voorhees und W. C. Johnson. *Interfacial equilibrium during a first-order phase transformation in solids*. *The Journal of Chemical Physics* 84 (9) (1986), 5108 (siehe S. 22, 66, 110).
- [32] G. Gottstein. *Materialwissenschaft und Werkstofftechnik : Physikalische Grundlagen*. Springer Verlag, 2014 (siehe S. 22).
- [33] J. C. Simo und T. J. R. Hughes. *Computational inelasticity*. Springer, 1998 (siehe S. 23 f., 81 f., 122).
- [34] G. Gladwell. *Nonlinear Solid Mechanics*. Springer Netherlands, 2009 (siehe S. 24).
- [35] M. Griebel, T. Dornseifer und T. Neunhoffer. *Numerische Simulation in der Strömungsmechanik: eine praxisorientierte Einführung*. Vieweg Verlag, 1995 (siehe S. 25, 27).

- [36] M. Selzer. *Mechanische und Strömungsmechanische Topologieoptimierung mit der Phasenfeldmethode*. Diss. 2014 (siehe S. 26).
- [37] S. Patankar. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. New York, 1980 (siehe S. 26).
- [38] J. D. van der Waals. *Thermodynamische Theorie der Kapillarität unter Voraussetzung stetiger Dichteänderung*. Z. Phys. Chem. Leipzig 13 (1894), 657 (siehe S. 29).
- [39] V. L. Ginzburg und L. D. Landau. *On the Theory of superconductivity*. Zh.Eksp.Teor.Fiz. 20 (1950), 1064 (siehe S. 29 f., 34).
- [40] J. W. Cahn und J. E. Hilliard. *Free Energy of a Nonuniform System. I. Interfacial Free Energy*. The Journal of Chemical Physics 28 (2) (1958), 258 (siehe S. 29, 47).
- [41] B. Halperin, P. Hohenberg und S. Ma. *Renormalization-group methods for critical dynamics: I. Recursion relations and effects of energy conservation*. Physical Review B 10 (1) (1974), 139 (siehe S. 29).
- [42] N. Provatas und K. Elder. *Phase-field methods in materials science and engineering*. Weinheim, Germany: Wiley-VCH Verlag, 2010 (siehe S. 30).
- [43] J. A. Dantzig und M. Rappaz. *Solidification*. EPFL Press, 2009 (siehe S. 30).
- [44] B. Nestler. *Phasenfeldmodellierung mehrphasiger Erstarrung*. Diss. 2000 (siehe S. 30).
- [45] H. Garcke, B. Nestler und B. Stoth. *A MultiPhase Field Concept: Numerical Simulations of Moving Phase Boundaries and Multiple Junctions*. SIAM Journal on Applied Mathematics 60 (1) (1999), 295 (siehe S. 32).
- [46] J. Hötzer, O. Tschukin, M. Ben Said, M. Berghoff, M. Jainta, G. Barthelemy, N. Smorchkov, D. Schneider, M. Selzer und B. Nestler. *Calibration of a multi-phase field model with quantitative angle measurement*. Journal of Materials Science 51 (4) (2016), 1788 (siehe S. 32, 76, 136).
- [47] N. Moelans. *A quantitative and thermodynamically consistent phase-field interpolation function for multi-phase systems*. Acta Materialia 59 (3) (2011), 1077 (siehe S. 32).
- [48] J. W. Cahn und S. M. Allen. *A Microscopic Theory for Domain Wall Motion and its experimental Verification in Fe-Al Alloy Domain Growth Kinetics*. Le Journal de Physique Colloques 38 (C7) (1977), 51 (siehe S. 34).
- [49] I. Steinbach und F. Pezzolla. *A generalized field method for multiphase transformations using interface fields*. Physica D: Nonlinear Phenomena 134 (4) (1999), 385 (siehe S. 35).
- [50] A. N. Choudhury. *Quantitative phase-field model for phase transformations in multi-component alloys*. Diss. 2013, 296 (siehe S. 37).
- [51] K. Ammar, B. Appolaire, G. Cailletaud und S. Forest. *Combining phase field approach and homogenization methods for modelling phase transformation in elastoplastic media*. Revue européenne de mécanique numérique 18 (5-6) (2009), 485 (siehe S. 41 ff.).
- [52] A. G. Khachaturyan. *Theory of structural transformation in solids*. John Wiley & Sons Inc, 1983 (siehe S. 42).
- [53] W. Voigt. *Über die Beziehung zwischen den beiden Elastizitätskonstanten isotroper Körper*. Annalen der Physik 274 (12) (1889), 573 (siehe S. 42 f.).
- [54] R. Spatschek, C. Müller-Gugenberger, E. Brener und B. Nestler. *Phase field modeling of fracture and stress-induced phase transitions*. Physical Review E 75 (6) (2007), 066111 (siehe S. 42, 48, 109, 122).

- [55] C. Mennerich, F. Wendler, M. Jainta und B. Nestler. *A phase-field model for the magnetic shape memory effect*. Arch. Mech. 63 (2011), 549 (siehe S. 42, 48).
- [56] D. Schneider, S. Schmid, M. Selzer, T. Böhlke und B. Nestler. *Small strain elasto-plastic multiphase-field model*. Computational Mechanics 55 (1) (2015), 27 (siehe S. 42, 48, 82, 109 f., 122, 141, 146 f.).
- [57] D. Schneider, M. Selzer, J. Bette, I. Rementeria, A. Vondrous, M. J. Hoffmann und B. Nestler. *Phase-field modeling of diffusion coupled crack propagation processes*. Advanced Engineering Materials 16 (2) (2014), 142 (siehe S. 42, 48, 109 f., 122, 126, 147).
- [58] A. Reuss. *Berechnung der Fließgrenze von Mischkristallen auf Grund der Plastizitätsbedingung für Einkristalle*. Z. Angew. Math. Mech. 9 (1929), 49 (siehe S. 43).
- [59] I. Steinbach und M. Apel. *Multi phase field model for solid state transformation with elastic strain*. Physica D 217 (2006), 153 (siehe S. 43).
- [60] M. Apel, S. Benke und I. Steinbach. *Virtual dilatometer curves and effective Young's modulus of a 3D multiphase structure calculated by the phase-field method*. Computational Materials Science 45 (3) (2009), 589 (siehe S. 43).
- [61] W. Voigt. *Lehrbuch der Kristallphysik: mit Ausschluß d. Kristalloptik*. Teubner, 1910, 964 (siehe S. 53).
- [62] M. A. Slawinski. *Waves and Rays in Elastic Continua Second edition*. World Scientific Pub Co, 2010 (siehe S. 54, 81).
- [63] S. G. Kim, W. T. Kim und T. Suzuki. *Phase-field model for binary alloys*. Physical review. E 60 (1999), 7186 (siehe S. 64).
- [64] M. Plapp. *Unified derivation of phase-field models for alloy solidification from a grand-potential functional*. Physical Review E 84 (3) (2011), 031601 (siehe S. 64).
- [65] A. K. Mai und S. J. Singh. *Deformation of elastic solids*. Prentice-Hall, 1991 (siehe S. 64 f., 67, 96 ff.).
- [66] Z. Nishiyama. *Martensitic Transformation (materials Science And Technology)*. Academic Press Inc., 1978 (siehe S. 74).
- [67] Y. Wang und A. G. Khachaturyan. *Multi-scale phase field approach to martensitic transformations*. Materials Science and Engineering: A 438-440 (2006), 55 (siehe S. 74, 146).
- [68] M. Mamivand, M. A. Zaeem und H. El Kadiri. *A review on phase field modeling of martensitic phase transformation*. Computational Materials Science 77 (2013), 304 (siehe S. 74, 87, 146).
- [69] M. Ueda, H. Y. Yasuda und Y. Umakoshi. *Controlling factor for nucleation of martensite at grain boundary in Fe-Ni bicrystals*. Acta Materialia 51 (4) (2003), 1007 (siehe S. 74).
- [70] A. Artemev, Y. Jin und A. G. Khachaturyan. *Three-dimensional phase field model of proper martensitic transformation*. Acta Materialia 49 (7) (2001), 1165 (siehe S. 74, 79, 87, 108).
- [71] P. R. Rios und J. R. C. Guimarães. *Microstructural path analysis of martensite burst*. Materials Research 13 (1) (2010), 119 (siehe S. 75).
- [72] H. K. D. H. Bhadeshia. *Bainite in steels*. IOM Communications, 2001 (siehe S. 75).
- [73] W. Krauss, S. K. Pabi und H. Gleiter. *On the mechanism of martensite nucleation*. Acta Metallurgica 37 (1) (1989), 25 (siehe S. 75).

- [74] I. Schmidt und D. Gross. *The equilibrium shape of an elastically inhomogeneous inclusion*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids 45 (9) (1997), 1521 (siehe S. 76).
- [75] S. G. Kim, D. I. Kim, W. T. Kim und Y. B. Park. *Computer simulations of two-dimensional and three-dimensional ideal grain growth*. Physical Review E 74 (2006), 061605 (siehe S. 76, 93).
- [76] B. Nestler, M. Reichert und M. Selzer. *Massive multi-phase-field simulations: methods to compute large grain system*. Proceedings of the 11th International Conference on Aluminium Alloys (2008), 1251 (siehe S. 76, 93).
- [77] T. W. Heo und L. Q. Chen. *Phase-field modeling of displacive phase transformations in elastically anisotropic and inhomogeneous polycrystals*. Acta Materialia 76 (2014), 68 (siehe S. 78).
- [78] D. Gross und T. Seelig. *Bruchmechanik: Mit einer Einführung in die Mikromechanik*. Springer Verlag, 2011 (siehe S. 79, 85, 110, 112 ff., 127).
- [79] F. Roters, P. Eisenlohr, L. Hantcherli, D. D. D. Tjahjanto, T. R. R. Bieler und D. Raabe. *Overview of constitutive laws, kinematics, homogenization and multiscale methods in crystal plasticity finite-element modeling: Theory, experiments, applications*. Acta Materialia 58 (4) (2010), 1152 (siehe S. 79).
- [80] S. Schmauder. *DFG Forschungsbericht: Mikromechanisches Verständnis des Verformungsverhaltens von ferritischen Gusseisen mit unterschiedlicher Graphitmorphologie*. Techn. Ber. 2003. Universität Stuttgart, 2003 (siehe S. 84).
- [81] V. I. Levitas. *Phase-field theory for martensitic phase transformations at large strains*. International Journal of Plasticity 49 (2013), 85 (siehe S. 87).
- [82] V. I. Levitas. *Phase field approach to martensitic phase transformations with large strains and interface stresses*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids 70 (2014), 154 (siehe S. 87, 146).
- [83] J. Mosler, O. Shchyglo und H. Montazer Hojjat. *A novel homogenization method for phase field approaches based on partial rank-one relaxation*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids 68 (2014), 251 (siehe S. 87).
- [84] E. H. Lee. *Elastic-Plastic Deformation at Finite Strains*. Journal of Applied Mechanics 36 (1) (1969), 1 (siehe S. 91).
- [85] M. Kabel, T. Böhlke und M. Schneider. *Efficient fixed point and Newton-Krylov solvers for FFT-based homogenization of elasticity at large deformations*. Computational Mechanics 54 (6) (2014), 1497 (siehe S. 92).
- [86] J. Lambert Diani und D. M. Parks. *Problem of an inclusion in an infinite body, approach in large deformation*. Mechanics of Materials 32 (1) (2000), 43 (siehe S. 106).
- [87] M. Marder und J. Fineberg. *How Things Break*. Physics Today 49 (9) (1996), 24 (siehe S. 109).
- [88] B. Lawn. *Fracture of brittle solids*. New York: Cambridge University Press, 1993, 378 (siehe S. 109).
- [89] L. B. Freund. *Dynamic fracture mechanics*. New York: Cambridge University Press, 1998, 563 (siehe S. 109).

- [90] A. Karma, D. A. Kessler und H. Levine. *Phase-Field Model of Mode III Dynamic Fracture*. Physical Review Letters 87 (4) (2001), 045501 (siehe S. 109, 115, 122).
- [91] B. Bourdin, G. A. Francfort und J. Marigo. *The Variational Approach to Fracture*. Springer Netherlands, 2008, 1 (siehe S. 109, 132, 135).
- [92] C. Kuhn und R. Müller. *A continuum phase field model for fracture*. Engineering Fracture Mechanics 77 (18) (2010), 3625 (siehe S. 109, 116, 120 f.).
- [93] C. Miehe, F. Welschinger und M. Hofacker. *Thermodynamically consistent phase-field models of fracture: Variational principles and multi-field FE implementations*. International Journal for Numerical Methods in Engineering 83 (10) (2010), 1273 (siehe S. 109, 117–121, 131, 138).
- [94] M. Hofacker und C. Miehe. *A Phase Field Model for Ductile to Brittle Failure Mode Transition*. PAMM 12 (1) (2012), 173 (siehe S. 109).
- [95] F. P. Duda, A. Ciarbonetti, P. J. Sánchez und A. E. Huespe. *A phase-field/gradient damage model for brittle fracture in elastic–plastic solids*. International Journal of Plasticity 65 (2015), 269 (siehe S. 109).
- [96] M. Ambati und L. De Lorenzis. *Phase-field modeling of brittle and ductile fracture in shells with isogeometric NURBS-based solid-shell elements*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering (2016) (siehe S. 109).
- [97] C. Miehe, L. Schänzel und H. Ulmer. *Phase field modeling of fracture in multi-physics problems. Part I. Balance of crack surface and failure criteria for brittle crack propagation in thermo-elastic solids*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 294 (2015), 449 (siehe S. 109).
- [98] C. Miehe, M. Hofacker, L.-M. Schänzel und F. Aldakheel. *Phase field modeling of fracture in multi-physics problems. Part II. Coupled brittle-to-ductile failure criteria and crack propagation in thermo-elastic–plastic solids*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 294 (2015), 486 (siehe S. 109).
- [99] M. Z. Hossain, C. J. Hsueh, B. Bourdin und K. Bhattacharya. *Effective toughness of heterogeneous media*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids 71 (2014), 15 (siehe S. 109, 130 ff., 135).
- [100] A. Abdollahi und I. Arias. *Numerical simulation of intergranular and transgranular crack propagation in ferroelectric polycrystals*. International Journal of Fracture 174 (1) (2012), 3 (siehe S. 110).
- [101] K. Oshima, T. Takaki und M. Muramatsu. *Development of multi-phase-field crack model for crack propagation in polycrystal*. International Journal of Computational Materials Science and Engineering 03 (02) (2014), 1450009 (siehe S. 110).
- [102] D. Schneider, E. Schoof, Y. Huang, M. Selzer und B. Nestler. *Phase-field modeling of crack propagation in multiphase systems*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering (2016) (siehe S. 110, 136, 147).
- [103] B. Nestler, D. Schneider, E. Schoof, Y. Huang und M. Selzer. *Modeling of crack propagation on a mesoscopic length scale*. GAMM-Mitteilungen 39 (1) (2016), 78 (siehe S. 110, 147).
- [104] C. E. Inglis. *Stresses in a plate due to the presence of cracks and sharp corners*. Trans. I.N.A. XLIV (1913), 15 (siehe S. 111, 159).

- [105] G. R. Irwin. *Analysis of Stresses and Strains Near the End of a Crack Traversing a Plate*. Journal of Applied Mechanics 137 (1957), 167 (siehe S. 111 f.).
- [106] I. N. Sneddon. *The Distribution of Stress in the Neighbourhood of a Crack in an Elastic Solid*. Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences 187 (1009) (1946), 229 (siehe S. 111).
- [107] J. R. Rice. *A Path Independent Integral and the Approximate Analysis of Strain Concentration by Notches and Cracks*. Journal of Applied Mechanics 35 (2) (1968), 379 (siehe S. 113).
- [108] W. C. Carpenter, D. T. Read und R. H. Dodds. *Comparison of several path independent integrals including plasticity effects*. International Journal of Fracture 31 (4) (1986), 303 (siehe S. 114).
- [109] I. Aranson, V. Kalatsky und V. Vinokur. *Continuum field description of crack propagation*. Physical review letters 85 (1) (2000), 118 (siehe S. 114 f., 122).
- [110] R. Spatschek, E. Brener und A. Karma. *Phase field modeling of crack propagation*. Philosophical Magazine 91 (1) (2011), 75 (siehe S. 115).
- [111] H. Henry und H. Levine. *Dynamic Instabilities of Fracture under Biaxial Strain Using a Phase Field Model*. Physical Review Letters 93 (10) (2004), 3 (siehe S. 115, 117, 119 f., 122).
- [112] H. Henry. *Study of the branching instability using a phase field model of inplane crack propagation*. EPL (Europhysics Letters) 83 (1) (2008), 16004 (siehe S. 116, 120, 122).
- [113] G. A. Francfort und J. J. Marigo. *Revisiting brittle fracture as an energy minimization problem*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids 46 (8) (1998), 1319 (siehe S. 116).
- [114] B. Bourdin, G. A. Francfort und J. J. Marigo. *Numerical experiments in revisited brittle fracture*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids 48 (4) (2000), 797 (siehe S. 116, 118 f., 121).
- [115] C. Kuhn und R. Müller. *A phase field model for fracture*. PAMM 8 (1) (2008), 10223 (siehe S. 116).
- [116] H. Amor, J. J. Marigo und C. Maurini. *Regularized formulation of the variational brittle fracture with unilateral contact: Numerical experiments*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids 57 (8) (2009), 1209 (siehe S. 117).
- [117] M. J. Borden, T. J. R. Hughes, C. M. Landis und C. V. Verhoosel. *A higher-order phase-field model for brittle fracture: Formulation and analysis within the isogeometric analysis framework*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 273 (2014), 100 (siehe S. 117 ff., 132).
- [118] N. I. Muskhelishvili. *Some Basic Problems of the Mathematical Theory of Elasticity*. Springer, 1977, 768 (siehe S. 123 f., 156, 159).
- [119] C. R. Kurkjian, P. K. Gupta, R. K. Brow und N. Lower. *The intrinsic strength and fatigue of oxide glasses*. Journal of Non-Crystalline Solids 316 (1) (2003), 114 (siehe S. 125).
- [120] S. M. Wiederhorn, T. Fett, G. Rizzi, S. Fünfschilling, M. J. Hoffmann und J. P. Guin. *Effect of Water Penetration on the Strength and Toughness of Silica Glass*. Journal of the American Ceramic Society 94 (2011), s196 (siehe S. 125).
- [121] M. Muraoka und H. Abe. *Subcritical Crack Growth in Silica Optical Fibers in Wide Range of Crack Velocities*. Journal of the American Ceramic Society 79 (1) (1996), 51 (siehe S. 125, 127).

- [122] T. I. Suratwala und R. A. Steele. *Anomalous temperature dependence of sub-critical crack growth in silica glass*. Journal of Non-Crystalline Solids 316 (1) (2003), 174 (siehe S. 125, 127).
- [123] K. Han, M. Ciccotti und S. Roux. *Measuring nanoscale stress intensity factors with an atomic force microscope*. EPL (Europhysics Letters) 89 (6) (2010), 66003 (siehe S. 125, 127).
- [124] M. Nogami und M. Tomozawa. *Effect of Stress on Water Diffusion in Silica Glass*. Journal of American Ceramic Society 67 (1983), 151 (siehe S. 125).
- [125] H. Ulmer, M. Hofacker und C. Miehe. *Phase Field Modeling of Brittle and Ductile Fracture*. PAMM 13 (1) (2013), 533 (siehe S. 129).
- [126] B. Bourdin, J. J. Marigo, C. Maurini und P. Sicsic. *Morphogenesis and Propagation of Complex Cracks Induced by Thermal Shocks*. Physical Review Letters 112 (1) (2014), 014301 (siehe S. 130).
- [127] R. Folch, J. Casademunt, A. Hernández-Machado und L. Ramírez-Piscina. *Phase-field model for Hele-Shaw flows with arbitrary viscosity contrast. I. Theoretical approach*. Physical review. E, Statistical physics, plasmas, fluids, and related interdisciplinary topics 60 (2 Pt B) (1999), 1724 (siehe S. 133).
- [128] W. J. Boettinger, J. A. Warren, C. Beckermann und A. Karma. *Phase-Field Simulation of Solidification I*. Annual Review of Materials Research 32 (1) (2002), 163 (siehe S. 133).
- [129] Y. Sun und C. Beckermann. *Sharp interface tracking using the phase-field equation*. Journal of Computational Physics 220 (2) (2007), 626 (siehe S. 133).
- [130] E. Borukhovich, P. S. Engels, T. Böhlke, O. Shchyglo und I. Steinbach. *Large strain elasto-plasticity for diffuse interface models*. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering 22 (3) (2014), 034008 (siehe S. 146).
- [131] M. Plapp. *Remarks on some open problems in phase-field modelling of solidification*. Philosophical Magazine (2010), 22 (siehe S. 146).
- [132] E. C. Bain. *The Alloying Elements in Steel*. ASM International, 1939 (siehe S. 146).
- [133] L. C. D. Fielding. *The Bainite Controversy*. Materials Science and Technology 29 (4) (2013), 383 (siehe S. 146).
- [134] A. Vondrous, P. Bienger, S. Schreijäg, M. Selzer, D. Schneider, B. Nestler, D. Helm und R. Mönig. *Combined crystal plasticity and phase-field method for recrystallization in a process chain of sheet metal production*. Computational Mechanics 55 (2) (2015), 439 (siehe S. 146 f.).
- [135] K. Ankit, R. Mukherjee, T. Mittnacht und B. Nestler. *Deviations from cooperative growth mode during eutectoid transformation: Insights from a phase-field approach*. Acta Materialia 81 (2014), 204 (siehe S. 147).
- [136] A. G. Evans, M. Y. He und J. W. Hutchinson. *Interface Debonding and Fiber Cracking in Brittle Matrix Composites*. Journal of the American Ceramic Society 72 (12) (1989), 2300 (siehe S. 147).
- [137] J. Hötzer, M. Jainta, P. Steinmetz, B. Nestler, A. Dennstedt, A. Genau, M. Bauer, H. Köstler und U. Råde. *Large scale phase-field simulations of directional ternary eutectic solidification*. Acta Materialia 93 (2015), 194 (siehe S. 147).
- [138] J. Hötzer, P. Steinmetz, M. Jainta, S. Schulz, M. Kellner, B. Nestler, A. Genau, A. Dennstedt, M. Bauer, H. Köstler und U. Råde. *Phase-field simulations of spiral growth during directional ternary eutectic solidification*. Acta Materialia 106 (2016), 249 (siehe S. 147).

- [139] P. Steinmetz, Y. C. Yabansu, J. Hötzer, M. Jainta, B. Nestler und S. R. Kalidindi. *Analytics for microstructure datasets produced by phase-field simulations*. Acta Materialia 103 (2016), 192 (siehe S. 147).
- [140] P. Steinmetz, J. Hötzer, M. Kellner, A. Dennstedt und B. Nestler. *Large-scale phase-field simulations of ternary eutectic microstructure evolution*. Computational Materials Science 117 (2016), 205 (siehe S. 147).
- [141] M. Bauer, U. Råde, J. Hötzer, M. Jainta, P. Steinmetz, M. Berghoff, F. Schornbaum, C. Godenschwager, H. Köstler und B. Nestler. *Massively parallel phase-field simulations for ternary eutectic directional solidification*. Proceedings of the International Conference for High Performance Computing (2015), 1 (siehe S. 147).
- [142] T. Böhlke. *Skript zur Vorlesung Plastizitätstheorie*. Karlsruhe Institute of Technology (2014), 134 (siehe S. 155).