Technische Universität Chemnitz
Sonderforschungsbereich 393
Numerische Simulation auf massiv parallelen Rechnern

Detlef Michael

Kontinuumstheoretische Grundlagen und algorithmische Behandlung von ausgewählten Problemen der assoziierten Fließtheorie

Preprint SFB393/01-06

Ausgehend von ersten Prinzipien wird eine assoziierte Fließtheorie defektbehafteter Kontinua entwickelt und ein Vorschlag zur algorithmischen Behandlung derartiger Fragestellungen angegeben.

Preprint-Reihe des Chemnitzer SFB 393

SFB393/01-06 **März 2001**

Inhaltsverzeichnis

Author's addresses:

Detlef Michael
TU Bergakademie Freiberg
Institut für Mechanik und Maschinenelemente
D-09596 Freiberg

`http://www.tu-chemnitz.de/sfb393/`

1 Motivation

Eine allgemeine Theorie der Elasto–Plastizität bei Annahme großer Deformationen ist derzeit noch Gegenstand einer breiten kontroversen Diskussion. Neben Modellen, die auf phänomenologischen *ad hoc* Annahmen basieren[1] , finden auch Formulierungen die durch ein gut verstandenes mikromechanisches Bild der Einkristallplastizität motiviert sind und auf einem *multiplikativen Split* des *Deformationsgradienten* basieren [19] breite Anwendung.
Andererseits ist ein plastischer Deformationsprozeß auf submikroskopischem Niveau durch das Verhaltens von Fremdatomen [2], Versetzungen [7, 8, 2]und Disklinationen [3] charakterisiert. Im weiteren soll der Versuch unternommen werden, zu skizzieren, in welchem Sinne sich die Kontinuumstheorie der Gitterdefekte in einer moderne Plastizitätstheorie niederschlägt.

2 Einige Bemerkungen zur kontinuumstheoretischen Behandlung elastisch–plastischer Deformationsvorgänge

Mechanik ist zuerst einmal Geometrie

Die Festkörpermechanik befaßt sich bekanntlicherweise mit Deformationsvorgängen in Festkörpern. Deformationen sind trivialerweise gleichzusetzen mit der Änderung der Gestalt d.h. der Geometrie des Körpers. Jeder Experimentator kann letztlich nur Längen und Winkel vermessen. Mechanik ist also zuerst einmal Geometrie. Dem Rechnung tragend sollte auch der geometrische Hintergrund des Phänomens der plastischen Deformation erhellt werden.
Bei den weiteren Betrachtungen werden *kontravariante* Größen durch den Zusatz $^\sharp$ und *kovariante* Größen durch den Zusatz $^\flat$ gekennzeichnet. Vektoren sind prinzipiell *kontravariant*, eine detaillierte Darstellung der verwendeten Konventionen findet sich in [15].

Feldtheoretische Behandlung von Gitterdefekten

Es mag auf den ersten Blick als etwas überraschend erscheinen, daß ein Kristall $\boldsymbol{\mathcal{S}}_t$ eine innere *nichteuklidische Struktur* besitzen kann, obgleich er sich im *euklidischen Raum* $\boldsymbol{R}^3$ (mit der Metrik $\boldsymbol{g}^\flat$) befindet. Um sich dies zu veranschaulichen, ist es hilfreich sich auf den Standpunkt eines „*inneren Beobachters*“ zu stellen. Dieser „*innere Beobachter*“ ist ausschließlich in der Lage die Anzahl der Gitterebenen in den einzelnen kristallographischen Richtungen zu zählen, er sieht $\boldsymbol{\mathcal{S}}_t$ als $\boldsymbol{\mathcal{I}}_t$. Ein Gitterdefekt wirkt sich für ihn so aus, daß an Atomen[2] in unmittelbarer Nähe des Defektes nicht alle kristallographischen Richtungen

[1]Dieser Zugang findet in vielen kommerziell verfügbaren Finite Element Programmen ausschließlich Anwendung.
[2]Wir beschränken unsere Betrachtungen auf Bravais Gitter

existieren. Die Änderung des Abstandes zweier Gitterpunkte auf Grund äußerer Belastungen bleibt für ihn dagegen unsichtbar, da er wie gesagt als Meßmöglichkeit nur die Anzahl der Gitterebenen hat. Über diese Informationen verfügt nur ein „*äußerer Beobachter*“, der vom *euklidischen* $\boldsymbol{R}^3$ aus, in dem der Körper $\boldsymbol{\mathcal{S}}_t$ eingebettet ist ($\boldsymbol{\mathcal{S}}_t \subset \boldsymbol{R}^3$), die Abstände der Gitterpunkte in den verschiedenen Konfigurationen $\overset{\mathrm{e}}{\boldsymbol{\Phi}}_t(\boldsymbol{\mathcal{S}}_t) \subset \boldsymbol{R}^3$ zu den Zeitpunkten t miteinander vergleichen kann.
Da ein Kristall eine diskrete Anordnung von Gitterpunkten ist, ist eine diskrete Geometrie erforderlich, um die geometrischen Verhältnisse, die die beiden „*Beobachter*“ vorfinden, exakt beschreiben zu können. Die Beschreibung eines Festkörpers macht letztlich nur vom Stand eines „*äußeren Beobachters*“ Sinn, der allerdings nur verschwommene Informationen über die Defektstruktur besitzt, und für den die Abstände der Gitterpunkte klein gegen die Abmessungen des Festkörpers sind. Das adäquate Modell ist folglich ein Kontinuum, das „folkloristisch“ ausgedrückt aus dem diskreten Modell durch einen Grenzübergang der Gitterkonstante ; 0 unter Beibehalt der kristallographischen Richtungen an den Gitterpunkten und der Dichte ρ entsteht.
Der „*innere Beobachter*“ sieht jetzt eine *affine Riemann'sche Mannigfaltigkeit* $\{\tilde{\boldsymbol{\mathcal{G}}}, \boldsymbol{\nabla}, \boldsymbol{\mathcal{I}}_t\}$ [16] deren geometrischen Eigenschaften durch die *Riemann'sche Metrik* $\tilde{\boldsymbol{\mathcal{G}}}$ und die *affine Konnexion* $\boldsymbol{\nabla}$ beschrieben werden. Der Einfluß topologischer Defekte geht dann über $\boldsymbol{\nabla}$ ein. Eine derartige Interpretation wurde erstmals von *Kondo* [6] und *Bilby, Bullough, Smith* [1] angegeben. Von den genannten Autoren konnte gezeigt werden, daß die *Cartan'sche Torsion* $\boldsymbol{\mathcal{T}}$ (der antisymmetrische Anteil von $\boldsymbol{\nabla}$) geometrisch die Dichte der Versetzungen im Kristall beschreibt. Nach *Kröner* [9] führt das Vorhandensein von Punkdefekten (Fremdatome, Leerstellen) und nach *de Wit* [3] auch von Disklinationen zu einem Nichtverschwinden der *Riemann'schen Krümmung* $\boldsymbol{\mathcal{R}}$ von $\boldsymbol{\nabla}$. In [10] wird $\boldsymbol{\nabla}$ in diesem Fall als „nicht metrisch“ (sprich nicht verträglich mit der Metrik $\tilde{\boldsymbol{\mathcal{G}}}$ auf $\{\tilde{\boldsymbol{\mathcal{G}}}, \boldsymbol{\nabla}, \boldsymbol{\mathcal{I}}_t\}$) bezeichnet, und in [11] wird gezeigt, daß es gleich bedeutend ist, eine Verteilung von Punktdefekten durch eine „innere Metrik“ $\boldsymbol{\mathcal{G}}^\flat \neq \tilde{\boldsymbol{\mathcal{G}}}$ zu charakterisieren.
Vom Standpunkt des „*äußeren Beobachters*“ steht zur Beschreibung der *Zwischenkonfiguration* $\boldsymbol{\mathcal{I}}_t$[3] letzlich nur die Metrik $\overset{\mathrm{e}}{\boldsymbol{\Phi}}{}^{*}\boldsymbol{g}^\flat$ zur Verfügung. Es erscheint als naheliegend diese Metrik mit $\tilde{\boldsymbol{\mathcal{G}}}$ zu identifizieren. Folglich kann eine defektbehaftete *lokale Zwischenkonfiguration* geometrisch als *affine Riemann'sche Mannigfaltigkeit* $\{\overset{\mathrm{e}}{\boldsymbol{\Phi}}{}^{*}\boldsymbol{g}^\flat, \boldsymbol{\mathcal{G}}^\flat, \boldsymbol{\mathcal{T}}, \boldsymbol{\mathcal{I}}_t\}$ charakterisiert werden. Interessanterweise führen die bisherigen mikromechanischen Betrachtungen zu den gleichen Ergebnissen wie eine geometrische Analyse des Begriffes der *Inkompatibilität* [16].

Geometrische Analyse des Kontinuumsbegriffs

Es dürfte unbestritten sein, daß ein Festkörper $\boldsymbol{\mathcal{B}}$ als eine Punktmenge $\boldsymbol{\mathcal{B}} \subset \boldsymbol{R}^3$ eingebettet in den *euklidischen Raum* $\boldsymbol{R}^3$ betrachtet werden kann. Um $\boldsymbol{\mathcal{B}}$ als Kontinuum betrachten zu können, muß zu jedem Punkt $\boldsymbol{X} \in \boldsymbol{\mathcal{B}}$ eine Umgebung $\boldsymbol{\mathcal{U}}(\boldsymbol{X})$ mit $\boldsymbol{X} \in \boldsymbol{\mathcal{U}}(\boldsymbol{X})$ und $\boldsymbol{\mathcal{U}}(\boldsymbol{X}) \subset \boldsymbol{\mathcal{B}}$ existieren. Um zwei Punkte $\boldsymbol{X} \in \boldsymbol{\mathcal{B}}, \boldsymbol{Y} \in \boldsymbol{\mathcal{B}}$ in diesem Kontinuum unterscheiden

[3]Letztlich ist der Begriff *Zwischenkonfiguration* nur ein anderer Ausdruck für das Bild, das der „*innere Beobachters*“ vom Festkörper gewinnen kann.

zu können, müssen Umgebungen $\boldsymbol{\mathcal{U}}(\boldsymbol{X}), \boldsymbol{\mathcal{U}}(\boldsymbol{Y})$ existieren mit $\boldsymbol{\mathcal{U}}(\boldsymbol{X}) \bigcap \boldsymbol{\mathcal{U}}(\boldsymbol{Y}) = \emptyset$. Diese für ein Kontinuum wünschenswerten Eigenschaften machen $\boldsymbol{\mathcal{B}}$ zu einem *Hausdorff Raum* [15]. Wenn für jeden Punkt $\boldsymbol{X} \in \boldsymbol{\mathcal{B}}$ eine Umgebung $\boldsymbol{\mathcal{U}}(\boldsymbol{X})$ existiert, die bijektiv auf eine offene Teilmenge des $\boldsymbol{R}^3$ abgebildet werden kann, so sagt man, $\boldsymbol{\mathcal{B}}$ besitzt die Dimension 3. Derartige Abbildungen bilden dann ein lokales Koordinatensystem[4]. Die Menge der zulässigen Koordinatensysteme (oder *Karten*) werden auch als *Atlas* bezeichnet.
Wenn in jedem Punkt zwischen den *Karten* des zugehörigen *Atlanten* k–fach stetig differenzierbare Koordinatentransformationen (genauer C^k–Diffeomorphismen) existieren, die orientierungserhaltend (Jacobi–Determinate > 0) sind, so heißt $\boldsymbol{\mathcal{B}}$ eine 3–*dimensionale* C^k*–Mannigfaltigkeit* [13][15]. Eine 3–*dimensionale* C^∞*–Mannigfaltigkeit* sieht folglich lokal wie der $\boldsymbol{R}^3$ aus.
Dieser geometrisch motivierte Kontinuumsbegriff beinhaltet letztlich alle Voraussetzungen um den oben formulierten Übergang vom Kristallgitter zum Kontinuum vollziehen zu können. Der eher klassische Zugang von *Scherzer* [17]:
„*Es sei die Konfiguration eines dreidimensionalen kontinuierlichen Mediums (Festkörper* $\boldsymbol{\mathcal{K}}$*) dadurch gegeben, daß jedem Teilchen die drei Zahlen* X^1, X^2, X^3 *zugeordnet werden.* $X^1{+}dX^1, X^2{+}dX^2, X^3{+}dX^3$ *charakterisiert ein dem Teilchen* X^1, X^2, X^3 *unendlich nahes Teilchen. Der Ort der Teilchen dieser Konfiguration, die wir als Referenz– oder Ausgangskonfiguration* $\boldsymbol{\mathcal{B}}$ *bezeichnen wollen, sei anhand des Radiusvektors* $\boldsymbol{X} \in \boldsymbol{R}^3$ *(dreidimensionaler euklidischer Vektorraum) in der Form*

$$\boldsymbol{X} := \boldsymbol{X}(X^1, X^2, X^3)$$

gegeben. Freilich setzen wir die Stetigkeit und Differenzierbarkeit (im notwendigen Umfang) von $\boldsymbol{X}(X^1, X^2, X^3)$ *voraus. Die Zahlen* X^1, X^2 *und* X^3 *bezeichnet man als die materiellen Koordinaten eines Teilchens in* $\boldsymbol{\mathcal{B}}$*. …*“ ist nur dann richtig, wenn $\boldsymbol{\mathcal{B}}$ eine 3–*dimensionale* C^k*–Mannigfaltigkeit* ist. So beinhalten beide Zugänge also das gleiche Kontinuumsmodell. Der geometrische Zugang hat allerdings den Vorteil, daß es sofort offensichtlich ist, daß $\boldsymbol{\mathcal{B}}$ zumindest lokal die geometrischen Eigenschaften[5] des $\boldsymbol{R}^3$ besitzt, d.h. eine 3–*dimensionale* C^∞*–Mannigfaltigkeit* $\boldsymbol{\mathcal{B}}$ ist zugleich eine 3–*dimensionale affine Riemann'sche Mannigfaltigkeit* $\{\boldsymbol{G}^\flat, \boldsymbol{\nabla}, \boldsymbol{\mathcal{B}}\}$.
Die *affine Konnexion* $\boldsymbol{\nabla}$ des $\boldsymbol{R}^3$ ist bekanntlicherweise *torsionsfrei* ($\boldsymbol{\mathcal{T}} = \boldsymbol{0}$) und *flach* ($\boldsymbol{\mathcal{R}} = \boldsymbol{0}$)[6], d.h. eindeutig bestimmt durch die *Riemann'sche Metrik* $\boldsymbol{G}^\flat$, so daß es naheliegend ist einen physikalischen Körper als *Riemann'sche Mannigfaltigkeit* $\{\boldsymbol{G}^\flat, \boldsymbol{\mathcal{B}}\}$ zu charakterisieren. In diesem Fall gehört auch ein (beliebiges) raumfesten Koordinatensy-

[4] Das heißt letztlich nichts anderes, als daß der Punkt $\boldsymbol{X} \in \boldsymbol{\mathcal{B}}$ mit seinen Koordinaten $\{X^1, X^2, X^3\} \in \boldsymbol{R}^3$ identfiziert werden kann.

[5] Der $\boldsymbol{R}^3$ besitzt eine *Riemann'sche Metrik* $\boldsymbol{G}^\flat$ und eine *affine Konnexion* $\boldsymbol{\nabla}$.

[6] D.h. die mit $\boldsymbol{\nabla}$ verbundenen *Christoffel Symbole* Γ^A_{BC} genügen der Beziehung

$$2G_{AB}\Gamma^A_{DC} = \frac{\partial G_{CB}}{\partial X^D} + \frac{\partial G_{DB}}{\partial X^C} - \frac{\partial G_{DC}}{\partial X^B},$$

womit wir wieder in der klassischen Differentialgeometrie angekommen wären.

stem zu den zulässigen Koordinatensystemen, und es ist möglich die Bewegung[7] $\boldsymbol{\Phi}_t(\boldsymbol{\mathcal{B}})$ in selbigen zu beschreiben.
An dieser Stelle mag sich mancher fragen, ob es denn wirklich erforderlich ist, den Begriff einer *affinen Riemann'schen Mannigfaltigkeit* einzuführen, wenn letztlich ein *physikalischer Körper* doch auch nur in klassischer Weise [17] beschrieben werden soll. Das Problem liegt in der Defektstruktur des betrachteten Festkörpers begründet. Wie auf Seite 1 skizziert wurde, sieht der „*innere Beobachter*“ eine *affinen Riemann'schen Mannigfaltigkeit* $\{\overset{e}{\boldsymbol{\Phi}}{}^{*}\boldsymbol{g}^\flat, \boldsymbol{\mathcal{G}}^\flat, \boldsymbol{\mathcal{T}}, \boldsymbol{\mathcal{I}_t}\}$, während wir nur einen gewöhnlichen *physikalischen Körper* $\{\boldsymbol{G}^\flat, \boldsymbol{\mathcal{B}}\}$ wahrnehmen können. Beiden *Konfigurationen* ist jedoch gemeinsam, daß es sich bei ihnen um 3–*dimensionale* C^k–*Mannigfaltigkeiten* handelt und folglich die Beziehungen der analytischen Geometrie [13] für beide gültig sind.

Geometrische Grundlagen der Kinematik

Die grundlegenden kinematische Größen Geschwindigkeit $\boldsymbol{V}^\sharp$ und Beschleunigung $\boldsymbol{A}^\sharp$ sind bekanntlich vektorielle Größen. Ein Körper stellt dagegen eine Punktmenge $\boldsymbol{\mathcal{B}} \subset \boldsymbol{R}^3$ mit speziellen, eingangs diskutierten Eigenschaften dar. Die Bewegung von $\boldsymbol{\mathcal{B}}$ im $\boldsymbol{R}^3$ ist trivialerweise eine einparametrige Familie (Parameter t) von eineindeutigen glatten $(C^l, l \geq 2$ bezüglich $t)$ Abbildungen

$$\boldsymbol{\Phi}_t(\boldsymbol{\mathcal{B}}) : \boldsymbol{\mathcal{B}} \mapsto \boldsymbol{\mathcal{S}}_t \subset \boldsymbol{R}^3.$$

$\boldsymbol{\mathcal{S}}_t$ wird auch als *Momentankonfiguration* bezeichnet. Stellt man sich auf den Standpunkt, daß der Körper zum Zeitpunkt $t = 0$ undeformiert (und in seiner Ausgangslage befindlich) sei, so kann man $\boldsymbol{\mathcal{B}}$ mit $\boldsymbol{\mathcal{S}}_0$ identifizieren und spricht hier von der *Ausgangskonfiguration*. Betrachten wir einen Punkt $\boldsymbol{X} \in \boldsymbol{\mathcal{B}}$, so beschreibt er folglich eine Bahnkurve $\boldsymbol{x}(t) := \boldsymbol{\Phi}_{\boldsymbol{X}}(t) \in \boldsymbol{\mathcal{S}}_t$ im $\boldsymbol{R}^3$. Die Geschwindigkeit diese Bewegung ergibt sich zu

$$\boldsymbol{V}^\sharp := \frac{d\boldsymbol{x}(t)}{dt} = \frac{d}{dt}\boldsymbol{\Phi}_{\boldsymbol{X}}(t),$$

$\boldsymbol{V}^\sharp$ ist der Tangentialvektor an die Raumkurve $\boldsymbol{x}(t)$. Die Tangentialvektoren an alle durch $\boldsymbol{X}$ hindurchgehenden und in einer Umgebung von $\boldsymbol{X}$ vollständig in $\boldsymbol{\mathcal{B}}$ gelegenen Kurven, spannen dann den Vektorraum (*Tangentialraum*) $T_{\boldsymbol{X}}\boldsymbol{\mathcal{B}}$ auf, mit

$$\boldsymbol{V}^\sharp \in T_{\boldsymbol{X}}\boldsymbol{\mathcal{B}}.$$

Beschreibt man die Bewegung im $T_{\boldsymbol{X}}\boldsymbol{\mathcal{B}}$, so spricht man auch vom *Lagrange'schen Zugang*. Analog existiert auch der *Tangentialraum* $T_{\boldsymbol{x}}\boldsymbol{\mathcal{S}}_t$ in dem der Geschwindigkeitsvektor

$$\boldsymbol{v}^\sharp := \boldsymbol{V}_t^\sharp\left(\boldsymbol{\Phi}_t^{-1}(\boldsymbol{x})\right)$$

(*Euler'scher Zugang*) enthalten ist. Zwischen den Vektoren (und natürlich letztlich auch den Tensoren, vgl. [13][15]) aus $T_{\boldsymbol{X}}\boldsymbol{\mathcal{B}}$ und $T_{\boldsymbol{x}}\boldsymbol{\mathcal{S}}$ bestehen, induziert durch der Bewegung

[7] Der hier verwendete Bewegungsbegriff beinhaltet translatorische, rotatorische und deformatorische Anteile.

$\boldsymbol{\Phi}_t$ die Abbildungsvorschrften

$\boldsymbol{\Phi}^* : T_{\boldsymbol{x}}\boldsymbol{\mathcal{S}}_t \mapsto T_{\boldsymbol{X}}\boldsymbol{\mathcal{B}}$ (*pull back*) und $\boldsymbol{\Phi}_* : T_{\boldsymbol{X}}\boldsymbol{\mathcal{B}} \mapsto T_{\boldsymbol{x}}\boldsymbol{\mathcal{S}}_t$ (*push forward*),

in denen der *Deformationsgradient*

$$\boldsymbol{F} := \frac{\partial \boldsymbol{\Phi}_t}{\partial \boldsymbol{X}}$$

die zentrale Rolle spielt. Eine detailierte Darstellung ist z.B. in [13][15][4] zu finden, so daß wir uns hier auf diese eher einleitenden Bemerkungen beschränken können.
Schon aus diesen wenigen Bemerkungen ergeben sich zwei für die Beschreibung einen physikalischen Körpers sehr interessante Aspekte.

1. Ist die *Momentankonfiguration* $\boldsymbol{\mathcal{S}}_t$ mit der *Riemann'schen Metrik* $\boldsymbol{g}^\flat$ ($\boldsymbol{g}^\flat$ sei die Metrik des physikalischen Raumes) ausgestattet, d.h. existiert für jeden Punkt $\boldsymbol{x} \in \boldsymbol{\mathcal{S}}_t$ ein symmetrischer kovarianter Tensor 2. Stufe $\boldsymbol{g}^\flat$ mit den Eigenschaften
$$\begin{array}{ll} \boldsymbol{g}^\flat(\boldsymbol{u}^\sharp, \boldsymbol{v}^\sharp) = \boldsymbol{g}^\flat(\boldsymbol{v}^\sharp, \boldsymbol{u}^\sharp); & \boldsymbol{u}^\sharp, \boldsymbol{v}^\sharp \in T_{\boldsymbol{x}}\boldsymbol{\mathcal{S}}_t \\ \boldsymbol{g}^\flat(\boldsymbol{u}^\sharp, \boldsymbol{u}^\sharp) > 0; & \boldsymbol{0} \neq \boldsymbol{u}^\sharp \in T_{\boldsymbol{x}}\boldsymbol{\mathcal{S}}_t, \end{array}$$
so ist die Metrik der *Ausgangskonfiguration* $\boldsymbol{\mathcal{B}}$ die *Riemann'schen Metrik* $\boldsymbol{C}^\flat := \boldsymbol{\Phi}^*\boldsymbol{g}^\flat$ (*rechter Cauchy–Green Tensor*). Gleichzeitig ist auf diese Weise ein Skalarprodukt $\langle \boldsymbol{u}^\sharp, \boldsymbol{v}^\sharp \rangle := \boldsymbol{g}^\flat(\boldsymbol{u}^\sharp, \boldsymbol{v}^\sharp)$ auf $T_{\boldsymbol{x}}\boldsymbol{\mathcal{S}}_t$ definiert.

2. Die Bewegung $\boldsymbol{\Phi}_t$ kann ohne weiters in Teilbewegungen $\overset{\mathrm{p}}{\boldsymbol{\Phi}}_t, \overset{\mathrm{e}}{\boldsymbol{\Phi}}_t$ unter Einführung einer *Zwischenkonfiguration* $\boldsymbol{\mathcal{I}}_t$ aufgespalten werden $\boldsymbol{\Phi}_t = \overset{\mathrm{e}}{\boldsymbol{\Phi}}_t \circ \overset{\mathrm{p}}{\boldsymbol{\Phi}}_t$ mit $\overset{\mathrm{p}}{\boldsymbol{\Phi}}_t : \boldsymbol{\mathcal{B}} \mapsto \boldsymbol{\mathcal{I}}_t$ und $\overset{\mathrm{e}}{\boldsymbol{\Phi}}_t : \boldsymbol{\mathcal{I}}_t \mapsto \boldsymbol{\mathcal{S}}_t$. Wenn man den *Tangentialraum* $T_{\boldsymbol{\xi}}\boldsymbol{\mathcal{I}}_t$ definiert als $T_{\boldsymbol{\xi}}\boldsymbol{\mathcal{I}}_t := \overset{\mathrm{p}}{\boldsymbol{\Phi}}_{*t} T_{\boldsymbol{X}}\boldsymbol{\mathcal{B}}$ oder gleichbedeutend $T_{\boldsymbol{\xi}}\boldsymbol{\mathcal{I}}_t := \overset{\mathrm{e}}{\boldsymbol{\Phi}}{}^*{}_t T_{\boldsymbol{x}}\boldsymbol{\mathcal{S}}_t$ mit $\boldsymbol{\Phi}_{*t} = \overset{\mathrm{e}}{\boldsymbol{\Phi}}_{*t} \circ \overset{\mathrm{p}}{\boldsymbol{\Phi}}_{*t}$ und $\boldsymbol{\Phi}^*{}_t = \overset{\mathrm{p}}{\boldsymbol{\Phi}}{}^*{}_t \circ \overset{\mathrm{e}}{\boldsymbol{\Phi}}{}^*{}_t$ so hat man den *multiplikativen Split* [19] realisiert, ohne „plastische" oder „elastische" *Deformationsgradienten* einführen zu müssen

Die Geometrie defektbehafteter Kontinua

Identifiziert man die *Zwischenkonfiguration* mit dem Bild das der „*innere Beobachter*" von Seite 1 sich von dem Festkörper macht, so sieht man, daß die geometrischen Eigenschaften der *Ausgangskonfiguration* durch

$$\boldsymbol{C}^\flat, \qquad \overset{\mathrm{p}}{\boldsymbol{C}}{}^\flat := \overset{\mathrm{p}}{\boldsymbol{\Phi}}{}^* \boldsymbol{\mathcal{G}}^\flat, \qquad \overset{\mathrm{p}}{\boldsymbol{\Phi}}{}^* \boldsymbol{\mathcal{T}}$$

und der *Momentankonfiguration* durch

$$\boldsymbol{g}^\flat, \qquad \overset{-e}{\boldsymbol{b}}{}^\flat := \overset{\mathrm{e}}{\boldsymbol{\Phi}}_* \boldsymbol{\mathcal{G}}^\flat, \qquad \overset{\mathrm{e}}{\boldsymbol{\Phi}}_* \boldsymbol{\mathcal{T}}$$

beschrieben werden. Hierbei enthalten $\overset{\mathrm{p}}{\boldsymbol{C}}{}^\flat, \overset{\mathrm{p}}{\boldsymbol{\Phi}}{}^*\boldsymbol{\mathcal{T}}$ bzw. $\overset{-e}{\boldsymbol{b}}{}^\flat, \overset{\mathrm{e}}{\boldsymbol{\Phi}}_*\boldsymbol{\mathcal{T}}$ die über die innere Defektstruktur verfügbaren Informationen, es erscheint deshalb auch sinnvoll, sie als *interne*

Variablen im Sinne der *rationalen Thermodynamik* zu betrachten. Im Gegensatz zu $\overset{\mathrm{p}}{\boldsymbol{C}}{}^{\flat}, \overset{-e}{\boldsymbol{b}}{}^{\flat}$ haben $\overset{\mathrm{p}}{\boldsymbol{\Phi}}{}^{*}\boldsymbol{\mathcal{T}}, \overset{\mathrm{e}}{\boldsymbol{\Phi}}{}_{*}\boldsymbol{\mathcal{T}}$ keine Entsprechung in der klassischen Plastizitätstheorie [14], so daß diese Terme bei den weiteren Betrachtungen außer Acht gelassen werden sollen.

Der hier verwendete geometrische Zugang führt zu der, bei oberflächlicher Betrachtungsweise vielleicht etwas verwirrenden Aussage, daß im Verlauf der betrachteten Bewegung, die *Metrik* $\boldsymbol{C}^{\flat}$ der *Ausgangskonfiguration* $\boldsymbol{\mathcal{B}}$ einer Veränderung unterliegt, wogegen die *Metrik* $\boldsymbol{g}^{\flat}$ der *Momentankonfiguration* $\boldsymbol{\mathcal{S}}_t$ unbeeinflußt bleibt. Wie bereits auf Seite 4 bemerkt, wird üblicherweise die *Ausgangskonfiguration* mit der *Momentankonfiguration* zu Beginn des betrachteten Prozesses ($t = 0$) identifiziert $\boldsymbol{\mathcal{B}} \equiv \boldsymbol{\mathcal{S}}_0$, $\boldsymbol{\mathcal{B}}$ besitzt dort die *Metrik* $\boldsymbol{G}^{\flat} := \boldsymbol{\Phi}^{*}|_{t=0}\boldsymbol{g}^{\flat}$. Folglich kann z.B. die Änderung der *Metrik* von $\boldsymbol{\mathcal{B}}$, $\boldsymbol{E}^{\flat} := \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{C}^{\flat} - \boldsymbol{G}^{\flat}\right)$ (*Green'scher Verzerrungstensor*) als Deformationsmaß herangezogen werden. Geht man nun von der *Lagrange'schen* Betrachtungsweise zur *Euler'schen* über, ergibt sich der *Almansi'sche Verzerrungstensor* $\boldsymbol{e}^{\flat} := \boldsymbol{\Phi}_{*}\boldsymbol{E}^{\flat} = \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{g}^{\flat} - \overset{-1}{\boldsymbol{b}}{}^{\flat}\right)$ ($\boldsymbol{b}^{\sharp} := \boldsymbol{\Phi}_{*}\boldsymbol{G}^{\sharp}$ *linker Cauchy–Green Tensor*) als Deformationsmaß auf der *Momentankonfiguration*. Diese Deformationsmaße finden jedoch keinen Eingang in die weiteren Betrachtungen, da eine Formulierung in diesen Größen äquivalent zur originären Formulierung in den geometrischen Größen ist.

Rationale Thermodynamik

Das grundlegende Postulat der *rationalen Thermodynamik* ist die Annahme, daß das konstitutive Verhalten eines Körpers dergestalt ist, daß keine Prozesse in selbigen ablaufen können die im Widerspruch zum 1. Hauptsatz[8]

$$\frac{d}{dt}\int_{\mathcal{S}_t}\rho\left[e + \frac{1}{2}\langle\boldsymbol{v}^{\sharp}, \boldsymbol{v}^{\sharp}\rangle\right]\,dv = \int_{\mathcal{S}_t}\rho\left[\langle\boldsymbol{l}^{\sharp}, \boldsymbol{v}^{\sharp}\rangle + s\right]\,dv + \int_{\partial\mathcal{S}_t}\left[\langle\boldsymbol{r}^{\sharp}, \boldsymbol{v}^{\sharp}\rangle + h\right]\,da \tag{2.1}$$

(ρ– Dichte; e– *spezifische innere Energie*; $\boldsymbol{v}^{\sharp}$– Geschwindigkeit; $\boldsymbol{r}^{\sharp}$– Oberflächenlasten; $\boldsymbol{l}^{\sharp}$– Volumenlasten; s– spezifische Wärmeproduktion; h– Wärmestrom senkrecht zu $\partial\mathcal{S}_t$) und 2. Hauptsatz

$$\frac{d}{dt}\int_{\mathcal{S}_t}\rho\eta\,dv \geq \int_{\mathcal{S}_t}\frac{\rho s}{\vartheta}\,dv + \int_{\partial\mathcal{S}_t}\frac{h}{\vartheta}\,da \tag{2.2}$$

(ϑ– absolute Temperatur; η– *spezifische Entropie*) der Thermodynamik stehen [20]. Mit Einführung der *spezifischen freien Energie* ψ

$$\psi := e - \vartheta\eta$$

gehen (2.1,2.2) bei $\vartheta = const.$ über in die *Clausius–Duhem Ungleichung* für isotherme Prozesse

$$\frac{d}{dt}\int_{\mathcal{S}_t}\rho\left[\psi + \frac{1}{2}\langle\boldsymbol{v}^{\sharp}, \boldsymbol{v}^{\sharp}\rangle\right]\,dv - \int_{\mathcal{S}_t}\rho\langle\boldsymbol{l}^{\sharp}, \boldsymbol{v}^{\sharp}\rangle\,dv - \int_{\partial\mathcal{S}_t}\langle\boldsymbol{r}^{\sharp}, \boldsymbol{v}^{\sharp}\rangle\,da \leq 0. \tag{2.3}$$

[8]Hier formuliert für thermomechanische Prozesse

Wendet man nun (2.3) auf einen Körper an, wie er auf Seite 5 beschrieben wurde, so ist klar, daß die *spezifische freie Energie* ψ von der *Metrik* $\boldsymbol{g}^\flat$ und *internen Variablen* $\boldsymbol{\kappa}$ ($\boldsymbol{\kappa}$ steht für $\overset{e}{\boldsymbol{b}}{}^{-1^\flat}$ und andere, bisher nicht näher spezifizierte interne Variable) abhängig ist

$$\psi := \psi(\boldsymbol{g}^\flat, \boldsymbol{\kappa}). \tag{2.4}$$

An dieser Stelle sei darauf verwiesen, daß *interne Variable* keine unabhängigen thermodynamischen Zustandsgrößen sind, sie selbst hängen von den thermodynamischen Zustandsgrößen über noch näher zu spezifizierende konstitutive Beziehungen ab.
Da die skalare Beziehung (2.3) universelle Gültigkeit haben soll, muß sie insbesondere auch invariant gegen beliebige Wechsel des Bezugssystems sein. Nach einigen Umformungen, wie sie z.B. in [13][15] zu finden sind, kann man nun zeigen, daß diese Invarianzeigenschaften dann und nur dann vorliegen, wenn folgende Beziehung $\forall\boldsymbol{\xi}$[9] erfüllt ist

$$\int_{\mathcal{S}_t}\left[\left(\frac{d}{dt}\rho+\rho\, div\boldsymbol{v}^\sharp\right)\langle\frac{1}{2}\boldsymbol{\xi}+\boldsymbol{v}^\sharp,\boldsymbol{\xi}\rangle+\left(\rho\,\frac{\partial\psi}{\partial\mathbf{g}^\flat}-\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}^\sharp\right):\mathcal{L}_\xi\boldsymbol{g}^\flat-\boldsymbol{\sigma}^\sharp:\boldsymbol{\omega}_\xi^\flat+\langle\rho(\boldsymbol{a}^\sharp-\boldsymbol{l}^\sharp)-div\boldsymbol{\sigma}^\sharp,\boldsymbol{\xi}\,\rangle\right]dv\leq\mathcal{D}_\xi$$

$$\mathcal{D}_\xi := -\int_{\mathcal{S}_t}\left[\rho\,\frac{\partial\psi}{\partial\boldsymbol{\kappa}}\mathcal{L}_\xi\boldsymbol{\kappa}\right]dv.$$

($\boldsymbol{\sigma}^\sharp$– *Cauchy'scher Spannungstensor*; $\boldsymbol{a}^\sharp$– Beschleunigung, $\mathcal{L}_\xi\boldsymbol{g}^\flat, \mathcal{L}_\xi\boldsymbol{\kappa}$– *Lie–Ableitung* von $\boldsymbol{g}^\flat$ bzw. $\boldsymbol{\kappa}$; $\boldsymbol{\omega}_\xi^\flat$– Spin) $\mathcal{D}_\xi$ wird auch als *Dissipation* bezeichnet, darunter wird die durch die Änderung der *inneren Variablen* dissipierte *frei Energie* verstanden. Folgt man nun der Standardargumentation, daß für *reversible Prozesse* ($\mathcal{D}_\xi = 0$) in (2.3) das Gleichheitszeichen gelten soll, kann man obige Gleichungen auch als

$$\begin{gathered}\int_{\mathcal{S}_t}\left[\left(\frac{d}{dt}\rho+\rho\, div\boldsymbol{v}^\sharp\right)\langle\frac{1}{2}\boldsymbol{\xi}+\boldsymbol{v}^\sharp,\boldsymbol{\xi}\rangle+\left(\rho\,\frac{\partial\psi}{\partial\mathbf{g}^\flat}-\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}^\sharp\right):\mathcal{L}_\xi\boldsymbol{g}^\flat-\boldsymbol{\sigma}^\sharp:\boldsymbol{\omega}_\xi^\flat+\langle\rho(\boldsymbol{a}^\sharp-\boldsymbol{l}^\sharp)-div\boldsymbol{\sigma}^\sharp,\boldsymbol{\xi}\,\rangle\right]dv=0\\ \mathcal{D}_\xi := -\int_{\mathcal{S}_t}\left[\rho\,\frac{\partial\psi}{\partial\boldsymbol{\kappa}}\mathcal{L}_\xi\boldsymbol{\kappa}\right]dv \geq 0\end{gathered} \tag{2.5}$$

formulieren. Geht man nun davon aus, daß diese Überlegungen nicht nur $\forall\boldsymbol{\xi}$ sondern auch für alle Teilgebiete $\boldsymbol{\mathcal{A}}$ von $\boldsymbol{\mathcal{S}}_t$ ($\boldsymbol{\mathcal{A}} \subset \mathcal{S}_t$) gelten sollen, so ist obige Forderung identisch mit

$$\begin{array}{lll} \frac{d}{dt}\rho+\rho\, div\boldsymbol{v}^\sharp = 0 & & \text{Massenbilanz}\\ \boldsymbol{\sigma}^\sharp = 2\rho\,\frac{\partial\psi}{\partial\mathbf{g}^\flat} & & \text{Doyle–Ericksen Formel}\\ \boldsymbol{\sigma}^\sharp & \text{symmetrisch} & \text{Drehimpulsbilanz}\\ \rho(\boldsymbol{a}^\sharp-\boldsymbol{l}^\sharp)-div\boldsymbol{\sigma}^\sharp = \mathbf{0} & & \text{Impulsbilanz}\\ \mathcal{D} := -\rho\,\frac{\partial\psi}{\partial\boldsymbol{\kappa}}\mathcal{L}_v\boldsymbol{\kappa} \geq 0 & & \text{Dissipationsungleichung} \end{array} \tag{2.6}$$

[9] $\boldsymbol{\xi}$ ist die Geschwindigkeit mit der der Bezugssystemswechsel vollzogen wird

3 Ein einfaches Modell zur Behandlung elastisch–plastischer Deformationsvorgänge

Anliegen ist es, ein Modell zur Behandlung elastisch–plastischer Deformationsvorgänge im Rahmen einer Fließtheorie bei Vorliegen großer Deformationen zu entwickeln, das der klassischen Plastizitätstheorie [14] möglichst nahe ist. Es wird sich im weiteren erweisen, daß dies auf der Basis eine *spezifischen Freien Energie* gemäß (2.4) mit der vereinfachten Struktur

$$\psi = \psi_e(\boldsymbol{g}^\flat, \overset{-e}{\boldsymbol{b}}{}^\flat) + \psi_h(\boldsymbol{\alpha}^\flat) \tag{3.1}$$

($\boldsymbol{\alpha}^\flat$ steht hier für einen Satz *interner Variabler* die Verfestigung, Entfestigung oder was auch immer beschreiben) und einer *Fließfunktion*

$$y = y(\overset{*}{\boldsymbol{\tau}}{}^\sharp, \boldsymbol{a}^\sharp), y \leq 0 \tag{3.2}$$

möglich ist, mit $\overset{*}{\boldsymbol{\tau}}{}^\sharp := -2\rho_0 \dfrac{\partial \psi}{\partial \overset{-e}{\boldsymbol{b}}{}^\flat}$, $\boldsymbol{a}^\sharp := \rho_0 \dfrac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{\alpha}^\flat}$, d.h. $\overset{*}{\boldsymbol{\tau}}{}^\sharp$, $\boldsymbol{a}^\sharp$ sind die zu $\overset{-e}{\boldsymbol{b}}{}^\flat$, $\boldsymbol{\alpha}^\flat$, arbeitskonjugierten Größen.
Wobei im Spezialfall

$$\psi_e(\boldsymbol{g}^\flat, \overset{-e}{\boldsymbol{b}}{}^\flat) := \psi_e(\boldsymbol{g}^\flat - \overset{-e}{\boldsymbol{b}}{}^\flat)$$

gilt

$$\overset{*}{\boldsymbol{\tau}}{}^\sharp \equiv \boldsymbol{\tau}^\sharp$$

($\boldsymbol{\tau}^\sharp := J\boldsymbol{\sigma}^\sharp$– *Kirchhoff'scher Spannungstensor*; $J := \sqrt{\dfrac{\det\left(\boldsymbol{g}^\flat\right)}{\det\left(\boldsymbol{G}^\flat\right)}}\, \det(\boldsymbol{F})$; $\rho_0 := \rho J$– *Dichte* der *Ausgangskonfiguration*) .
Die *Dissipation* aus (2.6) nimmt nun, wie man leicht überprüfen kann, die Form

$$\frac{\mathcal{D}_e}{J} := \frac{1}{2} \overset{*}{\boldsymbol{\tau}}{}^\sharp : \mathcal{L}_v \overset{-e}{\boldsymbol{b}}{}^\flat \; - \boldsymbol{a}^\sharp \,\vdots\, \mathcal{L}_v \boldsymbol{\alpha}^\flat \geq 0 \tag{3.3}$$

an. Geht man davon aus, daß das *Postulat der maximalen Dissipation* (*Drucker–Postulat*):

Bei Erreichen der Fließgrenze ($y=0$) stellen sich die Spannungen und die internen Variablen für jeden Deformationszustand so ein, daß die Dissipation maximal wird. Im elastischen Bereich ($y<0$) dagegen verschwindet die Dissipation [18].

für das betrachtete Material gültig ist, so erhält man durch Lösen des zum *Drucker–Postulat* äquivalenten Extremwertproblems mit Nebenbedingungen

$$\mathcal{D}_e\big|_{y\,=\,0} \; max.$$

die *Evolutionsgleichungen*

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_v \bar{\boldsymbol{b}}^{e\,\flat} &= 2\lambda \frac{\partial y}{\partial \overset{*}{\boldsymbol{\tau}}{}^\sharp}; \\
\mathcal{L}_v \boldsymbol{a}^\sharp &= -\lambda \boldsymbol{q}^\sharp, \;\; \boldsymbol{q}^\sharp := \frac{\partial \boldsymbol{a}^\sharp}{\partial \boldsymbol{\alpha}^\flat} : \frac{\partial y}{\partial \boldsymbol{a}^\sharp}; \\
&\lambda \geq 0, \lambda y = 0, y \; konvex
\end{aligned} \tag{3.4}$$

deren algorithmische Behandlung im nächsten Abschnitt näher diskutiert werden soll.

4 Aspekte der numerischen Behandlung

Variationsformulierung

Die Variationsformulierung für isotherme, stationäre Probleme

$$\int_{\mathcal{S}_t} \boldsymbol{\sigma}^\sharp : \boldsymbol{\varepsilon}^\flat_{\boldsymbol{\xi}^\sharp} \, dv = \int_{\mathcal{S}_t} \rho \langle \boldsymbol{l}^\sharp, \boldsymbol{\xi}^\sharp \rangle \, dv + \int_{\partial \mathcal{S}_t} \langle \boldsymbol{r}^\sharp, \boldsymbol{\xi}^\sharp \rangle \, da \tag{4.5}$$

mit $\boldsymbol{\varepsilon}^\flat_{\boldsymbol{\xi}^\sharp} := \frac{1}{2} \left(\boldsymbol{grad}\, \boldsymbol{\xi}^\sharp + (\boldsymbol{grad}\, \boldsymbol{\xi}^\sharp)^T \right)$ ergibt sich unmittelbar aus der Variation (2.5) des 1.Hauptsatzes (2.1) bei Beschränkung auf isotherme, stationäre Prozesse unter Anwendung des Satzes von *Gauss*. Selbstverständlich kann man auch von der schwachen Formulierung der Impulsbilanz in (2.6) ausgehen, um (4.5) zu erhalten. Die *konsistente Linearisierung* der nichtlinearen Gleichungen (4.5) ergibt sich dann [13][15] zu

$$\int_{\mathcal{S}_t} \boldsymbol{\varepsilon}^\flat_{\delta \boldsymbol{u}^\sharp} : \left(\frac{2}{J} \frac{d\boldsymbol{\tau}^\sharp}{d\boldsymbol{g}^\flat} \cdot \boldsymbol{g}^\flat + \boldsymbol{\sigma}^\sharp \otimes \mathbf{1} \right) : \boldsymbol{\varepsilon}^\flat_{\boldsymbol{\xi}^\sharp} \, dv = \int_{\mathcal{S}_t} \left(\rho \langle \boldsymbol{l}^\sharp, \boldsymbol{\xi}^\sharp \rangle - \boldsymbol{\sigma}^\sharp : \boldsymbol{\varepsilon}^\flat_{\boldsymbol{\xi}^\sharp} \right) \, dv + \int_{\partial \mathcal{S}_t} \langle \boldsymbol{r}^\sharp, \boldsymbol{\xi}^\sharp \rangle \, da \tag{4.6}$$

Auffallend an (4.6) ist, daß hier eine formale Gleichheit zu der entsprechenden Formulierung bei rein elastischen Materialverhalten besteht. Bei elastisch–plastischen Materialverhalten hängen die Spannungen jedoch noch zusätzlich von internen Variablen ab. Diese internen Variablen sind jedoch wiederum abhängig vom Deformationszustand (vgl. Seite 7), so das hier folglich die *Kettenregel*

$$\frac{d\boldsymbol{\tau}^\sharp}{d\boldsymbol{g}^\flat} = \frac{\partial \boldsymbol{\tau}^\sharp}{\partial \boldsymbol{g}^\flat} - \frac{\partial \overset{*}{\boldsymbol{\tau}}{}^\sharp}{\partial \boldsymbol{g}^\flat} : \frac{d\bar{b}^{e\,\flat}}{d\boldsymbol{g}^\flat} \tag{4.7}$$

zur Anwendung zu bringen ist.

Numerische Integration der Evolutionsgleichungen

Die *Evolutionsgleichungen* (3.4) sind nach ihrer Struktur *Differential–Algebraische* Gleichungen vom *Index* 1 [5]. Ein Standardverfahren zur Behandlung von *DAE's* der Struktur

(3.4) ist auf Seite 12 angegeben. Bei Anwendung dieses Mehrschritt–Rückwärts–Differenzenverfahrens gehen die *DAE's* (3.4) in die nichtlinearen algebraischen Gleichungen (4.8) über.

$$
\begin{aligned}
\overset{-e}{\boldsymbol{b}}{}^{\flat}{}_{n} - h\beta_0\lambda_n 2\frac{\partial y}{\partial \overset{*}{\boldsymbol{\tau}}{}^{\sharp}{}_{n}} &= -\boldsymbol{\Phi}_{*n}\sum_{j=1}^{k}\alpha_j \boldsymbol{\Phi}^{*}{}_{n-j}\overset{-e}{\boldsymbol{b}}{}^{\flat}{}_{n-j} \\
\boldsymbol{a}^{\sharp}{}_{n} + h\beta_0\lambda_n \boldsymbol{q}^{\sharp}_{n} &= -\boldsymbol{\Phi}_{*n}\sum_{j=1}^{k}\alpha_j \boldsymbol{\Phi}^{*}{}_{n-j}\boldsymbol{a}^{\sharp}{}_{n-j} \\
h\beta_0\lambda_n y(\overset{*}{\boldsymbol{\tau}}{}^{\sharp}{}_{n}, \boldsymbol{a}^{\sharp}_{n}) &= 0
\end{aligned}
\tag{4.8}
$$

Zur Lösung von (4.8) kann nun das *Newton–Verfahren* (4.9) verwendet werden, wobei von der Substitution $\hat{\lambda} := h\beta_0\lambda$ gebrauch gemacht wurde.

$$
\{\boldsymbol{\mathcal{J}_E}\}\begin{pmatrix} \delta\overset{-e}{\boldsymbol{b}}{}^{\flat} \\ \\ \delta\boldsymbol{a}^{\sharp} \\ \\ \delta\hat{\lambda} \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} \overset{-e}{\boldsymbol{b}}{}^{\flat\,\xi} - \hat{\lambda}^{\xi} 2\dfrac{\partial y}{\partial \overset{*}{\boldsymbol{\tau}}{}^{\sharp}}^{\xi} + \boldsymbol{\Phi}_{*n}\displaystyle\sum_{j=1}^{k}\alpha_j \boldsymbol{\Phi}^{*}{}_{n-j}\overset{-e}{\boldsymbol{b}}{}^{\flat}{}_{n-j} \\ \boldsymbol{a}^{\sharp\xi} + \hat{\lambda}^{\xi}\boldsymbol{q}^{\sharp\xi} + \boldsymbol{\Phi}_{*n}\displaystyle\sum_{j=1}^{k}\alpha_j \boldsymbol{\Phi}^{*}{}_{n-j}\boldsymbol{a}^{\sharp}{}_{n-j} \\ \hat{\lambda}^{\xi} y^{\xi} \end{pmatrix}
$$

mit

$$
\{\boldsymbol{\mathcal{J}_E}\} := \begin{pmatrix} \boldsymbol{\mathcal{I}} + \hat{\lambda}^{\xi} 2\dfrac{\partial^2 y}{\partial \overset{*}{\boldsymbol{\tau}}{}^{\sharp}\partial \overset{*}{\boldsymbol{\tau}}{}^{\sharp}}^{\xi} : \dfrac{\partial \boldsymbol{\tau}^{\sharp}}{\partial \boldsymbol{g}^{\flat}}^{\xi} & -\hat{\lambda}^{\xi} 2\dfrac{\partial^2 y}{\partial \overset{*}{\boldsymbol{\tau}}{}^{\sharp}\partial \boldsymbol{a}^{\sharp}}^{\xi} & -2\dfrac{\partial y}{\partial \overset{*}{\boldsymbol{\tau}}{}^{\sharp}}^{\xi} \\ -\hat{\lambda}^{\xi}\dfrac{\partial \boldsymbol{q}^{\sharp}}{\partial \overset{*}{\boldsymbol{\tau}}{}^{\sharp}}^{\xi} : \dfrac{\partial \boldsymbol{\tau}^{\sharp}}{\partial \boldsymbol{g}^{\flat}}^{\xi} & \boldsymbol{\mathcal{I}} + \hat{\lambda}^{\xi}\dfrac{\partial \boldsymbol{q}^{\sharp}}{\partial \boldsymbol{a}^{\sharp}}^{\xi} & \boldsymbol{q}^{\sharp\,\xi} \\ -\hat{\lambda}^{\xi}\dfrac{\partial y}{\partial \overset{*}{\boldsymbol{\tau}}{}^{\sharp}}^{\xi} : \dfrac{\partial \boldsymbol{\tau}^{\sharp}}{\partial \boldsymbol{g}^{\flat}}^{\xi} & \hat{\lambda}^{\xi}\dfrac{\partial y}{\partial \boldsymbol{a}^{\sharp}}^{\xi} & y^{\xi} \end{pmatrix}
\tag{4.9}
$$

und den Startwerten

$$
\overset{-e}{\boldsymbol{b}}{}^{\flat\,0} = -\boldsymbol{\Phi}_{*n}\sum_{j=1}^{k}\alpha_j \boldsymbol{\Phi}^{*}{}_{n-j}\overset{-e}{\boldsymbol{b}}{}^{\flat}{}_{n-j};\quad \boldsymbol{a}^{\sharp 0} = -\boldsymbol{\Phi}_{*n}\sum_{j=1}^{k}\alpha_j \boldsymbol{\Phi}^{*}{}_{n-j}\boldsymbol{a}^{\sharp}{}_{n-j};\quad \hat{\lambda}^{0} = \hat{\lambda}_{n-1}.
$$

Die zur Berechnung der *materiellen Steifigkeit* $\dfrac{d\boldsymbol{\tau}^{\sharp}}{d\boldsymbol{g}^{\flat}}$ in (4.7) benötigte Größe $\dfrac{d\overset{-e}{b}{}^{\flat}}{d\boldsymbol{g}^{\flat}}$ kann nun wie man leicht sieht durch Lösung des linearen Gleichungssystems (4.10) bestimmt werden.

$$
\{\boldsymbol{\mathcal{J}_E}\}\begin{pmatrix} \dfrac{d\overset{-e}{\boldsymbol{b}}{}^{\flat}}{d\boldsymbol{g}^{\flat}} \\ \dfrac{d\boldsymbol{a}^{\sharp}}{d\boldsymbol{g}^{\flat}} \\ \dfrac{d\hat{\lambda}}{d\boldsymbol{g}^{\flat}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{\lambda} 2\dfrac{\partial^2 y}{\partial \overset{*}{\boldsymbol{\tau}}{}^{\sharp}\partial \overset{*}{\boldsymbol{\tau}}{}^{\sharp}} : \dfrac{\partial \overset{*}{\boldsymbol{\tau}}{}^{\sharp}}{\partial \boldsymbol{g}^{\flat}} \\ -\hat{\lambda}\dfrac{\partial \boldsymbol{q}^{\sharp}}{\partial \overset{*}{\boldsymbol{\tau}}{}^{\sharp}} : \dfrac{\partial \overset{*}{\boldsymbol{\tau}}{}^{\sharp}}{\partial \boldsymbol{g}^{\flat}} \\ -\hat{\lambda}\dfrac{\partial y}{\partial \overset{*}{\boldsymbol{\tau}}{}^{\sharp}} : \dfrac{\partial \overset{*}{\boldsymbol{\tau}}{}^{\sharp}}{\partial \boldsymbol{g}^{\flat}} \end{pmatrix}
\tag{4.10}
$$

Schlußbemerkungen

Diese Erweiterung des Verfahrens aus [14] auf geometrisch nichtlineare Probleme bietet in gleicher Weise einen effizienten Weg zur numerischen Berechnung der Spannungen, internen Variablen und auch der konsistenten Steifigkeitsmatrix. Bezüglich Detailfragen sei auf diesen Artikel und auf [4] verwiesen. Das vorgestellte Materialmodell der finiten Elasto–Plastizität baut auf einer geometrischen Interpretation von Elementarmechanismen der Plastizität auf. Unter Voraussetzung der Anwendbarkeit der *rationalen Thermodynamik* ergibt sich ein Satz von Gleichungen, der bei Voraussetzung kleiner Deformationen in die Gleichungen der klassischen Elasto–Plastizität übergeht.

Anhang

Lineare Mehrschrittverfahren zur Behandlung von gewöhnlichen Differentialgleichungen erster Ordnung

Ein allgemeines implizites lineares k–Schrittverfahren zur Lösung des Systems gewöhnlicher Differentialgleichungen erster Ordnung

$$\dot{\boldsymbol{y}} = \boldsymbol{Y}(\boldsymbol{y}) \tag{4.1}$$

hat die Form [12]

$$\sum_{j=0}^{k} \alpha_j \boldsymbol{y}_{n-j} = h \sum_{j=0}^{k} \beta_j \boldsymbol{Y}(\boldsymbol{y}_{n-j});\;\; \alpha_0 = 1,\; |\alpha_0| + |\beta_0| \neq 0. \tag{4.2}$$

Die gebräuchlichsten impliziten Mehrschrittverfahren sind das

Adams–Moulton Verfahren

$$\boldsymbol{y}_n - \boldsymbol{y}_{n-1} = h \sum_{j=0}^{k} \beta_j \boldsymbol{Y}(\boldsymbol{y}_{n-j}) \tag{4.3}$$

mit der Konvergenzordnung $p = k + 1$ ($k\!=\!1$ – Trapezregel). Dieses Verfahren ist stabil $\forall k$ [12]. Und das

implizite Rückwärtsdifferenzenverfahren (BDF)

$$\sum_{j=0}^{k} \alpha_j \boldsymbol{y}_{n-j} = h \beta_0 \boldsymbol{Y}(\boldsymbol{y}_n) \tag{4.4}$$

mit der Konvergenzordnung $p = k$ ($k = 1$ – Euler rückwärts). Dieses Verfahren ist für $k = 1, 2$ absolut stabil und für $3 \leq k \leq 6$ stabil [12].

k	β_0	α_1	α_2	α_3	α_4	α_5	α_6
1	1	-1					
2	$\frac{2}{3}$	$-\frac{4}{3}$	$\frac{1}{3}$				
3	$\frac{6}{11}$	$-\frac{18}{11}$	$\frac{9}{11}$	$-\frac{2}{11}$			
4	$\frac{12}{25}$	$-\frac{48}{25}$	$\frac{36}{25}$	$-\frac{16}{25}$	$\frac{3}{25}$		
5	$\frac{60}{137}$	$-\frac{300}{137}$	$\frac{300}{137}$	$-\frac{200}{137}$	$\frac{75}{137}$	$-\frac{12}{137}$	
6	$\frac{60}{147}$	$-\frac{360}{147}$	$\frac{450}{147}$	$-\frac{400}{147}$	$\frac{225}{147}$	$-\frac{72}{147}$	$\frac{10}{147}$

Diese besonderen Stabilitätseigenschaften prädestinieren diese Methode insbesondere für sogenannte steife Systeme [12].

Ein BDF–Verfahren zur Behandlung von DAEs vom Index 1

Betrachten wir die spezielle *Index 1 DAE*

$$\begin{aligned} \dot{\boldsymbol{y}} &= \lambda \boldsymbol{Y}(\boldsymbol{y}) \\ 0 &= \lambda F(\boldsymbol{y}). \end{aligned} \tag{4.5}$$

so ist augenfällig, daß diese *Differential-Algebraischen Gleichungen* die gleiche Struktur wie die Evolutionsgleichungen (3.4) haben. Approximiert man nun diese Gleichungen mit dem Verfahren (4.4), so erhält man

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^{k} \alpha_j \boldsymbol{y}_{n-j} &= \Lambda_n \boldsymbol{Y}(\boldsymbol{y}_n) \\ 0 &= \Lambda_n F(\boldsymbol{y}_n) \end{aligned} \tag{4.6}$$

mit $\Lambda_n := h\beta_0\lambda_n$. Zur Lösung dieses Systems von nichtlinearen algebraischen Gleichungen bietet sich das Newton–Verfahren

$$\begin{gathered} \begin{pmatrix} \mathbf{1} - \Lambda^\xi \dfrac{\partial \boldsymbol{Y}^\xi}{\partial \boldsymbol{y}} & -\boldsymbol{Y}^\xi \\ \Lambda^\xi \dfrac{\partial F^\xi}{\partial \boldsymbol{y}} & F^\xi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta \boldsymbol{y} \\ \delta \Lambda \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \boldsymbol{y}^\xi - \Lambda^\xi \boldsymbol{Y}^\xi + \sum_{j=1}^{k} \alpha_j \boldsymbol{y}_{n-j} \\ \Lambda^\xi F^\xi \end{pmatrix} \\ \boldsymbol{y}^{\xi+1} = \boldsymbol{y}^\xi + \delta \boldsymbol{y}; \quad \Lambda^{\xi+1} = \Lambda^\xi + \delta\Lambda \end{gathered} \tag{4.7}$$

mit den Startwerten

$$\boldsymbol{y}^0 = -\sum_{j=1}^{k} \alpha_j \boldsymbol{y}_{n-j}; \;\; \Lambda^0 = \Lambda_{n-1} \tag{4.8}$$

an. Interessant ist, daß hier der Einfluß der Schrittweite h scheinbar verloren geht. Hierzu ist jedoch zu bemerken, daß bei den hier relevanten stationären Prozessen die Belastungen inkrementell aufgebracht werden, d.h. die aktuelle Belastung ergibt sich zu $\boldsymbol{f}_n = n\frac{\boldsymbol{f}_{max}}{N}$ ($\boldsymbol{f}_{max}$– Maximallast; N– Anzahl Schritte), diese Belastung führt zu einem Deformationszustand $\boldsymbol{C}_n^\flat = \boldsymbol{C}^\flat\left(n\frac{\boldsymbol{f}_{max}}{N}\right)$ und bestimmt $\boldsymbol{Y}_n, F_n$ mit (vgl. (3.4)). Da diese Beziehungen allerdings nichtlinear sind, kann unmittelbar daraus keine Schrittweite h für die hier betrachteten *Differential–Algebraischen Gleichungen* bestimmt werden. Gesagt werden kann aber, daß $\left\|\frac{\boldsymbol{f}_{max}}{N}\right\|$ einen Hinweis auf die Schrittweite und somit auf die erreichbare Genauigkeit gibt.

Literatur

[1] B.A. Bilby, R. Bullough, E. Smith: *Continuous Distributions of Dislocations: a New Application of the Methods of Non–Riemannian Geometry.* Proceedings of the Royal Society, London, Ser. A, Vol. 231, 1955, S.263–273.

[2] B.A. Bilby: *Continuous distributions of dislocations.* I.N. Sneddon, R. Hill (Eds.), Progress in Solid Mechanics, Vol.1, Amsterdam 1960, S.331–398.

[3] R. deWit: *Theory of disclinations: II. Continuous and discrete disclinations in anisotropic elasticity.* J.Res.Natn.Bur.Stand., 77A, 49 (1973).

[4] U.–J. Görke, A. Bucher, R. Kreißig, D. Michael: *Ein Beitrag zur Lösung von Anfangs–Randwert–Problemen einschließlich der Materialmodellierung bei finiten elastisch–plastischen Verzerrungen mit Hilfe der FEM.* Preprint–Reihe des Chemnitzer SFB 393, SFB393/00-09, Chemnitz, März 2000.

[5] E. Hairer, G. Wanner: *Solving Ordinary Differential Equations II: Stiff and Differential–Algebraic Problems.* Springer–Verlag, Berlin 1980.

[6] K. Kondo: *On the Geometrical and Physical Foundations of the Theory of Yielding.* Proceedings of the 2nd Japan National Congress on Applied Mechanics, Tokyo, 1952, S.41–47.

[7] K. Kondo: *Geometry of Elastic Deformation and Incombatibility.* Memoirs of the unifying study of the basic problems in engineering sciences by means of geometry, 1955, Volume 1, Division C, S.5–17.

[8] K. Kondo: *Non–Riemannian Geometry of Imperfect Crystals from a Macroscopic Viepoint.* Memoirs of the unifying study of the basic problems in engineering sciences by means of geometry, 1955, Volume 1, Division D, S.6–17.

[9] E. Kröner: *Plastizität und Versetzungen.* A. Sommerfeld, E. Fues, E. Kröner (Eds.), Mechanik der deformierbaren Medien, Leipzig 1970, S.310–376.

[10] E. Kröner: *The fundamental field theory of defects in crystals.* X. Markenscoff (Ed.), Dislocations in Solids: Some Recent Advances, AMD–Vol. 63, Am.Soc.Mech.Engng., New York 1984, S.1–10.

[11] E. Kröner: *The Continuized Crystal – a Bridge Between Micro– and Macromechanics?* Z.angew.Math.Mech., 66 (1986) 5, T 284 – T 292.

[12] J.D. Lambert: *Numerical methods for ordinary differential systems: the initial value problem.* John Wiley & Sons Ltd., Chichester 1991.

[13] J.E. Marsden, T.J.R. Hughes: *Mathematical Foundations of Elasticity.* Prentice–Hall International Inc., London 1983.

[14] A. Meyer, D. Michael: *A Modern Approach to the Solution of Problems of Classic Elasto–Plasticity on Parallel Computers.* Numerical Linear Algebra with Applications, Vol. 4(1), 1–16 (1997).

[15] D. Michael, M. Meisel: *Some remarks to large deformation elasto–plasticity (continuum formulation).* Preprint–Reihe des Chemnitzer SFB 393, SFB393/98-28, Chemnitz, September 1998.

[16] D. Michael: *Notizen zu einer geometrisch motivierten Plastizitätstheorie.* Preprint–Reihe des Chemnitzer SFB 393, SFB393/99-05, Chemnitz, Februar 1999.

[17] M. Scherzer: *Physikalisch und geometrisch nichtlineare Problemstellungen der Festkörper– und Bruchmechanik an Interface–Konfigurationen.* Habilitationsschrift, Technische Universität Bergakademie Freiberg 1999.

[18] J.C. Simo: *A Framework for Finite Strain Elastoplasticity based on Maximum Plastic Dissipation and the Multiplicative Decomposition: Part I. Continuum Formulation.* Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 66 (1988) 199–219.

[19] J.C. Simo, T.J.R. Hughes: *Computational Inelasticity.* Springer–Verlag, New York 1998.

[20] C. Truesdell: *Some Challenges offered to Analysis by Rational Thermodynamics.* G.M. deLaPenha, L.A.J. Medeiros (Eds.), Contemporary Developments in Continuum Mechanics and Partial Differential Equations, North–Holland Publishing Company, 1978, S. 495–603.

Other titles in the SFB393 series:

00-27 C. Mehl, V. Mehrmann, H. Xu. Canonical forms for doubly structured matrices and pencils. June 2000. S. I. Solov'ev. Preconditioned gradient iterative methods for nonlinear eigenvalue problems. June 2000.

00-29 A. Eilmes, R. A. Römer, M. Schreiber. Exponents of the localization lengths in the bipartite Anderson model with off-diagonal disorder. June 2000.

00-30 T. Grund, A. Rösch. Optimal control of a linear elliptic equation with a supremum-norm functional. July 2000.

00-31 M. Bollhöfer. A Robust ILU Based on Monitoring the Growth of the Inverse Factors. July 2000.

00-32 N. Arada, E. Casas, F. Tröltzsch. Error estimates for a semilinear elliptic control problem. July 2000.

00-33 T. Penzl. LYAPACK Users Guide. August 2000.

00-34 B. Heinrich, K. Pietsch. Nitsche type mortaring for some elliptic problem with corner singularities. September 2000.

00-35 P. Benner, R. Byers, H. Faßbender, V. Mehrmann, D. Watkins. Cholesky-like Factorizations of Skew-Symmetric Matrices. September 2000.

00-36 C. Villagonzalo, R. A. Römer, M. Schreiber, A. MacKinnon. Critical Behavior of the Thermoelectric Transport Properties in Amorphous Systems near the Metal-Insulator Transition. September 2000.

00-37 F. Milde, R. A. Römer, M. Schreiber. Metal-insulator transition in anisotropic systems. October 2000.

00-38 T. Stykel. Generalized Lyapunov Equations for Descriptor Systems: Stability and Inertia Theorems. October 2000.

00-39 G. Kunert. Robust a posteriori error estimation for a singularly perturbed reaction-diffusion equation on anisotropic tetrahedral meshes. November 2000.

01-01 G. Kunert. Robust local problem error estimation for a singularly perturbed problem on anisotropic finite element meshes. January 2001.

01-02 G. Kunert. A note on the energy norm for a singularly perturbed model problem. January 2001.

01-03 U.-J. Görke, A. Bucher, R. Kreißig. Ein Beitrag zur Materialparameteridentifikation bei finiten elastisch-plastischen Verzerrungen durch Analyse inhomogener Verschiebungsfelder mit Hilfe der FEM. Februar 2001.

01-04 R. A. Römer. Percolation, Renormalization and the Quantum-Hall Transition. February 2001.

01-05 A. Eilmes, R. A. Römer, C. Schuster, M. Schreiber. Two and more interacting particles at a metal-insulator transition. February 2001.

The complete list of current and former preprints is available via
`http://www.tu-chemnitz.de/sfb393/preprints.html`.