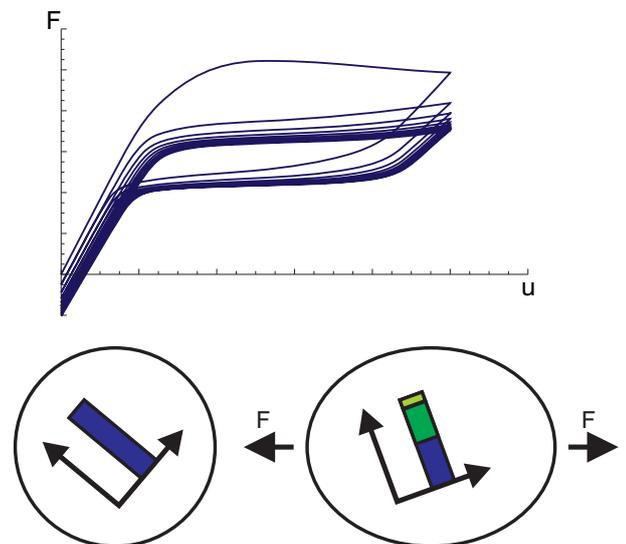
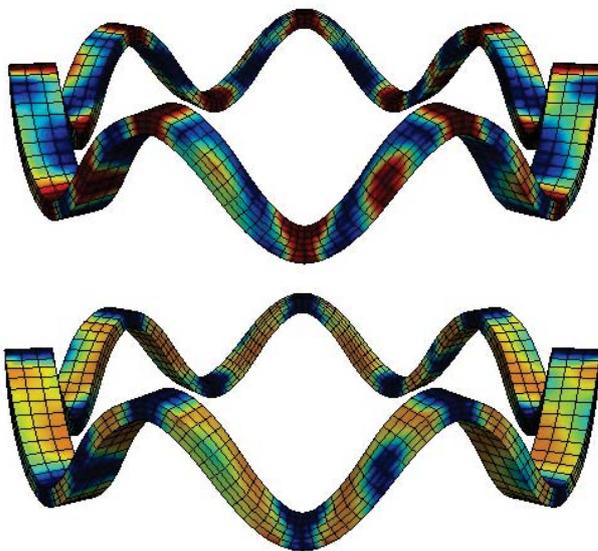


# Variationelle Modellierung irreversibler Effekte in polykristallinen Formgedächtnislegierungen

Johanna Waimann



**RUHR-UNIVERSITÄT BOCHUM**  
**Institut für Mechanik**

**Variationelle Modellierung irreversibler Effekte in  
polykristallinen Formgedächtnislegierungen**

Dissertation zur Erlangung des Grades

Doktor-Ingenieur

der Fakultät für Bau- und Umweltingenieurwissenschaften  
der Ruhr-Universität Bochum

von

**Johanna Waimann**

aus Castrop-Rauxel

Bochum 2018

**Mitteilungen aus dem Institut für Mechanik**  
**Nr. 179**

Herausgeber (Publisher):

Institut für Mechanik

— Schriftenreihe —

Ruhr-Universität Bochum

D-44780 Bochum

---

ISBN 978-3-935892-57-5

---

This material is presented to ensure timely dissemination of scholarly and technical work. Copyright and all rights therein are retained by the copyright holders. All persons copying this information are expected to adhere to the terms and constraints invoked by the author's copyright. These works or parts of it may not be used to repost reprint/republish or for creating new collective works for resale or redistribution to servers or lists without the explicit permission of the copyright holder.

Dieses Werk ist urheberrechtlich geschützt. Die dadurch begründeten Rechte, insbesondere die der Übersetzung, des Nachdrucks, des Vortrags, der Entnahme von Abbildungen und Tabellen, der Funksendung, der Mikroverfilmung oder der Vervielfältigung auf anderen Wegen und der Speicherung in Datenverarbeitungsanlagen, bleiben, auch bei nur auszugsweiser Verwertung, vorbehalten. Eine Vervielfältigung dieses Werkes oder von Teilen dieses Werkes ist zulässig. Sie ist grundsätzlich vergütungspflichtig. Zuwiderhandlungen unterliegen den Strafbestimmungen des Urheberrechtsgesetzes.

©2018 Johanna Waimann, Institut für Mechanik, Ruhr-Universität Bochum

Printed in Germany

Einreichung der Dissertation (thesis submission): 28. August 2018

Tag der mündlichen Prüfung (thesis defense): 08. November 2018

Erster Referent (first referee):

PD Dr.-Ing. Philipp Junker

Zweiter Referent (second referee):

Prof. Dr. rer. nat. Klaus Hackl

Vorsitzender (committee chair):

Jun.-Prof. Dr. Andreas Vogel

*Für meinen Vater*

## Vorwort

Die vorliegende Dissertation ist während meiner Tätigkeit als wissenschaftliche Mitarbeiterin am *Lehrstuhl für Mechanik-Materialtheorie* entstanden und wurde anteilig durch das *Mercator Research Center Ruhr* im Rahmen des Projektes „Mikromechanische Modellierung und Simulation der funktionalen Ermüdung von ein- und polykristallinen Formgedächtnislegierungen“ (PR-2013-0048) finanziert, wofür ich mich an dieser Stelle herzlich bedanken möchte. Meine Zeit am Lehrstuhl wurde aber auch von vielen Menschen begleitet, die mich maßgeblich bei meiner Promotion unterstützt haben, sowie dafür verantwortlich sind, dass ich nun gerne auf die vergangenen fünf Jahre zurückblicke.

An erster Stelle ist hier mein Betreuer und Erstgutachter Herr PD Dr.-Ing. Philipp Junker zu nennen. Durch Deine Betreuung und Förderung nicht nur in der Promotionszeit, sondern bereits während meiner Beschäftigung als studentische Hilfskraft, konntest Du mich für das Fach Mechanik begeistern. Sei es im Bereich der Materialmodellierung oder in den Grundlagen wie beispielsweise der Finite-Elemente-Methode, durch Deine Unterstützung konnte ich unheimlich viel lernen. Ich hatte des Weiteren das Gefühl, mit Fragen oder Problemen immer zu Dir kommen zu können und blicke gerne auf gemeinsame Diskussionen und die gemeinsame Zeit zurück. Vielen Dank für alles!

Mein aufrichtiger Dank gilt des Weiteren meinem Zweitgutachter Herrn Prof. Dr. rer. nat. Klaus Hackl. Vielen Dank für die Möglichkeit an Ihrem Lehrstuhl zu arbeiten und Ihr Vertrauen in meine Fähigkeiten. Sie haben mir die Gelegenheit gegeben, viel von Ihnen zu lernen, vor allem auch meine eigenen Ideen zu entwickeln und nachzuverfolgen. Bei Fragen stand mir auch Ihre Tür immer offen.

Nennen möchte ich an dieser Stelle ebenfalls Herrn Jun.-Prof. Dr. Andreas Vogel. Vielen Dank für Ihre doch etwas spontane Übernahme des Prüfungsvorsitzes.

Die Arbeit am *Lehrstuhl für Mechanik-Materialtheorie* in den vergangenen Jahren wäre jedoch ohne meine Kollegen und Kolleginnen, die für allerlei Abwechslung gesorgt und zu einer angenehmen Arbeitsatmosphäre beigetragen haben, nicht dieselbe gewesen. An dieser Stelle ist vor allem Herr Stephan Schwarz zu nennen. Danke für Deine Unterstützung und Freundschaft! Es war schön, sich mit Dir ein Büro zu teilen, wir waren ein sehr gutes Team! Vielen Dank auch an Herrn Dr.-Ing. Ulrich Hoppe dafür, dass Du uns durch Deine Organisation so sehr den Rücken freihältst und wir auch bei fachlichen Fragen immer zu Dir kommen können. Es war mir eine Freude, mit Euch allen zusammenzuarbeiten!

Abschließend möchte ich meine Familie und meine Freunde nennen, allen voran meine Mutter Eva und meine Schwestern, Helena und Christina. Ihr unterstützt mich, egal was ich tue, und seid immer für mich da. Vielen Dank an meine Nichte Anna für die Freude und Ablenkung, die Du mir im letzten Jahr bereitet hast!

## Kurzfassung

Bei Formgedächtnislegierungen handelt es sich um vielversprechende Materialien für die industrielle Anwendung. Eine Voraussetzung für diese ist jedoch ein detailliertes Kenntnis der innerhalb des Materials stattfindenden mikrostrukturellen Änderungen sowie die Berücksichtigung dieses Wissens in Materialmodellen, die somit in der Lage sind, das daraus resultierende komplexe Materialverhalten vorherzusagen. Die herausragenden Eigenschaften von Formgedächtnislegierung ergeben sich aus der diffusionslosen Phasentransformation zwischen den beiden Festkörperphasen Austenit und Martensit. Die vorliegende Arbeit behandelt parallel zur Phasentransformation stattfindende irreversible Prozesse, die in der funktionalen Degradierung der herausragenden Eigenschaften infolge zyklischer Belastungen resultieren.

Die drei präsentierten Materialmodelle basieren auf der variationellen Methode des Prinzips des Minimums des Dissipationspotentials. Der sogenannte Effekt der funktionalen Ermüdung wird in den ersten beiden Modellen durch zusätzliche Berücksichtigung plastischer Deformationen bzw. irreversibler Transformationsvorgänge abgebildet, die parallel zu den reversiblen Phasenumwandlungen stattfinden. Die simultane Entwicklung der mikrostrukturellen Effekte wird darin durch eine gekoppelte Dissipationsfunktion berücksichtigt. Um ebenfalls den Einfluss thermischer zyklischer Belastungen zu untersuchen, speichert das dritte Materialmodell die Transformationshistorie des Körpers. In den drei Modellansätzen wird die polykristalline Struktur des betrachteten Materials durch Verwendung einer sich entwickelnden Orientierungsverteilung berücksichtigt. Zusätzlich dazu wird für das erste Modell eine getrennte Auswertung der Mikrostrukturänderung für jedes einzelne Korn auf der Grundlage einer kombinierten Voigt/Reuß-Energiegrenze präsentiert. Für die ersten beiden Modelle erfolgt die Implementierung im Rahmen der Finite-Elemente-Methode. Simulationsergebnisse sowohl für die Materialpunktsebene als auch für makroskopische Randwertprobleme zeigen schließlich die Funktionalität des jeweiligen Materialmodells und somit die Möglichkeit die Kopplung der Phasentransformation mit irreversiblen Effekten und damit verbunden die funktionale Ermüdung abzubilden. Die Ergebnisse werden in diesem Zusammenhang anhand des Beispiels eines zyklisch belasteten Zugstabs mit experimentellen Daten verglichen.

## Summary

Shape memory alloys are attractive materials for industrial applications. A requirement for this usage is a detailed knowledge of the microstructural processes as well as the consideration of that knowledge in materials models which are thus able to predict the related complex material behavior. The outstanding properties of shape memory alloys are a result of the diffusionless solid-solid transformation between austenite and martensite. The present thesis deals with irreversible processes which simultaneously take place to the phase transformation and which result in the functional degradation of the outstanding properties due to cyclic loading.

The three presented material models are based on the variational method of the principle of the minimum of the dissipation potential. In the first two approaches, the so-called effect of functional fatigue is modeled by additional consideration of plastic deformation or respectively of irreversible transformation processes which are concurrently taking place to the reversible phase transitions. Thereby, the simultaneous evolution of the microstructural effects is considered by a coupled dissipation function. To also examine the influence of thermal cycling, the third material model saves the transformation history of the body. In the three material models, the polycrystalline structure is considered by use of an evolving orientation distribution function. In addition, for the first model an evaluation of the change in microstructure is presented, which is taken place separately for each individual grain and which is based on a combined Voigt/Reuß energy bound. Furthermore, for the first two models the implementation in a finite-element framework is introduced. Finally, simulation results for the material point level as well as for macroscopic boundary value problems prove the individual material model's functionality and thus, ability to display the coupling of phase transformations with irreversible effects as well as the related effect of functional fatigue. In that regard, the results of a wire, which is cyclically loaded on tension, are compared with experimental data.

# Inhaltsverzeichnis

<b>Symbolverzeichnis</b>	<b>xi</b>
<b>1 Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2 Mathematische und mechanische Grundlagen</b>	<b>5</b>
2.1 Verwendete Notation . . . . .	5
2.1.1 Voigt- und Mehrabadi-Cowin-Notation . . . . .	7
2.2 Der Begriff des Funktionals und seine Variation . . . . .	8
2.3 Legendre-Transformation . . . . .	9
2.4 Erster und zweiter Hauptsatz der Thermodynamik . . . . .	12
2.5 Prinzip des Minimums des Dissipationspotentials . . . . .	15
2.6 Gegenüberstellung elasto-plastischen, visko-elastischen und elasto-viskoplastischen Materialverhaltens . . . . .	16
2.7 Gegenüberstellung des Prinzips des Minimums des Dissipationspotentials und des Hamilton-Prinzips . . . . .	21
<b>3 Materialeigenschaften von Formgedächtnislegierungen und deren Berücksichtigung in anderen Materialmodellen</b>	<b>25</b>
3.1 Materielle Besonderheiten von Formgedächtnislegierungen . . . . .	25
3.1.1 Funktionale Ermüdung während des pseudoelastischen Materialverhaltens	29
3.2 Überblick über eine Auswahl bisheriger Materialmodelle . . . . .	32
3.2.1 Bisherige Modellierung von Formgedächtnislegierungen am <i>Lehrstuhl für Mechanik-Materialtheorie</i> . . . . .	32
3.2.2 Modellierung von Formgedächtnislegierungen anderer Forschungsgruppen . . . . .	39
<b>4 Variationelle Materialmodelle zur Modellierung irreversibler Prozesse in polykristallinen Formgedächtnislegierungen</b>	<b>43</b>
4.1 Variationelle Modellierung polykristalliner Formgedächtnislegierungen unter Berücksichtigung plastischer Dehnungen – Modell 1a . . . . .	43
4.1.1 Interne Variablen . . . . .	44
4.1.2 Freie Helmholtz-Energie mit kombinierter Voigt/Reuß-Energiegrenze .	45
4.1.3 Dissipationsfunktion . . . . .	47
4.1.4 Das Prinzip des Minimums des Dissipationspotentials angewandt auf die funktionale Ermüdung unter Verwendung der plastischen Dehnung .	48
4.1.5 Gewählte Ansätze für die Modellparameter . . . . .	52
4.1.6 Orientierungsverteilungsfunktion zur Berücksichtigung einer Textur . .	53
4.1.7 Algorithmische Implementierung des Materialmodells . . . . .	54
4.1.8 Modifizierung zur effizienteren Berücksichtigung der polykristallinen Struktur – Modell 1b . . . . .	55
4.2 Variationelle Modellierung polykristalliner Formgedächtnislegierungen unter Berücksichtigung irreversiblen Martensits – Modell 2 . . . . .	59
4.2.1 Interne Variablen . . . . .	59

4.2.2	Freie Helmholtz-Energie mit Reuß-Energiegrenze . . . . .	61
4.2.3	Dissipationsfunktion . . . . .	64
4.2.4	Das Prinzip des Minimums des Dissipationspotentials angewandt auf die funktionale Ermüdung unter Verwendung der irreversiblen martensitischen Volumenfraktion . . . . .	66
4.2.5	Materialmodell mit ratenunabhängiger Phasentransformation – Modell 2a	67
4.2.6	Materialmodell mit ratenabhängiger Phasentransformation – Modell 2b	72
4.2.7	Experimentell basierte Kalibrierung der Modellparameter . . . . .	75
4.3	Variationelle Modellierung der funktionalen Ermüdung während des thermischen Zyklierens – Modell 3 . . . . .	80
<b>5</b>	<b>Numerische Ergebnisse auf Materialpunktebene</b>	<b>87</b>
5.1	Simulationen auf Materialpunktebene des Modells für Phasentransformationen mit simultaner Entwicklung plastischer Dehnungen – Modell 1 . . . . .	90
5.1.1	Zyklischer Zugversuch unter Berücksichtigung des Modells 1a . . . . .	90
5.1.2	Parameterstudie für Modell 1a anhand des zyklischen Zugversuches . . . . .	94
5.1.3	Zyklischer Zugversuch unter Berücksichtigung des Modells 1b . . . . .	96
5.2	Simulationen auf Materialpunktebene des Modells für Phasentransformationen mit simultaner Stabilisierung des Martensits . . . . .	98
5.2.1	Zyklischer Zugversuch unter Berücksichtigung des Modells 2a . . . . .	99
5.2.2	Zyklischer Scherversuch unter Berücksichtigung des Modells 2a . . . . .	102
5.2.3	Einfluss der Temperatur unter Berücksichtigung des Modells 2a . . . . .	104
5.2.4	Zyklischer Zugversuch unter Berücksichtigung des Modells 2b . . . . .	105
5.3	Simulationen auf Materialpunktebene des Modells zur zusätzlichen Abbildung der funktionalen Ermüdung während des thermischen Zyklierens . . . . .	107
5.3.1	Zyklischer Zugversuch unter Berücksichtigung des Modells 3 . . . . .	108
5.3.2	Zyklische Temperaturbelastung unter Berücksichtigung des Modells 3 . . . . .	109
<b>6</b>	<b>Finite-Elemente-Implementierung</b>	<b>111</b>
6.1	Variationelle Formulierung der Finite-Elemente-Methode für materielle Nichtlinearität . . . . .	111
6.2	Implementierung des Materialmodells 1b . . . . .	117
6.3	Implementierung des Materialmodells 2a . . . . .	119
6.4	Implementierung des Materialmodells 2b . . . . .	120
<b>7</b>	<b>Numerische Ergebnisse der Finite-Elemente-Berechnung</b>	<b>121</b>
7.1	Finite-Elemente-Berechnungen für Modell 1b . . . . .	121
7.1.1	Draht unter zyklischer Zugbeanspruchung . . . . .	121
7.1.2	Zyklisch belasteter Zugstreifen . . . . .	126
7.1.3	Lochscheibe unter zyklischer Zugbeanspruchung . . . . .	129
7.1.4	Sinusring unter zyklischer Druckbeanspruchung . . . . .	132
7.1.5	Feder unter zyklischer Zugbeanspruchung . . . . .	136
7.2	Finite-Elemente-Berechnungen für Modell 2a . . . . .	139
7.2.1	Draht unter zyklischer Zugbeanspruchung . . . . .	139
7.2.2	Zyklisch belasteter Zugstreifen . . . . .	147
7.2.3	Lochscheibe unter zyklischer Zugbeanspruchung . . . . .	150
7.2.4	Riss unter zyklischer Belastung . . . . .	153
7.2.5	Sinusring unter zyklischer Druckbeanspruchung . . . . .	157
7.2.6	Feder unter zyklischer Zugbeanspruchung . . . . .	160

---

7.3	Finite-Elemente-Berechnungen für Modell 2b . . . . .	163
<b>8</b>	<b>Fazit</b>	<b>173</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>184</b>
	<b>Hinweis auf Vorveröffentlichungen</b>	<b>185</b>
	<b>Lebenslauf</b>	<b>186</b>



## Symbolverzeichnis

Nachfolgend werden die in dieser Arbeit verwendeten Symbole und Abkürzungen vorgestellt. Des Weiteren werden einzelne verwendete mathematische Operatoren erläutert. An dieser Stelle wird jedoch auch auf die jeweiligen Unterkapitel verwiesen, siehe vor allem Kapitel 2.1. Zur kompakteren Übersicht werden die Komponenten der tensoriellen Größen nicht aufgeführt.

### Lateinische Buchstaben

$a_i$	Parameter zur Berechnung der kalorischen Energie der Phase $i$
$\mathbf{a}$	allgemeiner Tensor erster Stufe
$A_S$	Austenit-Start-Temperatur
$A_F$	Austenit-Finish-Temperatur
$\mathbf{A}$	allgemeiner Tensor zweiter Stufe
$b_i$	Parameter zur Berechnung der kalorischen Energie der Phase $i$
$b_I, b_{II}, b_{III}$	Faktoren zur simultanen plastischen Deformation
$\mathbf{b}$	allgemeiner Tensor erster Stufe
$\mathbf{B}$	allgemeiner Tensor zweiter Stufe (Kapitel 2)
$\mathbf{B}$	Operatormatrix (Kapitel 6)
$\tilde{\mathbf{B}}$	Differentialoperatormatrix
$c_i$	kalorische Energie der Phase $i$
$c^j$	kalorische Energie der Orientierung $j$
$c_\theta$	Wärmekapazität
cons	Summand zur Berücksichtigung von Nebenbedingungen
$dA$	Flächeninkrement
$\text{dev}_{\mathcal{A}} P_{Ti}$	aktiver Deviator der Phase $i$
$\text{dev}_{\mathcal{A}i} P_{Ti}^j$	aktiver Deviator der Phase $i$ der Orientierung $j$
$\text{dev} P_{Pi}^j$	plastischer Deviator der Phase $i$ der Orientierung $j$
$dt$	Zeitinkrement
$dV$	Volumeninkrement
$dx$	Inkrement in $x$
$\mathbf{e}_i$	Basisvektoren
$E_i$	Elastizitätsmodul der Phase $i$
$f$	skalare Funktion (Kapitel 2)
$f$	Faktor der Dissipation durch reversible Phasentransformation
$f_o$	Faktor der Absenkung des oberen Plateaus
$f_u$	Faktor der Absenkung des unteren Plateaus
$f_1, f_2$	Faktoren zur Berechnung von $f$
$f_I, f_{II}, f_{III}$	Funktionen zur simultanen plastischen Deformation
$f^*$	Legendre-Transformation der Funktion $f$
$\mathbf{f}$	Volumenkräfte
$g$	Faktor der Dissipation durch irreversible Phasentransformation
$\mathbf{GP}_i$	Gaußpunkte
$h$	Wärmequelle

$I$	Einheitstensor
$J$	Jacobi-Matrix
$k$	Funktion zur Bestimmung der irreversiblen Dehnung (Modell 3)
$k$	Parameter der gekoppelten Dissipationsfunktion (Modell 1b)
$k_1, k_2, k_3, k_4$	Faktoren Modell 3
$k^j$	Parameter der Orientierung $j$ der gekoppelten Dissipationsfunktion
$M_S$	Martensit-Start-Temperatur
$M_F$	Martensit-Finish-Temperatur
$M_i$	Rotationstensoren der Martensitvarianten
$n$	Anzahl der Martensitvarianten
$n_A^j$	Anzahl der aktiven Phasen der Orientierung $j$
$n_{A\lambda}$	Anzahl der aktiven reversiblen Phasen
$n_{A\rho}$	Anzahl der aktiven irreversiblen Phasen
$n$	Normalenvektor
$n_{\text{pref}}$	bevorzugte Kornorientierung nach Vorbehandlung
$n_{\{1,0,0\},k}$	$k$ unterschiedliche austenitische Normalenvektoren
$N$	Anzahl der unterschiedlich orientierten Körner
$N_{\text{zyk}}$	Zyklusordnungszahl
$NE$	Anzahl der Elemente
$N_{\text{konv}}$	Nummer des konvergierten Zyklus
$N$	bilineare Ansatzfunktionen
$q$	Wärmestrom
$P_\rho$	Triebkraft der Historienvariable
$P$	thermodynamische Triebkraft
$\tilde{P}$	dissipative Kraft
$P_P$	Triebkraft der plastischen Deformation
$P_R$	Triebkraft der Eulerwinkel
$P_T$	Triebkraft der Phasentransformationen
$P_\lambda$	Triebkraft der reversiblen Phasen
$P_\rho$	Triebkraft der irreversiblen Phasen
$q$	Wärmestrom
$Q$	Rotationstensor
$r_1$	Dissipationsparameter
$r_2$	viskoser Parameter
$r_{As}, r_{Af}, r_{Ms}, r_{Mf}$	Dissipationsparameter der Transformationstemperaturen
$r_R$	viskoser Parameter der Eulerwinkelevolution
$r_T$	Dissipationsparameter der Phasentransformation
$r_{T1}$	Dissipationsparameter der Phasentransformation
$r_{T2}$	viskoser Parameter der Phasentransformation
$r^j$	Dissipationsparameter der Orientierung $j$
$R_u$	Residuum
$s$	spezifische Entropie (Kapitel 2)
$s$	Faktor für Funktion des Dissipationsparameters (Modell 1)
$t_1, t_2$	Zeitpunkte
$t$	Traktionsspannung
$t^*$	vorgegebene Traktionsspannung
$T$	allgemeiner Tensor
$u$	skalare Variable
$u$	allgemeiner Vektor (Kapitel 2.1)

$\mathbf{u}$	Verschiebung
$\mathbf{u}^*$	vorgegebene Verschiebung
$v$	skalare Variable
$\mathbf{v}$	allgemeiner Vektor (Kapitel 2.3)
$\mathbf{v}$	Geschwindigkeit (Kapitel 2.4)
$W$	Arbeit der nicht-konservativen Kräfte
$W_i$	Wichtungsfaktoren der Gauß-Quadratur
$x$	allgemeine Variable
$x_i$	Koordinaten des kartesischen Koordinatensystems
$\mathbf{x}$	physikalische Koordinaten
$y$	allgemeine Funktion
$Y_0$	plastische Fließgrenze

### Griechische Buchstaben und andere Symbole

$\alpha$	skalarer Faktor (Kapitel 2)
$\boldsymbol{\alpha}$	Set der Eulerwinkel
$\boldsymbol{\alpha}_i$	Startwerte der Eulerwinkel
$\boldsymbol{\alpha}^j$	Eulerwinkel der Orientierung $j$
$\beta$	Konsistenzparameter
$\beta^j$	Konsistenzparameter der Orientierung $j$
$\beta_T$	Konsistenzparameter zeitlich diskretisiert
$\beta_T^j$	Konsistenzparameter der Orientierung $j$ zeitlich diskretisiert
$\gamma$	Winkel
$\gamma_{\lambda i}, \gamma_{\rho i}, \bar{\gamma}_{\rho i}, \hat{\gamma}_{\rho}, \gamma_{Ti}^j$	Kuhn-Tucker-Parameter
$\Gamma$	Rand
$\Gamma_{\mathbf{u}}$	Dirichlet-Rand
$\Gamma_{\boldsymbol{\sigma}}$	Neumann-Rand
$\delta_{ij}$	Kronecker-Delta
$\Delta a$	Differenz Parameter zur Berechnung der kalorischen Energie
$\Delta b$	Differenz Parameter zur Berechnung der kalorischen Energie
$\Delta t$	Zeitinkrement
$\Delta t_P$	Parameter der viskosen Evolution
$\Delta t_R$	Parameter der viskosen Evolution der Eulerwinkel
$\Delta t_T$	Parameter der ratenabhängigen Phasentransformation
$\varepsilon$	skalare Dehnung
$\tilde{\varepsilon}$	Parameter des vorgegebenen Dehnungstensors
$\varepsilon_{\text{res}}$	bleibende Dehnung
$\varepsilon_{\text{res}}^I$	bleibenden Dehnung nach dem ersten Lastzyklus
$\varepsilon_{\text{res}}^{\text{konv}}$	konvergierte bleibenden Dehnung
$\boldsymbol{\varepsilon}$	Dehnungstensor
$\boldsymbol{\varepsilon}_{\text{el}}$	elastische Dehnung
$\boldsymbol{\varepsilon}_i$	Dehnungstensor der Phase $i$
$\boldsymbol{\varepsilon}_P$	plastische Dehnung
$\boldsymbol{\varepsilon}_{Pi}^j$	plastische Dehnung der Phase $i$ der Orientierung $j$
$\hat{\eta}$	Parameter zur Berechnung der Transformationsdehnung
$\eta_i$	skalare Transformationsdehnung der Phase $i$
$\boldsymbol{\eta}_i$	Transformationsdehnung der Phase $i$

$\eta_{\text{rot}i}$	rotierte Transformationsdehnung der Phase $i$
$\mathbf{H}$	Hencky-Dehnungstensor
$\mathbf{H}^j$	Hencky-Dehnungstensor der Orientierung $j$
$\mathbf{H}_*$	Transformationsdehnung (Hencky)
$\mathbf{H}_*^j$	Transformationsdehnung (Hencky) der Orientierung $j$
$\theta$	Temperatur
$\theta_M$	Mittelwert der Transformationstemperaturen
$\theta_R$	Referenztemperatur
$\vartheta$	Eulerwinkel
$\vartheta^j$	Eulerwinkel der Orientierung $j$
$\iota$	Lagrange-Parameter
$\kappa, \kappa_T^j, \kappa_{P_i}^j$	Lagrange-Parameter
$\lambda_0$	reversibler austenitischer Volumenanteil
$\lambda_{i>0}$	reversible Volumenanteile der Martensitvarianten
$\lambda$	reversible Volumenanteile
$\Lambda$	Hilfsvariable
$\mathbf{\Lambda}$	allgemeine interne Variable
$\hat{\nu}$	Parameter zur Berechnung der Transformationsdehnung
$\check{\nu}$	Parameter des vorgegebenen Dehnungstensors
$\nu_i$	Querkontraktion der Phase $i$
$\xi_i$	Koordinaten des natürlichen Koordinatensystems
$\xi$	Volumenanteile der Kornorientierungen
$\Xi$	Wert des Subdifferentials
$\rho$	HistorienvARIABLE
$\rho$	Dichte (Kapitel 2.4)
$\rho_0$	irreversibler austenitischer Volumenanteil
$\rho_{i>0}$	irreversible Volumenanteile der Martensitvarianten
$\rho_{\text{max}}$	maximaler absoluter irreversibler Volumenanteil
$\rho$	irreversible Volumenanteile
$\bar{\rho}$	absoluter irreversibler Volumenanteil
$\bar{\rho}^I$	absoluter irreversibler Volumenanteil nach erstem Zyklus
$\bar{\rho}_{\text{abs}}$	absoluter irreversibler Volumenanteil des Körpers
$\sigma_M, \sigma_m$	obere und untere Plateauspannung
$\sigma$	Spannungstensor
$\sigma^j$	Spannungstensor der Orientierung $j$
$\check{\tau}$	Parameter des vorgegebenen Dehnungstensors
$\nu_i$	irreversible Transformationsdehnung der Phase $i$
$\nu$	irreversible Dehnung
$\varphi$	Eulerwinkel
$\varphi^j$	Eulerwinkel der Orientierung $j$
$\varphi$	Feldvariable zur Regularisierung (Kapitel 3.2.1)
$\Phi$	Fließfunktion
$\Phi^j$	Fließfunktion der Orientierung $j$
$\Psi$	freie Helmholtz-Energie
$\Psi_0$	ursprüngliche freie Helmholtz-Energie
$\Psi_{\text{conv}}$	konvexe Hülle der freien Helmholtz-Energie
$\Psi_{\text{min}}$	nicht konvexe minimale freie Helmholtz-Energie
$\Psi_{\text{rel}}$	relaxierte freien Helmholtz-Energie
$\Psi_{\text{Taylor}}$	Energie mit Taylor-Energiegrenze

$\Psi_{VR}$	freie Helmholtz-Energie mit kombinierter Voigt/Reuß-Energiegrenze
$\Psi_{\lambda\varphi}$	Energie-Kopplungsterm zur Regularisierung
$\Psi_{\rho\theta}$	zusätzlicher Energieterm (Modell 3)
$\Psi_{\nabla\varphi}$	Energie-Gradiententerm zur Regularisierung
$\Psi_i$	freie Helmholtz-Energie der Phase $i$
$\omega$	Eulerwinkel
$\omega^j$	Eulerwinkel der Orientierung $j$
$\Omega$	Volumen
$\mathbf{\Omega}$	schief-symmetrischer Tensor der Winkelgeschwindigkeiten
$\mathbb{A}$	Steifigkeitstensor (Hencky)
$\mathbb{E}_i$	Steifigkeitstensor der Phase $i$
$\mathcal{A}^j$	aktive Menge der Orientierung $j$
$\mathcal{A}_\lambda$	aktive Menge der reversiblen Phasen
$\mathcal{A}_\rho$	aktive Menge der irreversiblen Phasen
$\mathcal{D}$	Dissipationsfunktion
$\mathcal{D}^*$	Legendre-Transformation der Dissipationsfunktion
$\mathcal{D}_{Ti}^*$	Terme innerhalb der Legendre-Transformation $\mathcal{D}_T^*$
$\mathcal{D}_R$	Dissipationsfunktion der Eulerwinkel
$\mathcal{D}_T$	Dissipationsfunktion der Phasentransformation
$\mathcal{E}$	innere Energie
$\mathcal{E}^3$	dreidimensionaler Euklidischer Vektorraum
$\mathcal{F}$	Funktional
$\mathcal{G}$	Gibbs-Energie
$\mathcal{H}$	absolute Entropieproduktion
$\mathcal{I}$	Energiefunktional
$\mathcal{K}$	kinetische Energie
$\mathcal{L}$	Lagrange-Funktion
$\mathcal{Q}$	thermische Leistung
$\mathcal{S}$	Entropiedichte
$\mathcal{W}$	mechanische Arbeit
$\dot{\mathcal{W}}$	mechanische Leistung

### Abkürzungen

FEM	Finite-Elemente-Methode
FGK	Formgedächtniskeramiken
FGL	Formgedächtnislegierungen
PMDP	Prinzip des Minimums des Dissipationspotentials
PVA	Prinzip der virtuellen Arbeit
TEM	Transmissionselektronenmikroskop

### Mathematische Operatoren

$\bar{(\cdot)}$	effektiver Wert
$\tilde{(\cdot)}$	Voigt-Notation

$\widetilde{(\cdot)}$	Mehrabadi-Cowin-Notation (Kapitel 2.1.1)
$\hat{(\cdot)}$	Knotenwerte einer Variable
$ (\cdot) $	Betrag einer Variablen, Länge eines Vektors
$(\cdot)'$	Rotation eines Tensors
$(\cdot)_+$	positiver Anteil einer Funktion
$(\cdot)_e$	elementbezogene Werte einer Variable
$(\cdot)^{GP}$	Gaußpunkt-bezogene Werte einer Variable
$(\cdot)^l$	vorheriger Lastschritt
$(\cdot)^{l+1}$	momentaner Lastschritt
$\frac{d(\cdot)}{d\mathbf{a}}$	absolute Ableitung nach $\mathbf{a}$
$\frac{d(\cdot)}{dt} = \dot{(\cdot)}$	zeitliche Ableitung
$\frac{\partial(\cdot)}{\partial\mathbf{a}}$	partielle Ableitung nach $\mathbf{a}$
$\delta(\cdot)$	Variation
$\partial(\cdot)$	nicht weiter spezifizierte partielle Ableitung
$\nabla$	Nabla-Operator
$\det$	Determinante
$\text{div}$	Divergenz
$\text{grad}$	Gradient
$\text{inf}$	Infimum
$\text{min}$	Minimum
$\text{sup}$	Supremum

# 1 Einleitung

Formgedächtnislegierungen werden für vielfältige industrielle Anwendungen genutzt. In der Medizintechnik bestehen beispielsweise kardiovaskuläre Implantate, wie Stents, und orthopädische Implantate, wie chirurgische Heftklammern und Knochenplatten, aus Formgedächtnislegierungen. Neben seiner Zugehörigkeit zur Gruppe der „intelligenten“ Werkstoffe und der damit verbundenen automatischen Anpassung an äußere Einflüsse, siehe z.B. Wagner (2005), liegt ein wesentlicher Vorteil dieses speziellen Werkstoffs in seiner guten Biokompatibilität, die ihn für die Nutzung in der Medizin befähigt. Des Weiteren kann der namensgebende Effekt des Formgedächtnis vor allem für kardiovaskuläre Eingriffe von Nutzen sein, da das jeweilige Implantat durch reines Erwärmen in seine gewünschte Form und Lage gebracht werden kann und so größere operative Eingriffe unnötig macht, siehe beispielsweise Machado u. Savi (2003). In Machado u. Savi (2003) wird ebenfalls eine detailliertere Erläuterung der medizinischen Anwendungsmöglichkeiten für Implantate, aber auch Instrumente gegeben. Eine deutlich weniger filigrane Anwendungsmöglichkeit wird hingegen in Song u. a. (2006) präsentiert. Darin wird die Nutzung von Nickeltitan basierten Formgedächtnislegierungen in Bauwerken vorgestellt, beispielsweise für Dämpfungselemente des Erdbebenschutzes. Das letzte an dieser Stelle genannte Anwendungsbeispiel umfasst die Nutzung in der Luft- und Raumfahrt, siehe Hartl u. Lagoudas (2007). So können zum Beispiel Torsionsrohre innerhalb der Tragflächen und Aktoren an Satelliten aus Formgedächtnislegierungen verwendet werden. Ein ausführlicher Überblick über weitere Einsatzmöglichkeiten des betrachteten Materials findet sich beispielsweise in Jani u. a. (2014) und Van Humbeeck (1999).

Eine Voraussetzung für die industrielle Anwendbarkeit ist eine genaue Kenntnis des Materialverhaltens von Formgedächtnislegierungen. Dieses Materialverhalten wird innerhalb jener außergewöhnlichen Klasse an Legierungen vor allem durch die diffusionslose Transformation zwischen einer austenitischen Phase und verschiedenen orientierten Martensitvarianten beeinflusst. Diese Mikrostrukturänderung kann sowohl durch aufgebrachte mechanische Beanspruchungen als auch thermisch induziert werden und ist verantwortlich für die später näher erläuterten maßgeblichen Effekte der Pseudoplastizität und Pseudoelastizität. Experimentelle Beobachtungen konnten jedoch zeigen, dass die Phasentransformation von irreversiblen Prozessen begleitet wird und das zyklische Belastungen somit einer funktionalen Degradierung der Materialeigenschaften unterliegen, siehe beispielsweise Eggeler u. a. (2004), Simon u. a. (2010) und Krooß u. a. (2015). Dieser Effekt wird als funktionale Ermüdung bezeichnet und im Rahmen dieser Arbeit basierend auf vorherigen variationellen Modellen zur Beschreibung der Phasentransformation in polykristallinen Formgedächtnislegierungen modelliert, siehe Hackl u. a. (2004a) und Junker (2014a).

Variationelle Methoden im Allgemeinen sind durch die Formulierung eines Energieterms gekennzeichnet, der – je nach gewählter Betrachtung der Dissipation durch die inneren mikrostrukturellen Prozesse – minimiert oder maximiert wird. Die dieser Arbeit zugrunde liegende Methode ist das Prinzip des Minimums des Dissipationspotentials. Sie ermöglicht die Herleitung von Evolutionsgleichungen für interne Variablen, die zur Beschreibung der mikrostrukturellen Änderungen eingeführt werden, und somit eine Vorhersage des Materialverhaltens. Im

Rahmen dieser Arbeit werden verschiedene Modellansätze präsentiert. Ergänzend zu einer internen Variable, die die reversible Phasentransformation beschreibt, wird je eine weitere interne Variable definiert, die zur Beschreibung der irreversiblen Prozesse und damit des Effekts der funktionalen Degradierung dient. Des Weiteren wird je nach betrachtetem Modell basierend auf Junker (2014a) eine interne Variable zur Berücksichtigung des polykristallinen Charakters der betrachteten Materialstruktur eingeführt.

Nach dieser kurzen Einleitung im ersten Kapitel wird in Kapitel 2 ein Überblick der in dieser Arbeit verwendeten mathematischen und mechanischen Grundlagen geliefert. Neben der Vorstellung verwendeter Notationen und grundsätzlicher mathematischer Begrifflichkeiten werden ebenso die für die Materialmodellierung besonders bedeutenden ersten beiden Hauptsätze der Thermodynamik eingeführt. Ausgehend von diesen Sätzen wird das Prinzip des Minimums des Dissipationspotentials für einen allgemeinen Fall vorgestellt und, anhand des Beispiels klassischer Plastizität, die Herleitung verschiedener Arten von Evolutionsgleichungen verdeutlicht und im Anschluss deren Unterschiede diskutiert. Abschließend wird zur methodischen Einordnung des verwendeten variationellen Prinzips dieses dem häufig innerhalb der Mechanik verwendeten Hamilton-Prinzip gegenübergestellt.

Darauf folgend liefert Kapitel 3 einen Einstieg in die werkstoffwissenschaftlichen Kenntnisse über Formgedächtnislegierungen und deren bisherige Umsetzung innerhalb der Materialmodellierung. Zunächst werden die grundlegenden Eigenschaften wie die Gitterstruktur der einzelnen Phasen und die Effekte der Pseudoelastizität und Pseudoplastizität vorgestellt, um im Anschluss daran die experimentellen Beobachtungen bezüglich der zyklischen mechanischen Beanspruchung und des damit verbundenen Effekts der funktionalen Ermüdung zu präsentieren. Des Weiteren wird innerhalb dieses Kapitels ein Überblick über die bisherigen Modellansätze für Formgedächtnislegierungen des *Lehrstuhls für Mechanik-Materialtheorie* an der *Ruhr-Universität Bochum* und darüber hinaus – zur Einordnung der geleisteten Arbeit in einen gesamtwissenschaftlichen Kontext – über andere Materialmodelle zur grundlegenden Modellierung von Formgedächtnislegierungen, aber auch zur Beschreibung des Effekts der funktionalen Degradierung präsentiert.

In Kapitel 4 werden drei wesentliche Modellansätze zur Beschreibung der simultan zur Phasentransformation stattfindenden Prozesse präsentiert. Dazu wird jeweils das bereits für den allgemeinen Fall präsentierte Prinzip der minimalen Dissipation auf das im vorherigen Abschnitt vorgestellte Materialverhalten angewendet und so Evolutionsgleichungen zur Vorhersage der funktionalen Ermüdung in polykristallinen Formgedächtnislegierungen hergeleitet. Der erste Modellansatz in Kapitel 4.1 wurde bereits in Waimann u. a. (2016) veröffentlicht und bildet die während der Transformation ablaufende plastische Deformation der jeweiligen Struktur ab. Die polykristalline Struktur wird zunächst durch die Betrachtung einzelner Körner und anschließend durch die in Junker (2014b) veröffentlichte repräsentative Orientierungsverteilungsfunktion verwirklicht. Diese wiederum aufgreifend erfolgt die Modellierung der funktionalen Degradierung im zweiten Materialmodell in Kapitel 4.2 durch die Unterteilung der Phasentransformation in einen reversiblen und einen irreversiblen Prozess. Diese Art der Modellierung wurde ebenso bereits in Waimann u. a. (2017) vorgestellt. Die zugehörige Herleitung erfolgt – wiederum die Überlegungen in Kapitel 2 aufgreifend – für zwei unterschiedliche Arten von Evolutionsgleichungen, ratenabhängigen bzw. ratenunabhängigen Typs. Neben der Präsentation des Berechnungsalgorithmus auf der Skala des Materialpunkts wird weiterhin eine Möglichkeit der experimentell basierten Kalibrierung der zur Beschreibung der funktionalen Ermüdung verwendeten Materialparameter vorgestellt. Als letztes Modell wird in Kapitel 4.3 ein weiteres Materialmodell präsentiert, das die Transformationshistorie des Materials speichert und so auch in der

Lage, ist die funktionale Ermüdung während des thermischen Zyklierens abzubilden.

Erste Ergebnisse für Berechnungen auf Materialpunktebene werden für die drei unterschiedlichen Modellansätze im Anschluss daran in Kapitel 5 vorgestellt. Die Simulationen bilden darin zyklische Zug- und Scherversuche ab. Darüber hinaus wird der Einfluss unterschiedlicher Umgebungstemperaturen und angenommener Kornorientierungen untersucht und ein erster Vergleich mit experimentellen Beobachtungen durchgeführt.

Um die Grundlage für makroskopische Berechnungen zu liefern, wird in Kapitel 6 eine kurze Einführung in die Finite-Elemente-Methode für nichtlineare Materialmodelle gegeben und gezeigt, wie die ersten beiden Materialmodelle innerhalb der Methode berücksichtigt werden können. Auf diese Ausführungen folgend werden in Kapitel 7 zahlreiche makroskopische Simulationen für die beiden Modellansätze präsentiert. Diesbezüglich erfolgt für das Beispiel des zyklisch beanspruchten Zugdrahts neben der Verwendung unterschiedlich feiner Netze eine Gegenüberstellung mit experimentellen Beobachtungen.

Die vorliegende Dissertation schließt mit einer Zusammenfassung und Diskussion der erhaltenen Ergebnisse sowie einem Ausblick auf weitere Modellerweiterungen und -untersuchungen in Kapitel 8.



## 2 Mathematische und mechanische Grundlagen

### 2.1 Verwendete Notation

In diesem Unterkapitel werden zur besseren Lesbarkeit der Arbeit die verwendeten Schreibweisen und Operationen vorgestellt. Die Ausführungen basieren dabei auf Altenbach u. Altenbach (1994), Gurtin u. a. (2010) und Willner (2003).

Ein Tensor wird hinsichtlich seiner Stufe eingeordnet: Ein Skalar stellt einen Tensor nullter Stufe, ein Vektor einen Tensor erster Stufe und eine Dyade einen Tensor zweiter Stufe dar. Unter dem Begriff Tensor versteht man im Allgemeinen eine lineare Abbildung. Im konkreten Fall eines Tensors zweiter Stufe  $\mathbf{T}$  und

$$\mathbf{v} = \mathbf{T}\mathbf{u} \quad (2.1)$$

stellt  $\mathbf{T}$  folglich die lineare Abbildung eines Vektors  $\mathbf{u}$  auf einen anderen Vektor  $\mathbf{v}$  dar, siehe Gurtin u. a. (2010). Tensoren lassen sich auf unterschiedliche Weise schreiben. Ein allgemeiner Tensor zweiter Stufe kann symbolisch als  $\mathbf{A}$  und in Matrixschreibweise als

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{pmatrix} \quad (2.2)$$

geschrieben werden. Die symbolische Schreibweise hat zwar den Vorteil sehr übersichtlich zu sein, ist für konkrete Rechenoperationen jedoch eher ungeeignet. Dazu wird an dieser Stelle die Basisdarstellung eines Tensors eingeführt. Ein allgemeiner Tensor des beispielsweise dreidimensionalen Euklidischen Vektorraums  $\mathcal{E}^3$  kann demnach als Linearkombination der die orthonormale Basis des Raumes aufspannenden Basisvektoren  $\mathbf{e}_1$ ,  $\mathbf{e}_2$  und  $\mathbf{e}_3$  dargestellt werden. Für einen Tensor erster Stufe bedeutet dies

$$\mathbf{a} = a_1\mathbf{e}_1 + a_2\mathbf{e}_2 + a_3\mathbf{e}_3 \quad (2.3)$$

oder im Fall eines Tensors zweiter Stufe

$$\mathbf{A} = \sum_i \sum_j A_{ij}\mathbf{e}_i\mathbf{e}_j. \quad (2.4)$$

An dieser Stelle wird nun des Weiteren die Einsteinsche Summenkonvention eingeführt. Diese schreibt vor, dass über einen innerhalb eines Ausdrucks zweimal auftretenden Index summiert werden muss. Es gilt also

$$a_i b_i = \sum_i a_i b_i = a_1 b_1 + a_2 b_2 + a_3 b_3, \quad (2.5)$$

was eine deutlich verkürzte Schreibweise ermöglicht. Mit Hilfe dieser Summationsvereinbarung lässt sich der allgemeine Tensor  $\mathbf{A}$  in Abhängigkeit der Basisvektoren  $\mathbf{e}_i$  und  $\mathbf{e}_j$  schreiben als

$$\mathbf{A} = A_{ij}\mathbf{e}_i\mathbf{e}_j. \quad (2.6)$$

Auch Tensoroperationen können durch die Notation in Basisvektoren dargestellt werden, wodurch vor allem Operationen mit Tensoren höherer Stufe deutlich übersichtlicher gestaltet werden. Die erste Operation, die Anwendung innerhalb dieser Arbeit findet, ist das einfache bzw. doppelte innere Produkt. Das innere Produkt zweier Tensoren erster Stufe  $\mathbf{a}$  und  $\mathbf{b}$  wird auch als Skalarprodukt bezeichnet und kann durch

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = |\mathbf{a}| |\mathbf{b}| \cos \angle [\mathbf{a}, \mathbf{b}] \quad (2.7)$$

berechnet werden, wobei  $\angle [\mathbf{a}, \mathbf{b}]$  den Winkel zwischen den beiden Tensoren darstellt und  $|(\cdot)|$  ihre Länge mit

$$|\mathbf{a}| = \sqrt{a_i a_i} . \quad (2.8)$$

Bevor nun das innere Produkt zweier allgemeiner Tensoren betrachtet wird, wird zunächst das Kronecker-Delta  $\delta_{ij}$  eingeführt. Dieses wird durch die Skalarmultiplikation zweier Basisvektoren berechnet. Die Länge dieser Vektoren der orthonormalen Basis ist jeweils 1 und die einzelnen Vektoren bilden ein Rechtssystem. Sie stehen folglich senkrecht zueinander. Der Winkel zwischen den einzelnen Basisvektoren angegeben in Bogenmaß ist demnach also 0 oder  $\Pi/2$  – je nachdem, ob gerade zwei gleiche oder zwei unterschiedliche Basisvektoren betrachtet werden. Das Kronecker-Delta liefert folglich für gleiche Indizes  $i$  und  $j$  den Wert 1 und für unterschiedliche Indizes den Wert 0. Es lässt sich schreiben:

$$\delta_{ij} = \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j = \begin{cases} 0 & \text{wenn } i \neq j \\ 1 & \text{wenn } i = j \end{cases} . \quad (2.9)$$

Das innere Produkt zweier Tensoren erster Stufe kann dann in Basisdarstellung mit Hilfe des Kronecker-Deltas durch

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = a_i \mathbf{e}_i \cdot b_j \mathbf{e}_j = a_i b_j \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j = a_i b_j \delta_{ij} = a_i b_i \quad (2.10)$$

und beispielsweise für einen Tensors zweiter Stufe  $\mathbf{A}$  mit einem Tensor erster Stufe  $\mathbf{b}$  durch

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{b} = A_{ij} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j \cdot b_k \mathbf{e}_k = A_{ij} b_k \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j \cdot \mathbf{e}_k = A_{ij} b_k \mathbf{e}_i \delta_{jk} = A_{ij} b_j \mathbf{e}_i \quad (2.11)$$

berechnet werden. Das doppelte innere Produkt existiert in zwei Varianten. Die jeweilige Multiplikation ergibt sich für zwei Tensoren zweiter Stufe zu

$$\mathbf{A} : \mathbf{B} = A_{ij} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j : B_{kl} \mathbf{e}_k \mathbf{e}_l = A_{ij} B_{kl} \delta_{ik} \delta_{jl} = A_{ij} B_{ij} \quad (2.12)$$

und

$$\mathbf{A} \cdot \cdot \mathbf{B} = A_{ij} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j \cdot \cdot B_{kl} \mathbf{e}_k \mathbf{e}_l = A_{ij} B_{kl} \delta_{il} \delta_{jk} = A_{ij} B_{ji} . \quad (2.13)$$

Sobald also mindestens einer der beiden Tensoren symmetrisch ist und entsprechend  $\mathbf{A} = \mathbf{A}^T$  und/oder  $\mathbf{B} = \mathbf{B}^T$ , gilt  $A_{ij} = A_{ji}$  und/oder  $B_{ij} = B_{ji}$  und die beiden Produkte liefern ein identisches Ergebnis.

Eine weitere im Rahmen dieser Arbeit bedeutende Tensoroperation ist das dyadische Produkt. Das dyadische Produkt wird in der symbolischen Schreibweise durch  $\otimes$  oder das einfache

Weglassen eines Multiplikationssymbols gekennzeichnet. Für zwei Tensoren erster Stufe kann es durch

$$\mathbf{a} \otimes \mathbf{b} = \mathbf{ab} = a_i b_j \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j \quad (2.14)$$

formuliert werden. Anders als das innere Produkt, was zur Minderung der Stufe des resultierenden Tensors führt, wird diese durch das dyadische Produkt erhöht.

Als besonderer Tensor wird abschließend der Nabla-Operator  $\nabla$  vorgestellt. Er ist als

$$\nabla := \frac{\partial}{\partial x_i} \mathbf{e}_i \quad (2.15)$$

definiert und enthält so die partiellen Ableitungen nach den jeweiligen Koordinaten  $x_i$ . Das innere Produkt des Nabla-Operators mit einem allgemeinen Tensor wird als Divergenz bezeichnet und berechnet sich im Fall eines Tensors erster Stufe durch

$$\operatorname{div} \mathbf{a} = \nabla \cdot \mathbf{a} = \frac{\partial a_i}{\partial x_i} . \quad (2.16)$$

Das dyadische Produkt des Operators mit einem Tensor wird als Gradient bezeichnet, für den Fall der Anwendung auf eine skalare Funktion  $f$  von  $\mathbf{x}$  ergibt sich

$$\operatorname{grad} f = \nabla f = \frac{\partial f}{\partial x_i} \mathbf{e}_i . \quad (2.17)$$

Der Gradient der skalaren Funktion ist somit ein Tensor erster Stufe, der die einzelnen Richtungsableitungen von  $f$  enthält.

### 2.1.1 Voigt- und Mehrabadi-Cowin-Notation

Um eine kompaktere Berechnung beispielsweise der Spannung  $\boldsymbol{\sigma}$  zu ermöglichen, werden die Voigt- und die Mehrabadi-Cowin-Notation eingeführt, siehe Mehrabadi u. Cowin (1990). Betrachtet man das Hookesche Gesetz

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbb{E} : \boldsymbol{\varepsilon} , \quad (2.18)$$

so handelt es sich bei dem Spannungstensor  $\boldsymbol{\sigma}$  und dem Dehnungstensor  $\boldsymbol{\varepsilon}$  um Tensoren zweiter Stufe:

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{pmatrix} , \quad \boldsymbol{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{pmatrix} . \quad (2.19)$$

Der Steifigkeitstensor  $\mathbb{E}$  ist ein Tensor vierter Stufe. Unter Ausnutzung der Symmetrie Eigenschaften des Spannungs- und Dehnungstensor,  $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$  bzw.  $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}$ , sowie des Steifigkeitstensors,  $\mathbb{E}_{ijklm} = \mathbb{E}_{jikm} = \mathbb{E}_{jimk} = \mathbb{E}_{kmji}$ , lässt sich das Hookesche Gesetz in Voigt-Notation schreiben als

$$\begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{13} \\ \sigma_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbb{E}_{11} & \mathbb{E}_{12} & \mathbb{E}_{13} & \mathbb{E}_{14} & \mathbb{E}_{15} & \mathbb{E}_{16} \\ \mathbb{E}_{12} & \mathbb{E}_{22} & \mathbb{E}_{23} & \mathbb{E}_{24} & \mathbb{E}_{25} & \mathbb{E}_{26} \\ \mathbb{E}_{13} & \mathbb{E}_{23} & \mathbb{E}_{33} & \mathbb{E}_{34} & \mathbb{E}_{35} & \mathbb{E}_{36} \\ \mathbb{E}_{14} & \mathbb{E}_{24} & \mathbb{E}_{34} & \mathbb{E}_{44} & \mathbb{E}_{45} & \mathbb{E}_{46} \\ \mathbb{E}_{15} & \mathbb{E}_{25} & \mathbb{E}_{35} & \mathbb{E}_{45} & \mathbb{E}_{55} & \mathbb{E}_{56} \\ \mathbb{E}_{16} & \mathbb{E}_{26} & \mathbb{E}_{36} & \mathbb{E}_{46} & \mathbb{E}_{56} & \mathbb{E}_{66} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ 2\varepsilon_{23} \\ 2\varepsilon_{13} \\ 2\varepsilon_{12} \end{pmatrix} . \quad (2.20)$$

Bei der Voigt-Notation handelt es sich um eine weitverbreitete Matrixschreibweise. Die Mehrbadi-Cowin-Notation ist eine tensorielle Schreibweise, die angewendet werden muss, wenn die Steifigkeit  $\mathbb{E}$  beispielsweise in eine bestimmte Kornorientierung gedreht wird. Diese Art der Notation stellt sicher, dass die tensoriellen Eigenschaften der einzelnen Größen erhalten bleiben. Das Hookesche Gesetz lässt sich in Mehrbadi-Cowin-Notation durch

$$\begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sqrt{2}\sigma_{23} \\ \sqrt{2}\sigma_{13} \\ \sqrt{2}\sigma_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbb{E}_{11} & \mathbb{E}_{12} & \mathbb{E}_{13} & \sqrt{2}\mathbb{E}_{14} & \sqrt{2}\mathbb{E}_{15} & \sqrt{2}\mathbb{E}_{16} \\ \mathbb{E}_{12} & \mathbb{E}_{22} & \mathbb{E}_{23} & \sqrt{2}\mathbb{E}_{24} & \sqrt{2}\mathbb{E}_{25} & \sqrt{2}\mathbb{E}_{26} \\ \mathbb{E}_{13} & \mathbb{E}_{23} & \mathbb{E}_{33} & \sqrt{2}\mathbb{E}_{34} & \sqrt{2}\mathbb{E}_{35} & \sqrt{2}\mathbb{E}_{36} \\ \sqrt{2}\mathbb{E}_{14} & \sqrt{2}\mathbb{E}_{24} & \sqrt{2}\mathbb{E}_{34} & 2\mathbb{E}_{44} & 2\mathbb{E}_{45} & 2\mathbb{E}_{46} \\ \sqrt{2}\mathbb{E}_{15} & \sqrt{2}\mathbb{E}_{25} & \sqrt{2}\mathbb{E}_{35} & 2\mathbb{E}_{45} & 2\mathbb{E}_{55} & 2\mathbb{E}_{56} \\ \sqrt{2}\mathbb{E}_{16} & \sqrt{2}\mathbb{E}_{26} & \sqrt{2}\mathbb{E}_{36} & 2\mathbb{E}_{46} & 2\mathbb{E}_{56} & 2\mathbb{E}_{66} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ \sqrt{2}\varepsilon_{23} \\ \sqrt{2}\varepsilon_{13} \\ \sqrt{2}\varepsilon_{12} \end{pmatrix} \quad (2.21)$$

ausdrücken. Gegenüber der ursprünglichen Schreibweise in Gleichung (2.18) handelt es sich bei dem Spannungs- und Dehnungstensor nur noch um Tensoren erster Stufe und bei dem Steifigkeitstensor lediglich um einen Tensor zweiter Stufe. Im Rahmen dieser Arbeit wird die Mehrbadi-Cowin-Notation für den ersten präsentierten Modellansatz verwendet, wenn der Steifigkeitstensor  $\mathbb{E}$  in die einzelnen Kornorientierungen gedreht wird. Wird der ursprüngliche Steifigkeitstensor vierter Stufe  $\mathbb{E}$  mit Hilfe des Rotationstensors

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} Q_{11} & Q_{12} & Q_{13} \\ Q_{21} & Q_{22} & Q_{23} \\ Q_{31} & Q_{32} & Q_{33} \end{pmatrix} \quad (2.22)$$

gedreht, kann diese Operation durch

$$\mathbb{E}'_{mnop} = Q_{qm}Q_{rn}Q_{so}Q_{tp}\mathbb{E}_{qrst} \quad (2.23)$$

geschrieben werden. In Mehrbadi-Cowin-Notation hat der Rotationstensor die Gestalt:

$$\begin{aligned} & \tilde{\mathbf{Q}}_{\text{MC}}(\mathbf{Q}) \\ & = \begin{pmatrix} Q_{11}^2 & Q_{12}^2 & Q_{13}^2 & \sqrt{2}Q_{12}Q_{13} & \sqrt{2}Q_{11}Q_{13} & \sqrt{2}Q_{11}Q_{12} \\ Q_{21}^2 & Q_{22}^2 & Q_{23}^2 & \sqrt{2}Q_{22}Q_{23} & \sqrt{2}Q_{21}Q_{23} & \sqrt{2}Q_{22}Q_{21} \\ Q_{31}^2 & Q_{32}^2 & Q_{33}^2 & \sqrt{2}Q_{33}Q_{32} & \sqrt{2}Q_{33}Q_{31} & \sqrt{2}Q_{31}Q_{32} \\ \sqrt{2}Q_{21}Q_{31} & \sqrt{2}Q_{22}Q_{32} & \sqrt{2}Q_{23}Q_{33} & Q_{22}Q_{33} + Q_{23}Q_{32} & Q_{21}Q_{33} + Q_{31}Q_{23} & Q_{21}Q_{32} + Q_{31}Q_{22} \\ \sqrt{2}Q_{11}Q_{31} & \sqrt{2}Q_{12}Q_{32} & \sqrt{2}Q_{13}Q_{33} & Q_{12}Q_{33} + Q_{32}Q_{13} & Q_{11}Q_{33} + Q_{13}Q_{31} & Q_{11}Q_{32} + Q_{31}Q_{12} \\ \sqrt{2}Q_{11}Q_{21} & \sqrt{2}Q_{12}Q_{22} & \sqrt{2}Q_{13}Q_{23} & Q_{12}Q_{23} + Q_{22}Q_{13} & Q_{11}Q_{23} + Q_{21}Q_{13} & Q_{11}Q_{22} + Q_{21}Q_{12} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.24)$$

und die Rotation des Steifigkeitstensors  $\mathbb{E}_{\text{MC}}$  erfolgt durch

$$\tilde{\mathbb{E}}_{\text{MC}} = \tilde{\mathbf{Q}}_{\text{MC}}^{\text{T}} \cdot \tilde{\mathbb{E}}_{\text{MC}} \cdot \tilde{\mathbf{Q}}_{\text{MC}} \quad (2.25)$$

Detailliertere Ausführungen zu den einzelnen Notationen können Mehrbadi u. Cowin (1990) entnommen werden.

## 2.2 Der Begriff des Funktionals und seine Variation

Während eine Funktion einen Zahlenwert auf einen anderen abbildet, beschreibt der Begriff Funktional die Abbildung einer Funktion auf einen Zahlenwert. Ein Beispiel hierfür ist die

Berechnung der Länge einer Funktion  $f(x)$  durch

$$\mathcal{F}[f(x)] = \int_{x_0}^{x_1} \sqrt{1 + \left(\frac{df(x)}{dx}\right)^2} dx. \quad (2.26)$$

Das Funktional  $\mathcal{F}$  ordnet somit – unabhängig von der Art der eingesetzten Funktion  $f$  – dieser einen Zahlenwert bzw. die skalare Größe der Länge zu. Des Weiteren wird nun im Zusammenhang der Funktionale der Begriff der Homogenität eingeführt, der aber gleichsam auch für Funktionen gilt. Ein Funktional  $\mathcal{F}[f(x)]$  ist genau dann homogen  $k$ ten Grades, wenn die Gleichung

$$\mathcal{F}[f(\alpha x)] = \alpha^k \mathcal{F}[f(x)] \quad (2.27)$$

erfüllt wird. Die Variable  $\alpha$  in Gleichung (2.27) stellt darin eine beliebige skalare Größe dar, siehe beispielsweise in Willner (2003).

Werden nun Minima und Maxima eines Funktionals gesucht, so wird die Bestimmung dieser Extrema als Variationsrechnung bezeichnet. Detaillierte Ausführungen zur Variationsrechnung finden sich z.B. in Elsgolc (1970), Kielhöfer (2010) und Lanczos (1970).

In nachfolgenden Kapiteln wird das Minimum eines Funktionals gesucht. Da aufgrund der Beschaffenheit des später eingeführten Funktionals kein Maximum vorliegen kann, reicht es aus, den stationären Punkt zu berechnen ohne weitere Bedingungen an diesen zu stellen. Im Zusammenhang eines Funktionals bedeutet der Begriff Minimum, dass die Funktion  $f(x)$  gesucht wird, für die das Funktional  $\mathcal{F}[f(x)]$  den kleinsten Wert liefert.

In diesem Sinne wird zunächst der Begriff der Gâteaux-Differenzierbarkeit eingeführt. Ein Funktional  $\mathcal{F}[f(x)]$  ist genau dann in  $\bar{f}$  und Richtung  $\delta f$  Gâteaux-differenzierbar, wenn

$$D\mathcal{F}(\bar{f})(\delta f) = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{\mathcal{F}[\bar{f} + \alpha \delta f] - \mathcal{F}[\bar{f}]}{\alpha} \quad (2.28)$$

existiert. Ist die Gâteaux-Ableitung und somit die Variation des Funktionals  $\delta\mathcal{F}$  in alle möglichen Richtungen  $\delta f$  null

$$D\mathcal{F}(\bar{f})(\delta f) = \delta\mathcal{F} = 0 \quad \forall \delta f \quad (2.29)$$

so heißt  $\bar{f}$  stationärer Punkt von  $\mathcal{F}$  und das Funktional ist extremal, siehe hierzu beispielsweise Kielhöfer (2010) und Willner (2003).

## 2.3 Legendre-Transformation

Die Legendre-Transformation ermöglicht im Allgemeinen das Ersetzen einer Ausgangsfunktion  $F(u_1, \dots, u_N)$  durch eine Funktion  $G(v_1, \dots, v_N)$  verbunden mit einem Variablenwechsel von  $\mathbf{u} = \{u_1, \dots, u_N\}$  zu  $\mathbf{v} = \{v_1, \dots, v_N\}$ . Diese Variablen können ineinander transformiert werden und auch die beiden Funktionen sind unter später genauer spezifizierten Voraussetzungen in beide Richtungen ineinander umwandelbar. Detaillierte Ausführungen zur Legendre-Transformation finden sich beispielsweise in Lanczos (1970), Kielhöfer (2010) und Rockafellar u. Wets (1998).

Zum genaueren Verständnis des Transformationsvorgangs wird zunächst die Funktion

$$f = (u - 2)^2 \quad (2.30)$$

betrachtet und eine neue Variable  $v$  eingeführt, die die partielle Ableitung der Ausgangsfunktion  $f$  nach  $u$  beschreibt:

$$v = \frac{\partial f}{\partial u} = 2(u - 2) . \quad (2.31)$$

Durch Umformen von Gleichung (2.31) kann nun die Ausgangsvariable  $u$  als Funktion der neuen Variable  $v$  geschrieben werden:

$$u = \frac{1}{2}v + 2 . \quad (2.32)$$

Nachfolgend wird eine neue Funktion  $f^*$  eingeführt. Diese hat die allgemeine Form

$$\begin{aligned} f^* &= \sum_i u_i v_i - f \\ &= \sum_i u_i(v_i) v_i - f(u_i(v_i)) \end{aligned} \quad (2.33)$$

und ist somit eine Funktion der neuen Variablen  $v_i$ . Geometrisch betrachtet kann  $f^*$  auch als Achsenabschnitt einer Tangente an die Funktion  $f$  an der Stelle  $u$  betrachtet werden. Dabei wird der Achsenabschnitt jedoch nicht als Funktion der Stelle  $u$  ausgedrückt, sondern als Funktion der Steigung  $v$  der Tangente, siehe hierzu Abbildung 2.1. Für die untersuchte Funktion lässt sich  $f^*(v)$  dann schreiben als

$$\begin{aligned} f^* &= u(v)v - f(u(v)) \\ &= \left(\frac{1}{2}v + 2\right)v - \left(\frac{1}{2}v + 2 - 2\right)^2 \\ &= \frac{1}{4}v^2 + 2v . \end{aligned} \quad (2.34)$$

Wird diese neue Funktion nun schließlich – äquivalent zum Vorgehen bei der Ausgangsfunktion jedoch diesmal nach der neuen Variable – abgeleitet, so ergibt sich die Ausgangsvariable  $u$ :

$$\frac{\partial f^*}{\partial v} = \frac{1}{2}v + 2 = u . \quad (2.35)$$

In Abbildung 2.1 werden sowohl die Ausgangsfunktion  $f(u)$  (*links*) als auch ihre Legendre-Transformation  $f^*(v)$  (*rechts*) dargestellt. Die Betrachtung der Stelle  $u = 5$  verdeutlicht darin exemplarisch die geltenden Zusammenhänge. Für diese Stelle ist der Wert der Legendre-Transformation bei  $v(5)$  durch den Achsenabschnitt der Tangente an  $f$  bei  $u = 5$  gegeben. Umgekehrt entspricht der Achsenabschnitt der Tangente von  $f^*$  an der Stelle  $v(5)$  dem Wert der Ausgangsfunktion bei  $u(v(5)) = 5$ . Beide Funktionen lassen sich folglich durch die gleiche Vorgehensweise in einander transformieren. Damit diese Transformationen jedoch eindeutig sind und somit sowohl  $f^*$  die Legendre-Transformierte von  $f$  als auch umgekehrt  $f$  die Legendre-Transformierte von  $f^*$  ist, müssen zwei Bedingungen erfüllt sein: zum einen muss die Ausgangsfunktion stetig differenzierbar sein, damit es überhaupt möglich ist ihre Ableitung

zu bilden; zum anderen muss diese Ableitung eindeutig nach der Ausgangsvariable umgeformt werden können. Bei trigonometrischen Funktionen oder anderen Funktionen mit mehreren Extrema kann der partiellen Ableitung und somit der Steigung der Funktion keine eindeutige Stelle zugeordnet werden. Daher ist die Transformation nur umkehrbar, wenn die Ausgangsfunktion konvex ist.

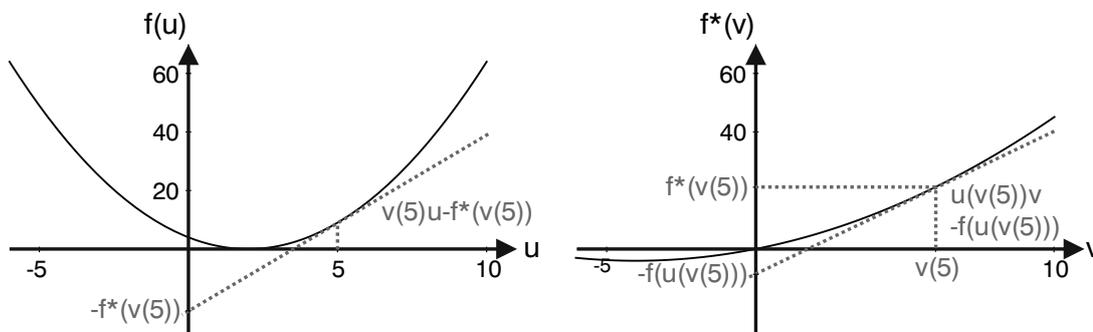


Abbildung 2.1: Legendre-Transformation: Ausgangsfunktion  $f(u)$  (links), Funktion  $f^*(v)$  (rechts).

Im allgemeineren Fall der Legendre-(Fenchel)-Transformation ist die transformierte Funktion als

$$f^*(v) := \sup_u \{u \cdot v - f(u)\} \quad (2.36)$$

definiert, wobei aufgrund der Übersichtlichkeit auf die symbolische Schreibweise zurückgegriffen wird, vergleiche Gleichung (2.33). Wird die neu eingeführte Variable  $v$  wieder als partielle Ableitung bzw. Steigung der Ausgangsfunktion  $f(u)$  betrachtet, so ist die Zuordnung der neuen und alten Variable für allgemeine und somit auch nicht-konvexe Funktionen nicht eindeutig. Geometrisch betrachtet ist es somit im Fall einer nicht-konvexen Funktion möglich, für den gleichen Wert von  $v$  unterschiedliche Funktionswerte von  $f^*$  zu berechnen, siehe Abbildung 2.2. Durch Erweiterung der Gleichung in (2.36) um das Supremum bzgl. der Ausgangsvariable wird die Eindeutigkeit der auch als konvex-konjugiert bezeichneten Funktion sichergestellt. Dies geschieht jedoch auf Kosten der Umkehrbarkeit der Legendre-Transformation im Fall einer nicht-konvexen Funktion, siehe Lanczos (1970) und Kielhöfer (2010).

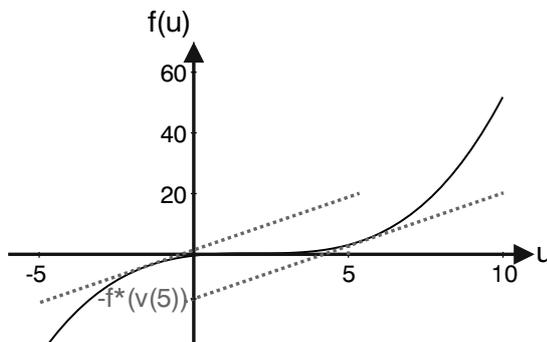


Abbildung 2.2: Legendre-Transformation einer nicht-konvexen Funktion.

## 2.4 Erster und zweiter Hauptsatz der Thermodynamik

Sowohl das für die Modellierung der funktionalen Ermüdung verwendete Prinzip des Minimums des Dissipationspotentials als auch das vergleichend herangezogene Hamilton-Prinzip beinhalten die später erläuterte thermodynamische Triebkraft. Beide Methoden resultieren in Materialmodellen, die, auch wenn sie nicht explizit auf die Hauptsätze der Thermodynamik zurückgreifen, diese dennoch erfüllen. Daher werden an dieser Stelle der erste und zweite Hauptsatz vorgestellt. Detaillierte Ausführungen hierzu finden sich in Demtröder (2017), Müller (2016) und Gurtin u. a. (2010).

Der erste Hauptsatz der Thermodynamik beschreibt die Energieerhaltung eines Systems

$$\dot{\mathcal{E}} + \dot{\mathcal{K}} = \dot{\mathcal{W}} + \mathcal{Q}. \quad (2.37)$$

Der Energiezustand eines Systems wird darin mit Hilfe der inneren Energie  $\mathcal{E}$  und der kinetischen Energie  $\mathcal{K}$  beschrieben. Diese Energie kann sich nur durch dem System zugeführte oder entzogene Wärme oder die Arbeit äußerer mechanischer Kräfte ändern. Diese Änderung wird durch die Rate der jeweiligen Größen erfasst, die mit  $(\dot{\cdot})$  gekennzeichneten Größen meinen die Ableitung nach der Zeit. Wird dem System keine Energie zugeführt, bleibt die Energie konstant und die zeitliche Änderung ist somit null.

Die thermische Leistung  $\mathcal{Q}$  kann durch

$$\mathcal{Q} = - \int_{\Gamma} \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} \, dA + \int_{\Omega} h \, dV \quad (2.38)$$

berechnet werden und berücksichtigt sowohl den Wärmestrom  $\mathbf{q}$ , der über den Rand  $\Gamma$  der betrachteten Region in das System fließt, als auch eine Wärmequelle  $h$ . Die Größe  $\mathbf{n}$  symbolisiert den Normalenvektor, der senkrecht auf dem Rand  $\Gamma$  steht. Durch Anwendung des Gaußschen Integralsatzes kann der Ausdruck (2.38) auch in der Form

$$\mathcal{Q} = - \int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{q} \, dV + \int_{\Omega} h \, dV \quad (2.39)$$

geschrieben werden.

Bei den externen mechanischen Kräften wird zwischen Volumenkräften  $\mathbf{f}$  und Randlasten unterschieden. Die mechanische Leistung  $\dot{\mathcal{W}}$  dieser äußeren Lasten wird durch

$$\dot{\mathcal{W}} = \int_{\Gamma} \mathbf{t} \cdot \mathbf{v} \, dA + \int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} \, dV \quad (2.40)$$

berechnet. Darin verkörpert  $\mathbf{v}$  die Geschwindigkeit bzw. die zeitliche Ableitung der Verschiebung  $\mathbf{u}$ , da  $\mathbf{v} = \dot{\mathbf{u}}$  gilt. Basierend auf der Cauchy-Hypothese, werden die Randlasten durch den Traktionsvektor beschrieben, der durch  $\mathbf{t} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}$  berechnet werden kann. Es handelt sich somit um den Anteil der Spannung  $\boldsymbol{\sigma}$ , der senkrecht auf den Rand wirkt. Wird des Weiteren die Impulsbilanz

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{f} = \rho \ddot{\mathbf{u}} \quad (2.41)$$

genutzt, so kann  $\dot{\mathcal{W}}$  durch

$$\dot{\mathcal{W}} = \int_{\Omega} \frac{d}{dt} \left( \frac{1}{2} \rho |\mathbf{v}|^2 \right) \, dV + \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\epsilon}} \, dV \quad (2.42)$$

berechnet werden. Folglich kann die Energiezufuhr durch äußere mechanische Lasten in einen Anteil aufgeteilt werden, der direkt zur Beschleunigung des Körpers führt und somit die kinetische Energie beeinflusst, und einen Anteil, der durch Änderung des Dehnungszustandes die innere Energie des Systems angeht.

Die kinetische Energie wird durch

$$\mathcal{K} = \int_{\Omega} \frac{1}{2} \rho |\mathbf{v}|^2 dV \quad (2.43)$$

beschrieben. Die innere Energie eines Körpers mit Volumen  $\Omega$  kann mit Hilfe von

$$\mathcal{E} = \int_{\Omega} \Psi dV + \int_{\Omega} \theta s dV \quad (2.44)$$

berechnet werden. Darin ist  $\Psi$  die freie Helmholtz-Energie und  $\theta$  die absolute Temperatur, für die  $\theta \geq 0$  K gilt. Die thermodynamische Größe  $s$  ist als spezifische Entropie definiert. Für die Interpretation der Entropie im physikalischen Kontext gibt es in der Literatur verschiedene Ansätze, beispielsweise von Gurtin u. a. (2010), Demtröder (2017) und Müller (2016). Während in Gurtin u. a. (2010) die Entropie als Maß der Unordnung innerhalb eines Systems verstanden wird, die aus der auf den Einfluss der Wärme zurückzuführenden Fluktuation der Atome resultiert, interpretiert Demtröder (2017) sie als Maß für die Wahrscheinlichkeit, dass ein System von einem in den anderen Zustand wechselt. Diese Wahrscheinlichkeit ist proportional zu der Anzahl der möglichen Wege den jeweiligen Zustand zu erreichen. Eine weitere Möglichkeit der physikalischen Deutung der Größe Entropie wird in Müller (2016) präsentiert. Darin trifft die Entropie eine Aussage über die Verfügbarkeit von Energie bzw. deren Qualität. Umso weniger Energie des Systems wieder nutzbar ist, desto höher ist die Entropie. Sie beschreibt somit in gewissem Maße irreversible Prozesse innerhalb des betrachteten Systems. Aufgrund dieser Unumkehrbarkeit der Prozesse innerhalb eines Materials kann der zweite Hauptsatz der Thermodynamik formuliert werden, der besagt, dass die Entropie immer nur wachsen kann und ihre zeitliche Änderung daher immer positiv sein muss.

Zunächst wird jedoch der erste Hauptsatz weiter betrachtet. Dazu werden die Ausdrücke (2.39), (2.42), (2.43) und (2.44) in die Bilanzgleichung (2.37) eingesetzt und diese Gleichung schließlich weiter vereinfacht. Weiterhin gilt der Hauptsatz für jedes beliebig kleine Volumen und lässt sich daher in seiner lokalen Form schreiben. Die Umformung ergibt schließlich:

$$\dot{\Psi} + \frac{d}{dt}(\theta s) + \frac{d}{dt} \left( \frac{1}{2} \rho |\mathbf{v}|^2 \right) = \frac{d}{dt} \left( \frac{1}{2} \rho |v|^2 \right) + \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} - \nabla \cdot \mathbf{q} + h \quad (2.45)$$

$$\dot{\Psi} + \dot{\theta} s + \theta \dot{s} = \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} - \nabla \cdot \mathbf{q} + h . \quad (2.46)$$

Der zweite Hauptsatz der Thermodynamik schreibt nun die oben genannte Nichtnegativität der absoluten Entropieproduktion  $\mathcal{H}$  vor:

$$\mathcal{H} = \int_{\Omega} \left( \dot{s} + \nabla \cdot \frac{\mathbf{q}}{\theta} - \frac{h}{\theta} \right) dV \geq 0 . \quad (2.47)$$

Diese Entropieproduktion ergibt sich aus der inneren Entropieproduktion abzüglich des Entropieflusses über die Grenzen des betrachteten Volumens, der in Gleichung (2.47) mit Hilfe des Wärmestroms und einer Wärmequelle sowie der absoluten Temperatur als Proportionalitätsfaktor beschrieben wird, vergleiche Gleichung (2.39). Diesem letzteren Zusammenhang liegt die

Hypothese zu Grunde, dass Entropie und Wärme in die gleiche Richtung fließen, wobei die Temperatur die Größe des Entropieflusses beeinflusst. Höhere Temperaturen führen somit bei gleichem Wärmestrom zu einem geringeren Entropiefluss als niedrigerer Wert für  $\theta$ . Die absolute innere Energieproduktion  $\dot{s}$  muss also mindestens so groß sein wie der Verlust durch den Energiefluss. Da der zweite Hauptsatz für beliebig kleine Volumina erfüllt sein muss, lässt er sich in der lokalen Form

$$\begin{aligned} \mathcal{S} &= \dot{s} + \nabla \cdot \frac{\mathbf{q}}{\theta} - \frac{h}{\theta} \\ &= \dot{s} + \frac{1}{\theta} \nabla \cdot \mathbf{q} - \frac{1}{\theta^2} \mathbf{q} \cdot \nabla \theta - \frac{h}{\theta} \geq 0 \end{aligned} \quad (2.48)$$

ausdrücken, wobei  $\mathcal{S}$  die Entropiedichte beschreibt.

Wird der erste Hauptsatz (2.46) nun nach  $h$  umgeformt und in (2.48) eingesetzt, so ergibt sich durch Umformung schließlich für den zweiten Hauptsatz:

$$\theta \mathcal{S} = -\frac{1}{\theta} \mathbf{q} \cdot \nabla \theta - \dot{\Psi} - \dot{\theta} s + \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} \geq 0. \quad (2.49)$$

In (2.49) wird der erste Teil  $\theta \mathcal{S}$  als Dissipation bezeichnet und beschreibt die Energie, die während der Belastung des Körpers beispielsweise durch die Änderung der Mikrostruktur oder thermische Einflüsse in nicht mehr nutzbare Energie umgewandelt wird. Der zweite Teil wird auch als Clausius-Duhem-Ungleichung bezeichnet.

Wird der zweite Hauptsatz der Thermodynamik nun unter Berücksichtigung einer allgemeinen internen Variable  $\Lambda$  – hier exemplarisch ein Tensor erster Stufe – interpretiert, so hat diese zunächst einmal einen Einfluss auf die freie Energie. Es gilt folglich  $\Psi = \Psi(\boldsymbol{\varepsilon}, \theta, \Lambda)$  und die Rate der freien Energie kann mit Hilfe der Kettenregel durch

$$\dot{\Psi} = \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} + \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \dot{\theta} + \frac{\partial \Psi}{\partial \Lambda} \cdot \dot{\Lambda} \quad (2.50)$$

berechnet werden. Wird (2.50) nun in (2.49) eingesetzt so kann

$$-\frac{1}{\theta} \mathbf{q} \cdot \nabla \theta + \left( \boldsymbol{\sigma} - \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} \right) : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} - \left( s + \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \right) \dot{\theta} - \frac{\partial \Psi}{\partial \Lambda} \cdot \dot{\Lambda} \geq 0 \quad (2.51)$$

geschrieben werden. Überlegungen nach Coleman u. Noll (1963) folgend kann diese Gleichung weiter interpretiert werden: Durch die Tatsache, dass durch den Wärmestrom ein entgegengerichteter Temperaturgradient resultiert und somit

$$\mathbf{q} \sim -\nabla \theta \quad (2.52)$$

gilt, ist der erste Summand automatisch positiv. Des Weiteren muss die Ungleichung auch ohne Existenz einer internen Variable und für einen isothermen Zustand sowie auch für eine konstante Dehnung erfüllt werden. Demnach lassen sich Spannung und Entropie mit Hilfe des zweiten und dritten Summanden von (2.51) durch

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}, \quad s = -\frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \quad (2.53)$$

ermitteln. Als Resultat bleibt schließlich die Gleichung

$$-\frac{\partial \Psi}{\partial \Lambda} \cdot \dot{\Lambda} \geq 0, \quad (2.54)$$

die zur Definition der thermodynamischen Triebkraft durch

$$-\frac{\partial \Psi}{\partial \Lambda} = P \quad (2.55)$$

führt. Diese Kraft gibt somit auch an, in welche Richtung die Änderung der internen Variable erfolgt.

## 2.5 Prinzip des Minimums des Dissipationspotentials

Effekte wie Plastizität, Schädigung oder Phasenumwandlungen werden anhand einer veränderten Mikrostruktur des jeweils betrachteten Materials deutlich. Beschrieben wird der Zustand dieser Struktur durch interne Variablen, wie beispielsweise plastische Dehnungen, Schädigungsmaße oder Volumenanteile einzelner Phasen. Ziel eines Materialmodells ist die Vorhersage der Entwicklung dieser Mikrostruktur und somit der internen Variablen infolge einer Belastung des Materials sowie der damit verbundenen nicht-linearen Spannungsantwort des Materials.

Das Prinzip des Minimums des Dissipationspotentials (PMDP) ist eine energiebasierte Methode zur Bestimmung von Evolutionsgleichungen für die internen Variablen. Die Methode bietet den Vorteil einer leichten Einbeziehung von zu erfüllenden Nebenbedingungen. Es kann des Weiteren gezeigt werden, dass die Methode mit dem Hamilton-Prinzip für nicht-konservative Kontinua und eine Energie, die nicht von dem Gradienten der internen Variable abhängt, übereinstimmt, siehe Kapitel 2.7.

Das Prinzip der Dissipationsminimierung wurde ausführlichst in Carstensen u. a. (2002), Ortiz u. Repetto (1999) und Hackl u. Fischer (2008) präsentiert sowie schließlich in Junker u. a. (2014) für nicht-isotherme Problemstellungen erweitert. Ausgangspunkt ist die Formulierung einer Lagrange-Funktion  $\mathcal{L}$  für ein Material, dessen Mikrostruktur durch eine allgemeine interne Variable  $\Lambda$  beschrieben wird, die hier die Dimension eines Tensors erster Stufe hat. Die Lagrange-Funktion besteht im wesentlichen aus zwei Komponenten: aus der Rate der freien Helmholtz-Energie  $\dot{\Psi}$  und einer Dissipationsfunktion  $\mathcal{D}$ . Sie kann geschrieben werden als

$$\mathcal{L} := \dot{\Psi} + \mathcal{D} . \quad (2.56)$$

Die Funktion  $\mathcal{D}$  gibt an, wie viel Energie durch die Änderung der Mikrostruktur dissipiert. Aufgrund des zweiten Hauptsatzes der Thermodynamik (2.49) ist die einzige Bedingung für  $\mathcal{D}$ , dass die Dissipationsfunktion für alle Änderungen der Mikrostruktur und somit für jede zulässige Änderung der internen Variable  $\dot{\Lambda}$  einen nicht negativen Wert annimmt, d.h.

$$\mathcal{D} \geq 0 \quad \forall \Lambda, \dot{\Lambda} . \quad (2.57)$$

Die Wahl des Ansatzes von  $\mathcal{D}$  entscheidet über die Art der Evolution der internen Variable  $\Lambda$  und es können beispielsweise homogene Funktionen ersten oder zweiten Grades gewählt werden.

Der Ansatz nach von Mises

$$\mathcal{D} = r_1 \left| \dot{\Lambda} \right| \quad (2.58)$$

mit  $r_1$  als Dissipationsparameter, ist homogen ersten Grades (vergl. Gleichung (2.27)) und resultiert in einer ratenunabhängigen Evolution der internen Variable  $\Lambda$ . Wie in späteren Ausführungen im nächsten Unterkapitel 2.6 gezeigt wird, stellt der Dissipationsparameter eine Fließgrenze

bzw. eine Energiebarriere dar, die überwunden werden muss, damit die ratenunabhängige Mikrostrukturänderung beginnen kann. Der zweite betrachtete Ansatz mit viskosem Parameter  $r_2$

$$\mathcal{D} = \frac{r_2}{2} \left| \dot{\Lambda} \right|^2 \quad (2.59)$$

ist homogen zweiten Grades. Die mit Hilfe dieser Dissipationsfunktion erhaltenen Entwicklungsgleichungen sind viskosen Typs und somit zeit- bzw. ratenabhängig. Eine Kombination beider Ansätze

$$\mathcal{D} = r_1 \left| \dot{\Lambda} \right| + \frac{r_2}{2} \left| \dot{\Lambda} \right|^2 \quad (2.60)$$

führt zu Evolutionsgleichungen elasto-viskoplastischer Art.

Die Rate der freien Helmholtz-Energie in Gleichung (2.56) kann durch Anwendung der Kettenregel berechnet werden und lässt sich unter Verwendung der Definition der thermodynamischen Triebkraft in Gleichung (2.55) schreiben als

$$\dot{\Psi} = \frac{\partial \Psi}{\partial \Lambda} \cdot \dot{\Lambda} = -P \cdot \dot{\Lambda} . \quad (2.61)$$

Verglichen mit (2.50) entfallen an dieser Stelle die Terme bezüglich der Rate der primären Variablen  $\varepsilon$  und  $\theta$ , da diese bei der Lösung des Minimierungsproblems bezüglich der Rate der internen Variable keinen Einfluss ausüben und daher – zwecks einer kompakteren Schreibweise – direkt vernachlässigt werden können. Zur Berechnung der Evolutionsgleichungen der Mikrostruktur wird die Lagrange-Funktion nun bezüglich der Rate der internen Variable minimiert. Dabei können, wie bereits erwähnt, besonders leicht Nebenbedingungen berücksichtigt werden. Dies geschieht im Fall von zu erfüllenden Gleichungen durch Lagrange-Parameter und im Fall von Ungleichungen mit Hilfe von Kuhn-Tucker-Parametern. Diese zusätzlichen Bestandteile der Lagrange-Funktion werden durch den Summanden  $\text{cons}$  berücksichtigt. Das Minimierungsproblem lässt sich somit insgesamt schreiben durch

$$\mathcal{L} = \dot{\Psi}(\varepsilon, \theta, \Lambda) + \mathcal{D}(\Lambda, \dot{\Lambda}) + \text{cons} \rightarrow \min_{\Lambda} , \quad (2.62)$$

worin die Abhängigkeit der Energie von der Dehnung  $\varepsilon$  und der Temperatur  $\theta$  berücksichtigt wird. Prinzipiell muss, um den gefundenen Punkt eindeutig als Minimum zu identifizieren, die zweite Ableitung überprüft werden. Dieser Schritt kann jedoch vernachlässigt werden, da die vorgegebene konvexe Energiefunktion keine Maxima zulässt. Der zusätzliche Anteil  $\text{cons}$  für die Nebenbedingungen sorgt dafür, dass der zu minimierende Ausdruck bei Nichteinhaltung der Bedingungen durch Addition eines Summanden bestraft wird. Die Minimierung des Ausdrucks gewährleistet somit automatisch, dass diese erfüllt werden. Im Fall erster Ordnung homogener Dissipationsfunktionen kann die Fließfunktion durch die Betrachtung der Legendre-Transformation von  $\mathcal{D}$  bestimmt werden. Dies wird im Detail in Kapitel 4 gezeigt.

## 2.6 Gegenüberstellung elasto-plastischen, visko-elastischen und elasto-viskoplastischen Materialverhaltens

Wie bereits erwähnt, bestimmen die im vorherigen Abschnitt 2.5 vorgestellten Dissipationsfunktionen (2.58)-(2.60), welcher Art die resultierenden Evolutionsgleichungen sind. Die in

Kapitel 4 vorgestellten Materialmodelle zur Bestimmung der funktionalen Ermüdung in Formgedächtnislegierungen beinhalten verschiedene Ansätze für die Dissipation. Um die Art der resultierenden Evolutionsgleichungen besser nachvollziehen zu können, wird in diesem Unterkapitel das Beispiel der Plastizität betrachtet. Zur Beschreibung der Mikrostruktur wird die plastische Dehnung  $\varepsilon_P$  eingeführt. Des Weiteren werden zunächst die entsprechenden Evolutionsgleichungen für eine elasto-plastische, eine viskose und eine elasto-viskoplastische Entwicklung von  $\varepsilon_P$  hergeleitet, um daran den Unterschied zwischen den verschiedenen Arten der Evolution zu verdeutlichen, siehe für vertiefende Informationen auch Wriggers (2013) und Lubliner (1972). Zur besseren Übersichtlichkeit wird an dieser Stelle auf die Berücksichtigung der Volumenerhaltung als Nebenbedingung verzichtet.

Für den Fall auftretender plastischer Effekte kann die elastische Dehnung  $\varepsilon_{el}$  aus der Differenz der totalen Dehnung  $\varepsilon$  abzüglich der plastischen Dehnung berechnet werden. Dadurch wird die freie Helmholtz-Energie durch den Ausdruck

$$\Psi = \frac{1}{2} (\varepsilon - \varepsilon_P) : \mathbb{E} : (\varepsilon - \varepsilon_P) \quad (2.63)$$

beschrieben, worin der Tensor  $\mathbb{E}$  die Materialsteifigkeit darstellt. Die Triebkraft der plastischen Dehnung kann mithilfe von Gleichung (2.55) berechnet werden. Der resultierende Ausdruck

$$\mathbf{P} = -\frac{\partial \Psi}{\partial \varepsilon_P} = \mathbb{E} : (\varepsilon - \varepsilon_P) = \boldsymbol{\sigma} \quad (2.64)$$

entspricht der Spannung  $\boldsymbol{\sigma}$ .

Wird im ersten Beispiel nun ein erster Ordnung homogener Ansatz für die Dissipationsfunktion gemäß Gleichung (2.58) gewählt

$$\mathcal{D} = r_1 |\dot{\varepsilon}_P|, \quad (2.65)$$

so kann die Lagrange-Funktion aufgestellt und schließlich minimiert werden:

$$\mathcal{L} = -\mathbf{P} : \dot{\varepsilon}_P + r_1 |\dot{\varepsilon}_P| \rightarrow \min_{\dot{\varepsilon}_P}. \quad (2.66)$$

Die Ableitung der Dissipationsfunktion  $\mathcal{D}$  ergibt aufgrund der gesuchten Ableitung einer Betragsfunktion das Subdifferential

$$\frac{\partial \mathcal{D}}{\partial \dot{\varepsilon}_P} = \begin{cases} r_1 \frac{\dot{\varepsilon}_P}{|\dot{\varepsilon}_P|} & \dot{\varepsilon}_P \neq \mathbf{0} \\ \mathbb{E}, |\mathbb{E}| < r_1 & \dot{\varepsilon}_P = \mathbf{0} \end{cases}, \quad (2.67)$$

so dass für alle  $\dot{\varepsilon}_P \neq \mathbf{0}$

$$-\mathbf{P} + r_1 \frac{\dot{\varepsilon}_P}{|\dot{\varepsilon}_P|} = \mathbf{0} \quad (2.68)$$

geschrieben werden kann. Durch Umformung ergibt sich schließlich die elasto-plastische Evolutionsgleichung

$$\dot{\varepsilon}_P = \beta \mathbf{P} \quad (2.69)$$

mit dem Konsistenzparameter  $\beta = |\dot{\varepsilon}_P|/r_1$ . Zur Bestimmung der Fließfunktion wird des Weiteren die Legendre-Transformation

$$\mathcal{D}^* = \sup_{\dot{\varepsilon}_P} \{\mathbf{P} : \dot{\varepsilon}_P - r_1 |\dot{\varepsilon}_P|\} \quad (2.70)$$

betrachtet. Durch Einsetzen der Evolutionsgleichung der plastischen Dehnung (2.69) und Umformung der Gleichung, kann der Ausdruck

$$\mathcal{D}^* = \sup_{\dot{\epsilon}_P} \left\{ \frac{|\dot{\epsilon}_P|}{r_1} (\mathbf{P} : \mathbf{P} - r_1^2) \right\} \quad (2.71)$$

geschrieben werden. Der erste Faktor – der Konsistenzparameter  $\beta$  – ist automatisch  $\geq 0$ . Damit die Funktion weiterhin beschränkt bleibt, muss für den Klammerterm

$$\Phi = \mathbf{P} : \mathbf{P} - r_1^2 \leq 0 \quad (2.72)$$

gelten. Er wird des Weiteren als Fließfunktion  $\Phi$  mit dem Dissipationsparameter  $r_1$  als Fließgrenze bezeichnet und es ergeben sich folglich die Kuhn-Tucker-Bedingungen

$$\beta \geq 0, \quad \Phi \leq 0, \quad \beta\Phi = 0. \quad (2.73)$$

Das Spannungs-Dehnungs-Diagramm und die Evolution der plastischen Dehnung in Abbil-

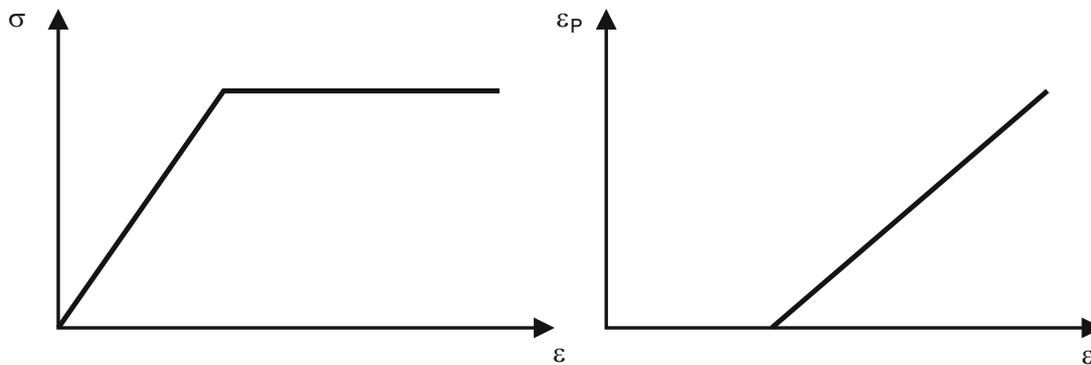


Abbildung 2.3: Spannungs-Dehnungs-Diagramm und Evolution der plastischen Dehnung bei elasto-plastischer Evolution der plastischen Dehnungen.

Abbildung 2.3 zeigen qualitativ das resultierende Materialverhalten. Die Spannungen steigen bis zum Erreichen der Fließgrenze  $r_1$  linear an und bleiben dann durch die lineare Entwicklung plastischer Dehnungen konstant. Im Spannungs-Dehnungs-Diagramm bildet sich ein deutliches Spannungsplateau.

Der zweiten Ordnung homogene Ansatz der Dissipationsfunktion (2.59), hier

$$\mathcal{D} = \frac{r_2}{2} |\dot{\epsilon}_P|^2, \quad (2.74)$$

liefert durch Minimierung der Lagrange-Funktion die visko-elastische Evolutionsgleichung

$$\dot{\epsilon}_P = \frac{1}{r_2} \mathbf{P}, \quad (2.75)$$

wobei  $r_2$  nun als viskoser Parameter bezeichnet werden kann. Anders als in dem vorherigen elasto-plastischen Ansatz kommt es durch das viskose Materialverhalten zu einer kontinuierlichen Evolution der plastischen Dehnung, die schon von Beginn an einen Einfluss auf die Spannungsentwicklung hat und diese dämpft, siehe Abbildung 2.4. Das Materialverhalten ist somit stark abhängig von der Wahl des viskosen Parameters und der Zeitdiskretisierung.

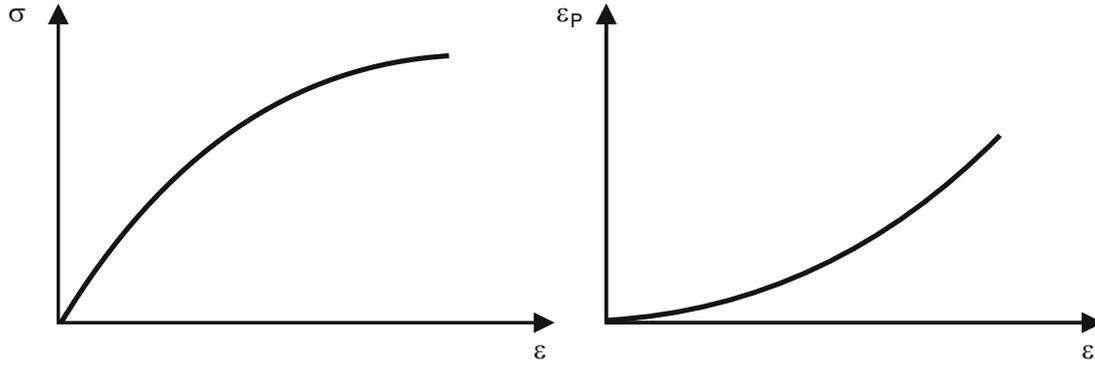


Abbildung 2.4: Spannungs-Dehnungs-Diagramm und Evolution der plastischen Dehnung bei viskoser Evolution der plastischen Dehnungen.

Der gemischte Ansatz (2.60) hat für das betrachtete Problem schließlich die Form

$$\mathcal{D} = r_1 |\dot{\epsilon}_P| + \frac{r_2}{2} |\dot{\epsilon}_P|^2 . \quad (2.76)$$

Die Minimierung der Lagrange-Funktion liefert

$$-\mathbf{P} + r_1 \frac{\dot{\epsilon}_P}{|\dot{\epsilon}_P|} + r_2 \dot{\epsilon}_P = \mathbf{0} \quad (2.77)$$

und ergibt durch Umformung die Evolutionsgleichung

$$\dot{\epsilon}_P = \frac{1}{r_2} \left( \mathbf{P} - r_1 \frac{\dot{\epsilon}_P}{|\dot{\epsilon}_P|} \right) . \quad (2.78)$$

Es wird die Annahme getroffen, dass die normierte Rate der plastischen Dehnung der normierten Triebkraft entspricht

$$\frac{\dot{\epsilon}_P}{|\dot{\epsilon}_P|} = \frac{\mathbf{P}}{|\mathbf{P}|} , \quad (2.79)$$

da auf Grundlage des zweiten Hauptsatzes der Thermodynamik, siehe Gleichungen (2.54) und (2.55), die Evolution der internen Variable in Richtung der Triebkraft stattfindet. Damit ergibt sich durch Umformung von Gleichung (2.78) schließlich die elasto-viskoplastische Evolutionsgleichung

$$\begin{aligned} \dot{\epsilon}_P &= \frac{1}{r_2} \left( \mathbf{P} - r_1 \frac{\mathbf{P}}{|\mathbf{P}|} \right) \\ &= \frac{1}{r_2} (|\mathbf{P}| - r_1) \frac{\mathbf{P}}{|\mathbf{P}|} . \end{aligned} \quad (2.80)$$

Äquivalent zu dem Vorgehen bei dem elasto-plastischen Materialverhalten wird die Legendre-Transformation der Dissipationsfunktion betrachtet:

$$\mathcal{D}^* = \sup_{\dot{\epsilon}_P} \left\{ \mathbf{P} : \dot{\epsilon}_P - r_1 |\dot{\epsilon}_P| - \frac{r_2}{2} |\dot{\epsilon}_P|^2 \right\} . \quad (2.81)$$

Durch Umformung von Gleichung (2.77) und anschließendes Einsetzen ergibt sich

$$\begin{aligned}
 \mathcal{D}^* &= \sup_{\dot{\epsilon}_P} \left\{ \frac{|\dot{\epsilon}_P|}{r_1} \left( \mathbf{P} : (\mathbf{P} - r_2 \dot{\epsilon}_P) - r_1^2 \right) - \frac{r_2}{2} |\dot{\epsilon}_P|^2 \right\} \\
 &= \sup_{\dot{\epsilon}_P} \left\{ \underbrace{\frac{|\dot{\epsilon}_P|}{r_1} (\mathbf{P} : \mathbf{P} - r_1^2)}_{\geq 0} - \underbrace{\frac{|\dot{\epsilon}_P|}{r_1} \mathbf{P} : r_2 \dot{\epsilon}_P}_{\leq 0} - \underbrace{\frac{r_2}{2} |\dot{\epsilon}_P|^2}_{\leq 0} \right\}, \quad (2.82)
 \end{aligned}$$

woraus sich die Fließfunktion

$$\Phi = \mathbf{P} : \mathbf{P} - r_1^2 \quad (2.83)$$

ableiten lässt. Damit lässt sich die Evolutionsgleichung schließlich schreiben als

$$\dot{\epsilon}_P = \frac{1}{r_2} \Phi_+ \frac{\mathbf{P}}{|\mathbf{P}|}. \quad (2.84)$$

Die Notation  $\Phi_+$  gibt an, dass falls die Fließfunktion negativ ist, diese den Wert 0 zurückliefert und somit keine Evolution der plastischen Dehnung stattfindet. Es wird folglich nur mit dem positiven Anteil von  $\Phi$  gerechnet.

Die Auswirkungen der elasto-viskoplastischen Evolution von  $\epsilon_P$  werden anhand von Abbildung 2.5 deutlich. Dargestellt werden die Kurven des ratenabhängigen Modells für unterschiedlich große Schrittweiten und somit Belastungsgeschwindigkeiten. Der viskose Parameter sowie die maximale Belastung sind für beide Kurven gleich. Wenn die Schrittweite in entsprechender Höhe gewählt wird, kann eine Kurve ähnlich der des elasto-plastischen Materials erreicht werden (*schwarze Kurve*). Erfolgt die Lastaufbringung in sehr kurzer Zeit und dementsprechend mit einer relativ großen Schrittweite, so reicht die viskose Entwicklung der internen Variable nicht aus, einen weiteren Anstieg der Spannung zu verhindern. Die Spannung wächst somit trotz überschrittener Fließgrenze weiter an (*graue Kurve*).

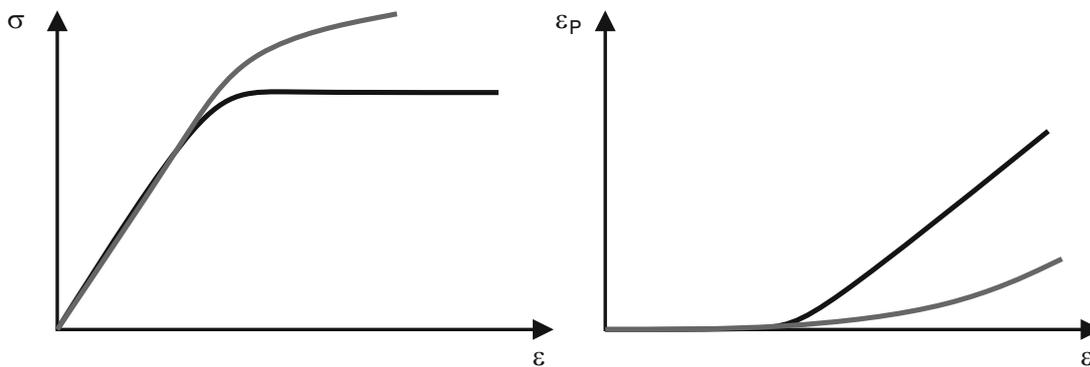


Abbildung 2.5: Spannungs-Dehnungs-Diagramm und Evolution der plastischen Dehnung bei elasto-viskoplastischer Evolution der plastischen Dehnungen.

Diese Charakteristik der elasto-viskoplastischen Evolution wird auch anhand von Abbildung 2.6 deutlich. Die Richtung der Evolution wird in beiden Fällen durch die thermodynamische Triebkraft  $P$  vorgegeben. Bei elasto-plastischem Materialverhalten und nicht Einhal-

ten der Fließbedingung  $\Phi \leq 0$  sorgt der Konsistenzparameter  $\beta$  dafür, dass die interne Variable so berechnet wird, dass die Fließgrenze wieder exakt eingehalten wird. Bei der elasto-viskoplastischen Evolution erfolgt die Entwicklung der internen Variable zwar auch in Richtung der Triebkraft, jedoch wird die Größe der Evolution durch das Zeitinkrement  $\Delta t$  und den viskosen Parameter bestimmt, hier zusammengefasst in  $\Delta t_p = \Delta t/r$ . Ist das Zeitinkrement  $\Delta t$  zu klein und erfolgt die Lastaufbringung somit sehr schnell, so reicht die Entwicklung der internen Variable nicht aus, damit die Fließgrenze wieder eingehalten wird und die Spannung ist zu hoch. Verglichen mit der elasto-plastischen Evolution kann die ratenabhängige Entwicklung vor allem durch geringere Berechnungszeiten überzeugen.

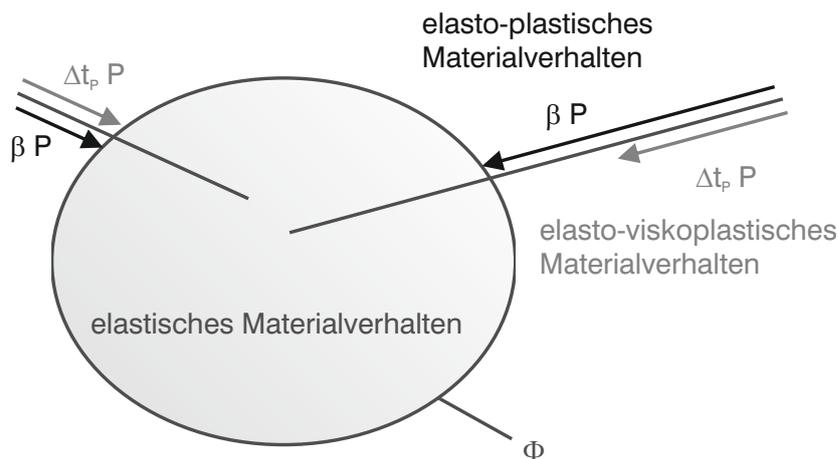


Abbildung 2.6: Einhaltung der Fließfunktion bei elasto-plastischem und elasto-viskoplastischen Materialverhalten.

## 2.7 Gegenüberstellung des Prinzips des Minimums des Dissipationspotentials und des Hamilton-Prinzips

Die Ausführungen zum Hamilton-Prinzip basieren im Wesentlichen auf Junker (2016), wo sich auch detailliertere Informationen sowie Anwendungsbeispiele für die erstmals in Hamilton (1834) und Hamilton (1835) vorgestellte Methode finden lassen. Das Hamilton-Prinzip basiert auf dem Prinzip der virtuellen Arbeit, siehe beispielsweise Bruhns (2003) und Reddy (2002), und kann auch in die Lagrangesche Bewegungsgleichung überführt werden, siehe z.B. Bedford (1985). Ein Material, dessen Mikrostruktur sich in einer solchen Art entwickelt, dass dadurch ein Teil der Energie dissipiert, wird als nicht-konservativ bezeichnet. Für nicht-konservative Kontinua wird der stationäre Punkt eines Energiefunktional  $\mathcal{I}$  gesucht. Dieses Funktional setzt sich aus der Differenz der kinetischen Energie  $\mathcal{K}$ , der Gibbs-Energie  $\mathcal{G}$  und der Arbeit  $W$  der nicht-konservativen Kräfte zusammen. Das stationäre Problem lässt sich somit mit Hilfe der Gâteaux-Ableitung als

$$\delta \mathcal{I} = \int_{t_1}^{t_2} (\delta \mathcal{K} - \delta \mathcal{G} + \delta W) dt = 0 \quad \forall \delta \mathbf{u}, \delta \Lambda \quad (2.85)$$

schreiben und gilt für alle Variationen der primären Variablen – hier der Verschiebungen  $\mathbf{u}$  – und der internen Variablen  $\Lambda$ , siehe Bedford (1985). Die kinetische Energie  $\mathcal{K}$  kann Gleichung

(2.43) entnommen werden. Jedoch wird sie aufgrund der Beschränkung auf quasi-statische Probleme innerhalb dieser Arbeit vernachlässigt. Die Gibbs-Energie lässt sich durch

$$\mathcal{G} = \int_{\Omega} \Psi \, dV - \int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \mathbf{u} \, dV - \int_{\Gamma} \mathbf{t} \cdot \mathbf{u} \, dA \quad (2.86)$$

berechnen. Sie setzt sich folglich aus einem Anteil der inneren Energie zusammen, der sich durch Integration der freien Energie ergibt, sowie einem Anteil, der durch die Wirkung äußerer Kräfte entsteht, siehe hierzu auch Lubliner (2008). Dieser zweite Anteil entspricht der mechanischen Arbeit der konservativen Kräfte, die eine direkte Änderung der Gibbs-Energie bewirkt. Im Gegensatz dazu erfolgt die Berücksichtigung der nicht-konservativen Kräfte durch  $W$ . Die dissipativen Prozesse werden mithilfe der internen Variablen  $\Lambda$  beschrieben. Des Weiteren wird in Junker (2016) an dieser Stelle wiederum eine Dissipationsfunktion  $\mathcal{D}$  [vergleiche Kapitel 2.5] verwendet, deren Ableitung nach der Rate der internen Variable  $\Lambda$  die dissipative Kraft  $\tilde{\mathbf{P}}$  ergibt:

$$\tilde{\mathbf{P}} = -\frac{\partial \mathcal{D}}{\partial \dot{\Lambda}}. \quad (2.87)$$

Die Größe  $\tilde{\mathbf{P}}$  entspricht dann der Kraft, die „entlang“ der internen Variable Arbeit verrichtet und so die Umwandlung der Energie in beispielsweise nicht mehr nutzbare Wärmeenergie bewirkt. Die Arbeit der nicht-konservativen Kräfte ist somit durch

$$W := \int_{\Omega} \tilde{\mathbf{P}} \cdot \Lambda \, dV \quad (2.88)$$

gegeben.

Unter der Voraussetzung eines quasi-statischen Problems und der Annahme, dass die Gibbs-Energie nun nicht nur von dem Verschiebungsfeld  $\mathbf{u}$ , sondern auch von der internen Variable  $\Lambda$  abhängt, kann das Hamilton-Prinzip aus Gleichung (2.85) umformuliert werden zu

$$-\delta \mathcal{G}(\mathbf{u}, \Lambda) + \delta W(\Lambda, \dot{\Lambda}) = 0 \quad \forall \delta \mathbf{u}, \delta \Lambda. \quad (2.89)$$

Das Anwenden der Variation auf die einzelnen Energieterme (2.86) und (2.88) ergibt

$$\delta \mathcal{G} = \int_{\Omega} \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{u}} \cdot \delta \mathbf{u} \, dV + \int_{\Omega} \frac{\partial \Psi}{\partial \Lambda} \cdot \delta \Lambda \, dV - \int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \delta \mathbf{u} \, dV - \int_{\Gamma} \mathbf{t} \cdot \delta \mathbf{u} \, dA \quad (2.90)$$

$$\delta W = \int_{\Omega} \tilde{\mathbf{P}} \cdot \delta \Lambda \, dV. \quad (2.91)$$

Diese Ausdrücke lassen sich anschließend in Gleichung (2.89) einsetzen, die für alle Variationen  $\delta \mathbf{u}$  und  $\delta \Lambda$  erfüllt sein muss. Da diese unabhängig voneinander sind, kann eine separate Betrachtung erfolgen und es ergeben sich die beiden Gleichungen:

$$-\int_{\Omega} \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{u}} \cdot \delta \mathbf{u} \, dV + \int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \delta \mathbf{u} \, dV + \int_{\Gamma} \mathbf{t} \cdot \delta \mathbf{u} \, dA = 0 \quad (2.92)$$

$$-\int_{\Omega} \frac{\partial \Psi}{\partial \Lambda} \cdot \delta \Lambda \, dV + \int_{\Omega} \tilde{\mathbf{P}} \cdot \delta \Lambda \, dV = 0. \quad (2.93)$$

Der erste Ausdruck ist bekannt als Prinzip der virtuellen Arbeit. Die zweite Gleichung muss für jedes beliebig kleine Volumen und alle möglichen  $\delta\Lambda$  erfüllt sein. Es lässt sich somit unter Berücksichtigung der Definition der dissipativen Kraft (2.87)

$$\frac{\partial\Psi}{\partial\Lambda} + \frac{\partial\mathcal{D}}{\partial\dot{\Lambda}} = \mathbf{0} \quad (2.94)$$

schreiben. Umgestellt und unter Anwendung der Definition der thermodynamischen Triebkraft  $\mathbf{P}$  aus Gleichung (2.55) folgt die Biot-Gleichung

$$\frac{\partial\mathcal{D}}{\partial\dot{\Lambda}} = \mathbf{P} . \quad (2.95)$$

Wird für die Dissipationsfunktionen nun eine der Gleichungen aus dem vorherigen Kapitel 2.5 verwendet, ergibt sich beispielsweise für den erster Ordnung homogenen Ansatz aus Gleichung (2.58) das Subdifferential

$$\frac{\partial\mathcal{D}}{\partial\dot{\Lambda}} = \begin{cases} r_1 \frac{\dot{\Lambda}}{|\dot{\Lambda}|} & \dot{\Lambda} \neq \mathbf{0} \\ \Xi, |\Xi| < r_1 & \dot{\Lambda} = \mathbf{0} \end{cases} \quad (2.96)$$

und die Evolutionsgleichung der allgemeinen internen Variable  $\Lambda$  kann schließlich in Abhängigkeit des Konsistenzparameter  $\beta = |\dot{\Lambda}|/r_1$

$$\dot{\Lambda} = \beta\mathbf{P} \quad \text{für } \dot{\Lambda} \neq \mathbf{0} \quad (2.97)$$

geschrieben werden. Die resultierende Evolutionsgleichung ist elasto-plastischen Typs und entspricht der im vorherigen Kapitel 2.6 mit Hilfe des PMDP am konkreten Fall der Plastizität hergeleiteten Evolutionsgleichung (2.69).

Das eigentliche Ziel ist der Vergleich zwischen PMDP und Hamilton-Prinzip. Wie im vorangegangenen Kapitel 2.5 ausführlich beschrieben, sieht das PMDP eine Minimierung der Lagrange-Funktion vor, siehe Gleichung (2.62), und somit

$$-\mathbf{P} \cdot \dot{\Lambda} + \mathcal{D} \rightarrow \min_{\dot{\Lambda}} . \quad (2.98)$$

Wird nun die erste Ableitung nach der Rate der internen Variable  $\dot{\Lambda}$  gebildet, ergibt sich

$$-\mathbf{P} + \frac{\partial\mathcal{D}}{\partial\dot{\Lambda}} = \mathbf{0} . \quad (2.99)$$

Das Prinzip des Minimums des Dissipationspotentials stimmt folglich mit dem Hamilton-Prinzip für nicht-konservative Kontinua überein, falls die Gibbs-Energie nicht von dem Gradienten der internen Variable abhängt.



## 3 Materialeigenschaften von Formgedächtnislegierungen und deren Berücksichtigung in anderen Materialmodellen

Formgedächtnislegierungen (FGL) sind aufgrund der Komplexität ihres Materialverhaltens Thema zahlreicher vergangener, aber auch aktueller Studien. In dem ersten Unterkapitel 3.1 wird zunächst eine kurze Einführung zu Formgedächtnislegierungen gegeben und es werden so die herausragenden experimentell beobachteten Eigenschaften von FGL vorgestellt. Neben der Vorstellung der wesentlichen Eigenschaften wird dabei besonders auf den in der vorliegenden Arbeit modellierten Effekt der funktionalen Ermüdung eingegangen. Anschließend wird in den nachfolgenden Unterkapiteln ein kurzer Überblick über die bisherigen Arbeiten am *Lehrstuhl für Mechanik-Materialtheorie* an der *Ruhr-Universität Bochum* sowie über Modellierungsansätze anderer Forschungsgruppen gegeben. Aufgrund der zahlreichen existierenden wissenschaftlichen Untersuchungen ist es weniger Ziel, einen Komplettüberblick zu liefern, als viel mehr einen Einblick in andere Herangehensweisen zu bieten, um so das dieser Arbeit zu Grunde liegende Modell in den wissenschaftlichen Kontext einordnen, aber auch von anderen Materialmodellen abgrenzen zu können.

### 3.1 Materielle Besonderheiten von Formgedächtnislegierungen

Experimentelle Abhandlungen, wie beispielsweise Otsuka u. Ren (2005), Otsuka u. Wayman (1999) und insbesondere bezüglich der funktionalen Ermüdung von FGL Eggeler u. a. (2004), Wagner (2005), Simon u. a. (2010) und Krooß u. a. (2015), liefern einen detaillierten Überblick über das außergewöhnliche Materialverhalten von FGL und dienen als Grundlagen dieses Unterkapitels.

Maßgeblich das namensgebende Formgedächtnis und die Superelastizität machen Formgedächtnislegierungen zu interessanten Materialien für die industrielle Anwendung. Zuerst entdeckt in der Legierung Au-47.5 At.-% Cd, konnten diese Eigenschaften in zahlreichen weiteren Legierungen nachgewiesen werden, siehe für eine detaillierte Übersicht Lagoudas (2008), Otsuka u. Wayman (1999) und Wei u. a. (1998). Demnach existieren beispielsweise kupferbasierte Legierungen, die sich vor allem durch eine hohe elektrische und thermische Leitfähigkeit und eine große Verformbarkeit auszeichnen, sowie maßgeblich preisgünstige eisenhaltige Formgedächtnislegierungen. Die hinsichtlich ihrer Attraktivität für die industrielle Nutzung überzeugteste FGL ist jedoch Nickeltitan (NiTi). NiTi verfügt über herausragende Eigenschaften bezüglich seiner Duktilität und Festigkeit und ist zudem noch sehr korrosionsbeständig. Ein Nachteil und somit Motivation für intensive Forschungen im Bereich der Fe-basierten FGL ist jedoch der hohe Preis von NiTi. Neben den entsprechenden Legierungen verfügen weiterhin auch gewisse Keramiken und Polymere, wie z.B. Gummi, über ein Formgedächtnis. Der Effekt der scheinbaren Erinnerung an ihre ursprüngliche Form kann in manchen der sogenannten Formgedächtniskeramiken (FGK) durch ein elektrisches Feld initiiert werden, was eine sehr schnelle Transformation ermöglicht. FGK zeichnen sich allerdings vor allem durch ihre potentielle Einsatzfähigkeit bei relativ hohen Temperaturen verglichen mit den FGL aus, die jedoch

gleichzeitig auf deutlich geringere Dehnungen beschränkt ist, siehe Otsuka u. Wayman (1999) und Wei u. a. (1998).

Zurückzuführen sind die Effekte des Formgedächtnis und der Superelastizität in FGL auf eine im Material stattfindende diffusionslose Festkörpertransformation zwischen der bei relativ hohen Temperaturen stabilen austenitischen und der bei niedrigeren Temperaturen stabilen Phase Martensit, siehe Otsuka u. Wayman (1999). Im Folgenden wird nun das Atomgitter für die Formgedächtnislegierung NiTi betrachtet. Die diffusionslose Phasenumwandlung findet in dieser speziellen Legierung zwischen der Hochtemperaturphase Austenit und zwölf verschiedenen Martensitvarianten statt. Die austenitische Phase besitzt ein kubisch-flächenzentriertes Atomgitter. Die Einheitszelle der sogenannte B2-Struktur wird in Abbildung 3.1 dargestellt. Sie verfügt über eine symmetrische Anordnung der Nickel- und Titanatome.

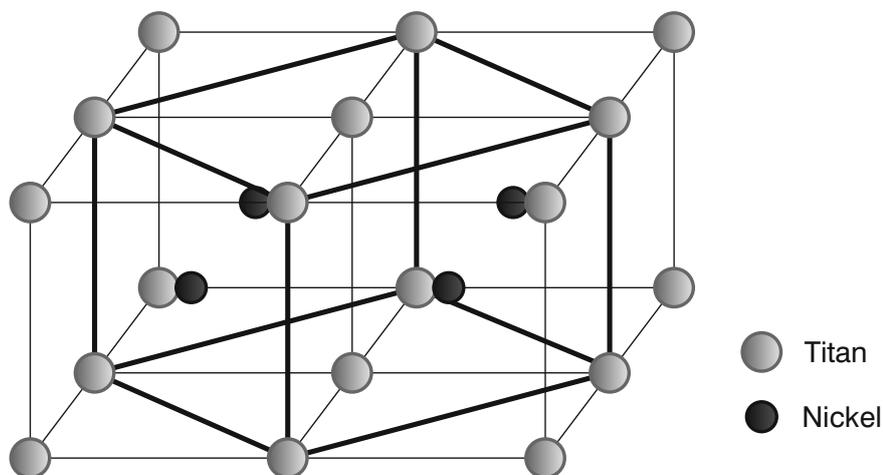


Abbildung 3.1: B2-Kristallstruktur des Austenits nach Otsuka u. Ren (2005).

Abbildung 3.2 zeigt die monokline B19' Struktur des Martensits. Abgebildet werden zwei verschiedene Varianten des Martensits, diese beiden lassen sich, ebenso wie die weiteren zehn Varianten, durch Spiegelung und Rotation ineinander überführen. Das abgebildete Atomgitter zeichnet sich durch eine kubisch-raumzentrierte Struktur aus, siehe Otsuka u. Ren (2005).

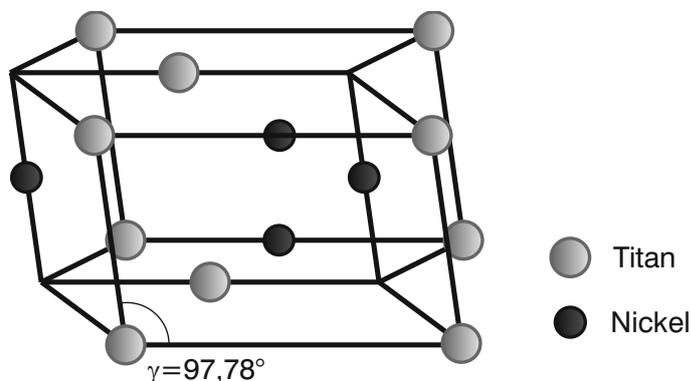


Abbildung 3.2: B19'-Kristallstruktur des Martensits nach Otsuka u. Ren (2005).

Zuweilen erfolgt die Umwandlung der austenitischen B2-Struktur in die martensitische B19'-Struktur nicht direkt, sondern es kommt zunächst zur Bildung der sogenannten R-Phase bevor das Material dann in den entgültigen martensitischen Zustand übergeht. Die Ursache für die Bildung dieser Phase mit trigonaler oder rhomboedrischer Kristallstruktur liegt in der Vorbehand-

lung des Werkstoffs. Sie wird ausgelöst durch eine thermomechanische Behandlung des Bauteils und thermisches Zyklieren, siehe hierzu z.B. Bhattacharya (2003) und Otsuka u. Wayman (1999). Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wird lediglich die einstufige Phasenumwandlung behandelt. An entsprechender Stelle wird jedoch auf eine mögliche Einbindung der R-Phase und der damit verbundenen zweistufigen Transformation verwiesen.

Die Umwandlung der Gitterstruktur ist weiterhin mit einer dazu nötigen Dehnung verbunden. Diese Dehnung wird auch als Transformationsdehnung [Bhattacharya (2003)], superelastische Dehnung [Otsuka u. Wayman (1999)] oder Bain-Dehnung bezeichnet, wobei sich letztere mit Hilfe der sogenannten Bain-Matrix berechnen lässt, siehe beispielsweise in Bhattacharya (2003) und Le (2010). Bei der Transformationsdehnung bzw. Bain-Matrix handelt es sich um eine experimentell messbare Größe. Beispielsweise in Bhattacharya (2003) sind diese für unterschiedliche FGL zu finden. Die unterschiedlichen Phasen zeichnen sich weiterhin durch verschiedene Steifigkeiten aus. Auch die damit verbundenen elastischen Konstanten waren in der Vergangenheit bereits Objekt experimenteller Studien. Für NiTi sind sie beispielsweise in Wagner u. Windl (2008) dokumentiert.

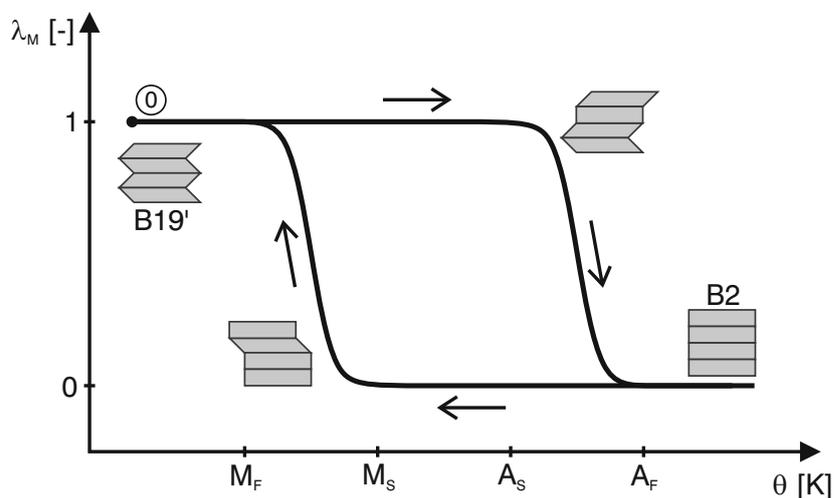


Abbildung 3.3: Entwicklung des Martensitgehalts  $\lambda_M$  bei thermischer Belastung nach Wagner (2005).

Abbildung 3.3 zeigt eine thermisch induzierte Phasenumwandlung, beispielsweise zu finden in Wagner (2005). Dargestellt wird die schematische Entwicklung des Martensitgehalts  $\lambda_M$  einer Probe, die zunächst erwärmt und anschließend abgekühlt wird. Zu Beginn des Versuchs ① liegt eine Temperatur  $\theta$  vor, die kleiner als die sogenannte Martensit-Finish-Temperatur  $M_F$  ist. Das Material besteht somit ausschließlich aus den zwölf unterschiedlichen Martensitvarianten. Wird die Probe nun erwärmt und erreicht schließlich eine Temperatur  $\theta > A_S$ , beginnt die Umwandlung der Niedrigtemperaturphase Martensit in die Hochtemperaturphase Austenit, die bei der sogenannten Austenit-Finish-Temperatur  $A_F$  abgeschlossen ist. Wird die rein austenitische Probe nun wieder abgekühlt, beginnt ab der sogenannten Martensit-Start-Temperatur  $M_S$  die Umwandlung in die unterschiedlichen Martensitvarianten. Diese Temperatur ist kleiner als  $A_F$ , wodurch es zu der charakteristischen Hysterese kommt. Bei Erreichen der Martensit-Finish-Temperatur  $M_F$  ist die Phasentransformation abgeschlossen und die Probe erneut in einem rein martensitischen Zustand, siehe z.B. Otsuka u. Wayman (1999) und Wagner (2005). Eine zyklische Durchführung dieses Versuches und eine damit verbundene Verschiebung der Transformationen zu niedrigeren Temperaturen wird beispielsweise in Burow (2010) und Miyazaki u. a. (1986a) untersucht.

Anders als bei klassischen Stahllegierungen, siehe Hornbogen u. a. (1973), kann die Phasentransformation in Formgedächtnislegierungen nicht ausschließlich durch thermische, sondern auch durch mechanische Belastungen ausgelöst werden. Unterschieden werden hierbei zwei wesentliche Effekte: die Pseudoplastizität und die Pseudoelastizität. Ausführliche experimentelle Untersuchungen zu beiden Effekten finden sich in Otsuka u. Wayman (1999), Bhattacharya (2003) und Otsuka u. Ren (2005).

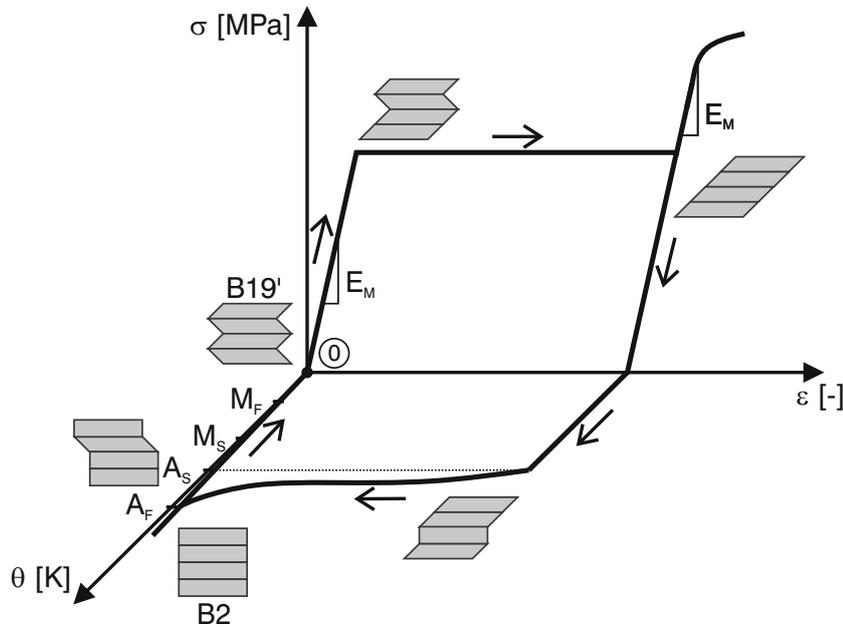


Abbildung 3.4: Schematische Darstellung der Pseudoplastizität anhand eines Spannungs-Dehnungs-Temperatur-Diagramms nach Wagner (2005).

Im ersten Fall der Pseudoplastizität wird eine Probe betrachtet, die eine Ausgangstemperatur von  $\theta < M_F$  besitzt. Die Probe ist also in einem rein martensitischen Zustand und besteht aus unterschiedlichen Martensitvarianten  $(\textcircled{0})$ , die jeweils einen Elastizitätsmodul von  $E_M$  besitzen. Wird die Probe nun einer Verschiebung ausgesetzt, so verhält sie sich zunächst linear-elastisch, siehe Abbildung 3.4. Wird eine gewisse Spannung erreicht beginnt das Entzwilligen der Struktur, d.h. die bezüglich der Belastung ungünstigen Martensitvarianten wandeln sich bei konstant bleibender Spannung in günstige Varianten um. Nach abgeschlossener Transformation und somit nach Bildung einer komplett geordneten Martensitstruktur, beginnt das Material sich zunächst wieder elastisch zu Verformen, bevor es dann zur Bildung von plastischen Dehnungen und schließlich zum Versagen der Probe kommt. Wird die Probe jedoch vorher entlastet, verformt sie sich elastisch zurück. Ähnlich wie bei der klassischen Plastizität verbleibt jedoch bei vollständiger Entlastung eine Verformung. Wird die Probe nun erwärmt und die Temperaturen  $A_S$  und letztendlich auch  $A_F$  überschritten, wird die geordnete Martensitstruktur in Austenit umgewandelt und die für die Verformung verantwortlichen Transformationsdehnungen zurückgebildet. Das Abkühlen der Probe unter die martensitischen Umwandlungstemperaturen  $M_S$  und  $M_F$  lässt die Probe schließlich in ihren Ausgangszustand zurückkehren, sodass wieder eine rein martensitische verzwilligte Struktur bestehend aus verschiedenen Martensitvarianten und ohne verbleibende Deformation vorliegt. Neben der Bezeichnung Pseudoplastizität wird dieser Prozess auch als Einwege- oder Formgedächtniseffekt bezeichnet, siehe beispielsweise Otsuka u. Wayman (1999) und Wagner (2005).

Der zweite wichtige Effekt, der prägend für die herausragenden Eigenschaften von Form-

gedächtnislegierungen ist, ist wie bereits genannt die Pseudoelastizität, auch als Superelastizität bezeichnet. Die betrachtete Probe befindet sich zu Beginn des Versuchs ① in einem rein austenitischen Zustand, sie ist also einer Temperatur  $\theta > M_F$  ausgesetzt. Wird nun eine Verschiebung aufgebracht, verformt sich die Probe mit dem Elastizitätsmodul  $E_A$  bis zum Erreichen einer Spannung  $\sigma_M$  linear-elastisch, siehe Abbildung 3.5. Anschließend beginnt die Transformation von Austenit in entzwillingten Martensit, d.h. es bilden sich die auf die Belastung bezogenen günstigsten Martensitvarianten. Wie bei dem Einwegeffekt entsteht auch in diesem Versuch bis zum Abschluss der Umwandlung ein Spannungsplateau. Jede weitere Belastung führt anschließend zu einem erneuten Anstieg der Spannung, gefolgt von plastischen Verformungen sowie schließlichem Versagen des Bauteils. Die Entlastung führt hingegen zunächst zu einer linear-elastischen Spannungs-Dehnungs-Beziehung. Wird jedoch eine Spannung  $\sigma_m$  erreicht, bildet sich für die weitere Entlastung wiederum ein Spannungsplateau: der Martensit wird zurücktransformiert in den Austenit. Ist die Umwandlung abgeschlossen, liegt wieder ein rein austenitisches Gefüge vor und die Probe verformt sich linear-elastisch zurück in ihren Ausgangszustand, siehe auch hierzu z.B. Otsuka u. Wayman (1999) und Wagner (2005).

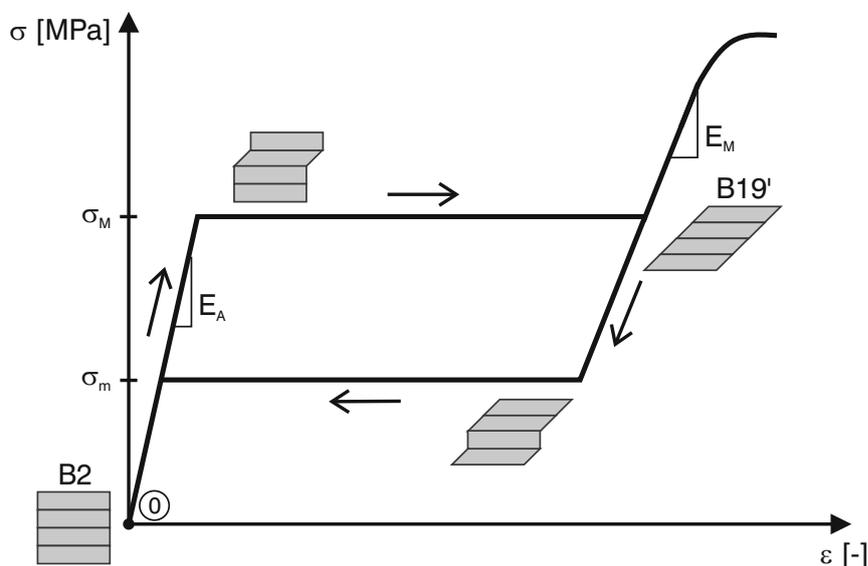


Abbildung 3.5: Schematische Darstellung der Pseudoelastizität anhand eines Spannungs-Dehnungs-Diagramms nach Wagner (2005).

### 3.1.1 Funktionale Ermüdung während des pseudoelastischen Materialverhaltens

Aufgrund der Thematik der vorliegenden Arbeit wird an dieser Stelle ein besonderes Augenmerk auf die funktionale Ermüdung gelegt. Ermüdung im Allgemeinen meint die Veränderung der Materialeigenschaften sowie Schädigung in Folge einer wiederholten Belastung und kann auf verschiedenen Ebenen stattfinden, siehe Suresh (1998). Eine detaillierte Auseinandersetzung mit der Definition von Ermüdung sowie eine Zusammenstellung verschiedener Arten, wie beispielsweise Kriechermüdung oder thermomechanische Ermüdung, kann Suresh (1998) und Bolotin (1999) entnommen werden.

In Otsuka u. Wayman (1999) und Morgan u. Friend (2001) wird zwischen drei Arten von Ermüdung in Formgedächtnislegierungen unterschieden: einer Ermüdung in Gestalt eines Bruchs durch mechanisches Zyklieren bei einer konstanten Temperatur, einer durch thermisches Zy-

klieren ausgelösten Divergenz der physikalischen, mechanischen und funktionalen Materialeigenschaften und letztlich ein abnehmendes Formgedächtnis, für das vor allem NiTi anfällig ist, siehe Otsuka u. Wayman (1999) und Morgan u. Friend (2001). In Eggeler u. a. (2004) wird hingegen – die letzten beiden Gruppen zusammenfassend – nur zwischen zwei wesentlichen Arten der Ermüdung differenziert: der strukturellen und der funktionalen Ermüdung. Die strukturelle Ermüdung umfasst dabei – wie in Otsuka u. Wayman (1999) – das Versagen eines Bauteils durch zyklische Beanspruchung, das nicht nur in FGL auftritt. Explizit gemeint ist damit eine wachsende Schädigung des Bauteils, die zur Rissbildung und schließlich zum Bruch des selbigen führen kann. Die funktionale Ermüdung meint die Degradierung funktionaler Eigenschaften, siehe Eggeler u. a. (2004).

Deutlich wird das im Rahmen dieser Arbeit behandelte Phänomen der funktionalen Ermüdung anhand eines zyklischen Belastungsversuchs nach beispielsweise Gall u. Maier (2002), Ibarra u. a. (2007), Miyazaki u. a. (1986b) und Delville u. a. (2011). Die Abbildungen 3.6 und 3.7 zeigen die experimentellen Daten sowie die schematische Aufarbeitung eines zyklischen Zugversuchs nach Wagner (2005). Die zu Beginn rein austenitische und sich somit pseudoelastisch verhaltende Probe wird wiederholt be- und entlastet. Diese zyklische Belastung führt zur Abnahme der Plateauspannungen  $\sigma_M$  und  $\sigma_m$ . Dabei sinkt das obere Plateau stärker ab, was zu einer Verkleinerung der Hystereseschleife führt. Des Weiteren bildet sich eine mit jedem Zyklus wachsende bleibende Dehnung  $\varepsilon_{res}$ . Sowohl die Absenkung der Spannungsplateaus, als auch die Bildung der verbleibenden Dehnung sind zwischen dem ersten ( $N_{zyk} = 1$ ) und zweiten Lastzyklus ( $N_{zyk} = 2$ ) besonders deutlich zu erkennen, konvergieren jedoch in späteren Lastzyklen gegen einen stabilen Zustand ( $N_{konv}$ ).

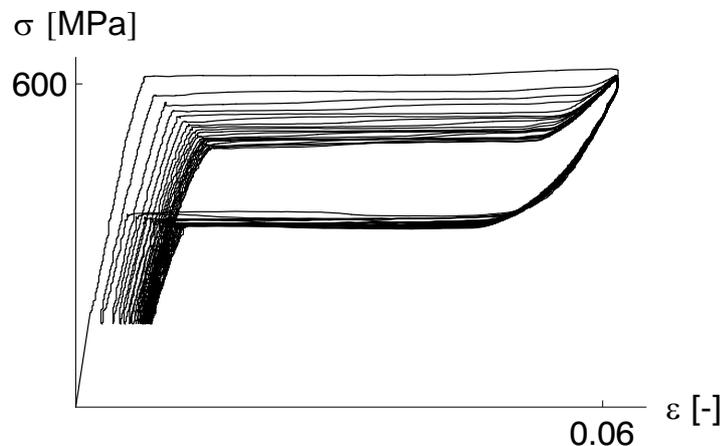


Abbildung 3.6: Spannungs-Dehnungs-Diagramm eines zyklischen Zugversuchs nach Wagner (2005).

Der maßgebliche Auslöser der funktionalen Ermüdung ist die Zunahme der Versetzungsdichte während der Transformation von Austenit zu Martensit, siehe beispielsweise Filip u. Mazanec (1996), Eggeler u. a. (2004), Simon u. a. (2010) und Krooß u. a. (2015). Abbildung 3.8 zeigt die in Simon u. a. (2010) veröffentlichte Transmissionselektronenmikroskopie (TEM) einer thermisch induzierten Umwandlung von Austenit zu Martensit. Die Pfeile innerhalb der Abbildung dienen lediglich der besseren Orientierung. Die oberen drei Abbildungen wurden dabei während der Transformation von Austenit zu Martensit aufgenommen, die unteren Bilder während der Rücktransformation, wobei diese unterschiedliche Bereiche des Werkstoffs zeigen. Durch das Absinken der Temperatur formt sich in dem ursprünglich reinem Austenit (1) eine nadelförmige Martensitstruktur (2), die mit sinkender Temperatur weiter wächst (3). Wird

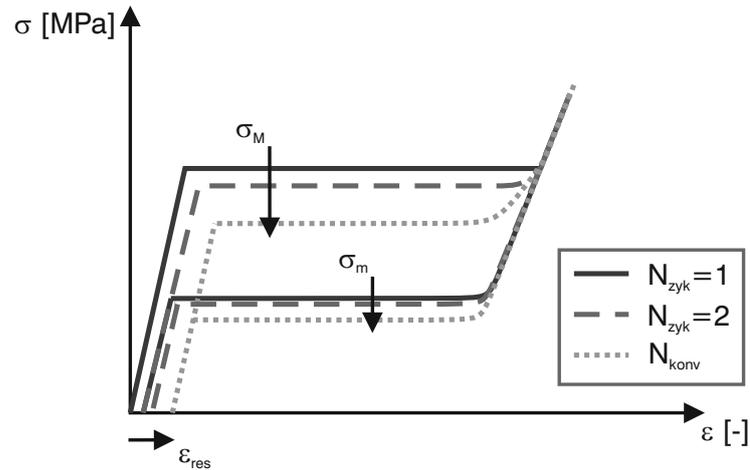


Abbildung 3.7: Schematische Darstellung des zyklischen Zugversuchs nach Wagner (2005).

durch eine erneute Erwärmung der Probe nun die Rücktransformation ausgelöst, verschwindet die Martensitnadel und hinterlässt als graue Linien erkennbaren Restmartensit, sowie während der Transformation gebildete Versetzungen, die als schwarze Linien erscheinen, siehe Simon u. a. (2010).

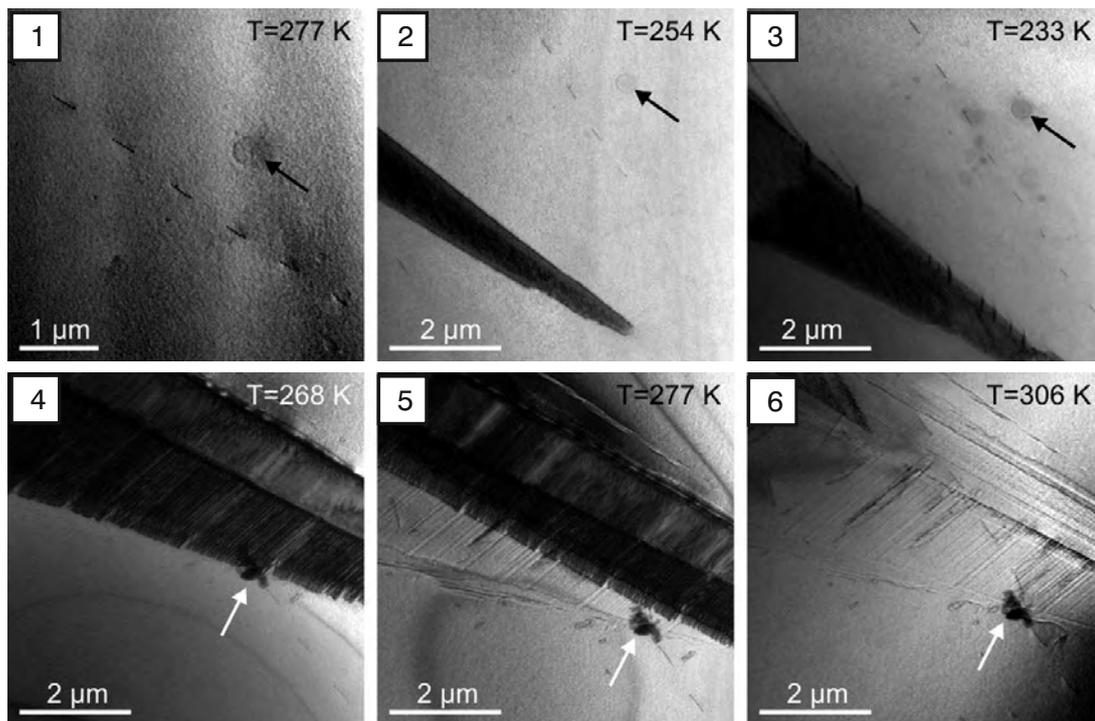


Abbildung 3.8: TEM einer thermisch induzierten Phasenumwandlung aus Simon u. a. (2010), Nachdruck mit Genehmigung von Elsevier.

In Krooß u. a. (2015) wird diese Stabilisierung des Martensits durch gebildete Versetzungen aufgegriffen. Abbildung 3.9 zeigt TEM Aufnahmen eines in 1000 Lastzyklen durchgeführten Zugversuchs. Die Versetzungen sind darin mit einem schwarzen Pfeil markiert und so vornehmlich in den helleren – martensitischen – Bereichen vorhanden (1). Die Vergrößerung des durch den Kreis gekennzeichneten Ausschnitts zeigt anhand der Lichtreflexionen das Atomgitter stabilisierten Martensits. Die experimentellen Studien weisen somit eine erhöhte Versetzungsbil-

dung nahe der Phasengrenzen und infolge derer eine Martensitstabilisierung nach, die wiederum die funktionale Degradierung der Materialeigenschaften zur Folge hat, siehe Krooß u. a. (2015). Gleichzeitig kann der Effekt der Stabilisierung jedoch auch geheilt werden. Unter dem Begriff Heilung wird nach Wagner u. a. (2008) die thermische Behandlung eines zyklisierten Bauteils gemeint, durch die der stabilisierte Martensit reduziert und somit die funktionale Stabilität des Werkstoffs verbessert werden kann.

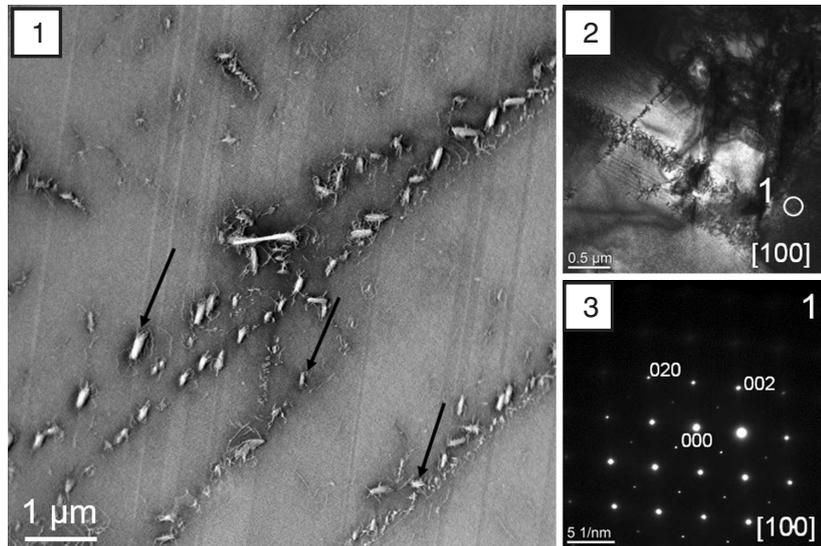


Abbildung 3.9: TEM nach einem zyklischen Zugversuch aus Krooß u. a. (2015), *Nachdruck mit Genehmigung von Springer Nature.*

### 3.2 Überblick über eine Auswahl bisheriger Materialmodelle

Es existieren zahlreiche wissenschaftliche Arbeiten, um die im vorangegangenen Kapitel behandelten herausragenden Eigenschaften von Formgedächtnislegierungen auch durch Simulationen abbilden zu können. Zunächst liefert dieses Unterkapitel einen Überblick über das zugrundeliegende Ausgangsmodell und dessen bisherige Erweiterungen. Anschließend werden einige wesentliche Materialmodelle für Formgedächtnislegierungen vorgestellt und des Weiteren eine Auswahl jener präsentiert, die bereits den Effekt der funktionalen Ermüdung berücksichtigen.

#### 3.2.1 Bisherige Modellierung von Formgedächtnislegierungen am *Lehrstuhl für Mechanik-Materialtheorie*

Das Ausgangsmodell für die vorliegende Arbeit basiert auf dem bereits in Hackl u. a. (2004a) und Hackl u. a. (2004b) vorgestellten ersten Modellansatz für polykristalline Formgedächtnislegierungen. Darin erfolgt die Berücksichtigung einzelner Körner und somit des polykristallinen Charakters durch Verwendung einer einzigen Martensitphase, die durch Rotation ihrer Transformationsdehnung  $H_*$  in eine beliebige Anzahl an Orientierungen überführt wird. Unter Verwendung des Rotationstensors  $Q^j$  der Orientierung  $j$  kann die rotierte Transformationsdehnung durch

$$H_*^j = (Q^j)^T \cdot H_* \cdot Q^j \quad (3.1)$$

berechnet werden. Zwecks einer universellen Anwendbarkeit greift das variationelle Materialmodell bereits auf die in Abschnitt 2.5 beschriebene Methode des Prinzips des Minimums des Dissipationspotentials und somit eine Lagrange-Funktion  $\mathcal{L}$  zurück, die zur Modellierung der experimentell erkennbaren Hysterese die Dissipation infolge der Phasentransformation durch Verwendung einer Dissipationsfunktion  $\mathcal{D}$  berücksichtigt:

$$\mathcal{L} = \dot{\Psi}(\mathbf{H}, \boldsymbol{\xi}) + \mathcal{D}(\dot{\boldsymbol{\xi}}) \rightarrow \min. \quad (3.2)$$

In diesem ersten Modell wird aufgrund der vorherrschenden großen Deformationen der Hencky-Tensor  $\mathbf{H}$  als Verzerrungsmaß verwendet. Die mikrostrukturellen Änderungen werden durch den Volumenanteil  $\xi^j$  der unterschiedlichen Orientierungen berücksichtigt. Als Energie  $\Psi$  wird die relaxierte freie Energie verwendet. Unter Verwendung der Energie der einzelnen Körner

$$\Psi^j = \frac{1}{2} (\mathbf{H}^j - \mathbf{H}_*^j) : \mathbb{A} : (\mathbf{H}^j - \mathbf{H}_*^j) + c^j \quad (3.3)$$

kann die relaxierte Energie mittels Konvexifizierung durch

$$\Psi_{\text{rel}} = \inf_{\mathbf{H}^j} \left\{ \sum_{j=1}^N \xi^j \Psi^j \mid \sum_{j=1}^N \xi^j \mathbf{H}^j = \mathbf{H} \right\} \quad (3.4)$$

hergeleitet werden. In Gleichung (3.3) entspricht  $\mathbf{H}^j$ , der Dehnung im Korn  $j$ . Bei dem Tensor vierter Stufe  $\mathbb{A}$  handelt es sich um den Elastizitätstensor und  $c^j$  beschreibt die kalorische Energie des Materials, wobei sich diese Größe lediglich hinsichtlich der betrachteten Phase, nicht aber der Orientierung, unterscheidet. Aus den Berechnungen ergibt sich die Verteilung der transformierten Körner bzw. die Reorientierung des vorhandenen Martensits. Ein in Hackl u. a. (2008) vorgestellter Vergleich des Materialmodells mit experimentellen Ergebnissen zeigt jedoch, dass durch diesen ersten Modellversuch zwar qualitativ gute Ergebnisse erzielt werden, diese aber quantitativ das tatsächliche Materialverhalten noch nicht widerspiegeln können. Die Berechnungen des ursprünglichen Modells erfolgen auf Grundlage einer Reuß-Energiegrenze, die wiederum eine untere energetische Grenze darstellt. Bei dieser durch Konvexifizierung erhaltenen Energie handelt es sich um eine vergleichsweise grobe Art der Energierelaxierung, die jedoch, wie in Hackl u. a. (2008) und später gezeigt, analytisch durch Gleichung (3.4) berechnet werden kann.

In Govindjee u. a. (2007) findet sich eine detaillierte Gegenüberstellung dieser unteren Reuß-Energiegrenze und einer oberen Laminatgrenze, die die Zwillingsbildung während der martensitischen Phasentransformation mitberücksichtigt, siehe Abbildung 3.10. Eine Gegenüber-

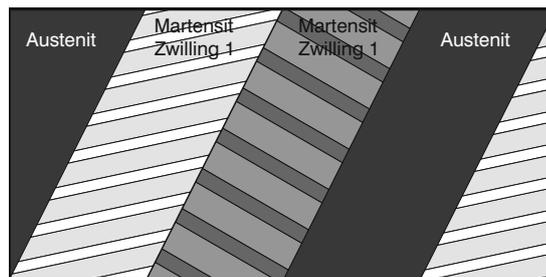


Abbildung 3.10: Laminatstruktur, bestehend aus Austenit und zwei Martensitzwillingen, siehe Govindjee u. a. (2007).

stellung liefert für gegebene Volumenanteile eines Einkristalls beinahe übereinstimmende Ergebnisse für die beiden unterschiedlichen Energieansätze. Diese Untersuchungen werden in Heinen u. Hackl (2007) und Heinen u. a. (2008) mit Bezug auf Formgedächtnislegierungen weiter ausgeweitet. Dazu wird ein Einkristall mit  $n$  unterschiedlichen Martensitvarianten und mit der linearisierten Dehnung  $\varepsilon$  als Verzerrungsmaß betrachtet. Auf Kosten der dadurch im Vergleich zu dem Ursprungsmodell Hackl u. a. (2004a) nicht vorhandenen Hysterese wird auf die Berücksichtigung der Dissipation verzichtet, da diese die Differenzen zwischen den einzelnen Energieansätzen verringern würde. Durch den Vergleich der durch reine Energieminimierung erhaltenen Phasen kann jedoch wieder gezeigt werden, dass die Reuß-Grenze ein gutes energetisches Werkzeug zur Modellierung mehrphasiger Materialien darstellt. Die Ausweitung der Energiebetrachtung auf Polykristalle in Hackl u. Heinen (2008b) erfolgt im Gegensatz zu dem Ausgangsmodell Hackl u. a. (2004a) durch Berücksichtigung verschiedener Körner  $j$ , die jeweils einen Volumenanteil einer austenitischen und verschiedener Martensitphasen  $\lambda_i^j$  besitzen, siehe Abbildung 3.11. Die Energiebetrachtung zeigt jedoch für nicht gegebene, sondern

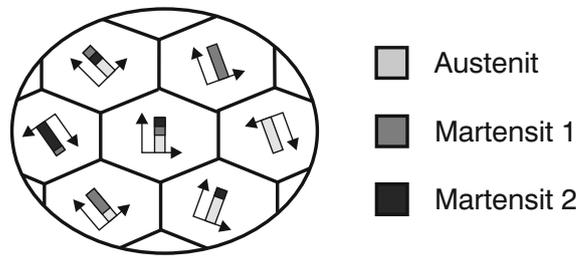


Abbildung 3.11: Polykristall, Phasenzusammensetzung.

mit Hilfe der Reuß-Energie berechnete Volumenfraktionen deutliche Abweichungen der Reuß-Energiegrenze von der oberen Laminatgrenze. Als Ursache für die Abweichungen wird das Ignorieren der Kompatibilitätsbedingung zwischen der Verformung der einzelnen Körner genannt. In derselben Arbeit wird des Weiteren der Einfluss einer zusätzlichen oberen Grenze, der sogenannten Taylor-Grenze, untersucht. Die Energie  $\Psi_{\text{Taylor}}$  ist dann durch

$$\Psi_{\text{Taylor}} = \sum_{j=1}^N \xi^j \min_i \Psi_i^j \quad (3.5)$$

gegeben, wobei der Index  $i$  für die unterschiedlichen Phasen steht. Die Taylor-Grenze stellt eine obere Grenze dar und zeigt Differenzen im Fall vorgegebener Volumenanteile. Bei Verwendung der minimierenden Volumenanteile im Fall einer reinen Taylor-Grenze für geringe Belastungen und im Fall einer gemischten Energiegrenze und somit einer Reuß-Grenze auf Kornebene und einer Taylor-Grenze auf Materialpunktebene für größere Belastungen, ergibt sich jedoch eine nahezu identische Energie wie durch Verwendung der Laminatgrenze.

Unter weiterer Verwendung der Reuß-Energiegrenze und somit einer am Materialpunkt als konstant angenommenen Spannungsverteilung erfolgt die Materialmodellierung von FGL in Hackl u. Heinen (2008a) unter Berücksichtigung einer linearisierten Dehnung  $\varepsilon$  als Verzerrungsmaß. Der polykristalline Ansatz wird des Weiteren unter Verwendung eines Young-Maßes hinsichtlich einer vorherrschenden Textur untersucht. Der zuvor linearverteilte Volumenanteil der einzelnen Körner  $j$  wird folglich durch

$$\xi^j(Q^j) = \max_{k=1, \dots, 6} [n_{\text{pref}} \cdot Q^j \cdot n_{\{1,0,0\},k}]^{-q} \quad (3.6)$$

angenommen. Darin entspricht  $\mathbf{n}_{\{1,0,0\},k}$  den sechs unterschiedlichen austenitischen Normalenvektoren

$$\mathbf{n}_{\{1,0,0\},k} \in \left\{ \left( \begin{array}{c} \pm 1 \\ 0 \\ 0 \end{array} \right), \left( \begin{array}{c} 0 \\ \pm 1 \\ 0 \end{array} \right), \left( \begin{array}{c} 0 \\ 0 \\ \pm 1 \end{array} \right) \right\}, \quad (3.7)$$

der Tensor  $\mathbf{n}_{\text{pref}}$  beschreibt die aus der Vorbehandlung resultierende bevorzugte Kornorientierung. Der Volumenanteil  $\xi^j$  richtet sich somit nach der Wahrscheinlichkeit ein Korn gewisser Orientierung vorzufinden. Diese Textur und somit eine nicht gleichförmige Verteilung unterschiedlich orientierter Körner ist dabei eine Folge der Vorbehandlung des Werkstoffs. Beispielsweise durch den Prozess des Walzens sind in der untersuchten Probe bestimmte Kornorientierungen wahrscheinlicher zu finden als andere. Das ratenunabhängige Materialmodell zeigt so die Entwicklung der austenitischen und der  $n$  martensitischen Volumenanteile in jedem einzelnen Korn.

In Bartel u. Hackl (2009) wird nachfolgend der Einfluss unterschiedlicher Dissipationsfunktionen  $\mathcal{D}$  auf das einkristalline Modell mit oberer Laminatgrenze aus Heinen u. Hackl (2007) bzw. Heinen u. a. (2008) untersucht. Während die Ansätze von von Mises und Tresca

$$\mathcal{D} = r_1 |\dot{\boldsymbol{\lambda}}|, \quad \mathcal{D} = r_1 \sum_{i=0}^n |\dot{\lambda}_i| \quad (3.8)$$

ein ratenunabhängiges Materialverhalten zur Folge haben, weist der Ansatz nach Perzyna

$$\mathcal{D} = r_1 \sum_{i=0}^n |\dot{\lambda}_i| + r_2 |\dot{\boldsymbol{\lambda}}|^2 \quad (3.9)$$

ein ratenabhängiges Materialverhalten und somit eine gewisse Zeitabhängigkeit auf.

Erste Finite-Elemente-Berechnungen erfolgen schließlich für das in Hackl u. Heinen (2008a) präsentierte Modell in Junker u. Hackl (2011b), wodurch das im Experiment beobachtete makroskopische Verhalten in Form des für FGL charakteristischen Last-Verformungs-Diagramms abgebildet werden kann. Die Arbeit umfasst weiterhin eine detaillierte Untersuchung des Einflusses einer vorherrschenden Textur sowie eine Analyse der Orientierung der umgewandelten Körner. Das präsentierte Berechnungsbeispiel eines Zugstabs zeigt – verbunden mit einer weitgehend homogenen Phasentransformation – netzunabhängige Ergebnisse.

Die direkt folgenden Arbeiten der Forschungsgruppe des *Lehrstuhls für Mechanik-Materialtheorie* widmen sich vor allem der Berücksichtigung thermischer Einflüsse auf Formgedächtnislegierungen. Aufgrund der bis zum derzeitigen Zeitpunkt vorhandenen Beschränkung des Prinzips des Minimums des Dissipationspotentials auf isotherme Prozesse, wird dazu das in vielen Fällen identische Ergebnisse liefernde Prinzip der maximalen Dissipation verwendet, siehe Junker u. Hackl (2011a). Die Berücksichtigung der temperaturabhängigen Stabilität der einzelnen Phasen erfolgt in Junker u. Hackl (2011a) durch Berücksichtigung der kalorischen Energie nach Huo u. Müller (1993). Diese kann für jede einzelne Phase  $i$  in Abhängigkeit der Temperatur  $\theta$  und Referenztemperatur  $\theta_R$ , der Wärmekapazität  $c_\theta$  und den Materialkonstanten  $a_i$  und  $b_i$  durch

$$c_i = c_\theta(\theta - \theta_R) - c_\theta \theta \ln \left( \frac{\theta}{\theta_R} \right) + a_i - b_i \theta \quad (3.10)$$

bestimmt werden. Ergänzend wird angenommen, dass die Dissipation abhängig von dem Austenitgehalt ist. Dieser funktionale Zusammenhang berücksichtigt die unterschiedlichen Energiemengen, die zur Bildung eines neuen martensitischen oder austenitischen Nukleus oder dessen Wachstum notwendig sind. Darüber hinaus wird im Rahmen der Finite-Elemente-Berechnungen eine Regularisierung eingeführt. Diese in Dimitrijevic u. Hackl (2008) vorgestellte Methode basiert auf der Idee der Einführung einer weiteren skalaren Variable  $\varphi$ . Die ursprüngliche Energie  $\Psi_0$  wird dann um einen Energieterm  $\Psi_{\lambda\varphi}$  ergänzt, der mit der internen Variable der Volumenfraktion  $\lambda$  gekoppelt ist, sowie um einen Anteil  $\Psi_{\nabla\varphi}$ , der für große Gradienten zu einer Erhöhung der Energie führt und folglich im Rahmen der Minimierung zu einer Bestrafung des Materialverhaltens führt. Die freie Energie setzt sich somit wie folgt zusammen:

$$\Psi = \Psi_0(\boldsymbol{\varepsilon}, \theta, \boldsymbol{\lambda}) + \Psi_{\lambda\varphi}(\boldsymbol{\lambda}, \varphi) + \Psi_{\nabla\varphi}(\nabla\varphi) . \quad (3.11)$$

Da im Rahmen des Prinzips des Minimums des Dissipationspotentials die Energie nicht abhängig von dem Gradienten der internen Variable sein darf, ist es so über den Kopplungsterm möglich, indirekt auch Gradienten der internen Variable zu bestrafen. Die zugehörigen Ergebnisse sind damit im Vergleich zu vorangegangenen Berechnungen in der Lage, lokale Effekte abzubilden. Eine hinsichtlich der Dissipation und des angewendeten Prinzips modifizierte Version des Materialmodells findet sich in Junker u. Hackl (2014). Die Abhängigkeit der Dissipation von dem Austenitgehalt wird auf die Rate dessen und die Temperatur ausgedehnt, so dass auch indirekt die Abhängigkeit von den einzelnen Transformationstemperaturen berücksichtigt werden kann. Das Materialmodell ist damit in der Lage, die thermisch induzierte Phasenumwandlung und zugleich den Einfluss unterschiedlicher Belastungsgeschwindigkeiten abzubilden.

Die in Junker u. a. (2014) präsentierte Herleitung des Prinzips des Minimums des Dissipationspotentials für nicht-isotherme Prozesse ermöglicht im Folgenden die deutlich übersichtlichere Modellierung der thermomechanischen Kopplung auf Grundlage des Minimumprinzips, siehe Junker u. Hackl (2013). Die in dieser Arbeit verwendete und in Junker (2014b) vorgestellte repräsentative Orientierungsverteilungsfunktion sieht des Weiteren die Erfassung des polykristallinen Materials durch die Berücksichtigung dreier Eulerwinkel  $\boldsymbol{\alpha}$  als weitere interne Variablen vor. Mit Hilfe dieser Winkel und dem von ihnen abhängigen Transformationstensor  $\mathbf{Q}(\boldsymbol{\alpha})$  werden die in den nachfolgenden Kapiteln noch näher betrachteten effektiven Transformationsdehnungen  $\bar{\boldsymbol{\eta}}$  in die für das Material energetisch günstigste Richtung rotiert:

$$\bar{\boldsymbol{\eta}}_{\text{rot}} = \mathbf{Q}(\boldsymbol{\alpha})^T \cdot \bar{\boldsymbol{\eta}} \cdot \mathbf{Q}(\boldsymbol{\alpha}) . \quad (3.12)$$

In Kombination mit der Transformationsdehnung der jeweils aktiven Martensitvariante, geben die Eulerwinkel die Richtung an in der sich der Martensit entwickelt. Die Phasenanteile werden nun nicht mehr in jedem Korn einzeln berechnet, sondern gemittelt für den ganzen Materialpunkt, siehe Abbildung 3.12. Durch diese erhebliche Reduktion wird das Materialmodell hinsichtlich seiner numerischen Effizienz erheblich verbessert.

Die nachfolgende Veröffentlichung Junker (2014a) dient schließlich der weiteren Effizienzsteigerung des Modells. Die Temperatur beeinflusst darin zum einen die Dissipation während der Transformation und zum anderen die kalorische Energie. Die Stabilität der Berechnungen wird durch Verwendung eines zusätzlichen zweiter Ordnung homogenen Ansatzes für die Dissipation und somit einer Evolution elasto-viskoplastischer Art der Volumenanteile und einer Entwicklung viskosen Typs der Eulerwinkel weiter verbessert. Die präsentierte Arbeit umfasst des Weiteren unterschiedliche Finite-Elemente-Berechnungen, deren Ergebnisse anhand eines Zugversuchs mit experimentellen Daten verglichen werden. In Junker (2014b) werden diese

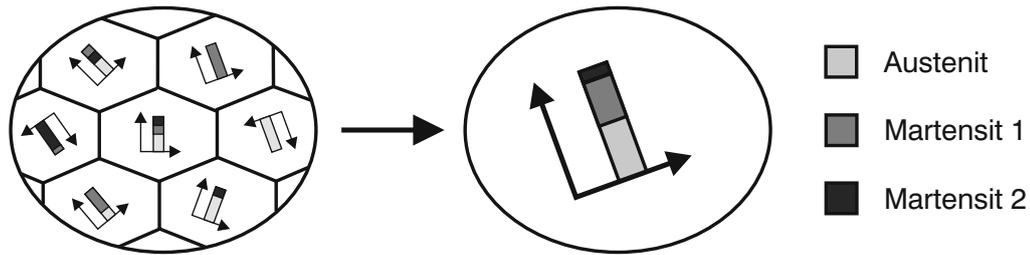


Abbildung 3.12: Reduktion des polykristallinen Ansatzes durch die dynamische Orientierungsverteilungsfunktion, siehe Junker (2014b).

Berechnungen unter Nutzung eines erster Ordnung homogenen Ansatzes der Dissipation (vergleiche Gleichung (2.60)) und somit einer ratenunabhängigen Evolution der Phasenanteile des Weiteren unter Nutzung experimentell bestimmter Transformationsdehnungen für CuAlNi und NiTi wiederholt.

Die bis zu diesem Zeitpunkt vorhandene Abhängigkeit der Modelle von Materialparametern, die zwecks Vergleich mit Experimenten günstig gewählt und somit von phänomenologischem Charakter sind, wird schließlich durch Junker u. a. (2015) ausgeräumt. Die in Junker u. a. (2015) präsentierten Ausführungen zeigen die Kalibrierung der Materialparameter auf energetischer Ebene. Diese Kalibrierung mittels dynamischer Differenzkalimetrie, siehe Abbildung 3.13, ermöglicht durch die Berechnung der kalorischen Energie  $c$  und des Dissipationsparameters  $r$  in Abhängigkeit der Transformationstemperaturen  $M_S$ ,  $M_F$ ,  $A_S$  und  $A_F$ , sowie des experimentell gemessenen Wärmestroms  $q$  eine Vorhersage des komplexen Materialverhaltens. Die so berechneten Parameter werden schließlich in Junker u. Hackl (2016) auf das Materialmodell aus Junker (2014a) angewandt. Die Wirksamkeit dieser Kalibrierung kann durch den Vergleich mit experimentellen Ergebnissen nach Schäfer u. Wagner (2009) nachgewiesen werden. In Junker

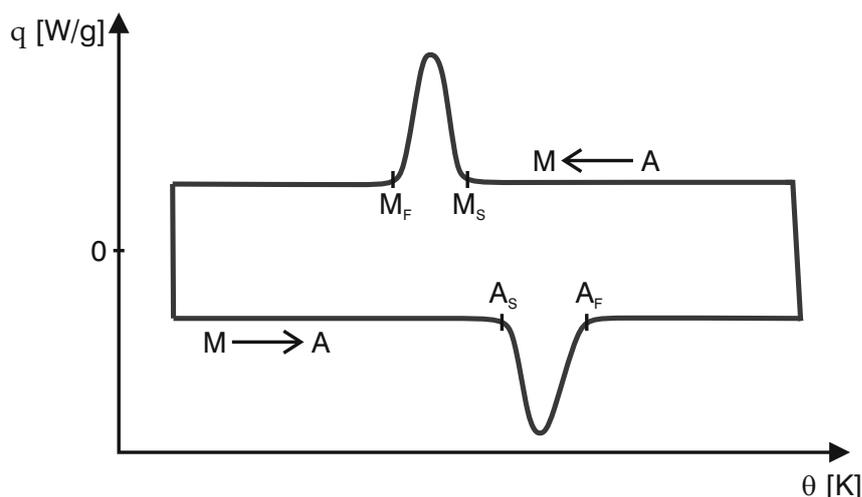


Abbildung 3.13: Dynamische Differenzkalimetrie zur Kalibrierung der Materialparameter, siehe Junker u. a. (2015).

u. Hempel (2017) erfolgte schließlich eine Erweiterung des Materialmodells zur Berücksichtigung klassischer Plastizität mit isotroper Verfestigung. Ansätze für kinematische Verfestigung können Waimann u. a. (2015) entnommen werden. Das dort präsentierte Modell bezieht sich zwar nicht direkt auf Formgedächtnislegierungen, der gezeigte Ansatz für die transformations-

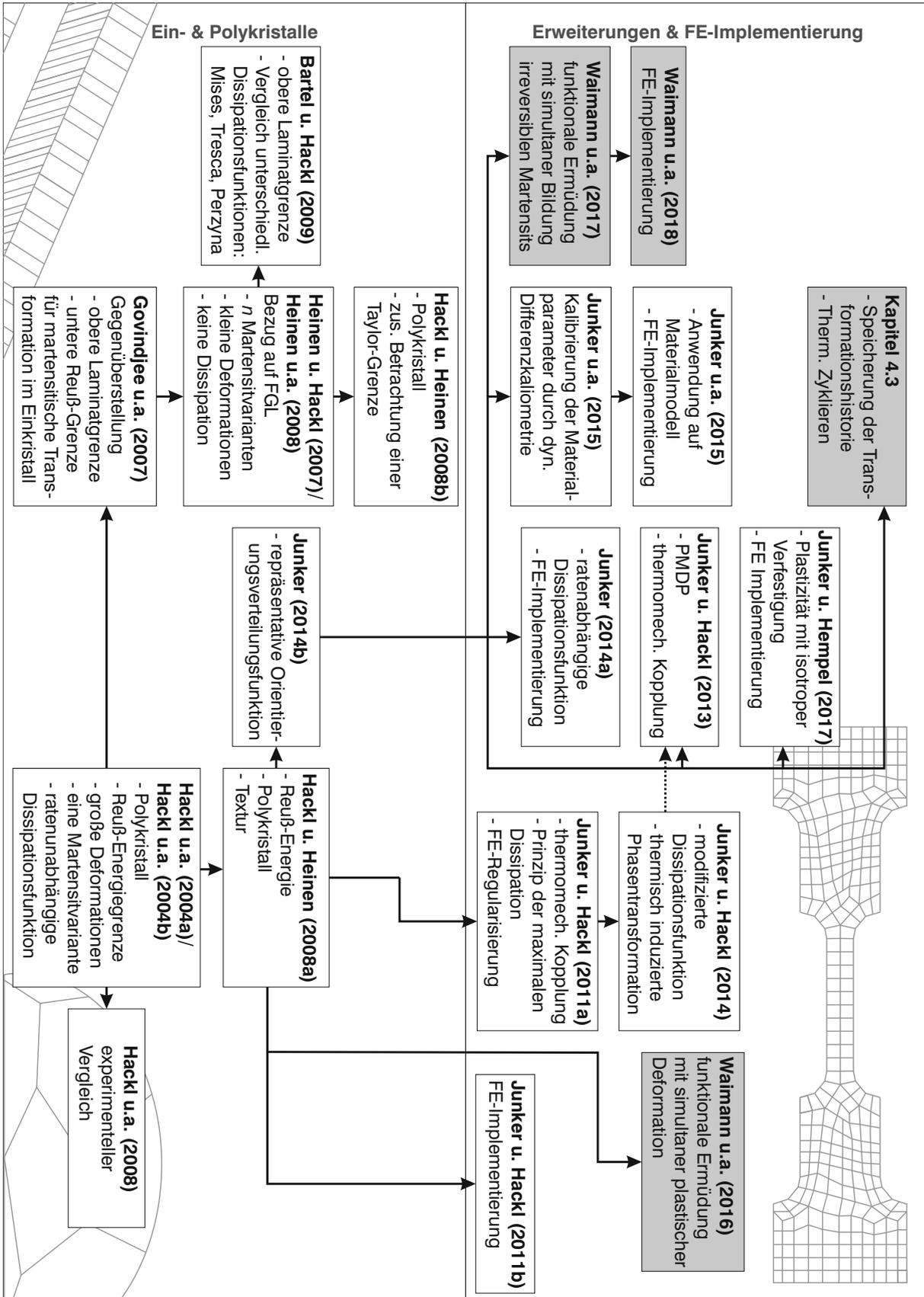


Abbildung 3.14: Übersicht der am Lehrstuhl für Mechanik-Materialtheorie entwickelten Materialmodelle.

induzierte Plastizität in polykristallinen Stählen ist allerdings übertragbar.

Zur kompakteren Übersicht der bereits veröffentlichten Materialmodelle des *Lehrstuhls für Mechanik-Materialtheorie* werden in Abbildung 3.14 die Zusammenhänge, Besonderheiten und Weiterentwicklungen der einzelnen Modelle zusammenfassend und kompakt dargestellt. An dieser Stelle erfolgt auch die Einordnung der im Rahmen dieser Arbeit vorgestellten Ansätze für die funktionale Ermüdung durch Kopplung mit plastischen Deformationen nach Waimann u. a. (2016), durch Berücksichtigung einer irreversiblen martensitischen Volumenfraktion nach Waimann u. a. (2017) und Waimann u. a. (2018) und schließlich durch Speicherung der Transformationshistorie zur gleichzeitigen Abbildung der Ermüdung durch thermisches Zyklieren, siehe Kapitel 4.3 dieser Arbeit.

### 3.2.2 Modellierung von Formgedächtnislegierungen anderer Forschungsgruppen

Über den am *Lehrstuhl für Mechanik-Materialtheorie* verwendeten Modellansatz hinaus gibt es zahlreiche weitere Materialmodelle, die das Verhalten von Formgedächtnislegierungen darstellen. Bei einer Vielzahl handelt es sich bei diesen um variationelle Ansätze, bei denen ein in Abhängigkeit von der Mikrostruktur aufgestellter Energieterm minimiert oder im Fall eines betrachteten Dissipationsansatzes entsprechend maximiert wird. In Govindjee u. Miehe (2001) erfolgt die Modellierung basierend auf dem Prinzip maximaler Dissipation. Das auf isotropes Materialverhalten begrenzte Modell basiert auf der Annahme einer unteren Energiegrenze sowie einer durch die Phasenumwandlung ausgelösten Dissipation an Energie. Der gewählte Ansatz resultiert in einer ratenunabhängigen Phasentransformation. Basiert das in Govindjee u. Miehe (2001) vorgestellte Modell noch auf der Annahme infinitesimal kleiner Deformationen, so wird diese Theorie in Stein u. Sagar (2008) schließlich hinsichtlich finiter Deformationen erweitert. Dazu wird die verwendete Reiß-Energiegrenze der Phasemischung unter Verwendung eines Neo-Hooke-Materials für große Deformationen verallgemeinert.

Das in Stupkiewicz u. Petryk (2002) präsentierte Materialmodell modelliert den Effekt der Pseudoelastizität ausgehend von einer verschachtelten zweiphasigen Laminatstruktur auf mikrostruktureller Ebene. Des Weiteren muss zunächst ein Grenzwert der thermodynamischen Triebkraft überwunden werden, bevor die martensitische Transformation initialisiert werden kann. Das in Govindjee u. Hall (2000) vorgestellte ratenabhängige Materialmodell hingegen basiert auf Konzepten der Wahrscheinlichkeitstheorie. Die definierten Transformationswahrscheinlichkeiten der einzelnen Phasen werden darin mit Hilfe eines Eyring-Modells angenommen. Diese Wahrscheinlichkeit steht dabei in einem exponentiellen Zusammenhang zu der Größe des transformierenden Bereichs, der Temperatur sowie einer Energiebarriere, die das Material überschreiten muss, damit es überhaupt zur Phasenumwandlung kommt. Es bilden sich folglich die für den vorherrschenden Belastungszustand wahrscheinlichsten Phasen, wobei die Transformation durch das zunächst notwendige Überwinden einer die jeweiligen Phasen stabilisierenden Energiebarriere gedämpft bzw. verzögert wird.

In dem eher phänomenologischen Modell nach Panico u. Brinson (2007) werden ratenunabhängige Evolutionsgleichungen vom Biot-Typ vorausgesetzt und damit verbunden eine jeweilige Entwicklung der Volumenfraktionen sowie der inelastischen Dehnung durch martensitische Reorientierung und die Transformationsdehnung wieder in Richtung der thermodynamischen Triebkräfte. Das präsentierte Modell wurde in Stebner u. Brinson (2013) schließlich unter Berücksichtigung eines expliziten Integrationsverfahrens und einer abgewandelten und mathematisch fortan weicheren Fließfunktion für die Bildung der Transformationsdehnung modifi-

ziert. Diese Fließfunktion dient darin der Verbesserung der numerischen Implementierung und somit einer deutlichen Stabilisierung des Algorithmus.

Weiterhin gibt es eine Vielzahl an Modellen, die in der Lage sind die funktionale Degradierung der FGL während der zyklisch wiederholten Belastung vorherzusagen. Eine grundsätzliche Unterscheidung der Modelle kann aufgrund der Interpretation der mit dem Zyklisieren auftretenden Effekte erfolgen. Die erste Gruppe der Modelle bindet die grundsätzlichen Materialeigenschaften, wie beispielsweise die kalorische Energie oder die Fließgrenze zum Beginn der Phasentransformation, an die Zyklenzahl oder äquivalente Faktoren zur Beurteilung der bereits erfahrenen Transformationen. Das Resultat sind Materialmodelle, die in der Regel eine gute Abbildung des jeweils modellierten Versuches ermöglichen, jedoch auch meist keine universelle Anwendbarkeit aufweisen können. Zudem handelt es sich bei der Zyklenzahl um keine physikalische Größe, was den phänomenologischen Charakter dieser Modelle unterstreicht. Die zweite Klasse der Materialmodelle umfasst jene, die die funktionale Degradierung mit Hilfe von plastischen bzw. irreversiblen Effekten innerhalb des Materials modellieren. Im Unterschied zur Berücksichtigung klassischer Plastizität, wie beispielsweise in Junker u. Hempel (2017) und Govindjee u. Kasper (1999), die bei deutlich höheren Spannungen als die Phasentransformation stattfindet, erfolgt das Auftreten der Irreversibilitäten während der Phasentransformation.

Die eher phänomenologische Herangehensweise von Grossmann u. a. (2010) greift den in Shaw (2000) vorgestellten Ansatz auf. Dieser berücksichtigt die Phasentransformation von Austenit in Martensit durch ein klassisches  $J_2$ -Plastizitätsmodell mit isotroper Verfestigung. Darin erfolgt die Modellierung einer klar erkennbaren Phasenfront durch eine nicht-konvexe Energiedichtefunktion. Die damit verbundenen mathematischen Diskontinuitäten resultieren in einem Spannungsabfall während der Umwandlung und folglich einer stark netzabhängigen Lokalisierung der Phasentransformation. In Grossmann u. a. (2010) wird dieses Entfestigungsmodell durch Berücksichtigung einer von der Zyklenzahl abhängigen Fließspannung erweitert, um den Effekt der funktionalen Ermüdung abbilden zu können. Aufgrund des gewählten Plastizitätsansatzes kann die Rücktransformation durch die beiden Modelle jedoch nicht erfasst werden.

Das in Bartel u. a. (2016) vorgestellte Modell widmet sich ebenfalls der Berechnung klarer Phasengrenzen, die sich innerhalb eines Drahtes bewegen können und versucht somit die im Experiment deutlich zu erkennenden Transformationsfronten, siehe z.B. Shaw u. Kyriakides (1997), abzubilden. Diese Fronten werden als Diskontinuitäten innerhalb des Dehnungsfeldes aufgefasst und ihre Bewegung auf Grundlage kinematischer Betrachtungen modelliert. Durch energetische Minimierung resultiert eine ratenabhängige Evolution der Position der Phasengrenzen vom Biot-Typ, siehe hierzu Kapitel 2.5. Zur Berücksichtigung der funktionalen Ermüdung werden, wie bereits in den vorherigen Modellen, exponentielle Funktionen eingefügt, die die Transformation mit zunehmender Anzahl des Passierens der Transformationsfront an der jeweiligen Position beeinflussen. Durch diesen Modellansatz kann das Spannungs-Dehnungs-Diagramm eines zyklischen Zugexperiments sowohl für eine gleichbleibende als auch für eine zunehmende maximale Dehngrenze abgebildet werden.

Ein letztes Beispiel für die Modellierung der funktionalen Ermüdung durch Verwendung der Zyklenzahl stellt das Modell von Abeyaratne u. Kim (1997) dar, das auf dem in Abeyaratne u. Knowles (1993) vorgestellten Ausgangsmodell basiert. Auf Grundlage eines gewählten abschnittsweise linearen Spannungsverlaufs werden die Gibbs-Energien aller Phasen berechnet. Dabei ist die Phase mit der geringsten Energie stabil. Überschreitet die Differenz zwischen den instabilen und der stabilen Phase einen Schwellenwert, so wird die Phasenumwandlung initialisiert. Der Einfluss des Zyklisierens wird durch eine exponentielle Abhängigkeit dieses

Schwellenwertes von der Zyklenzahl erreicht. Zwar ist es durch diesen Modellansatz möglich, die Plateaubabsenkung abzubilden, jedoch kommt es nicht zur Bildung bleibender Dehnungen.

Ein erstes Beispiel für die Verwendung physikalischer Größen zur Beschreibung des Degradierungseffekts wird in Bo u. Lagoudas (1999) und Lagoudas u. Entchev (2004) vorgestellt. Das in Boyd u. Lagoudas (1996) bzw. Lagoudas (2008) vorgestellte Ausgangsmaterialmodell berücksichtigt die martensitische Volumenfraktion als interne Variable. Die in Boyd u. Lagoudas (1996) dargestellten Evolutionsgleichungen für die Volumenfraktion und die damit verbundene Transformationsdehnung korrespondieren mit der Coleman-Noll-Methode und somit mit dem ersten und zweiten Hauptsatz der Thermodynamik. Der verwendete Transformations-tensor ist darin je nachdem, ob es sich um die Umwandlung von Austenit in Martensit oder um die Rücktransformation handelt, abhängig von dem Spannungsdeviator oder proportional zur vorhandenen Transformationsdehnung. Das durch zusätzliche Berücksichtigung der Kuhn-Tucker-Bedingungen resultierende Materialmodell zeigt eine ratenabhängige Evolution der Mikrostruktur. Die in Bo u. Lagoudas (1999) und Lagoudas u. Entchev (2004) vorgestellten Erweiterungen des Modells aus Boyd u. Lagoudas (1996) berücksichtigen plastische Effekte während einer thermisch bzw. spannungsinduzierten Transformation. Die entstehenden plastischen Dehnungen werden durch die Bildung entzwilligten Martensits hervorgerufen, für dessen Entwicklung ein exponentieller Ansatz angenommen wird. Um die Veränderung der Spannungs-Dehnungs-Hysterese zu berücksichtigen, werden innerhalb des Materialmodells des Weiteren für charakteristische Materialparameter ebenfalls exponentielle Funktionen angenommen, die diese Parameter und somit die Eigenschaften der Hysterese in Verbindung zu der akkumulierten entzwilligten martensitischen Volumenfraktion setzen. Ein detaillierter Überblick der umfassenden Studien über FGL der Forschergruppe findet sich in Lagoudas (2008).

Ein weiteres energetisch motiviertes Modell, das den kumulierten Martensit als verantwortlich für das Materialverhalten während des Zyklierens zeichnet, wird in Zaki u. Moumni (2007b) vorgestellt. Die Energie setzt sich darin aus den einzelnen Energien der vorhandenen Phasen sowie einem Anteil, der die Interaktion jener Phasen beschreibt, zusammen. Durch Interpretation der thermodynamischen Triebkräfte als Subdifferenziale eines formulierten Pseudopotentials der Dissipation werden Triebkräfte hergeleitet, die zusammen mit Kuhn-Tucker-Bedingungen die Veränderung der Mikrostruktur regeln. Die im zweiten Teil der Veröffentlichung von Zaki u. Moumni (2007a) vorgestellte Modellierung wiederholter Belastungen erfolgt durch Einführung eines lokalen Spannungsfeldes, das die Umwandlung von Austenit in Martensit begünstigt. Die Evolution dieses internen Spannungsfeldes sowie der bleibenden Dehnung erfolgt dabei mitunter durch die Multiplikation mit einer exponentiellen Funktion des kumulierten Martensits.

In Auricchio u. a. (2007) wird das zyklische Materialverhalten durch Integration einer inelastischen Dehnung in das ursprüngliche Modell Auricchio u. Petrini (2004) berücksichtigt. Das thermodynamisch konsistente Ausgangsmodell basiert wiederum auf der Wahl ratenabhängiger Evolutionsgleichungen für die Transformationsdehnung und der Erfüllung der Kuhn-Tucker-Bedingungen sowie folglich einer die Zug-Druck Asymmetrie erfüllenden Fließfunktion. Durch die in Auricchio u. a. (2007) vorgestellte Erweiterung kommt es durch eine Kopplung reversibler und irreversibler Vorgänge zu einer erhöhten Triebkraft des reversiblen Prozesses infolge der irreversiblen Dehnungsanteile und einer Reduktion der Triebkraft der irreversiblen Dehnung durch die reversible Transformationsdehnung. Dieser Ansatz wird in Barera u. a. (2014) durch die Interpretation der inelastischen Dehnung als Tensor der funktionalen Ermüdung erweitert. Neben der zusätzlichen Berücksichtigung makroskopischer Plastizität und einer veränderten Rate der Dissipationsfunktion werden makroskopische Bereiche eingeführt, die infolge der erfahrenen inelastischen Deformation fortan keine Phasenumwandlung mehr

erfahren können.

Weitere Materialmodelle für die funktionale Ermüdung während des Zyklierens finden sich beispielsweise in LExcellent u. Bourbon (1996). Darin sind – ähnlich wie in dem in dieser Arbeit vorgestellten Modell – die nach Entlastung in jedem Zyklus bleibenden Martensitanteile ausschlaggebend für das Materialverhalten. In Tanaka u. a. (1995) werden eine makroskopische bleibende Spannung und Dehnung sowie ein makroskopischer Martensitgehalt als zusätzliche interne Variablen berücksichtigt und so mit Hilfe eines exponentiellen Ansatzes der genannte Effekt abgebildet.

Das als letztes Beispiel im Rahmen dieser Arbeit aufgeführte und in Bouvet u. a. (2004) beschriebene Materialmodell berücksichtigt zwei angenommene Fließgrenzen für die Spannungen, die angeben, ob in dem Material eine Transformation von Austenit in Martensit oder die entsprechende Rücktransformation stattfindet. Ausgehend von diesen Fließgrenzen wird die Entwicklung der effektiv vorhandenen Transformationsdehnungen bestimmt. In der in Saint-Sulpice u. a. (2009) vorgestellten Modellerweiterung werden diese Fließgrenzen durch eine angenommene Abhängigkeit von dem momentanen sowie minimalen und maximalen Martensitgehalts des vorherigen Zyklus unter zu Hilfenahme von logarithmischen und exponentiellen Ansätzen modifiziert und so die funktionale Degradierung abgebildet.

## **4 Variationelle Materialmodelle zur Modellierung irreversibler Prozesse in polykristallinen Formgedächtnislegierungen**

In Kapitel 2.5 wurde bereits das Prinzip des Minimums des Dissipationspotentials vorgestellt. Dieses wird nun für die Entwicklung dreier Materialmodelle zur Beschreibung der funktionalen Ermüdung in polykristallinen Formgedächtnislegierungen verwendet. Das erste Modell verknüpft die Phasentransformation zwischen Austenit und Martensit mit der Formation plastischer Dehnungen. Wird die polykristalline Struktur im ersten Ansatz durch Auswertung für jedes einzelne Korn berücksichtigt (Modell 1a), so wird im zweiten Modell (Modell 1b) eine sich entwickelnde Orientierungsverteilungsfunktion nach Junker (2014b) verwendet, die erheblich zur Optimierung der Berechnungszeiten beiträgt. Ebenfalls unter Berücksichtigung des so reduzierten polykristallinen Ansatzes, erfolgt die Präsentation des zweiten Materialmodells mit simultaner Entwicklung irreversiblen Martensit und des dritten Modells zur gleichzeitigen Modellierung des Materialverhaltens während des thermischen Zyklierens. Für das zweite Materialmodell wurden des Weiteren sowohl ratenunabhängige (Modell 2a) als auch ratenabhängige Evolutionsgleichungen (Modell 2b) für die Phasentransformation hergeleitet. Das dritte Materialmodell (Modell 3) basiert schließlich auf der Speicherung der Transformationshistorie und ist unter gleichzeitiger Annahme einer irreversiblen Dehnung in der Lage sowohl die Effekte während des thermischen als auch während des mechanischen Zyklierens abzubilden. Die Betrachtungen des Modells 1a wurden bereits in Waimann u. a. (2016) veröffentlicht. Modell 2a wurde auf Materialpunktseben in Waimann u. a. (2017) vorgestellt und hinsichtlich der Finite-Elemente-Implementierung in Waimann u. a. (2018) präsentiert.

### **4.1 Variationelle Modellierung polykristalliner Formgedächtnislegierungen unter Berücksichtigung plastischer Dehnungen – Modell 1a**

Das in diesem Kapitel vorgestellte Materialmodell berücksichtigt die Bildung plastischer Dehnungen während der Phasentransformation. Nach der Einführung der verwendeten internen Variablen, mit deren Hilfe das komplexe Verhalten auf Mikrostrukturebene (vergl. Kapitel 3.1) beschrieben werden kann, erfolgt die Beschreibung der verwendeten kombinierten Voigt/Reuß-Energiegrenze. Im Anschluss daran wird der erstmals in Waimann u. a. (2016) verwendete gekoppelte Ansatz für die Dissipationsfunktion vorgestellt, um nachfolgend basierend auf dem Prinzip des Minimums des Dissipationspotentials ratenunabhängige Evolutionsgleichungen für die verwendeten internen Variablen herzuleiten. Die durchgeführte Legendre-Transformation liefert die das Materialmodell komplettierende Fließfunktion. Eine detaillierte Beschreibung des präsentierten Modellansatzes sowie detaillierte Simulationen auf Materialpunktebene werden bereits in Waimann u. a. (2016) vorgestellt.

### 4.1.1 Interne Variablen

Innerhalb des auf Plastizität basierenden Materialmodells wird die Mikrostruktur unter Berücksichtigung zweier interner Variablen beschrieben.

Die betrachtete polykristalline Struktur besteht aus  $N$  unterschiedlich orientierten Körnern und wird durch Betrachtung jedes einzelnen Kornes  $j$  mit einer zufällig gewählten, aber festen Kornorientierung  $\alpha^j = \{\varphi^j, \vartheta^j, \omega^j\}$  umgesetzt, siehe Abbildung 4.1 bzw. Hackl u. Heinen (2008a). Bei der ersten internen Variable handelt es sich dann um den Volumenanteil der je-

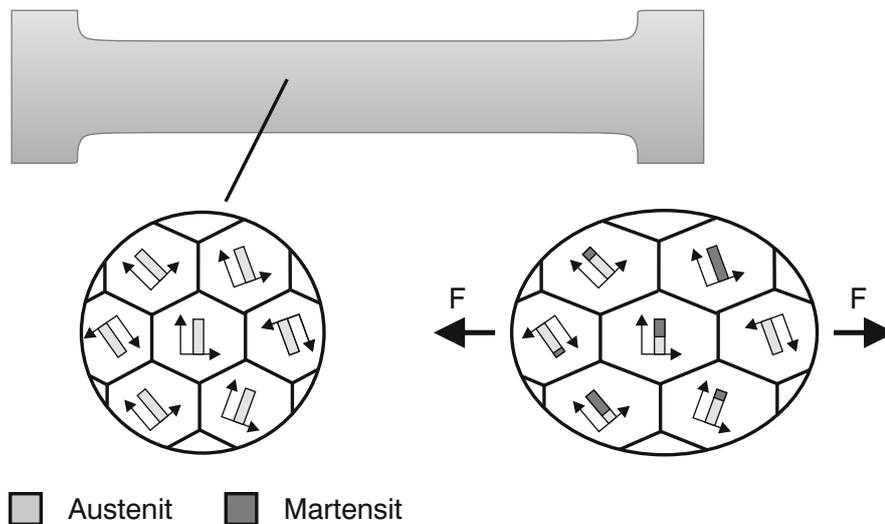


Abbildung 4.1: Polykristalline Struktur unter Berücksichtigung einzelner Körner, Waimann u. a. (2016), Waimann u. a. (2017).

weiligen austenitischen bzw.  $n$  martensitischen Phasen innerhalb des  $j$ ten Kornes  $\lambda_i^j$ . Darin beschreibt der Index  $i = 0$  den Austenit und dementsprechend  $0 < i < n$  eine der martensitischen Varianten.

Wie in Kapitel 3.1.1 dargestellt, kommt es jedoch während der Transformation von Austenit zu Martensit zu einer Versetzungsbildung, die wiederum in der Stabilisierung gewisser Mengen an Martensit resultiert. Die explizite Modellierung von Versetzungen findet auf einer niedrigeren Skala statt. Die Modellierung auf dieser Skala hätte zur Folge, dass es nicht mehr möglich wäre, die Phasen durch eine Volumenfraktion zu erfassen, da die exakte Verteilung innerhalb des Kornes inklusive klarer Phasenfronten von Bedeutung wäre. Diese Art der Modellierung resultiert in einem erheblich größeren Berechnungsaufwand. Um diesen zu umgehen, wird anstelle einer Versetzungsdichte eine plastische Dehnung  $\varepsilon_{P_i}^j$  der Phase  $i$  im  $j$ ten Korn eingeführt und somit auf eine homogenisiertere Beschreibung zurückgegriffen.

Die Einführung interner Variablen geht einher mit Nebenbedingungen, die diese erfüllen müssen. So gilt für die einzelnen Komponenten der Volumenfraktion  $\lambda$ , dass diese nicht negativ sein können

$$\lambda_i^j \geq 0 \quad \forall i, j \tag{4.1}$$

Des Weiteren muss die Massenerhaltung erfüllt werden, dies bedeutet konkret

$$\sum_{i=0}^n \lambda_i^j = 1 \quad \forall j. \quad (4.2)$$

Gleichung (4.65) muss auch für die Phasenzusammensetzung während der Initialisierung, also zu Beginn der Berechnung, erfüllt sein. Da das Anwachsen eines Volumenanteils automatisch mit der Abnahme eines anderen einhergeht, kann also alternativ die Einhaltung der Bedingung

$$\sum_{i=0}^n \dot{\lambda}_i^j = 0 \quad \forall j \quad (4.3)$$

zum Erhalt der Masse gefordert werden.

Zusätzlich zu den Nebenbedingungen für die Phasentransformation gilt im Fall der Plastizität die Volumenerhaltung und damit unter Verwendung des Einheitstensors  $\mathbf{I}$

$$\dot{\epsilon}_{P_i}^j : \mathbf{I} = 0 \quad \forall i, j. \quad (4.4)$$

#### 4.1.2 Freie Helmholtz-Energie mit kombinierter Voigt/Reuß-Energiegrenze

Bei der Wahl der Energie für das polykristalline Material wurde angenommen, dass die einzelnen Körner die gleiche Verformung erfahren und somit die resultierende Dehnung am Materialpunkt konstant sein muss. Die Modellierung erfolgt daher unter Verwendung einer kombinierten Voigt/Reuß-Energiegrenze, d.h. einer Reuß-Grenze auf Kornebene und einer Voigt-Grenze auf Materialpunktebene. Wie in Abbildung 4.2 dargestellt hat die verwendete kombinierte Energie zur Folge, dass die Spannung innerhalb jedes Korns konstant ist, sich aber zwischen den einzelnen Körnern unterscheidet. Für die Dehnung gilt des Weiteren, dass sie zwar innerhalb eines Korns variieren kann, jedoch die für jedes Korn gemittelten Dehnungen übereinstimmen, siehe Hackl u. Heinen (2008a). Die Energie des Polykristalls hat unter Verwendung dieser kombi-

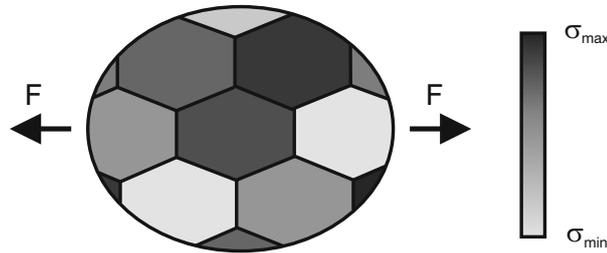


Abbildung 4.2: Spannungsverteilung unter Verwendung der kombinierten Voigt/Reuß-Energiegrenze, Waimann u. a. (2016).

nierten Energiegrenze die Form

$$\Psi_{VR} = \sum_{j=1}^N \xi^j \left( \frac{1}{2} (\epsilon - \bar{\epsilon}_P^j - \bar{\eta}^j) : \bar{\mathbb{E}}^j : (\epsilon - \bar{\epsilon}_P^j - \bar{\eta}^j) + \bar{c}^j \right). \quad (4.5)$$

Die Variable  $\eta_i$  beschreibt die experimentell bestimmbare Transformationsdehnung der einzelnen Phasen. Des Weiteren wird das austenitische System zur Referenzkonfiguration gewählt.

Die Transformationsdehnung des Austenits  $\eta_0$  entspricht somit  $\mathbf{0}$ . Zur Berücksichtigung der Orientierung des jeweils betrachteten Korns  $j$  wird die Transformationsdehnung mithilfe des Tensors  $\mathbf{Q}$  in die durch die anfänglich gewählten Eulerwinkel  $\alpha^j = \{\varphi, \vartheta, \omega\}$  beschriebene Orientierung rotiert. Der Rotationstensor  $\mathbf{Q}^j(\alpha^j)$  kann mit Hilfe von

$$\mathbf{Q}(\alpha) = \begin{pmatrix} \cos \varphi \cos \omega - \cos \vartheta \sin \varphi \sin \omega & -\cos \vartheta \cos \omega \sin \varphi - \cos \varphi \sin \omega & \sin \vartheta \sin \varphi \\ \cos \omega \sin \varphi + \cos \vartheta \cos \varphi \sin \omega & \cos \vartheta \cos \varphi \cos \omega - \sin \varphi \sin \omega & -\cos \varphi \sin \vartheta \\ \sin \vartheta \sin \omega & \cos \omega \sin \vartheta & \cos \vartheta \end{pmatrix} \quad (4.6)$$

berechnet werden. Für die Phase  $i$  im Korn mit der Orientierung  $j$  ist die rotierte Transformationsdehnung dann durch

$$\eta_i^j = (\mathbf{Q}^j)^T \cdot \eta_i \cdot \mathbf{Q}^j \quad (4.7)$$

gegeben. Der Tensor  $\mathbb{E}_i$  ist die Steifigkeitsmatrix der einzelnen Phasen, die ebenfalls mit Hilfe des Rotationstensors aus Gleichung (4.6) gemäß Gleichung (2.23) in die jeweilige Kornorientierung überführt werden kann:

$$\mathbb{E}_{i,mnop}^j = Q_{qm}^j Q_{rn}^j Q_{so}^j Q_{tp}^j \mathbb{E}_{i,qrst} \cdot \quad (4.8)$$

Für den Fall einer isotropen Steifigkeitsmatrix kann diese Rotation entfallen, da sie invariant bezüglich jeder beliebigen Drehung ist. Die Variable  $c_i$  beschreibt die kalorische Energie der Phasen und ist abhängig von der Temperatur  $\theta$ . Sie berücksichtigt die bei unterschiedlicher Temperatur unterschiedlich große Stabilität der einzelnen Phasen, siehe Huo u. Müller (1993). Die in Gleichung (4.5) durch  $(\bar{\cdot})^j$  gekennzeichneten effektiven Größen für die plastische und die Transformationsdehnung, den Steifigkeitstensor und die kalorische Energie lassen sich dann für jedes Korn  $j$  durch

$$\begin{aligned} \bar{\mathbb{E}}^j &= \left[ \sum_{i=0}^n \lambda_i^j (\mathbb{E}_i^j)^{-1} \right]^{-1} & \bar{\epsilon}_P^j &= \sum_{i=0}^n \lambda_i^j \epsilon_{P_i}^j \\ \bar{\eta}^j &= \sum_{i=0}^n \lambda_i^j \eta_i^j & \bar{c}^j &= \sum_{i=0}^n \lambda_i^j c_i \end{aligned} \quad (4.9)$$

berechnen.

Eine im Detail durchgeführte Energierelaxierung wird anhand des aufgrund zweier verwendeter Volumenanteile komplexeren zweiten Materialmodells in Kapitel 4.2.2 vorgestellt.

Abschließend lässt sich die in Kapitel 5.1 verwendete effektive plastische Dehnung des Materialpunktes  $\bar{\epsilon}_P$  berechnen. Im Fall der kompletten Entlastung ist die Spannung  $\sigma = \mathbf{0}$ . Da die effektive Dehnung aufgrund des bei Entlastung rein austenitischen Materials ebenfalls in jedem Korn  $j$  null ist, gilt für die Dehnung  $\epsilon = \bar{\epsilon}_P$ . Die Spannung ergibt sich dann zu

$$\sigma = \sum_{j=1}^N \xi^j \bar{\mathbb{E}}^j : (\bar{\epsilon}_P - \bar{\epsilon}_P^j) = \mathbf{0} \cdot \quad (4.10)$$

Dieser Ausdruck lässt sich schließlich nach der gesuchten effektiven plastischen Dehnung um-

formen:

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^N \xi^j \bar{\mathbb{E}}^j : \bar{\epsilon}_P &= \sum_{j=1}^N \xi^j \bar{\mathbb{E}}^j : \bar{\epsilon}_P^j \\ \bar{\epsilon}_P &= \left( \sum_{j=1}^N \xi^j \bar{\mathbb{E}}^j \right)^{-1} \sum_{j=1}^N \xi^j \bar{\mathbb{E}}^j : \bar{\epsilon}_P^j . \end{aligned} \quad (4.11)$$

### 4.1.3 Dissipationsfunktion

Wie in Kapitel 2.5 vorgestellt, berücksichtigt die Dissipationsfunktion den Anteil der Energie, der aufgebracht werden muss, um die Änderung der Mikrostruktur herbeizuführen. Dabei gilt als einzige Bedingung, dass die Dissipationsfunktion für jede mögliche Änderung der internen Variable einen nicht-negativen Wert aufweist, siehe auch Hackl u. Fischer (2008) und Carstensen u. a. (2002). Des Weiteren kann, wie bereits in Kapitel 2.6 gezeigt, über die Art der Wahl von  $\mathcal{D}$  auch bestimmt werden, welcher Art die resultierenden Evolutionsgleichungen entsprechen. Aufgrund der direkt miteinander verknüpften Phasentransformation und Bildung plastischer Dehnungen, wird die erstmals in Waimann u. a. (2016) verwendete gekoppelte Dissipationsfunktion angewendet. Diese ermöglicht die Berücksichtigung von simultan ablaufenden mikrostrukturellen Veränderungen und hat für den vorliegenden Fall die bereits in Waimann u. a. (2016) präsentierte erster Ordnung homogene Form

$$\mathcal{D} = \sum_{j=1}^N \xi^j r^j \sqrt{\sum_{i=0}^n \left( \dot{\lambda}_i^j \right) + k^j \sum_{i=0}^n \dot{\epsilon}_{P_i}^j : \dot{\epsilon}_{P_i}^j} , \quad (4.12)$$

wobei  $r^j$  den – hier orientierungsabhängigen – Dissipationsparameter beschreibt, siehe auch die Ausführungen in Kapitel 2.5. Im Zusammenhang mit der später berechneten Fließfunktion wird ersichtlich, dass es sich bei  $r_{T1}$  um eine gewisse Energiebarriere handelt, die zunächst überwunden werden muss, bevor die Mikrostrukturänderung stattfinden kann. Der Parameter  $k^j$  kann unter zur Hilfenahme der plastischen Fließgrenze des Materials  $Y_0$  durch

$$k^j = \left( \frac{Y_0}{r^j} \right)^2 \quad (4.13)$$

berechnet werden. Er berücksichtigt die unterschiedlichen Fließgrenzen der betrachteten Prozesse und somit die unterschiedlichen Mengen an Energie, die nötig sind, um eine Phasentransformation durchzuführen bzw. plastische Dehnungen zu bilden. Für den Fall reiner Plastizität und folglich nicht stattfindender Phasenumwandlungen lässt sich die Dissipationsfunktion aus Gleichung (4.12) vereinfacht durch

$$\mathcal{D} = \sum_{j=1}^N \xi^j Y_0 \sqrt{\sum_{i=0}^n \dot{\epsilon}_{P_i}^j : \dot{\epsilon}_{P_i}^j} \quad (4.14)$$

schreiben und hat somit – von der phasenweisen Betrachtung auf Kornebene abgesehen – eine ähnliche Gestalt wie die Dissipationsfunktion bei klassischer Plastizität mit der plastischen Fließgrenze als Dissipationsparameter, vergleiche Gleichung (2.65).

#### 4.1.4 Das Prinzip des Minimums des Dissipationspotentials angewandt auf die funktionale Ermüdung unter Verwendung der plastischen Dehnung

Auf Grundlage des bereits in Kapitel 2.5 beschriebenen Prinzips des Minimums des Dissipationspotentials werden in diesem Kapitel nun Evolutionsgleichungen für die beiden internen Variablen, den Volumenanteil  $\lambda$  und die plastische Dehnung  $\epsilon_P$ , hergeleitet. Die Ausführungen wurden bereits in Waimann u. a. (2016) vorgestellt und werden an dieser Stelle aufbereitet.

Wie bereits in Kapitel 2.5 beschrieben, beruht das PMDP auf der Idee, eine Lagrange-Funktion zu minimieren, die im Wesentlichen aus zwei Anteilen besteht: der Rate der freien Helmholtz-Energie und der Dissipationsfunktion. Zur Berechnung der Energierate werden zunächst die thermodynamischen Triebkräfte gemäß Gleichung (2.55) berechnet:

$$P_T = -\frac{\partial \Psi}{\partial \lambda} \quad (4.15)$$

$$P_P = -\frac{\partial \Psi}{\partial \epsilon_P}. \quad (4.16)$$

Im Korn mit der Orientierung  $j$  lauten die Triebkräfte für die Phasenumwandlung und die plastische Deformation dann für die Phase  $i$

$$P_{Ti}^j = \xi^j \left( \frac{1}{2} (\boldsymbol{\sigma}^j)^T : (\mathbb{E}_i^j)^{-1} : \boldsymbol{\sigma}^j + (\boldsymbol{\epsilon}_{Pi}^j + \boldsymbol{\eta}_i^j) : \boldsymbol{\sigma}^j - c_i \right) \quad (4.17)$$

$$P_{Pi}^j = \xi^j \lambda_i^j \boldsymbol{\sigma}^j. \quad (4.18)$$

Die Rate der Energie unter Verwendung der kombinierten Voigt/Reuß-Energie kann schließlich mit Hilfe der Kettenregel als

$$\dot{\Psi}_{VR} = -\sum_{j=1}^N \sum_{i=0}^n P_{Ti}^j \dot{\lambda}_i^j - \sum_{j=1}^N \sum_{i=0}^n P_{Pi}^j : \dot{\boldsymbol{\epsilon}}_{Pi}^j \quad (4.19)$$

geschrieben werden. Zusammen mit der Dissipationsfunktion aus Gleichung (4.14) sowie den Nebenbedingungen in den Gleichungen (4.1)-(4.4) kann die Lagrange-Funktion aufgestellt werden:

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & -\sum_{j=1}^N \sum_{i=0}^n P_{Ti}^j \dot{\lambda}_i^j - \sum_{j=1}^N \sum_{i=0}^n P_{Pi}^j : \dot{\boldsymbol{\epsilon}}_{Pi}^j + \sum_{j=1}^N \xi^j \gamma^j \sqrt{\sum_{i=0}^n (\dot{\lambda}_i^j)^2 + k^j \sum_{i=0}^n \dot{\boldsymbol{\epsilon}}_{Pi}^j : \dot{\boldsymbol{\epsilon}}_{Pi}^j} \\ & + \sum_{j=1}^N \kappa_T^j \sum_{i=0}^n \dot{\lambda}_i^j - \sum_{j=1}^N \sum_{i=0}^n \gamma_{Ti}^j \dot{\lambda}_i^j + \sum_{j=1}^N \sum_{i=0}^n \kappa_{Pi}^j \dot{\boldsymbol{\epsilon}}_{Pi}^j : \mathbf{I} \rightarrow \min_{\lambda, \epsilon_P}. \end{aligned} \quad (4.20)$$

Ein großer Vorteil des PMDP liegt in der einfachen Berücksichtigung von Nebenbedingungen durch die Addition eines entsprechenden Terms zur Lagrange-Funktion. Bei der Berücksichtigung dieser Nebenbedingungen wird im Wesentlichen zwischen Gleichungen und Ungleichungen unterschieden. Zur Berücksichtigung der Gleichungen (4.3) und (4.4) werden die Lagrange-Parameter  $\kappa_T^j$  und  $\kappa_{Pi}^j$  eingeführt. Bei Nichterfüllung der jeweiligen Gleichungen sorgen sie dafür, dass die Lagrange-Funktion wächst, was durch die Minimierung verhindert wird.

Der Kuhn-Tucker-Parameter  $\gamma_{Ti}^j$  dient der Berücksichtigung der Ungleichung (4.1). Für ihn gilt der Ausdruck

$$\gamma_{Ti}^j = \begin{cases} 0 & \text{if } \lambda_i > 0 \vee (\lambda_i = 0 \wedge \dot{\lambda}_i > 0) \\ > 0 & \text{else} \end{cases} . \quad (4.21)$$

Auch der Kuhn-Tucker-Parameter sorgt folglich für eine Bestrafung des Energieterms bei Verletzung der Nichtnegativität der Volumenfraktionen.

Die Minimierung der Lagrange-Funktion (4.20) bezüglich der Volumenfraktion ergibt

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \lambda_i^j} = -P_{Ti}^j + \frac{\xi^j r^j \dot{\lambda}_i^j}{\sqrt{\sum_{i=0}^n (\dot{\lambda}_i^j) + k^j \sum_{i=0}^n \dot{\epsilon}_{Pi}^j : \dot{\epsilon}_{Pi}^j}} + \kappa_{T}^j - \gamma_{Ti}^j = 0 . \quad (4.22)$$

Die obige Gleichung gilt lediglich für Werte der Raten der internen Variablen, die nicht dem Nullvektor  $\mathbf{0}$  entsprechen. Diese Beschränkung folgt aufgrund der Ableitung der Dissipationsfunktion. Wie bereits in Kapitel 2.6 gezeigt, ergibt sich durch die Ableitung von  $\mathcal{D}$  ein Subdifferential, siehe Gleichung (2.67).

Zur Weiteren Berücksichtigung der Nebenbedingungen für die Volumenanteile wird die aktive Menge  $\mathcal{A}^j$  verwendet. Sie umfasst alle Phasen einer Kornorientierung  $j$ , deren Volumenanteil  $\lambda_i^j$  positiv ist. Des Weiteren sind diejenigen Phasen inbegriffen, deren Volumenanteil zwar noch null ist, die sich durch eine positive Rate  $\dot{\lambda}_i^j$  desselben jedoch bilden werden:

$$\mathcal{A}^j = \{i | \lambda_i^j > 0\} \cup \{i | (\lambda_i^j = 0) \wedge (\dot{\lambda}_i^j > 0)\} . \quad (4.23)$$

Zur Bestimmung des Lagrange-Parameters  $\kappa_{T}^j$  wird zunächst für jedes Korn  $j$  die Ableitung nach der Volumenfraktion in Gleichung (4.22) über alle  $n_{\mathcal{A}}^j$  aktiven Phasen aufsummiert

$$\begin{aligned} - \sum_{k \in \mathcal{A}_{\lambda}^j} P_{Tk}^j + \frac{\xi^j r^j \sum_{k \in \mathcal{A}_{\lambda}^j} \dot{\lambda}_i^j}{\sqrt{\sum_{i=0}^n (\dot{\lambda}_i^j) + k^j \sum_{i=0}^n \dot{\epsilon}_{Pi}^j : \dot{\epsilon}_{Pi}^j}} + n_{\mathcal{A}}^j \kappa_{T}^j &= 0 \\ - \sum_{k \in \mathcal{A}_{\lambda}^j} P_{Tk}^j + n_{\mathcal{A}}^j \kappa_{T}^j &= 0 , \end{aligned} \quad (4.24)$$

worin der zweite Summand aufgrund der einzuhaltenden Nebenbedingung (4.3) und der Kuhn-Tucker-Parameter aufgrund seiner Definition in Gleichung (4.21) für die aktive Menge zu null werden. Wird der Ausdruck schließlich nach dem gesuchten Parameter  $\kappa_{T}^j$  aufgelöst, ergibt sich

$$\kappa_{T}^j = \frac{1}{n_{\mathcal{A}}^j} \sum_{k \in \mathcal{A}_{\lambda}^j} P_{Tk}^j . \quad (4.25)$$

Um eine kompaktere Schreibweise der Evolutionsgleichung für die Volumenfraktionen zu ermöglichen, werden zwei Größen definiert: der Konsistenzparameter  $\beta^j$  und der aktive Deviator  $\text{dev}_{\mathcal{A}^j} P_{Ti}^j$ . Der Konsistenzparameter ist durch

$$\beta^j := \frac{\sqrt{\sum_{i=0}^n (\dot{\lambda}_i^j) + k^j \sum_{i=0}^n \dot{\epsilon}_{Pi}^j : \dot{\epsilon}_{Pi}^j}}{r^j} \quad (4.26)$$

gegeben. Der aktive Deviator der Phase  $i$  im Korn mit der Orientierung  $j$  kann unter Verwendung des berechneten Parameters  $\kappa_{\mathcal{T}}^j$  durch

$$\text{dev}_{\mathcal{A}^j} P_{\mathcal{T}i}^j := P_{\mathcal{T}i}^j - \frac{1}{n_{\mathcal{A}^j}} \sum_{k \in \mathcal{A}^j} P_{\mathcal{T}k}^j \quad (4.27)$$

berechnet werden und stellt so die Triebkraft der einzelnen Phasen einer energetisch gewichteten und gemittelten Triebkraft aller existierenden Phasen im Korn gegenüber. Mit diesen beiden Größen kann die Ableitung nach  $\dot{\lambda}_i^j$  in Gleichung (4.22) schließlich nach der gesuchten Evolutionsgleichung für die Volumenanteile umgeformt werden:

$$\dot{\lambda}_i^j = \frac{\beta^j}{\xi^j} \text{dev}_{\mathcal{A}^j} P_{\mathcal{T}i}^j \quad \forall i \in \mathcal{A}^j. \quad (4.28)$$

Während also der Deviator der Triebkräfte angibt, welche Phasenanteile sich in welcher Größenordnung zueinander ändern, gibt der Konsistenzparameter die Gesamtgrößenordnung der Transformation an.

Zur Ermittlung der Evolutionsgleichung für die Formation plastischer Dehnungen wird die Minimierung der Lagrange-Funktion in Gleichung (4.20) bezüglich der Rate dieser plastischen Dehnungen durchgeführt. Die Ableitung nach  $\dot{\epsilon}_{\mathcal{P}i}^j$  lautet somit

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\epsilon}_{\mathcal{P}i}^j} = -\mathbf{P}_{\mathcal{P}i}^j + \frac{\xi^j r^j k^j \dot{\epsilon}_{\mathcal{P}i}^j}{\sqrt{\sum_{i=0}^n (\dot{\lambda}_i^j)^2 + k^j \sum_{i=0}^n \dot{\epsilon}_{\mathcal{P}i}^j : \dot{\epsilon}_{\mathcal{P}i}^j}} + \kappa_{\mathcal{P}i}^j \mathbf{I} = \mathbf{0} \quad (4.29)$$

und gilt für den Fall, dass  $\dot{\lambda}^j$  und  $\dot{\epsilon}_{\mathcal{P}}^j$  nicht dem Nullvektor entsprechen. Zur Bestimmung des Lagrange-Parameters  $\kappa_{\mathcal{P}i}^j$  wird die Summe über die Spur der Gleichung betrachtet:

$$-\mathbf{P}_{\mathcal{P}i}^j : \mathbf{I} + \frac{\xi^j r^j k^j \dot{\epsilon}_{\mathcal{P}i}^j : \mathbf{I}}{\sqrt{\sum_{i=0}^n (\dot{\lambda}_i^j)^2 + k^j \sum_{i=0}^n \dot{\epsilon}_{\mathcal{P}i}^j : \dot{\epsilon}_{\mathcal{P}i}^j}} + 3\kappa_{\mathcal{P}i}^j = 0. \quad (4.30)$$

Da aufgrund der geforderten Volumenerhaltung in Gleichung (4.4)  $\dot{\epsilon}_{\mathcal{P}i}^j : \mathbf{I} = 0$  gilt, kann  $\kappa_{\mathcal{P}i}^j$  durch

$$\kappa_{\mathcal{P}i}^j = \frac{1}{3} \mathbf{P}_{\mathcal{P}i}^j : \mathbf{I} \quad (4.31)$$

berechnet werden. Durch Umformung von Gleichung (4.29) kann schließlich die Evolutionsgleichung der plastischen Dehnungen in der Phase  $i$  im Korn mit der Orientierung  $j$  formuliert werden

$$\dot{\epsilon}_{\mathcal{P}i}^j = \frac{\beta^j}{\xi^j k^j} \text{dev} \mathbf{P}_{\mathcal{P}i}^j \quad \forall i \in \mathcal{A}^j, \quad (4.32)$$

wobei vorausgesetzt wird, dass sich plastische Dehnungen nur in vorhandenen und damit aktiven Phasen der Menge  $\mathcal{A}^j$  bilden können. In Gleichung (4.32) beschreibt  $\text{dev} \mathbf{P}_{\mathcal{P}i}^j$  den plastischen Deviator:

$$\text{dev} \mathbf{P}_{\mathcal{P}i}^j = \mathbf{P}_{\mathcal{P}i}^j - \frac{1}{3} (\mathbf{P}_{\mathcal{P}i}^j : \mathbf{I}) \mathbf{I}. \quad (4.33)$$

Die Triebkraft der plastischen Deformation entspricht der mit den Volumenanteilen der Phasen und Kornorientierung multiplizierten Spannung  $\sigma^j$ , siehe Gleichung (4.18). Bei dem plastischen Deviator handelt es sich dann um einen mit beiden Faktoren multiplizierten Spannungsdeviator. Die ermittelte Evolutionsgleichung korrespondiert somit mit den Evolutionsgleichungen der klassischen Plastizität, siehe beispielsweise Wriggers (2013).

Die Gegenüberstellung der beiden Evolutionsgleichungen (4.28) und (4.32) zeigt des Weiteren, dass diese den gleichen Konsistenzparameter  $\beta^j$  beinhalten. Dies ist eine Folge der gekoppelten Dissipationsfunktion und hat eine simultane Entwicklung der beiden internen Variablen zur Folge. Um den Konsistenzparameter zu bestimmen, wird eine Legendre-Transformation der Dissipationsfunktion durchgeführt. Den Erläuterungen in Kapitel 2.3 folgend kann diese für das betrachtete Materialmodell durch

$$\mathcal{D}^* = \sup_{\lambda, \dot{\epsilon}_P} \left\{ \sum_{j=1}^N \sum_{i=0}^n \text{dev}_{\mathcal{A}^j} P_{Ti}^j : \dot{\lambda}_i^j + \sum_{j=1}^N \sum_{i=0}^n \text{dev} \mathbf{P}_{Pi}^j : \dot{\epsilon}_{Pi}^j - \mathcal{D} \Big| \mathcal{A} \right\} \quad (4.34)$$

geschrieben werden. Gleichung (4.34) kann durch Einsetzen der Evolutionsgleichungen für die internen Variablen  $\lambda$  und  $\epsilon_P$  wie folgt umgeformt werden:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}^* &= \sup_{\lambda, \dot{\epsilon}_P} \left\{ \sum_{j=1}^N \sum_{i=0}^n \text{dev}_{\mathcal{A}^j} P_{Ti}^j : \dot{\lambda}_i^j + \sum_{j=1}^N \sum_{i=0}^n \text{dev} \mathbf{P}_{Pi}^j : \dot{\epsilon}_{Pi}^j - \mathcal{D} \Big| \mathcal{A} \right\} \\ &= \sup_{\lambda, \dot{\epsilon}_P} \left\{ \sum_{j=1}^N \sum_{i=0}^n \text{dev}_{\mathcal{A}^j} P_{Ti}^j : \frac{\beta^j}{\xi^j} \text{dev}_{\mathcal{A}^j} P_{Ti}^j + \sum_{j=1}^N \sum_{i=0}^n \text{dev} \mathbf{P}_{Pi}^j : \frac{\beta^j}{\xi^j k^j} \text{dev} \mathbf{P}_{Pi}^j - \mathcal{D} \Big| \mathcal{A} \right\} \\ &= \sup_{\lambda, \dot{\epsilon}_P} \left\{ \sum_{j=1}^N \underbrace{\beta^j}_{\geq 0} \left( \underbrace{\frac{1}{\xi^j} \sum_{i=0}^n (\text{dev}_{\mathcal{A}^j} P_{Ti}^j)^2 + \frac{1}{\xi^j k^j} \sum_{i=0}^n \text{dev} \mathbf{P}_{Pi}^j : \text{dev} \mathbf{P}_{Pi}^j - \xi^j (r^j)^2}_{:=\Phi^j \leq 0} \right) \Big| \mathcal{A} \right\}. \end{aligned} \quad (4.35)$$

Da der erste Faktor, der Konsistenzparameter  $\beta^j$ , jeden beliebigen positiven Wert annehmen kann, muss der zweite Faktor der Gleichung  $\leq 0$  sein, damit die Legendre-Transformierte weiterhin begrenzt ist. Des Weiteren kann der zweite Faktor der Gleichung als Fließfunktion  $\Phi^j$  bezeichnet werden. Die Fließfunktion hat folglich die Form

$$\Phi^j = \frac{1}{\xi^j} \sum_{i=0}^n (\text{dev}_{\mathcal{A}^j} P_{Ti}^j)^2 + \frac{1}{\xi^j k^j} \sum_{i=0}^n \text{dev} \mathbf{P}_{Pi}^j : \text{dev} \mathbf{P}_{Pi}^j - \xi^j (r^j)^2. \quad (4.36)$$

Die aus den in Gleichung (4.35) herausgestellten Eigenschaften der beiden Faktoren  $\beta^j$  und  $\Phi^j$  folgenden Zusammenhänge

$$\beta^j \geq 0, \quad \Phi^j \leq 0, \quad \beta^j \Phi^j = 0 \quad (4.37)$$

sind auch als Kuhn-Tucker-Bedingungen bekannt.

#### 4.1.5 Gewählte Ansätze für die Modellparameter

Zur Abbildung des experimentell beobachteten Effekts der funktionalen Ermüdung werden, wie bereits in Waimann u. a. (2016) vorgestellt, Ansätze für den Dissipationsparameter  $r^j$  und den Kopplungsparameter  $k^j$  angenommen. Wie in den Ausführungen in Kapitel 3.1 gezeigt führt die Bildung von Versetzungen während der mechanisch induzierten Phasentransformation zu einer Begünstigung der Transformation von Austenit zu Martensit und einer benachteiligten Rücktransformation. Wie bereits in Kapitel 4.1.1 erläutert, werden die Versetzungen im vorliegenden Materialmodell indirekt durch die plastische Dehnung berücksichtigt. Die Transformationsrichtung und damit, ob eine Umwandlung von Austenit in Martensit oder umgekehrt erfolgt, wird durch den aktiven Deviator des Austenits  $\text{dev}_{\mathcal{A}j} P_{T0}^j$  gekennzeichnet. Für den Dissipationsparameter wird ausgehend von dem Ausgangswert  $r_0$  der Ansatz

$$r^j = r_0 \left[ \left( \frac{1}{2} - \frac{\arctan(s \text{dev}_{\mathcal{A}j} P_{T0}^j)}{\pi} \right) f_{\text{I}}(\bar{\epsilon}_{\text{P}}^j) + \left( \frac{1}{2} + \frac{\arctan(s \text{dev}_{\mathcal{A}j} P_{T0}^j)}{\pi} \right) f_{\text{II}}(\bar{\epsilon}_{\text{P}}^j) \right] \quad (4.38)$$

gewählt. Darin haben die Faktoren  $f_{\text{I}}$  und  $f_{\text{II}}$  aufgrund der experimentell beobachteten Konvergenz die jeweils exponentielle Form

$$\begin{aligned} f_{\text{I}}(\bar{\epsilon}_{\text{P}}^j) &= \exp(-b_{\text{I}} |\bar{\epsilon}_{\text{P}}^j|) \\ f_{\text{II}}(\bar{\epsilon}_{\text{P}}^j) &= 1 + b_{\text{II}} (1 - f_{\text{I}}(\bar{\epsilon}_{\text{P}}^j)) \end{aligned} \quad (4.39)$$

mit den konstanten Faktoren  $b_{\text{I}}$  und  $b_{\text{II}}$ . Der Faktor  $f_{\text{I}}$  berücksichtigt somit die bei wachsender Anzahl an Versetzungen abnehmende Menge an Energie, die nötig ist, um Austenit in Martensit umzuwandeln, der Faktor  $f_{\text{II}}$  hingegen die gleichzeitig erschwerte Rücktransformation. Aufgrund der Fallunterscheidung der Transformationsrichtung wird diese mit Hilfe des aktiven Deviators des Austenits berücksichtigt. Ein negativer Deviator deutet somit auf eine Abnahme des Austenits und ein positiver Wert für diesen auf eine Zunahme hin. Um an dieser Stelle eine Heaviside und somit unstetige Funktion zu vermeiden wird die inverse Winkelfunktion  $\arctan(x)$  in Gleichung (4.38) verwendet. Der Parameter  $s$  steuert darin die Steigung während des Wechsels der Transformationsrichtung. Die Funktion für den Parameter  $r^j$  wird zur besseren Veranschaulichung in Abbildung 4.3 dargestellt. Für den Kopplungsparameter  $k^j$  wird der Ansatz

$$k^j = \left( \frac{Y_0}{r^j} \right)^2 f_{\text{III}}(\bar{\epsilon}_{\text{P}}^j) \quad (4.40)$$

gewählt. Darin berücksichtigt die Funktion  $f_{\text{III}}$

$$f_{\text{III}}(\bar{\epsilon}_{\text{P}}^j) = - \left( \frac{1}{b_{\text{III}}} |\bar{\epsilon}_{\text{P}}^j| - 1 \right)^{-1} \quad (4.41)$$

mit dem konstanten Faktor  $b_{\text{III}}$  die experimentell zu beobachtende konvergierende Zunahme der bleibenden Dehnung, siehe Waimann u. a. (2016). Diese Konvergenz ist ebenfalls auf Grundlage der Versetzungstheorie zu begründen, siehe beispielsweise Taylor (1934) und Le (2010). Für die Bildung neuer Versetzungen ist umso mehr Energie nötig je mehr Versetzungen bereits im Material vorhanden sind.

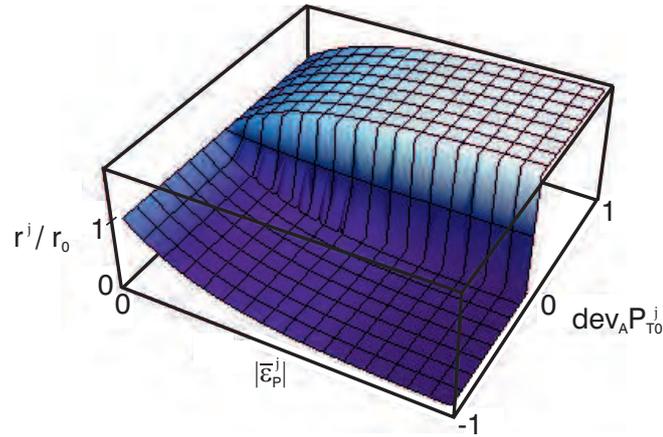


Abbildung 4.3: Funktion des Dissipationsparameters  $r^j$  in Abhängigkeit der effektiven plastischen Dehnung und der Transformationsrichtung.

#### 4.1.6 Orientierungsverteilungsfunktion zur Berücksichtigung einer Textur

Wie beispielsweise in Laplanche u. a. (2015) untersucht, kann eine thermomechanische Vorbehandlung von Formgedächtnislegierungen zu der Entwicklung einer Textur führen. Dies bedeutet, dass – durch beispielsweise Warm- oder Kaltwalzen – bestimmte Kornorientierungen wahrscheinlicher auftreten als andere. In Hackl u. Heinen (2008a) wird die Wahrscheinlichkeit einzelne Kornorientierungen vorzufinden mit Hilfe eines Young-Maßes berücksichtigt. Die Orientierungsverteilung kann durch

$$\bar{\xi}^j = \max_{k=1,\dots,6} [\mathbf{n}_{\text{pref}} \cdot \mathbf{Q}^j \cdot \mathbf{n}_{\{1,0,0\},k}]^{-q} \quad (4.42)$$

berechnet werden, wobei  $\mathbf{Q}^j$  der bereits bekannte Rotationstensor der Kornorientierung  $j$  ist. Bei  $\mathbf{n}_{\text{pref}}$  handelt es sich um die bevorzugte Orientierung, in Kapitel 5.1.1 sowie Waimann u. a. (2016) wird diese zu  $\{1, 0, 0\}$  gewählt. Die Vektoren  $\mathbf{n}_{\{1,0,0\},k}$  beschreiben die austenitischen Normalenvektoren:

$$\mathbf{n}_{\{1,0,0\},k} \in \left\{ \begin{pmatrix} \pm 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ \pm 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \pm 1 \end{pmatrix} \right\}. \quad (4.43)$$

Mit Hilfe des Faktors  $q$  lässt sich der stochastische Einfluss regulieren und folglich, wie stark die Textur ausgeprägt ist. Des Weiteren muss eine Normierung der Verteilungsfunktion (4.42) erfolgen

$$\xi^j = \frac{\bar{\xi}^j}{\sum_{j=1}^N \bar{\xi}^j}, \quad (4.44)$$

da für die Volumenanteile die Bedingung  $\sum_{j=1}^N \xi^j = 1$  erfüllt sein muss. Nähere Informationen zu diesem Ansatz zur Berücksichtigung einer Vortextur finden sich in Hackl u. Heinen (2008a), im Rahmen dieser Arbeit wird die resultierende Orientierungsverteilungsfunktion lediglich aufgegriffen, siehe Kapitel 5.1.1.

**Algorithmus 1:** Algorithmus des Modells 1a unter Berücksichtigung plastischer Dehnungen, siehe Waimann u. a. (2016).

**Input:**  $\boldsymbol{\varepsilon}^{l+1}, \boldsymbol{\lambda}^l, \boldsymbol{\varepsilon}_P^l$   
**Calc:**  $(\text{dev}_{\mathcal{A}^j} P_{T_i}^j)^{l*} = (\text{dev}_{\mathcal{A}^j} P_{T_i}^j)^{l*}(\boldsymbol{\varepsilon}^{l+1}, \boldsymbol{\lambda}^l, \boldsymbol{\varepsilon}_P^l)$   
**Calc:**  $(\text{dev} P_{P_i}^j)^{l*} = (\text{dev} P_{P_i}^j)^{l*}(\boldsymbol{\varepsilon}^{l+1}, \boldsymbol{\lambda}^l, \boldsymbol{\varepsilon}_P^l)$   
**Calc:**  $(r^j)^l = (r^j)^l((\boldsymbol{\varepsilon}_P^j)^l, (\text{dev}_{\mathcal{A}^j} P_{T_0}^j)^l), (k^j)^l = (k^j)^l((\boldsymbol{\varepsilon}_P^j)^l)$

**Calc:**  $\Phi^j = \Phi^j(\boldsymbol{\varepsilon}^{l+1}, \boldsymbol{\lambda}^l, \boldsymbol{\varepsilon}_P^l, (r^j)^l)$

**Set:**  $\boldsymbol{\lambda}^{l+1} = \boldsymbol{\lambda}^l, \boldsymbol{\varepsilon}_P^{l+1} = \boldsymbol{\varepsilon}_P^l, \mathcal{A}^l = \mathcal{A}^{l+1}, \beta_T = 0$

**while**  $\exists j : \Phi^j > \text{tol}$  **do**

$(\lambda_i^j)^{l+1} = (\lambda_i^j)^l + \frac{\beta_T^j}{\xi_j} (\text{dev}_{\mathcal{A}^j} P_{T_i}^j)^{l*} \quad \forall i \in \mathcal{A}^l$

$(\boldsymbol{\varepsilon}_P^j)^{l+1} = (\boldsymbol{\varepsilon}_P^j)^l + \frac{\beta_T^j}{\xi_j (k^j)^l} (\text{dev} P_{P_i}^j)^{l*} \quad \forall i \in \mathcal{A}^l$

**Calc:**  $\Phi = \Phi(\boldsymbol{\varepsilon}^{l+1}, \boldsymbol{\lambda}^{l+1}, \boldsymbol{\varepsilon}_P^{l+1}, (r^j)^l)$

**if**  $\exists j : \Phi^j > \text{tol}$  **then**

$(\lambda_i^j)^{l+1} = (\lambda_i^j)^l + \frac{(\beta_T^j + \text{tol}_{lt})}{\xi_j} (\text{dev}_{\mathcal{A}^j} P_{T_i}^j)^{l*} \quad \forall i \in \mathcal{A}^l$

$(\boldsymbol{\varepsilon}_P^j)^{l+1} = (\boldsymbol{\varepsilon}_P^j)^l + \frac{(\beta_T^j + \text{tol}_{lt})}{\xi_j (k^j)^l} (\text{dev} P_{P_i}^j)^{l*} \quad \forall i \in \mathcal{A}^l$

**Calc:**  $\Phi^{lt} = \Phi^{lt}(\boldsymbol{\varepsilon}^{l+1}, \boldsymbol{\lambda}^{lt}, \boldsymbol{\varepsilon}_P^{lt}, (r^j)^l)$

$\beta_T^j = \beta_T^j - \frac{\Phi}{\Phi^{lt} - \Phi} \text{tol}_{lt}$

**if**  $\exists j : \beta_T^j < -\text{tol}$  **then**  
 $\quad \perp$  ABORT

**Calc:**  $\mathcal{A}^{l+1}$

**Update:**  $\boldsymbol{\lambda}^{l+1} = \boldsymbol{\lambda}^l, \boldsymbol{\varepsilon}_P^{l+1} = \boldsymbol{\varepsilon}_P^l, \mathcal{A}^l = \mathcal{A}^{l+1}$

CONTINUE with next load step:  $l + 1 \rightarrow l + 2$

#### 4.1.7 Algorithmische Implementierung des Materialmodells

Der verwendete Berechnungsalgorithmus des Materialmodells wird in Algorithmus 1 vorgestellt. Die Implementierung erfolgt dabei unter Verwendung eines expliziten Eulerverfahrens, siehe Schäfer (2013). Demnach wird die Rate einer beliebigen internen Variable  $\Lambda$  durch

$$\dot{\Lambda} = \frac{\Lambda^{l+1} - \Lambda^l}{\Delta t} \quad (4.45)$$

approximiert, wobei  $l + 1$  auf den aktuellen und  $l$  auf den vorherigen Lastschritt verweist und es sich bei  $\Delta t$  um das Zeitinkrement handelt. Unter Berücksichtigung dieser Diskretisierung können die internen Variablen des momentanen Lastschrittes mit Hilfe der ratenunabhängigen

Evolutionsgleichungen durch

$$\begin{aligned} (\lambda_i^j)^{l+1} &= (\lambda_i^j)^l + \frac{\beta_T^j}{\xi^j} (\text{dev}_{\mathcal{A}^j} P_{T_i}^j)^{l*} |_{\mathcal{A}} \\ (\dot{\epsilon}_{P_i}^j)^{l+1} &= (\dot{\epsilon}_{P_i}^j)^l + \frac{\beta_T^j}{\xi^j k^j} (\text{dev} P_{P_i}^j)^{l*} |_{\mathcal{A}} \end{aligned} \quad (4.46)$$

berechnet werden. Darin beschreibt  $\beta_T^j$  den Konsistenzparameter multipliziert mit dem Zeitinkrement:  $\beta_T^j = \beta^j \Delta t$ . Die Schreibweise  $(\cdot)^{l*}$  impliziert des Weiteren, dass die betroffenen Kraftgrößen bezüglich der aktuellen Dehnung  $\epsilon^{l+1}$  und der internen Variablen des vorherigen Berechnungsschrittes  $\Lambda^l$  berechnet werden, somit gilt  $(\text{dev}_{\mathcal{A}^j} P_{T_i}^j)^{l*} = (\text{dev}_{\mathcal{A}^j} P_{T_i}^j)^{l*} (\epsilon^{l+1}, \lambda^l, \epsilon_P^l)$  und  $(\text{dev} P_{P_i}^j)^{l*} = (\text{dev} P_{P_i}^j)^{l*} (\epsilon^{l+1}, \lambda^l, \epsilon_P^l)$ .

Zur Berechnung der mikrostrukturellen Änderungen werden also für jeden Lastschritt zunächst ausgehend von der aktuellen Dehnung  $\epsilon^{l+1}$  sowie den Volumenfraktionen  $\lambda^l$  und den plastischen Dehnungen  $\epsilon_P^l$  des vorherigen Lastschrittes der aktive Deviator und der Deviator der plastischen Deformation berechnet und die Modellparameter  $r^j$  und  $k^j$  bestimmt. Im Anschluss daran erfolgt eine Überprüfung der Fließfunktion  $\Phi^j$ . Erfüllt diese unter Gewährung einer Toleranz  $\text{tol}$  in jeder Orientierung  $j$  die Kuhn-Tucker-Bedingung aus Gleichung (4.37)  $\Phi^j \leq \text{tol}$ , so kommt es zu keiner Evolution der internen Variablen und es kann nach der Speicherung der internen Variablen als Ausgangswerte für den nächsten Lastschritt direkt mit diesem fortgefahren werden. Existiert jedoch eine Orientierung in der die Toleranz der Fließgrenze nicht eingehalten wird, erfolgt eine Aktualisierung der internen Variablen mit Hilfe der gewählten Diskretisierung aus Gleichung (4.46). Um den Konsistenzparameter  $\beta_T^j$  so zu bestimmen, dass die Kuhn-Tucker-Bedingungen wieder erfüllt werden, wird das Newton-Verfahren angewendet, siehe hierzu beispielsweise Hermann (2011). Die benötigte Steigung der Funktion wird dabei numerisch durch Stören des Konsistenzparameters um einen Wert  $\text{tol}_t$  berechnet. Wird der Konsistenzparameter  $\beta_T^j$  gefunden und schließlich die Fließgrenzen in allen Körnern eingehalten, kann unter Verwendung der aktualisierten internen Variablen als Ausgangswerte mit dem nächsten Lastschritt fortgefahren werden.

#### 4.1.8 Modifizierung zur effizienteren Berücksichtigung der polykristallinen Struktur – Modell 1b

Das in diesem Kapitel vorgestellte Modell zur gleichzeitigen Abbildung plastischer Deformationen während der Phasentransformation berücksichtigt den polykristallinen Charakter des Materials durch Verwendung der in Kapitel 4.1.2 vorgestellten kombinierten Voigt/Reuß-Energiegrenze. Diese hat zur Folge, dass die Auswertung des Materialmodells und somit die Berechnung der internen Variablen getrennt für jedes Korn geschieht, siehe die Evolutionsgleichungen (4.28) und (4.32) sowie die Fließfunktion in (4.36) bzw. (4.37). Diese Berechnung der Mikrostruktur je Korn resultiert in einem erheblichen Berechnungsaufwand. Um diesen zu reduzieren, wird an dieser Stelle die bereits in Junker (2014b) eingeführte und auch in den nachfolgend präsentierten Materialmodellen verwendete dynamische Orientierungsverteilungsfunktion vorgestellt. Statt also jedes Korn einzeln zu betrachten, wird der Materialpunkt als Ganzes in den Blick genommen, siehe Abbildung 4.4. Zur Berücksichtigung der unterschiedlich orientierten Körner werden die Eulerwinkel  $\alpha = \{\varphi, \vartheta, \omega\}$  als interne Variablen eingeführt. Sie beschreiben die Richtung, in der die Transformation stattfindet. Diese modifizierte Betrachtungsweise

des Polykristalls hat zur Folge, dass auch die anderen beiden internen Variablen  $\lambda$  und  $\varepsilon_P$  als gemittelter Wert für den Materialpunkt berechnet werden.

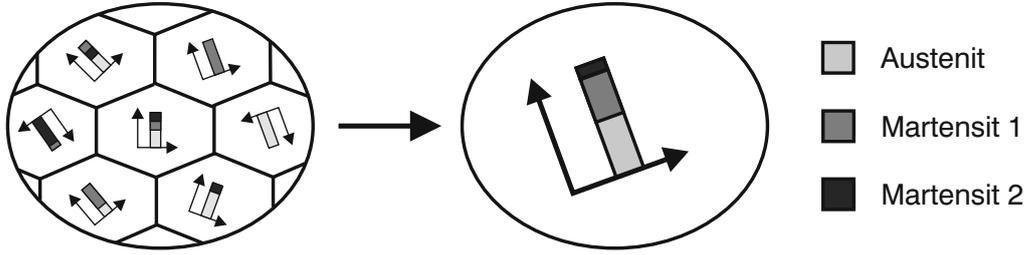


Abbildung 4.4: Polykristalline Struktur unter Berücksichtigung der Orientierungsverteilungsfunktion.

Anstelle der kombinierten Voigt/Reuß-Energie aus Gleichung (4.5) wird nun der Ansatz

$$\Psi_{\text{rel}} = \frac{1}{2} (\varepsilon - \bar{\varepsilon}_P - \mathbf{Q}^T \cdot \bar{\eta} \cdot \mathbf{Q}) : \bar{\mathbb{E}} : (\varepsilon - \bar{\varepsilon}_P - \mathbf{Q}^T \cdot \bar{\eta} \cdot \mathbf{Q}) + \bar{c} \quad (4.47)$$

für die freie Helmholtz-Energie gewählt, der eine Reuß-Energiegrenze auf Materialpunktebene berücksichtigt. Die effektiven Größen lassen sich – äquivalent zu Gleichung (4.9) – nun für den gesamten Materialpunkt gültig durch

$$\begin{aligned} \bar{\mathbb{E}} &= \left[ \sum_{i=0}^n \lambda_i (\mathbb{E}^i)^{-1} \right]^{-1} & \bar{\varepsilon}_P &= \sum_{i=0}^n \lambda_i \varepsilon_{P_i} \\ \bar{\eta} &= \sum_{i=0}^n \lambda_i \eta_i & \bar{c} &= \sum_{i=0}^n \lambda_i c_i. \end{aligned} \quad (4.48)$$

berechnen. Der in Gleichung (4.47) verwendete Rotationstensor  $\mathbf{Q}$  ist nun nicht mehr abhängig von den zu Beginn gewählten konstanten Winkeln eines jeden Kornes, sondern von der internen Variable  $\alpha$ . Es gilt also  $\mathbf{Q} = \mathbf{Q}(\alpha)$  mit dem bereits in Gleichung (4.6) eingeführten Rotationstensor

$$\mathbf{Q}(\alpha) = \begin{pmatrix} \cos \varphi \cos \omega - \cos \vartheta \sin \varphi \sin \omega & -\cos \vartheta \cos \omega \sin \varphi - \cos \varphi \sin \omega & \sin \vartheta \sin \varphi \\ \cos \omega \sin \varphi + \cos \vartheta \cos \varphi \sin \omega & \cos \vartheta \cos \varphi \cos \omega - \sin \varphi \sin \omega & -\cos \varphi \sin \vartheta \\ \sin \vartheta \sin \omega & \cos \omega \sin \vartheta & \cos \vartheta \end{pmatrix}. \quad (4.49)$$

Dieser ist somit nicht mehr statisch, sondern wird sich belastungsabhängig mit der internen Variable  $\alpha$  entwickeln. Anders als bei dem unmodifizierten Ansatz, werden bei den späteren Berechnungen isotrope Steifigkeitsmatrizen  $\mathbb{E}_i$  verwendet und somit kann auf eine Rotation der effektiven Steifigkeitsmatrix  $\bar{\mathbb{E}}$  verzichtet werden.

Aus der modifizierten Energie lassen sich anschließend die Triebkräfte der internen Variablen berechnen. Die Triebkraft der Eulerwinkel kann durch

$$\mathbf{P}_R = -\frac{\partial \Psi_{\text{rel}}}{\partial \alpha} = -\frac{\partial \Psi_{\text{rel}}}{\partial \mathbf{Q}} : \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial \alpha} \quad (4.50)$$

berechnet werden. Die verwendete Ableitung der Energie nach dem Rotationstensor  $\mathbf{Q}$  hat die Form

$$\frac{\partial \Psi_{\text{rel}}}{\partial \mathbf{Q}} = -2\bar{\eta} \cdot \mathbf{Q} \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (4.51)$$

und die Ableitungen von  $\mathbf{Q}$  nach den Eulerwinkeln  $\boldsymbol{\alpha} = \{\varphi, \vartheta, \omega\}$  lassen sich jeweils durch

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial \varphi} &= \begin{pmatrix} -\sin \varphi \cos \omega - \cos \vartheta \cos \varphi \sin \omega & -\cos \vartheta \cos \omega \cos \varphi + \sin \varphi \sin \omega & \sin \vartheta \cos \varphi \\ \cos \omega \cos \varphi - \cos \vartheta \sin \varphi \sin \omega & -\cos \vartheta \sin \varphi \cos \omega - \cos \varphi \sin \omega & \sin \varphi \sin \vartheta \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial \vartheta} &= \begin{pmatrix} \sin \vartheta \sin \varphi \sin \omega & \sin \vartheta \cos \omega \sin \varphi & \cos \vartheta \sin \varphi \\ -\sin \vartheta \cos \varphi \sin \omega & -\sin \vartheta \cos \varphi \cos \omega & -\cos \varphi \cos \vartheta \\ \cos \vartheta \sin \omega & \cos \omega \cos \vartheta & -\sin \vartheta \end{pmatrix} \\ \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial \omega} &= \begin{pmatrix} -\cos \varphi \sin \omega - \cos \vartheta \sin \varphi \cos \omega & \cos \vartheta \sin \omega \sin \varphi - \cos \varphi \cos \omega & 0 \\ -\sin \omega \sin \varphi + \cos \vartheta \cos \varphi \cos \omega & -\cos \vartheta \cos \varphi \sin \omega - \sin \varphi \cos \omega & 0 \\ \sin \vartheta \cos \omega & -\sin \omega \sin \vartheta & 0 \end{pmatrix} \quad (4.52) \end{aligned}$$

bestimmen, siehe hierzu Junker (2014b).

Die Form der Triebkräfte von  $\boldsymbol{\lambda}$  und  $\boldsymbol{\varepsilon}_P$  entspricht im Wesentlichen den Gleichungen (4.17) und (4.18), wobei auch hier eine Betrachtung der Größen auf der Materialpunktebene erfolgt und nicht auf Kornebene:

$$\begin{aligned} P_{Ti} &= \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} : (\mathbb{E}_i)^{-1} : \boldsymbol{\sigma} + (\boldsymbol{\varepsilon}_{Pi} + \mathbf{Q}^T \cdot \boldsymbol{\eta}_i \cdot \mathbf{Q}) : \boldsymbol{\sigma} - c_i \\ \mathbf{P}_{Pi} &= \lambda_i \boldsymbol{\sigma} . \end{aligned} \quad (4.53)$$

Die Spannung in Gleichung (4.53) kann dabei durch

$$\boldsymbol{\sigma} = \bar{\mathbb{E}} : (\boldsymbol{\varepsilon} - \mathbf{Q}^T \cdot \bar{\boldsymbol{\eta}} \cdot \mathbf{Q} - \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_P) \quad (4.54)$$

berechnet werden.

Die Dissipationsfunktion (4.12) wird des Weiteren um einen Anteil bezüglich der Eulerwinkel ergänzt. Dieser Anteil  $\mathcal{D}_R$  wird in Anlehnung an Junker (2014a) zweiter Ordnung homogen gewählt und hat die Form

$$\mathcal{D}_R = \frac{r_R}{2} \|\boldsymbol{\Omega}\|^2 , \quad (4.55)$$

wobei  $r_R$  den viskosen Parameter und  $\boldsymbol{\Omega} := \dot{\mathbf{Q}} \cdot \mathbf{Q}^{-1}$  den schief-symmetrischen Tensor der Winkelgeschwindigkeiten beschreibt. Dessen euklidische Norm kann durch

$$\|\boldsymbol{\Omega}\|^2 = \sqrt{2} \left( \dot{\varphi}^2 + \dot{\vartheta}^2 + 2\dot{\varphi}\dot{\omega} \cos \vartheta + \dot{\omega}^2 \right) \quad (4.56)$$

berechnet werden und gewährleistet im Gegensatz zu den Winkelgeschwindigkeiten Objektivität, siehe Junker (2014a) and Junker (2014b). Der in Gleichung (4.55) aufgeführte Divisor von 2 dient, wie im Folgenden ersichtlich, lediglich der Vereinfachung der resultierenden Gleichungen. Da der Dissipationsparameter  $r_R$  ein zu bestimmender Modellparameter ist, hat der Faktor keinerlei physikalisch-relevanten Einfluss.

Die modifizierte Lagrange-Funktion kann als

$$\begin{aligned} \mathcal{L} &= - \sum_{i=0}^n P_{Ti} \dot{\lambda}_i - \sum_{i=0}^n \mathbf{P}_{Pi} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{Pi} - \mathbf{P}_R \cdot \dot{\boldsymbol{\alpha}} + r \sqrt{\sum_{i=0}^n (\dot{\lambda}_i)^2 + k \sum_{i=0}^n \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{Pi} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{Pi}} \\ &\quad + \frac{\sqrt{2} r_R}{2} \left( \dot{\varphi}^2 + \dot{\vartheta}^2 + 2\dot{\varphi}\dot{\omega} \cos \vartheta + \dot{\omega}^2 \right) + \kappa_T \sum_{i=0}^n \dot{\lambda}_i - \sum_{i=0}^n \gamma_{Ti} \dot{\lambda}_i + \sum_{i=0}^n \kappa_{Pi} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{Pi} : \mathbf{I} \\ &\rightarrow \min_{\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\varepsilon}_P, \boldsymbol{\alpha}} . \end{aligned} \quad (4.57)$$

geschrieben werden. Die Bestimmung der Evolutionsgleichungen für  $\lambda$  und  $\varepsilon_P$  erfolgt – wie in analoger Weise bereits in Kapitel 4.1.4 vorgestellt – durch Minimierung der Lagrange-Funktion und anschließende Umformung. Aufgrund der äquivalenten Vorgehensweise nicht detailliert hergeleitet, ergeben sich die Evolutionsgleichungen zu

$$\begin{aligned}\dot{\lambda}_i &= \beta \operatorname{dev}_{\mathcal{A}} P_{Ti} \quad \forall i \in \mathcal{A} \\ \dot{\varepsilon}_{Pi} &= \frac{\beta}{k} \operatorname{dev} \mathbf{P}_{Pi} \quad \forall i \in \mathcal{A}.\end{aligned}\quad (4.58)$$

Die entsprechenden Deviatoren können in Anlehnung an die Gleichungen (4.27) und (4.33) darin durch

$$\operatorname{dev}_{\mathcal{A}} P_{Ti} := P_{Ti} - \frac{1}{n_{\mathcal{A}}} \sum_{k \in \mathcal{A}} P_{Tk}, \quad \operatorname{dev} \mathbf{P}_{Pi} := \mathbf{P}_{Pi} - \frac{1}{3} (\mathbf{P}_{Pi} : \mathbf{I}) \mathbf{I} \quad (4.59)$$

berechnet werden. Auch die Fließgrenze kann, äquivalent zum in Kapitel 4.1.4 hergeleiteten Vorgehen, durch die Legendre-Transformation der Dissipationsfunktion ermittelt werden und hat somit die Form

$$\Phi = \sum_{i=0}^n (\operatorname{dev}_{\mathcal{A}} P_{Ti})^2 + \frac{1}{k} \sum_{i=0}^n \operatorname{dev} \mathbf{P}_{Pi} : \operatorname{dev} \mathbf{P}_{Pi} - r^2. \quad (4.60)$$

Sowohl die Evolutionsgleichungen als auch die Fließgrenze der simultan ablaufenden Phasentransformation und plastischen Deformation stimmen folglich mit den Gleichungen (4.28), (4.32) und (4.36) überein und unterscheiden sich lediglich bezüglich der betrachteten Skala: wird die Mikrostruktur im Ausgangsmodell für die Körner einzeln ermittelt, so erfolgt die Berechnung im modifizierten Modell gemittelt für den gesamten Materialpunkt. Gleiches gilt für die automatisch resultierenden Kuhn-Tucker-Bedingungen:

$$\beta \geq 0, \quad \Phi \leq 0, \quad \beta \Phi = 0. \quad (4.61)$$

Die Evolutionsgleichungen der neu eingefügten internen Variable der Eulerwinkel kann durch die Ableitung der Lagrange-Funktion (4.57) nach der Rate der Eulerwinkel  $\dot{\alpha}$  ermittelt werden. Die Minimierung liefert folglich

$$\begin{aligned}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\varphi}} &= -P_{\varphi} + \sqrt{2} r_{\mathbf{R}} (\dot{\varphi} + \dot{\omega} \cos \vartheta) &= 0 \\ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\vartheta}} &= -P_{\vartheta} + \sqrt{2} r_{\mathbf{R}} \dot{\vartheta} &= 0 \\ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\omega}} &= -P_{\omega} + \sqrt{2} r_{\mathbf{R}} (\dot{\omega} + \dot{\varphi} \cos \vartheta) &= 0.\end{aligned}\quad (4.62)$$

Durch Umformung von Gleichung (4.62) folgen direkt Evolutionsgleichungen für die drei Eulerwinkel  $\varphi$ ,  $\vartheta$  und  $\omega$

$$\left. \begin{aligned}\dot{\varphi} &= \frac{1}{\sqrt{2} r_{\mathbf{R}}} \frac{1}{1 - \cos^2 \vartheta} (P_{\varphi} - P_{\omega} \cos \vartheta) \\ \dot{\vartheta} &= \frac{1}{\sqrt{2} r_{\mathbf{R}}} P_{\vartheta} \\ \dot{\omega} &= \frac{1}{\sqrt{2} r_{\mathbf{R}}} \frac{1}{1 - \cos^2 \vartheta} (P_{\omega} - P_{\varphi} \cos \vartheta)\end{aligned}\right\}, \quad (4.63)$$

die mit den in Junker (2014a) hergeleiteten Ausdrücken übereinstimmen, siehe auch Junker (2014b). Gemäß des gewählten rein zweiter Ordnung homogenen Ansatzes für die rotationsbezogene Dissipationsfunktion in Gleichung (4.55) sind diese Evolutionsgleichungen viskoelastischen Typs.

## 4.2 Variationelle Modellierung polykristalliner Formgedächtnislegierungen unter Berücksichtigung irreversiblen Martensits – Modell 2

In diesem Unterkapitel erfolgt die Berücksichtigung der irreversiblen Prozesse während der Phasentransformation und somit die Abbildung des Effekts der funktionalen Ermüdung durch die Unterteilung der Phasenumwandlung in einen reversiblen und einen irreversiblen Prozess. Dazu werden – äquivalent zum Vorgehen im vorangegangenen Kapitel – zunächst die internen Variablen definiert. Nach der detaillierten Herleitung der relaxierten Helmholtz-Energie des polykristallinen Materials unter Verwendung einer Reuß-Energiegrenze werden im Anschluss verschiedene konkrete Ansätze für die Dissipationsfunktionen präsentiert. Abschließend werden unter Verwendung des Prinzips des Minimums des Dissipationspotentials die Evolutionsgleichungen für die internen Variablen hergeleitet und das Materialmodell wiederum durch Anwendung einer Legendre-Transformation und somit eine berechnete Fließfunktion vervollständigt. Die Herleitungen erfolgen zunächst für das bereits in Waimann u. a. (2017) und Waimann u. a. (2018) vorgestellte Modell 2a mit ratenunabhängiger Phasentransformation. Zudem wird ein weiterer Modellansatz 2b mit ratenabhängiger Transformation präsentiert. Das Unterkapitel endet mit einer experimentell basierten Kalibrierung der verwendeten Modellparameter zur Modellierung der funktionalen Ermüdung.

### 4.2.1 Interne Variablen

Wie in Waimann u. a. (2017) beschrieben, werden die mikrostrukturellen Prozesse innerhalb des polykristallinen Materials, die für die Phasenumwandlung und die damit verbundene funktionale Degradierung während der zyklischen Belastung von FGL verantwortlich sind, im zweiten präsentierten Modellansatz durch drei interne Variablen beschrieben.

Zur Berücksichtigung der polykristallinen Struktur von Formgedächtnislegierungen wird der bereits in Kapitel 4.1.8 vorgestellte Ansatz der sich entwickelnden Orientierungsverteilungsfunktion nach Junker (2014b) aufgegriffen, siehe Abbildung 4.5. Bei der ersten internen Varia-

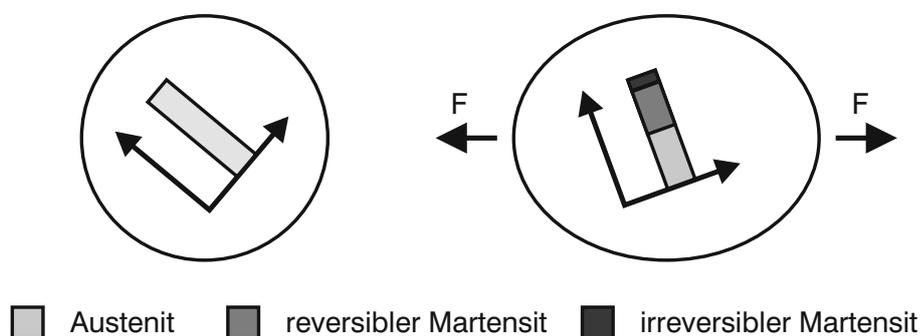


Abbildung 4.5: Polykristalline Struktur unter Berücksichtigung der Orientierungsverteilungsfunktion (Modell2), Waimann u. a. (2017).

ble handelt es sich somit um das bereits bekannte Set an Eulerwinkeln  $\alpha = \{\varphi, \vartheta, \omega\}$ , das die Richtung, in der die Transformationen stattfinden, beschreibt. Die zweite interne Variable ist der bereits im vorangegangenen Kapitel verwendete reversible Volumenanteil der unterschiedlichen Phasen  $\lambda$ . Jede Phase  $i$  hat demnach einen Volumenanteil  $\lambda_i$ , wobei wiederum  $\lambda_0$  die

austenitische Phase und  $\lambda_{i>0}$  eine der  $n$  unterschiedlichen Martensitvarianten beschreibt. Die ersten beiden Variablen  $\alpha$  und  $\lambda$  reichen nun also aus, um die polykristalline Struktur auf der einen Seite und die reversible Phasentransformation auf der anderen Seite wiederzugeben.

Die nachfolgend in Kapitel 5.1 präsentierten Berechnungen des Plastizitätsmodells des vorherigen Unterkapitels 4.1 zeigen eine Schwachstelle des Modellansatzes zur Abbildung des Effekts der funktionalen Ermüdung. Das ursprüngliche Materialmodell zeigt somit keine Stabilisierung des Martensits durch die plastischen Dehnungen. Dies führt zur Modellierung der irreversiblen Prozesse durch die Einführung des irreversiblen Volumenanteils  $\rho$ . Anstelle also die experimentell beobachteten Versetzungen zu modellieren, wird deren direkte Auswirkung – der stabilisierte Martensit – berücksichtigt. Die Phasentransformation teilt sich folglich in einen reversiblen und einen irreversiblen Anteil auf.

Wiederum ist die Verwendung interner Variablen an die Einhaltung unterschiedlicher Nebenbedingungen geknüpft. Neben der diesmal für beide Volumenanteile zu erfüllenden Nichtnegativität

$$\begin{aligned} \lambda_i &\geq 0 \quad \forall i \\ \rho_i &\geq 0 \quad \forall i. \end{aligned} \tag{4.64}$$

sowie der Massenerhaltung

$$\sum_{i=0}^n \lambda_i + \sum_{i=0}^n \rho_i = 1. \tag{4.65}$$

bzw.

$$\sum_{i=0}^n \dot{\lambda}_i + \sum_{i=0}^n \dot{\rho}_i = 0 \tag{4.66}$$

gelten im vorliegenden Materialmodell weitere Nebenbedingungen bezüglich der Stabilisierung des Martensits. Aufgrund der Irreversibilität des Volumenanteils  $\rho$  muss sichergestellt werden, dass dieser nicht abnehmen kann. Für die Rate der irreversiblen Volumenfraktionen muss folglich

$$\dot{\rho}_i \geq 0 \quad \forall i \tag{4.67}$$

gelten. Experimentell begründet durch den stabilen Zustand, gegen den das Material konvergiert, wird des Weiteren ein maximaler absoluter irreversibler Volumenanteil  $\rho_{\max}$  eingeführt, sodass für den absoluten Anteil der irreversiblen Volumenfraktion  $\bar{\rho}$

$$\bar{\rho} := \sum_{i=0}^n \rho_i \leq \rho_{\max} \tag{4.68}$$

gilt und nur eine gewisse Menge Martensit im Material stabilisiert werden kann. Das Material verfügt folglich indirekt über eine maximale Versetzungsdichte.

Die letzte zu erfüllende Nebenbedingung resultiert aus der experimentellen Entdeckung, dass während des Zyklierens lediglich eine Stabilisierung des Martensits, nicht aber des Austenits stattfindet. Daher ist der entsprechende Volumenanteil des irreversiblen Austenits stets

$$\rho_0 = 0. \tag{4.69}$$

### 4.2.2 Freie Helmholtz-Energie mit Reuß-Energiegrenze

Die Energie des Austenits und der einzelnen martensitischen Varianten kann in Abhängigkeit der absoluten Dehnung in der Phase  $i$   $\varepsilon_i$  und der Temperatur  $\theta$  geschrieben werden als

$$\Psi_i(\varepsilon_i, \theta) = \frac{1}{2} (\varepsilon_i - \mathbf{Q}^T \cdot \boldsymbol{\eta}_i \cdot \mathbf{Q}) : \mathbb{E}_i : (\varepsilon_i - \mathbf{Q}^T \cdot \boldsymbol{\eta}_i \cdot \mathbf{Q}) + c_i(\theta) . \quad (4.70)$$

Die in den einzelnen Phasen vorherrschende elastische Dehnung  $\varepsilon_{el i}$  entspricht der totalen Dehnung abzüglich der Dehnung, die für die Transformation von Austenit zu Martensit aufgebracht werden muss:

$$\varepsilon_{el i} = \varepsilon_i - \mathbf{Q}^T \cdot \boldsymbol{\eta}_i \cdot \mathbf{Q} . \quad (4.71)$$

Bei  $\boldsymbol{\eta}_i$  handelt es sich wiederum um die Transformationsdehnung der einzelnen Phasen. Wie bereits in Kapitel 4.1.8 vorgestellt, erfolgt die Berechnung der internen Variablen nicht für jedes Korn einzeln, sondern für den gesamten Materialpunkt. Mithilfe des in Gleichung (4.49) eingeführten Transformationstensors  $\mathbf{Q}(\alpha)$  kann  $\boldsymbol{\eta}_i$  in die gemittelte Orientierung der transformierenden Körner gedreht werden. Diese wird basierend auf Junker (2014b) durch die nun veränderlichen Eulerwinkel  $\alpha$  definiert. Wie in Kapitel 4.1 handelt es sich bei dem Tensor  $\mathbb{E}_i$  um die Steifigkeitsmatrix und bei  $c_i$  um die kalorische Energie der Phase  $i$ .

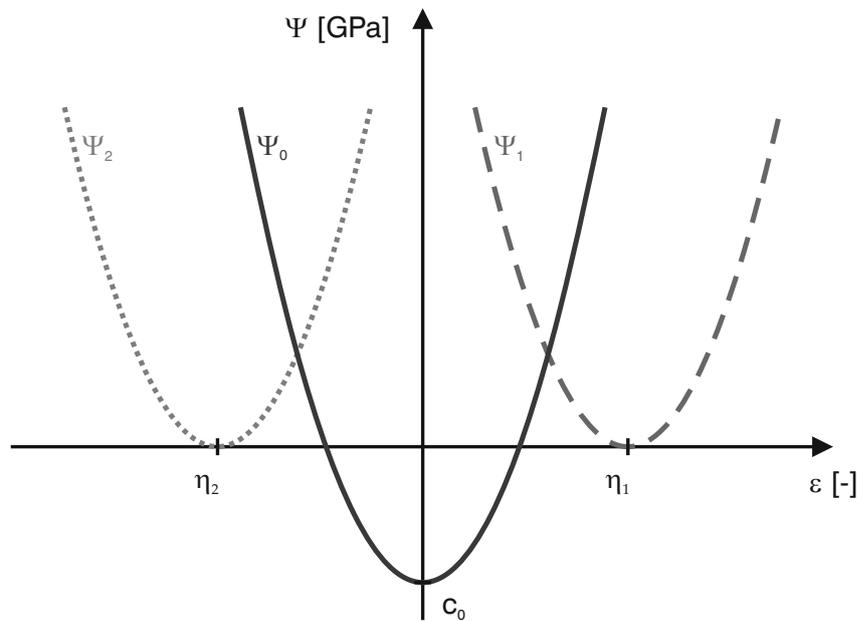


Abbildung 4.6: Energie der einzelnen Phasen (1D), Junker (2011).

Um nun die Gesamtenergie des Materialpunktes zu beschreiben, wird – den Ausführungen aus Junker (2011) folgend – zunächst die Energie des Austenits,  $\Psi_0$ , und zweier exemplarischer reversibler Martensitvarianten,  $\Psi_1$  und  $\Psi_2$ , für den eindimensionalen Fall betrachtet, siehe Abbildung 4.6. Die Transformationsdehnung des Martensits ist dabei durch die skalare Größe  $\eta_{i>0}$  gegeben. Die kalorische Energie des Austenits ist  $c_0$ , die des Martensits ist 0 GPa. Für die angenommene vorherrschende Temperatur befindet sich das Material im unbelasteten Fall  $\varepsilon = 0$  folglich in einem rein austenitischen Zustand und wird sich daher pseudoelastisch verhalten. Des Weiteren wird die Dissipation in Folge der Phasenumwandlung und somit die Energie, die aufgebracht werden muss, um die Mikrostrukturänderung herbeizuführen, zur besseren Veranschaulichung nicht mitberücksichtigt.

Anhand von Abbildung 4.6 wird deutlich, dass je nachdem, was für eine Dehnung  $\varepsilon$  vorgegeben wird, eine andere Phase die geringste Energie vorweisen kann. Für das Material ist es somit günstiger, sich in die Phase mit der geringsten Energie umzuwandeln. Die minimale Energie ist in Abbildung 4.7 eingezeichnet. Ein Material, das zur Minimierung seiner Energie dieser Kurve folgt, wird sich, sobald die Energie einer anderen Phase als der Ausgangsphase geringer ist, schlagartig komplett in die neue Phase umwandeln. In der Realität zeigt sich jedoch, dass einzelne Phasen nicht plötzlich einen anderen Zustand annehmen, sondern sich nach und nach umwandeln. Dies bedeutet im Umkehrschluss, dass das Material während der Transformation anteilig aus mehreren Phasen bestehen kann. Die Energie der Phasenmischung ist durch die sogenannte konvexe Hülle gegeben, die in Abbildung 4.8 dargestellt ist.

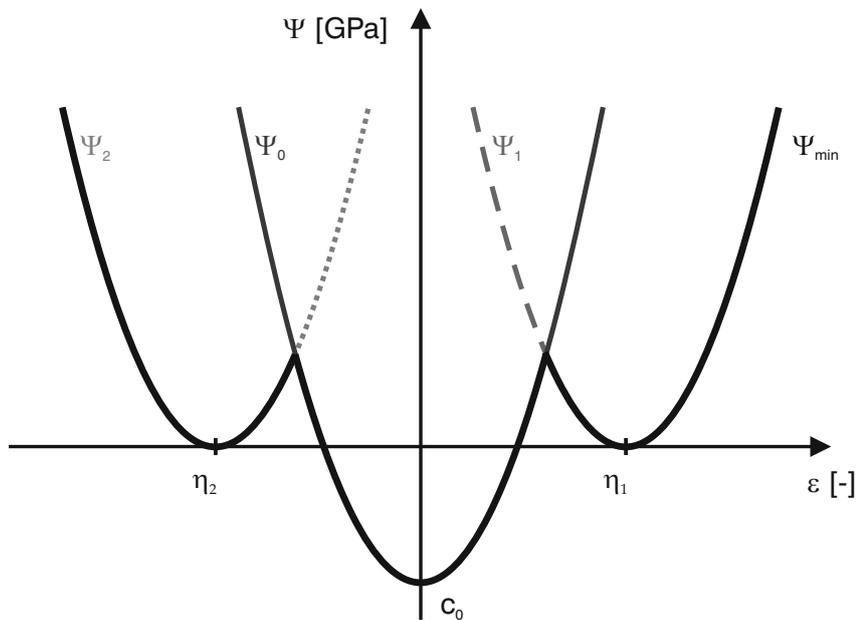


Abbildung 4.7: Minimale Energie am Materialpunkt (1D), Junker (2011).

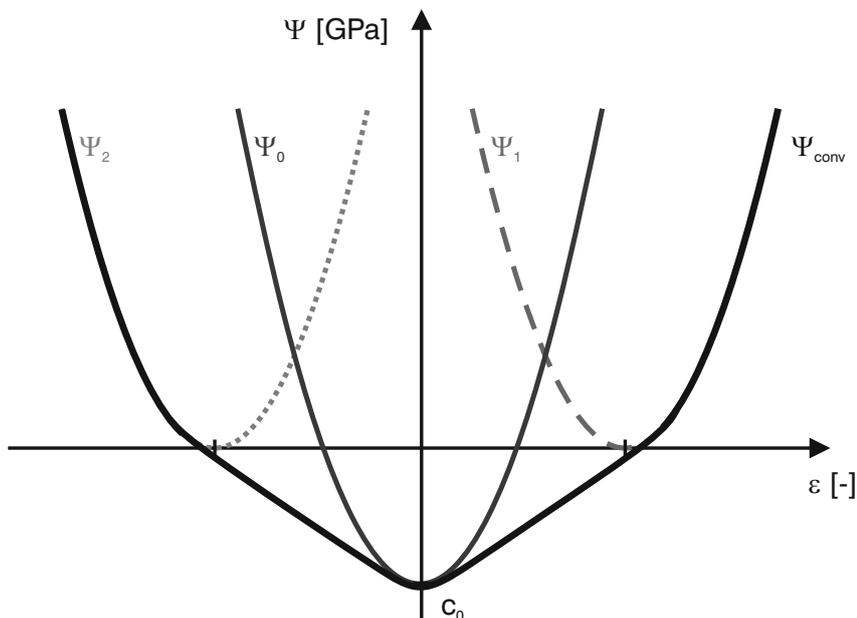


Abbildung 4.8: Konvexe Hülle (1D), Junker (2011).

Wird das betrachtete Material nun aus der Ruhe heraus positiv belastet, so wandelt sich der Austenit langsam in die Martensitvariante 1 um. Eine Druckbelastung führt hingegen zur Bildung von Martensitvariante 2.

Um die konvexe Hülle für den komplexeren dreidimensionalen Fall zu berechnen, wird die größte untere Schranke für die mit den Volumenanteilen  $\lambda_i$  und  $\rho_i$  gewichtete Summe der Phasenenergien gesucht. Die Minimierung erfolgt bezüglich der in den einzelnen Phasen vorhandenen totalen Dehnung  $\varepsilon_i$ , als deren Mittelwert  $\varepsilon$  angenommen wird. Folglich gilt die Nebenbedingung

$$\sum_{i=0}^n (\lambda_i + \rho_i) \varepsilon_i = \varepsilon \quad (4.72)$$

und die relaxierte Energie kann basierend auf Hackl u. Heinen (2008a) durch

$$\Psi_{\text{rel}} = \inf_{\varepsilon_i} \left\{ \sum_{i=0}^n (\lambda_i + \rho_i) \Psi_i \mid \sum_{i=0}^n (\lambda_i + \rho_i) \varepsilon_i = \varepsilon \right\} \quad (4.73)$$

formuliert werden. Zur Erfüllung der Nebenbedingung wird der Lagrange-Parameter  $\sigma$  eingeführt. Durch Anwendung der Minimierung folgt

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \varepsilon_i} \left[ \sum_{i=0}^n (\lambda_i + \rho_i) \Psi_i + \sigma : \left( \varepsilon - \sum_{i=0}^n (\lambda_i + \rho_i) \varepsilon_i \right) \right] &= \mathbf{0} \\ \Leftrightarrow (\lambda_i + \rho_i) \mathbb{E}_i : (\varepsilon_i - \mathbf{Q}^T \cdot \boldsymbol{\eta}_i \cdot \mathbf{Q}) - \sigma (\lambda_i + \rho_i) &= \mathbf{0}. \end{aligned} \quad (4.74)$$

Wird der Ausdruck (4.74) umgeformt und anschließend über alle Phasen aufsummiert

$$(\lambda_i + \rho_i) \varepsilon_i - \mathbf{Q}^T \cdot (\lambda_i + \rho_i) \boldsymbol{\eta}_i \cdot \mathbf{Q} = (\lambda_i + \rho_i) \mathbb{E}_i^{-1} : \sigma \quad (4.75)$$

$$\Rightarrow \sum_{i=0}^n (\lambda_i + \rho_i) \varepsilon_i - \mathbf{Q}^T \cdot \sum_{i=0}^n (\lambda_i + \rho_i) \boldsymbol{\eta}_i \cdot \mathbf{Q} = \sum_{i=0}^n (\lambda_i + \rho_i) \mathbb{E}_i^{-1} : \sigma, \quad (4.76)$$

ergibt sich der Lagrange-Parameter mit

$$\sigma = \bar{\mathbb{E}} : (\varepsilon - \mathbf{Q}^T \cdot \bar{\boldsymbol{\eta}} \cdot \mathbf{Q} - \mathbf{Q}^T \cdot \bar{\mathbf{v}} \cdot \mathbf{Q}) \quad (4.77)$$

und entspricht somit der am Materialpunkt vorherrschenden Spannung. Als Resultat der durchgeführten Relaxierung folgen effektive Größen für den Steifigkeitstensor  $\bar{\mathbb{E}}$  sowie die Transformationsdehnungen:

$$\begin{aligned} \bar{\mathbb{E}} &= \left[ \sum_{i=0}^n (\lambda_i + \rho_i) (\mathbb{E}_i)^{-1} \right]^{-1} & \bar{\boldsymbol{\eta}} &= \sum_{i=0}^n \lambda_i \boldsymbol{\eta}_i \\ \bar{\mathbf{v}} &= \sum_{i=0}^n \rho_i \boldsymbol{\eta}_i. \end{aligned} \quad (4.78)$$

Dabei stellt  $\bar{\boldsymbol{\eta}}$  die effektive reversible Transformationsdehnung dar und  $\bar{\mathbf{v}}$  den entsprechend aus den irreversiblen Transformationsdehnungen der einzelnen Phasen  $\mathbf{v}_i$  berechneten irreversiblen Tensor. Verglichen mit dem Plastizitätsmodell in Kapitel 4.1, beziehen sich die effektiven

Größen auf den gesamten Materialpunkt, während sie in Gleichung (4.9) für jedes Korn separat berechnet werden. Die relaxierte Energie kann dann durch Umformung und Einsetzen von Ausdruck (4.76)

$$\begin{aligned}
 \Psi_{\text{rel}} &= \sum_{i=0}^n (\lambda_i + \rho_i) \left( \frac{1}{2} (\boldsymbol{\varepsilon}_i - \mathbf{Q}^T \cdot \boldsymbol{\eta}_i \cdot \mathbf{Q}) : \mathbb{E}_i : (\boldsymbol{\varepsilon}_i - \mathbf{Q}^T \cdot \boldsymbol{\eta}_i \cdot \mathbf{Q}) + c_i \right) \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{i=0}^n ((\lambda_i + \rho_i) \boldsymbol{\varepsilon}_i - \mathbf{Q}^T \cdot (\lambda_i + \rho_i) \boldsymbol{\eta}_i \cdot \mathbf{Q}) : \mathbb{E}_i : (\boldsymbol{\varepsilon}_i - \mathbf{Q}^T \cdot \boldsymbol{\eta}_i \cdot \mathbf{Q}) + \bar{c} \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{i=0}^n (\lambda_i + \rho_i) \mathbb{E}_i^{-1} : \boldsymbol{\sigma} : \mathbb{E}_i : (\boldsymbol{\varepsilon}_i - \mathbf{Q}^T \cdot \boldsymbol{\eta}_i \cdot \mathbf{Q}) + \bar{c} \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{i=0}^n (\lambda_i + \rho_i) \boldsymbol{\sigma} : (\boldsymbol{\varepsilon}_i - \mathbf{Q}^T \cdot \boldsymbol{\eta}_i \cdot \mathbf{Q}) + \bar{c} \tag{4.79}
 \end{aligned}$$

schließlich durch

$$\Psi_{\text{rel}} = \frac{1}{2} (\boldsymbol{\varepsilon} - \mathbf{Q}^T \cdot \bar{\boldsymbol{\eta}} \cdot \mathbf{Q} - \mathbf{Q}^T \cdot \bar{\boldsymbol{v}} \cdot \mathbf{Q}) : \bar{\mathbb{E}} : (\boldsymbol{\varepsilon} - \mathbf{Q}^T \cdot \bar{\boldsymbol{\eta}} \cdot \mathbf{Q} - \mathbf{Q}^T \cdot \bar{\boldsymbol{v}} \cdot \mathbf{Q}) + \bar{c} \tag{4.80}$$

berechnet werden, wobei die effektive kalorische Energie analog zu den effektiven Größen (4.78) durch

$$\bar{c} = \sum_{i=0}^n (\lambda_i + \rho_i) c_i \tag{4.81}$$

definiert wird. Die präsentierte untere Begrenzung der Energie stimmt mit der sogenannten Reiß-Energiegrenze überein, die voraussetzt, dass die Spannung am Materialpunkt in jeder Phase gleich ist, Hackl u. Heinen (2008a).

Wie bereits in Kapitel 3.1 erwähnt, kann es bei einer entsprechenden Vorbehandlung der FGL Nickel titan zu der Umwandlung des Austenits in die sogenannte R-Phase kommen, bevor der Werkstoff in einen martensitischen Zustand übergeht, siehe z.B. Bhattacharya (2003). Um diese zweistufige Phasentransformation in dem vorliegenden Materialmodell oder dem im vorherigen Kapitel 4.1 präsentierte Ansatz zu berücksichtigen, muss die interne Variable der reversiblen Volumenfraktionen  $\boldsymbol{\lambda}$  lediglich um die Anzahl der möglichen Varianten der R-Phase erweitert werden und für diese Werte für die Transformationsdehnung und die kalorische Energie bekannt sein, siehe hierzu auch Fechte-Heinen (2007).

### 4.2.3 Dissipationsfunktion

Wie in Waimann u. a. (2017) dargestellt, setzt sich die Dissipationsfunktion im vorliegenden Fall der drei internen Variablen aus zwei Bestandteilen zusammen

$$\mathcal{D} = \mathcal{D}_R + \mathcal{D}_T. \tag{4.82}$$

Der erste Anteil bezieht sich auf die sich ändernden Eulerwinkel und somit die dynamische Anpassung der gemittelten Orientierung der transformierenden Körner. In Anlehnung an Junker

(2014a) wird für die Dissipationsfunktion  $\mathcal{D}_R$  wieder der bereits in Gleichung (4.55) verwendete und zweiter Ordnung homogene Ansatz

$$\mathcal{D}_R = \frac{\sqrt{2}}{2} r_R \left( \dot{\varphi}^2 + \dot{\vartheta}^2 + 2\dot{\varphi}\dot{\omega} \cos \vartheta + \dot{\omega}^2 \right) \quad (4.83)$$

gewählt. Er beinhaltet den viskosen Parameter  $r_R$ , siehe Junker (2014a) and Junker (2014b).

Der zweite Anteil der Dissipationsfunktion (4.82) bezieht sich auf die im Material stattfindende Transformation zwischen der Austenitphase und den einzelnen Martensitvarianten. Im betrachteten Fall liegt die Annahme zu Grunde, dass die reversible Phasentransformation von Austenit zu Martensit zwangsläufig mit Versetzungsbildung und somit der Stabilisierung von kleinen Mengen Martensit begleitet wird. Diese beiden Prozesse sind folglich untrennbar miteinander verknüpft, weshalb wie bereits im vorherigen Modell in Kapitel 4.1.3 der erstmals in Waimann u. a. (2016) vorgestellte gekoppelte Ansatz für die Dissipationsfunktion verwendet wird. Dieser hat nach Waimann u. a. (2017) die Form

$$\mathcal{D}_T = r_{T1} \sqrt{\sum_{i=0}^n (f\dot{\lambda}_i)^2 + \sum_{i=0}^n (g\dot{\rho}_i)^2}. \quad (4.84)$$

Der Dissipationsparameter  $r_{T1}$  ist wiederum ein Maß für die Energiemenge, die nötig ist, um die jeweiligen mikrostrukturellen Änderungen herbeizuführen. Durch die Faktoren  $f$  und  $g$  in Gleichung (4.84) ist es möglich, die unterschiedlichen Energiemengen zu berücksichtigen, die jeweils für die Bildung von reversiblen und irreversiblen Phasen nötig sind. Ausgehend von der Annahme, dass für die Bildung von irreversiblen Martensit deutlich mehr Energie aufgebracht werden muss als für den reversiblen Prozess, wird für  $g$  ein konstanter Wert  $> 1$  gewählt. Wie bereits in Kapitel 3.1 gezeigt, führt die Versetzungsbildung zu einer Stabilisierung des Martensits. Aufgrund der bereits erläuterten Zusammenhänge wird auf eine explizite Berücksichtigung von Versetzungen verzichtet und stattdessen der absolute Anteil irreversiblen Martensits  $\bar{\rho} = \sum_{i=0}^n \rho_i$  verwendet, um eine implizite Aussage über die Versetzungsdichte zu treffen. Ausgehend von der Annahme, dass diese irreversiblen Effekte die Bildung von Martensit begünstigen und seine Rücktransformation erschweren, wird für den Faktor  $f$

$$f = \begin{cases} (1.0 - f_1\bar{\rho}) & A \rightarrow M \\ (1.0 + f_2\bar{\rho}) & M \rightarrow A \end{cases} \quad (4.85)$$

angenommen und somit eine stückweise lineare Funktion. Die in erster Ordnung homogene Dissipationsfunktion in Gleichung (4.84) liefert Evolutionsgleichungen elasto-plastischen Typs für die Phasenumwandlung. Des Weiteren soll das Modell auf Finite-Elemente-Ebene hinsichtlich ratenabhängiger Evolutionsgleichungen untersucht werden. Hierzu wird die Dissipationsfunktion (4.84) um einen zweiter Ordnung homogenen Anteil erweitert, vergl. Kapitel 2.5. Es folgt

$$\mathcal{D}_T = r_{T1} \sqrt{\sum_{i=0}^n (f\dot{\lambda}_i)^2 + \sum_{i=0}^n (g\dot{\rho}_i)^2} + \frac{r_{T2}}{2} \left( \sum_{i=0}^n (f\dot{\lambda}_i)^2 + \sum_{i=0}^n (g\dot{\rho}_i)^2 \right) \quad (4.86)$$

mit dem viskosen Parameter  $r_{T2}$ .

#### 4.2.4 Das Prinzip des Minimums des Dissipationspotentials angewandt auf die funktionale Ermüdung unter Verwendung der irreversiblen martensitischen Volumenfraktion

Im Folgenden wird nun das Prinzip des Minimums des Dissipationspotentials zur Beschreibung der funktionalen Ermüdung angewandt. Dies geschieht unter Verwendung der erster Ordnung homogenen Dissipationsfunktion in Gleichung (4.84) bzw. der aus einem erster Ordnung homogenen und einem zweiter Ordnung homogenen Anteil zusammengesetzten Dissipationsfunktion in Gleichung (4.86) und der freien Helmholtz-Energie aus Gleichung (4.80). Das Resultat sind Evolutionsgleichungen für die internen Variablen  $\lambda$ ,  $\rho$  und  $\alpha$ . Die gezeigten Herleitungen wurden bereits in Waimann u. a. (2017) bzw. Waimann u. a. (2018) veröffentlicht und werden an dieser Stelle nur wiedergegeben.

Zunächst wird wie bereits in Kapitel 4.1 die zu minimierende Lagrange-Funktion aufgestellt. Ihr erster Bestandteil, die Rate der freien Helmholtz-Energie in Gleichung (4.80), kann mit Hilfe der Kettenregel zu

$$\dot{\Psi}_{\text{rel}} = - \sum_{i=0}^n P_{T_i} (\dot{\lambda}_i + \dot{\rho}_i) - \mathbf{P}_R \cdot \dot{\alpha} \quad (4.87)$$

bestimmt werden. Darin sind  $P_{T_i}$  und  $\mathbf{P}_R$  die thermodynamischen Triebkräfte, die sich als negative Ableitung der Energie  $\Psi$  nach den internen Variablen berechnen lassen

$$\begin{aligned} P_\lambda &= - \frac{\partial \Psi}{\partial \lambda} \\ P_\rho &= - \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} \\ P_R &= - \frac{\partial \Psi}{\partial \alpha}. \end{aligned} \quad (4.88)$$

Im Fall der relaxierten freien Helmholtz-Energie aus Gleichung (4.80) sind die Triebkräfte der reversiblen und irreversiblen Phasentransformation identisch und lauten für die einzelnen Phasen konkret

$$\begin{aligned} P_{T_i} &= - \frac{\partial \Psi_{\text{rel}}}{\partial \lambda_i} = - \frac{\partial \Psi_{\text{rel}}}{\partial \rho_i} \\ &= \mathbf{Q}^T \cdot \boldsymbol{\eta}_i \cdot \mathbf{Q} : \boldsymbol{\sigma} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} : (\mathbb{E}_i)^{-1} : \boldsymbol{\sigma} - c_i. \end{aligned} \quad (4.89)$$

Die Triebkräfte zur Berücksichtigung der dynamischen Anpassung der Eulerwinkel lauten unter Verwendung der Ableitungen  $\partial \Psi_{\text{rel}} / \partial \mathbf{Q}$

$$\frac{\partial \Psi_{\text{rel}}}{\partial \mathbf{Q}} = -2 (\bar{\boldsymbol{\eta}} + \bar{\mathbf{v}}) \cdot \mathbf{Q} \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (4.90)$$

und  $\partial \mathbf{Q} / \partial \alpha$  aus Gleichung (4.52)

$$\mathbf{P}_R = - \frac{\partial \Psi_{\text{rel}}}{\partial \mathbf{Q}} : \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial \alpha}, \quad (4.91)$$

vergleiche hierzu Kapitel 4.1.8 bzw. Junker (2014b).

Analog zum in Kapitel 4.1.4 gezeigten Vorgehen, wird auch im vorliegenden Materialmodell zur Erfüllung der Nebenbedingungen zwischen Gleichungen und Ungleichungen unterschieden und diese mittels Lagrange- und Kuhn-Tucker-Parametern berücksichtigt. Die zu erfüllenden Bedingungen für die Volumenanteile werden in Kapitel 4.2.1 vorgestellt. Die zu erfüllenden Gleichungen bezüglich der Massenerhaltung in (4.66) und der ausschließlichen Stabilisierung des Martensits in (4.69) werden mit Hilfe der Lagrange-Parameter  $\kappa$  und  $\iota$  berücksichtigt. Die Bedingungen der Nichtnegativität der reversiblen und irreversiblen Volumenanteile in (4.64), der Irreversibilität von  $\rho$  in (4.67) sowie des einzuhaltenden Maximalwerts für den totalen irreversiblen Volumenanteil in (4.68) werden als Ungleichungen durch Verwendung der Kuhn-Tucker-Parameter  $\gamma_{\lambda_i}$ ,  $\gamma_{\rho_i}$ ,  $\bar{\gamma}_{\rho_i}$  und  $\hat{\gamma}_\rho$  einbezogen. Diese Parameter sind durch

$$\begin{aligned} \gamma_{\lambda_i} &= \begin{cases} 0 & \text{if } \lambda_i > 0 \vee (\lambda_i = 0 \wedge \dot{\lambda}_i > 0) \\ > 0 & \text{else} \end{cases} & \gamma_{\rho_i} &= \begin{cases} 0 & \text{if } \rho_i > 0 \vee (\rho_i = 0 \wedge \dot{\rho}_i > 0) \\ > 0 & \text{else} \end{cases} \\ \bar{\gamma}_{\rho_i} &= \begin{cases} 0 & \text{if } \dot{\rho}_i > 0 \\ > 0 & \text{else} \end{cases} & \hat{\gamma}_\rho &= \begin{cases} 0 & \text{if } \rho_{\max} - \sum_{i=0}^n \rho_i > 0 \\ > 0 & \text{else} \end{cases} \end{aligned} \quad (4.92)$$

definiert und nehmen somit nur Werte größer null an, so die jeweiligen geforderten Nebenbedingungen nicht erfüllt werden.

Unter Verwendung der Rate der freien Helmholtz-Energie (4.87), der aus den Gleichungen (4.83) und (4.84) bzw. (4.86) zusammengesetzten Dissipationsfunktion (4.82) und der mit Hilfe der Lagrange- und Kuhn-Tucker-Parameter berücksichtigten Nebenbedingungen, lässt sich die Lagrange-Funktion schließlich schreiben als

$$\begin{aligned} \mathcal{L} &= - \sum_{i=0}^n P_{T_i} (\dot{\lambda}_i + \dot{\rho}_i) - \mathbf{P}_R \cdot \dot{\boldsymbol{\alpha}} + \mathcal{D} + \kappa \sum_{i=0}^n (\dot{\lambda}_i + \dot{\rho}_i) + \iota \rho_0 - \sum_{i=0}^n \gamma_{\lambda_i} \dot{\lambda}_i \\ &\quad - \sum_{i=0}^n \gamma_{\rho_i} \dot{\rho}_i - \sum_{i=0}^n \bar{\gamma}_{\rho_i} \dot{\rho}_i - \hat{\gamma}_\rho \left( \rho_{\max} - \sum_{i=0}^n \rho_i \right) \rightarrow \min_{\dot{\boldsymbol{\alpha}}, \dot{\rho}, \dot{\lambda}} \end{aligned} \quad (4.93)$$

und bezüglich der Raten der internen Variablen minimieren. In den nächsten beiden Unterkapiteln 4.2.5 und 4.2.6 werden nun für beide vorgestellten Varianten der Dissipationsfunktion die Evolutionsgleichungen für die internen Variablen hergeleitet.

#### 4.2.5 Materialmodell mit ratenunabhängiger Phasentransformation – Modell 2a

Zur Berechnung von ratenunabhängigen Evolutionsgleichungen für die Phasenumwandlung wird die erster Ordnung homogene Dissipationsfunktion aus Gleichung (4.84) verwendet und der in Gleichung (4.93) aufgestellte Ausdruck der Lagrange-Funktion bezüglich der Raten der internen Variablen minimiert. Wie bereits in Waimann u. a. (2017) präsentiert, lässt sich für die

Lagrange-Funktion unter Berücksichtigung von (4.84)

$$\begin{aligned}
 \mathcal{L} = & -\mathbf{P}_T \cdot (\dot{\boldsymbol{\lambda}} + \dot{\boldsymbol{\rho}}) - \mathbf{P}_\alpha \cdot \dot{\boldsymbol{\alpha}} + r_{T1} \sqrt{\sum_{i=0}^n (f \dot{\lambda}_i)^2 + \sum_{i=0}^n (g \dot{\rho}_i)^2} \\
 & + \frac{\sqrt{2} r_R}{2} (\dot{\varphi}^2 + \dot{\vartheta}^2 + 2 \dot{\varphi} \dot{\omega} \cos \vartheta + \dot{\omega}^2) + \kappa \sum_{i=0}^n (\dot{\lambda}_i + \dot{\rho}_i) + \iota \rho_0 \\
 & - \sum_{i=0}^n \gamma_{\lambda_i} \dot{\lambda}_i - \sum_{i=0}^n \tilde{\gamma}_{\rho_i} \dot{\rho}_i - \sum_{i=0}^n \bar{\gamma}_{\rho_i} \dot{\rho}_i - \hat{\gamma}_\rho \left( \rho_{\max} - \sum_{i=0}^n \rho_i \right) \rightarrow \min_{\dot{\boldsymbol{\alpha}}, \dot{\boldsymbol{\rho}}, \dot{\boldsymbol{\lambda}}} \quad (4.94)
 \end{aligned}$$

schreiben. Zur anschließenden Minimierung werden die Ableitungen nach  $\dot{\lambda}_i$ ,  $\dot{\rho}_i$  und  $\dot{\boldsymbol{\alpha}}$  gleich null gesetzt. Die Ableitungen nach den einzelnen Eulerwinkelraten entsprechen den im vorangegangenen Kapitel hergeleiteten Ausdrücken, siehe Gleichungen (4.62). Folglich ergeben sich ebenso die hier zur besseren Übersichtlichkeit erneut aufgeführten Evolutionsgleichungen der Eulerwinkel  $\boldsymbol{\alpha} = \{\varphi, \vartheta, \omega\}$  visko-elastischen Typs aus Gleichung (4.63):

$$\left. \begin{aligned}
 \dot{\varphi} &= \frac{1}{\sqrt{2} r_R} \frac{1}{1 - \cos^2 \vartheta} (P_\varphi - P_\omega \cos \vartheta) \\
 \dot{\vartheta} &= \frac{1}{\sqrt{2} r_R} P_\vartheta \\
 \dot{\omega} &= \frac{1}{\sqrt{2} r_R} \frac{1}{1 - \cos^2 \vartheta} (P_\omega - P_\varphi \cos \vartheta)
 \end{aligned} \right\}, \quad (4.95)$$

vergleiche Junker (2014a) bzw. Junker (2014b).

Für die Ableitungen nach den einzelnen reversiblen und irreversiblen Volumenanteilen folgt für den Fall, dass  $\dot{\boldsymbol{\lambda}} \neq \mathbf{0}$  bzw.  $\dot{\boldsymbol{\rho}} \neq \mathbf{0}$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\lambda}_i} &= -P_{Ti} + \frac{r_{T1} f^2 \dot{\lambda}_i}{\sqrt{\sum_{i=0}^n (f \dot{\lambda}_i)^2 + \sum_{i=0}^n (g \dot{\rho}_i)^2}} + \kappa - \gamma_{\lambda_i} = 0 \\
 \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\rho}_i} &= -P_{Ti} + \frac{r_{T1} g^2 \dot{\rho}_i}{\sqrt{\sum_{i=0}^n (f \dot{\lambda}_i)^2 + \sum_{i=0}^n (g \dot{\rho}_i)^2}} + \kappa - \gamma_{\rho_i} - \bar{\gamma}_{\rho_i} = 0, \quad (4.96)
 \end{aligned}$$

vergleiche hierzu das Subdifferential in Gleichung (2.67).

Des Weiteren werden zwei aktive Mengen eingeführt, die aktive reversible Menge  $\mathcal{A}_\lambda$  und die aktive irreversible Menge  $\mathcal{A}_\rho$ . Die aktive reversible Menge  $\mathcal{A}_\lambda$  umfasst alle aktiven Phasen, deren Volumenanteil größer als null ist sowie bisher nicht gebildete Phasen, die aufgrund einer positiven Rate im Begriff sind, zu entstehen. Die aktive Menge der reversiblen Phasen lässt sich also zusammenfassend schreiben als

$$\mathcal{A}_\lambda = \{i | \lambda_i > 0\} \cup \{i | (\lambda_i = 0) \wedge (\dot{\lambda}_i > 0)\}, \quad (4.97)$$

vergleiche hierzu Gleichung (4.23). Der Definition für die aktive Menge der irreversiblen Phasen  $\mathcal{A}_\rho$  liegen grundsätzlich die gleichen Überlegungen zu Grunde. Zusätzlich werden jedoch die Nebenbedingungen der Irreversibilität (4.67), der ausschließlichen Stabilisierung des Martensits (4.69) und des Maximalwerts  $\rho_{\max}$  (4.68) berücksichtigt. Somit folgt – falls die Nichtnegativität zum Zeitpunkt der Initialisierung erfüllt ist – für die aktive Menge der irreversiblen

Phasen

$$\mathcal{A}_\rho = \left\{ i \mid (i > 0) \wedge (\dot{\rho}_i > 0) \wedge \left( \sum_{i=0}^n \rho_i < \rho_{\max} \right) \right\}. \quad (4.98)$$

Wird das Gleichungssystem (4.96) nun erst umgeformt und anschließend für alle aktiven reversiblen und irreversiblen Phasen aufsummiert, so ergibt sich

$$-\frac{1}{f^2} \sum_{k \in \mathcal{A}_\lambda} P_{Tk} - \frac{1}{g^2} \sum_{l \in \mathcal{A}_\rho} P_{Tl} + \left( \frac{n_{\mathcal{A}_\lambda}}{f^2} + \frac{n_{\mathcal{A}_\rho}}{g^2} \right) \kappa = 0. \quad (4.99)$$

Dabei ist  $n_{\mathcal{A}_\lambda}$  die Anzahl der aktiven reversiblen Phasen und dementsprechend  $n_{\mathcal{A}_\rho}$  die Anzahl der aktiven irreversiblen Phasen. Die Kuhn-Tucker-Parameter entfallen, da sie durch ihre Definition in den aktiven Phasen den Wert null besitzen. Durch Umformung von (4.99) lässt sich schließlich der Lagrange-Parameter  $\kappa$  durch

$$\kappa = \frac{\frac{1}{f^2} \sum_{k \in \mathcal{A}_\lambda} P_{Tk} + \frac{1}{g^2} \sum_{l \in \mathcal{A}_\rho} P_{Tl}}{\frac{n_{\mathcal{A}_\lambda}}{f^2} + \frac{n_{\mathcal{A}_\rho}}{g^2}} \quad (4.100)$$

ermitteln. An dieser Stelle wird zur Verkürzung der Schreibweise wieder der aktive Deviator für die Phasentransformation eingeführt, der die einzelnen Triebkräfte einander gegenüberstellt und so die Richtung der Transformation beschreibt. Er lässt sich durch

$$\text{dev}_{\mathcal{A}} P_{Ti} = P_{Ti} - \kappa \quad (4.101)$$

berechnen. Die Ableitungen (4.96) können dann schließlich für die aktiven Phasen umgeformt werden zu den Evolutionsgleichungen für die reversiblen und irreversiblen Volumenanteile

$$\left. \begin{aligned} \dot{\lambda}_i &= \frac{\beta}{f^2} \text{dev}_{\mathcal{A}} P_{Ti} \quad \forall i \in \mathcal{A}_\lambda \\ \dot{\rho}_i &= \frac{\beta}{g^2} \text{dev}_{\mathcal{A}} P_{Ti} \quad \forall i \in \mathcal{A}_\rho \end{aligned} \right\}, \quad (4.102)$$

wobei der Konsistenzparameter  $\beta$ , der – wie bereits erwähnt – die Gesamtgrößenordnung der Transformation beschreibt, durch

$$\beta := \frac{\sqrt{\sum_{i=0}^n (f \dot{\lambda}_i)^2 + \sum_{i=0}^n (g \dot{\rho}_i)^2}}{r_{T1}} \quad (4.103)$$

definiert ist.

Nachfolgend muss nun noch festgelegt werden, wie dieser Konsistenzparameter  $\beta$  bestimmt werden kann. Dazu wird – analog zum zuvor vorgestellten Materialmodell in Kapitel 4.1 – die Legendre-Transformation der transformationsbezogenen Dissipation betrachtet, siehe auch Kapitel 2.3. Diese lautet unter Berücksichtigung der geforderten Nebenbedingungen

$$\mathcal{D}_T^* = \sup_{\dot{\lambda}, \dot{\rho}} \left\{ \text{dev} \mathbf{P}_T \cdot (\dot{\lambda} + \dot{\rho}) - \mathcal{D}_T \Big| \mathcal{A}_\lambda \wedge \mathcal{A}_\rho \right\}, \quad (4.104)$$

wobei insgesamt die symbolische Schreibweise verwendet wird, siehe auch Kapitel 2.1. Nach dem Einsetzen der Evolutionsgleichungen (4.102) in (4.104) lässt sich der Ausdruck schließlich in

$$\begin{aligned}
 \mathcal{D}_T^* &= \sup_{\lambda, \dot{\rho}} \left\{ \operatorname{dev}_{\mathcal{A}} \mathbf{P}_T \cdot \left( \frac{\beta}{f^2} \operatorname{dev}_{\mathcal{A}} \mathbf{P}_T \Big|_{\mathcal{A}_\lambda} + \frac{\beta}{g^2} \operatorname{dev}_{\mathcal{A}} \mathbf{P}_T \Big|_{\mathcal{A}_\rho} \right) \right. \\
 &\quad \left. - r_{T1} \sqrt{\sum_{i=0}^n (f \dot{\lambda}_i)^2 + \sum_{i=0}^n (g \dot{\rho}_i)^2} \right\} \\
 &= \sup_{\lambda, \dot{\rho}} \left\{ \operatorname{dev}_{\mathcal{A}} \mathbf{P}_T \cdot \left( \frac{\beta}{f^2} \operatorname{dev}_{\mathcal{A}} \mathbf{P}_T \Big|_{\mathcal{A}_\lambda} + \frac{\beta}{g^2} \operatorname{dev}_{\mathcal{A}} \mathbf{P}_T \Big|_{\mathcal{A}_\rho} \right) - r_{T1}^2 \beta \right\} \\
 &= \sup_{\lambda, \dot{\rho}} \left\{ \underbrace{\beta}_{\geq 0} \underbrace{\left( \frac{1}{f^2} \operatorname{dev}_{\mathcal{A}} \mathbf{P}_T \cdot \operatorname{dev}_{\mathcal{A}} \mathbf{P}_T \Big|_{\mathcal{A}_\lambda} + \frac{1}{g^2} \operatorname{dev}_{\mathcal{A}} \mathbf{P}_T \cdot \operatorname{dev}_{\mathcal{A}} \mathbf{P}_T \Big|_{\mathcal{A}_\rho} - r_{T1}^2 \right)}_{\leq 0} \right\}
 \end{aligned} \tag{4.105}$$

umformen. Durch die Nichtnegativität des Konsistenzparameters  $\beta$  muss der zweite Faktor stets  $\leq 0$  sein, um eine Begrenzung der Legendre-Transformierten zu gewährleisten. Die so erhaltene Fließfunktion  $\Phi$  lässt sich also in Abhängigkeit vom aktiven Deviator zu

$$\Phi := \frac{1}{f^2} \operatorname{dev}_{\mathcal{A}} \mathbf{P}_T \cdot \operatorname{dev}_{\mathcal{A}} \mathbf{P}_T \Big|_{\mathcal{A}_\lambda} + \frac{1}{g^2} \operatorname{dev}_{\mathcal{A}} \mathbf{P}_T \cdot \operatorname{dev}_{\mathcal{A}} \mathbf{P}_T \Big|_{\mathcal{A}_\rho} - r_{T1}^2 \tag{4.106}$$

bzw. umformuliert zu

$$\Phi := \sqrt{\frac{1}{f^2} \operatorname{dev}_{\mathcal{A}} \mathbf{P}_T \cdot \operatorname{dev}_{\mathcal{A}} \mathbf{P}_T \Big|_{\mathcal{A}_\lambda} + \frac{1}{g^2} \operatorname{dev}_{\mathcal{A}} \mathbf{P}_T \cdot \operatorname{dev}_{\mathcal{A}} \mathbf{P}_T \Big|_{\mathcal{A}_\rho}} - r_{T1} \tag{4.107}$$

bestimmen. Die aus den in Gleichung (4.105) herausgestellten Eigenschaften der beiden Faktoren  $\beta$  und  $\Phi$  folgenden Kuhn-Tucker-Bedingungen

$$\beta \geq 0, \quad \Phi \leq 0, \quad \beta \Phi = 0 \tag{4.108}$$

komplettieren das Materialmodell mit ratenunabhängiger Evolution der reversiblen und irreversiblen Volumenanteile. Die Fließfunktion (4.107) gibt somit an, ob das Material eine Phasenumwandlung erfährt oder nicht. Der Konsistenzparameter  $\beta$  regelt, wie viel Umwandlung stattfinden muss, bis die Fließgrenze wieder eingehalten wird.

Der nachfolgend dargestellte Algorithmus 2 zeigt die Implementierung des vorgestellten Materialmodells auf Materialpunktebene. Zur Berechnung der aktualisierten internen Variablen wurde das bereits in Kapitel 4.1.7 vorgestellte explizite Eulerverfahren verwendet, siehe Schäfer (2013). Unter Berücksichtigung der entsprechenden Werte des vorherigen Lastschritts  $l$  können

---

**Algorithmus 2:** Algorithmus des Modells 2a auf Materialpunktebene, Waimann u. a. (2017) entnommen.

---

**Input:**  $\boldsymbol{\varepsilon}^{l+1}, \boldsymbol{\alpha}^l, \boldsymbol{\lambda}^l, \boldsymbol{\rho}^l$

**Calc:**  $(\mathbf{P}_\alpha)^{l*} = (\mathbf{P}_\alpha)^{l*}(\boldsymbol{\varepsilon}^{l+1}, \boldsymbol{\alpha}^l, \boldsymbol{\lambda}^l, \boldsymbol{\rho}^l)$

**Calc:**  $\text{dev}_{\mathcal{A}} \mathbf{P}_T^{l*} = \text{dev}_{\mathcal{A}} \mathbf{P}_T^{l*}(\boldsymbol{\varepsilon}^{l+1}, \boldsymbol{\alpha}^l, \boldsymbol{\lambda}^l, \boldsymbol{\rho}^l)$

**Calc:**  $f^l = f^l(\boldsymbol{\rho}^l, (\text{dev}_{\mathcal{A}} \mathbf{P}_{T0}^j)^l)$

$$\varphi^{l+1} = \varphi^l + \Delta t_R (P_\varphi^{l*} - P_\omega^{l*} \cos \vartheta^l) / (1 - \cos^2 \vartheta^l)$$

$$\vartheta^{l+1} = \vartheta^l + \Delta t_R P_\vartheta^{l*}$$

$$\omega^{l+1} = \omega^l + \Delta t_R (P_\omega^{l*} - P_\varphi^{l*} \cos \vartheta^l) / (1 - \cos^2 \vartheta^l)$$

**Calc:**  $\Phi = \Phi(\boldsymbol{\varepsilon}^{l+1}, \boldsymbol{\alpha}^l, \boldsymbol{\lambda}^l, \boldsymbol{\rho}^l)$

**Set:**  $\boldsymbol{\lambda}^{l+1} = \boldsymbol{\lambda}^l, \boldsymbol{\rho}^{l+1} = \boldsymbol{\rho}^l, \mathcal{A}_\lambda^l = \mathcal{A}_\lambda^{l+1}, \mathcal{A}_\rho^l = \mathcal{A}_\rho^{l+1}, \beta_T = 0$

**while**  $\Phi > \text{tol}$  **do**

$$\lambda_i^{l+1} = \lambda_i^l + \frac{\beta_T}{(f^l)^2} \text{dev}_{\mathcal{A}} P_{Ti}^{l*} \quad \forall i \in \mathcal{A}_\lambda^l$$

$$\rho_i^{l+1} = \rho_i^l + \frac{\beta_T}{g^2} \text{dev}_{\mathcal{A}} P_{Ti}^{l*} \quad \forall i \in \mathcal{A}_\rho^l$$

**Calc:**  $\Phi = \Phi(\boldsymbol{\varepsilon}^{l+1}, \boldsymbol{\alpha}^l, \boldsymbol{\lambda}^{l+1}, \boldsymbol{\rho}^{l+1})$

**if**  $\Phi > \text{tol}$  **then**

$$\lambda_i^{lt} = \lambda_i^l + \frac{(\beta_T + \text{tol}_{lt})}{(f^l)^2} \text{dev}_{\mathcal{A}} P_{Ti}^{l*} \quad \forall i \in \mathcal{A}_\lambda^l$$

$$\rho_i^{lt} = \rho_i^l + \frac{(\beta_T + \text{tol}_{lt})}{g^2} \text{dev}_{\mathcal{A}} P_{Ti}^{l*} \quad \forall i \in \mathcal{A}_\rho^l$$

**Calc:**  $\Phi^{lt} = \Phi^{lt}(\boldsymbol{\varepsilon}^{l+1}, \boldsymbol{\alpha}^l, \boldsymbol{\lambda}^{lt}, \boldsymbol{\rho}^{lt})$

$$\beta_T = \beta_T - \frac{\Phi}{\Phi^{lt} - \Phi} \text{tol}_{lt}$$

**if**  $\beta_T < -\text{tol}$  **then**

└ ABORT

**Calc:**  $\mathcal{A}_\lambda^{l+1}, \mathcal{A}_\rho^{l+1}$

**Update:**  $\boldsymbol{\alpha}^l = \boldsymbol{\alpha}^{l+1}, \boldsymbol{\lambda}^l = \boldsymbol{\lambda}^{l+1}, \boldsymbol{\rho}^l = \boldsymbol{\rho}^{l+1}, \mathcal{A}_\lambda^l = \mathcal{A}_\lambda^{l+1}, \mathcal{A}_\rho^l = \mathcal{A}_\rho^{l+1}$

CONTINUE with next load step:  $l + 1 \rightarrow l + 2$

---

die internen Variablen des momentanen Lastschrittes  $l+1$  mit Hilfe von Gleichung (4.45) durch

$$\begin{aligned}\varphi^{l+1} &= \varphi^l + \Delta t_{\text{R}} \frac{1}{1 - \cos^2 \vartheta} (P_{\varphi}^{l*} - P_{\omega}^{l*} \cos \vartheta) \\ \vartheta^{l+1} &= \vartheta^l + \Delta t_{\text{R}} P_{\vartheta}^{l*} \\ \omega^{l+1} &= \omega^l + \Delta t_{\text{R}} \frac{1}{1 - \cos^2 \vartheta} (P_{\omega}^{l*} - P_{\varphi}^{l*} \cos \vartheta)\end{aligned}\quad (4.109)$$

$$\boldsymbol{\lambda}^{l+1} = \boldsymbol{\lambda}^l + \frac{\beta_{\text{T}}}{f^2} \text{dev}_{\mathcal{A}} \mathbf{P}_{\text{T}}^{l*} |_{\mathcal{A}_{\lambda}} \quad (4.110)$$

$$\boldsymbol{\rho}^{l+1} = \boldsymbol{\rho}^l + \frac{\beta_{\text{T}}}{g^2} \text{dev}_{\mathcal{A}} \mathbf{P}_{\text{T}}^{l*} |_{\mathcal{A}_{\rho}} \quad (4.111)$$

diskretisiert werden. Darin ist der Parameter  $\Delta t_{\text{R}} = \Delta t / \sqrt{2} r_{\text{R}}$  sowie  $\beta_{\text{T}} = \beta \Delta t$ . Durch den Index  $(\cdot)^{l*}$  wird weiterhin festgelegt, dass die Triebkräfte mittels der momentanen makroskopischen Dehnung  $\boldsymbol{\varepsilon}^{l+1}$  und den internen Variablen des vorherigen Lastschrittes  $\boldsymbol{\Lambda}^l$  berechnet werden. Folglich gilt für die Triebkräfte  $\mathbf{P}_{\text{T}}^{l*} = \mathbf{P}_{\text{T}}^{l*}(\boldsymbol{\varepsilon}^{l+1}, \boldsymbol{\alpha}^l, \boldsymbol{\lambda}^l, \boldsymbol{\rho}^l)$  und entsprechend  $\mathbf{P}_{\text{R}}^{l*} = \mathbf{P}_{\text{R}}^{l*}(\boldsymbol{\varepsilon}^{l+1}, \boldsymbol{\alpha}^l, \boldsymbol{\lambda}^l, \boldsymbol{\rho}^l)$ . Des Weiteren werden die beiden Arten der Evolution der Eulerwinkel und der Phasenanteile getrennt voneinander und nicht gekoppelt ausgewertet. Die Berechnung der Phasenanteile erfolgt somit in Abhängigkeit der Eulerwinkel des vorherigen Lastschrittes und umgekehrt.

Die Implementierung orientiert sich im Wesentlichen an dem bereits in Kapitel 4.1.7 vorgestellten Algorithmus. In jedem Lastschritt werden zu Beginn die Triebkräfte der Eulerwinkel, der aktive Deviator der Phasentransformation und der Faktor  $f$  in Abhängigkeit des aktuellen Dehnungstensors  $\boldsymbol{\varepsilon}^{l+1}$  und der internen Variablen des vorherigen Zeitschrittes  $\boldsymbol{\Lambda}^l$  berechnet. Nach der viskosen Aktualisierung der Eulerwinkel wird die Fließfunktion der Phasenumwandlung  $\Phi$  zunächst berechnet und anschließend überprüft, ob diese eine Toleranz  $\text{tol}$  einhält. Wird die Fließgrenze überschritten, erfolgt die Berechnung des Konsistenzparameters mithilfe des Newton-Verfahrens, siehe hierzu beispielsweise Hermann (2011). Als Tangente wird wiederum eine numerische gewählt, die durch Stören des Konsistenzparameters um einen Wert  $\text{tol}_t$  berechnet werden kann. Wird der Konsistenzparameter  $\beta_{\text{T}}$  zur Wiedereinhaltung der Fließfunktion gefunden, werden die aktualisierten reversiblen und irreversiblen Volumenfraktionen für den nächsten Zeitschritt gespeichert und mit diesem fortgefahren.

Die Implementierung des hergeleiteten Modells im Rahmen der Finite-Elemente-Methode wird in Kapitel 6.3 gezeigt. Berechnungsergebnisse für das vorgestellte ratenunabhängige Modell mit simultaner Entwicklung irreversiblen Martensits werden sowohl für die Materialpunktebene in Kapitel 5.2.1 als auch für ganze makroskopische Körper basierend auf der genannten Finite-Elemente-Methode in Kapitel 7.2 vorgestellt.

#### 4.2.6 Materialmodell mit ratenabhängiger Phasentransformation – Modell 2b

Eine zweite im Rahmen dieser Arbeit vorgestellte Möglichkeit der Modellierung der funktionalen Ermüdung durch irreversiblen Martensit ist die einer Phasentransformation elastoviskoplastischen Typs, siehe Kapitel 2.6. Die einzige Änderung im Vergleich zum ratenunabhängigen Modellansatz ist die Ergänzung der Dissipationsfunktion um einen zweiten Ordnung homogenen Anteil, wie in Gleichung (4.86) dargestellt. Die Energie sowie die thermodynamischen Triebkräfte bleiben, verglichen mit den in Modell 2b in Kapitel 4.2.5 verwendeten

Größen, unverändert. Für die Lagrange-Funktion folgt

$$\begin{aligned}
 \mathcal{L} = & -\mathbf{P}_T \cdot (\dot{\boldsymbol{\lambda}} + \dot{\boldsymbol{\rho}}) - \mathbf{P}_\alpha \cdot \dot{\boldsymbol{\alpha}} + r_{T1} \sqrt{\sum_{i=0}^n (f\dot{\lambda}_i)^2 + \sum_{i=0}^n (g\dot{\rho}_i)^2} \\
 & + \frac{r_{T2}}{2} \left( \sum_{i=0}^n (f\dot{\lambda}_i)^2 + \sum_{i=0}^n (g\dot{\rho}_i)^2 \right) + \frac{\sqrt{2}r_R}{2} (\dot{\varphi}^2 + \dot{\vartheta}^2 + 2\dot{\varphi}\dot{\omega} \cos \vartheta + \dot{\omega}^2) \\
 & + \kappa \sum_{i=0}^n (\dot{\lambda}_i + \dot{\rho}_i) + \iota\rho_0 - \sum_{i=0}^n \gamma_{\lambda i} \dot{\lambda}_i - \sum_{i=0}^n \tilde{\gamma}_{\rho i} \dot{\rho}_i - \sum_{i=0}^n \bar{\gamma}_{\rho i} \dot{\rho}_i - \hat{\gamma}_\rho \left( \rho_{\max} - \sum_{i=0}^n \rho_i \right) \\
 \rightarrow \min_{\dot{\boldsymbol{\alpha}}, \dot{\boldsymbol{\rho}}, \dot{\boldsymbol{\lambda}}} & . \tag{4.112}
 \end{aligned}$$

Die Terme innerhalb von Gleichung (4.112), die abhängig von der Rate der Eulerwinkel  $\dot{\boldsymbol{\alpha}}$  sind, haben sich im Vergleich zu Gleichung (4.94) nicht verändert. Daher bleiben auch die Evolutionsgleichungen identisch zu denen des ratenunabhängigen Modells in Gleichung (4.95). Die Ableitungen des Ausdrucks nach den reversiblen und irreversiblen Volumenfraktionsraten  $\dot{\boldsymbol{\lambda}}$  und  $\dot{\boldsymbol{\rho}}$  liefern jedoch die Gleichungen

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\lambda}_i} = & -P_{Ti} + r_{T1} f^2 \frac{\dot{\lambda}_i}{\sqrt{\Lambda}} + r_{T2} f^2 \dot{\lambda}_i + \kappa - \gamma_{\lambda i} = 0 \\
 \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\rho}_i} = & -P_{Ti} + r_{T1} g^2 \frac{\dot{\rho}_i}{\sqrt{\Lambda}} + r_{T2} g^2 \dot{\rho}_i + \kappa - \tilde{\gamma}_{\rho i} - \bar{\gamma}_{\rho i} = 0, \tag{4.113}
 \end{aligned}$$

wobei, um eine kompaktere Schreibweise zu ermöglichen, die Variable  $\Lambda$  mit

$$\Lambda = \sum_{i=0}^n (f\dot{\lambda}_i)^2 + \sum_{i=0}^n (g\dot{\rho}_i)^2 \tag{4.114}$$

eingeführt wurde. Die Gleichungen (4.113) können schließlich in

$$\begin{aligned}
 \dot{\lambda}_i &= \frac{1}{r_{T2} f^2} \left( \text{dev} P_{Ti} - r_{T1} f^2 \frac{\dot{\lambda}_i}{\sqrt{\Lambda}} \right) \quad \forall i \in \mathcal{A}_\lambda \\
 \dot{\rho}_i &= \frac{1}{r_{T2} g^2} \left( \text{dev} P_{Ti} - r_{T1} g^2 \frac{\dot{\rho}_i}{\sqrt{\Lambda}} \right) \quad \forall i \in \mathcal{A}_\rho \tag{4.115}
 \end{aligned}$$

umgeformt werden. Für den Lagrange-Parameter  $\kappa$  folgt, analog zur Herleitung in 4.2.5, wieder Gleichung (4.100) und somit der aktive Deviator nach Gleichung (4.101).

Die Legendre-Transformation zur Ermittlung der Fließfunktion lässt sich dann für den Fall der Evolution elasto-viskoplastischen Typs schreiben als

$$\begin{aligned}
 \mathcal{D}_T^* &= \sup_{\dot{\boldsymbol{\lambda}}, \dot{\boldsymbol{\rho}}} \left\{ \text{dev}_{\mathcal{A}} \mathbf{P}_T \cdot (\dot{\boldsymbol{\lambda}} + \dot{\boldsymbol{\rho}}) - r_{T1} \sqrt{\Lambda} - \frac{r_{T2}}{2} \Lambda \Big|_{\mathcal{A}_\lambda \wedge \mathcal{A}_\rho} \right\} \\
 &= \sup_{\dot{\boldsymbol{\lambda}}, \dot{\boldsymbol{\rho}}} \left\{ \frac{\sqrt{\Lambda}}{r_{T1}} \left( \text{dev}_{\mathcal{A}} \mathbf{P}_T \cdot \frac{r_{T1}}{\sqrt{\Lambda}} (\dot{\boldsymbol{\lambda}} + \dot{\boldsymbol{\rho}}) - r_{T1}^2 \right) - \frac{r_{T2}}{2} \Lambda \Big|_{\mathcal{A}_\lambda \wedge \mathcal{A}_\rho} \right\}. \tag{4.116}
 \end{aligned}$$

Werden die umgeformten Evolutionsgleichungen (4.115) der aktiven Phasen

$$\begin{aligned} r_{T1} \frac{\dot{\lambda}}{\sqrt{\Lambda}} &= -r_{T2} \dot{\lambda} + \frac{1}{f^2} \operatorname{dev} \mathbf{P}_T \\ r_{T1} \frac{\dot{\rho}}{\sqrt{\Lambda}} &= -r_{T2} \dot{\rho} + \frac{1}{g^2} \operatorname{dev} \mathbf{P}_T \end{aligned} \quad (4.117)$$

in (4.116) eingesetzt, so folgt vereinfachend

$$\mathcal{D}_T^* = \sup_{\dot{\lambda}, \dot{\rho}} \left\{ \mathcal{D}_{T1}^* + \mathcal{D}_{T2}^* + \mathcal{D}_{T3}^* \Big|_{\mathcal{A}_\lambda \wedge \mathcal{A}_\rho} \right\} \quad (4.118)$$

mit den drei Summanden

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{T1}^* &= \underbrace{\frac{\sqrt{\sum_{i=0}^n (f \dot{\lambda}_i)^2 + \sum_{i=0}^n (g \dot{\rho}_i)^2}}{r_{T1}}}_{\geq 0} \underbrace{\left( \frac{1}{f^2} \operatorname{dev}_{\mathcal{A}} \mathbf{P}_T \cdot \operatorname{dev}_{\mathcal{A}} \mathbf{P}_T + \frac{1}{g^2} \operatorname{dev}_{\mathcal{A}} \mathbf{P}_T \cdot \operatorname{dev}_{\mathcal{A}} \mathbf{P}_T - r_{T1}^2 \right)}_{:= \Phi \leq 0} \\ \mathcal{D}_{T2}^* &= - \underbrace{\frac{\sqrt{\sum_{i=0}^n (f \dot{\lambda}_i)^2 + \sum_{i=0}^n (g \dot{\rho}_i)^2}}{r_{T1}}}_{\geq 0} \underbrace{\left( \operatorname{dev}_{\mathcal{A}} \mathbf{P}_T \cdot r_{T2} \dot{\lambda} + \operatorname{dev}_{\mathcal{A}} \mathbf{P}_T \cdot r_{T2} \dot{\rho} \right)}_{\geq 0} \\ &\quad \underbrace{\hspace{15em}}_{\leq 0} \\ \mathcal{D}_{T3}^* &= - \underbrace{\frac{r_{T2}}{2} \left( \sum_{i=0}^n (f \dot{\lambda}_i)^2 + \sum_{i=0}^n (g \dot{\rho}_i)^2 \right)}_{\leq 0}. \end{aligned} \quad (4.119)$$

Die innerhalb der Ausdrücke (4.119) verwendeten Faktoren, die die Quadrate des aktiven Deviators bzw. der Raten der internen Variablen enthalten, sind automatisch größer null. Darüber hinaus ist mit Verweis auf den zweiten Hauptsatz der Thermodynamik, wonach gilt

$$\operatorname{dev}_{\mathcal{A}} \mathbf{P}_T \cdot \dot{\lambda} \geq 0, \quad \operatorname{dev}_{\mathcal{A}} \mathbf{P}_T \cdot \dot{\rho} \geq 0, \quad (4.120)$$

auch der zweite Faktor des Summanden  $\mathcal{D}_{T2}^*$  nicht negativ. Die resultierenden Aussagen über die Definitionsbereiche der einzelnen Summanden sind in Gleichung (4.119) gekennzeichnet. Damit die Funktion  $\mathcal{D}_T^*$  für jede beliebige Änderung der Volumenanteile begrenzt bleibt, muss der mit  $\Phi$  gekennzeichnete Ausdruck demnach kleiner gleich null sein. Für die Fließfunktion folgt also der gleiche Ausdruck wie für das Modell 2a in Gleichung (4.106), so dass wieder

$$\Phi := \sqrt{\frac{1}{f^2} \operatorname{dev}_{\mathcal{A}} \mathbf{P}_T \cdot \operatorname{dev}_{\mathcal{A}} \mathbf{P}_T \Big|_{\mathcal{A}_\lambda} + \frac{1}{g^2} \operatorname{dev}_{\mathcal{A}} \mathbf{P}_T \cdot \operatorname{dev}_{\mathcal{A}} \mathbf{P}_T \Big|_{\mathcal{A}_\rho}} - r_{T1} \quad (4.121)$$

angenommen werden kann. Mit Hilfe der Fließfunktion lassen sich nun die Evolutionsgleichungen

gen umformen zu

$$\begin{aligned}\dot{\lambda}_i &= \frac{1}{r_{T2}f^2} [\Phi]_+ \frac{\text{dev}P_{Ti}}{\sqrt{\sum_{k \in \mathcal{A}_\lambda} \left(\frac{\text{dev}P_{Tk}}{f}\right)^2 + \sum_{l \in \mathcal{A}_\rho} \left(\frac{\text{dev}P_{Tl}}{g}\right)^2}} \quad \forall i \in \mathcal{A}_\lambda \\ \dot{\rho}_i &= \frac{1}{r_{T2}g^2} [\Phi]_+ \frac{\text{dev}P_{Ti}}{\sqrt{\sum_{k \in \mathcal{A}_\lambda} \left(\frac{\text{dev}P_{Tk}}{f}\right)^2 + \sum_{l \in \mathcal{A}_\rho} \left(\frac{\text{dev}P_{Tl}}{g}\right)^2}} \quad \forall i \in \mathcal{A}_\rho, \quad (4.122)\end{aligned}$$

wobei die Annahme getroffen wird, dass der Anteil der jeweiligen Volumenfraktionsänderung an der Gesamtmikrostrukturänderung durch Phasentransformation dem mit den jeweiligen Vorfaktoren  $1/f^2$  bzw.  $1/g^2$  multiplizierten korrespondierenden Anteil der Triebkraft entspricht und somit

$$\begin{aligned}\frac{f \dot{\lambda}_i}{\sqrt{\sum_{i=0}^n (f \dot{\lambda}_i)^2 + \sum_{i=0}^n (g \dot{\rho}_i)^2}} &= \frac{1}{f} \frac{\text{dev}P_{Ti}}{\sqrt{\sum_{k \in \mathcal{A}_\lambda} \left(\frac{\text{dev}P_{Tk}}{f}\right)^2 + \sum_{l \in \mathcal{A}_\rho} \left(\frac{\text{dev}P_{Tl}}{g}\right)^2}} \\ \frac{g \dot{\rho}_i}{\sqrt{\sum_{i=0}^n (f \dot{\lambda}_i)^2 + \sum_{i=0}^n (g \dot{\rho}_i)^2}} &= \frac{1}{g} \frac{\text{dev}P_{Ti}}{\sqrt{\sum_{k \in \mathcal{A}_\lambda} \left(\frac{\text{dev}P_{Tk}}{f}\right)^2 + \sum_{l \in \mathcal{A}_\rho} \left(\frac{\text{dev}P_{Tl}}{g}\right)^2}}\end{aligned} \quad (4.123)$$

gilt.

Die Implementierung des nun komplettierten Materialmodells erfolgt, wie in Algorithmus 3 dargestellt. Der einzige Unterschied im Vergleich zu dem Algorithmus 2 des Modells 2a besteht in der ratenabhängigen Evolution der Volumenfraktionen. Die Diskretisierung dieser ergibt unter abermaliger Nutzung eines expliziten Eulerverfahrens

$$\boldsymbol{\lambda}^{l+1} = \boldsymbol{\lambda}^l + \frac{\Delta t_T}{(f)^2} \left[ 1 - \frac{r_{T1}}{|\text{dev}_{\mathcal{A}} \mathbf{P}_T^{l*}|} \right]_+ \text{dev}_{\mathcal{A}} \mathbf{P}_T^{l*} \Big|_{\mathcal{A}_\lambda} \quad (4.124)$$

$$\boldsymbol{\rho}^{l+1} = \boldsymbol{\rho}^l + \frac{\Delta t_T}{g^2} \left[ 1 - \frac{r_{T1}}{|\text{dev}_{\mathcal{A}} \mathbf{P}_T^{l*}|} \right]_+ \text{dev}_{\mathcal{A}} \mathbf{P}_T^{l*} \Big|_{\mathcal{A}_\rho} \quad (4.125)$$

mit dem Parameter  $\Delta t_T = \Delta t / r_{T2}$ .

#### 4.2.7 Experimentell basierte Kalibrierung der Modellparameter

In den vorangegangenen Abschnitten wurden im Wesentlichen vier Modellparameter, die im direkten Zusammenhang mit dem Phänomen der funktionalen Ermüdung stehen, eingeführt. Zunächst wird der Maximalwert der totalen irreversiblen martensitischen Volumenanteile  $\rho_{\max}$ , der die experimentell beobachtete Begrenzung der irreversiblen Prozesse miteinbezieht, betrachtet. Die Faktoren  $g$ ,  $f_1$  und  $f_2$  berücksichtigen die unterschiedliche Menge an Energie, die

**Algorithmus 3:** Algorithmus des ratenabhängigen Modells auf Materialpunktebene Waimann u. a. (2017).

**Input:**  $\varepsilon^{l+1}, \alpha^l, \lambda^l, \rho^l$   
**Calc:**  $(P_\alpha)^{l*} = (P_\alpha)^{l*}(\varepsilon^{l+1}, \alpha^l, \lambda^l, \rho^l)$   
**Calc:**  $(\text{dev}_{\mathcal{A}} P_T)^{l*} = (\text{dev}_{\mathcal{A}} P_T)^{l*}(\varepsilon^{l+1}, \alpha^l, \lambda^l, \rho^l)$   
**Calc:**  $f^l = f^l(\rho^l, (\text{dev}_{\mathcal{A}} P_{t0}^j)^l)$

$\varphi^{l+1} = \varphi^l + \Delta t_R (P_\varphi^{l*} - P_\omega^{l*} \cos \vartheta^l) / (1 - \cos^2 \vartheta^l)$   
 $\vartheta^{l+1} = \vartheta^l + \Delta t_R P_\vartheta^{l*}$   
 $\omega^{l+1} = \omega^l + \Delta t_R (P_\omega^{l*} - P_\varphi^{l*} \cos \vartheta^l) / (1 - \cos^2 \vartheta^l)$

**Calc:**  $\Phi = \Phi(\varepsilon^{l+1}, \alpha^l, \lambda^l, \rho^l)$

**Set:**  $\lambda^{l+1} = \lambda^l, \rho^{l+1} = \rho^l, \mathcal{A}_\lambda^l = \mathcal{A}_\lambda^{l+1}, \mathcal{A}_\rho^l = \mathcal{A}_\rho^{l+1}$

**if**  $\Phi > \text{tol}$  **then**

$$\left[ \begin{array}{l} \lambda_i^{l+1} = \lambda_i^l + \frac{\Delta t_T}{(f^l)^2} \left[ 1 - \frac{r_{T1}}{|\text{dev}_{\mathcal{A}} P_{Ti}^{l*}|} \right] \text{dev}_{\mathcal{A}} P_{Ti}^{l*} \quad \forall i \in \mathcal{A}_\lambda^l \\ \rho_i^{l+1} = \rho_i^l + \frac{\Delta t_T}{(g)^2} \left[ 1 - \frac{r_{T1}}{|\text{dev}_{\mathcal{A}} P_{Ti}^{l*}|} \right] \text{dev}_{\mathcal{A}} P_{Ti}^{l*} \quad \forall i \in \mathcal{A}_\rho^l \end{array} \right.$$

**Calc:**  $\mathcal{A}_\lambda^{l+1}, \mathcal{A}_\rho^{l+1}$

**Update:**  $\alpha^l = \alpha^{l+1}, \lambda^l = \lambda^{l+1}, \rho^l = \rho^{l+1}, \mathcal{A}_\lambda^l = \mathcal{A}_\lambda^{l+1}, \mathcal{A}_\rho^l = \mathcal{A}_\rho^{l+1}$

CONTINUE with next load step:  $l + 1 \rightarrow l + 2$

während der irreversiblen und reversiblen Transformation dissipiert, wobei die letzteren beiden zusätzlich die Bildung von Martensit favorisieren und seine Rücktransformation erschweren.

Wie bereits in Waimann u. a. (2017) veröffentlicht, lassen sich diese Modellparameter anhand experimenteller Daten bestimmen und das Materialmodell so kalibrieren. Als Grundlage hierfür dient der zyklische Zugversuch nach Wagner (2005).

Der maximale totale irreversible Volumenanteil kann durch Betrachtung des Spannungs-Dehnungs-Diagramms des ersten und konvergierten Zyklus bestimmt werden. Zur besseren Übersicht wurden in Abbildung 4.9 beide Zyklen schematisch dargestellt. Im vorliegenden Modell wird die verbleibende Dehnung im konvergierten Zustand  $\varepsilon_{\text{res}}^{\text{konv}}$  als Transformationsdehnung der irreversiblen Phase  $v$  interpretiert. Bei der Transformationsdehnung  $\eta$  handelt es sich wie in Kapitel 3.1 beschrieben um eine experimentell bestimmbare Größe. Sofern also experimentelle Daten für  $\eta$  vorliegen, siehe z.B. Wagner u. Windl (2008), lassen sich diese einfach in dem Modell berücksichtigen. In den nachfolgenden Berechnungen werden jedoch vereinfachend

$$\eta_1 = \hat{\eta} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -\hat{v} & 0 \\ 0 & 0 & -\hat{v} \end{pmatrix} \quad \eta_2 = \hat{\eta} \begin{pmatrix} -\hat{v} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -\hat{v} \end{pmatrix} \quad \eta_3 = \hat{\eta} \begin{pmatrix} -\hat{v} & 0 & 0 \\ 0 & -\hat{v} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (4.126)$$

als Transformationsdehnungen gewählt. Darin sind  $\hat{\eta}$  und  $\hat{\nu}$  konstante Materialparameter. In Kombination mit der auf sie angewandten Rotation kann so jede experimentell beobachtete Transformationsdehnung in jedem energetisch günstig orientierten Korn abgebildet werden. Der einzige Nachteil, den diese Vorgehensweise gegenüber der Verwendung der exakten experimentellen Transformationsdehnungen hat, ist, dass nicht mehr eindeutig gesagt werden kann, welche tatsächliche Martensitvariante gebildet wird. Dieser Nachteil ist allerdings im Angesicht der deutlich kürzeren Berechnungszeiten hinnehmbar und deckt sich des Weiteren mit anderen Materialmodellen, die direkt die Transformationsdehnung als interne Variable verwenden, siehe z.B. Auricchio u. a. (2007). Die verbleibende Dehnung ist dann näherungsweise durch

$$\varepsilon_{\text{res}}^{\text{konv}} \approx \rho_{\text{max}} \hat{\eta} \quad (4.127)$$

gegeben, es handelt sich folglich um die maximale irreversible Transformationsdehnung. Dieser Ausdruck lässt sich schließlich nach dem zu bestimmenden Parameter  $\rho_{\text{max}}$  umstellen

$$\rho_{\text{max}} \approx \frac{\varepsilon_{\text{res}}^{\text{konv}}}{\hat{\eta}}, \quad (4.128)$$

welcher sich mithilfe der aus dem Experiment in Abbildung 4.10 abgelesenen verbleibenden Dehnung berechnen lässt.

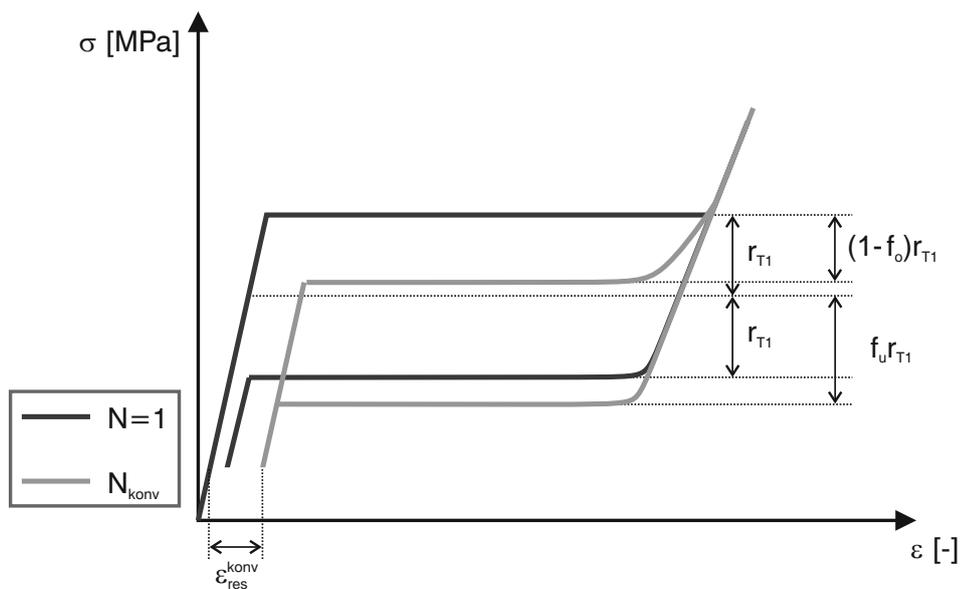


Abbildung 4.9: Zyklischer Zugversuch nach Wagner (2005), schematisches Spannungs-Dehnungs-Diagramm des ersten und des konvergierten Zyklus.

Zur Bestimmung der Faktoren  $f_1$  und  $f_2$  werden ebenso der erste und der konvergierte Zyklus miteinander verglichen. An dieser Stelle empfiehlt sich eine genauere Interpretation des Dissipationsparameters  $r_{T1}$ . Dieser steuert, wie viel Energie durch die Phasenumwandlung dissipiert, und ist somit für den Fall einer rein reversiblen Transformation proportional zur Hysteresenhöhe bzw. zum Abstand des oberen und unteren Plateaus von der Hysteresenmitte. Im Fall der zusätzlichen irreversiblen Transformation wurde unter anderem der Faktor  $f$  in die Dissipationsfunktion (4.84) eingefügt. Dadurch ist nun nicht mehr nur  $r_{T1}$ , sondern vielmehr das Produkt  $r_{T1}f$  proportional zum Abstand der Plateaus. Wie in Abbildung 4.9 schematisch dargestellt, muss somit dieser effektive Dissipationsparameter im konvergierten Zustand für das obere Plateau deutlich abnehmen und entsprechend für das untere Plateau größer werden. Diese Veränderungen werden durch die Faktoren  $f_o$  und  $f_u$  berücksichtigt, die aus den experimentellen Werten

berechnet werden können und somit die resultierenden effektiven Dissipationsparameter des konvergierten Zustands für das obere und untere Plateau liefern. Für die Transformation von Austenit zu Martensit ergibt sich folglich  $(fr_{T1})_{A \rightarrow M} = f_o r_{T1}$  und für die Rücktransformation entsprechend  $(fr_{T1})_{M \rightarrow A} = f_u r_{T1}$ . Wie in Gleichung (4.85) beschrieben, handelt es sich bei dem Faktor  $f$  um eine lineare Funktion des totalen irreversiblen Volumenanteils. Im betrachteten konvergierten Zustand entspricht dieser seinem Maximalwert  $\rho_{\max}$  und es gilt somit

$$\begin{aligned} 1.0 - f_1 \rho_{\max} &= f_o \\ 1.0 + f_2 \rho_{\max} &= f_u . \end{aligned} \quad (4.129)$$

Die beiden Faktoren  $f_1$  und  $f_2$  können also durch

$$\begin{aligned} f_1 &= \frac{1 - f_o}{\rho_{\max}} \\ f_2 &= \frac{f_u - 1}{\rho_{\max}} \end{aligned} \quad (4.130)$$

bestimmt werden. An dieser Stelle soll jedoch nicht unerwähnt bleiben, dass in den Überlegungen der Einfluss der irreversiblen Transformation auf die Hysteresenbreite nicht berücksichtigt wurde. Dieser ist jedoch aufgrund der ausschließlich reversiblen Transformation im konvergierten Zyklus sowie der geringen irreversiblen Umwandlung im Vergleich zum reversiblen Prozess vernachlässigbar.

Zuletzt bleibt die nötige Bestimmung des Materialparameters  $g$ , der steuert, wie viel irreversibler Martensit – in Relation zu reversiblen – während der Transformation entsteht. Dazu wird der erste Zyklus betrachtet. Analog zu der Bestimmung von  $\rho_{\max}$  lässt sich die totale irreversible Volumenfraktion des ersten Zyklus  $\bar{\rho}^I$  aus der abgelesenen verbleibenden Dehnung des ersten Zyklus  $\varepsilon_{\text{res}}^I$  bestimmen durch

$$\bar{\rho}^I \approx \frac{\varepsilon_{\text{res}}^I}{\hat{\eta}} . \quad (4.131)$$

Des Weiteren wird angenommen, dass im Zustand der maximal aufgebrauchten Dehnung ein rein martensitisches Material vorliegt. Der absolute Anteil an irreversiblen Martensit ergibt sich dann durch Integration der Evolutionsgleichung von  $\rho$  über die Zeit und Summierung der einzelnen Martensitvarianten. Er entspricht, da während der Rücktransformation durch die Irreversibilitätsbedingung (4.67) die irreversiblen Volumenanteile konstant bleiben,  $\bar{\rho}^I$ . Somit gilt

$$\sum_{i=1}^n \int \dot{\rho}_i dt = \bar{\rho}^I . \quad (4.132)$$

Der totale reversible Martensitanteil ergibt sich dann durch entsprechende Integration und Summierung der Rate  $\dot{\lambda}$  und kann in Abhängigkeit von  $\dot{\rho}$  ausgedrückt werden, vergleiche hierzu die Evolutionsgleichungen in (4.102) und (4.122). Dabei wurde vorausgesetzt, dass die reversiblen und irreversiblen Martensitvarianten aktiv sind, da sie durch den gleichen aktiven Deviator aktiviert werden und die Irreversibilitätsbedingung erst während der Rücktransformation an Bedeutung gewinnt, wo sie die Rücktransformation des irreversiblen Martensits verhindert. Der

totale reversible Martensitanteil entspricht dann bei vollständiger Transformation des Austenits  $1 - \bar{\rho}^I$ . Somit gilt:

$$\sum_{i=1}^n \int \dot{\lambda}_i dt = \sum_{i=1}^n \int \frac{g^2}{f^2} \dot{\rho}_i dt = 1 - \bar{\rho}^I. \quad (4.133)$$

Der Faktor  $g$  ist ein konstanter Parameter. Der Faktor  $f$  ist eine lineare Funktion von  $\rho$ . Näherungsweise wird für  $f$  jedoch  $\tilde{f} = f(\bar{\rho}^I/2)$  angenommen, so dass sich der nun konstante Faktor  $g^2/\tilde{f}^2$  aus dem Integral ziehen lässt. Dann ergibt sich der Faktor  $g^2$  schließlich durch Umformung der Gleichungen (4.132) und (4.133):

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n \frac{g^2}{\tilde{f}^2} \int \dot{\rho}_i dt &= 1 - \bar{\rho}^I \\ \frac{g^2}{\tilde{f}^2} \sum_{i=1}^n \int \dot{\rho}_i dt &= 1 - \bar{\rho}^I \\ \frac{g^2}{\tilde{f}^2} \bar{\rho}^I &= 1 - \bar{\rho}^I \\ \Leftrightarrow g^2 &= \frac{\tilde{f}^2 (1 - \bar{\rho}^I)}{\bar{\rho}^I}. \end{aligned} \quad (4.134)$$

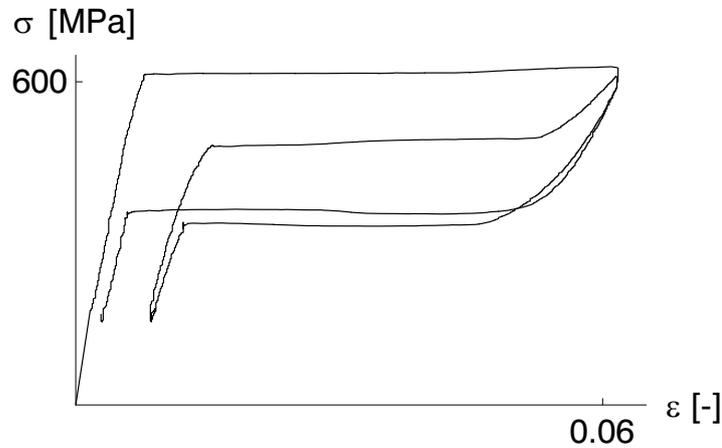


Abbildung 4.10: Zyklischer Zugversuch nach Wagner (2005), Spannungs-Dehnungs-Diagramm des ersten und des konvergierten Zyklus.

Abbildung 4.10 zeigt die Messdaten des zyklischen Zugversuchs nach Wagner (2005). Aus den zur Verfügung gestellten experimentellen Daten aus Wagner (2005) konnten die hier gerundet dargestellten verbliebenen Dehnungen mit  $\varepsilon_{\text{res}}^I = 0.00155$  und  $\varepsilon_{\text{res}}^{\text{konv}} = 0.00718$  entnommen werden. Da sich das obere Plateau in etwa bis zur Mitte der ursprünglichen Hysterese absenkt und eine Dissipation von null physikalisch nicht sinnvoll ist, wird der Faktor des oberen Plateaus mit  $f_o = 0.00001$  angenommen. Durch Betrachtung der Absenkung des unteren Plateaus folgt der Faktor  $f_u = 1.16980$ . Unter Verwendung des Materialparameters  $\hat{\eta} = 0.055$  ergeben sich schließlich die in Tabelle 4.1 für die funktionale Ermüdung verantwortlichen Parameter, mit denen in den nachfolgenden Kapiteln gerechnet wird.

$\rho_{\max}$	0.130 [-]
$f_1$	7.665 [-]
$f_2$	1.302 [-]
$g^2$	27.742 [-]

Tabelle 4.1: Experimentell gestützte Materialparameter zur Modellkalibrierung.

### 4.3 Variationelle Modellierung der funktionalen Ermüdung während des thermischen Zyklierens – Modell 3

Die Modellierung der mechanisch induzierten funktionalen Ermüdung basiert auf der Bildung irreversiblen Martensits und spiegelt somit das experimentell untersuchte Materialverhalten wieder, siehe beispielsweise Eggeler u. a. (2004). Für eine zyklisch aufgebrachte thermische Belastung wurden unterschiedliche Effekte dokumentiert, die teilweise trotz gleicher untersuchter Legierungen im Widerspruch zueinander stehen, siehe Otsuka u. Wayman (1999). Zwar wird in manchen Quellen, wie beispielsweise Perkins u. Muesing (1983), durchaus eine Bildung irreversiblen Martensits und eine dadurch resultierende begünstigte Transformation von Austenit zu Martensit und erschwerte Rücktransformation beschrieben, jedoch ist vor allem in neueren Untersuchungen keine Bildung permanenten Martensits unter zyklischer Belastung dokumentiert. Des Weiteren kommt es im Fall der Untersuchung eines nicht vorgedehnten Materials unter zyklischer thermischer Belastung beispielsweise nach Miyazaki u. a. (1986a) zu einem Abfall der Transformationstemperaturen.

Abbildung 4.11 zeigt schematisch das in Burow (2010) dokumentierte Materialverhalten. Die Wärmestromspitzen weisen darin auf den Umwandlungsprozess hin und verdeutlichen so das Absinken der Transformationstemperaturen unter zyklisch aufgetragener thermischer Belastung. Die in späteren Lastzyklen auftretende zweistufige Umwandlung während des Abkühlvorgangs, verbunden mit der Bildung der sogenannten R-Phase, wurde im Rahmen dieser Arbeit nicht berücksichtigt.

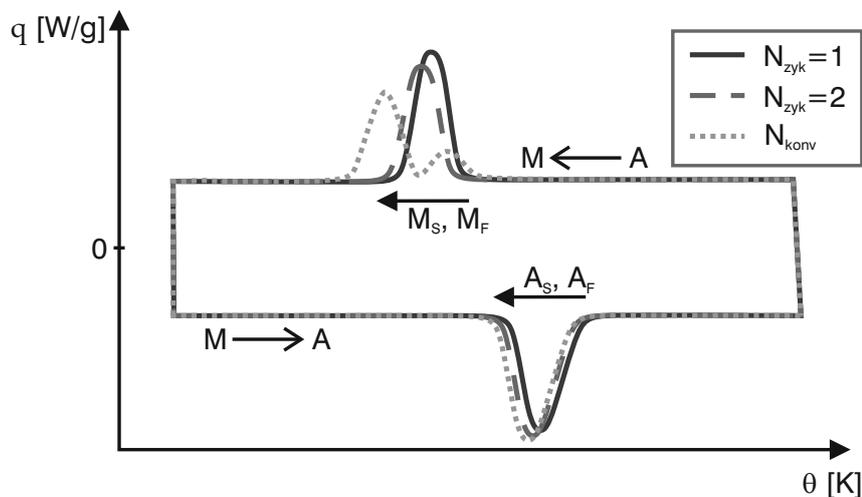


Abbildung 4.11: Schematische Darstellung des zyklischen Temperaturversuchs nach Burow (2010).

Zur Modellierung des Materialverhaltens werden drei interne Variablen verwendet. Bei der

ersten internen Variable handelt es sich um die reversible Volumenfraktion  $\lambda$ , die – wie bereits in den ersten beiden Modellen – die Nebenbedingung der Nichtnegativität und die Massenerhaltung erfüllen muss:

$$\dot{\lambda}_i \geq 0 \quad \forall i, \quad \sum_{i=0}^n \dot{\lambda}_i = 0. \quad (4.135)$$

Zur Modellierung der funktionalen Degradierung wird – anstelle der irreversiblen martensitischen Volumenfraktion einer jeden Martensitvariante –  $\rho$  als Gesamtmaß der bereits stattgefundenen Phasentransformationen und damit verbundenen Bildung irreversibler Dehnungen betrachtet. Zur Berücksichtigung der Transformationshistorie wird für  $\rho$  die Nebenbedingung

$$\dot{\rho} = |\dot{\lambda}| \quad (4.136)$$

gefordert. Die irreversible Dehnung  $\mathbf{v}$  entspricht dann nicht mehr der Transformationsdehnung der irreversiblen Phasen, sondern kann durch

$$\mathbf{v} = k(\rho) \tilde{\boldsymbol{\eta}} \quad (4.137)$$

berechnet werden. Die Funktion  $k(\rho)$  wird mit

$$k(\rho) = -\frac{k_1}{k_2\rho + 1} + k_1 \quad (4.138)$$

angenommen. Der Faktor  $k_1$  definiert somit die Größenordnung der Formation, der Faktor  $k_2$  die Konvergenz der bleibenden Dehnungen. Die Richtung der irreversiblen Dehnung ist mit  $\tilde{\boldsymbol{\eta}} = \sum_{i=0}^n \boldsymbol{\eta}_i$  gegeben. Ähnlich wie bereits in Modell 2 erfolgt die Bildung der bleibenden Dehnungen also in Richtung der Transformationsdehnungen.

Die freie Helmholtz-Energie aus Gleichung (4.80) wird des Weiteren um einen zusätzlichen Term  $\Psi_{\rho,\theta}$  ergänzt, der von der Temperatur  $\theta$  und der Historienvariable  $\rho$  abhängt:

$$\Psi_{\text{mod}} = \frac{1}{2} (\boldsymbol{\varepsilon} - \mathbf{Q}^T \cdot \bar{\boldsymbol{\eta}} \cdot \mathbf{Q} - \mathbf{Q}^T \cdot \mathbf{v} \cdot \mathbf{Q}) : \bar{\mathbb{E}} : (\boldsymbol{\varepsilon} - \mathbf{Q}^T \cdot \bar{\boldsymbol{\eta}} \cdot \mathbf{Q} - \mathbf{Q}^T \cdot \mathbf{v} \cdot \mathbf{Q}) + \bar{c}(\theta) + \Psi_{\rho\theta}(\rho, \theta). \quad (4.139)$$

Die effektiven Werte für die Transformationsdehnung, die Steifigkeitsmatrix und die kalorische Energie berechnen sich wie bereits in Kapitel 4.1.2 durch

$$\begin{aligned} \bar{\boldsymbol{\eta}} &= \sum_{i=0}^n \lambda_i \boldsymbol{\eta}_i & \bar{\mathbb{E}} &= \left[ \sum_{i=0}^n \lambda_i (\mathbb{E}_i)^{-1} \right]^{-1} \\ \bar{c} &= \sum_{i=0}^n \lambda_i c_i. \end{aligned} \quad (4.140)$$

Die kalorische Energie  $c_i$  hat nach Huo u. Müller (1993) die Form

$$c_i = c_\theta(\theta - \theta_R) - c_\theta \theta \ln \left( \frac{\theta}{\theta_R} \right) + a_i - b_i \theta \quad (4.141)$$

mit der Referenztemperatur  $\theta_R$ , der Wärmekapazität  $c_\theta$  und den Faktoren  $a_i$  und  $b_i$ . Für die Berechnungen ist lediglich die Differenz der Energien der einzelnen Phasen von Bedeutung, da

abhängig von deren Verhältnis zueinander die Transformation einsetzt bzw. endet. Des Weiteren unterscheidet sich die kalorische Energie lediglich für den austenitischen und martensitischen Zustand, nicht aber für die einzelnen Martensitvarianten. Daher wird basierend auf Junker u. Hackl (2014) und Junker (2011) lediglich die Differenz der Energien

$$\Delta c = \Delta a - \Delta b\theta \tag{4.142}$$

mit den konstanten Faktoren  $\Delta a$  und  $\Delta b$  betrachtet.

Der zusätzliche Energieanteil der Temperatur und der Transformationshistorie wird durch

$$\begin{aligned} \Psi_{\rho\theta}(\rho, \theta) = & \frac{1}{1 + \exp(\theta_M - \theta)} \left( \frac{k_3}{k_4} \ln(k_4\rho + 1) - k_3\rho \right) \\ & - \left( 1 - \frac{1}{1 + \exp(\theta_M - \theta)} \right) \left( \frac{k_5}{k_4} \ln(k_4\rho + 1) - k_5\rho \right) \end{aligned} \tag{4.143}$$

angenommen, darin sind  $k_3$ ,  $k_4$  und  $k_5$  eingeführte Modellparameter. Er berücksichtigt die beispielsweise in Burow (2010) dokumentierte Verschiebung der Transformation zu tieferen Temperaturen während des thermischen Zyklirens. Die Funktion wird in Abbildung 4.12 dargestellt. Oberhalb der Temperatur  $\theta_M = (A_S + M_S)/2$  führt eine durch den Parameter  $\rho$  gespeicherte vorherige Phasentransformation zu einer Erhöhung der vorhandenen Energie, während diese bei Temperaturen  $\theta < \theta_M$  reduziert wird. Mit Hilfe des modifizierten Energieterms (4.139)

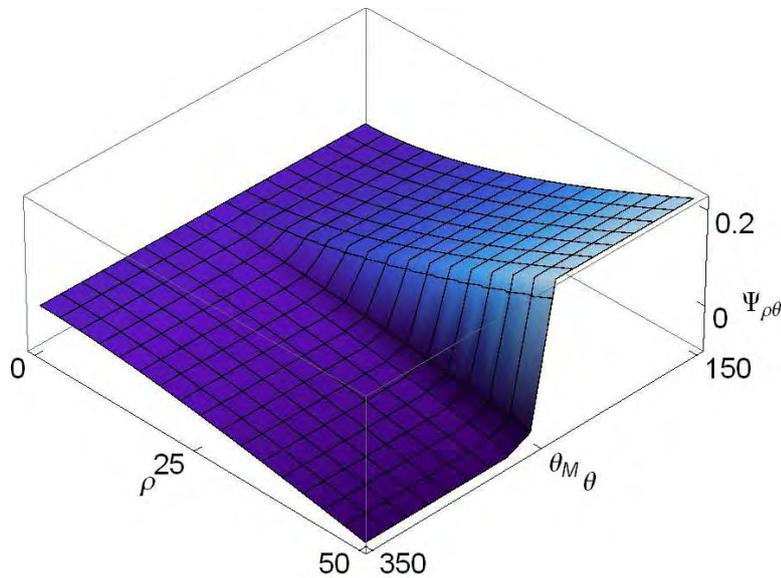


Abbildung 4.12: Funktion des zusätzlichen Energieterms  $\Psi_{\rho\theta}(\rho, \theta)$ .

können die Triebkräfte der internen Variablen  $\lambda$ ,  $\alpha$  und  $\rho$  bestimmt werden. Die Spannung wird dazu analog zu Gleichung (4.144) durch

$$\sigma = \bar{\mathbb{E}} : (\varepsilon - Q^T \cdot \bar{\eta} \cdot Q - Q^T \cdot v \cdot Q) \tag{4.144}$$

berechnet. Die Triebkraft der Phasentransformation  $P_T$  sowie der Eulerwinkeländerung  $P_R$  entsprechen im Wesentlichen den bereits in den vorangegangenen Kapiteln verwendeten Größen,

vergleiche Gleichungen (4.89) und (4.91). Sie haben im vorliegenden Fall die Form

$$\begin{aligned} P_{Ti} &= \mathbf{Q}^T \cdot \boldsymbol{\eta}_i \cdot \mathbf{Q} : \boldsymbol{\sigma} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} : (\mathbb{E}_i)^{-1} : \boldsymbol{\sigma} - c_i \\ \mathbf{P}_R &= 2(\tilde{\boldsymbol{\eta}} + \mathbf{v}) \cdot \mathbf{Q} \cdot \boldsymbol{\sigma} : \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial \boldsymbol{\alpha}} \end{aligned} \quad (4.145)$$

mit der Ableitung des Rotationstensors nach den Eulerwinkeln nach Gleichung (4.52). Die Triebkraft der neuen internen Variable  $\rho$  ergibt sich mit

$$\begin{aligned} P_\rho &= \frac{k_1 k_2}{(k_2 \rho + 1)^2} \mathbf{Q}^T \cdot \tilde{\boldsymbol{\eta}} \cdot \mathbf{Q} : \boldsymbol{\sigma} - \frac{1}{1 + \exp(\theta_M - \theta)} \left( \frac{k_3}{k_4 \rho + 1} - k_3 \right) \\ &+ \left( 1 - \frac{1}{1 + \exp(\theta_M - \theta)} \right) \left( \frac{k_5}{k_4 \rho + 1} - k_5 \right). \end{aligned} \quad (4.146)$$

Für die Dissipationsfunktion wird ein ratenunabhängiger Ansatz für die Entwicklung der Volumenfraktion und der bereits aus den vorherigen Kapiteln bekannte und ursprünglich in Junker (2014b) vorgestellte ratenabhängige Ansatz für die Eulerwinkelevolution verwendet:

$$\mathcal{D} = r_T(\lambda_0, \text{dev}_{\mathcal{A}} P_{T0}) \left| \dot{\boldsymbol{\lambda}} \right| + \frac{r_R}{2} \|\boldsymbol{\Omega}\|^2. \quad (4.147)$$

In Gleichung (4.147) entspricht  $\boldsymbol{\Omega}$  wiederum dem schief-symmetrischen Tensor der Winkelgeschwindigkeiten aus Gleichung (4.56). Basierend auf Junker u. Hackl (2014) und Junker (2011) wird zur Abbildung der thermisch induzierten Umwandlung der Dissipationsparameter der Phasentransformation  $r_T$  als Funktion des Austenitgehalts und der Transformationsrichtung formuliert. Die Transformationsrichtung wird – wie bereits in den vorangegangenen Kapiteln – durch den nachfolgend definierten aktiven Deviator des Austenits  $\text{dev}_{\mathcal{A}} P_{T0}$  beschrieben. Unter Verwendung des Parameters  $s = 10000$ , der lediglich die Sensibilität der Aktivierungsfunktion beeinflusst, wurde somit der Ansatz

$$r_T = \frac{1}{1 + \exp(-s \text{dev}_{\mathcal{A}} P_{T0})} (r_{As} + (r_{Af} - r_{As}) \lambda_0) \quad (4.148)$$

$$+ \frac{1}{1 + \exp(s \text{dev}_{\mathcal{A}} P_{T0})} (r_{Mf} + (r_{Ms} - r_{Mf}) \lambda_0) \quad (4.149)$$

gewählt. Darin sind die Faktoren  $r_{As}$ ,  $r_{Af}$ ,  $r_{Ms}$  und  $r_{Mf}$  die Dissipationsparameter der austenitischen bzw. martensitischen Start- und Finish-Temperaturen  $A_S$ ,  $A_F$ ,  $M_S$  und  $M_F$ . Diese können unter Verwendung der Anzahl der Martensitvarianten  $n$  und in Abhängigkeit der kalorischen Energiedifferenz aus Gleichung (4.142) durch

$$r_T(\theta) = \sqrt{\frac{n}{n+1}} |\Delta c(\theta)| \quad (4.150)$$

berechnet werden. Sie haben somit die Form

$$\begin{aligned} r_{As} &= \sqrt{\frac{n}{n+1}} |\Delta c(A_S)| & r_{Af} &= \sqrt{\frac{n}{n+1}} |\Delta c(A_F)| \\ r_{Ms} &= \sqrt{\frac{n}{n+1}} |\Delta c(M_S)| & r_{Mf} &= \sqrt{\frac{n}{n+1}} |\Delta c(M_F)|. \end{aligned} \quad (4.151)$$

Detailliertere Ausführungen zur Bestimmung des Dissipationsparameters können Junker u. Hackl (2014) entnommen werden.

Unter Berücksichtigung der freien Energie (4.139), der Dissipationsfunktion (4.147) und der Nebenbedingungen für die internen Variablen in den Gleichungen (4.135) und (4.136) kann schließlich die Lagrange-Funktion aufgestellt werden. Sie nimmt die Form

$$\begin{aligned} \mathcal{L} &= -\mathbf{P}_T \cdot \dot{\boldsymbol{\lambda}} - \mathbf{P}_R \cdot \dot{\boldsymbol{\alpha}} - P_\rho \dot{\rho} + r_T |\dot{\boldsymbol{\lambda}}| + \frac{r_R}{2} \|\boldsymbol{\Omega}\|^2 + \kappa_T \sum_{i=0}^n \dot{\lambda}_i + \kappa_\rho (|\dot{\boldsymbol{\lambda}}| - \dot{\rho}) - \sum_{i=0}^n \gamma_{Ti} \dot{\lambda}_i \\ &\rightarrow \min_{\dot{\boldsymbol{\lambda}}, \dot{\boldsymbol{\alpha}}, \dot{\rho}} \end{aligned} \quad (4.152)$$

an und wird im Anschluss bezüglich der Raten der internen Variablen minimiert. Die folgenden Herleitungen stimmen im Wesentlichen mit den Berechnungen der vorherigen Kapitel überein. In Gleichung (4.152) sind  $\kappa_T$  und  $\kappa_\rho$  Lagrange-Parameter und  $\gamma_{Ti}$  der durch

$$\gamma_{Ti} = \begin{cases} 0 & \text{if } \lambda_i > 0 \vee (\lambda_i = 0 \wedge \dot{\lambda}_i > 0) \\ > 0 & \text{else} \end{cases} \quad (4.153)$$

definierte Kuhn-Tucker-Parameter, vergleiche Gleichung (4.21). Für die Ableitung und die daraus bestimmten Evolutionsgleichungen der Eulerwinkel ergeben sich die bereits in den Kapiteln 4.1.8 und 4.2.5 vorgestellten Relationen, siehe beispielsweise die Evolutionsgleichungen in (4.95) und Junker (2014b) bzw. Junker (2014a).

Die Differenzierung der Lagrange-Funktion nach  $\dot{\boldsymbol{\lambda}}$  und  $\dot{\rho}$  ergeben

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\lambda}_i} = -P_{Ti} + r_T \frac{\dot{\lambda}_i}{|\dot{\boldsymbol{\lambda}}|} + \kappa_T + \kappa_\rho \frac{\dot{\lambda}_i}{|\dot{\boldsymbol{\lambda}}|} - \gamma_{Ti} = 0 \quad (4.154)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\rho}} = -P_\rho - \kappa_\rho = 0, \quad (4.155)$$

wobei sich letztere direkt nach dem Lagrange-Parameter  $\kappa_\rho$  in

$$\kappa_\rho = -P_\rho \quad (4.156)$$

umformen lässt. Durch Aufsummieren der ersten Gleichung (4.154) über die aktive Menge  $\mathcal{A}_\lambda$ , siehe Gleichung (4.97), ergibt sich der Lagrange-Parameter  $\kappa_T$  zu

$$\kappa_T = \frac{1}{n_{\mathcal{A}}} \sum_{k \in \mathcal{A}_\lambda} P_{Tk}. \quad (4.157)$$

Unter Verwendung des zuvor bereits erhaltenen Deviators der aktiven Phasen

$$\text{dev}_{\mathcal{A}} P_{Ti} = P_{Ti} - \kappa_T \quad (4.158)$$

ergibt sich durch Umformung von Gleichung (4.154) die Evolutionsgleichung für die Volumenfraction

$$\dot{\lambda}_i = \beta \text{dev}_{\mathcal{A}} P_{Ti} \quad \forall i \in \mathcal{A}_\lambda \quad (4.159)$$

mit dem Konsistenzparameter

$$\beta := \frac{|\dot{\lambda}|}{r_T - P_\rho}. \quad (4.160)$$

Aufgrund der Nebenbedingung (4.136) lässt sich die Evolutionsgleichung der internen Variable  $\rho$  als

$$\dot{\rho} = \beta |\text{dev}_{\mathcal{A}} \mathbf{P}_T| \quad (4.161)$$

formulieren.

Um abschließend noch die Fließfunktion des betrachteten ratenunabhängigen Falls zu bestimmen, wird die Legendre-Transformation der Dissipationsfunktion für die Phasentransformation betrachtet. Diese lässt sich schreiben als

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_T^* &= \sup_{\dot{\lambda}} \left\{ \mathbf{P}_T \cdot \dot{\lambda} - \kappa_T \sum_{i=0}^n \dot{\lambda}_i - \kappa_\rho |\dot{\lambda}| - r_T |\dot{\lambda}| \Big|_{\mathcal{A}_\lambda} \right\} \\ &= \sup_{\dot{\lambda}} \left\{ \frac{|\dot{\lambda}|}{r_T - P_\rho} (\text{dev}_{\mathcal{A}} \mathbf{P}_T \cdot \text{dev}_{\mathcal{A}} \mathbf{P}_T - (r_T - P_\rho)^2) \Big|_{\mathcal{A}_\lambda} \right\} \end{aligned} \quad (4.162)$$

und – wie bereits in den vorangegangenen Kapiteln – so umformen, dass der Ausdruck für die Fließfunktion abgelesen werden kann:

$$\Phi := \text{dev}_{\mathcal{A}} \mathbf{P}_T \cdot \text{dev}_{\mathcal{A}} \mathbf{P}_T - (r_T - P_\rho)^2. \quad (4.163)$$

Das Materialmodell zur Beschreibung der thermisch induzierten funktionalen Ermüdung wird schließlich durch die wiederum automatisch resultierenden Kuhn-Tucker-Bedingungen

$$\beta \geq 0, \quad \Phi \leq 0, \quad \beta \Phi = 0 \quad (4.164)$$

komplettiert. Durch Betrachtung der Fließfunktion in Gleichung (4.163) wird deutlich, dass die neue interne Variable zur Berücksichtigung der Transformationshistorie einen direkten Einfluss auf die Fließgrenze für das Einsetzen der Phasentransformation hat. Diese Eigenschaft ist vergleichbar mit isotroper Verfestigung, siehe Wriggers (2013).



## 5 Numerische Ergebnisse auf Materialpunktebene

In dem nun folgenden Kapitel werden Ergebnisse für Berechnungen auf Materialpunktebene präsentiert. Die Präsentation erfolgt für alle in Kapitel 4 vorgestellten Modelle unter Berücksichtigung der jeweiligen Modifikationen. Zur kompakteren Schreibweise wird die in Tabelle 5.1 vorgestellte Nummerierung der einzelnen Materialmodelle vorgenommen. Bei dem ersten Materialmodell handelt es sich um das in Kapitel 4.1 präsentierte Modell mit simultaner Entwicklung plastischer Dehnungen. Die Auswertungen auf Materialpunktebene erfolgen für Modell 1 sowohl unter Verwendung der statischen Orientierungsverteilungsfunktion und somit der vorgestellten kombinierten Voigt/Reuß-Energiegrenze als auch unter Berücksichtigung der sich entwickelnden Orientierungsverteilung mit Hilfe der Eulerwinkel als zusätzliche interne Variablen, wie in Kapitel 4.1.8 präsentiert. Im zweiten Materialmodell liegt die Ursache für die funktionale Ermüdung in der Stabilisierung des Martensits und der damit verbundenen Bildung einer irreversiblen Volumenfraktion. Die Modelle 2a und 2b zeigen jeweils Berechnungen für eine ratenunabhängige bzw. ratenabhängige Entwicklung der Mikrostruktur, siehe Kapitel 4.2. Der letzte im Rahmen dieser Arbeit präsentierte Modellansatz 3 aus Kapitel 4.3 dient der gleichzeitigen Abbildung der funktionalen Ermüdung während des thermischen Zyklierens unter Berücksichtigung der Transformationshistorie und sich bildenden bleibenden Dehnungen in Richtung der Transformationsdehnungen.

<b>Modell 1</b>	Simultane Formation plastischer Dehnungen		
	a	statische Orientierungsverteilungsfunktion	Kapitel 4.1
	b	dynamische Orientierungsverteilungsfunktion	Kapitel 4.1.8
<b>Modell 2</b>	Simultane Entwicklung irreversiblen Martensits mit dynamischer Orientierungsverteilungsfunktion		
	a	ratenunabhängige Phasentransformation	Kapitel 4.2.5
	b	ratenabhängige Phasentransformation	Kapitel 4.2.6
<b>Modell 3</b>	Gleichzeitige Abbildung thermischer Ermüdungseffekte mit dynamischer Orientierungsverteilungsfunktion		Kapitel 4.3

Tabelle 5.1: Übersicht über die unterschiedlichen Modellansätze.

Das erste berechnete Randwertproblem auf Materialpunktebene ist ein zyklischer Zugversuch. Der vorgegebene Dehnungstensor hat die Gestalt

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \tilde{\varepsilon} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -\tilde{\nu} & 0 \\ 0 & 0 & -\tilde{\nu} \end{pmatrix} \quad (5.1)$$

mit einem gleichmäßig zyklisch zu- und abnehmendem Wert für  $\tilde{\varepsilon} \in \{0, 0.06125\}$  sowie dem konstanten belastungsrelevanten Parameter  $\tilde{\nu} = 0.44$ . Die maximale Dehnung in Zugrichtung von 0.06125 entspricht dabei der maximalen Dehnung im Experiment nach Wagner (2005). Für das zweite Berechnungsbeispiel auf Materialpunktebene – den zyklischen Scherversuch – wird

als Dehnungstensor

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \tilde{\tau} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.2)$$

mit  $\tilde{\tau} \in \{0, 0.06152\}$  angenommen.

An dieser Stelle wird des Weiteren angemerkt, dass in den einzelnen Zyklen der Materialpunktsberechnung keine vollständige Entlastung bis  $\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{0}$  erfolgt. Um sich den experimentellen Untersuchungen anzupassen, wird lediglich bis  $\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0}$  entlastet und im Anschluss mit der jeweiligen Belastung fortgefahren.

Für die Simulationen wird auf zwei unterschiedliche Materialdatensätze zurückgegriffen. Für die Simulationen des Modells 1a werden die bereits in Junker (2011) verwendeten Daten – die Transformationsdehnungen sowie die Steifigkeitstensoren der einzelnen Phasen – der Legierung NiTi genutzt. Aufgrund der Rotation des Steifigkeitstensors erfolgen sämtliche Berechnungen für diesen Materialdatensatz in Mehrabadi-Cowin-Notation, siehe Kapitel 2.1.1 bzw. Mehrabadi u. Cowin (1990). Wie bereits in Kapitel 4.2.7 erwähnt, entspricht durch die Wahl des Austenits als Referenzzustand  $\boldsymbol{\eta}_0$  dem Nulltensor  $\mathbf{0}$ . Die entsprechenden Dehnungen der zwölf martensitischen Varianten sind durch

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\eta}_1 &= (\hat{\eta}_1, \hat{\eta}_1, \hat{\eta}_2, \hat{\eta}_4, \hat{\eta}_4, \hat{\eta}_3)^\top & \boldsymbol{\eta}_7 &= (\hat{\eta}_1, \hat{\eta}_2, \hat{\eta}_1, \hat{\eta}_4, -\hat{\eta}_3, -\hat{\eta}_4)^\top \\ \boldsymbol{\eta}_2 &= (\hat{\eta}_1, \hat{\eta}_1, \hat{\eta}_2, -\hat{\eta}_4, -\hat{\eta}_4, \hat{\eta}_3)^\top & \boldsymbol{\eta}_8 &= (\hat{\eta}_1, \hat{\eta}_2, \hat{\eta}_1, -\hat{\eta}_4, -\hat{\eta}_3, \hat{\eta}_4)^\top \\ \boldsymbol{\eta}_3 &= (\hat{\eta}_1, \hat{\eta}_1, \hat{\eta}_2, \hat{\eta}_4, -\hat{\eta}_4, -\hat{\eta}_3)^\top & \boldsymbol{\eta}_9 &= (\hat{\eta}_2, \hat{\eta}_1, \hat{\eta}_1, \hat{\eta}_3, \hat{\eta}_4, \hat{\eta}_4)^\top \\ \boldsymbol{\eta}_4 &= (\hat{\eta}_1, \hat{\eta}_1, \hat{\eta}_2, -\hat{\eta}_4, \hat{\eta}_4, -\hat{\eta}_3)^\top & \boldsymbol{\eta}_{10} &= (\hat{\eta}_2, \hat{\eta}_1, \hat{\eta}_1, \hat{\eta}_3, -\hat{\eta}_4, -\hat{\eta}_4)^\top \\ \boldsymbol{\eta}_5 &= (\hat{\eta}_1, \hat{\eta}_2, \hat{\eta}_1, \hat{\eta}_4, \hat{\eta}_3, \hat{\eta}_4)^\top & \boldsymbol{\eta}_{11} &= (\hat{\eta}_2, \hat{\eta}_1, \hat{\eta}_1, -\hat{\eta}_3, \hat{\eta}_4, -\hat{\eta}_4)^\top \\ \boldsymbol{\eta}_6 &= (\hat{\eta}_1, \hat{\eta}_2, \hat{\eta}_1, -\hat{\eta}_4, \hat{\eta}_3, -\hat{\eta}_4)^\top & \boldsymbol{\eta}_{12} &= (\hat{\eta}_2, \hat{\eta}_1, \hat{\eta}_1, -\hat{\eta}_3, -\hat{\eta}_4, \hat{\eta}_4)^\top \end{aligned} \quad (5.3)$$

mit den Parametern  $\hat{\eta}_1 = 0.02381$ ,  $\hat{\eta}_2 = -0.02480$ ,  $\hat{\eta}_3 = 0.10646$  und  $\hat{\eta}_4 = 0.07027$  gegeben. Die Steifigkeitstensoren von Austenit ( $i = 0$ ) und Martensit ( $i < 0$ ) sind

$$\mathbb{E}_0 = \begin{pmatrix} 140 & 110 & 110 & 0 & 0 & 0 \\ 110 & 140 & 110 & 0 & 0 & 0 \\ 110 & 110 & 140 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 32 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 32 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 32 \end{pmatrix} \text{ GPa}, \quad \hat{\mathbb{E}}_{i>0} = \begin{pmatrix} 223 & 129 & 99 & 0 & 7 & 0 \\ 129 & 241 & 125 & 0 & -9 & 0 \\ 99 & 125 & 200 & 0 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 76 & 0 & -8 \\ 7 & -9 & 4 & 0 & 21 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -8 & 0 & 77 \end{pmatrix} \text{ GPa}, \quad (5.4)$$

wobei der Tensor des Martensits noch in die einzelnen Orientierungen der verschiedenen Varianten gedreht werden muss. Diese Rotation erfolgt in der verwendeten Mehrabadi-Cowin-Notation unter Anwendung von den in Kapitel 2.1.1 präsentierten Gleichungen (2.24) und (2.25), siehe Mehrabadi u. Cowin (1990). Die Berechnung der Steifigkeitstensoren der einzelnen Martensitvarianten erfolgt somit durch

$$\mathbb{E}_i = \left( \tilde{\mathbf{Q}}_{\text{MC}}(\mathbf{M}_i) \right)^\top \cdot \mathbb{E}_i \cdot \tilde{\mathbf{Q}}_{\text{MC}}(\mathbf{M}_i). \quad (5.5)$$

Die Orientierung der Varianten sind darin durch die Rotationstensoren

$$\begin{aligned}
 \mathbf{M}_1 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} & \mathbf{M}_4 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} & \mathbf{M}_7 &= \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} & \mathbf{M}_{10} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
 \mathbf{M}_2 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} & \mathbf{M}_5 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} & \mathbf{M}_8 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} & \mathbf{M}_{11} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
 \mathbf{M}_3 &= \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} & \mathbf{M}_6 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} & \mathbf{M}_9 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \mathbf{M}_{12} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{5.6}$$

gegeben, siehe Junker (2011).

Der zweite verwendete Materialdatensatz wird für die Berechnungen unter Berücksichtigung der sich entwickelnden Orientierungsverteilungsfunktion verwendet. Statt der zwölf unterschiedlichen Martensitvarianten werden lediglich drei Varianten betrachtet. Für die Festlegung der Transformationsdehnungen der einzelnen Phasen werden gemäß Gleichung (4.126)  $\hat{\eta} = 0.055$  und  $\hat{\nu} = 0.45$  gewählt. Somit folgt für die nahezu volumenerhaltenden Transformationsdehnungen der Martensitvarianten

$$\begin{aligned}
 \boldsymbol{\eta}_1 &= 0.055 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -0.45 & 0 \\ 0 & 0 & -0.45 \end{pmatrix} & \boldsymbol{\eta}_2 &= 0.055 \begin{pmatrix} -0.45 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -0.45 \end{pmatrix} \\
 \boldsymbol{\eta}_3 &= 0.055 \begin{pmatrix} -0.45 & 0 & 0 \\ 0 & -0.45 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.
 \end{aligned} \tag{5.7}$$

Die Transformationsdehnung der Referenzphase Austenit entspricht wiederum dem Nulltensor:  $\boldsymbol{\eta}_0 = \mathbf{0}$ . Des Weiteren werden für Austenit und Martensit unterschiedliche Steifigkeiten verwendet. Die Berechnung der isotropen Steifigkeitsmatrix erfolgt für eine allgemeine Phase  $i$  in Abhängigkeit von dem Elastizitätsmodul  $E_i$  und der Querkontraktion  $\nu_i$  durch

$$\mathbb{E}_i = \frac{E_i}{1 + \nu_i} \begin{pmatrix} \frac{1-\nu_i}{1-2\nu_i} & \frac{\nu_i}{1-2\nu_i} & \frac{\nu_i}{1-2\nu_i} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\nu_i}{1-2\nu_i} & \frac{1-\nu_i}{1-2\nu_i} & \frac{\nu_i}{1-2\nu_i} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\nu_i}{1-2\nu_i} & \frac{\nu_i}{1-2\nu_i} & \frac{1-\nu_i}{1-2\nu_i} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.5 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0.5 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.5 \end{pmatrix}, \tag{5.8}$$

wobei die Voigt-Notation verwendet wird. Die entsprechenden Zahlenwerte für  $E_i$  und  $\nu_i$ , die kalorische Energie  $c_i$  und der Dissipationsparameter  $r_{T1}$  finden sich in Tabelle 5.2.

$E_0$	83.0 [GPa]
$E_{i>0}$	30.0 [GPa]
$\nu_0$	0.35 [-]
$\nu_{i>0}$	0.35 [-]
$c_0$	-0.036 [GPa]
$c_{i>0}$	0.0 [GPa]
$r_{T1}$	0.008 [GPa]

Tabelle 5.2: Materialparameter für Beispielrechnungen.

## 5.1 Simulationen auf Materialpunktebene des Modells für Phasentransformationen mit simultaner Entwicklung plastischer Dehnungen – Modell 1

In den nachfolgenden Unterkapiteln werden verschiedene Ergebnisse für das Materialmodell mit simultaner Bildung plastischer Dehnungen vorgestellt. Zunächst folgen dazu Simulationen für das Modell 1a mit der statischen Orientierungsverteilungsfunktion und unter Berücksichtigung des ersten Materialdatensatzes für die Legierung NiTi, siehe Gleichungen (5.3)-(5.6). Nach der Berechnung eines zyklischen Zugversuchs werden die verwendeten Modellparameter variiert, um deren Einfluss auf das Materialverhalten zu untersuchen. Die dargestellten Ergebnisse stimmen zwar nicht mit den in Waimann u. a. (2016) präsentierten Simulationen überein, jedoch orientieren sich die gewählten Randwertprobleme und deren Analyse an diesen. Nachfolgend wird die Simulation des zyklischen Zugversuchs unter Verwendung des Modellansatzes 1b und somit einer dynamischen Orientierungsverteilungsfunktion wiederholt. Für die letzteren Simulationen wird der reduzierte, zweite Materialdatensatz aus den Gleichungen (5.7) und (5.8) sowie die Materialparameter aus Tabelle 5.2 zu Grunde gelegt.

### 5.1.1 Zyklischer Zugversuch unter Berücksichtigung des Modells 1a

Bei der ersten Berechnung handelt es sich – wie bereits erwähnt – um einen zyklischen Zugversuch. Die in 4000 Lastschritten je Zyklus aufgebrachte Dehnung kann Gleichung (5.1) entnommen werden. Für die Berechnung wurden zwanzig zufällig generierte Kornorientierungen ( $N = 20$ ) gewählt. Diese sind gleichmäßig verteilt und haben folglich den gleichen Volumenanteil  $\xi^j = 1/N$ . Die für die ersten Simulationen gewählten Materialparameter können Tabelle 5.3 entnommen werden. Abbildung 5.1 zeigt das resultierende Spannungs-Dehnungs-Diagramm

$b_I$	700 [-]
$b_{II}$	0.7 [-]
$b_{III}$	0.004 [-]
$Y_0$	3.0 [GPa]

Tabelle 5.3: Gewählte Parameter des Modells für Phasentransformationen mit simultaner Bildung plastischer Dehnungen, Waimann u. a. (2016).

und die zugehörige Entwicklung der internen Variablen, des über die einzelnen Körner gemit-

telten Austenitgehalts  $\lambda_0 = \sum_{j=1}^N \xi^j \lambda_0^j$  und der Komponente der gemittelten plastischen Dehnung nach Gleichung (4.11) in Zugrichtung. Das Spannungs-Dehnungs-Diagramm zeigt den

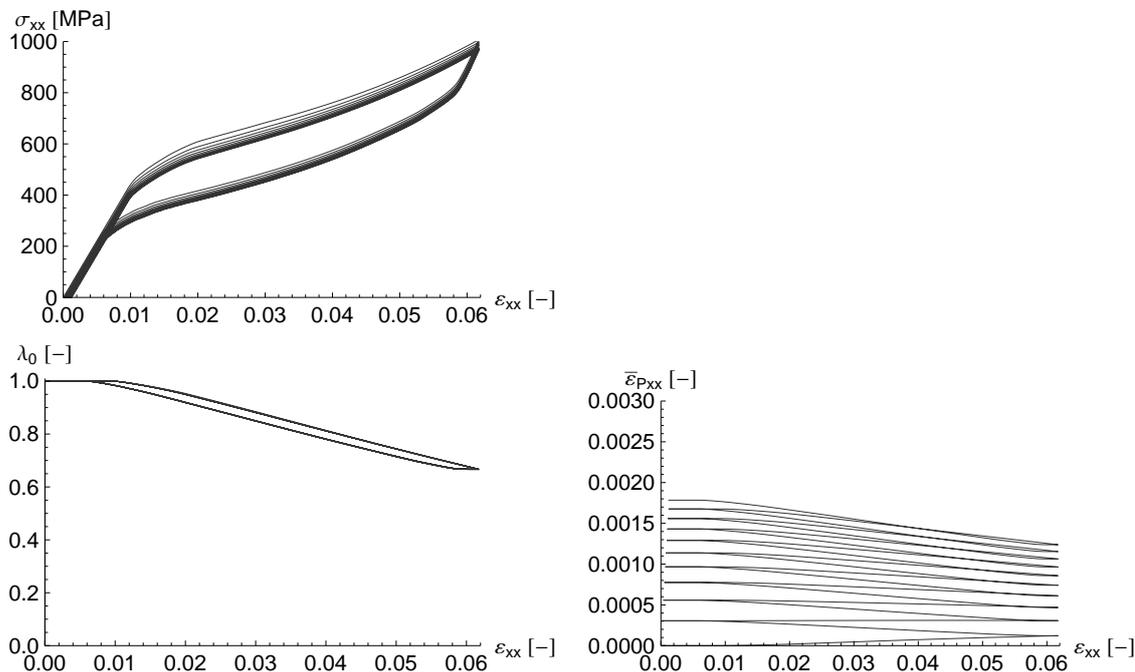


Abbildung 5.1: Zugversuch mit 10 Zyklen und 20 Orientierungen, Modell 1a, *oben links*: Spannungs-Dehnungs-Diagramm, *unten links*: Austenitgehalt, *unten rechts*: plastische Dehnung, vergleiche Waimann u. a. (2016).

erwarteten Effekt der funktionalen Ermüdung: die Formation einer bleibenden Dehnung und das Absinken beider Spannungsplateaus. Durch die in Kapitel 4.1.5 gewählten Ansätze für den Dissipationsparameter  $r^j$  und den Kopplungsparameter  $k^j$  in den Gleichungen (4.38) und (4.40) zeigt sich eine stärkere Absenkung des oberen Plateaus gegenüber dem unteren. Des Weiteren stellt sich ein konvergierendes Verhalten ein, das auch anhand der Entwicklung von  $\bar{\varepsilon}_{Pxx}$  zu erkennen ist. Diese effektive plastische Dehnung nimmt mit jedem Lastzyklus zu, jedoch zeigt sich kein stetiges Wachstum der plastischen Dehnung. Während der Belastung kommt es – beginnend mit dem zweiten Zyklus – zu einer Abnahme der plastischen Dehnung während der Belastung. Zwar kommt es bei der Bildung von Versetzungen, umso mehr bereits vorhanden sind, zu einer gegenseitigen Auslöschung dieser, der Grund für die Abnahme von  $\bar{\varepsilon}_{Pxx}$  liegt allerdings in der Umwandlung der einzelnen Phasen. Durch die Transformation von Austenit in Martensit kommt es zur Reduktion der Volumenfraktion  $\lambda_0$  und damit zu einer veränderten Wichtung bei der Berechnung der effektiven plastischen Dehnung. Die Betrachtung des Austenits zeigt eine für die einzelnen Lastzyklen übereinstimmende Evolution des Austenitgehalts. Die experimentell beobachtete Bildung stabilisierten Martensits, siehe beispielsweise Krooß u. a. (2015), kann von dem ersten Modellansatz nicht abgebildet werden.

Aufgrund der verwendeten Voigt-Energiegrenze auf Materialpunktebene stellt sich des Weiteren ein unterschiedlicher Spannungszustand für die einzelnen Kornorientierungen ein. Die einzelnen Spannungs-Dehnungs-Diagramme werden in Abbildung 5.2 dargestellt. Darin zeigt sich deutlich, dass die einzelnen Körner bei unterschiedlichen aufgebrachtten Dehnungen beginnen zu transformieren. Die verschiedenen positiven und negativen Steigungen der Kurven während der Transformation resultieren dabei aus der Betrachtung im globalen Koordinatensy-

stem.

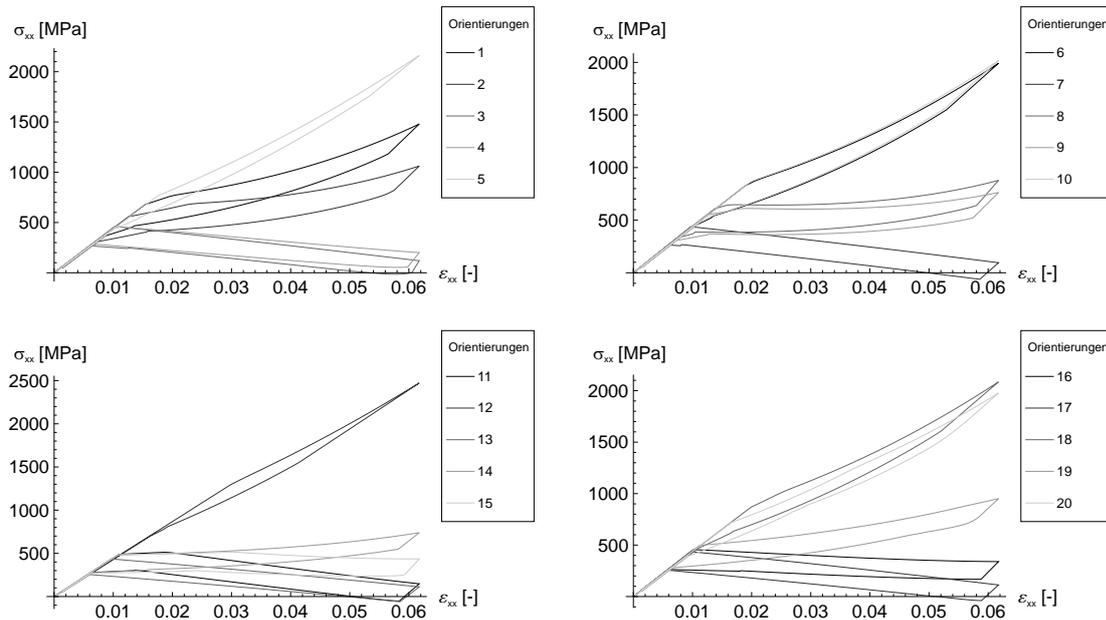


Abbildung 5.2: Zugversuch mit 10 Zyklen und 20 Orientierungen, Modell 1a, Spannungs-Dehnungs-Diagramme der 20 Kornorientierungen, vergleiche Waimann u. a. (2016).

Nachfolgend soll nun eine Vortextur nach Hackl u. Heinen (2008a) berücksichtigt werden, siehe Kapitel 4.1.6. Der Faktor  $q$  aus Gleichung (4.42), der angibt, wie stark die Textur ausgeprägt ist, wird im vorliegenden Fall mit  $q = 5$  gewählt. Im Vergleich zur gleichmäßigen Verteilung der einzelnen Kornorientierungen im ersten Berechnungsbeispiel ergibt sich die in Abbildung 5.3 (*links*) präsentierte Orientierungsverteilung. Die einzelnen Körner zeigen nach wie vor die in Abbildung 5.2 dargestellten Spannungsverläufe. Der Grund dafür ist, dass bei

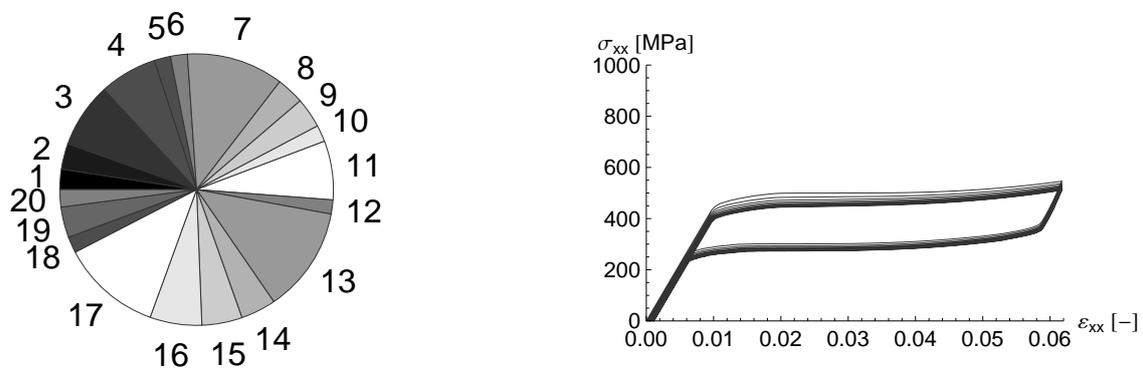


Abbildung 5.3: Zugversuch mit 10 Zyklen, 20 Orientierungen und Vortextur ( $q = 5$ ), Modell 1a, *links*: Orientierungsverteilung, *rechts*: Spannungs-Dehnungs-Diagramm, vergleiche Waimann u. a. (2016).

Betrachtung der Fließfunktion (4.36) für jedes einzelne Korn die Volumenfraktion  $\xi^j$  aus dieser

herausgekürzt werden kann. Die durch die Orientierungsverteilungsfunktion nun unterschiedliche Wichtung der einzelnen Körner resultiert in dem in Abbildung 5.3 (*rechts*) dargestellten Spannungs-Dehnungs-Diagramm. Dieses zeigt – verglichen mit der Berechnung ohne Vortextur – eine nahezu gleichbleibende Spannung während der Phasentransformation und stimmt somit mit den experimentell begründeten Erwartungen überein.

Um abschließend weiter zu untersuchen, wie stark die Phasentransformation in den einzelnen Kornorientierungen ausgeprägt ist, werden Ergebnisse einer Simulation mit 1000 verschiedenen Orientierungen präsentiert. Der in Abbildung 5.4 (*links*) dargestellte Verlauf für das Spannungs-

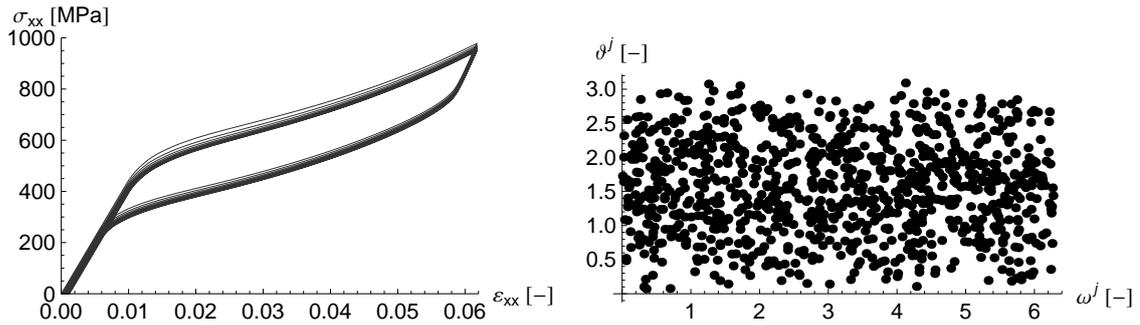


Abbildung 5.4: Zugversuch mit 10 Zyklen und 1000 Orientierungen, Modell 1a, *links*: Spannungs-Dehnungs-Diagramm, *rechts*: Orientierungsverteilung.

Dehnungs-Diagramm stimmt qualitativ mit den Berechnungen für 20 Orientierungen in Abbildung 5.1 überein. In Abbildung 5.4 (*rechts*) werden zwei der drei zufällig generierten Winkel

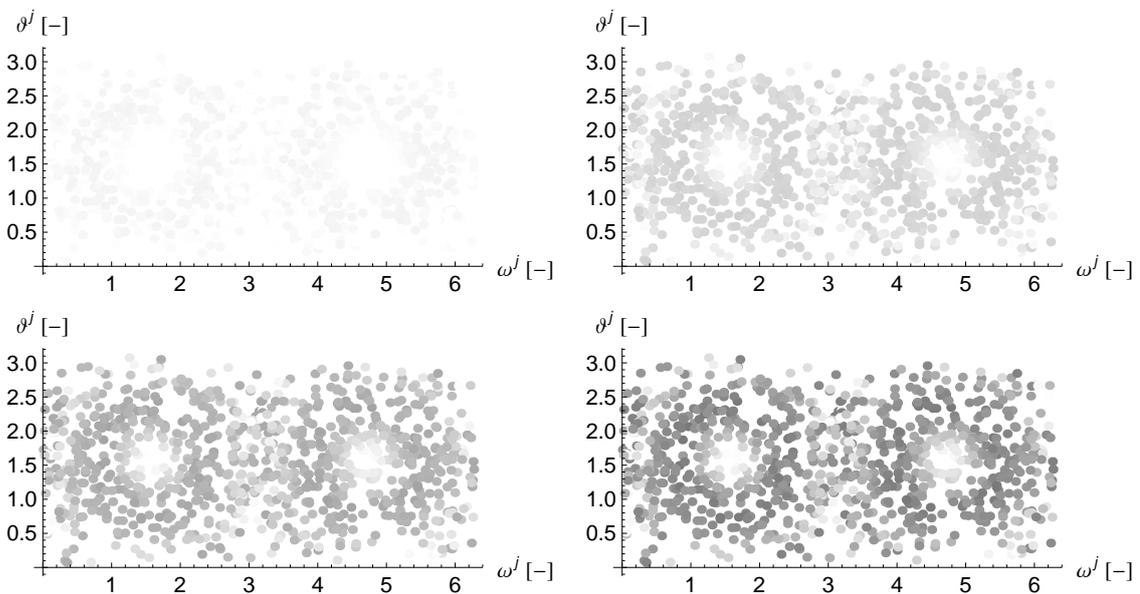


Abbildung 5.5: Zugversuch mit 10 Zyklen und 1000 Orientierungen, Modell 1a, Phasentransformation der einzelnen Körner während der Belastung im ersten Zyklus (*schwarz*:  $\lambda_0 = 0$ , *weiß*:  $\lambda_0 = 1$ ), *oben links*:  $l = 500$ , *oben rechts*:  $l = 1000$ , *unten links*:  $l = 1500$ , *unten rechts*:  $l = 2000$ .

$\vartheta^j$  und  $\omega^j$  der einzelnen Körner dargestellt. Abbildung 5.5 zeigt die Entwicklung des Martensits

während der Belastungsphase des ersten Zyklus. Die in 2000 Schritten aufgebrachte Verschiebung wird dazu jeweils nach 500 Schritten dargestellt. Die Farbe Weiß kennzeichnet darin einen rein austenitischen Zustand ( $\lambda_0 = 1$ ), die Farbe Schwarz einen martensitischen ( $\lambda_0 = 0$ ). Es zeigt sich die bereits in Fechte-Heinen (2007) ringförmige Orientierungsverteilung der Körner, die die stärkste Transformation von Austenit zu Martensit erfahren. Die aus Abbildung 5.2 gewonnene Erkenntnis, dass die Transformation in den einzelnen Körnern bei unterschiedlichen Belastungen beginnt, wird vor allem durch die Lastschritte  $l = 500$  und  $l = 1000$  unterstrichen. Des Weiteren wird deutlich, dass einzelne Körnern gar keine bzw. nur eine geringe Phasenumwandlung zeigen.

Das präsentierte Materialmodell zeigt somit insgesamt die Fähigkeit, den Effekt der funktionalen Ermüdung mit Hilfe einer simultanen plastischen Deformation vorherzusagen. Die Modellierung ist jedoch aufgrund der gewählten Ansätze für den Kopplungsparameter  $k^j$  aus Gleichung (4.40) und den Dissipationsparameter  $r^j$  aus Gleichung (4.38) abhängig von zusätzlichen Modellparametern. Um den Einfluss der bis dato nicht experimentell bestimmten Parameter zu untersuchen, wird im nachfolgenden Kapitel eine Parameterstudie präsentiert.

### 5.1.2 Parameterstudie für Modell 1a anhand des zyklischen Zugversuches

In diesem Unterkapitel werden nun Parameterstudien für jene Modellparameter vorgestellt, die einen Einfluss auf den Effekt der funktionalen Ermüdung haben. Diese Parameter sind die plastische Fließgrenze  $Y_0$  sowie die Faktoren  $b_I$ ,  $b_{II}$  und  $b_{III}$ , siehe Kapitel 4.1.5. Die Parameterstudie und die daraus gewonnenen Erkenntnisse über die verwendeten Modellparameter wurden bereits in Waimann u. a. (2016) präsentiert und werden an dieser Stelle nur anhand der leicht veränderten Simulationen wiederholt. Wie bereits in Waimann u. a. (2016) werden in den Abbildungen den ursprünglichen Berechnungen (*Mitte*) Berechnungen mit einem höheren und einem niedrigerem Wert für den jeweiligen variierten Parameter gegenübergestellt.

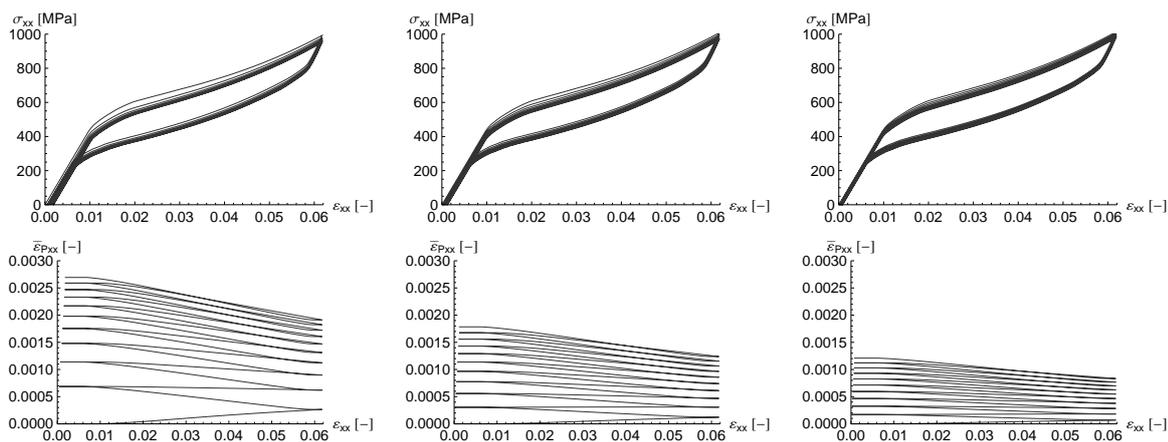


Abbildung 5.6: Zugversuch mit 10 Zyklen und 20 Orientierungen, Modell 1a, Variation der plastischen Fließgrenze, *links*:  $Y_0 = 2.0$  [GPa], *Mitte*:  $Y_0 = 3.0$  [GPa], *rechts*:  $Y_0 = 4.0$  [GPa], vergleiche Waimann u. a. (2016).

Die plastische Fließgrenze  $Y_0$  beeinflusst den Kopplungsparameter  $k^j$ , siehe Gleichung (4.13). Abbildung 5.6 zeigt das resultierende Materialverhalten für  $Y_0 = \{0.0004, 0.004, 0.04\}$  GPa. Daraus wird ersichtlich, dass je geringer die plastische Fließgrenze ist, desto mehr plastische

Dehnungen gebildet werden. Durch den geringeren Wert für  $Y_0$  resultiert gemäß Gleichung (4.13) ein kleinerer Wert für  $k^j$  und damit eine stärkere Evolution der plastischen Dehnung, siehe Gleichung (4.32). Des Weiteren kommt es für einen kleineren Wert für  $Y_0$  zu einem größeren Plateauabfall zwischen den ersten Zyklen, während ein relativ großer Wert für die plastische Fließgrenze in einer eher gleichförmigen Abnahme der Transformationsspannungen resultiert.

Der Faktor  $f_{III}$  stellt die Konvergenz der Menge an bleibenden Dehnungen sicher und sorgt somit für eine Erhöhung des Kopplungsparameters  $k^j$  bei wachsenden plastischen Dehnungen, siehe Gleichung (4.40). Gleichung (4.41) zeigt den Einfluss des Faktors  $b_{III}$  auf  $f_{III}$ . Die Simulationsergebnisse für  $b_{III} = \{0.0004, 0.004, 0.04\}$  [-] werden in Abbildung 5.7 präsentiert. Aus den dargestellten Spannungs-Dehnungs-Diagrammen und der abgebildeten Evolution der plastischen Dehnung wird ersichtlich, dass  $\epsilon_P$  je geringer der Faktor  $b_{III}$  ist, desto schneller konvergiert. Durch die frühere Konvergenz wird insgesamt eine geringere Menge an plastischer Dehnung gebildet und die Plateaus senken sich ebenfalls deutlich schwächer ab.

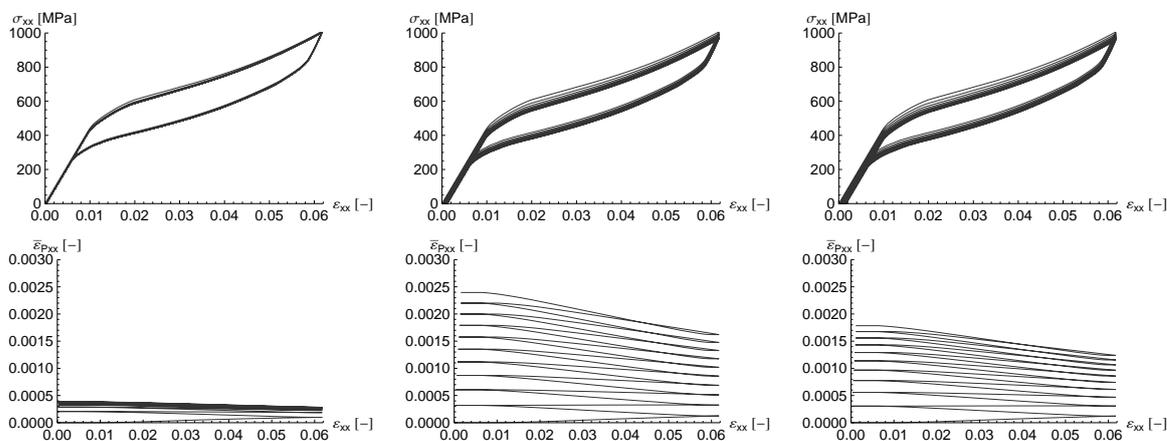


Abbildung 5.7: Zugversuch mit 10 Zyklen und 20 Orientierungen, Modell 1a, Variation des Faktors  $b_{III}$ , links:  $b_{III} = 0.0004$  [-], Mitte:  $b_{III} = 0.004$  [-], rechts:  $b_{III} = 0.04$  [-], vergleiche Waimann u. a. (2016).

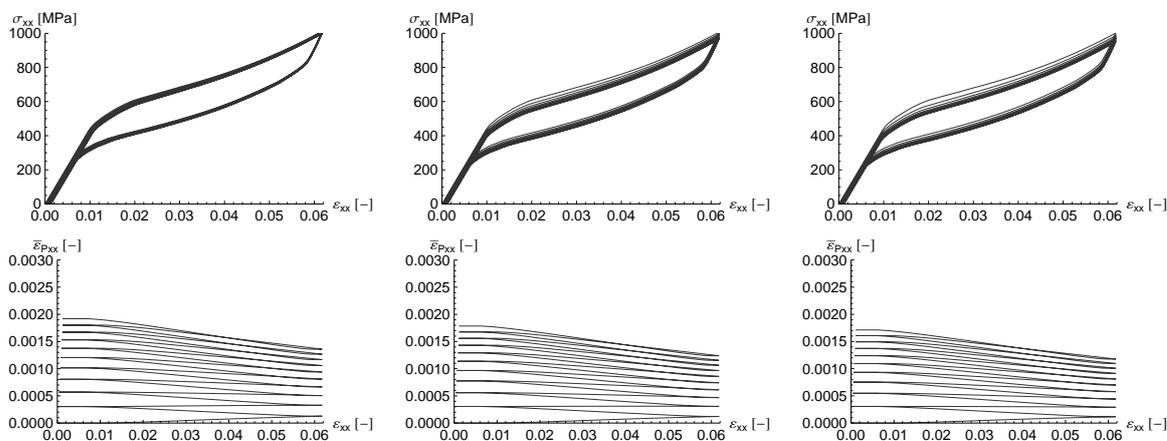


Abbildung 5.8: Zugversuch mit 10 Zyklen und 20 Orientierungen, Modell 1a, Variation des Faktors  $b_I$ , links:  $b_I = 200$  [-], Mitte:  $b_I = 700$  [-], rechts:  $b_I = 1200$  [-], vergleiche Waimann u. a. (2016).

Die abschließend variierten Parameter sind die Faktoren  $b_I$  und  $b_{II}$ , die über die Gleichungen (4.38), (4.39) und (4.41) einen Einfluss auf den Dissipationsparameter  $r^j$  ausüben. Der Faktor  $b_I$  wirkt sich auf die Berechnung des Faktors  $f_I$  in Gleichung (4.39) aus, der wiederum berücksichtigt, dass durch eine wachsende Menge an Versetzungen bzw. größere plastische Dehnungen der Dissipationsparameter  $r^j$  für die Transformation von Austenit zu Martensit abnimmt und diese folglich erleichtert wird, siehe Gleichung (4.38) und Abbildung 4.3. In Abbildung 5.8 wird die Spannungsentwicklung und die Evolution der plastischen Dehnung für  $b_I = 1200$  [-], den Referenzwert  $b_I = 700$  [-] und  $b_I = 200$  [-] dargestellt. Während die plastische Dehnung nur eine leichte Abnahme zeigt, resultiert ein höherer Wert des Faktors  $b_I$  demnach in einer größeren Absenkung der Spannungsplateaus zwischen den einzelnen Lastzyklen. Die geringeren Auswirkungen auf  $\varepsilon_P$  sind durch die Abnahme der Spannung zu erklären, die über die Triebkraft in Gleichung (4.18) einen wesentlichen Einfluss auf die Evolution der plastischen Dehnung hat.

Analog zum Faktor  $b_I$  beeinflusst der Parameter  $b_{II}$  die Berechnung des Faktors  $f_{II}$  in Gleichung (4.39). Letzterer berücksichtigt durch eine Erhöhung des Dissipationsparameters  $r^j$  die Erschwerung der Rücktransformation aufgrund der gebildeten plastischen Dehnungen, siehe Gleichungen (4.38) bzw. Abbildung 4.3. Abbildung 5.9 zeigt den Einfluss unterschiedlicher Werte von  $b_{II}$  auf die Entwicklung der Spannung und der plastischen Dehnung. Explizit wurden Simulationen für  $b_{II} = 1.0$  [-],  $b_{II} = 0.7$  [-] und  $b_{II} = 0.4$  [-] durchgeführt. Es zeigt sich wie bereits bei der Variation des Faktors  $b_I$  kein wesentlicher Einfluss auf die Evolution von  $\varepsilon_P$ . Das untere Spannungsplateau senkt sich jedoch, je höher der Faktor ist, stärker ab.

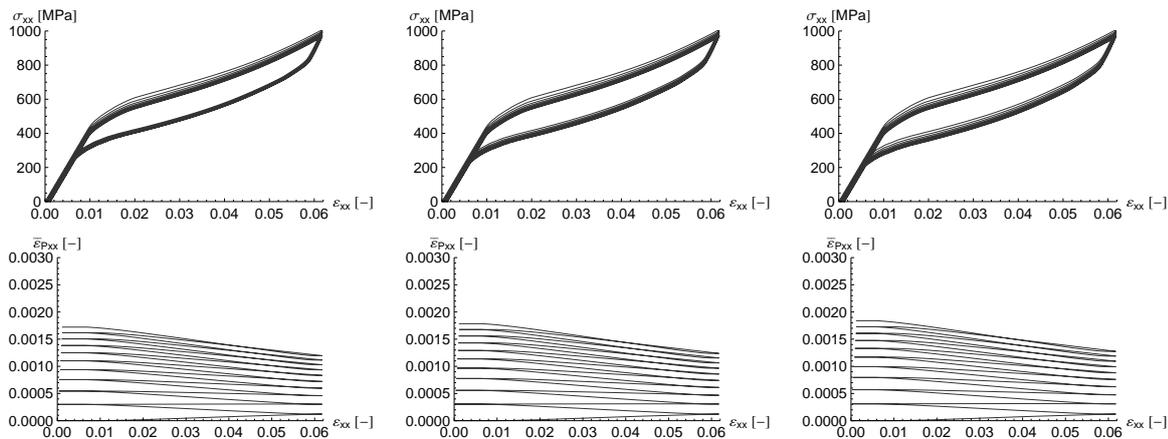


Abbildung 5.9: Zugversuch mit 10 Zyklen und 20 Orientierungen, Modell 1a, Variation des Faktors  $b_{II}$ , links:  $b_{II} = 0.4$  [-], Mitte:  $b_{II} = 0.7$  [-], rechts:  $b_{II} = 1.0$  [-], vergleiche Waimann u. a. (2016).

Der Einfluss der Modellparameter, die zur Abbildung des Effekts der funktionalen Ermüdung eingeführt wurden, konnte abschließend gezeigt werden, vergleiche Waimann u. a. (2016). Weitere Berechnungen auf Finite-Elemente-Ebene können Kapitel 7.1 entnommen werden.

### 5.1.3 Zyklischer Zugversuch unter Berücksichtigung des Modells 1b

Der in Kapitel 5.1.1 präsentierte Zugversuch wird nun unter Verwendung der sich dynamisch entwickelnden Orientierungsverteilungsfunktion aus Modellansatz 1b wiederholt. Als Startwert für die Eulerwinkel wird zunächst die zufällig generierte Kombination  $\alpha_1$  gewählt. Neben dem

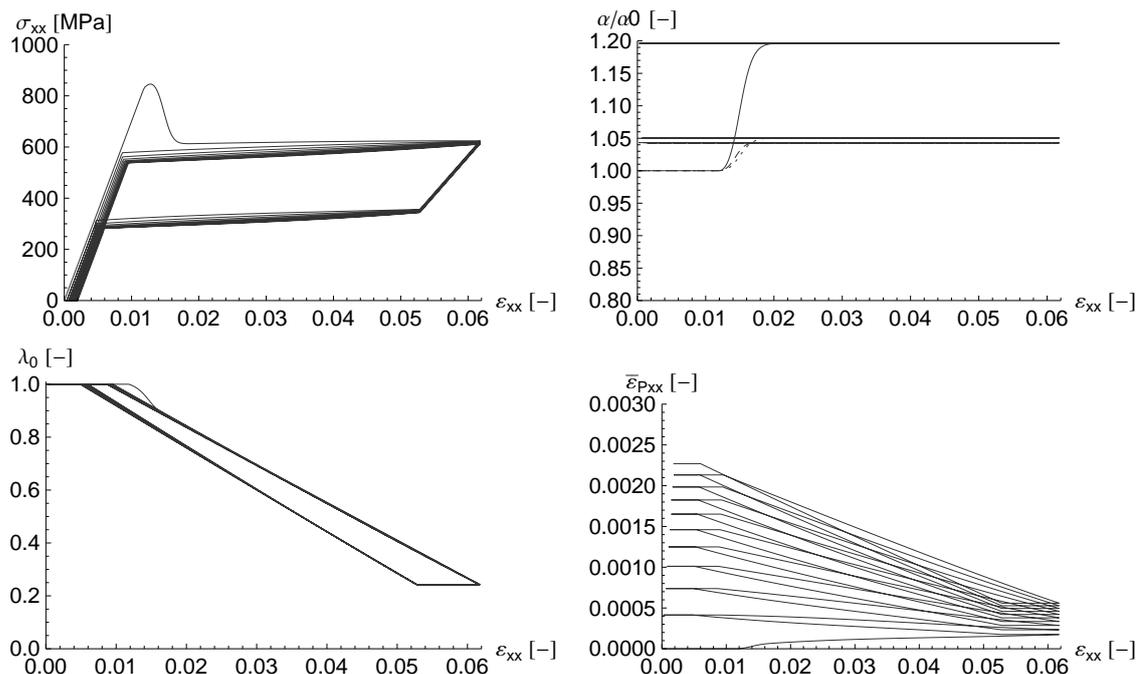


Abbildung 5.10: Zugversuch mit 10 Zyklen und anfänglichen Eulerwinkeln  $\alpha_1$ , Modell 1b, *oben links*: Spannungs-Dehnungs-Diagramm, *oben rechts*: relative Eulerwinkeländerung, *unten links*: Austenitgehalt, *unten rechts*: plastische Dehnung.

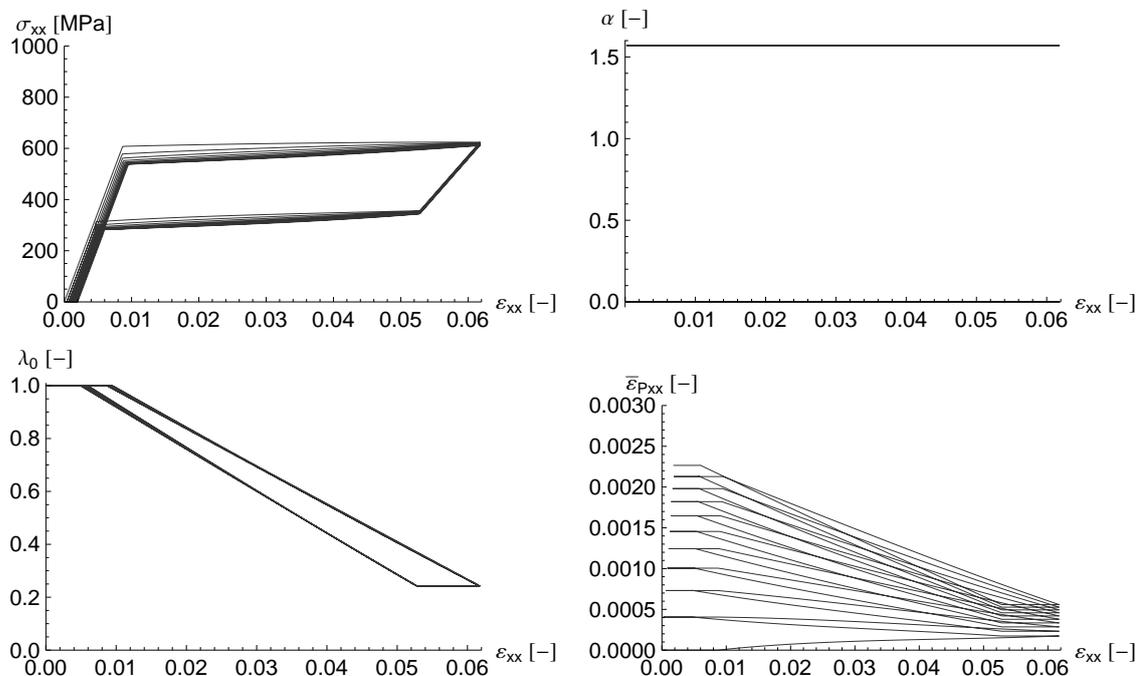


Abbildung 5.11: Zugversuch mit 10 Zyklen und anfänglichen Eulerwinkeln  $\alpha_0$ , Modell 1b, *oben links*: Spannungs-Dehnungs-Diagramm, *oben rechts*: relative Eulerwinkeländerung, *unten links*: Austenitgehalt, *unten rechts*: plastische Dehnung.

nun genutzten zweiten Materialdatensatz, siehe Gleichungen (5.7) und (5.8) sowie Tabelle 5.2, wird auf die gleichen Parameter wie für das Modell 1a zurückgegriffen, siehe Tabelle 5.3. Abbildung 5.10 zeigt das Spannungs-Dehnungs-Diagramm sowie die relative Entwicklung der Eulerwinkel, die Evolution der austenitischen Volumenfraktion  $\lambda_0$  und der plastischen Dehnung in Zugrichtung  $\varepsilon_{P,xx}$ . Ebenso wie das Modell 1a mit der statischen Orientierungsverteilungsfunktion ist auch der Modellansatz 1b in der Lage, den Effekt der funktionalen Ermüdung qualitativ abzubilden. Es zeigt sich sowohl die experimentell beobachtete, unterschiedlich stark ausgeprägte Absenkung des oberen und unteren Spannungsplateaus als auch eine bleibende Dehnung nach jedem Belastungszyklus. Es ergeben sich im Vergleich zu den Ergebnissen in Abbildung 5.1 jedoch auch einige signifikante Unterschiede. Zum einen kommt es zu einem deutlich konstanteren Verlauf der Spannung während der Transformation, zum anderen kommt es zu einer schnelleren bzw. dadurch auch stärkeren Entwicklung der Mikrostruktur. Während der Austenit in Modell 1a nur bis zu einem Gehalt von etwa 70 % umgewandelt wird, führt die Berücksichtigung des Modellansatzes aus Junker (2014b) bei gleicher Belastung zu einer Umwandlung von bis zu ca. 25 %. Diese Entwicklung spiegelt sich ebenso in der Formation der plastischen Dehnungen wieder. Während die nach den einzelnen Zyklen vorhandene plastische Dehnung insgesamt wächst, wird auch der Effekt der Abnahme während der Transformation von Austenit zu Martensit verstärkt.

Der charismatischste Unterschied ist jedoch die anhand des Spannungs-Dehnungs-Diagramms ersichtliche Spannungsspitze im ersten Lastzyklus. Die Ursache dieser Spannungserhöhung liegt an der Wahl der Startwerte für die Eulerwinkel. Diese Winkel ändern sich lediglich während des ersten Belastungszyklus und bleiben anschließend konstant. Eine günstigere Wahl hier in Form von  $\alpha_0 = \{0, \Pi/2, 0\}$  führt wie an den Ergebnissen in Abbildung 5.11 deutlich zu einem direkten Übergang des elastischen Materialverhaltens zum Spannungsplateau ohne Bildung einer Spannungsspitze. Die Eulerwinkel entwickeln sich nicht und behalten die zur Initialisierung gewählten Werte. Das weitere Materialverhalten und somit die Entwicklung der plastischen Dehnung und des Austenits bleiben jedoch weitestgehend unverändert. Der Einfluss der Eulerwinkel wird anhand von Modellansatz 2 in den nachfolgenden Kapiteln noch detaillierter untersucht.

## 5.2 Simulationen auf Materialpunkzebene des Modells für Phasentransformationen mit simultaner Stabilisierung des Martensits

In diesem Kapitel werden Ergebnisse für Berechnungen auf Materialpunkzebene für Modell 2 vorgestellt. Die Simulationen erfolgen dabei sowohl für Modell 2a mit ratenunabhängigen Evolutionsgleichungen für die Volumenanteile als auch für die Verwendung des ratenabhängigen Ansatzes. Für Modell 2a werden unter Verwendung des in Kapitel 4.2.5 dargestellten Ausgangsmaterialmodells und der in Kapitel 4.2.7 bestimmten und in Tabelle 4.1 gesammelten Modellparameter zwei Belastungsfälle behandelt. Dies ist zum einen ein zyklischer Zugversuch, der diesmal auch mit den experimentellen Daten aus Wagner (2005) verglichen wird, und zum anderen ein zyklischer Scherversuch, der zeigt, dass der Modellansatz auch für andere Lastfälle verwendet werden kann. Diese umfassendere Einsetzbarkeit wird später durch die in Kapitel 7 gezeigten Finite-Elemente-Berechnungen weiter verdeutlicht. Um außerdem anhand des Zugversuches den Einfluss der Temperatur auf die Materialmodelle zu untersuchen, wird der kalorische Anteil der Energie  $c$  im nachfolgenden Unterkapitel variiert. Das Kapitel endet mit der Berechnung des zyklischen Zugversuchs auf Basis des ratenabhängigen Materialmodells aus

Kapitel 4.2.6. Anhand dieser Simulationen werden die Unterschiede der verschiedenen Evolutionsarten deutlich. Alle nachfolgenden Berechnungen des zweiten Materialmodells basieren auf dem zweiten Materialdatensatz – bestehend aus Gleichungen (5.7) und (5.8) und Tabelle 5.2.

### 5.2.1 Zyklischer Zugversuch unter Berücksichtigung des Modells 2a

Als erstes Berechnungsbeispiel für das in Kapitel 4.2.5 vorgestellte Materialmodell erfolgt der zyklische Zugversuch. Für die Berechnung wird Algorithmus 2 verwendet. Zur Initialisierung wird zunächst ein rein austenitisches Material gewählt. Die Belastung wird unter Verwendung des Dehnungstensors  $\varepsilon$  aus Gleichung (5.1) in 200 Lastschritten aufgebracht und unter Berücksichtigung der gleichen Schrittweite im Anschluss bis zu einer Spannung  $\sigma = 0$  wieder entlastet. Ausgehend von zufällig generierten Startwerten für die Eulerwinkel und somit  $\alpha_1 = \{2.6260, 1.8406, 5.9814\}$ , ergeben sich mit dem viskosen zeitdiskretisierten Parameter  $\Delta t_R = 10.0 \text{ 1/GPa}$  die in den Abbildung 5.12 dargestellten Ergebnisse für zwanzig Lastzyklen.

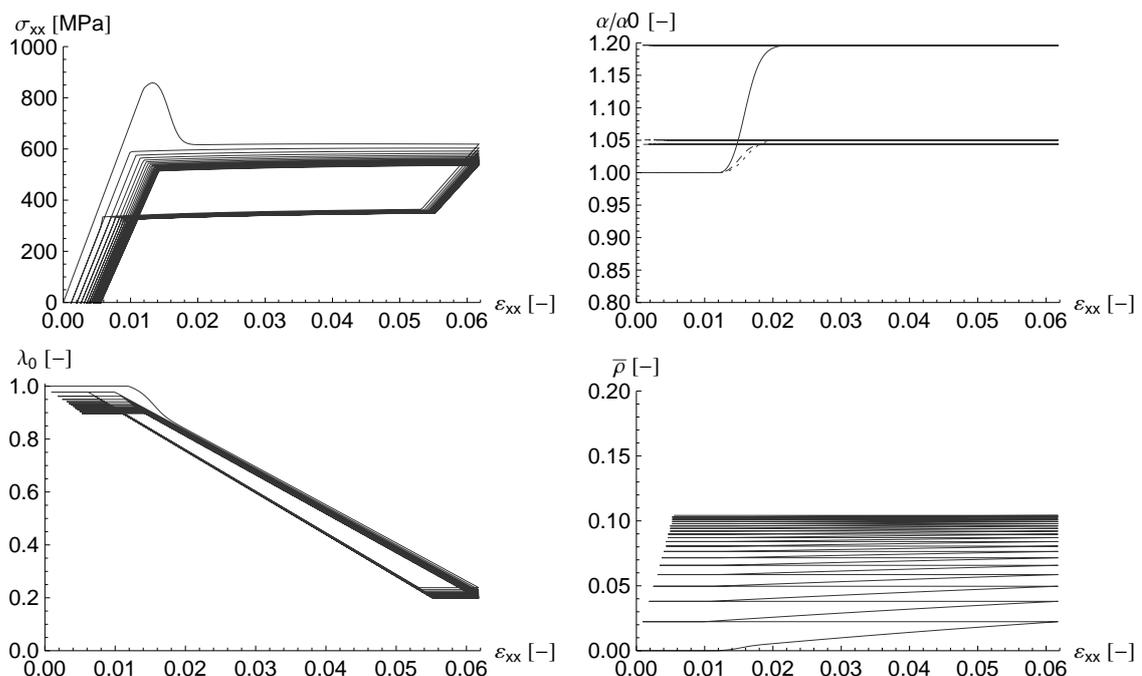


Abbildung 5.12: Zugversuch mit 20 Zyklen und anfänglichen Eulerwinkeln  $\alpha_1$ , Modell 2a, *oben links*: Spannungs-Dehnungs-Diagramm, *oben rechts*: relative Eulerwinkeländerung, *unten links*: Austenitgehalt, *unten rechts*: totaler irreversibler Volumenanteil.

Das Spannungs-Dehnungs-Diagramm 5.12 (*oben links*) zeigt das erwartete Materialverhalten: Vor allem das obere Spannungsplateau nimmt während des Zyklierens ab und es bildet sich eine kumulierende bleibende Dehnung nach jedem einzelnen Belastungszyklus. Die Spannungsspitze während des ersten Zyklus steht in Relation zu den ursprünglich gewählten Eulerwinkeln. Diese entwickeln sich nur innerhalb des ersten Zyklus und nehmen den bezüglich der Belastung energetisch günstigsten Wert an, siehe Abbildung 5.12 (*oben rechts*). Der Austenitgehalt  $\lambda_0$  5.12 (*unten links*) wird annähernd linear umgewandelt, jedoch kehrt das Material

nie wieder in seinen rein austenitischen Anfangszustand zurück. Dies wiederum hängt zusammen mit dem gebildeten irreversiblen Martensit, dessen Absolutwert  $\bar{\rho} = \sum_i \rho_i$  in Abbildung 5.12 (*unten rechts*) dargestellt wird. Der totale irreversible Martensit konvergiert genau wie die Spannung und der austenitische Volumenanteil gegen ein stabiles Materialverhalten.

Um den Einfluss der gewählten Eulerwinkel weiter herauszustellen, zeigt Abbildung 5.13 das Spannungs-Dehnungs-Diagramm sowie die Entwicklung für den ersten Zyklus unter Verwendung drei verschiedener wiederum zufälliger Werte für  $\alpha$ . Die Berechnungen wurden für die bereits bekannte Winkelkombination  $\alpha_1 = \{2.6260, 1.8406, 5.9814\}$  sowie

$$\alpha_2 = \{5.9725, 1.2051, 3.4680\}, \quad \alpha_3 = \{3.8594, 2.0726, 1.2739\} \quad (5.9)$$

durchgeführt.

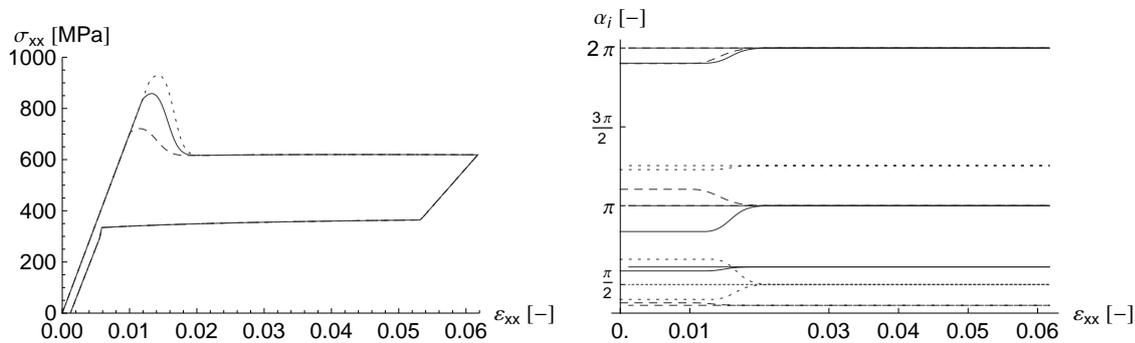


Abbildung 5.13: Zugversuch mit drei unterschiedlichen anfänglichen Eulerwinkeln  $\alpha_1$  (schwarz),  $\alpha_2$  (strichliert),  $\alpha_3$  (gepunktet), Modell 2a, links: Spannungs-Dehnungs-Diagramm, rechts: absolute Eulerwinkeländerung.

Die Spannungs-Dehnungs-Diagramme 5.13 (*links*) zeigen den Einfluss von  $\alpha$ . Für verschiedene Ausgangswerte der Eulerwinkel ergibt sich eine unterschiedlich große Spannungsspitze zu Beginn der Umwandlung von Austenit in Martensit. Nachdem die Winkelkorrektur stattgefunden hat, vergleiche hierzu 5.13 (*rechts*), sind die Spannungs-Dehnungs-Kurven identisch. Bei genauer Betrachtung der Entwicklung der Eulerwinkel ergeben sich jeweils die konvergierten Werte

$$\alpha_1^{\text{konv}} = \{\Pi, 1.9208, 2\Pi\}, \quad \alpha_2^{\text{konv}} = \{2\Pi, 1.1553, \Pi\}, \quad \alpha_3^{\text{konv}} = \{3.9401, \Pi/2, \Pi/2\}. \quad (5.10)$$

Dabei ist auffallend, dass die Werte von  $\alpha_1^{\text{konv}}$  und  $\alpha_2^{\text{konv}}$  für den ersten und dritten Winkel  $-\varphi$  und  $\omega$  – identisch sind. Für die drei konvergierten Winkelkombinationen resultieren die deutlich unterschiedlichen Rotationstensoren:

$$\mathbf{Q}_1^{\text{konv}} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0.343 & 0.939 \\ 0 & 0.939 & -0.343 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{Q}_2^{\text{konv}} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -0.404 & -0.915 \\ 0 & -0.915 & 0.404 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{Q}_3^{\text{konv}} = \begin{pmatrix} 0 & 0.698 & -0.716 \\ 0 & 0.716 & 0.698 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.11)$$

Für die ersten beiden gewählten Konfigurationen ergibt sich bei der Phasenumwandlung eine Bildung der ersten Martensitvariante. Für die sich deutlich von den anderen beiden Beispielen abhebende Berechnung mit Startwert  $\alpha_3$  konvergieren die Winkel gegen komplett unterschiedliche Werte und es kommt des Weiteren zu einer Bildung der dritten Martensitvariante. Die Initialisierung der Eulerwinkel beeinflusst folglich nicht nur die Eulerwinkel selbst und das Spannungsverhalten, sondern auch, welche Martensitvariante die energetisch günstigste ist. Betrachtet man die mit Hilfe der Rotationstensoren rotierten Transformationsdehnungen  $\eta_i$  der jeweils gebildeten Martensitvariante, wird der Grund für die Bildung unterschiedlicher Varianten deutlich:

$$\eta_{\text{rot}} = (\mathbf{Q}^{\text{konv}})^{\text{T}} \cdot \eta_i \cdot \mathbf{Q}^{\text{konv}}$$

$$\eta_{\text{rot1}} = \eta_{\text{rot2}} = \eta_{\text{rot3}} = \begin{pmatrix} 0.055 & 0 & 0 \\ 0 & -0.02475 & 0 \\ 0 & 0 & -0.02475 \end{pmatrix}. \quad (5.12)$$

Es zeigt sich somit, dass die jeweils rotierten Transformationsdehnungen für die unterschiedlichen Winkelkombinationen identisch sind und zudem für diesen Belastungsfall der unrotierten Transformationsdehnung entsprechen. Der Martensit bildet sich somit zwar in unterschiedlich orientierten Körnern, aber unter Einbezug der jeweiligen Varianten in gleicher Richtung.

Diese Erkenntnis dient als Motivation für den Fall der zyklischen Zugbelastung direkt  $\alpha_0 = \{0, \Pi/2, 0\}$  als Startwert für die Eulerwinkel anzunehmen. Für den zweiten Winkel  $\vartheta$  wird aus numerischen Gründen ein Wert ungleich null angenommen. Abbildung 5.14 zeigt das Spannungs-Dehnungs-Diagramm (*oben links*), die Evolution der Eulerwinkel (*oben rechts*), des Austenitgehalts (*unten links*) und schließlich des totalen irreversiblen Volumenanteils (*unten rechts*).

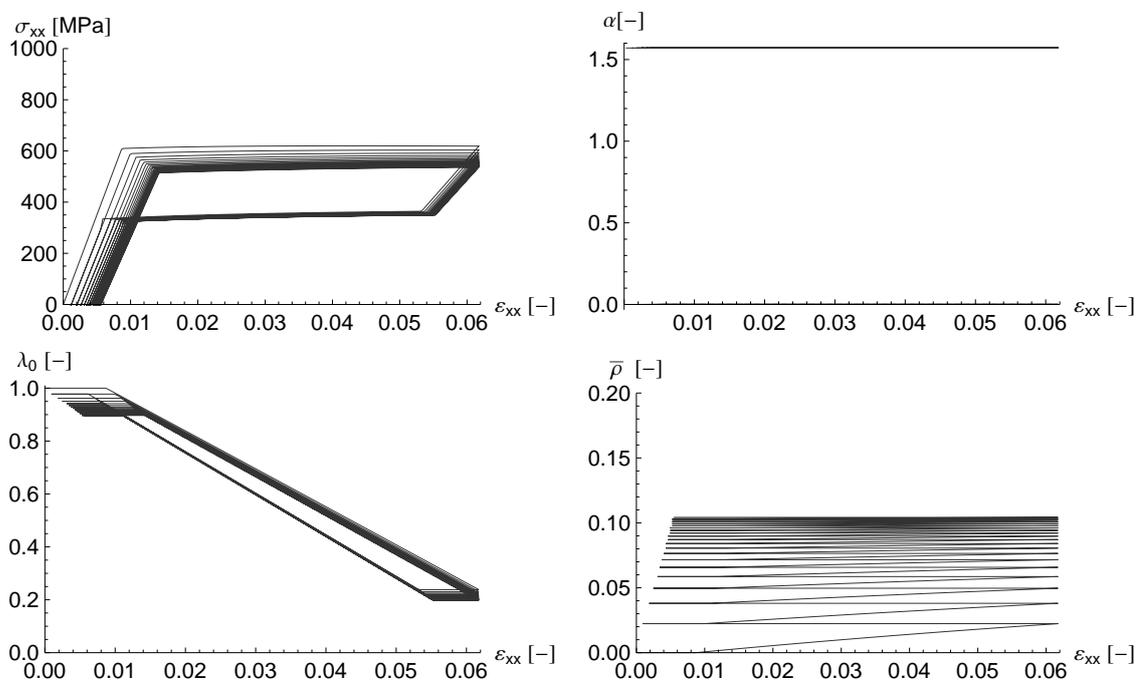


Abbildung 5.14: Zugversuch mit 20 Zyklen und anfänglichen Eulerwinkeln  $\alpha_0$ , Modell 2a, *oben links*: Spannungs-Dehnungs-Diagramm, *oben rechts*: absolute Eulerwinkeländerung, *unten links*: Austenitgehalt, *unten rechts*: totaler irreversibler Volumenanteil.

Anders als bei den vorherigen Ergebnissen wechselt das Materialverhalten nun direkt vom linear-elastischen Bereich zum oberen Spannungsplateau ohne Bildung einer Spannungsspitze, da aufgrund der energetisch günstigen Ausgangskonfiguration für  $\alpha$  keine Korrektur der Winkel nötig ist. Die Evolution des Austenits und die Bildung des irreversiblen Martensits bleiben jedoch weitestgehend identisch.

Abbildung 5.15 zeigt den Vergleich des Spannungs-Dehnungs-Diagramms aus Abbildung 5.14 mit den experimentellen Ergebnissen aus Wagner (2005). Zwar kann die nach jedem Belastungszyklus bleibende Dehnung von dem Materialmodell gut abgedeckt werden, jedoch erfolgt vor allem die Absenkung des oberen Spannungsplateaus deutlich schwächer als im Experiment. Unter Berücksichtigung der Tatsache, dass für die Berechnung am Materialpunkt jedoch ein Dehnungstensor angenommen wurde, und der Simulation somit nicht der gleiche Belastungszustand wie im Experiment vorliegt, kann angemerkt werden, dass die Ergebnisse zumindest eine gute qualitative Übereinstimmung mit den experimentellen Daten zeigen. Eine genauere quantitative Validierung des Modellansatzes wird auf Ebene der Finite-Elemente-Berechnungen erfolgen, wenn den Berechnungen ein Randwertproblem zugrunde gelegt wird, das den Experimentaufbau zumindest näherungsweise abbilden kann.

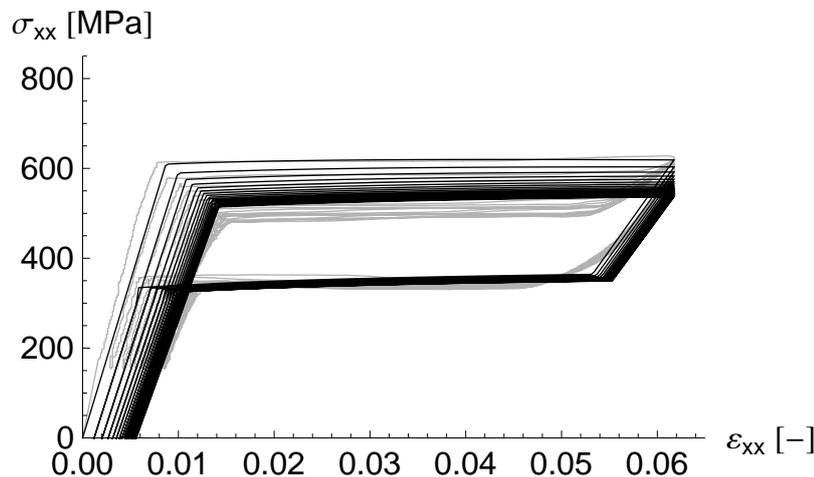


Abbildung 5.15: Vergleich des Spannungs-Dehnungs-Diagramms des Modells 2a auf Materialpunktebene mit experimentellen Daten (grau) des Zugversuchs nach Wagner (2005).

### 5.2.2 Zyklischer Scherversuch unter Berücksichtigung des Modells 2a

Um aber dennoch zu zeigen, dass das Materialmodell mit den in Kapitel 4.2.7 bestimmten Modellparametern auch für andere Lastfälle anwendbar ist, erfolgt als zweites Berechnungsbeispiel ein zyklischer Scherversuch mit vorgegebenem Dehnungstensor nach Gleichung (5.2). Der viskose Parameter wurde mit  $\Delta t_R = 5.0$  1/GPa festgelegt und die Belastung wird in 20 Zeitschritten pro Be- und Entlastung aufgebracht.

Abbildung 5.16 zeigt die Ergebnisse einer Berechnung für 20 Lastzyklen und mit  $\alpha_1$  als Startwert für die Eulerwinkel. Diese zeigen wie bereits die Ergebnisse des Zugversuchs die experimentell beobachtete Absenkung der Spannungsplateaus sowie eine akkumulierte bleibende Dehnung. Das Materialmodell ist also auch für diese Belastungsart in der Lage die Mikrostrukturentwicklung qualitativ abzubilden.

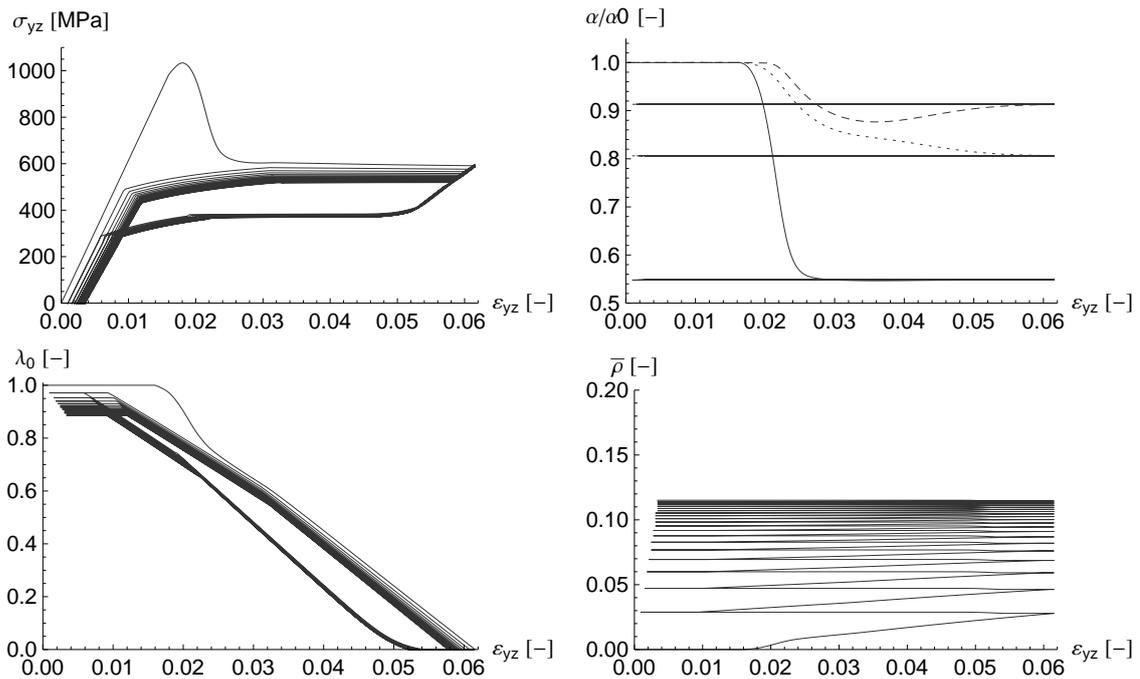


Abbildung 5.16: Scherversuch mit 20 Zyklen und anfänglichen Eulerwinkeln  $\alpha_1$ , Modell 2a, *oben links*: Spannungs-Dehnungs-Diagramm, *oben rechts*: relative Eulerwinkeländerung, *unten links*: Austenitgehalt, *unten rechts*: totaler irreversibler Volumenanteil.

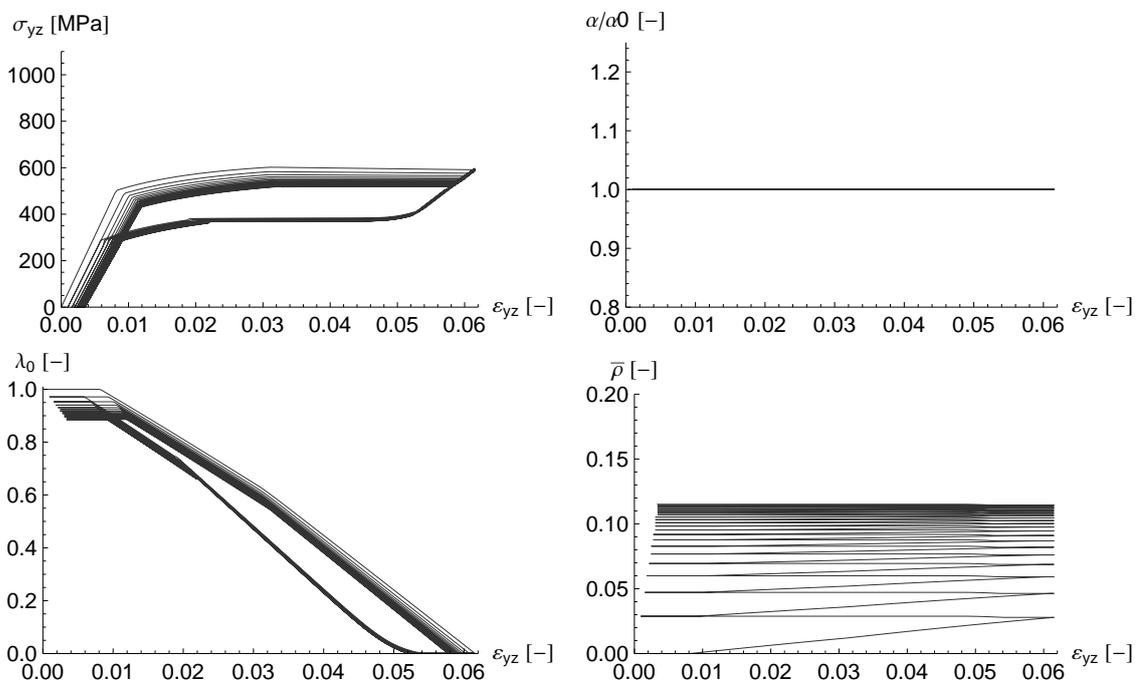


Abbildung 5.17: Scherversuch mit 20 Zyklen und anfänglichen Eulerwinkeln  $\check{\alpha}_1^{conv}$ , Modell 2a, *oben links*: Spannungs-Dehnungs-Diagramm, *oben rechts*: relative Eulerwinkeländerung, *unten links*: Austenitgehalt, *unten rechts*: totaler irreversibler Volumenanteil.

Die Winkel konvergieren in diesem ersten Scherversuch gegen die Werte

$$\tilde{\alpha}_1^{\text{conv}} = \{\Pi/4, \Pi/2, \Pi/2\} . \quad (5.13)$$

Werden diese Winkel nun als Ausgangswert für die Berechnung des Scherversuchs verwendet, verhält sich das Material wie in Abbildung 5.17 dargestellt. Genau wie zuvor im Zugversuch ergibt sich weder eine Spannungserhöhung im ersten Zyklus, noch eine Evolution der Eulerwinkel. Das übrige Materialverhalten bleibt jedoch im Wesentlichen durch den veränderten Startwinkel unberührt.

### 5.2.3 Einfluss der Temperatur unter Berücksichtigung des Modells 2a

Im Anschluss soll nun der Einfluss der Temperatur auf das Materialverhalten untersucht werden. In Junker (2011) wird bereits eine thermomechanische Kopplung vorgestellt, die den Einfluss der Temperatur auf die Phasenumwandlung in Formgedächtnislegierungen ohne den Effekt der funktionalen Ermüdung wiedergibt. Im Rahmen dieses Kapitels wird jedoch nicht der Einfluss eines sich mit der Zeit ändernden Temperaturfeldes untersucht, sondern der unterschiedlicher konstanter Umgebungstemperaturen. Diese Temperatur beeinflusst die kalorische Energie  $c$ , siehe dazu auch Huo u. Müller (1993). Demnach wird der Einfluss einer unterschiedlichen Temperatur auf das Materialverhalten während eines zyklischen Zugversuches durch Berücksichtigung eines anderen – aber dennoch konstanten – Wertes der kalorischen Energie verwirklicht. Abbildung 5.18 zeigt Ergebnisse des gleichen Zugversuchs wie in 5.14 mit den Ausgangswinkeln  $\alpha_0$ , jedoch bei einer niedrigeren Temperatur und somit einem betragsmäßig niedrigeren

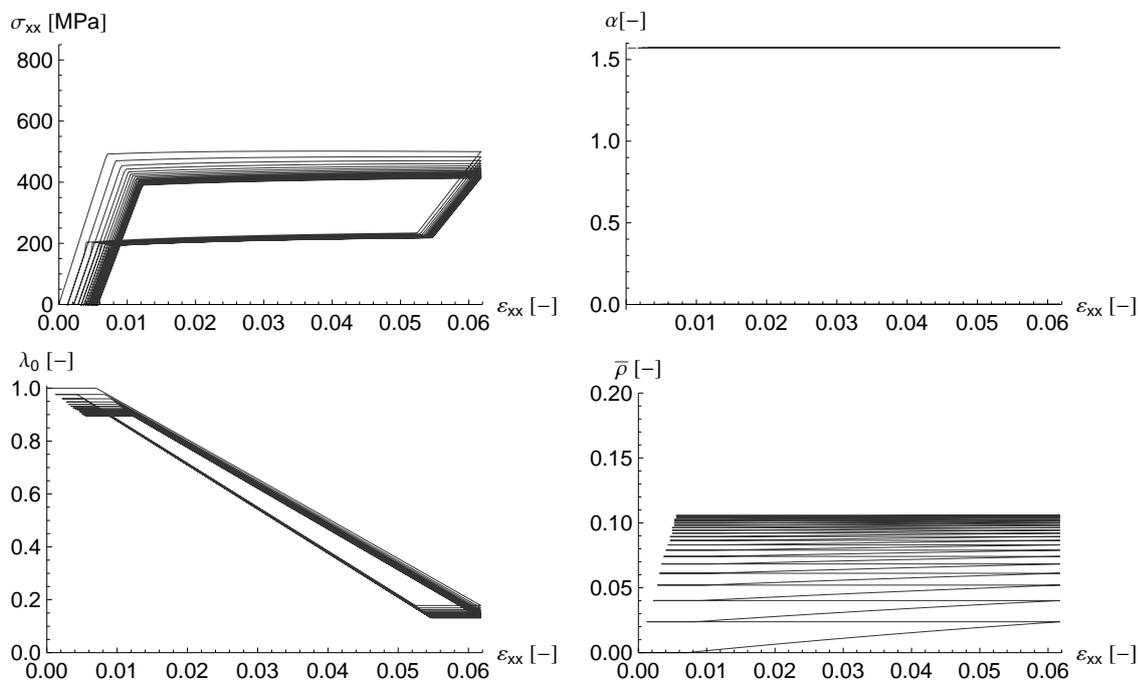


Abbildung 5.18: Zugversuch mit 20 Zyklen,  $\alpha_0$  und  $c_0 = -0.026$  GPa, Modell 2a, *oben links*: Spannungs-Dehnungs-Diagramm, *oben rechts*: absolute Eulerwinkeländerung, *unten links*: Austenitgehalt, *unten rechts*: totaler irreversibler Volumenanteil.

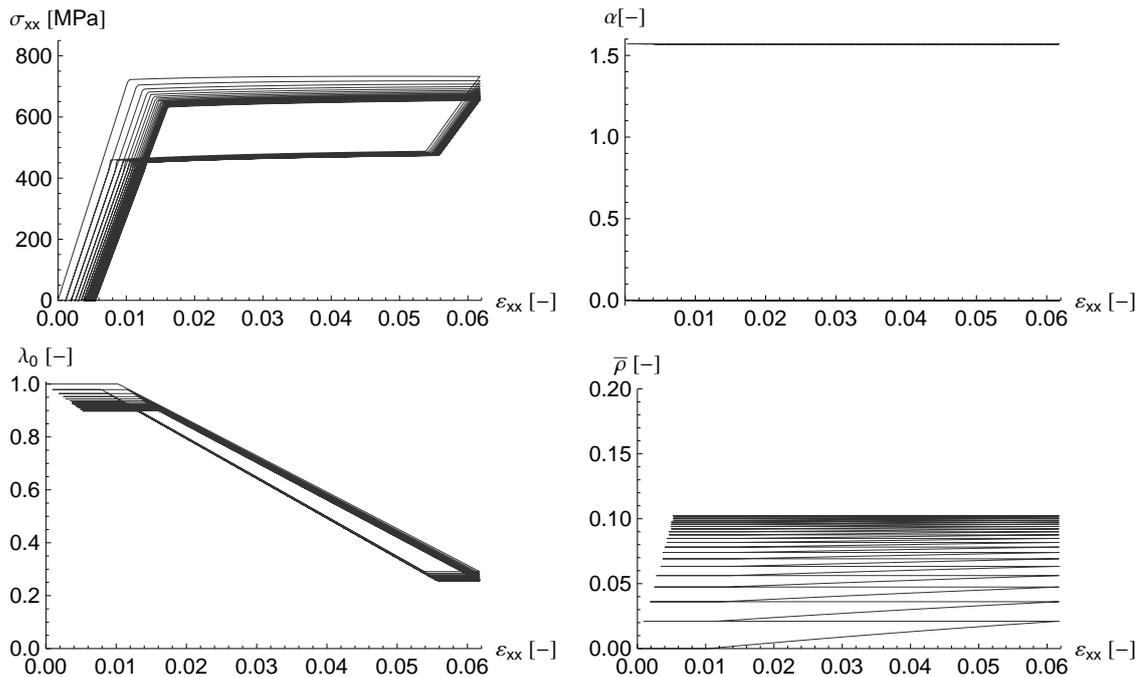


Abbildung 5.19: Zugversuch mit 20 Zyklen,  $\alpha_0$  und  $c_0 = -0.046$  GPa, Modell 2a, *oben links*: Spannungs-Dehnungs-Diagramm, *oben rechts*: absolute Eulerwinkeländerung, *unten links*: Austenitgehalt, *unten rechts*: totaler irreversibler Volumenanteil.

temperaturabhängigen Energieanteil mit  $c_0 = -0.026$  GPa. Entsprechend zeigt Abbildung 5.19 Ergebnisse bei einer höheren Temperatur und somit  $c_0 = -0.046$  GPa.

Während die qualitative Entwicklung der Mikrostruktur auch verglichen mit der Berechnung für  $c_0 = -0.036$  GPa, siehe Abbildung 5.14, bei allen Temperaturen gleich ist, so unterscheiden sich die einzelnen Simulationen bezüglich des Beginns der Phasenumwandlung und folglich der Höhe der Spannungsplateaus. Allgemein beeinflusst die kalorische Energie demnach die Mitte der Hystereseschleife. Bei niedrigeren Temperaturen und somit einem niedrigerem Betrag von  $c_0$  ist der Austenit weniger stabil, siehe hierzu auch die Erklärungen in Kapitel 3.1 v.a. aber Abbildung 3.3. Dadurch kommt es zu einer früheren Umwandlung in Martensit verbunden mit einer insgesamt niedrigeren Hystereseschleife. Umgekehrt ist der Austenit bei höheren Temperaturen stabiler, er besitzt eine um  $c_0$  geringere Energie und ist aus energetischer Sicht – das Material strebt einen Zustand minimaler Energie an – günstiger. Durch diesen betragsmäßig höheren Wert von  $c_0$  beginnt die Umwandlung zu Martensit entsprechend erst später und die Hystereseschleife wird insgesamt – verglichen mit den ursprünglichen Ergebnissen – nach oben verlagert.

#### 5.2.4 Zyklischer Zugversuch unter Berücksichtigung des Modells 2b

Die Berechnung des Zugversuchs auf Grundlage des ratenabhängigen Modells erfordert die Wahl des viskosen Parameters  $\Delta t_T$  in geeigneter Größenordnung. Zur Stabilisierung der Simulation wurden jeweils 1000 Be- und Entlastungsschritte gewählt. Der viskose Parameter wurde mit 0.9 1/GPa festgelegt. Die Ergebnisse werden in Abbildung 5.20 dargestellt. Verglichen mit

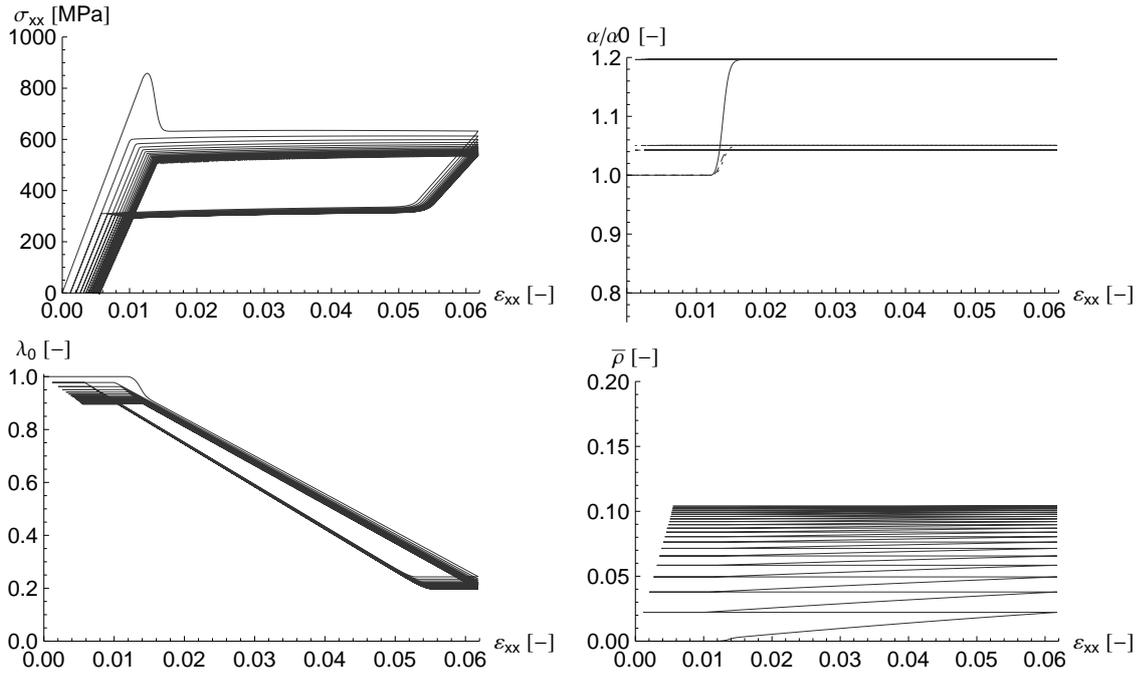


Abbildung 5.20: Zugversuch mit 20 Zyklen und anfänglichen Eulerwinkeln  $\alpha_1$ , Modell 2b mit  $\Delta t_T = 0.9$  1/GPa, *oben links*: Spannungs-Dehnungs-Diagramm, *oben rechts*: relative Eulerwinkeländerung, *unten links*: Austenitgehalt, *unten rechts*: totaler irreversibler Volumenanteil.

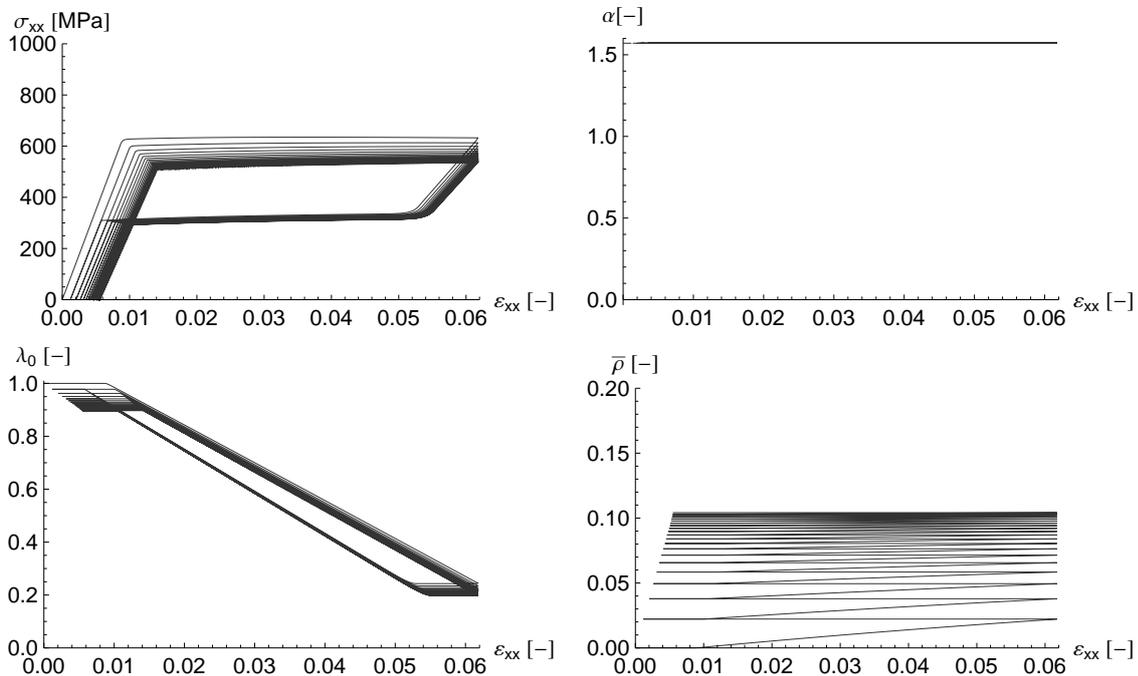


Abbildung 5.21: Zugversuch mit 20 Zyklen und anfänglichen Eulerwinkeln  $\alpha_0$ , Modell 2b mit  $\Delta t_T = 0.9$  1/GPa, *oben links*: Spannungs-Dehnungs-Diagramm, *oben rechts*: absolute Eulerwinkeländerung, *unten links*: Austenitgehalt, *unten rechts*: totaler irreversibler Volumenanteil.

der ratenunabhängigen Evolution der Volumenanteile, zeigt das ratenabhängige Modell einen qualitativ ähnlichen Verlauf. Der Effekt der funktionalen Ermüdung wird – auch bei Evolution von  $\lambda$  und  $\rho$  elasto-viskoplastischen Typs – sowohl anhand der sinkenden Plateauspannungen als auch durch die kumulierende bleibende Dehnung nach jedem Lastzyklus deutlich. Ein Unterschied zum ratenunabhängigen Modell ist jedoch die im Vergleich später einsetzende Rücktransformation von Martensit in Austenit und die daraus resultierende tiefere Hysteresenschleife.

Abschließend wurde für das ratenabhängige Materialmodell eine Berechnung mit dem Startwinkel  $\alpha_0$  durchgeführt. Es ergeben sich erneut qualitativ vergleichbare Ergebnisse zu den ratenunabhängigen Ergebnissen in Abbildung 5.14, die in Abbildung 5.21 dargestellt werden. Jedoch resultiert auch hier das Modell 2b durch die verzögerte Entwicklung der Phasentransformation in einer deutlich breiteren Hysteresekurve.

Zusammenfassend lässt sich also anmerken, dass das ratenabhängige Modell für die durchgeführten Berechnungen am Materialpunkt zwar qualitativ in der Lage ist, die Absenkung der Plateaus und die Bildung der bleibenden Dehnung abzubilden, dem ratenunabhängige Modell diese von einem quantitativen Standpunkt aus jedoch besser gelingt. Des Weiteren kommt auch der numerische Vorteil, der durch die Entwicklung elasto-viskoplastischen Typs entsteht, zum einen mit Hinblick auf die ohnehin schon sehr geringe Berechnungszeit am Materialpunkt und zum anderen aufgrund der höheren Anzahl an benötigten Zeitschritten nicht zum Tragen.

### 5.3 Simulationen auf Materialpunktebene des Modells zur zusätzlichen Abbildung der funktionalen Ermüdung während des thermischen Zyklierens

In diesem Unterkapitel werden nun abschließend Berechnungsbeispiele für das Materialmodell 3 präsentiert. Das erste Berechnungsbeispiel zeigt den bereits für die vorherigen Modelle präsentierten Zugversuch. Im zweiten Beispiel wird zudem die Simulation eines zyklischen Temperaturversuchs präsentiert. Für die Berechnungen wird der zweite Materialdatensatz zu Grunde gelegt, siehe Gleichungen (5.7) und (5.8) und Tabelle 5.2. Die verwendeten Materialparameter können Tabelle 5.4 entnommen werden. An dieser Stelle sei wiederum darauf hingewiesen, dass die Präsentation des Modells 3 im Rahmen dieser Doktorarbeit lediglich einem Ausblick auf zukünftige Untersuchungen dient. Weitere Auswertungen bezüglich des Einflusses des thermischen Zyklierens auf die funktionale Ermüdung sowie ein experimenteller Abgleich werden Thema zukünftiger Untersuchungen sein.

$k_1$	0.200 [-]	$\Delta a$	0.129 [-]
$k_2$	0.100 [-]	$\Delta b$	0.0005 [-]
$k_3$	0.004 [-]	$r_T$	0.008 [GPa]
$k_4$	0.040 [-]	$\Delta t_R$	10.0 [1/GPa]
$k_5$	0.010 [-]		

Tabelle 5.4: Verwendete Materialparameter, Modell 3.

### 5.3.1 Zyklischer Zugversuch unter Berücksichtigung des Modells 3

Unter Verwendung des Dehnungstensors aus Gleichung (5.1) und der anfänglichen Winkelkombination  $\alpha_1$  wird die maximale Dehnung von 0.06125 in jeweils 200 Be- und Entlastungsschritten in zwanzig Zyklen aufgetragen. Die Temperatur die während des zyklischen Zugversuchs vorliegt wurde konstant mit 323.25 K angenommen. Die Simulation findet somit für den pseudoelastischen Bereich statt. Abbildung 5.22 zeigt das Spannungs-Dehnungs-Diagramm sowie die Entwicklung der Eulerwinkel  $\alpha$ , des Austenits  $\lambda_0$ , der internen Variable  $\rho$ , die die Transformationshistorie des Materials speichert, und der aus dieser vergangenen Transformation resultierenden irreversiblen Dehnung  $v_{xx}$  in Zugrichtung. Das Spannungs-Dehnungs-Diagramm

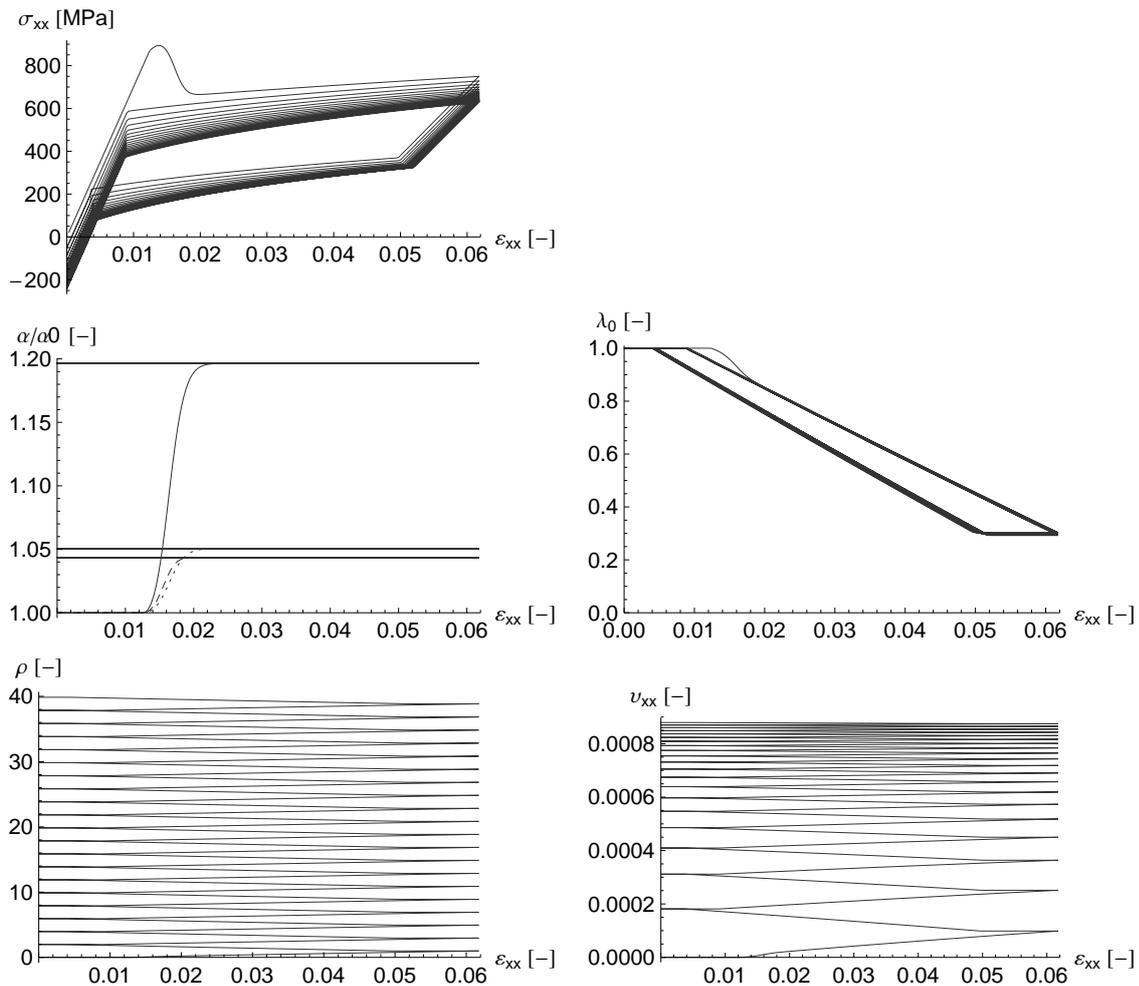


Abbildung 5.22: Zugversuch mit 20 Zyklen und anfänglichen Eulerwinkeln  $\alpha_1$ , Modell 3, *oben links*: Spannungs-Dehnungs-Diagramm, *Mitte links*: relative Eulerwinkeländerung, *Mitte rechts*: Austenitgehalt, *unten links*: Transformationshistorie, *unten rechts*: irreversible Dehnung.

zeigt anhand der zunehmenden bleibenden Dehnung und der abnehmenden Spannungsplateaus den schließlich konvergierenden Effekt der funktionalen Ermüdung. Die Eulerwinkel zeigen eine ähnliche Entwicklung wie bereits in den vorangegangenen Simulationen. Ihre Evolution ist auf den ersten Belastungszyklus begrenzt und resultiert in der charakteristischen Bildung einer Spannungsspitze innerhalb des ersten Zyklus. Die Umwandlung des Austenits erfolgt in

jedem Zyklus bis zu einem Restaustenitgehalt von ca. 30 %. Im Gegensatz zum vorangegangenen Materialmodell 2 ist die Transformation auf Materialpunktebene jedoch komplett reversibel. Die bleibende Dehnung im Spannungs-Dehnungs-Diagramm korrespondiert des Weiteren mit der gebildeten irreversiblen Dehnung, welche zwar von dem kontinuierlich wachsenden  $\rho$  abhängt, jedoch durch den in Gleichung (4.138) gewählten Ansatz einen konvergierenden Charakter zeigt.

### 5.3.2 Zyklische Temperaturbelastung unter Berücksichtigung des Modells 3

Als abschließendes Beispiel wird nun eine zyklische Temperaturbelastung simuliert. Beginnend bei einer Ausgangstemperatur von 323.25 K wird diese in 200 Schritten auf 143.25 K abgekühlt und anschließend wieder erwärmt. Dieser Temperaturzyklus wird insgesamt zwanzig Mal wiederholt. Die Simulationsergebnisse werden in Abbildung 5.23 dargestellt. Die Entwicklung des Austenitgehalts zeigt die experimentell beobachtete Verschiebung der Transformation zu niedrigeren Temperaturen, siehe beispielsweise Burow (2010) bzw. Abbildung 4.11. Die Variable  $\rho$  zeigt wie bereits im vorherigen Berechnungsbeispiel eine stetige Zunahme während der Phasentransformation, welche in einem Wachstum der irreversiblen Dehnung resultiert. Die Evolution der Eulerwinkel zeigt, dass diese ihren ursprünglich durch  $\alpha_1$  gewählten Wert beibehalten. Aufgrund der fehlenden vorgegebenen Dehnung und einer resultierenden Spannung  $\sigma = 0$  GPa wird keine Kornorientierung begünstigt. Die ausbleibende Evolution von  $\alpha$  wird auch anhand der Triebkraft aus Gleichung (4.145) deutlich, da diese in Abhängigkeit der Spannung  $\sigma$  berechnet wird und somit ebenso einen Wert von null annimmt.

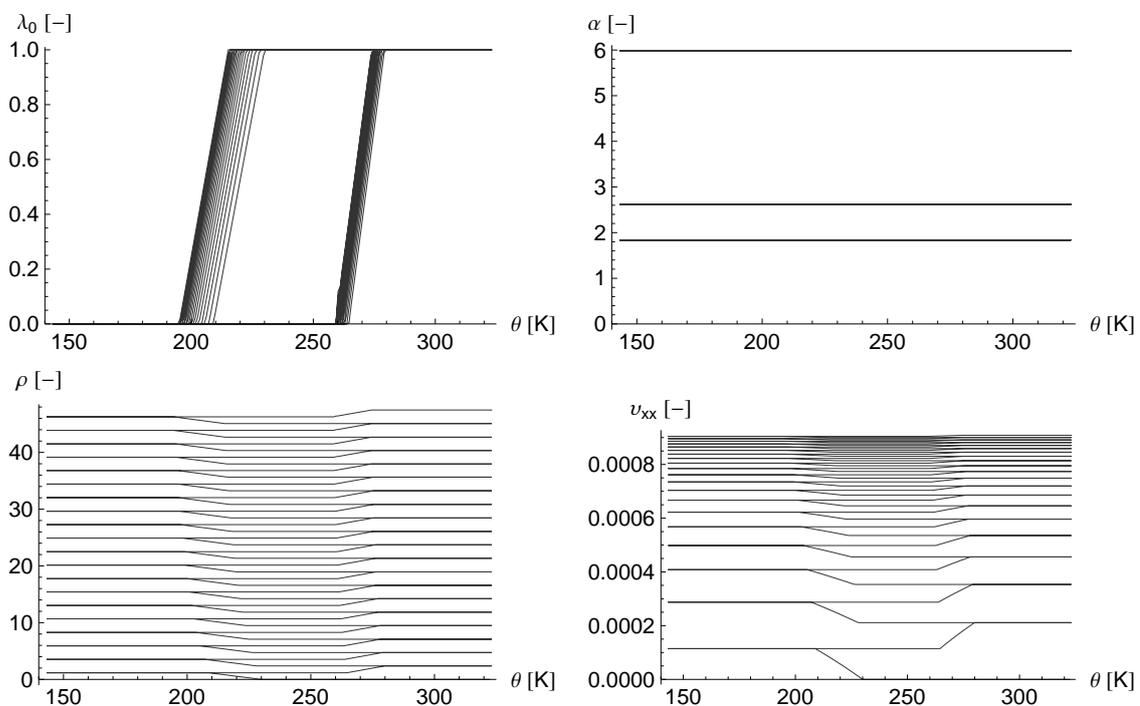


Abbildung 5.23: Temperaturversuch mit 20 Zyklen und anfänglichen Eulerwinkeln  $\alpha_1$ , Modell 3, *oben links*: Austenitgehalt, *oben rechts*: absolute Eulerwinkeländerung, *unten links*: Transformationshistorie, *unten rechts*: irreversible Dehnung.



## 6 Finite-Elemente-Implementierung

Die Finite-Elemente-Methode (FEM) dient der numerischen Lösung partieller Differentialgleichungen und ist dadurch ein viel genutztes Verfahren innerhalb der Ingenieurwissenschaften. In den nachfolgenden Unterkapiteln wird zunächst der variationelle Ansatz der FEM angewandt auf nichtlineare Materialmodelle vorgestellt. Die Nichtlinearität bezieht sich an dieser Stelle auf eine reine materielle Nichtlinearität, die eine Folge der mikrostrukturellen Änderungen ist und sich in einer nichtlinearen Konstitutivbeziehung zwischen Spannung und Dehnung äußert. Geometrische Nichtlinearität und somit große Deformationen werden innerhalb dieser Arbeit nicht berücksichtigt. Des Weiteren wird die FEM auf die zwei in den Kapiteln 4.1 bzw. 4.2 vorgestellten Ansätze – mit simultaner Entwicklung plastischer Deformationen bzw. irreversiblen Martensits– angewandt und so die zu lösenden Gleichungssysteme hergeleitet.

### 6.1 Variationelle Formulierung der Finite-Elemente-Methode für materielle Nichtlinearität

Eine ausführliche Aufarbeitung der Einbindung verschiedener Formen von Nichtlinearität findet sich beispielsweise in Wriggers (2013). Die folgenden Ausführungen zur Finite-Elemente-Methode können in detaillierterer Form beispielsweise in Zienkiewicz u. Taylor (2000a), Zienkiewicz u. Taylor (2000b) oder Bathe (2006) gefunden werden.

Im Vergleich zu den Berechnungen am Materialpunkt können mit Hilfe der FEM sowohl primäre und sekundäre Variablen, hier die Verschiebung und Spannung, als auch die die Mikrostruktur beschreibenden internen Variablen eines kompletten makroskopischen Körpers bestimmt werden. Zur Klärung der folgenden Begrifflichkeiten stellt Abbildung 6.1 einen allgemeinen Körper dar.

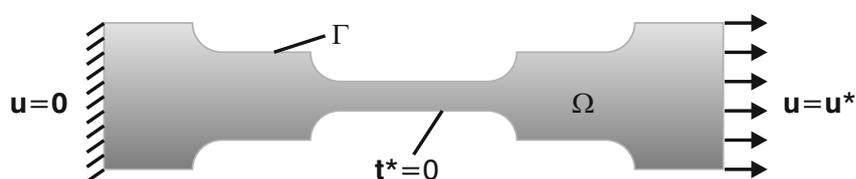


Abbildung 6.1: Allgemeiner Körper mit Volumen  $\Omega$ .

Neben einem Volumen  $\Omega$  besitzt der Körper einen Rand  $\Gamma$ . Dieser lässt sich je nach vorgegebenen Randbedingungen in einen Neumann-Rand  $\Gamma_\sigma$ , an dem Kraft- bzw. Spannungsrandbedingungen vorgegeben sind, und einen Dirichlet-Rand  $\Gamma_u$ , an dem die primäre Variable – im betrachteten Fall die Verschiebung – vorgegeben ist, unterteilen. Ist die vorgegebene Verschiebung  $u = 0$ , so wird der Rand auch als homogener Dirichlet-Rand bezeichnet. Neben den am Neumann-Rand vorgegebenen Traktionsspannungen  $t^*$ , die sich mit Hilfe der Spannung  $\sigma$  und des Normalenvektors  $n$  durch

$$t = \sigma \cdot n \quad (6.1)$$

berechnen lassen und im dargestellten Fall am freien unbelasteten Rand null sind, ist es des Weiteren möglich Volumenkräfte  $\mathbf{f}$  vorzugeben, die beispielsweise durch die Berücksichtigung des Eigengewichts der Struktur entstehen.

Ausgangspunkt des variationellen Ansatzes der Finite-Elemente-Methode ist die Formulierung der Gibbs-Energie  $\mathcal{G}$

$$\mathcal{G} = \int_{\Omega} \Psi \, dV - \int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \mathbf{u} \, dV - \int_{\Gamma_{\sigma}} \mathbf{t} \cdot \mathbf{u} \, dA \quad (6.2)$$

in Abhängigkeit der gesuchten primären Variable  $\mathbf{u}$ . Wie bereits in Kapitel 2.7 erwähnt, setzt sich die Energie darin aus einem internen und einem externen Anteil zusammen. Der interne Anteil umfasst die über das Volumen des betrachteten Körpers integrierte freie Energie  $\Psi$ , die zum einen von der Dehnung  $\varepsilon$  und zum anderen von der Mikrostruktur und somit von allgemeinen internen Variablen  $\Lambda$  abhängt. Der externe Anteil der Gibbs-Energie  $\mathcal{G}$  ist durch die Arbeit äußerer Kräfte – der Traktionsspannungen  $\mathbf{t}$  und Volumenkräfte  $\mathbf{f}$  entlang des Verschiebungsfeldes  $\mathbf{u}$  – gegeben.

Durch den Umstand, dass das Material den Zustand minimaler Energie anstrebt, lässt sich der Energieausdruck in Bezug auf die primäre Variable  $\mathbf{u}$  minimieren. Folglich gilt, dass die Variation der Gibbs-Energie für jede beliebige Änderung des Verschiebungsfeldes  $\delta\mathbf{u}$  verschwinden muss

$$\delta\mathcal{G} = 0 \quad (6.3)$$

und die Gibbs-Energie somit für  $\mathbf{u}$  stationär ist. Die Variation von  $\mathcal{G}$  (6.2) lässt sich dann

$$\delta\mathcal{G} = \int_{\Omega} \delta\Psi \, dV - \int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \delta\mathbf{u} \, dV - \int_{\Gamma_{\sigma}} \mathbf{t} \cdot \delta\mathbf{u} \, dA \quad (6.4)$$

$$= \int_{\Omega} \frac{\partial\Psi}{\partial\varepsilon} : \delta\varepsilon \, dV - \int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \delta\mathbf{u} \, dV - \int_{\Gamma_{\sigma}} \mathbf{t} \cdot \delta\mathbf{u} \, dA \stackrel{!}{=} 0 \quad \forall\delta\mathbf{u} \quad (6.5)$$

schreiben, wobei zur Berechnung der Variation der freien Helmholtz-Energie die hier nicht näher definierte interne Variable  $\Lambda$  als konstant angesehen wird und folglich nur die Variation des von  $\mathbf{u}$  abhängenden Dehnungsfeldes  $\delta\varepsilon$  Einfluss nimmt. Die partielle Ableitung der Energie nach der totalen Dehnung  $\partial\Psi/\partial\varepsilon$  entspricht der Spannung  $\boldsymbol{\sigma}$ . Die Variation der Gibbs-Energie kann also

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma} : \delta\varepsilon \, dV - \int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \delta\mathbf{u} \, dV - \int_{\Gamma_{\sigma}} \mathbf{t} \cdot \delta\mathbf{u} \, dA \stackrel{!}{=} 0 \quad \forall\delta\mathbf{u} \quad (6.6)$$

geschrieben werden. Sie hat somit die Gestalt des Prinzips der virtuellen Arbeit (PVA).

Die Grundidee der Finite-Elemente-Methode umfasst nun mehrere Schritte zur Vereinfachung der partiellen Differentialgleichung (6.6), damit diese für komplexe makroskopische Körper lösbar wird. Eine Übersicht der wesentlichen Schritte wird in Abbildung 6.2 dargestellt. Zunächst erfolgt die Unterteilung des jeweils betrachteten Körpers in eine finite Anzahl  $NE$  einzelner Elemente. Folglich setzen sich sowohl das Gesamtvolumen  $\Omega$  als auch die Ränder aus den Elementvolumen  $\Omega_e$  und Elementrändern  $\Gamma_{ue}$  bzw.  $\Gamma_{\sigma e}$  wie folgt zusammen:

$$\Omega = \sum_{e=1}^{NE} \Omega_e, \quad \Gamma_u = \sum_{e=1}^{NE} \Gamma_{ue}, \quad \Gamma_{\sigma} = \sum_{e=1}^{NE} \Gamma_{\sigma e}. \quad (6.7)$$

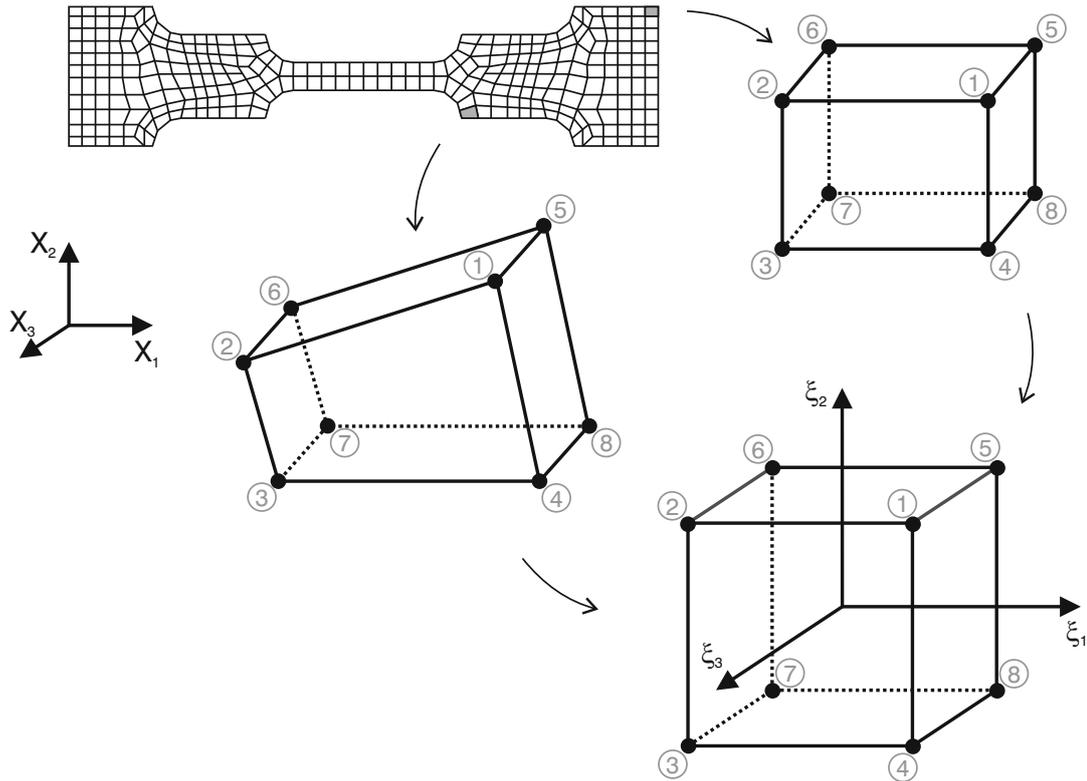


Abbildung 6.2: Übersicht über die Finite-Elemente-Methode.

Damit lassen sich die einzelnen Integrale innerhalb des PVA nun ebenfalls elementweise auswerten und anschließend summieren

$$\sum_{e=1}^{NE} \int_{\Omega_e} \boldsymbol{\sigma} : \delta \boldsymbol{\varepsilon} \, dV - \sum_{e=1}^{NE} \int_{\Omega_e} \mathbf{f} \cdot \delta \mathbf{u} \, dV - \sum_{e=1}^{NE} \int_{\Gamma_{\sigma e}} \mathbf{t} \cdot \delta \mathbf{u} \, dA \stackrel{!}{=} 0. \quad (6.8)$$

Beim Aufsummieren der elementweise ausgewerteten Terme muss die globale Knotennummerierung berücksichtigt werden. Dieser Prozess wird als Assemblierung bezeichnet und beispielsweise in Fish u. Belytschko (2007) anschaulich beschrieben.

Das Verschiebungsfeld innerhalb eines einzelnen Elements lässt sich nun durch die Interpolation zwischen den Knotenverschiebungen der das Element begrenzenden Punkten  $\hat{\mathbf{u}}$  approximieren. Die gleiche Interpolation wird des Weiteren auf die Variation der Verschiebung  $\delta \mathbf{u}$  sowie durch Verwendung des isoparametrischen Konzepts auf die Geometrie in Form der physikalischen Koordinate  $\mathbf{x}$  angewandt. Diese Methode wird als (Bubnov-)Galerkin Verfahren bezeichnet. Verschiebungsfeld, Variation des Verschiebungsfelds und physikalische Koordinate können dann durch

$$\mathbf{u} = \mathbf{N} \cdot \hat{\mathbf{u}}, \quad \delta \mathbf{u} = \mathbf{N} \cdot \delta \hat{\mathbf{u}}, \quad \mathbf{x} = \mathbf{N} \cdot \hat{\mathbf{x}} \quad (6.9)$$

angenähert werden, wobei  $\mathbf{N}$  die zur Interpolation verwendeten Ansatzfunktionen enthält und  $\delta \hat{\mathbf{u}}$  und  $\hat{\mathbf{x}}$  die Variation von  $\mathbf{u}$  ausgewertet an den Elementknoten und die entsprechenden Knotenkoordinaten bezeichnen. Zur genaueren Definition der Ansatzfunktionen  $\mathbf{N}$  wird zunächst ein natürliches Element vorgestellt. Der betrachtete Körper befindet sich im physikalischen Koordinatensystem mit den Koordinaten  $\mathbf{x}$ . Durch die Zerlegung in einzelne Elemente ist es nicht immer möglich – teilweise aber auch nicht sinnvoll – ein gleichmäßiges Netz zu gewährleisten.

Aus diesem Grund wird ein natürliches Koordinatensystem mit den natürlichen Koordinaten  $\boldsymbol{\xi}$  verwendet. Abbildung 6.2 zeigt exemplarisch zwei beliebige Elemente des physikalischen Koordinatensystems, die sich beide auf das selbe Element im natürlichen dreidimensionalen Koordinatensystem beziehen.

Da bei der Elementzerlegung im physikalischen Koordinatensystem hexagonale Elemente verwendet werden, wird als natürliches Element ein Würfel mit der dimensionslosen Kantenlänge 2 gewählt, dessen Mittelpunkt im Koordinatenursprung liegt. Anstatt nun die Ansatzfunktionen für jedes physikalische Element neu zu definieren, werden sie einmal im natürlichen Koordinatensystem formuliert. Im Rahmen dieser Arbeit wurden die trilinearen Ansatzfunktionen

$$\begin{aligned}
 N_1(\boldsymbol{\xi}) &= \frac{1}{8} (\xi_1 + 1) (\xi_2 + 1) (\xi_3 + 1) & N_5(\boldsymbol{\xi}) &= \frac{1}{8} (\xi_1 + 1) (\xi_2 + 1) (\xi_3 - 1) \\
 N_2(\boldsymbol{\xi}) &= \frac{1}{8} (\xi_1 - 1) (\xi_2 + 1) (\xi_3 + 1) & N_6(\boldsymbol{\xi}) &= \frac{1}{8} (\xi_1 - 1) (\xi_2 + 1) (\xi_3 - 1) \\
 N_3(\boldsymbol{\xi}) &= \frac{1}{8} (\xi_1 - 1) (\xi_2 - 1) (\xi_3 + 1) & N_7(\boldsymbol{\xi}) &= \frac{1}{8} (\xi_1 - 1) (\xi_2 - 1) (\xi_3 - 1) \\
 N_4(\boldsymbol{\xi}) &= \frac{1}{8} (\xi_1 + 1) (\xi_2 - 1) (\xi_3 + 1) & N_8(\boldsymbol{\xi}) &= \frac{1}{8} (\xi_1 + 1) (\xi_2 - 1) (\xi_3 - 1) \quad (6.10)
 \end{aligned}$$

verwendet. Mit Hilfe der Ansatzfunktionen und der Approximationen (6.9) lassen sich nun die entsprechenden Ausdrücke in dem PVA (6.8) ersetzen. Die Berechnung der Dehnung  $\boldsymbol{\varepsilon}$  erfordert jedoch eine genauere Betrachtung. Es gilt die Definition der Dehnung im Fall kleiner Auslenkungen

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2} (\boldsymbol{\nabla} \mathbf{u} + \mathbf{u} \boldsymbol{\nabla}) . \quad (6.11)$$

Diese wird also aus der Ableitung der Verschiebungen nach den physikalischen Koordinaten berechnet. Im Folgenden wird im Rahmen der Betrachtungen zur FEM die Voigt-Notation verwendet, siehe hierzu auch Kapitel 2.1.1. Die Voigt-Notation ist darin und nachfolgend durch  $(\tilde{\cdot})$  gekennzeichnet, siehe dazu auch Mehrabadi u. Cowin (1990). Damit lässt sich die Berechnung der Dehnung durch

$$\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} = \tilde{\mathbf{B}} \cdot \mathbf{u} \quad (6.12)$$

ersetzen, wobei die Differentialoperatormatrix  $\tilde{\mathbf{B}}$  verwendet wird, die nun die Ableitungen nach den physikalischen Koordinaten enthält

$$\tilde{\mathbf{B}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x_1} & 0 & 0 & \frac{\partial}{\partial x_2} & 0 & \frac{\partial}{\partial x_3} \\ 0 & \frac{\partial}{\partial x_2} & 0 & \frac{\partial}{\partial x_1} & \frac{\partial}{\partial x_3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial}{\partial x_3} & 0 & \frac{\partial}{\partial x_2} & \frac{\partial}{\partial x_1} \end{pmatrix}^T . \quad (6.13)$$

Wird nun die Approximation der Verschiebung aus Gleichung (6.9) eingesetzt

$$\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} = \tilde{\mathbf{B}} \cdot \mathbf{N} \cdot \hat{\mathbf{u}} , \quad (6.14)$$

so wird durch die Multiplikation von  $\tilde{\mathbf{B}} \cdot \mathbf{N}$  die Ableitung der von den natürlichen Koordinaten abhängigen Ansatzfunktionen nach den physikalischen Koordinaten benötigt, welche sich für

jede einzelne Komponente  $k$  durch die Kettenregel berechnen lässt

$$\begin{aligned} \frac{\partial N_k(\boldsymbol{\xi})}{\partial \boldsymbol{x}} &= \frac{\partial N_k(\boldsymbol{\xi})}{\partial \boldsymbol{\xi}} \frac{\partial \boldsymbol{\xi}}{\partial \boldsymbol{x}} \\ &= \frac{\partial N_k(\boldsymbol{\xi})}{\partial \boldsymbol{\xi}} \mathbf{J}^{-1}. \end{aligned} \quad (6.15)$$

Darin ist  $\mathbf{J}$  die Jacobi-Matrix

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial \xi_1} & \frac{\partial x_2}{\partial \xi_1} & \frac{\partial x_3}{\partial \xi_1} \\ \frac{\partial x_1}{\partial \xi_2} & \frac{\partial x_2}{\partial \xi_2} & \frac{\partial x_3}{\partial \xi_2} \\ \frac{\partial x_1}{\partial \xi_3} & \frac{\partial x_2}{\partial \xi_3} & \frac{\partial x_3}{\partial \xi_3} \end{pmatrix} = \frac{\partial \mathbf{N}}{\partial \boldsymbol{\xi}} \cdot \hat{\boldsymbol{x}}, \quad (6.16)$$

die durch Verwendung der isoparametrischen Approximation, siehe Gleichung (6.9), bestimmt werden kann. Der durch

$$\mathbf{B} = \tilde{\mathbf{B}} \cdot \mathbf{N} \quad (6.17)$$

gegebene Ausdruck wird als Operatormatrix  $\mathbf{B}$  definiert. Das PVA lässt sich schließlich unter der Berücksichtigung beliebiger konstanter Werte von  $\delta \hat{\mathbf{u}}$

$$\mathbf{R}_u = \sum_{e=1}^{NE} \int_{\Omega_e} \mathbf{B}^T \cdot \tilde{\boldsymbol{\sigma}} \, dV - \sum_{e=1}^{NE} \int_{\Omega_e} \mathbf{N} \cdot \mathbf{f} \, dV - \sum_{e=1}^{NE} \int_{\Gamma_{\sigma e}} \mathbf{N} \cdot \mathbf{t} \, dA \stackrel{!}{=} 0 \quad (6.18)$$

neu formulieren und wird fortan als Residuum  $\mathbf{R}_u$  bezeichnet.

Abschließend wird eine weitere Vereinfachung bezüglich der Integration eingeführt. Die Berücksichtigung des natürlichen Koordinatensystems fordert, dass die Integration im natürlichen und nicht im physikalischen Koordinatensystem durchgeführt wird. Der Koordinatenwechsel in Bezug auf die Integrale geschieht unter zur Hilfenahme der Jacobi-Determinante  $\det \mathbf{J}$ . Des Weiteren kann im gewählten natürlichen Element die Gauß-Quadratur angewandt werden. Diese ist ein numerisches Verfahren, durch das es möglich ist, anstelle eine Integration im Intervall von  $\boldsymbol{x} \in [-1, 1]$  durchzuführen, die zu integrierende Funktion  $f(\boldsymbol{x})$  an speziellen Stützstellen auszuwerten und diese mit Wichtungsfaktoren  $w_i$  multipliziert aufzusummieren

$$\int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 f(x_1, x_2, x_3) \, dx_1 dx_2 dx_3 = \sum_{i,j,k} w_i w_j w_k f(x_{1i}, x_{2j}, x_{3k}). \quad (6.19)$$

Die Stützstellen  $\{x_{1i}, x_{2j}, x_{3k}\}$  werden auch als Gaußpunkte  $\mathbf{GP}$  bezeichnet und sind im vorliegenden Fall quadratischer Funktionen als

$$\begin{aligned} \mathbf{GP}_1 &= \left\{ +\frac{1}{\sqrt{3}}, +\frac{1}{\sqrt{3}}, +\frac{1}{\sqrt{3}} \right\} & \mathbf{GP}_5 &= \left\{ +\frac{1}{\sqrt{3}}, +\frac{1}{\sqrt{3}}, -\frac{1}{\sqrt{3}} \right\} \\ \mathbf{GP}_2 &= \left\{ -\frac{1}{\sqrt{3}}, +\frac{1}{\sqrt{3}}, +\frac{1}{\sqrt{3}} \right\} & \mathbf{GP}_6 &= \left\{ -\frac{1}{\sqrt{3}}, +\frac{1}{\sqrt{3}}, -\frac{1}{\sqrt{3}} \right\} \\ \mathbf{GP}_3 &= \left\{ -\frac{1}{\sqrt{3}}, -\frac{1}{\sqrt{3}}, +\frac{1}{\sqrt{3}} \right\} & \mathbf{GP}_7 &= \left\{ -\frac{1}{\sqrt{3}}, -\frac{1}{\sqrt{3}}, -\frac{1}{\sqrt{3}} \right\} \\ \mathbf{GP}_4 &= \left\{ +\frac{1}{\sqrt{3}}, -\frac{1}{\sqrt{3}}, +\frac{1}{\sqrt{3}} \right\} & \mathbf{GP}_8 &= \left\{ +\frac{1}{\sqrt{3}}, -\frac{1}{\sqrt{3}}, -\frac{1}{\sqrt{3}} \right\} \end{aligned} \quad (6.20)$$

definiert. Die Wichtungsfaktoren sind jeweils 1. Die Integrale über das Elementvolumen  $\Omega_e$  – hier für eine allgemeine Funktion  $f(\boldsymbol{\xi})$  – lassen sich somit insgesamt durch die Summe der Funktionswerte an den acht Gaußpunkten

$$\int_{\Omega_e} f(\xi_1, \xi_2, \xi_3) \, dV = \sum_{j=1}^8 f(\mathbf{GP}_j) \det \mathbf{J}_e(\mathbf{GP}_j) \quad (6.21)$$

vereinfachen.

Um nun die Nullstelle des Residuums in Gleichung (6.18) zu bestimmen wird aufgrund des nichtlinearen Materialmodells das Newton-Raphson-Verfahren verwendet. Wie bereits erwähnt, handelt es sich bei diesem Verfahren um eine iterative Methode zur Bestimmung von Nullstellen. Durch die Formulierung des Residuums  $\mathbf{R}_u^{i+1}$  des Iterationsschrittes  $i + 1$

$$\mathbf{R}_u^{i+1} = \mathbf{R}_u^i + \frac{d\mathbf{R}_u^i}{d\hat{\mathbf{u}}} \cdot \Delta \hat{\mathbf{u}} = \mathbf{0} \quad (6.22)$$

kann das Verschiebungsinkrement  $\Delta \hat{\mathbf{u}}$  durch

$$\Delta \hat{\mathbf{u}} = - \left( \frac{d\mathbf{R}_u^i}{d\hat{\mathbf{u}}} \right)^{-1} \cdot \mathbf{R}_u^i \quad (6.23)$$

ermittelt werden. Darin entspricht  $\mathbf{R}_u^i$  dem Residuum aus Gleichung (6.18) ausgewertet für den vorangegangenen Iterationsschritt und  $d\mathbf{R}_u^i/d\hat{\mathbf{u}}$  der Tangentenmatrix, die durch Ableitung von Gleichung (6.18) nach den gesuchten Knotenverschiebungen bestimmt werden kann

$$\frac{d\mathbf{R}_u^i}{d\hat{\mathbf{u}}} = \sum_{e=1}^{NE} \int_{\Omega_e} \mathbf{B}^T \cdot \frac{d\tilde{\boldsymbol{\sigma}}}{d\hat{\mathbf{u}}} \, dV = \sum_{e=1}^{NE} \int_{\Omega_e} \mathbf{B}^T \cdot \frac{d\tilde{\boldsymbol{\sigma}}}{d\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}} \cdot \mathbf{B} \, dV. \quad (6.24)$$

Die Verschiebung des Iterationsschritts  $i + 1$  kann dann durch

$$\mathbf{u}^{i+1} = \mathbf{u}^i + \Delta \hat{\mathbf{u}} \quad (6.25)$$

ermittelt werden. Ist das für diese Lösungsvariable ausgewertete Residuum null oder erreicht zumindest eine gewählte Toleranz, so kann die Iteration beendet werden. Ansonsten wird mit dem nächsten Iterationsschritt fortgefahren bis dieser Zustand erreicht ist.

Im Fall der linearen Konstitutivbeziehung, gegeben durch das Hookesche Gesetz

$$\tilde{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbb{E} \cdot \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}, \quad (6.26)$$

kann die in Gleichung (6.24) auftauchende Materialtangente  $d\tilde{\boldsymbol{\sigma}}/d\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}$  einfach durch die Steifigkeitsmatrix  $\mathbb{E}$  identifiziert werden. Im Fall eines nichtlinearen Zusammenhangs zwischen Spannung und Dehnung – zum Beispiel durch interne Variablen, die ihrerseits Einfluss auf die Spannung nehmen, aber auch von der Dehnung abhängen – hängt die Materialtangente von der Diskretisierung der internen Variablen und der Spannung ab, was anhand der folgenden Kapitel veranschaulicht wird. Zur kompakteren Schreibweise wird dabei wiederum auf die in Tabelle 5.1 eingeführte Nummerierung der einzelnen Modellansätze zurückgegriffen.

## 6.2 Implementierung des Materialmodells 1b

Da das Modell 1a aufgrund der getrennten Auswertung der Entwicklung der Mikrostruktur für jedes Korn eine deutlich erhöhte Berechnungszeit verlangt, wird zur Betrachtung der während der Phasenumwandlung stattfindenden plastischen Deformation auf Finite-Elemente-Ebene lediglich das Modell 1b mit der sich entwickelnden Orientierungsverteilungsfunktion aus Kapitel 4.1.8 verwendet.

Zur Implementierung des nichtlinearen Materialverhaltens muss nun – die Ausführungen im vorangegangenen Kapitel ergänzend – zur Bestimmung der Tangentenmatrix  $d\mathbf{R}_u^i/d\hat{\mathbf{u}}$  in Gleichung (6.24) die totale Ableitung der Spannung nach der Dehnung bestimmt werden. Zur Bestimmung dieser Materialtangente  $d\tilde{\boldsymbol{\sigma}}/d\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}$  müssen dazu zunächst die Spannung und die Evolutionsgleichungen für die internen Variablen diskretisiert werden. Zur zeitlichen Diskretisierung der Entwicklungsgleichungen für die internen Variablen wird – in Übereinstimmung zu dem in Junker u. Hempel (2017) präsentierten Vorgehen – ein Taylor-Polynom ersten Grades herangezogen, siehe beispielsweise in Hermann (2011). Für eine allgemeine Funktion  $y(x)$ , lässt sich der aktuelle Wert demnach durch

$$y(x^{l+1}) = y(x^l) + \left. \frac{\partial y}{\partial x} \right|^l \Delta x \quad (6.27)$$

berechnen. Darin bezieht sich die Notation  $(\cdot)^{l+1}$  auf den aktuellen und  $(\cdot)^l$  auf den vorherigen Lastschritt. Sowohl die Funktion als auch ihre Ableitung werden folglich als Funktionen des Wertes von  $x$  des vorherigen Lastschrittes berechnet. Das Inkrement  $\Delta x$  meint die Änderung der Variable  $x$  zwischen den beiden Lastschritten.

Die interne Variable der Volumenanteile  $\boldsymbol{\lambda}$  des momentanen Lastschritts kann mit Hilfe des Taylor-Polynoms durch

$$\boldsymbol{\lambda}^{l+1} = \boldsymbol{\lambda}^l + \left. \frac{\partial \boldsymbol{\lambda}}{\partial t} \right|^l \Delta t \quad (6.28)$$

zeitlich diskretisiert werden. Darin bezeichnet die partielle Ableitung  $\partial \boldsymbol{\lambda} / \partial t$  die Rate der internen Variable und entspricht der in Kapitel 4.1.8 hergeleiteten Evolutionsgleichung (4.58). Wird diese in (6.28) eingesetzt, so ergibt sich die explizite Berechnung

$$\boldsymbol{\lambda}^{l+1} = \boldsymbol{\lambda}^l + \beta_T \operatorname{dev}_{\mathcal{A}} \mathbf{P}_T^l \Big|_{\mathcal{A}^l}, \quad (6.29)$$

worin die Variable  $\beta_T = \beta \Delta t$  verwendet wird. Der aktive Deviator in Gleichung (6.29) wird folglich durch Verwendung der Dehnung und der internen Variablen des vorherigen Lastschritts berechnet:  $\operatorname{dev}_{\mathcal{A}} \mathbf{P}_T^l = \operatorname{dev}_{\mathcal{A}} \mathbf{P}_T(\boldsymbol{\varepsilon}^l, \boldsymbol{\Lambda}^l)$ . Dem entsprechend wird auch der Konsistenzparameter  $\beta_T$  mit Hilfe der Kuhn-Tucker-Bedingungen (4.61) unter Berücksichtigung der Fließgrenze  $\Phi = \Phi(\boldsymbol{\varepsilon}^l, \boldsymbol{\Lambda}^{l+1})$  – ausgehend von der Dehnung des vorherigen Lastschritts – bestimmt.

Die Verwendung der gleichen Diskretisierung wie in Gleichung (6.28) auf die restlichen internen Variablen, die plastische Dehnung  $\boldsymbol{\varepsilon}_P$  und die Eulerwinkel  $\boldsymbol{\alpha}$ , ergibt

$$\boldsymbol{\varepsilon}_P^{l+1} = \boldsymbol{\rho}^l + \frac{\beta_T}{k} \operatorname{dev} \mathbf{P}_P^l \Big|_{\mathcal{A}^l} \quad (6.30)$$

$$\boldsymbol{\alpha}^{l+1} = \boldsymbol{\alpha}^l + \Delta t_R \bar{\mathbf{P}}_R^l \quad (6.31)$$

mit dem diskretisierten viskosen Parameter  $\Delta t_{\text{R}} = \Delta t / \sqrt{2} r_{\text{R}}$  und den Triebkräften der Eulerwinkel

$$\bar{\mathbf{P}}_{\text{R}} = \begin{pmatrix} (P_{\varphi} - P_{\omega} \cos \vartheta) / (1 - \cos^2 \vartheta) \\ P_{\vartheta} \\ (P_{\omega} - P_{\varphi} \cos \vartheta) / (1 - \cos^2 \vartheta) \end{pmatrix}. \quad (6.32)$$

Ebenfalls auf Grundlage der Taylor-Reihenentwicklung und äquivalent zu Junker u. Hempel (2017) folgt für die Spannungen aus (4.54)

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma}^{l+1} &= \boldsymbol{\sigma}^l + \left. \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} \right|^l : (\boldsymbol{\varepsilon}^{l+1} - \boldsymbol{\varepsilon}^l) + \left. \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial \boldsymbol{\alpha}} \right|^l \cdot (\boldsymbol{\alpha}^{l+1} - \boldsymbol{\alpha}^l) \\ &\quad + \left. \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial \boldsymbol{\lambda}} \right|^l \cdot (\boldsymbol{\lambda}^{l+1} - \boldsymbol{\lambda}^l) + \left. \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_{\text{P}}} \right|^l : (\boldsymbol{\varepsilon}_{\text{P}}^{l+1} - \boldsymbol{\varepsilon}_{\text{P}}^l). \end{aligned} \quad (6.33)$$

Diese Herangehensweise führt zu einem sogenannten *Operator Split* und damit einer leicht verzögerten Evolution der internen Variablen gegenüber dem Dehnungs- bzw. Verschiebungsfeld. Es kommt dadurch zu einer leichten Entkopplung, da im momentanen Zeitschritt nun der Einfluss der eigentlich aktuellen internen Variablen auf das Verschiebungsfeld entfällt, jedoch ist deren Auswirkung auf das Materialverhalten bei genügend kleinen Schrittweiten vernachlässigbar gering.

Die partielle Ableitung  $\partial(\boldsymbol{\sigma}) / \partial(\cdot)^l$  beschreibt die Ableitung der Spannung nach den jeweiligen Variablen des vorangegangenen Lastschritts  $l$ , von dem die internen Variablen bereits bekannt sind. Diese partiellen Ableitungen der Spannung können direkt aus Gleichung (4.54) berechnet werden:

$$\left. \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} \right|^l = \bar{\mathbb{E}}^l \quad (6.34)$$

$$\left. \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial \boldsymbol{\alpha}} \right|^l = -2\bar{\mathbb{E}} : \left( \frac{\partial \mathbf{Q}^{\text{T}}}{\partial \boldsymbol{\alpha}} \cdot \bar{\boldsymbol{\eta}} \cdot \mathbf{Q} \right)^l \quad (6.35)$$

$$\left. \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial \boldsymbol{\lambda}} \right|^l = -\bar{\mathbb{E}} \cdot \mathbb{E}^{-1} \cdot \boldsymbol{\sigma} - \bar{\mathbb{E}} : (\mathbf{Q}^{\text{T}} \cdot \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{Q} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\text{P}})^l \quad (6.36)$$

$$\left. \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_{\text{P}}} \right|^l = -\bar{\mathbb{E}} \boldsymbol{\lambda}^l. \quad (6.37)$$

Die für die Ableitung des Residuums (6.24) zu bestimmende Materialtangente kann dann durch die totale Ableitung der diskretisierten momentanen Spannung (6.33) nach der momentanen Dehnung  $\boldsymbol{\varepsilon}^{l+1}$  unter Anwendung der Kettenregel durch

$$\frac{d\boldsymbol{\sigma}^{l+1}}{d\boldsymbol{\varepsilon}^{l+1}} = \left. \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} \right|^l + \left. \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial \boldsymbol{\alpha}} \right|^l \cdot \frac{\partial \boldsymbol{\alpha}^{l+1}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^{l+1}} + \left. \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial \boldsymbol{\lambda}} \right|^l \cdot \frac{\partial \boldsymbol{\lambda}^{l+1}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^{l+1}} + \left. \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_{\text{P}}} \right|^l : \frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_{\text{P}}^{l+1}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^{l+1}} \quad (6.38)$$

ausgedrückt werden. Die darin auftauchenden Subtangente  $\partial(\cdot)^{l+1} / \partial \boldsymbol{\varepsilon}^{l+1}$ , die die partielle Ableitung der aktuellen internen Variablen  $\boldsymbol{\Lambda}^{l+1}$  nach der momentanen Dehnung beschreiben,

ergeben sich durch die Unabhängigkeit der diskretisierten Evolutionsgleichungen (6.29)-(6.31) zu null:

$$\frac{\partial \boldsymbol{\alpha}^{l+1}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^{l+1}} = \mathbf{0}, \quad \frac{\partial \lambda^{l+1}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^{l+1}} = \mathbf{0}, \quad \frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_P^{l+1}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^{l+1}} = \mathbf{0}. \quad (6.39)$$

Daraus resultierend lässt sich die Materialtangente reduzieren und schließlich durch

$$\frac{d\boldsymbol{\sigma}^{l+1}}{d\boldsymbol{\varepsilon}^{l+1}} = \left. \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} \right|^l = \bar{\mathbb{E}}^l \quad (6.40)$$

schreiben. Sie entspricht somit der Steifigkeitsmatrix der Phasenzusammensetzung des vorangegangenen Zeitschritts. Folglich lässt sich die Tangentenmatrix  $d\mathbf{R}_u^i/d\hat{\mathbf{u}}$  in Gleichung (6.24) zur Durchführung des Newton-Verfahrens zur Bestimmung der gesuchten Knotenverschiebungen  $\hat{\mathbf{u}}$  berechnen, vergl. Junker u. Hempel (2017).

### 6.3 Implementierung des Materialmodells 2a

In Kapitel 4.2.5 wurde das Materialmodell zur Beschreibung der funktionalen Ermüdung mit ratenunabhängigen Evolutionsgleichungen für die reversiblen und irreversiblen Volumenanteile hergeleitet.

Auf Grundlage der Taylor-Reihenentwicklung, siehe Gleichung (6.28) und Junker u. Hempel (2017), können äquivalent zum im vorangegangenen Abschnitt 6.2 präsentierten Verfahren die Evolutionsgleichungen der internen Variablen der reversiblen und irreversiblen Volumenfraktionen,  $\boldsymbol{\lambda}$  und  $\boldsymbol{\rho}$ , sowie der Eulerwinkel  $\boldsymbol{\alpha}$  durch

$$\boldsymbol{\lambda}^{l+1} = \boldsymbol{\lambda}^l + \frac{\beta_T}{(f^l)^2} \text{dev}_{\mathcal{A}} \mathbf{P}_T^l \Big|_{\mathcal{A}_\lambda^l} \quad (6.41)$$

$$\boldsymbol{\alpha}^{l+1} = \boldsymbol{\alpha}^l + \Delta t_R \bar{\mathbf{P}}_R^l \quad (6.42)$$

$$\boldsymbol{\rho}^{l+1} = \boldsymbol{\rho}^l + \frac{\beta_T}{g^2} \text{dev}_{\mathcal{A}} \mathbf{P}_T^l \Big|_{\mathcal{A}_\rho^l}. \quad (6.43)$$

und die Spannung aus Gleichung (4.77) durch

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma}^{l+1} = & \boldsymbol{\sigma}^l + \left. \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} \right|^l : (\boldsymbol{\varepsilon}^{l+1} - \boldsymbol{\varepsilon}^l) + \left. \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial \boldsymbol{\alpha}} \right|^l \cdot (\boldsymbol{\alpha}^{l+1} - \boldsymbol{\alpha}^l) \\ & + \left. \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial \boldsymbol{\lambda}} \right|^l \cdot (\boldsymbol{\lambda}^{l+1} - \boldsymbol{\lambda}^l) + \left. \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial \boldsymbol{\rho}} \right|^l \cdot (\boldsymbol{\rho}^{l+1} - \boldsymbol{\rho}^l). \end{aligned} \quad (6.44)$$

ermittelt werden.

Die partiellen Ableitungen der Spannung  $\partial(\boldsymbol{\sigma})/\partial(\cdot)|^l$  werden wiederum mit Hilfe von Glei-

chung (4.77) zu

$$\left. \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} \right|^l = \bar{\mathbb{E}}^l \quad (6.45)$$

$$\left. \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial \boldsymbol{\alpha}} \right|^l = -2\bar{\mathbb{E}} : \left( \frac{\partial \mathbf{Q}^T}{\partial \boldsymbol{\alpha}} \cdot (\bar{\boldsymbol{\eta}} + \bar{\mathbf{v}}) \cdot \mathbf{Q} \right) \Big|^l \quad (6.46)$$

$$\left. \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial \boldsymbol{\lambda}} \right|^l = \left. \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial \boldsymbol{\rho}} \right|^l = -\bar{\mathbb{E}} \cdot \mathbb{E}^{-1} \cdot \boldsymbol{\sigma} - \bar{\mathbb{E}} : (\mathbf{Q}^T \cdot \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{Q}) \Big|^l \quad (6.47)$$

ermittelt. Die für die Ableitung des Residuums (6.24) benötigte Materialtangente resultiert schließlich in

$$\frac{d\boldsymbol{\sigma}^{l+1}}{d\boldsymbol{\varepsilon}^{l+1}} = \left. \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} \right|^l = \bar{\mathbb{E}}^l. \quad (6.48)$$

Wie bereits für Modell 2b in Gleichung (6.40) handelt es sich bei der Materialtangente um die effektive Steifigkeitsmatrix des vorherigen Lastschritts.

## 6.4 Implementierung des Materialmodells 2b

Äquivalent zum in den vorherigen Kapiteln präsentierten Vorgehen lässt sich ebenso die Materialtangente für das ratenabhängige Materialmodell aus Kapitel 4.2.6 berechnen. Die Diskretisierung der Spannung ist identisch zu Gleichung (6.44) und auch die Diskretisierung der Eulerwinkel stimmt durch identische Evolutionsgleichungen mit den Formulierungen im vorherigen Unterkapitel überein. Der einzige Unterschied ergibt sich aus der Diskretisierung der ratenabhängigen Evolutionsgleichungen der reversiblen und irreversiblen Volumenanteile

$$\boldsymbol{\lambda}^{l+1} = \boldsymbol{\lambda}^l + \frac{\Delta t_T}{(f^l)^2} \left[ 1 - \frac{r_{T1}}{|\text{dev}_{\mathcal{A}} \mathbf{P}_T^l|} \right]_+ \text{dev}_{\mathcal{A}} \mathbf{P}_T^l \Big|_{\mathcal{A}_\lambda^l} \quad (6.49)$$

$$\boldsymbol{\rho}^{l+1} = \boldsymbol{\rho}^l + \frac{\Delta t_T}{g^2} \left[ 1 - \frac{r_{T1}}{|\text{dev}_{\mathcal{A}} \mathbf{P}_T^l|} \right]_+ \text{dev}_{\mathcal{A}} \mathbf{P}_T^l \Big|_{\mathcal{A}_\rho^l}, \quad (6.50)$$

die aber ebenfalls auf Grundlage des Taylor-Polynoms erster Ordnung erfolgt. Äquivalent zu Modell 2a mit ratenunabhängiger Evolution der Volumenanteile, hängen auch hier die Entwicklungsgleichungen daher nicht von der momentanen maskroskopischen Dehnung  $\boldsymbol{\varepsilon}^{l+1}$  ab. Die partiellen Ableitungen ergeben sich wiederum zu null und es folgt die gleiche Materialtangente, wie bereits in Gleichung (6.40) bzw. (6.48) gegeben.

## 7 Numerische Ergebnisse der Finite-Elemente-Berechnung

In diesem Kapitel werden Simulationsergebnisse für verschiedene Randwertprobleme präsentiert. Die Berechnungen erfolgen, wie bereits erwähnt, mit Hilfe der Software FEAP – *A Finite Element Analysis Program* (University of California, Berkeley (2003)) und auf Grundlage der in den Kapiteln 4 und 6 hergeleiteten Ansätze. Die resultierenden Konturdiagramme wurden mit Hilfe der Visualisierungssoftware PARAVIEW (National Technology & Engineering Solutions of Sandia, LLC (NTESS), Kitware Inc. (2005)) erzeugt und zeigen die von den Gaußpunktwerten aus auf die Netzknoten extrapolierten Werte der einzelnen Größen.

Zur besseren Übersicht wird auf die bereits in Tabelle 5.1 veranschaulichte Nummerierung der betrachteten Modelle verwiesen. Aufgrund des erheblichen Vorteils hinsichtlich der Rechenzeiten erfolgen die Simulationen auf Finite-Elemente-Ebene für das Materialmodell zur Abbildung simultan stattfindender Phasentransformationen und plastischer Deformationen lediglich unter Verwendung der Eulerwinkel zur Beschreibung der polykristallinen Struktur (Modell 1b) aus Kapitel 4.1.8. Zu diesem Zweck werden fünf Probleme präsentiert. Bei dem ersten Berechnungsbeispiel handelt es sich um einen zyklisch beanspruchten Zugdraht mit zwei unterschiedlich feinen Netzen. Das zweite Berechnungsbeispiel zeigt einen ebenso zyklisch auf Zug beanspruchten Streifen. Die abschließenden Beispiele der Lochscheibe, des Sinusrings und der Feder zeigen eine mehrdimensionalere Anwendung des ersten Materialmodells mit einer deutlich lokaleren Ausprägung der stattfindenden Phasentransformationen und plastischen Deformationen. Im Anschluss an die Auswertungen für den Modellansatz 1b werden Finite-Elemente-Simulationen für die Phasentransformation mit gleichzeitiger Bildung irreversiblen Martensits, siehe Kapitel 4.2, vorgestellt. Im zweiten Kapitel 7.2 werden dazu Ergebnisse für das bereits in Waimann u. a. (2018) veröffentlichte Modell 2a mit ratenunabhängiger Evolution der Volumenfraktionen aus Kapitel präsentiert. Die bereits in Waimann u. a. (2018) präsentierten Berechnungsbeispiele des Zugdrahts, der Lochscheibe, des Sinusrings und der Feder werden um die Simulationen eines Streifens und eines Risses ergänzt. Sie zeigen dabei die Auswirkungen einer zyklischen Belastung und der einhergehenden funktionalen Ermüdung des jeweiligen Bauteils. Der maßgebliche Unterschied zwischen diesen Simulationen ist eine unterschiedlich stark ausgeprägte Lokalisierung der auftretenden Effekte. Im Anschluss daran werden im dritten Unterkapitel 7.3 Berechnungen für das Materialmodell 2b mit ratenabhängiger Evolution der Phasenanteile gezeigt, um die bereits in Kapitel 2.6 verdeutlichten Unterschiede bezüglich der verschiedenen Materialverhalten zu belegen und die beiden Modellansätze 2a und 2b hinsichtlich der Rechenzeiten und numerischen Stabilität zu vergleichen.

### 7.1 Finite-Elemente-Berechnungen für Modell 1b

#### 7.1.1 Draht unter zyklischer Zugbeanspruchung

Bei dem ersten Randwertproblem, das für das Modell 1b auf Finite-Elemente-Ebene gelöst wird, handelt es sich um einen Draht, der einer zyklischen Zugbelastung ausgesetzt ist. Dieses

erste Berechnungsbeispiel orientiert sich an dem in Wagner (2005) durchgeführten Zugversuch.

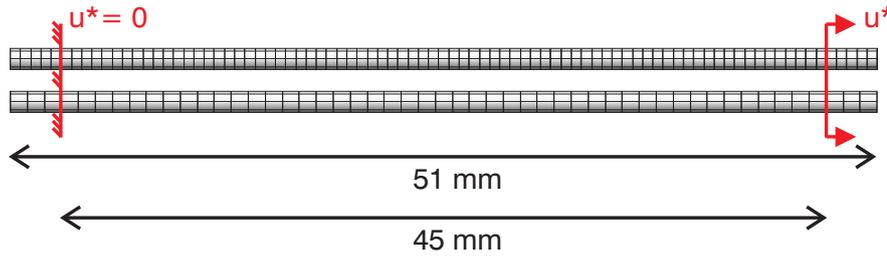


Abbildung 7.1: Zugdraht mit zwei unterschiedlichen Netzen (612 und 1020 Elemente), Randwertproblem, Waimann u. a. (2018).

Der betrachtete Draht ist 51 mm lang, seine gedehnte Länge beträgt 45 mm und er besitzt eine Querschnittsfläche von  $1.13097 \text{ mm}^2$ . Wie in Abbildung 7.1 dargestellt, wird der Stab an der linken Seite gehalten und an der rechten Seite durch eine Verschiebung  $u^*$  zyklisch belastet. Um die experimentellen Zugversuche nach Wagner (2005) nachzuvollziehen, ist die maximale vorgegebene Verschiebung  $2.77875 \text{ mm}$ . Der Draht wird in zehn Zyklen mit jeweils 4000 Belastungsschritten be- und entlastet. Die Funktion der Verschiebung wird in Abbildung 7.2 dargestellt. Darin markiert sind auch die Lastschritte, für die nachfolgend Strukturdiagramme für die

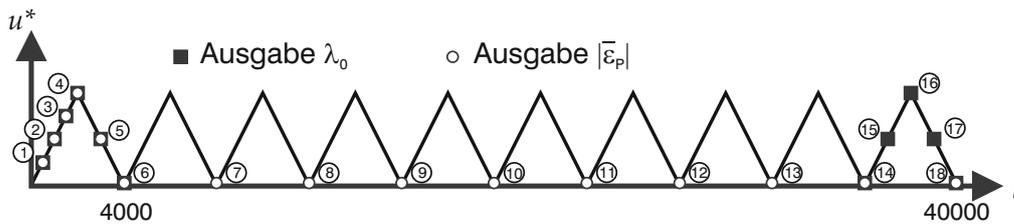


Abbildung 7.2: Zugdraht, Modell 1b, vorgegebene Verschiebung der einzelnen Lastschritte mit Markierung der ausgegebenen Belastungsschritte.

Entwicklung des Austenitgehalts  $\lambda_0$  und der absoluten plastischen Dehnung  $|\bar{\epsilon}_P|_{\text{abs}}$  präsentiert werden. Diese absolute plastische Dehnung wird durch

$$|\bar{\epsilon}_P|_{\text{abs}} = \frac{1}{NE \cdot 8} \sum_{e=1}^{NE} \sum_{j=1}^8 |\bar{\epsilon}_P|_e^j \quad (7.1)$$

als Mittelwert der  $NE$  Elemente und acht Gaußpunkte berechnet und ist dadurch, dass weder die Größe der Elemente noch des transformierenden Gebietes berücksichtigt wird, eher als qualitatives Maß für die Entstehung plastischer Deformationen zu verstehen. Diese erste Berechnung wird für zwei unterschiedliche Netze durchgeführt, die sich wie in Abbildung 7.1 dargestellt durch eine abweichende Anzahl an Elementen in Längsrichtung unterscheiden. Das grobe Netz besteht aus 612, das feine aus 1020 Elementen. Die Startwerte für die Eulerwinkel entsprechen den Werten aus Kapitel 5.2 und lauten somit  $\alpha_1 = \{2.6260, 1.8406, 5.9814\}$ . Der Viskositätsparameter für die Entwicklung der Eulerwinkel ist mit  $0.003 \text{ 1/GPa}$  angenommen.

Das resultierende Spannungs-Dehnungs-Diagramm sowie die Entwicklung der absoluten plastischen Dehnung werden in Abbildung 7.3 dargestellt. Zu Beginn der ersten Belastungsphase verhält sich das rein austenitische Material linear-elastisch. Nach Erreichen einer gewissen Spannung setzt die Phasentransformation ein und die Spannung bleibt – abgesehen von einer abgebauten Erhöhung zu Beginn aufgrund der Eulerwinkeländerung – konstant. Zeitgleich kommt

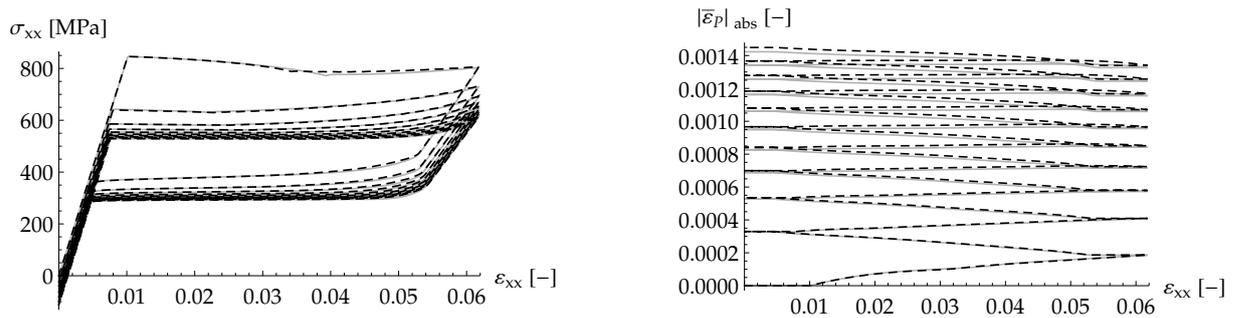


Abbildung 7.3: Zugdraht mit zwei unterschiedlichen Netzen (612 (strichliert) und 1020 Elemente (grau)), Modell 1b, links: Spannungs-Dehnungs-Diagramm, rechts: plastische Dehnung.

es durch die gekoppelten Evolutionsgleichung zur Bildung plastischer Dehnungen, siehe hierzu auch die Strukturdiagramme für den ersten Belastungszyklus in den Abbildungen 7.4 und 7.5.

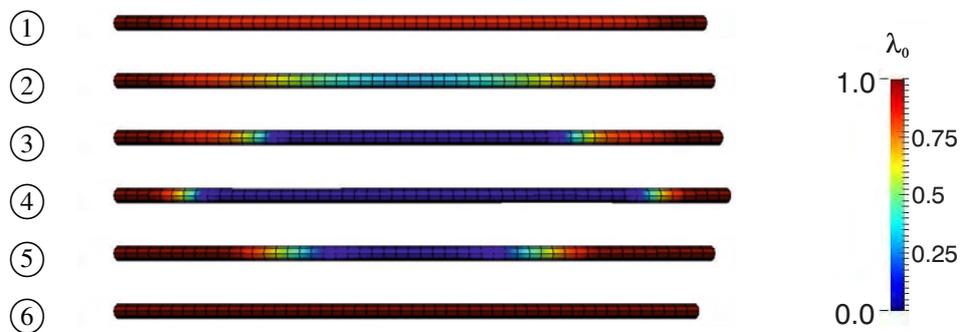


Abbildung 7.4: Zugdraht, Modell 1b, Austenitgehalt des ersten Zyklus, 612 Elemente.

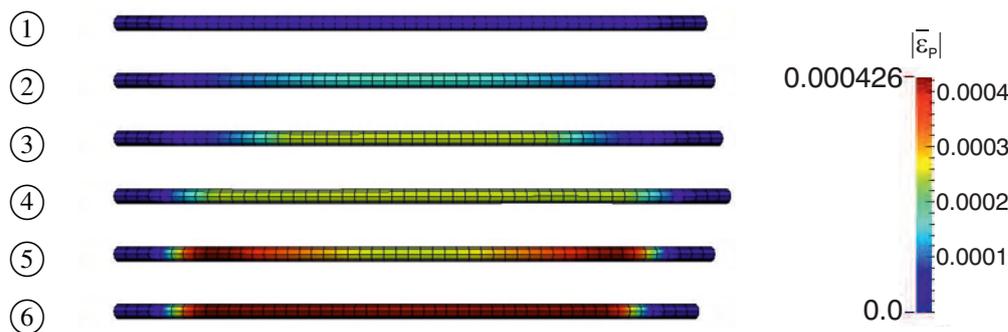


Abbildung 7.5: Zugdraht, Modell 1b, plastische Dehnung des ersten Zyklus, 612 Elemente.

Die Entwicklung der Mikrostruktur erfolgt zunächst homogen ① und bildet dann eine erkennbare Front aus, die sich von einem mittigen Bereich des Drahtes zu den Dirichlet-Rändern ausbreitet ②-④. Die Entlastung des Bauteils führt zunächst zu einer linearen Abnahme der Spannung bevor die Rücktransformation von Martensit zu Austenit einsetzt ⑤. Diese hat zum einen die Bildung des unteren Spannungsplateaus zur Folge, geht allerdings des Weiteren mit einer weiteren Zunahme plastischer Deformationen einher, die sich diesmal in der Nähe der Dirichlet-Ränder beginnend weiter in die Mitte des Bauteils ausbreiten ⑤. Liegt wieder ein rein austenitisches Material vor ⑥ erfolgt eine lineare Abnahme der restlichen Spannung, wobei bei totaler Entlastung  $\sigma = 0$  immer noch eine geringe Restdehnung vorliegt. Wird dieser

Belastungszyklus nun wiederholt, bleibt die Entwicklung des Austenits in den einzelnen Zyklen gleich, siehe hierzu das Konturdiagramm des zehnten Zyklus in Abbildung 7.6. Die beiden

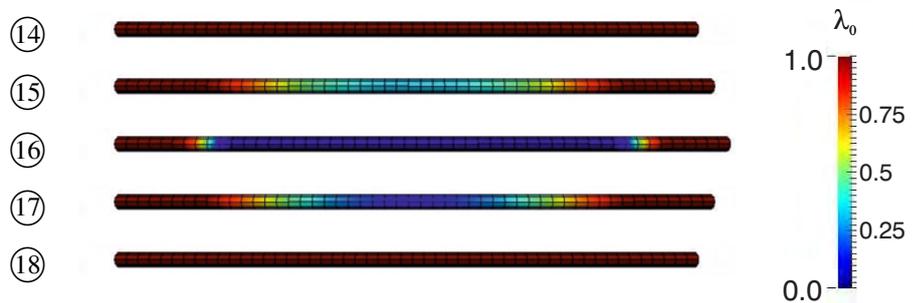


Abbildung 7.6: Zugdraht, Modell 1b, Austenitgehalt des zehnten Zyklus, 612 Elemente.

Spannungsplateaus – vor allem das obere – sinken jedoch mit wachsender Zyklenzahl ab und es bleibt jeweils eine wachsende Dehnung nach jedem Zyklus zurück. Diese steht im Zusammenhang mit der wachsenden plastischen Dehnung, siehe neben Abbildung 7.3 auch das Konturdiagramm des groben Netzes in Abbildung 7.7. Wie bereits für die Materialpunktsuntersuchungen in Kapitel 5.1 zeigt sich auch auf Finite-Elemente-Ebene der Effekt der abnehmenden plastischen Dehnung, der in späteren Zyklen während der Transformation von Austenit in Martensit auftritt. Dieser verhindert aber nicht das kontinuierliche Wachstum der bleibenden Dehnung nach jedem Zyklus.

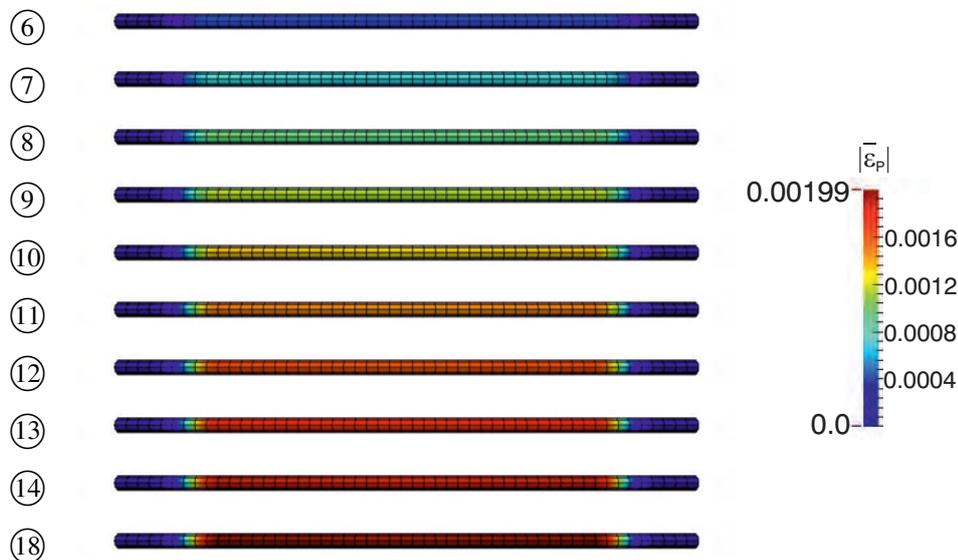


Abbildung 7.7: Zugdraht, Modell 1b, plastische Dehnung nach den einzelnen Zyklen, 612 Elemente.

Der Vergleich des Spannungs-Dehnungs-Diagramms und der Entwicklung der absoluten plastischen Dehnung für die beiden unterschiedlichen Netze in Abbildung 7.3 zeigt eine übereinstimmende Spannungs-Dehnungs-Relation. Eine minimale Abweichung entsteht lediglich im oberen Spannungsplateau nach Beendigung der Winkelkorrektur. Auch die Entwicklung der plastischen Dehnung stimmt für die ersten Lastzyklen überein. Es entsteht jedoch eine leichte Abweichung durch eine stärkere Entwicklung von  $\epsilon_p$  für das grobe Netz, die sich über die einzelnen Belastungszyklen akkumuliert. Die Austenitentwicklung innerhalb des feinen Netzes

wird für ausgewählte Lastschritte in Abbildung 7.8 dargestellt. Die Betrachtung der Konturdiagramme für die Austenitentwicklung im ersten und letzten Zyklus zeigt eine gute Übereinstimmung, wobei auch hier eine leichte Abweichung des Austenitgehalts während der ersten Belastungsphase ② zu erkennen ist. Abbildungen 7.9 und 7.10 zeigen die Formation der plastischen

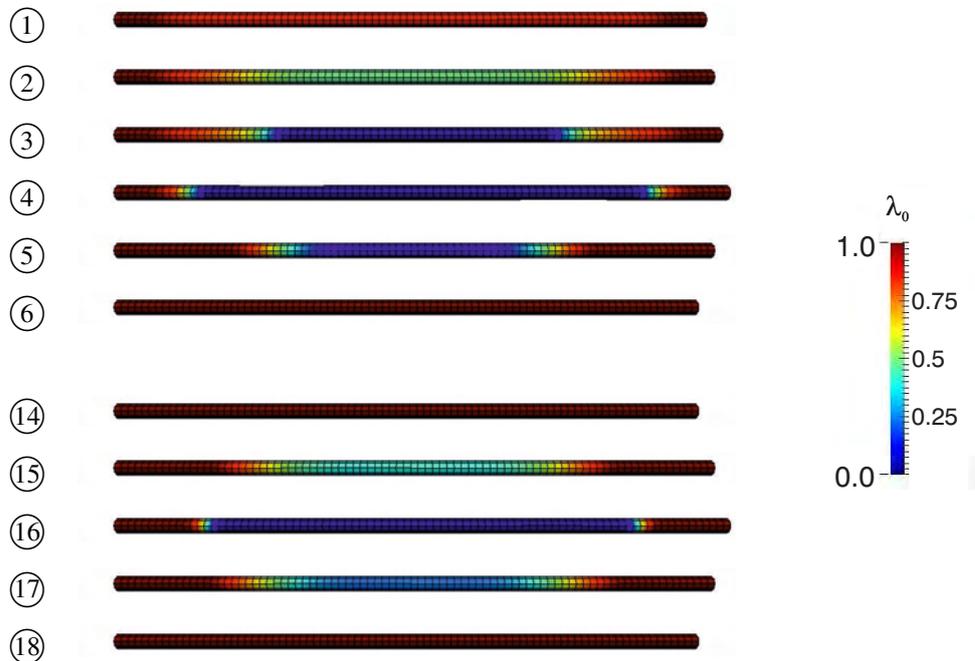


Abbildung 7.8: Zugdraht, Modell 1b, Austenitgehalt des ersten und letzten Zyklus, 1020 Elemente.

Dehnung in der feiner vernetzten Struktur für den ersten und nach jedem weiteren Zyklus. Trotz der leichten Abweichung innerhalb der absoluten plastischen Dehnungsentwicklung in Abbildung 7.3 zeigt sich durch Vergleich mit den Konturdiagrammen des feineren Netzes eine gute Übereinstimmung der Ergebnisse.

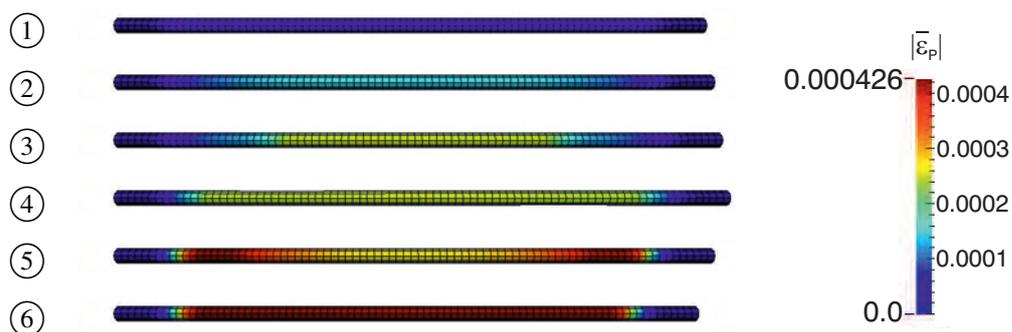


Abbildung 7.9: Zugdraht, Modell 1b, plastische Dehnung des ersten Zyklus, 1020 Elemente.

Wie an der Absenkung der Spannungsplateaus und der Bildung einer bleibenden Dehnung erkennbar, ist das Materialmodell mit gekoppelter Phasenumwandlung und plastischer Deformation in der Lage den in Kapitel 3.1 beschriebenen Effekt der funktionalen Ermüdung abzubilden. Ein Vergleich der Spannungs-Dehnungs-Diagramme der Simulation aus Abbildung 7.3 mit den experimentellen Daten nach Wagner (2005) aus Abbildung 3.6 zeigt die gute qualitative Übereinstimmung der experimentell beobachteten Effekte. Es zeigt sich jedoch auch, dass im

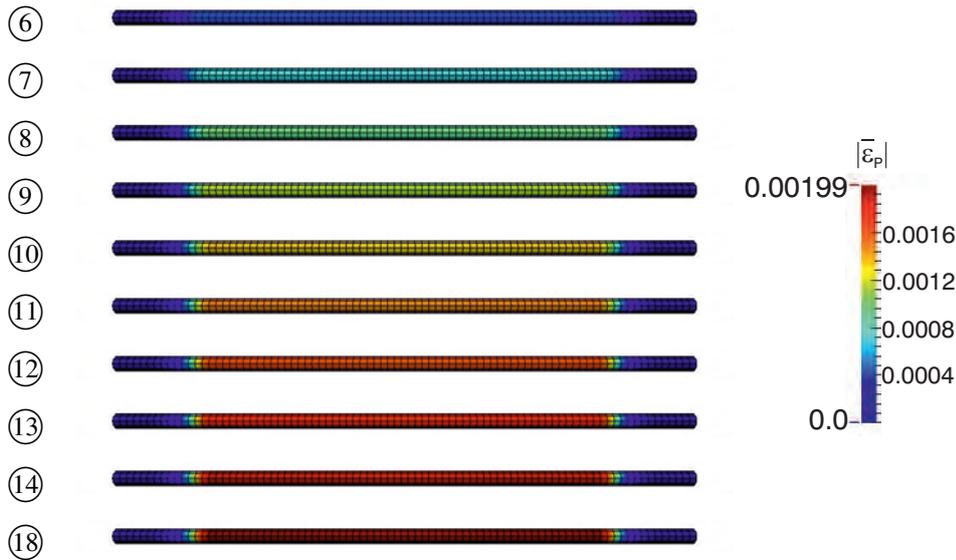


Abbildung 7.10: Zugdraht, Modell 1b, plastische Dehnung nach den einzelnen Zyklen, 1020 Elemente.

Rahmen der Modellierung eine deutlich geringere Menge bleibender Dehnungen gebildet wird. Insgesamt handelt es sich bei dem Modell 1b dennoch um ein geeignetes Modell, eine erste Abschätzung der mikrostrukturellen Veränderungen sowie des komplexen Materialverhaltens zu liefern.

### 7.1.2 Zyklisch belasteter Zugstreifen

Ergänzend zum Beispiel des zyklisch belasteten Drahtes wird ein Streifen gleicher Länge betrachtet, der ebenso der gleichen wiederholten Belastung ausgesetzt ist, siehe Abbildung 7.11. Wie bereits für den Zugdraht wurde auch der viskose Parameter mit  $0.005 \text{ 1/GPa}$  und die anfängliche Winkelkombination mit  $\alpha_0$  angenommen, siehe Kapitel 5.1.3. Die Konturdiagramme für den Austenitgehalt und die absolute plastische Dehnung werden für die in Abbildung 7.12 gekennzeichneten Lastschritte erzeugt.

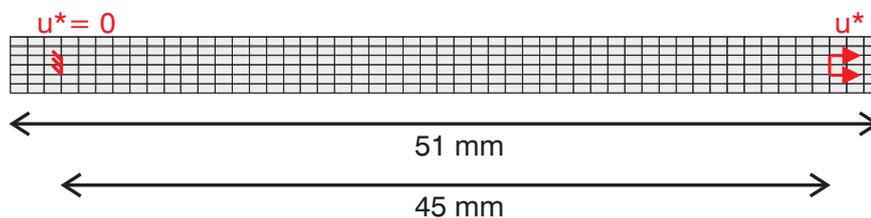


Abbildung 7.11: Zugstreifen, Randwertproblem.

Abbildung 7.13 zeigt die Beziehung zwischen Spannung und Dehnung sowie die Entwicklung der absoluten plastischen Dehnung. Die Spannung wurde dazu durch Division der aufsummierten Reaktionskräfte an den Knoten mit vorgegebener Verschiebung durch die Querschnittsfläche des Streifens von  $2.244 \text{ mm}^2$  berechnet. Die Dehnung ergibt sich durch Division der gemittelten Verschiebung durch die gedehnte Länge von  $45 \text{ mm}$ . Aufgrund der gewählten Winkelkombination  $\alpha_0$  und damit der günstigen Initialisierung der Eulerwinkel zeigt sich be-

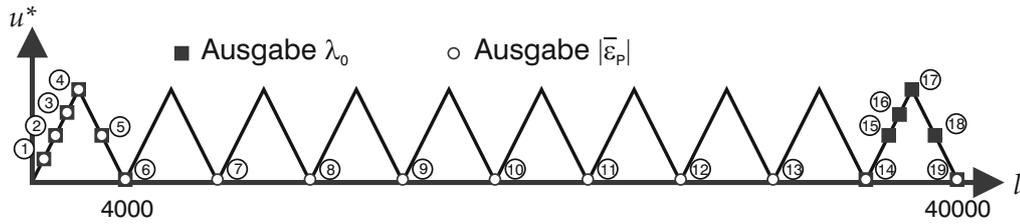


Abbildung 7.12: Zugstreifen, Modell 1b, vorgegebene Verschiebung der einzelnen Lastschritte mit Markierung der ausgegebenen Belastungsschritte.

reits auf Materialpunktebene ein Ausbleiben der Spannungserhöhung im ersten Zyklus. Ansonsten stimmt das Materialverhalten im Wesentlichen mit dem des Drahts überein. Auch anhand dieses Beispiels zeigt sich der Effekt der funktionalen Ermüdung anhand der sinkenden Plateauspannungen und der Formation der bleibenden Dehnung. Auch kommt es wie bereits im ersten Berechnungsbeispiel zum Abbau der plastischen Dehnung während der Austenitabnahme in den späteren Belastungszyklen.

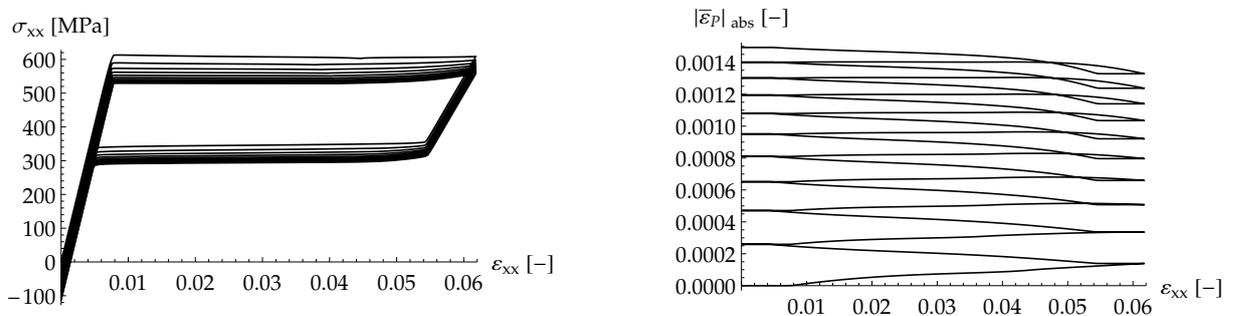


Abbildung 7.13: Zugstreifen, Modell 1b, links: Spannungs-Dehnungs-Diagramm, rechts: plastische Dehnung.

Anhand der Konturdiagramme für den Austenitgehalt des ersten und letzten Zyklus in den Abbildungen 7.14 und 7.15 wird die durch das Zyklieren unbeeindruckte, zunächst homogene und später lokalere Phasenumwandlung deutlich, die stets komplett reversibel ist, siehe ⑥ und ⑰. Diese Phasentransformation geht wiederum einher mit der Bildung der plastischen Dehnungen, die aufgrund der gekoppelten Evolutionsgleichungen aus Gleichung (4.58) in den gleichen Elementen wie die Transformation stattfindet, siehe das Konturdiagramm für den er-

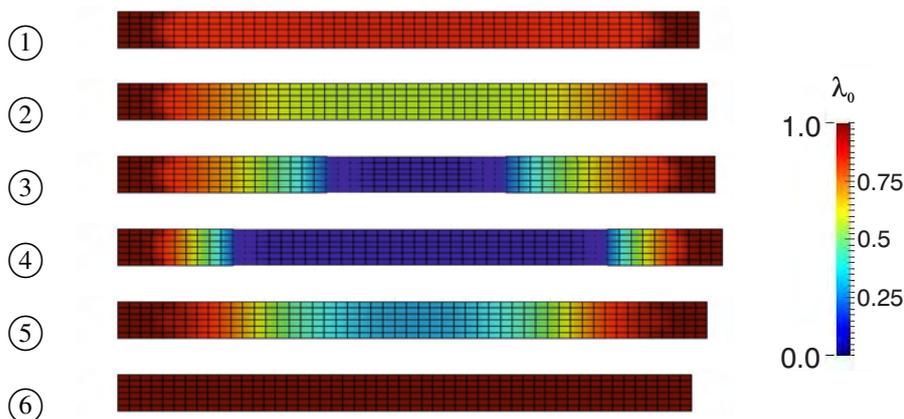


Abbildung 7.14: Zugstreifen, Modell 1b, Austenitgehalt des ersten Zyklus.

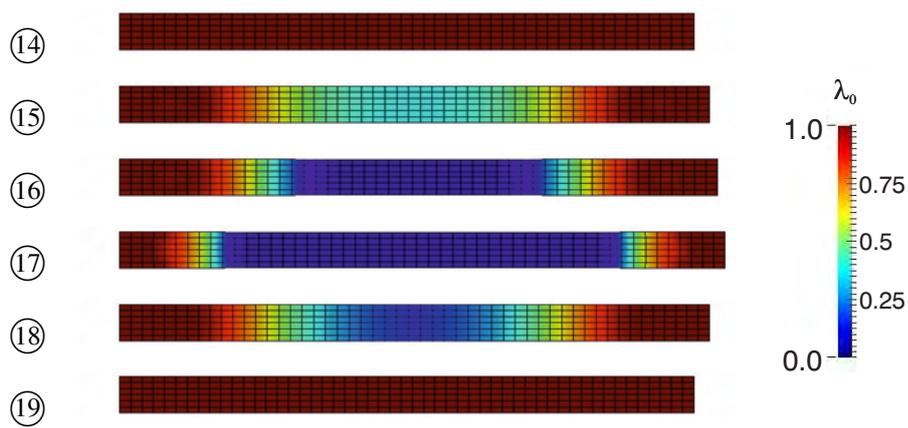


Abbildung 7.15: Zugstreifen, Modell 1b, Austenitgehalt des zehnten Zyklus.

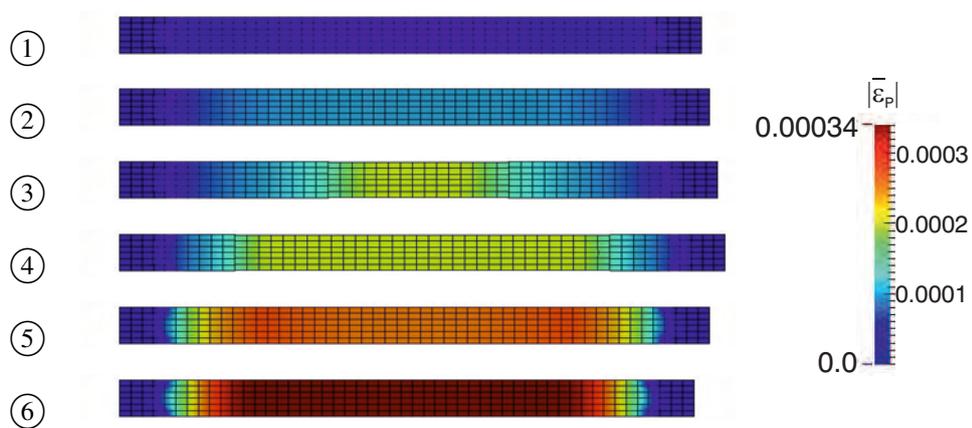


Abbildung 7.16: Zugstreifen, Modell 1b, plastische Dehnung des ersten Zyklus.

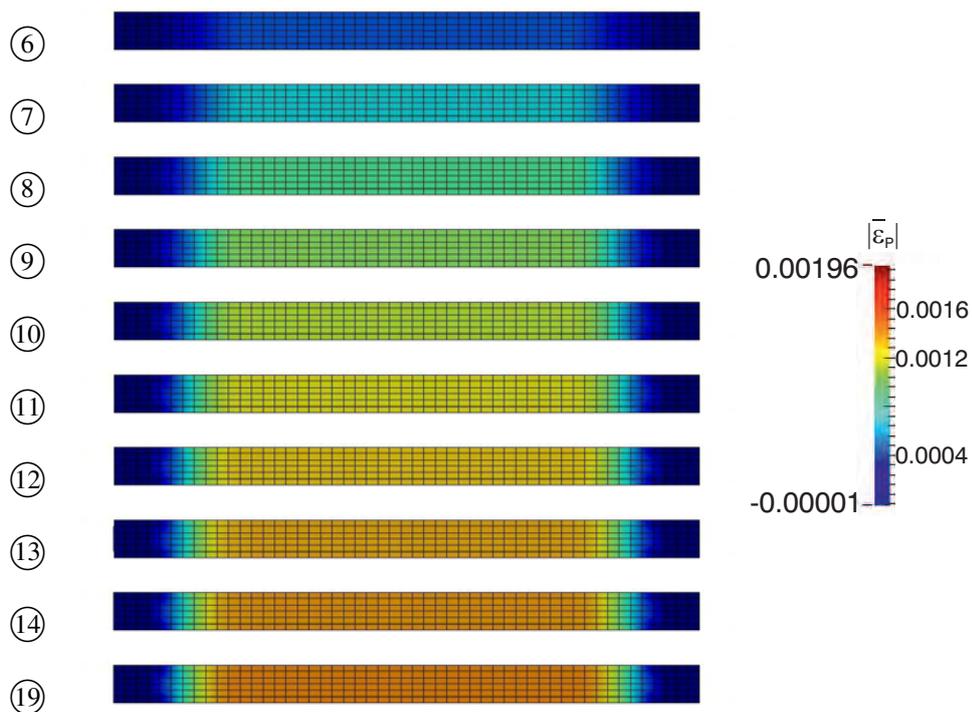


Abbildung 7.17: Zugstreifen, Modell 1b, plastische Dehnung nach den einzelnen Zyklen.

sten Zyklus in Abbildung 7.16. Ebenso wie bereits im Zugdraht jedoch im Streifen schwächer ausgeprägt zeigt sich während der Rücktransformation eine verstärkte plastische Deformation ausgehend von den Dirichlet-Rändern (5). Diese ist jedoch deutlich weniger lokalisiert ausgeprägt als im vorangegangenen Berechnungsbeispiel. Abbildung 7.17 zeigt ergänzend zum Diagramm in Abbildung 7.13 den Anstieg der plastischen Dehnung anhand eines Konturdiagramms der plastischen Dehnung nach jedem Belastungszyklus. Auch daran wird die qualitativ gleich ausgeprägte Änderung der Mikrostruktur der beiden ersten Berechnungsbeispiele deutlich.

### 7.1.3 Lochscheibe unter zyklischer Zugbeanspruchung

Das dritte Berechnungsbeispiel für das Modell mit simultaner plastischer Deformation behandelt eine Scheibe mit quadratischem Grundriss mit einer Seitenlänge von 1.0 mm und einer Dicke von 0.06 mm. In der Mitte der Scheibe befindet sich ein kreisrunder Ausschnitt mit einem Durchmesser von 0.2 mm. Der Körper wird mit Hilfe von 920 Elementen diskretisiert. Wie in Abbildung 7.18 dargestellt wird die Lochscheibe an ihrer linken Seite gehalten und an der rechten durch eine zyklisch aufgetragene Verschiebung belastet. Der Maximalwert der Verschiebung lautet 0.03 mm. Der Verlauf wird in Abbildung 7.19 dargestellt. Für die Euler-

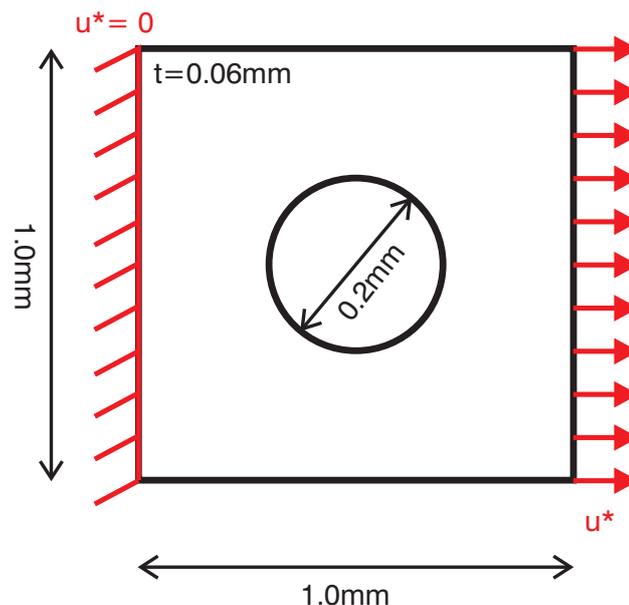


Abbildung 7.18: Lochscheibe, Randwertproblem, Waimann u. a. (2018).

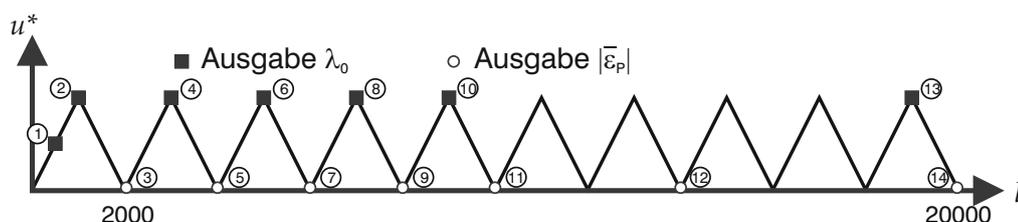


Abbildung 7.19: Lochscheibe, Modell 1b, vorgegebene Verschiebung der einzelnen Lastschritte mit Markierung der ausgegebenen Belastungsschritte.

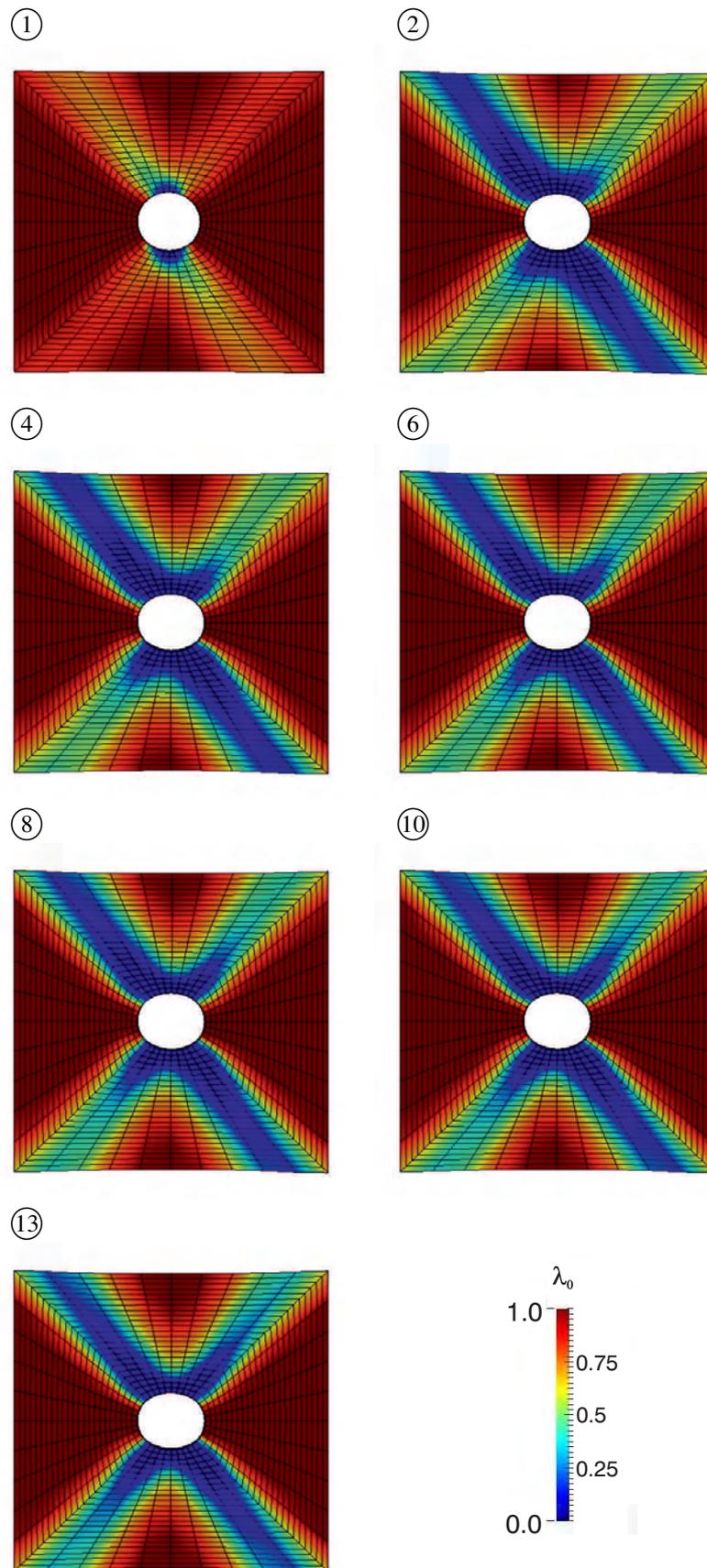


Abbildung 7.20: Lochscheibe, Modell 1b, Austenitgehalt unterschiedlicher Lastschritte.

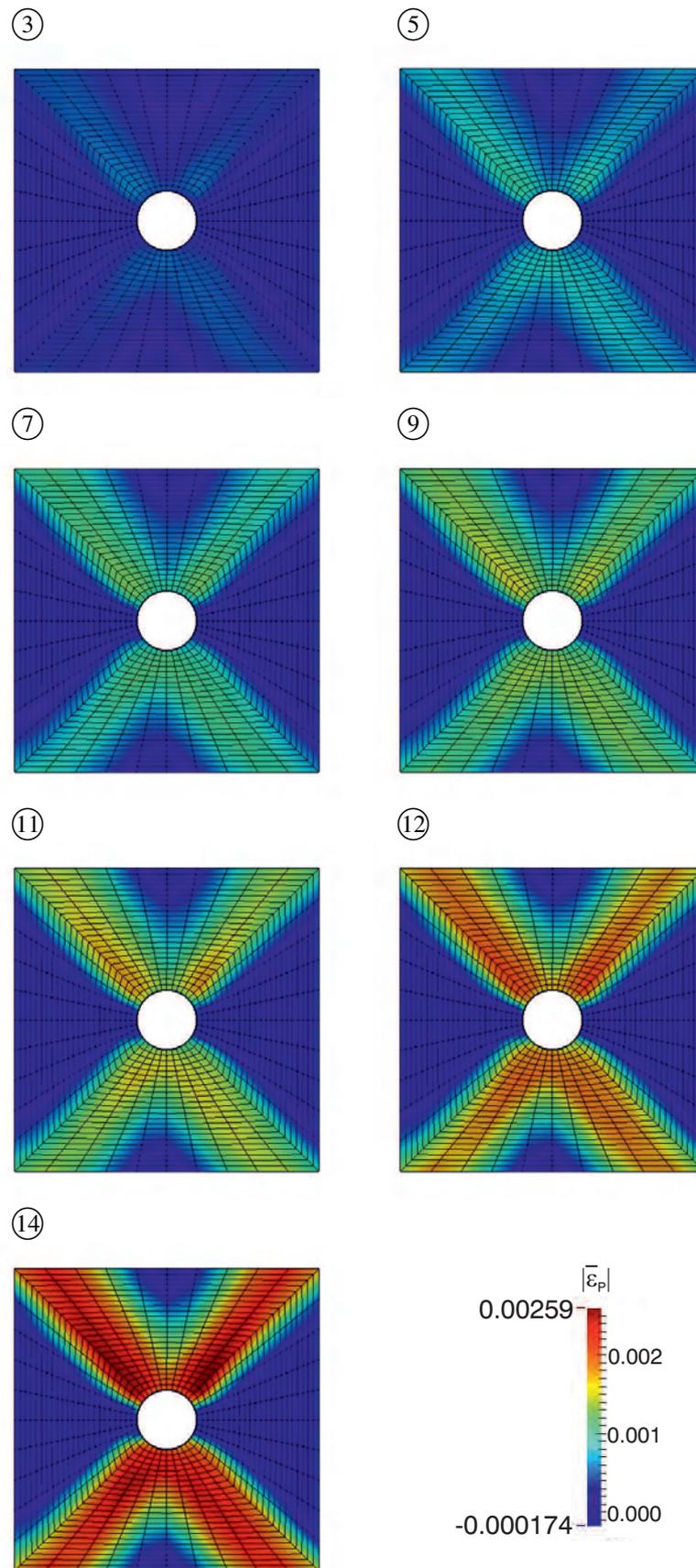


Abbildung 7.21: Lochscheibe, Modell 1b, plastische Dehnung unterschiedlicher Lastschritte.

winkel wurde die Winkelkombination  $\alpha_1$  und für den viskosen Parameter  $\Delta t_R = 0.005$  1/GPa angenommen.

Die Konturdiagramme für den Austenitgehalt und die plastische Dehnung werden für die in Abbildung 7.19 gekennzeichneten Lastschritten in den Abbildungen 7.20 und 7.21 dargestellt. Das Kraft-Verformungs-Diagramm und die qualitative Entwicklung der absoluten plastischen Dehnung werden in Abbildung 7.22 präsentiert und zeigen wie bereits die vorherigen Berechnungen eine Entwicklung bleibender Dehnungen mit einhergehender Absenkung vor allem des oberen Plateaus. Die Umwandlung von Austenit und Martensit, siehe Abbildung 7.20, tritt im

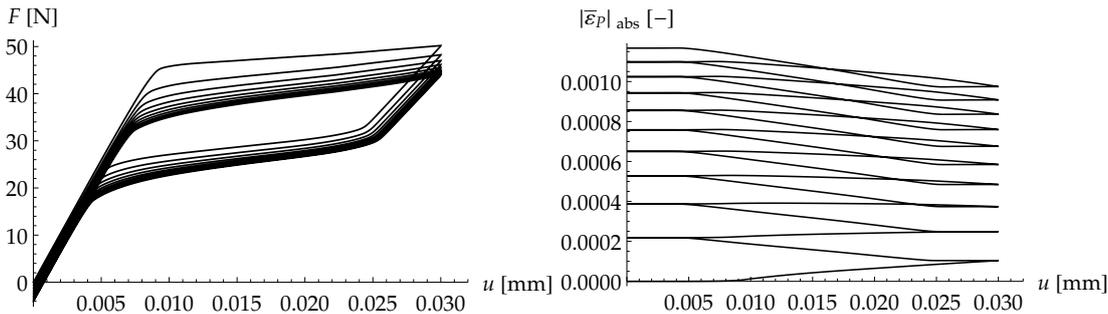


Abbildung 7.22: Lochscheibe, Modell 1b, *links*: Last-Verformungs-Diagramm, *rechts*: plastische Dehnung.

Fall der Lochscheibe deutlich lokalisierter auf als für die ersten beiden präsentierten Randwertprobleme. Nach der Initialisierung am Loch in der Mitte der Platte ① breitet sich die Phasenumwandlung punktsymmetrisch weiter in die Struktur aus ②. Mit zunehmender Zyklenzahl wird diese Punktsymmetrie immer mehr abgebaut, siehe ④, ⑥, ⑧ und ⑩, bis sich schließlich eine immer mehr bogenartige Martensitstruktur ⑬ zeigt. Der maßgebliche Grund für die Änderung der transformierenden Bereiche liegt in diesem Fall in der Initialisierung und Entwicklung der Eulerwinkel. Während die Startwerte  $\alpha_1$  eine punktsymmetrische Mikrostrukturänderung begünstigen, resultieren die sich in diesem Fall relativ langsam entwickelnden Winkel in einer zunehmend achsensymmetrischen Transformation. Diese im Vergleich zu den Drahtbeispielen in Kapitel 7.1.1 auftretende langsamere Evolution führt zu einem geringeren Spannungsunterschied zwischen dem ersten und zweiten Zyklus bzw. dem Ausbleiben der Bildung einer Spannungsspitze, vergl. Kapitel 5.1.3.

#### 7.1.4 Sinusring unter zyklischer Druckbeanspruchung

Bei dem des Weiteren betrachteten sinusförmigen Klemmring handelt es sich um ein Berechnungsbeispiel, das eine tatsächliche Anwendung für die Industrie darstellt. Das Bauteil besitzt einen inneren Radius von 2.75 mm, eine radiale Breite von 0.5 mm und eine Dicke in  $z$ -Richtung von 0.187 mm. Die Amplitude der zu einem Ring geschlossenen Sinusfunktion beträgt 0.625 mm. Abbildung 7.23 zeigt schematisch das betrachtete Randwertproblem. Die Struktur wurde zur Analyse im Rahmen der Finite-Elemente-Methode in 1890 Elemente unterteilt. Der Klemmring wird an den markierten Punkten gehalten und in zehn Lastzyklen mit jeweils 4000 Lastschritten und einer maximalen Verschiebung von  $-0.1$  mm zusammengedrückt und anschließend entlastet. Die Funktion der vorgegebenen Verschiebung wird wiederum zusammen mit den markierten Lastschritten in Abbildung 7.24 dargestellt. Als Initialisierungswinkelkombination wird  $\alpha_1$  verwendet und der Viskositätsparameter für die Entwicklung der Eulerwinkel wird mit 0.01 1/GPa angenommen. Das resultierende Last-Verformungs-Diagramm und die

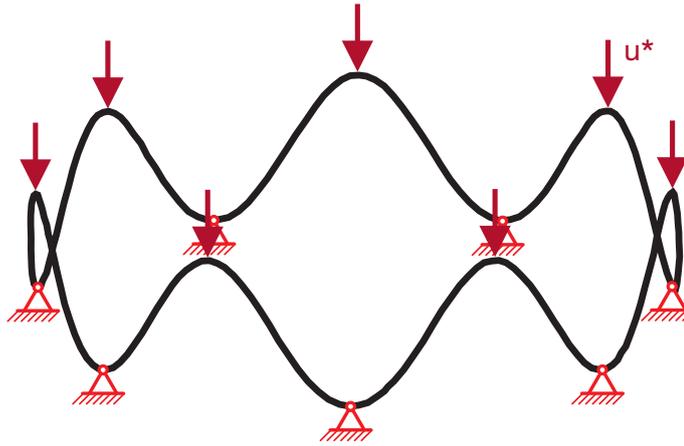


Abbildung 7.23: Sinusring, Randwertproblem, Waimann u. a. (2018).

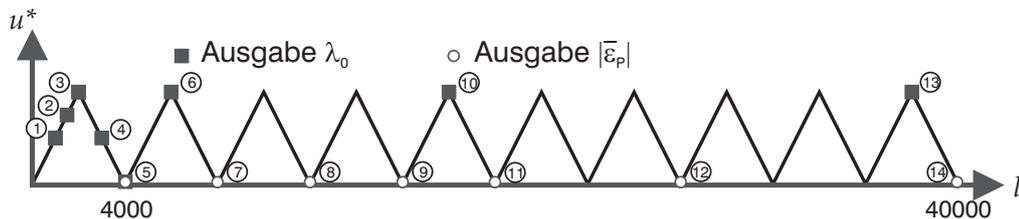


Abbildung 7.24: Sinusring, Modell 1b, vorgegebene Verschiebungen der einzelnen Lastschritte mit Markierung der ausgegebenen Belastungsschritte.

Entwicklung der absoluten plastischen Dehnung werden in Abbildung 7.25 dargestellt. Im Vergleich zum vorherigen Berechnungsbeispiel der zyklisch beanspruchten Lochscheibe zeigt sich ein besonders starker Abfall der Plateauspannungen zwischen dem ersten und zweiten Lastzyklus, der eine Folge der gewählten Startwerte und des Viskositätsparameters der Eulerwinkel ist. Nach der starken Korrektur von  $\alpha$  im ersten Lastzyklus zeigt sich die konvergierende Plateaubsenkung infolge der funktionalen Ermüdung mit gleichzeitiger Bildung plastischer Dehnungen, genau wie bereits in den vorangegangenen Berechnungsbeispielen. Auch die Kon-

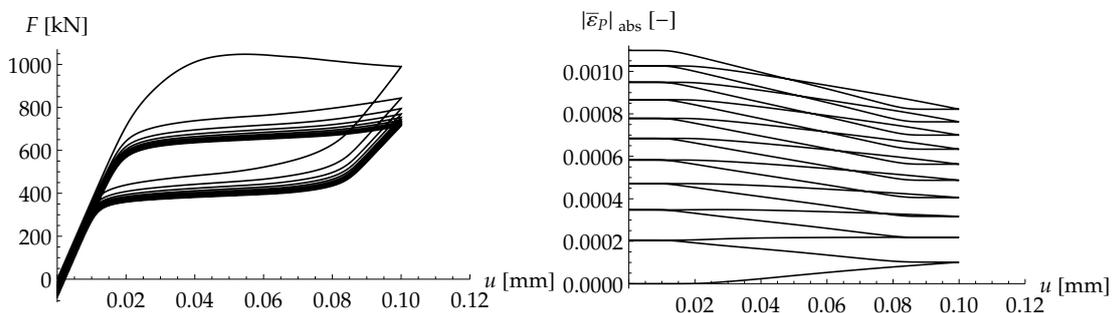


Abbildung 7.25: Sinusring, Modell 1b, links: Last-Verformungs-Diagramm, rechts: plastische Dehnung.

turdiagramme – für den Austenitgehalt in Abbildung 7.26 und für die plastische Dehnung in Abbildung 7.27 – zeigen die simultane Entwicklung der beiden mikrostrukturellen Effekte. Die Phasentransformation und somit auch die plastische Deformation beginnen dabei in der unmittelbaren Nähe der Dirichlet-Ränder und breiten sich von dort aus weiter in den Ring aus ①-③. Diese stark ausgeprägten martensitischen Fronten ziehen sich ebenso bei der Entlastung

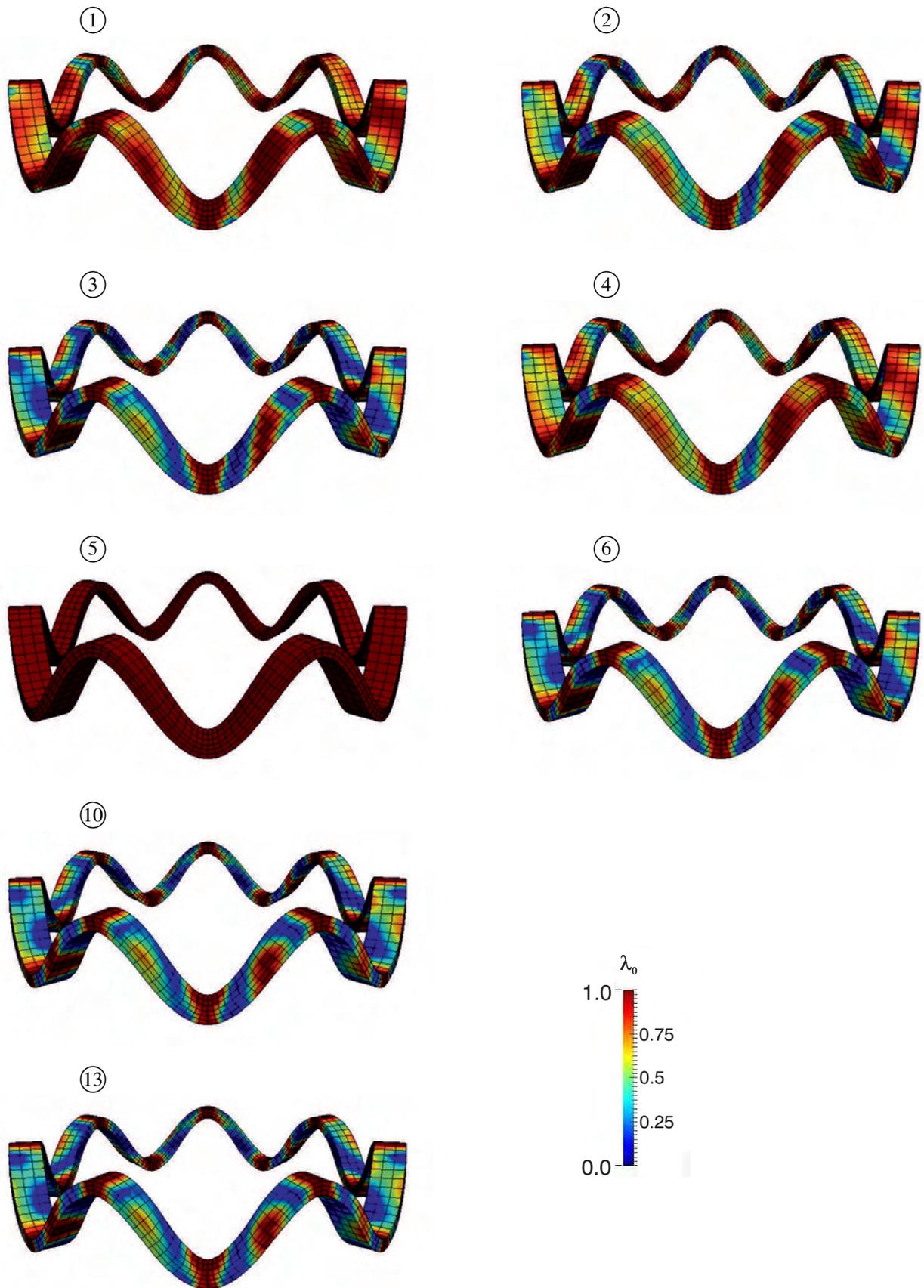


Abbildung 7.26: Sinusring, Modell 1b, Austenitgehalt unterschiedlicher Lastschritte.

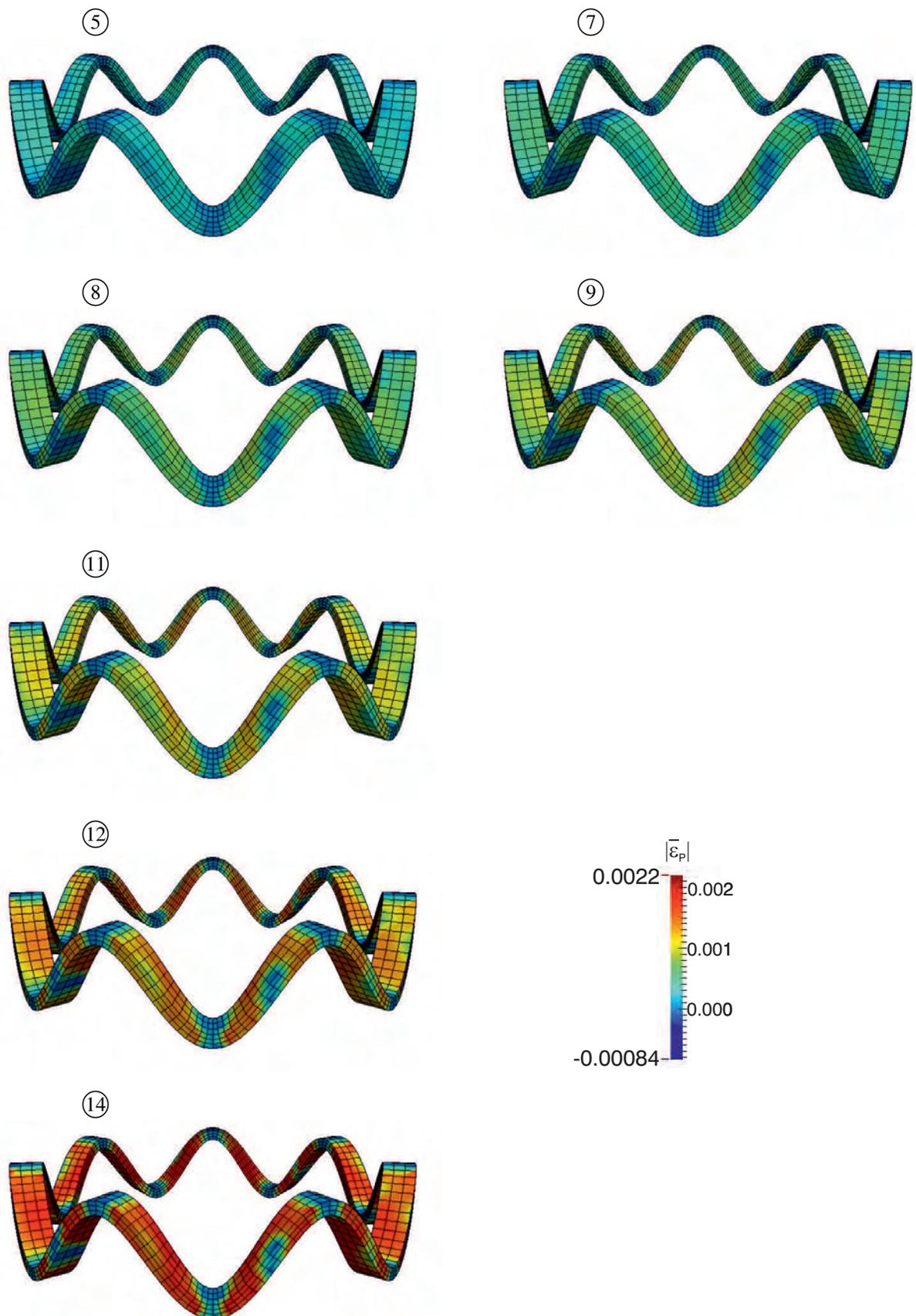


Abbildung 7.27: Sinusring, Modell 1b, plastische Dehnung unterschiedlicher Lastschritte.

aus dem Bauteil heraus ④ bis wieder ein vollständig austenitischer Zustand vorliegt ⑤). Zum Zeitpunkt der maximalen Belastung der späteren Zyklen zeigt sich, dass der Bereich der keine Mikrostrukturänderung erfährt mit jedem Belastungsdurchlauf geringer wird ③, ⑥, ⑩ und ⑬). Die Bildung der plastischen Dehnung findet aufgrund der gekoppelten Evolutionsgleichungen wiederum in den gleichen Bereichen wie die Phasenumwandlung statt, siehe Abbildung 7.27.

### 7.1.5 Feder unter zyklischer Zugbeanspruchung

Bei dem letzten Randwertproblem, das für das Modell mit simultaner Bildung plastischer Dehnungen betrachtet wird, handelt es sich um das stärker dreidimensional ausgeprägte Beispiel einer Feder. Die Feder der Länge 21.8 mm und mit dem Durchmesser 6 mm besteht aus einem Draht des Durchmessers 2 mm. Geometrie und Randbedingungen werden in Abbildung 7.28 dargestellt. Das Bauteil wird gemäß der in Abbildung 7.29 präsentierten Verschiebungsfunktion zyklisch bis zu einer maximalen Verschiebung von 12 mm belastet. Die Konturdiagramme

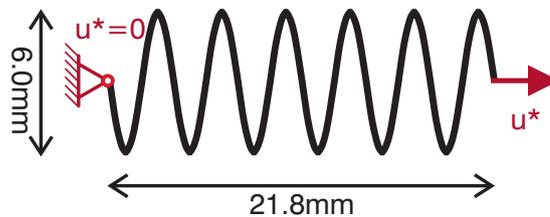


Abbildung 7.28: Feder, Randwertproblem, Waimann u. a. (2018).

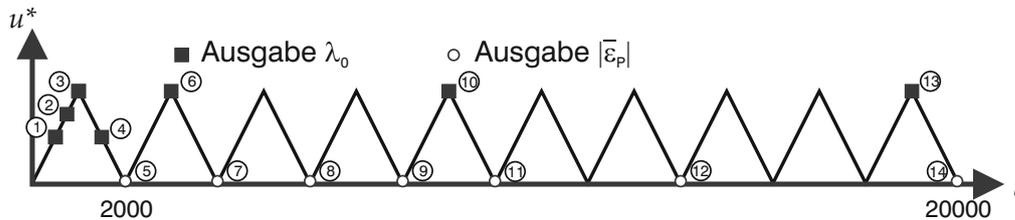


Abbildung 7.29: Feder, Modell 1b, vorgegebene Verschiebungen der einzelnen Lastschritte mit Markierung der ausgegebenen Belastungsschritte.

für die Austenitentwicklung und die plastische Deformation in den Abbildungen 7.30 und 7.31 zeigen, dass die Mikrostrukturänderung aufgrund der geringeren Belastung nur auf einen kleinen Bereich der Feder beschränkt ist. Die Phasentransformation wird im Inneren der Feder initialisiert ① und breitet sich mit fortschreitender Belastung auf äußere Bereiche aus ②-③), um diese mit einsetzender Rücktransformation während der Entlastungsphase wieder zu verlassen ④). Betrachtet man den Lastschritt maximaler Belastung späterer Zyklen in ⑥, ⑩ und ⑬ zeigt sich, dass die zunehmende Zyklenzahl und gebildete Menge plastischer Dehnungen keinen wesentlichen Einfluss auf die transformierenden Regionen hat. In eben diesen Regionen findet die gekoppelte plastische Deformation statt, die im Beispiel der Feder ebenfalls stark lokalisiert stattfindet und dementsprechend hauptsächlich im Inneren der Feder. Das resultierende Last-Verformungs-Diagramm in Abbildung 7.32 (links) zeigt wiederum den Effekt der funktionalen Ermüdung: zum einen verschiebt sich die Hysterese zu betragslich geringeren Spannungen, zum anderen bildet sich eine bleibende Dehnung, die im Zusammenhang mit der in Abbildung

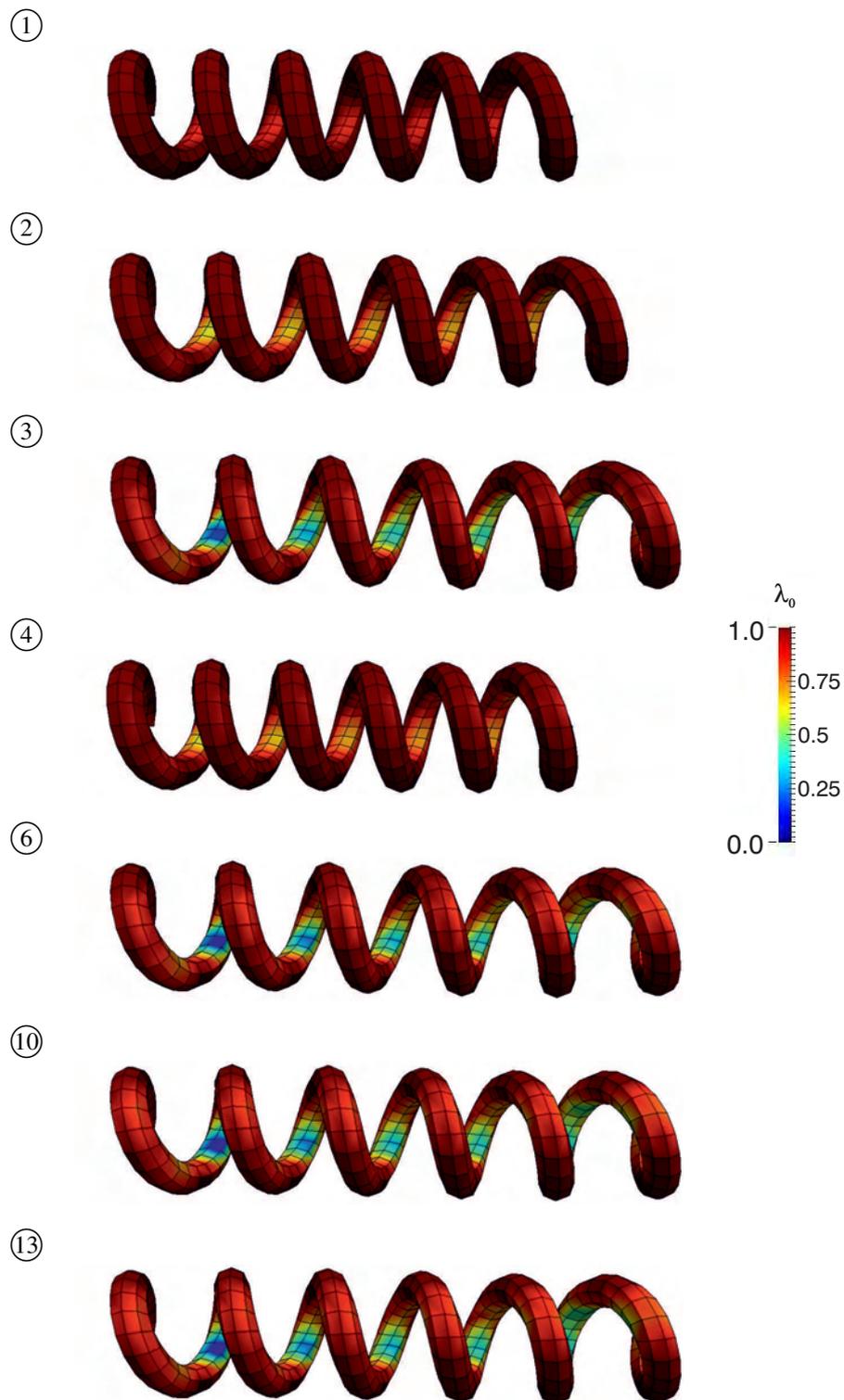


Abbildung 7.30: Feder, Modell 1b, Austenitgehalt unterschiedlicher Lastschritte.

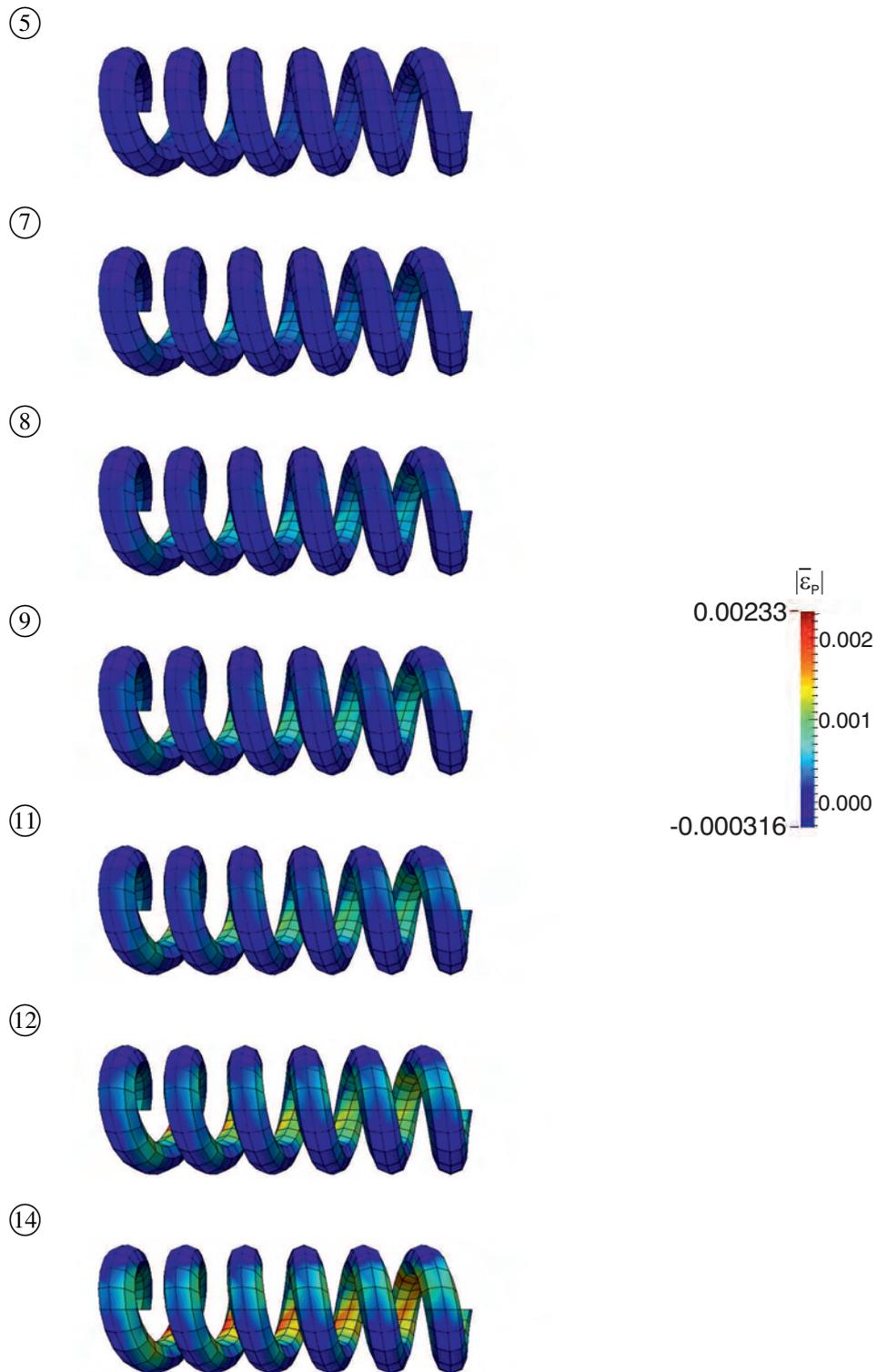


Abbildung 7.31: Feder, Modell 1b, plastische Dehnung nach den einzelnen Zyklen.

7.32 (*rechts*) dargestellten und insgesamt mit jedem Zyklus wachsenden absoluten plastischen Dehnung steht.

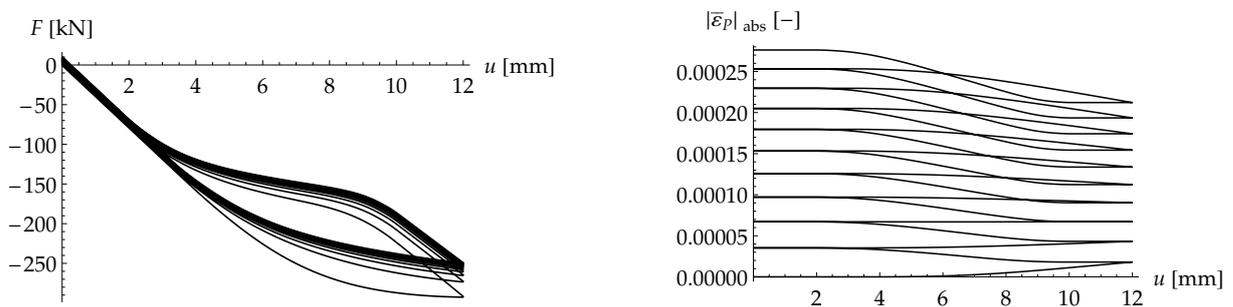


Abbildung 7.32: Feder, Modell 1b, *links*: Last-Verformungs-Diagramm, *rechts*: plastische Dehnung.

## 7.2 Finite-Elemente-Berechnungen für Modell 2a

### 7.2.1 Draht unter zyklischer Zugbeanspruchung

Genau wie für Modell 1b wird auch für das ratenunabhängige Modell mit simultaner Entwicklung irreversiblen Martensits der zyklizierte Zugdraht als erstes Berechnungsbeispiel gewählt. Die sich an den experimentellen Untersuchungen nach Wagner (2005) orientierenden Abmaße wurden bereits in Kapitel 7.1.1 verwendet, siehe Abbildung 7.1. Die Verschiebungsfunktion ist in Abbildungen 7.33 abgebildet und beinhaltet wieder die linear in je 2000 Schritten aufgetragene und zurückgebildete maximale vorgegebene Verschiebung von  $u^* = 2.77875$  mm. Die folgenden Darstellungen und Ausführungen wurden im Wesentlichen bereits in Waimann u. a. (2018) veröffentlicht. Abbildung 7.33 gibt neben der linearen Verschiebungsfunktion einen Überblick

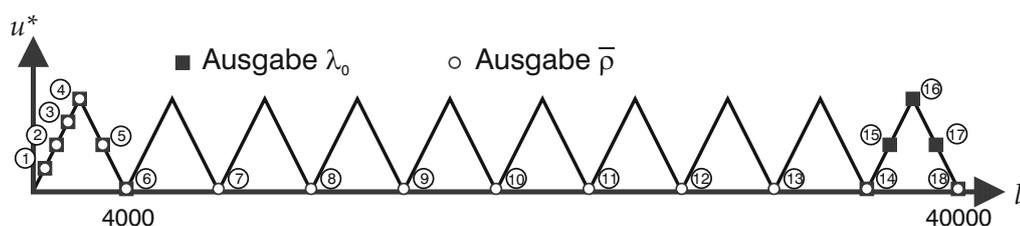


Abbildung 7.33: Zugdraht, Modell 2a, vorgegebene Verschiebung der einzelnen Lastschritte mit Markierung der ausgegebenen Belastungsschritte.

über die Lastschritte, für die Konturdiagramme für die Entwicklung des Austenitgehalts  $\lambda_0$  und des totalen irreversiblen Anteils an Martensit  $\bar{\rho}$  präsentiert werden. Diese erste Berechnung wird wieder für die zwei unterschiedlich feinen Netze mit 612 bzw. 1020 Elementen durchgeführt. Im Rahmen dieser Arbeit nicht dargestellte Netzverfeinerungen in der Querschnittsebene ergaben keinerlei Einfluss auf das Materialverhalten, weshalb auf eine Darstellung verzichtet wird. Für die Eulerwinkel wurde als Startwert die Winkelkombination  $\alpha_1 = \{2.6260, 1.8406, 5.9814\}$  gewählt und ein Viskositätsparameter von  $\Delta t_R = 0.003$  1/GPa angenommen.

Abbildung 7.34 zeigt jeweils für beide verwendeten Netze die Spannungs-Dehnungs-Relation sowie den Mittelwert des im gesamten Körper vorhandenen irreversiblen Martensits  $\bar{\rho}_{abs}$ .

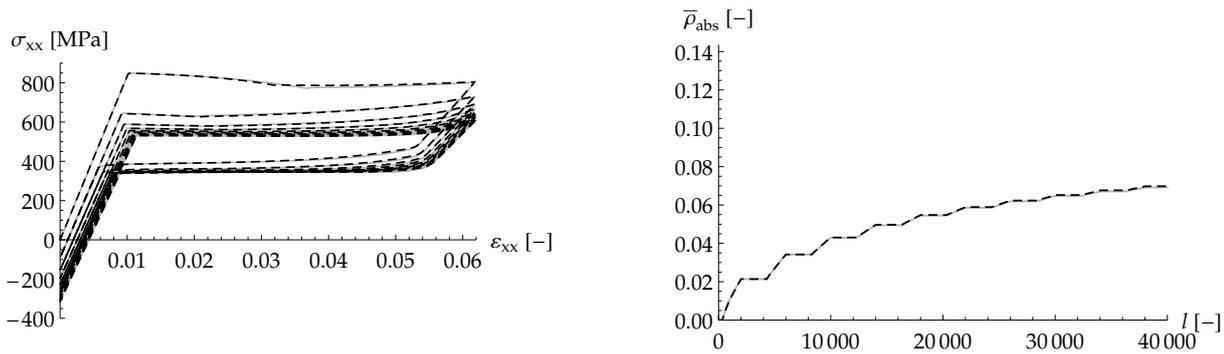


Abbildung 7.34: Zugdraht mit zwei unterschiedlichen Netzen (612 (strichliert) und 1020 Elemente (grau)), Modell 2a, *links*: Spannungs-Dehnungs-Diagramm, *rechts*: irreversibler Martensit, Waimann u. a. (2018).

Genau wie auf Materialpunktebene ist das Materialmodell auch im Rahmen von Finite-Elemente-Berechnungen in der Lage, die funktionale Ermüdung von Formgedächtnislegierungen abzubilden. Die resultierenden Spannungs-Dehnungs-Kurven zeigen das qualitative Verhalten des im Experiment zyklisch beanspruchten Drahts. Während des Zyklierens sinkt vor allem das obere Plateau mit zunehmender Zyklenzahl ab. Durch die Änderung der Eulerwinkel kommt es – genau wie auf Materialpunktebene, wo sich dieser Effekt durch eine Spannungsspitze im ersten Zyklus deutlich macht – auch hier zu einem deutlichen Spannungsabfall zwischen erstem und zweitem Zyklus infolge der Orientierungsanpassung. Des Weiteren wird der Effekt der zyklischen Spannungsreduktion begleitet von einer sich bildenden bleibenden Dehnung, die der irreversiblen Transformationsdehnung entspricht. Diese ist ein Resultat der sich bildenden irreversiblen martensitischen Volumenfraktion, die in Abbildung 7.34 dargestellt wird. Darin ist der stufenartige Verlauf der alleinigen Stabilisierung des Martensit während der Transformation von Austenit zu Martensit geschuldet. Auch dieser Effekt konnte bereits auf Materialpunktebene beobachtet werden, genau wie die auch hier ersichtliche Konvergenz der auftretenden Phänomene. Ein Vergleich zwischen den Ergebnissen für die beiden unterschiedlichen Netze zeigt des Weiteren, abgesehen von einer minimalen Abweichung im  $\sigma$ - $\epsilon$ -Diagramms während der Belastungsphase des ersten Zyklus, identische Verläufe, sodass von Netzunabhängigkeit ausgegangen werden kann.

Zum näheren Verständnis der mikrostrukturellen Veränderung innerhalb des betrachteten Drahtes werden nun zunächst die Konturdiagramme des Austenitgehalts  $\lambda_0$  und des lokalen irreversiblen Martensitanteils  $\bar{\rho}$  für den ersten Zyklus im Draht dargestellt. Abbildung 7.35 zeigt die Entwicklung des Austenits im ersten Belastungszyklus für das grobe Netz.

Durch die vorgegebenen Randbedingungen entsteht im zu Beginn rein austenitischen Stab ein nahezu homogener Spannungszustand, wodurch es zu einer zunächst homogenen Initialisierung der Phasenumwandlung von Austenit zu Martensit im gesamten Stab kommt ①. Durch den Einfluss der Lagerungsbedingungen sowie den die Lokalisierung begünstigenden linearen Zusammenhang zwischen dem Faktor  $f$  und dem totalen Wert des irreversiblen Martensits aus Gleichung (4.85) beginnt dann schließlich lokalisiert in der Mitte des Stabs eine stärker ausgeprägte Phasentransformation, die sich mit zunehmender Belastung auf den kompletten gedehnten Teil des Stabes ausweitet ②-④. Diese Lokalisierung der Phasentransformation stimmt mit den experimentell beobachteten sich im Material ausbreitenden Phasenfronten überein, siehe beispielsweise Schäfer u. Wagner (2009) und Shaw u. Kyriakides (1997). Die Entlastungsphase bewirkt eine Rückumwandlung des Martensits ⑤ und schließlich, wenn die vorgegebene Ver-

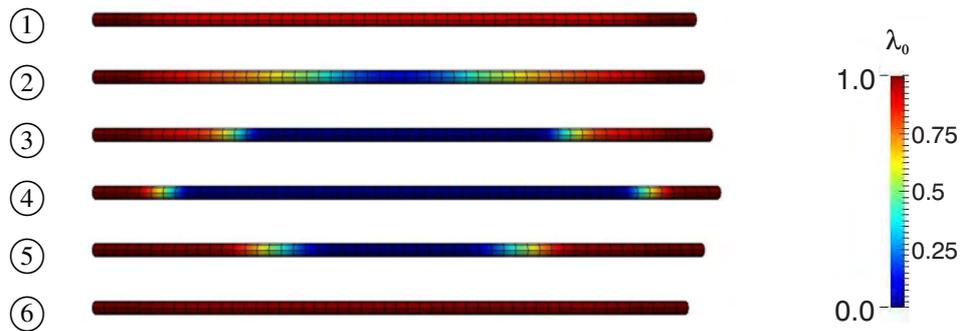


Abbildung 7.35: Zugdraht, Modell 2a, Austenitgehalt des ersten Zyklus, 612 Elemente, Waimann u. a. (2018).

schiebung wieder den Wert 0 annimmt, ein beinahe rein austenitisches Material ⑥. Begleitet wird diese reversible Transformation von der Bildung irreversiblen Martensits, siehe Abbildung 7.36. Durch die anteilige Umwandlung des Austenits in stabilisierten Martensit ergibt sich der Zuwachs an irreversiblen Phasen folglich auch in den gleichen Bereichen wie die Abnahme des Austenits. Hieran wird auch erneut die allein während der Belastungsphase zunehmende und schließlich auch bei vollständiger Entlastung bleibende Martensitstabilisierung deutlich.

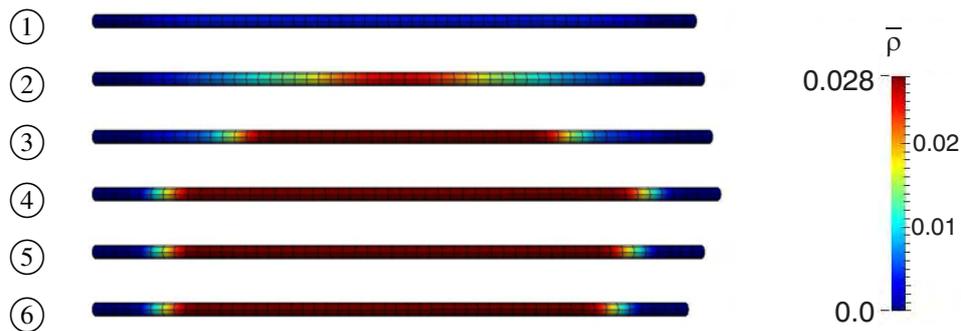


Abbildung 7.36: Zugdraht, Modell 2a, irreversibler Martensitgehalt des ersten Zyklus, 612 Elemente, Waimann u. a. (2018).

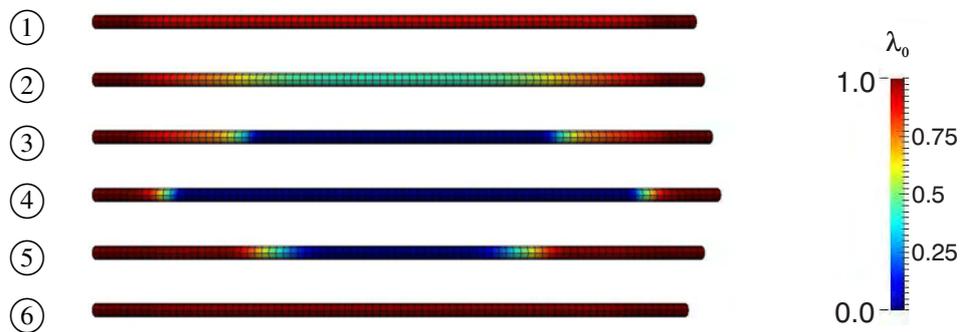


Abbildung 7.37: Zugdraht, Modell 2a, Austenitgehalt des ersten Zyklus, 1020 Elemente, Waimann u. a. (2018).

Die nun folgenden Ergebnisse für den ersten Zyklus des feineren Netzes werden in den Abbildungen 7.37 und 7.38 dargestellt. Der Vergleich zeigt konsequenterweise für sowohl die Austenitentwicklung als auch die Bildung der irreversiblen Fraktion eine zu Beginn etwas homogenere Entwicklung ② und steht somit in Einklang mit den zuvor benannten leichten Abweichungen innerhalb des Spannungs-Dehnungs-Diagramms. Diese Unterschiede in der Entwicklung

der Mikrostruktur im Vergleich zum größeren Netz sind jedoch mit fortschreitender Phasentransformation nicht mehr erkennbar.

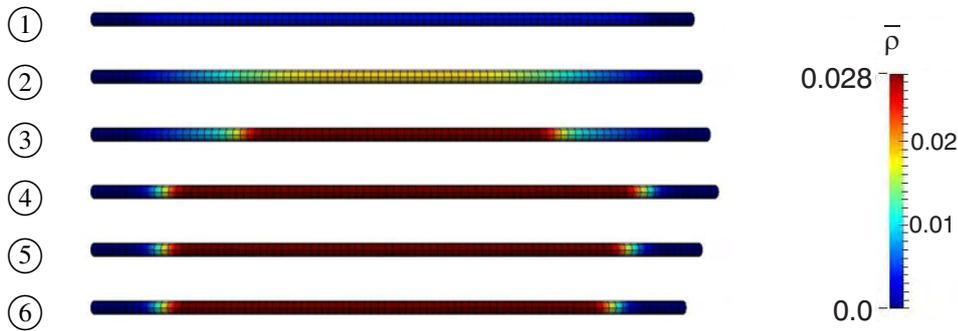


Abbildung 7.38: Zugdraht, Modell 2a, irreversibler Martensitgehalt des ersten Zyklus, 1020 Elemente, Waimann u. a. (2018).

Der Vergleich der Konturplots des Austenitgehalts für den letzten Zyklus in den Abbildungen 7.39 und 7.40 zeigt ebenso zusammen mit den Diagrammen in Abbildung 7.34, dass diese Abweichungen ausschließlich auf den ersten Zyklus beschränkt und somit bezüglich der Netzabhängigkeit gute Ergebnisse erzielt werden können.

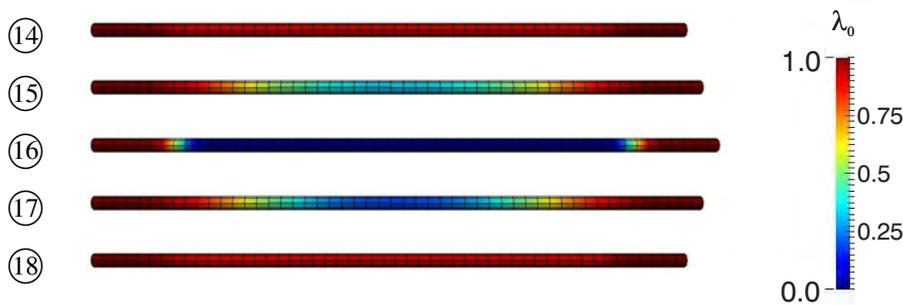


Abbildung 7.39: Zugdraht, Modell 2a, Austenitgehalt des zehnten Zyklus, 612 Elemente, Waimann u. a. (2018).

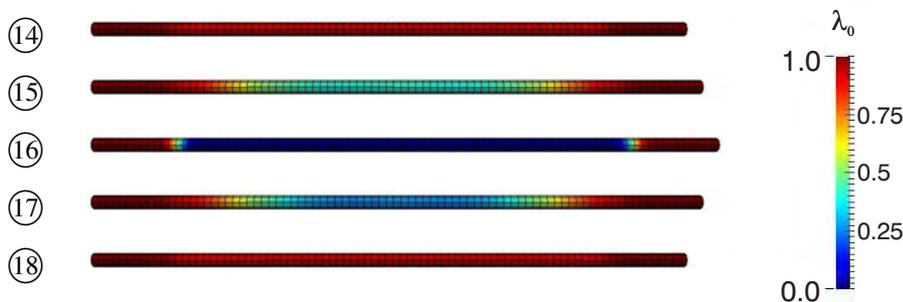


Abbildung 7.40: Zugdraht, Modell 2a, Austenitgehalt des zehnten Zyklus, 1020 Elemente, Waimann u. a. (2018).

Auch die in den Abbildungen 7.41 und 7.42 dargestellte Entwicklung des Martensits nach jedem der zehn Belastungszyklen bestätigt die beobachtete Netzunempfindlichkeit. Die Menge an irreversiblen Martensit nimmt in jedem Zyklus mit zunehmend konvergierender Tendenz zu, vgl. 7.34 (rechts).

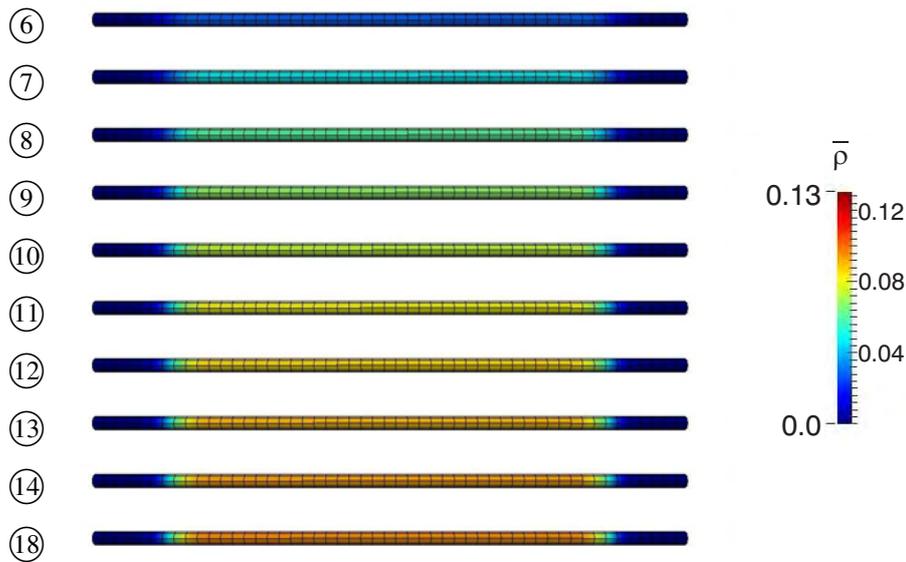


Abbildung 7.41: Zugdraht, Modell 2a, irreversibler Martensitgehalt nach den einzelnen Zyklen, 612 Elemente, Waimann u. a. (2018).

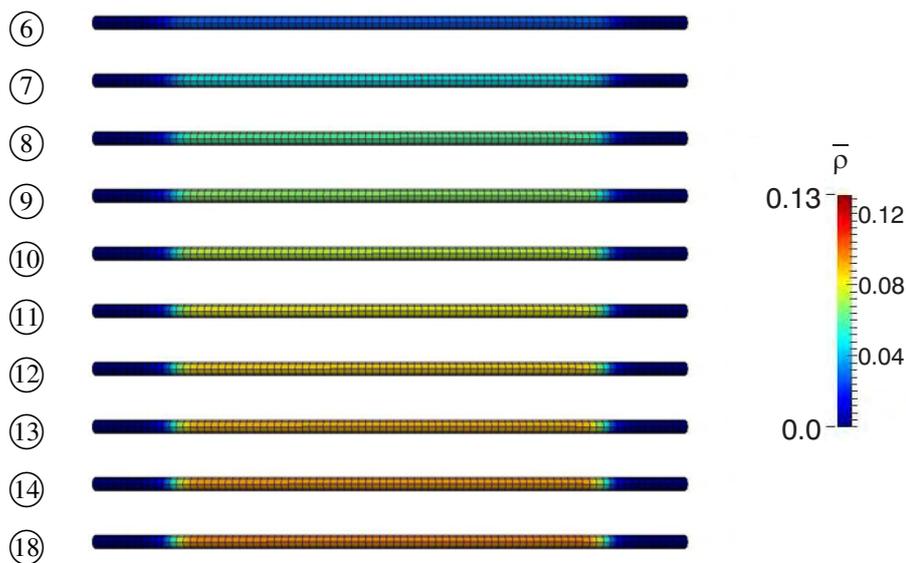


Abbildung 7.42: Zugdraht, Modell 2a, irreversibler Martensitgehalt nach den einzelnen Zyklen, 1020 Elemente, Waimann u. a. (2018).

Wie bereits im Zusammenhang der Materialpunktsergebnisse gezeigt, kann der Einfluss der Eulerwinkeländerung durch eine gute Wahl der Initialisierungswinkel beschränkt werden. Um die Simulationsergebnisse mit dem in Wagner (2005) gezeigten Versuch zu vergleichen, werden daher die Startwerte der Eulerwinkel mit  $\alpha_0 = \{0.0, \Pi/2.0, 0.0\}$  angenommen, siehe hierzu auch Kapitel 5.2. Abbildungen 7.43 und 7.44 stellen die Ergebnisse der Simulation mit 50 Lastzyklen und die experimentellen Daten für 20 Lastzyklen gegenüber.

Das Spannungs-Dehnungs-Diagramm der Simulation zeigt eine deutlich verringerte eulerwinkelbedingte Absenkung der Plateaus zwischen erstem und zweitem Zyklus. Der Vergleich mit dem Experiment zeigt, dass sich die Plateaus auf das gleiche Spannungsniveau absenken und auch die bleibende Dehnung im Vergleich gute Ergebnisse erzielen kann. Jedoch konvergiert das Materialmodell deutlich langsamer gegen den stabilisierten Zustand als das tatsächliche

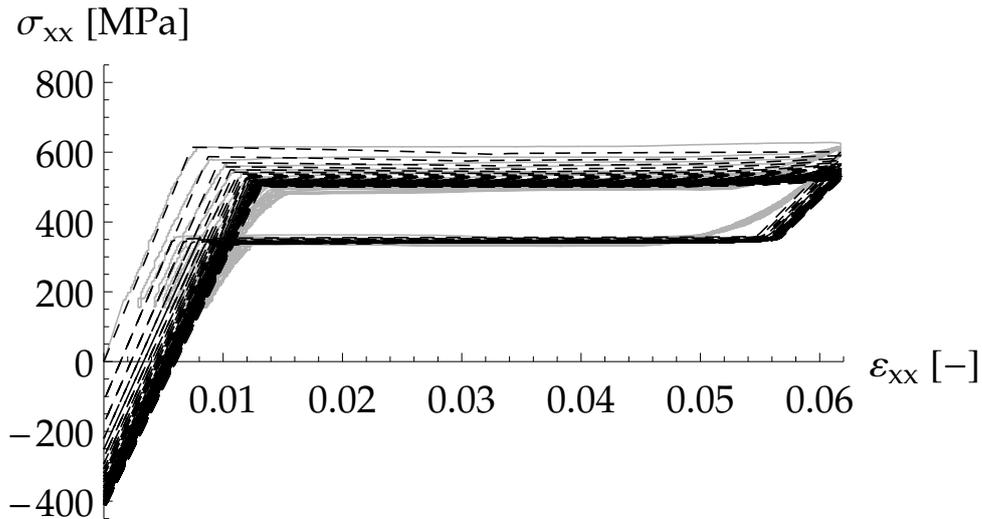


Abbildung 7.43: Zugdraht, Modell 2a, Vergleich zwischen Simulation (strichliert) und Experiment Wagner (2005) (grau), Spannungs-Dehnungs-Diagramm, Waimann u. a. (2018).

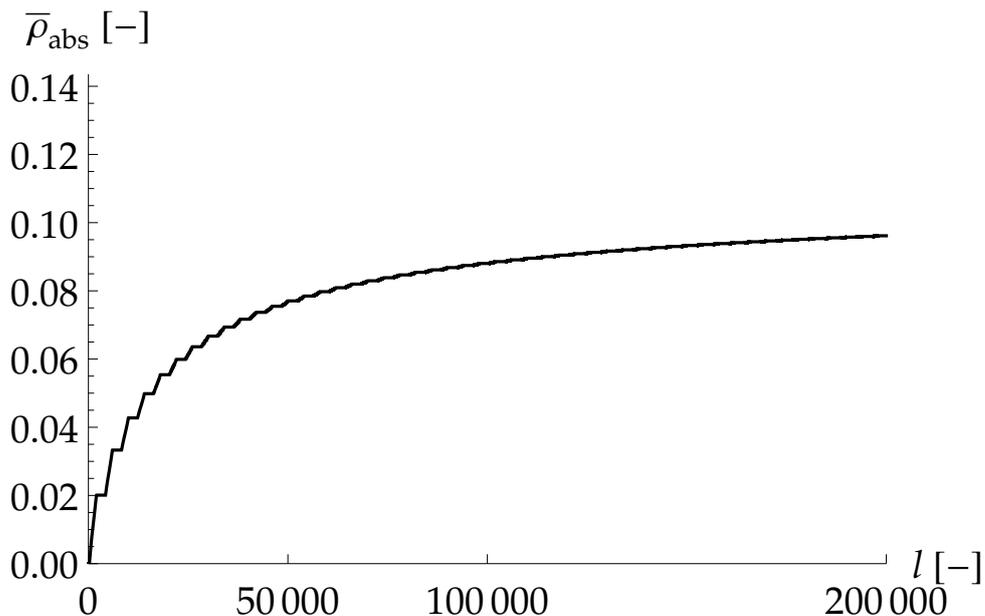


Abbildung 7.44: Zugdraht, Modell 2a, Vergleich zwischen Simulation und Experiment Wagner (2005), irreversibler Martensit über den Lastschritten (Simulation), Waimann u. a. (2018).

che Material im Experiment. Gerade in späteren Lastzyklen der Simulation ist die Bildung irreversiblen Martensits und die damit verbundene Absenkung der Spannungsplateaus verglichen mit dem Experiment zu gering. Eine mögliche Erklärung für die langsamere funktionale Degradierung sind im Materialmodell nicht berücksichtigte lokale Defekte des Ausgangsmaterials, wie beispielsweise Einschlüsse, Versetzungen oder eine vorhandene Textur. Diese Inhomogenitäten sind im Versuch, auch bedingt durch den Herstellungsprozess der FGL-Bauteile, nicht zu vermeiden. Sie können somit zu einer lokalen Erhöhung des Spannungsfeldes sorgen und dadurch verantwortlich für eine früher einsetzende Transformation sein. Eine nähere Betrachtung

des ersten oberen Spannungsplateaus zeigt weiterhin, dass die Spannung schon während des ersten Lastzyklus absinkt. Auch dieser Effekt ist durch die mangelnde Lokalität der Simulation zu erklären. Somit findet, bevor sich eine klare Martensitfront im Stab bewegt, zunächst eine homogenere bzw. auf den mittleren Bereich des Stabes beschränkte Phasentransformation statt. Solange keine klare Front weiter in das rein austenitische Material wandert, erfährt das Material schon in diesem Lastzyklus die Auswirkungen des stabilisierten Martensits und – damit verbunden – des Faktors  $f$ . Die Phasentransformation von Austenit zu Martensit wird somit bereits im ersten Zyklus favorisiert. Die Abbildung 7.45 zeigt das Spannungs-Dehnungs-Diagramm für das grobe Netz mit leicht verringertem Querschnitt in der Mitte des Stabes. Eine Initialisierung

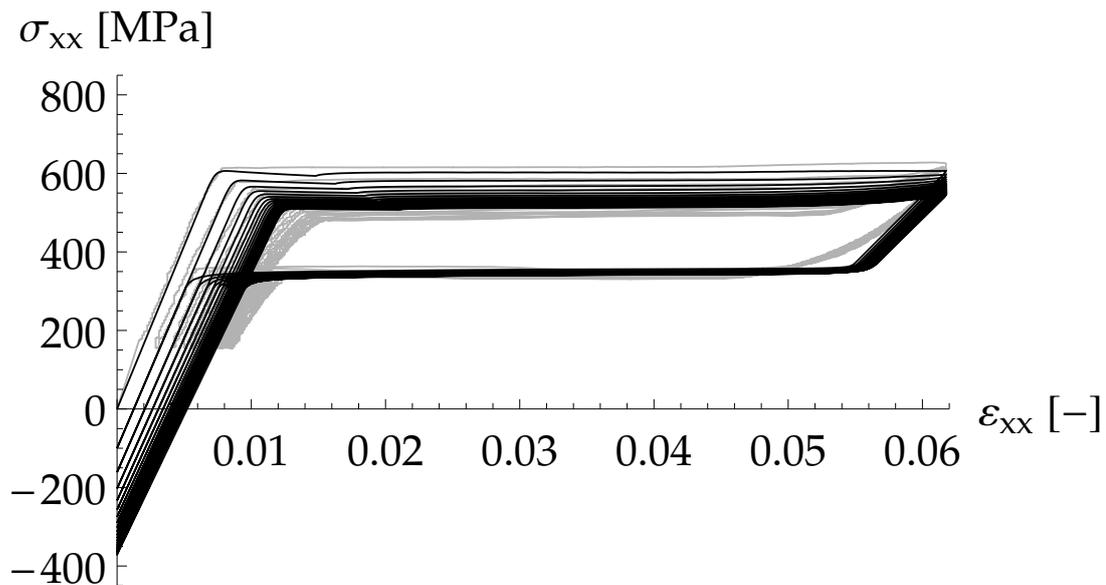


Abbildung 7.45: Zugdraht mit in seiner Mitte verringertem Querschnitt, Modell 2a, Vergleich zwischen Simulation (strichliert) und Experiment Wagner (2005) (grau), Spannungs-Dehnungs-Diagramm.

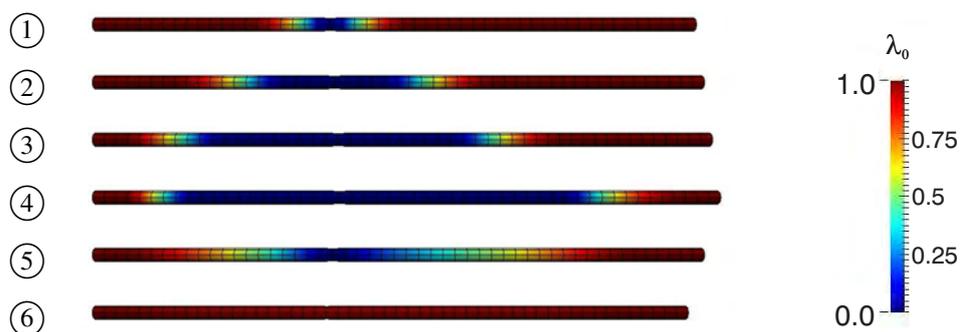


Abbildung 7.46: Zugdraht mit in seiner Mitte verringertem Querschnitt, Modell 2a, Austenitgehalt des ersten Zyklus, 612 Elemente.

der Martensitbildung wird somit durch die erhöhte Spannung an der Einschnürung an dieser Stelle begünstigt, siehe hierzu die Konturdiagramme des Austenitgehalts im ersten Zyklus in Abbildung 7.46. Es zeigt sich, dass es durch diese geometrisch erzwungene Lokalisierung nun nach einer deutlich kürzeren Absenkung innerhalb des ersten Zyklus zu einer Stabilisierung der Plateauspannung kommt. Der Effekt der funktionalen Degradierung innerhalb der simulierten 20 Lastzyklen ist jedoch auch hier nicht so stark ausgeprägt wie im Experiment Wagner (2005).

Die letzte Berechnung für den Draht untersucht nun den Einfluss unterschiedlicher maximaler Verschiebungen während des Zyklrierens. Experimentelle Untersuchungen dazu finden sich ebenfalls in Wagner (2005). Diese Experimente zeigen, dass eine nach einigen Lastzyklen durchgeführte Erhöhung der maximalen aufgetragenen Verschiebung zu einem Wiederanstieg des Plateaus auf das Ausgangsniveau führt, da dadurch Bereiche des Bauteils zum ersten Mal eine Phasentransformation erfahren. Um diesen Versuch abzubilden, wurde der Draht mit grobem Netz, wie in Abbildung 7.47 dargestellt, zunächst in vier Lastzyklen bis zu einer maximalen Verschiebung von  $u^* = 1.66725 \text{ mm} = 60\% u_{\max}^*$  und anschließend zweimal bis zum ursprünglichen Wert von  $u_{\max}^* = 2.77875 \text{ mm}$  gezogen.

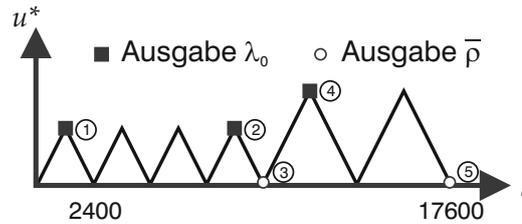


Abbildung 7.47: Zugdraht mit unterschiedlichen maximalen Verschiebungen, Modell 2a, vorgegebene Verschiebung der einzelnen Lastschritte mit Markierung der ausgegebenen Belastungsschritte, Waimann u. a. (2018).

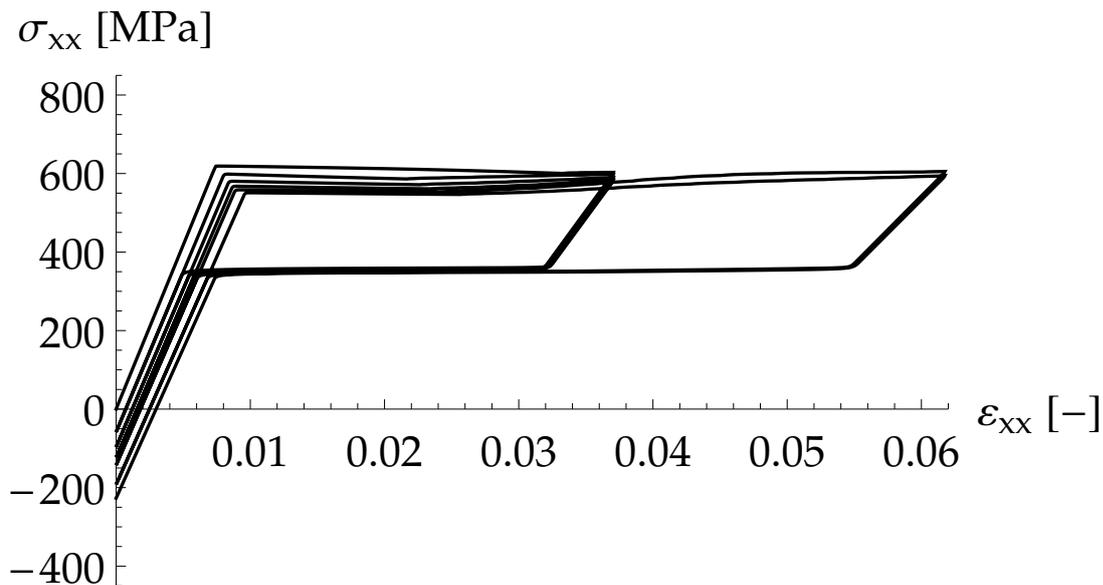


Abbildung 7.48: Zugdraht mit unterschiedlichen maximalen Verschiebungen, Modell 2a, Spannungs-Dehnungs-Diagramm, Waimann u. a. (2018).

Das Spannungs-Dehnungs-Diagramm in Abbildung 7.48 zeigt das gewünschte Materialverhalten, das mit den Konturdiagrammen in den Abbildungen 7.49 und 7.50 erklärt werden kann: Die Bildung von reversiblen und irreversiblen martensitischen Phasen findet zunächst nur innerhalb eines kleineren Bereichs in der Mitte des Stabes statt. Dieser transformierende Bereich breitet sich aufgrund der geringeren aufgetragenen Verschiebung – anders als in den zuvor gezeigten Zugversuchen – nicht auf den gesamten belasteten Teil des Drahtes aus, sondern bleibt auf diesen kleineren Bereich beschränkt. Das Zyklieren resultiert in einer Absenkung der Spannungsplateaus. Wird dann im fünften und sechsten Zyklus die maximale Verschiebung wieder erhöht, erstreckt sich die Phasenumwandlung erstmals über den gesamten Stab und es kommt,

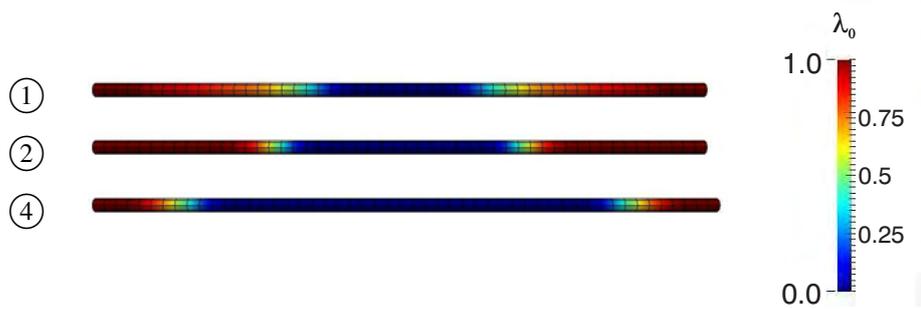


Abbildung 7.49: Zugdraht mit unterschiedlichen maximalen Verschiebungen, Modell 2a, Austenitgehalt unterschiedlicher Lastschritte, Waimann u. a. (2018).

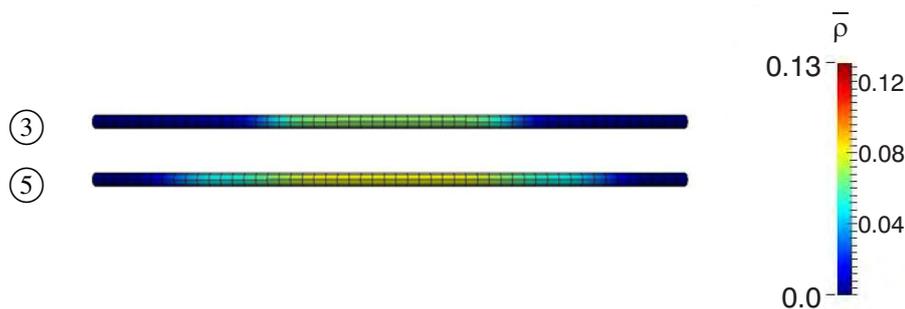


Abbildung 7.50: Zugdraht mit unterschiedlichen maximalen Verschiebungen, Modell 2a, irreversibler Martensitgehalt unterschiedlicher Lastschritte, Waimann u. a. (2018).

sobald die Transformationsfront die Bereiche mit bereits vorhandenem irreversiblen Martensit verlässt, zu einem erneuten Anstieg des oberen Plateaus bis zu seinem ursprünglichen Niveau.

Das Modell ist also auch in diesem Fall der unterschiedlichen Belastungsgrenzen in der Lage, das Materialverhalten und die damit verbundenen mikrostrukturellen Veränderungen abzubilden, auch wenn die Effekte aufgrund der geringeren Plateausenkung deutlich schwächer ausfallen.

### 7.2.2 Zyklisch belasteter Zugstreifen

Als zweites Berechnungsbeispiel wird wiederum der zyklisch belastete Zugstreifen gleicher Länge und Belastung wie der Zugdraht betrachtet, siehe auch Kapitel 7.1.2. Das zugehörige Randwertproblem wird in Abbildung 7.11, die Verschiebungsfunktion in Abbildung 7.51 dargestellt. Die Belastung folgt bis zur gleichen maximalen Belastung wie im vorherigen Be-

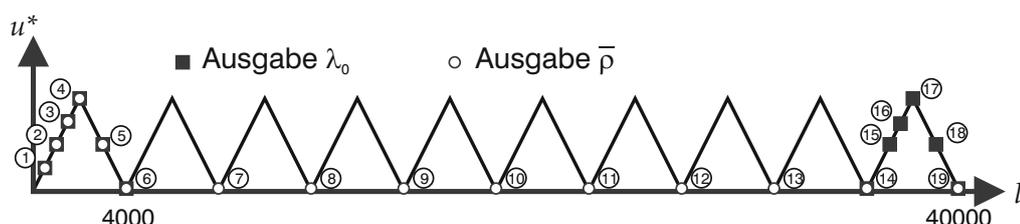


Abbildung 7.51: Zugstreifen, Modell 2a, vorgegebene Verschiebung der einzelnen Lastschritte mit Markierung der ausgegebenen Belastungsschritte.

rechnungsbeispiel unter Verwendung des viskosen Parameters 0.005 1/GPa und mit der anfangs angenommenen Winkelkombination  $\alpha_0$ .

Das resultierende Materialverhalten wird anhand der Abbildungen 7.52-7.56 deutlich.

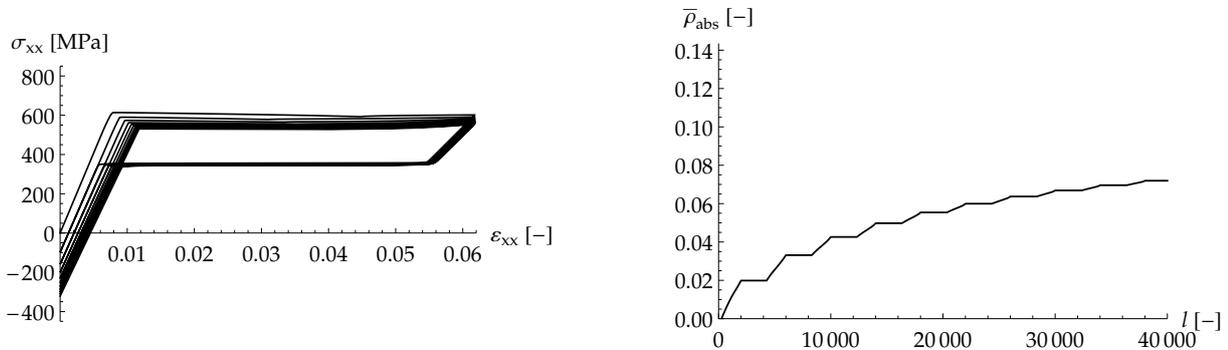


Abbildung 7.52: Zugstreifen, Modell 2a, links: Spannungs-Dehnungs-Diagramm, rechts: irreversibler Martensit.

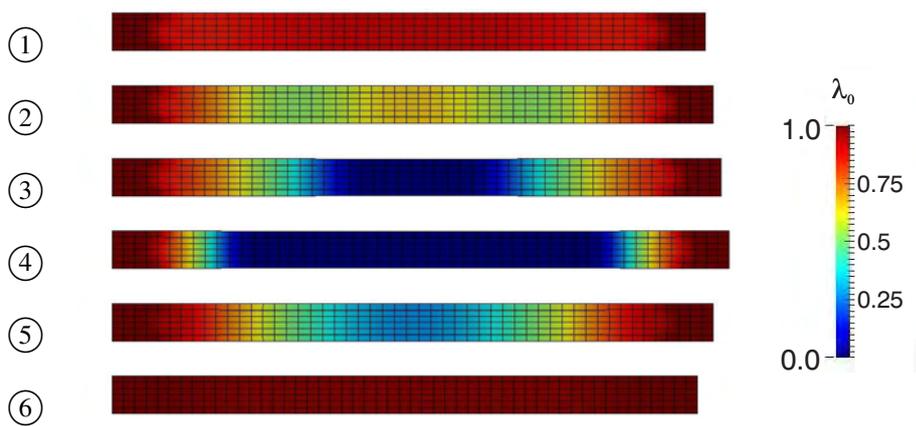


Abbildung 7.53: Zugstreifen, Modell 2a, Austenitgehalt des ersten Zyklus.

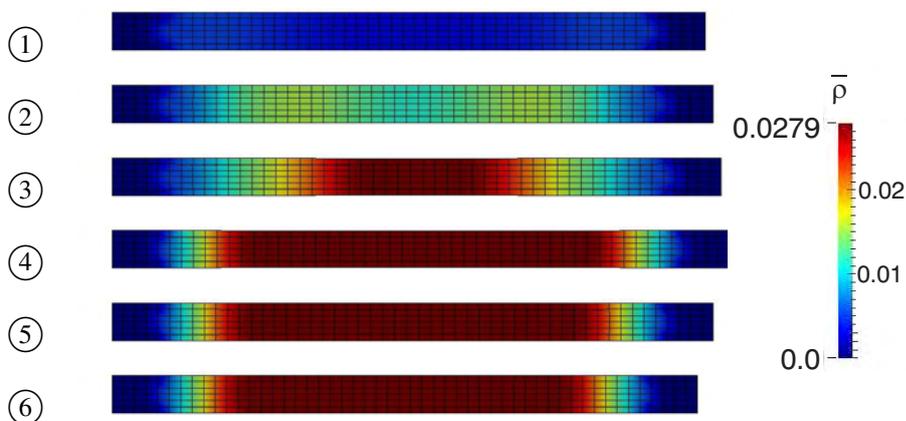


Abbildung 7.54: Zugstreifen, Modell 2a, irreversibler Martensitgehalt des ersten Zyklus.

Das Spannungs-Dehnungs-Diagramm und die Entwicklung des absoluten Martensits  $\bar{\rho}_{abs}$  werden in Abbildung 7.52 dargestellt und es zeigt sich, wie beim Draht, die für die funktio-

nale Ermüdung charakteristische Relation. Die Konturdiagramme für die Verteilung des Austenits und des irreversiblen Martensits werden zu den in Abbildung 7.51 gekennzeichneten Lastschritten erstellt, siehe Abbildungen 7.53-7.56. Die Phasentransformation erfolgt innerhalb des Zugstreifens in vergleichbarer Weise wie im Draht des vorherigen Unterkapitels. Wie anhand des Konturdiagramms für den ersten Lastzyklus ersichtlich, zeichnet sich nach der zunächst wieder homogen einsetzenden leichten ersten Transformation ① jeweils eine deutlich lokalere Martensitbildung in den äußeren Dritteln der Struktur ab, siehe ②. Im Anschluss daran kommt es allerdings auch in diesem Berechnungsbeispiel zur Bildung einer klaren Martensitfront in der Mitte des Körpers ③. In späteren Lastzyklen – siehe hier anhand des letzten Zyklus in Abbildung 7.55 – wird die Phasenumwandlung direkt in der Mitte des Stabes initialisiert. Bei

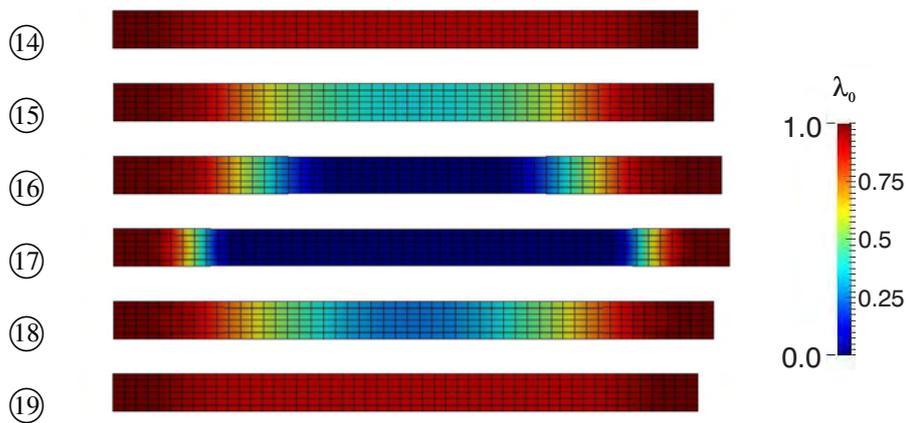


Abbildung 7.55: Zugstreifen, Modell 2a, Austenitgehalt des zehnten Zyklus.

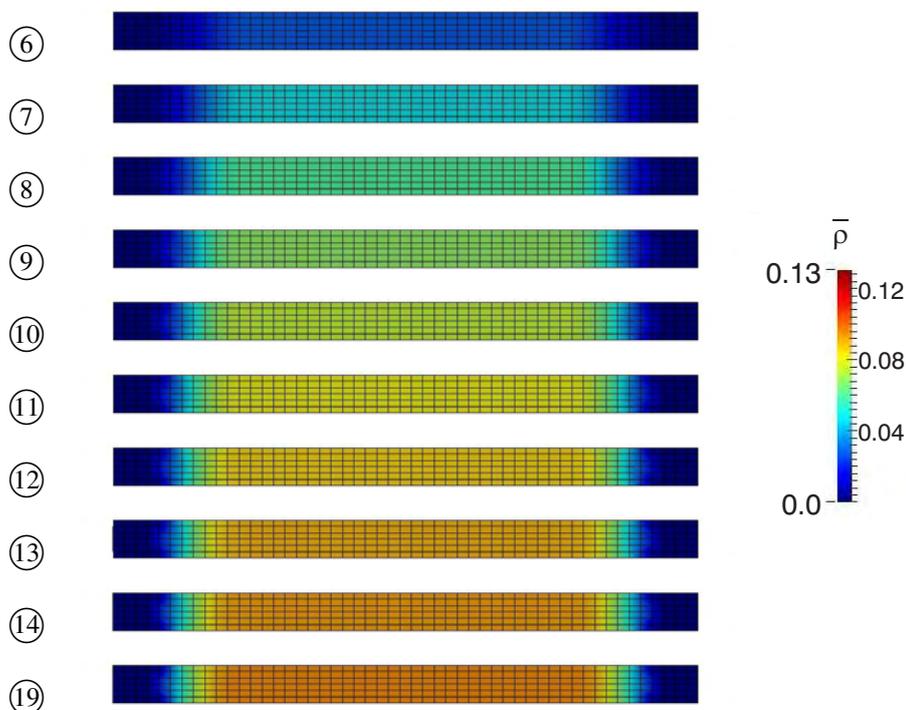


Abbildung 7.56: Zugstreifen, Modell 2a, irreversibler Martensitgehalt nach den einzelnen Zyklen.

der Betrachtung der Entwicklung des irreversiblen Martensits des ersten Belastungszyklus wird

des Weiteren deutlich, dass sich durch den identischen Belastungsvorgang die gleiche Menge an Martensit stabilisiert – der Maximalwert ist somit für beide Konturdiagramme in etwa der selbe, vergleiche Abbildungen 7.36, 7.38 und 7.54.

### 7.2.3 Lochscheibe unter zyklischer Zugbeanspruchung

Das dritte Berechnungsbeispiel wurde ebenfalls bereits in Waimann u. a. (2018) vorgestellt und behandelt das in Abbildung 7.18 präsentierte Randwertproblem der zyklisch bis zu einer maximalen Verschiebung von 0.03 mm belasteten Lochscheibe. Die Verschiebungsfunktion und die ausgegebenen Belastungsschritte werden zur besseren Übersicht in Abbildung 7.57 dargestellt. Die Eulerwinkel wurden mit  $\alpha_1$ , der viskose Parameter mit  $\Delta t_R = 0.005$  1/GPa angenommen.

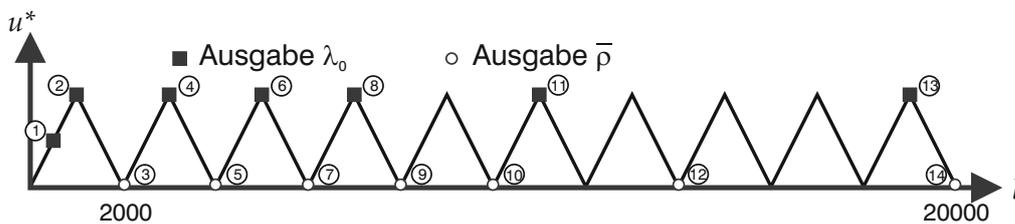


Abbildung 7.57: Lochscheibe, Modell 2a, vorgegebene Verschiebung der einzelnen Lastschritte mit Markierung der ausgegebenen Belastungsschritte, Waimann u. a. (2018).

Abbildung 7.58 zeigt das resultierende Last-Verformungs-Diagramm sowie die Entwicklung des irreversiblen Martensits für zehn durchgeführte Lastzyklen mit jeweils 2000 Lastschritten. Wiederum ergibt sich das erwartete Materialverhalten mit konvergierendem Charakter. Das

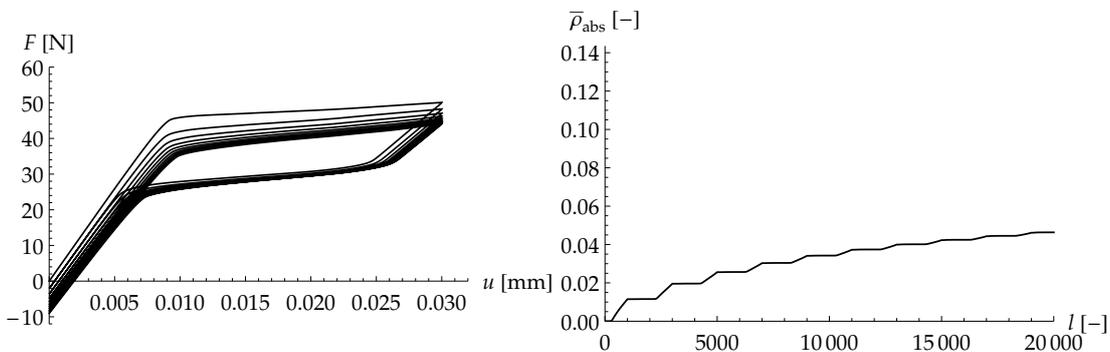


Abbildung 7.58: Lochscheibe, Modell 2a, *links*: Last-Verformungs-Diagramm, *rechts*: irreversibler Martensit, Waimann u. a. (2018).

Konturdiagramm in Abbildung 7.59 zeigt die Evolution des Austenits mit einem Zwischenschritt des ersten Zyklus und dann – wie in 7.57 markiert – für den Zustand maximaler Belastung einzelner späterer Zyklen. Es zeigt sich eine – im Vergleich zu den vorherigen Berechnungsbeispielen – extrem lokal auftretende Phasentransformation. Diese findet in den ersten Zyklen, beispielsweise ②, innerhalb der dargestellten Ebene punktsymmetrisch zum Mittelpunkt der Struktur statt. Durch die Evolution der Eulerwinkel nimmt der transformierte Bereich mit steigender Zyklenzahl jedoch eine zunehmend achsensymmetrische Form an, die schließlich eine bogenartige Gestalt hat ⑬. Die sich simultan bildenden irreversiblen Phasen treten wieder in den gleichen Bereichen auf. Der irreversible Martensit wird nach den einzelnen Lastdurchläufen in Abbildung 7.60 dargestellt.

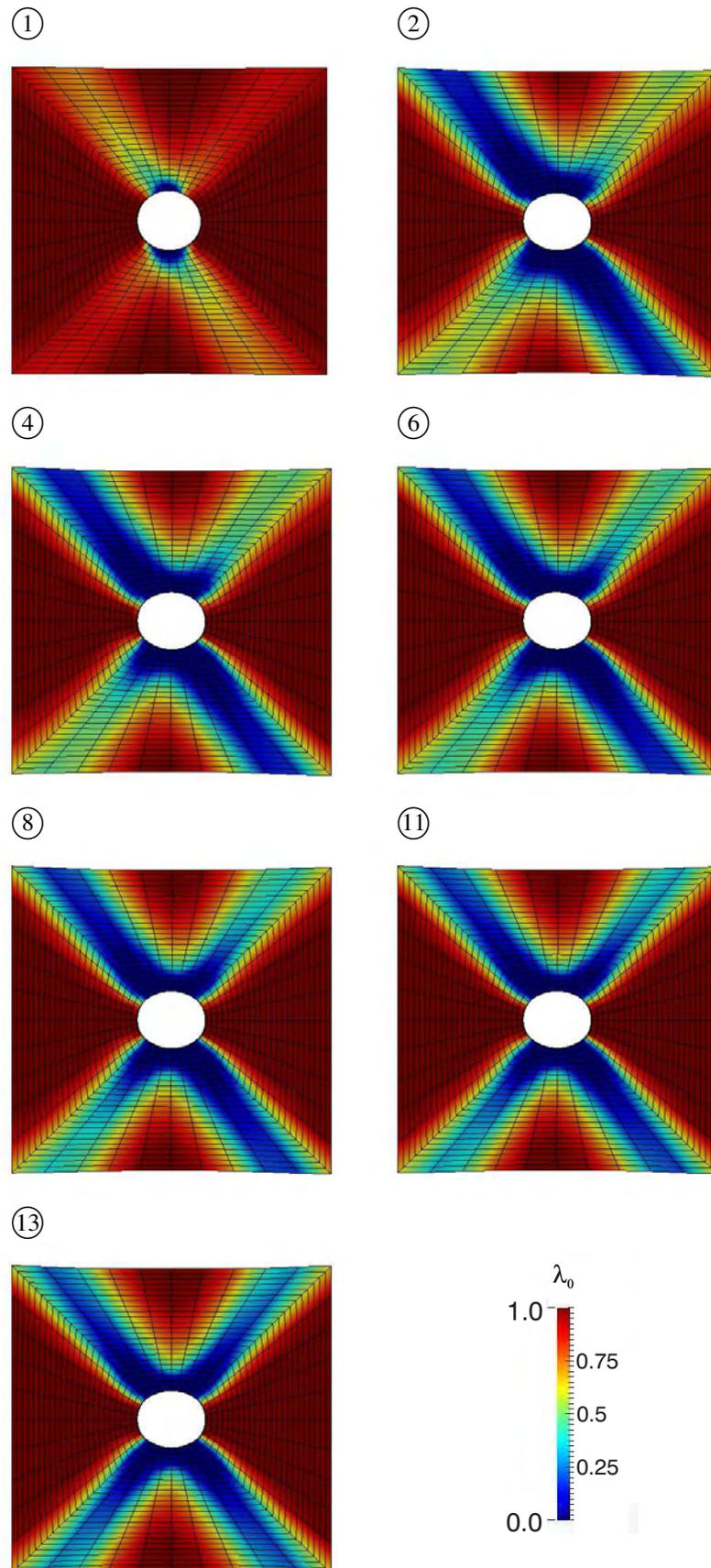


Abbildung 7.59: Lochscheibe, Modell 2a, Austenitgehalt unterschiedlicher Lastschritte, Wai- mann u. a. (2018).

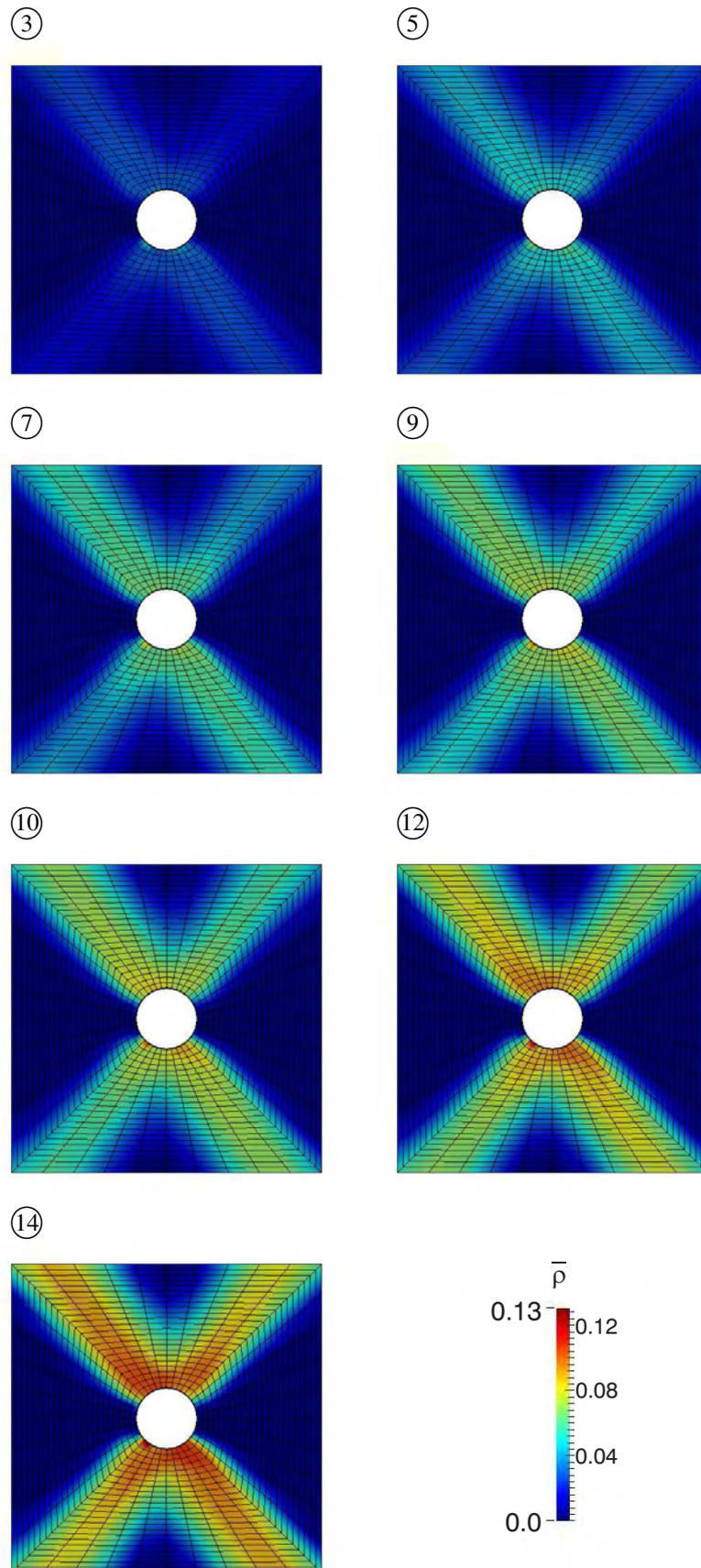


Abbildung 7.60: Lochscheibe, Modell 2a, irreversibler Martensitgehalt unterschiedlicher Lastschritte, Waimann u. a. (2018).

### 7.2.4 Riss unter zyklischer Belastung

Als weiteres Beispiel, das die in Waimann u. a. (2018) präsentierten Berechnungen ergänzt, wird an dieser Stelle das Randwertproblem eines sich zyklisch aufweitenden Risses vorgestellt. Das Randwertproblem der in der Mitte bis zur Hälfte horizontal gerissenen quadratischen Scheibe mit einer Seitenlänge von 100 mm wird in Abbildung 7.61 dargestellt. Der betrachtete Körper

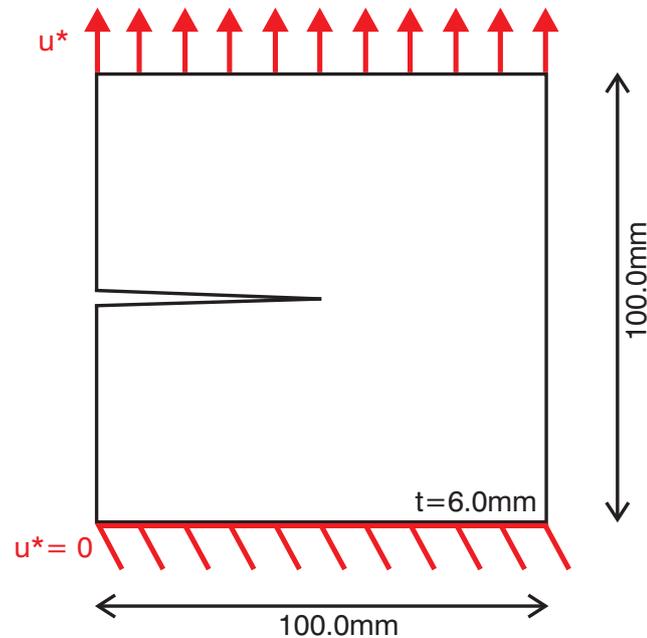


Abbildung 7.61: Riss, Randwertproblem.

wird an seiner unteren Seite gehalten und an der oberen Seite einer Verschiebung von maximal 3,5 mm ausgesetzt. Die lineare Verschiebungsfunktion der zehn Lastzyklen wird in Abbildung 7.62 präsentiert und beinhaltet genau wie in den bisherigen Berechnungsbeispielen die Kennzeichnung der Lastschritte für die eine Betrachtung des Austenits bzw. des irreversiblen Martensits erfolgt. Die Initialisierungswinkel nehmen die Werte  $\alpha_1$  an und für  $\Delta t_R$  wird 0,1 1/GPa verwendet.

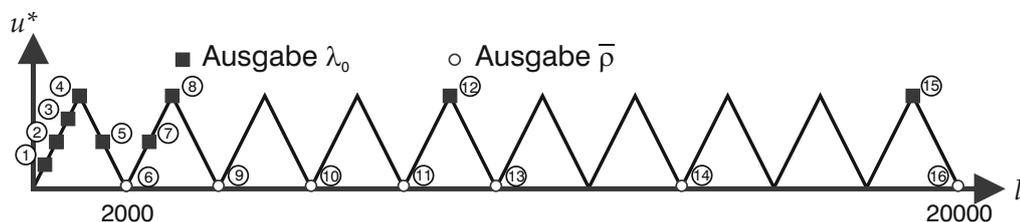


Abbildung 7.62: Riss, Modell 2a, vorgegebene Verschiebungen der einzelnen Lastschritte mit Markierung der ausgegebenen Belastungsschritte.

Die Konturdiagramme für  $\lambda_0$  und  $\bar{\rho}$  in Abbildungen 7.63 und 7.64 sowie die Last-Verformungskurve und die Entwicklung der effektiven irreversiblen Volumenfraktion in Abbildung 7.65 zeigen auch für dieses Berechnungsbeispiel das erwartete Materialverhalten und folglich die funktionale Degradierung des Werkstoffs. Wie bereits die Lochscheibe in Abschnitt 7.2.3 zeigt auch das Beispiel des Risses die Entwicklung eines bogenförmigen transformierenden Bereichs.

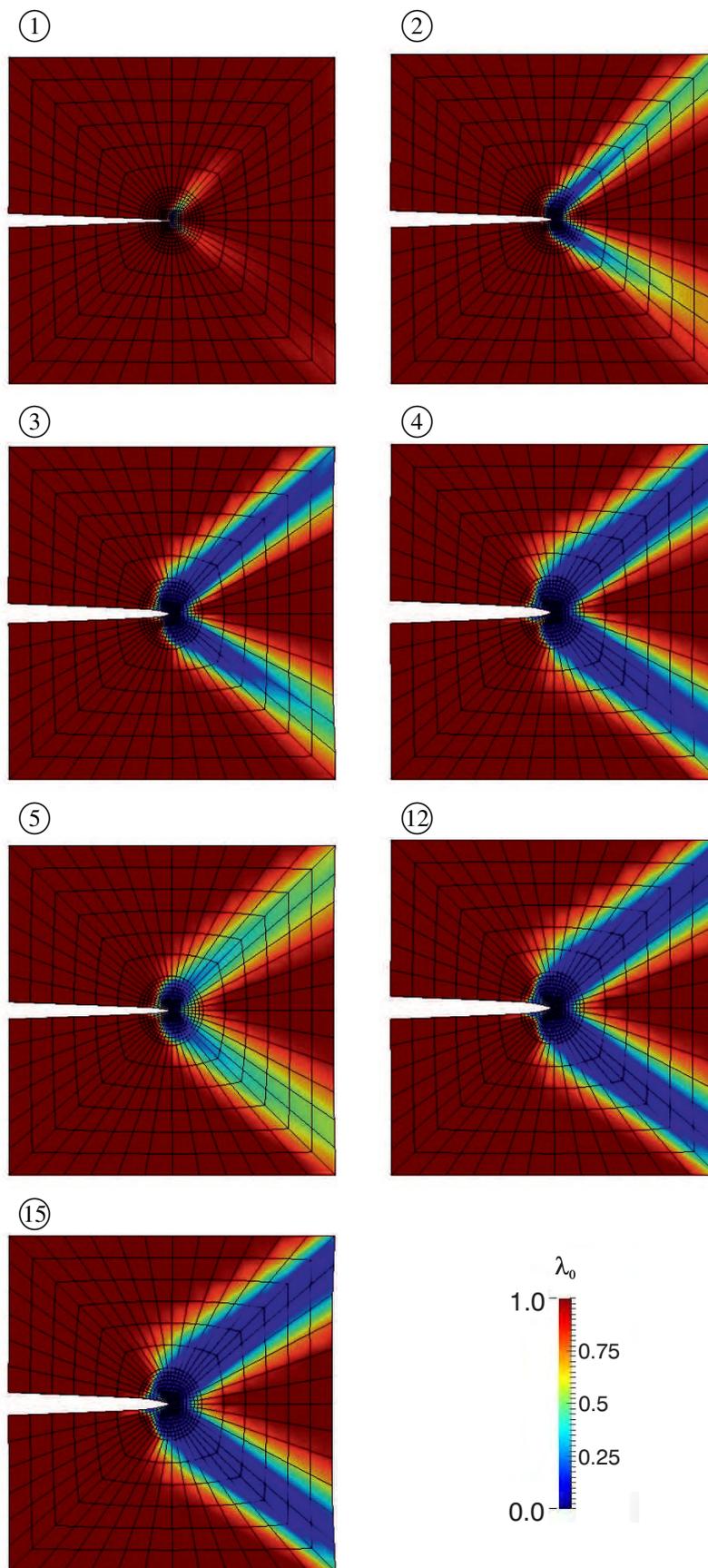


Abbildung 7.63: Riss, Modell 2a, Austenitgehalt unterschiedlicher Lastschritte.

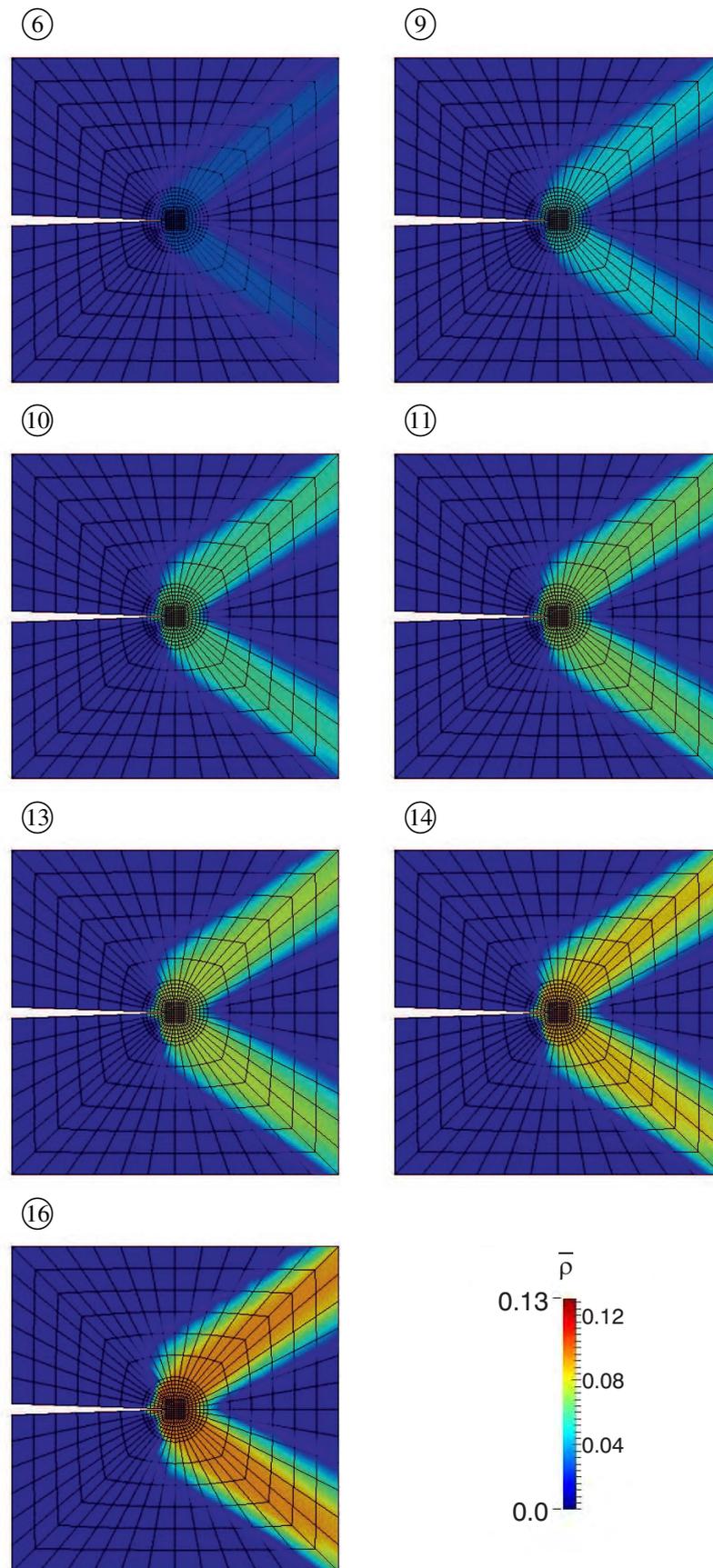


Abbildung 7.64: Riss, Modell 2a, Martensitgehalt unterschiedlicher Lastschritte.

Im Vergleich zum vorherigen Beispiel findet die Winkelkorrektur allerdings deutlich schneller statt, wodurch eine betragsliche Spannungserhöhung während der Transformation von Austenit zu Martensit im ersten Belastungszyklus zustandekommt sowie eine starke Abnahme des Betrags des Spannungsplateaus der Transformation von Austenit zu Martensit zwischen dem ersten und zweiten Zyklus resultiert. Auch die durch die anfängliche gewählte Eulerwinkel-

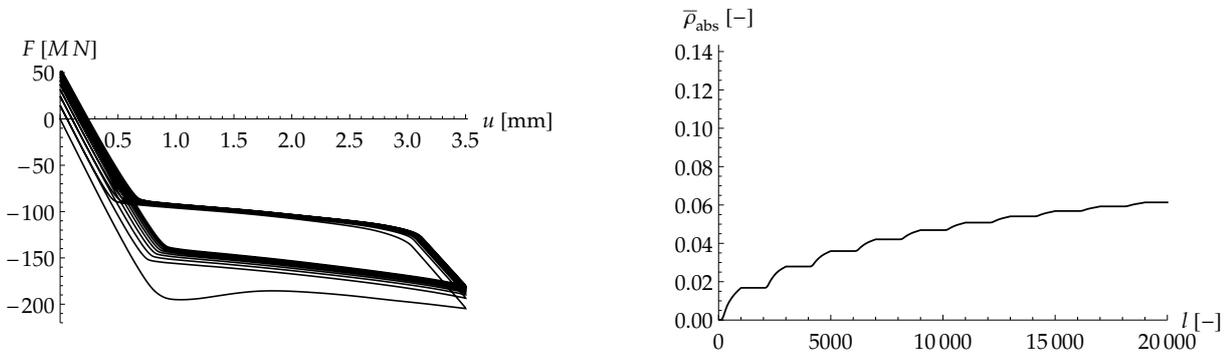


Abbildung 7.65: Riss, Modell 2a, links: Last-Verformungs-Diagramm, rechts: irreversibler Martensit.

kombination bewirkte Asymmetrie der Transformation, siehe Abbildung 7.63 ①-③, nimmt bereits während des ersten Lastzyklus ab, siehe ④ und ⑤, und damit im Vergleich zur Lochscheibe deutlich schneller. Für die weiteren Lastzyklen in ⑫ und ⑮ für den Zustand maximaler Belastung dargestellt bleiben die transformierenden Bereiche dann nahezu identisch. Die vergrößerte Darstellung des Austenitgehalts in der Risspitze in Abbildung 7.66 verdeutlicht des Weiteren die komplexe Transformationsstruktur aufgrund des durch den Riss entstehenden Spannungsfeldes.

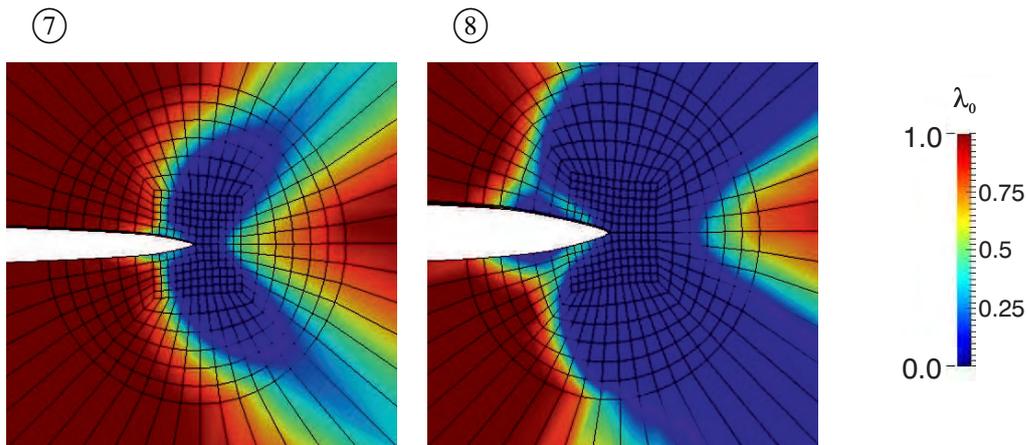


Abbildung 7.66: Riss, Modell 2a, Austenitgehalt unterschiedlicher Lastschritte, vergrößerte Umgebung der Risspitze.

Die Entwicklung der irreversiblen Volumenfraktionen zeigt sowohl in Abbildung 7.65 als auch anhand der Konturdiagramme in Abbildung 7.64, die zunehmende Stabilisierung der martensitischen Phase in den transformierenden Regionen des betrachteten Körpers.

### 7.2.5 Sinusring unter zyklischer Druckbeanspruchung

Das Randwertproblem des Sinusrings entstammt ebenfalls Waimann u. a. (2018). Das Randwertproblem des aus 1890 Elementen bestehenden sinusförmigen Klemmrings wird bereits in 7.23 dargestellt. Die maximale Verschiebung von  $-0.1$  mm wird in zehn Lastzyklen mit jeweils 4000 Lastschritten aufgebracht und anschließend entlastet. Abbildung 7.67 zeigt die vorgegebene Verschiebungsfunktion sowie die Lastschritte, für die Konturdiagramme für die Entwicklung der Mikrostruktur präsentiert werden. Die Eulerwinkel wurden durch  $\alpha_1$  initialisiert und für die Berechnung wurde ein Viskositätsparameter für die Entwicklung der Eulerwinkel von  $\Delta t_R = 0.01$  1/GPa gewählt. Das resultierende Last-Verformungs-Diagramm sowie die Ent-

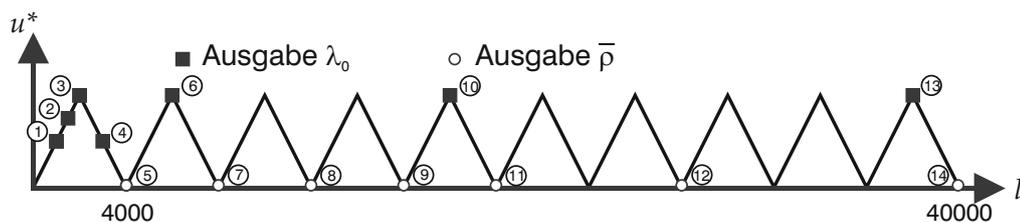


Abbildung 7.67: Sinusring, Modell 2a, vorgegebene Verschiebungen der einzelnen Lastschritte mit Markierung der ausgegebenen Belastungsschritte, Waimann u. a. (2018).

wicklung des irreversiblen Martensits zeigen das gleiche Materialverhalten wie die vorherigen Berechnungen, siehe Abbildung 7.68. Durch die Winkelkorrektur entsteht nach dem ersten Zyklus eine deutliche Absenkung der Hysteresekurve. Anschließend ergeben sich genau wie für den zyklisch beanspruchten Draht eine konvergierende Plateausenkung sowie eine ebenfalls konvergierende bleibende Dehnung, die mit dem anfangs stärker wachsenden irreversible Martensit korrespondiert.

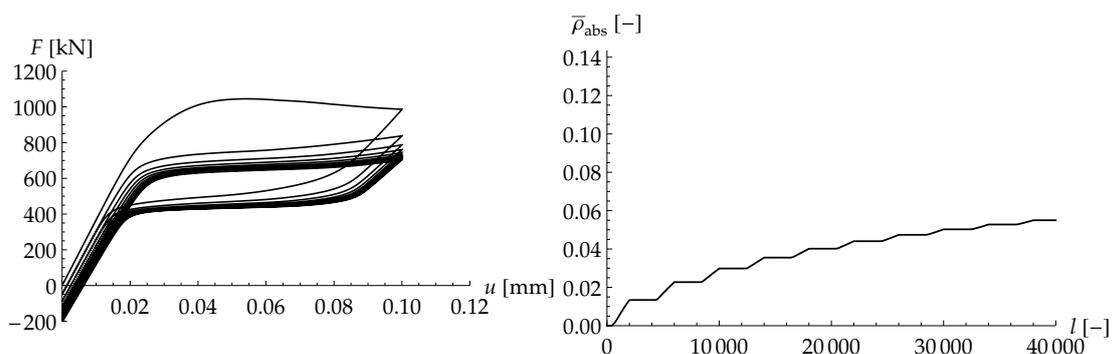


Abbildung 7.68: Sinusring, Modell 2a, links: Last-Verformungs-Diagramm, rechts: irreversibler Martensit, Waimann u. a. (2018).

Die Betrachtung der Konturdiagramme für die austenitische Volumenfraktion und den irreversiblen Martensit in Abbildung 7.69 und 7.70 zeigen wie bereits in den vorangegangenen Beispielen der Lochscheibe und des Risses eine deutlich lokaler auftretende Phasentransformation verglichen mit den ersten beiden betrachteten Geometrien. Diesbezüglich machen die Diagramme für den ersten Zyklus in Abbildung 7.69 deutlich, dass nahe den Dirichlet-Rändern die Phasenumwandlung initialisiert wird und sich von dort aus der Martensit weiter in das Bauteil ausbreitet. Die Entlastung resultiert wiederum in einer Rücktransformation des Martensits. Die des Weiteren präsentierten Diagramme späterer maximaler Belastungen zeigen eine weitere Verkleinerung der bleibenden austenitischen Bereiche. Die in Abbildung 7.70 dargestellten

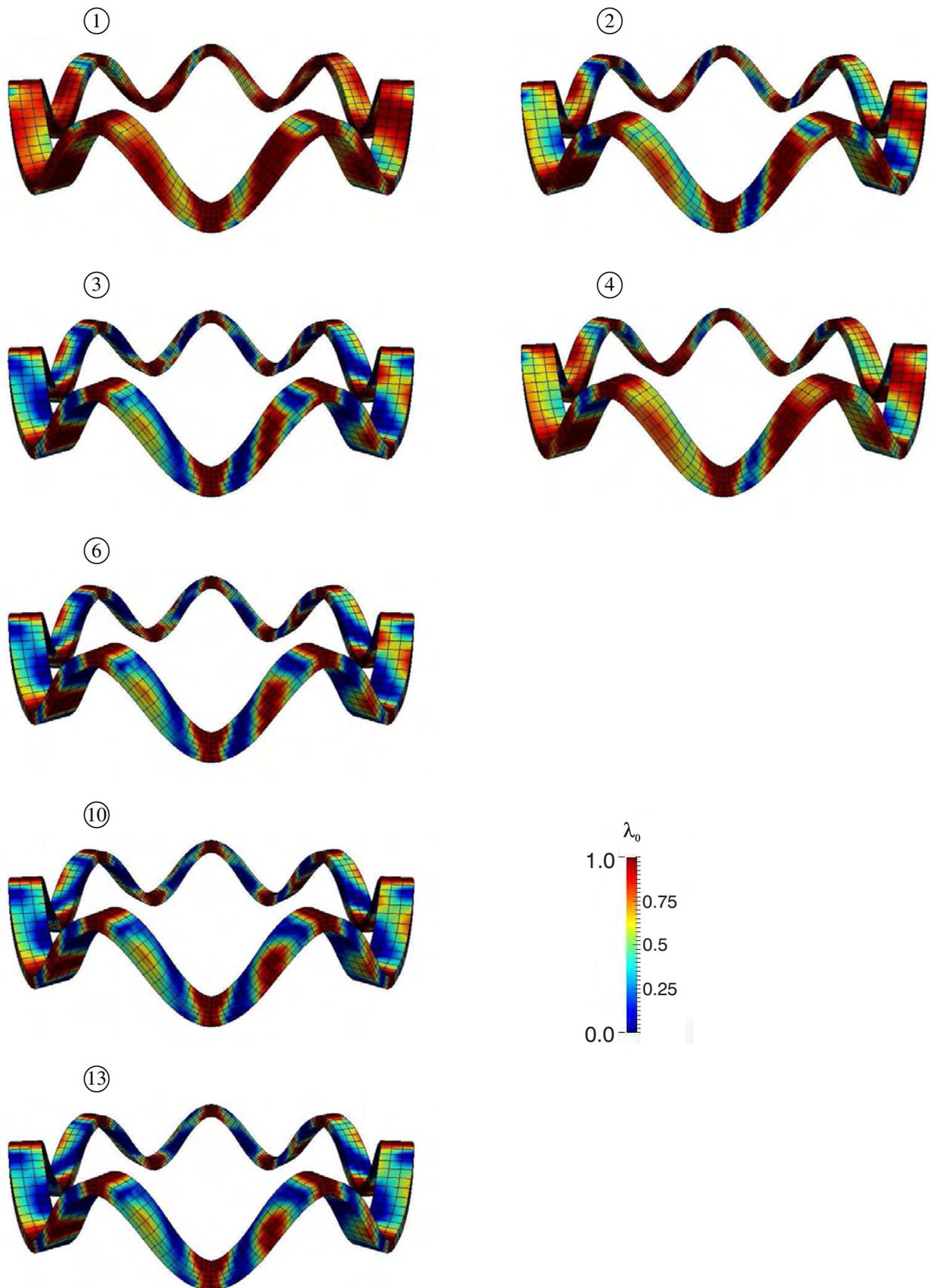


Abbildung 7.69: Sinusring, Modell 2a, Austenitgehalt unterschiedlicher Lastschritte, Waimann u. a. (2018).

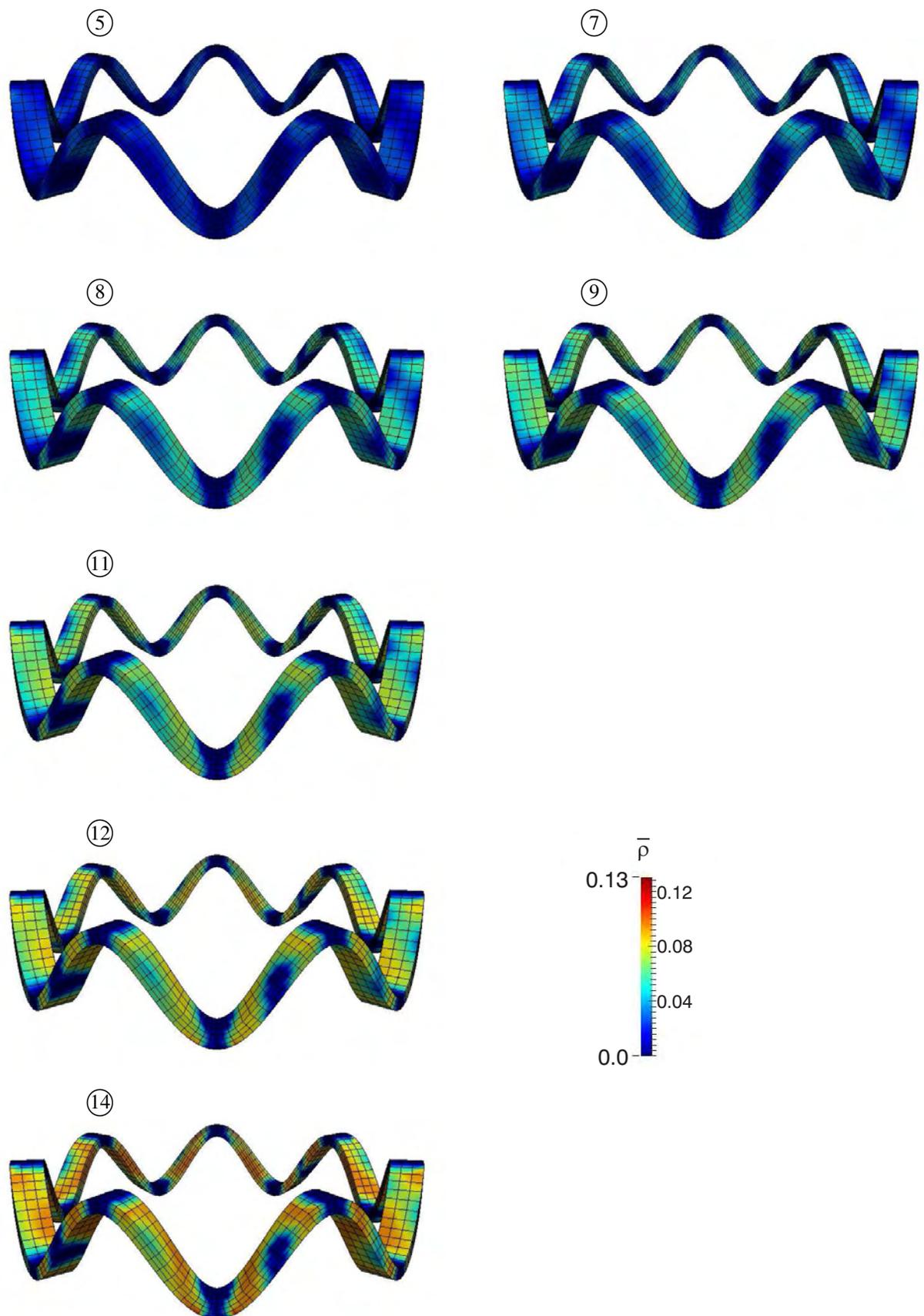


Abbildung 7.70: Sinusring, Modell 2a, irreversibler Martensitgehalt unterschiedlicher Lastschritte, Waimann u. a. (2018).

Verteilungen des stabilisierten Martensits nach einzelnen Zyklen, zeigt darüber hinaus die Entstehung der irreversiblen Phasen in den transformierenden Bereichen und das anfangs deutlich stärkere Wachstum.

### 7.2.6 Feder unter zyklischer Zugbeanspruchung

Als abschließendes Randwertproblem für das ratenunabhängige Modell mit simultaner Bildung irreversiblen Martensits wird die Mikrostrukturänderung der bereits in Kapitel 7.1.5 untersuchten Feder betrachtet. Die präsentierten Ergebnisse entstammen wiederum Waimann u. a. (2018). Die Randbedingungen und die Geometrie können Abbildung 7.28 entnommen werden. In je 2000 Schritten pro Lastzyklus erfährt die Feder die gleiche maximale Verschiebung von 12.0 mm. Abbildung 7.71 zeigt die lineare Verschiebungsfunktion mit Kennzeichnung der Lastschritte, für die nachfolgend Konturdiagramme der Mikrostruktur präsentiert werden. Das Last-

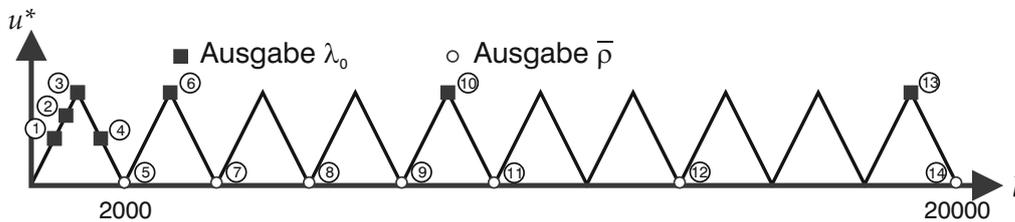


Abbildung 7.71: Feder, Modell 2a, vorgegebene Verschiebungen der einzelnen Lastschritte mit Markierung der ausgegebenen Belastungsschritte.

Verformungs-Diagramm in Abbildung 7.72 zeigt den bereits aus den vergangenen Beispielen bekannten Effekt der funktionalen Ermüdung mit ausgeprägter betraglicher Spannungssenkung zwischen dem ersten und zweiten Zyklus, der wieder ein Resultat der Eulerwinkel Anpassung ist. Insgesamt stellt sich im betrachteten Beispiel für die vorgegebene Belastung nur eine geringe Umwandlung und damit verbundene Bildung irreversiblen Martensits ein, siehe ebenfalls Abbildung 7.72. Die mikrostrukturellen Veränderungen unter der zyklischen mechanischen Belastung werden ebenfalls anhand der Konturdiagramme in den Abbildungen 7.73 und 7.74 deutlich. Die Transformation wird wie bereits für Modell 1b in Kapitel 7.1.5 in der Mitte der Feder initiiert und breitet sich dann leicht weiter in äußere Bereiche der Struktur aus. Es zeigt sich jedoch eine stark lokalisierte Ausprägung der reversiblen und irreversiblen Phasentransformationen.

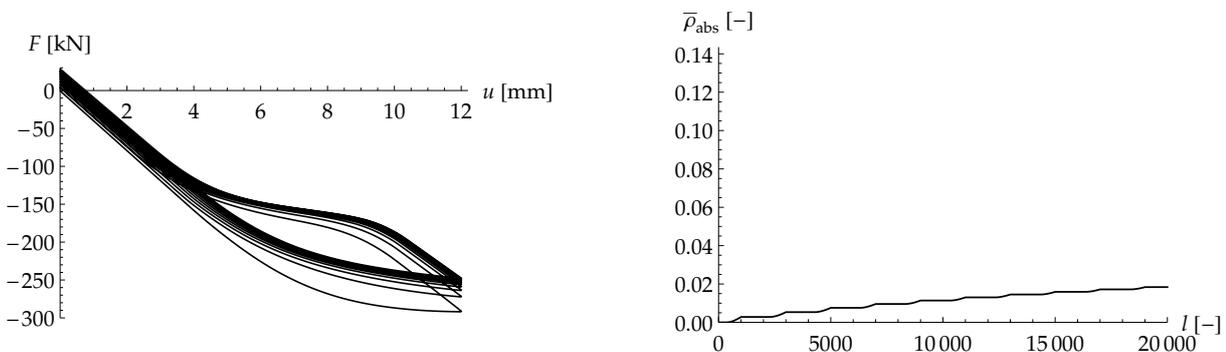


Abbildung 7.72: Feder, Modell 2a, links: Last-Verformungs-Diagramm, rechts: irreversibler Martensit, Waimann u. a. (2018).

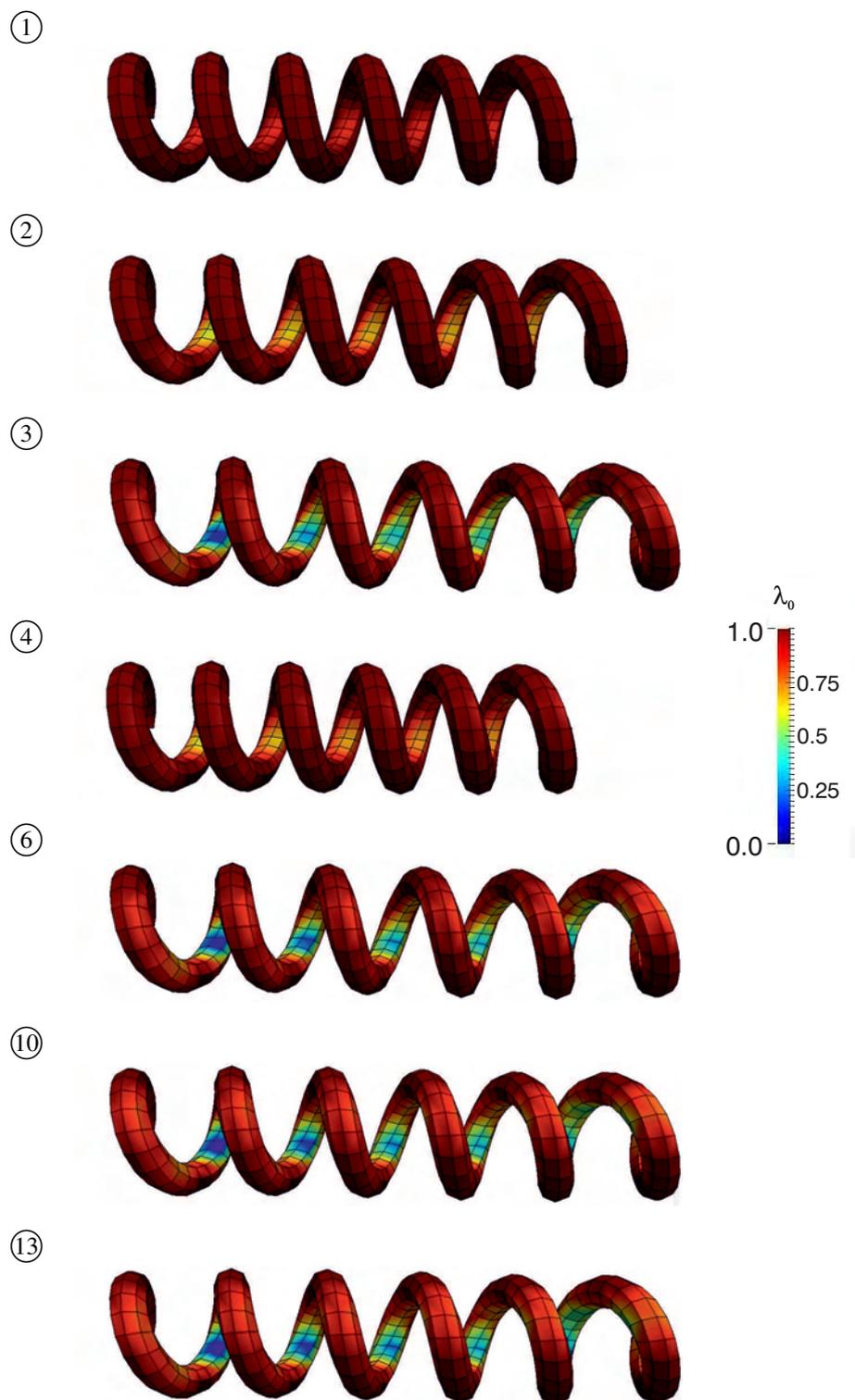


Abbildung 7.73: Feder, Modell 2a, Austenitgehalt unterschiedlicher Lastschritte, Waimann u. a. (2018).

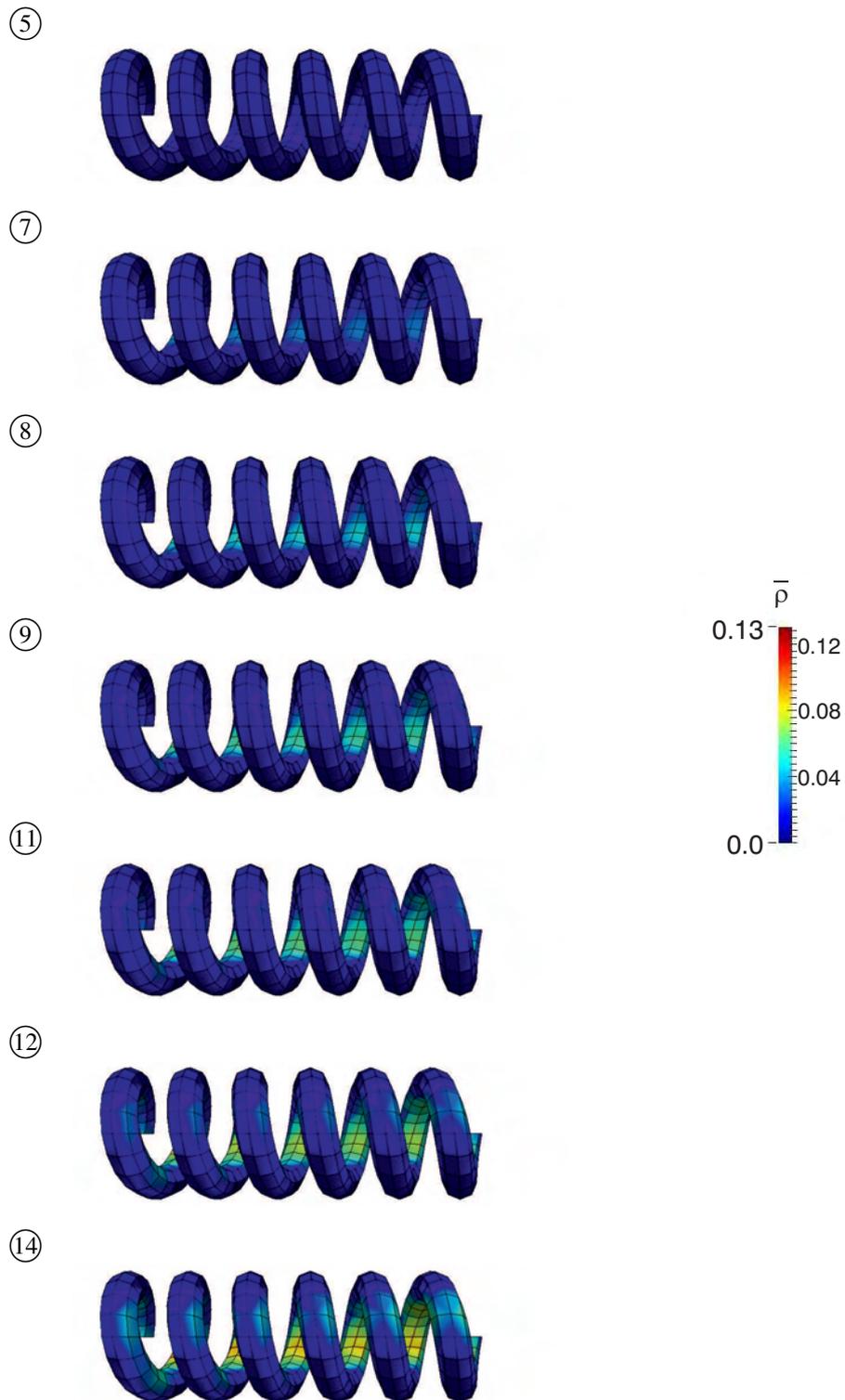


Abbildung 7.74: Feder, Modell 2a, irreversibler Martensitgehalt nach den einzelnen Zyklen, Waimann u. a. (2018).

### 7.3 Finite-Elemente-Berechnungen für Modell 2b

In diesem Unterkapitel werden einzelne der in Kapitel 7.2 vorgestellten Berechnungsbeispiele unter Berücksichtigung der ratenabhängigen Phasentransformation erneut aufgegriffen. Die – so nicht anders vermerkt – für alle Simulationen verwendeten viskosen Parameter sind mit  $\Delta t_R = 0.1 \text{ 1/GPa}$  und  $\Delta t_T = 1.0 \text{ 1/GPa}$  festgelegt.

Die erste erneute Berechnung erfolgt für den zyklischen Zugversuch des Drahtes mit zwei unterschiedlichen Netzen und den initialisierten Werten für die Eulerwinkel  $\alpha_1$ . Die Lastaufbringung erfolgt darin in lediglich 2000 Schritten pro Zyklus, siehe Abbildung 7.75.

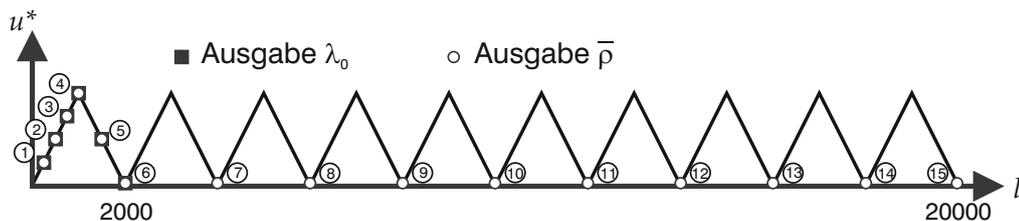


Abbildung 7.75: Zugdraht, Modell 2b, vorgegebene Verschiebung der einzelnen Lastschritte mit Markierung der ausgegebenen Belastungsschritte.

Das Spannungs-Dehnungs-Diagramm in Abbildung 7.76 zeigt einen identischen Verlauf für die beiden unterschiedlich feinen Netze. Verglichen mit den Ergebnissen für die ratenunabhängige Evolution, zeigt sich ausgelöst durch den höheren Wert von  $\Delta t_R$  ein großer Spannungsabfall im ersten Belastungszyklus. Ansonsten stellt sich jedoch der gleiche qualitative Verlauf der Kurven ein, die Plateauabsenkung und Ansammlung bleibender Dehnungen beinhaltend. Die zu einzelnen Lastschritten erstellten Konturdiagramme (vergl. Abbildung 7.75) – diesmal nur dargestellt für das gröbere Netz mit 612 Elementen – zeigen eine deutlich homogenere Phasenumwandlung innerhalb des ersten Zyklus, siehe Abbildung 7.77. Auch wenn dies hier nicht dargestellt wird, tritt die Transformation auch in späteren Lastzyklen nicht lokalisierter auf.

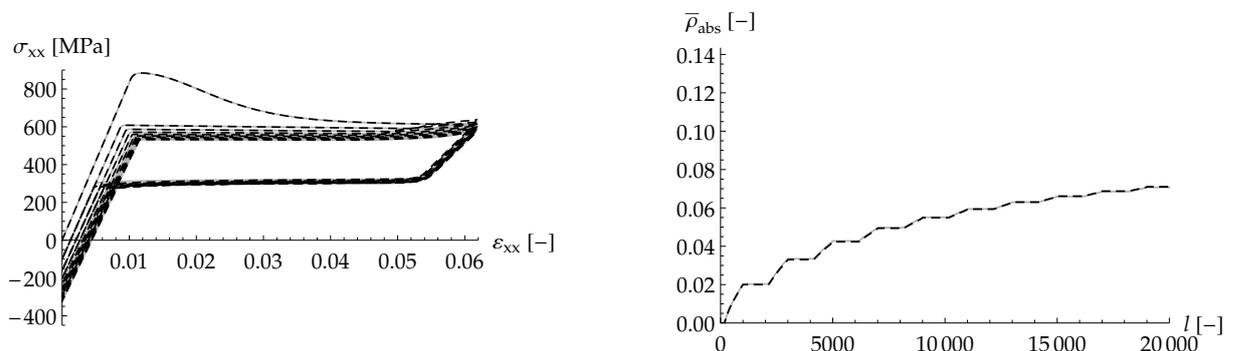


Abbildung 7.76: Zugdraht mit zwei unterschiedlichen Netzen (612 (strichliert) und 1020 Elemente (grau)), Modell 2b, 2000 Lastschritte je Zyklus, *links*: Spannungs-Dehnungs-Diagramm, *rechts*: irreversibler Martensit.

Diese Homogenisierung wird auch anhand der Entwicklung des stabilisierten Martensits deutlich. Auch dieser bildet sich gleichmäßig über den gedehnten Bereich des Stabes verteilt, siehe Abbildung 7.78. Dennoch zeigt die Entwicklung des irreversiblen Martensits nach den

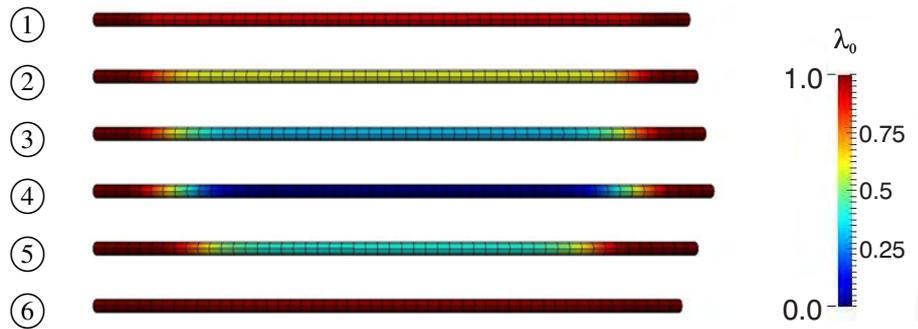


Abbildung 7.77: Zugdraht, Modell 2b, Austenitgehalt des ersten Zyklus, 612 Elemente, 2000 Lastschritte je Zyklus.

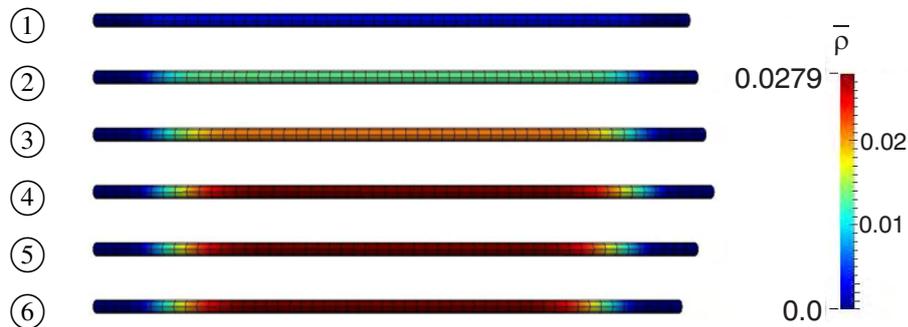


Abbildung 7.78: Zugdraht, Modell 2b, irreversibler Martensitgehalt des ersten Zyklus, 612 Elemente, 2000 Lastschritte je Zyklus.

einzelnen Lastzyklen in Abbildung 7.79, dass sich verglichen mit Abbildung 7.41 für das ratenunabhängige Materialmodell 2a vergleichbare Ergebnisse für die ratenabhängige Evolution ergeben. Das erste Berechnungsbeispiel wurde des Weiteren für eine Laustaufbringung in 1000 bzw. 4000 Schritten wiederholt. Die resultierenden Spannungs-Dehnungs-Diagramme werden in Abbildung 7.80 dargestellt. Durch den Vergleich des Materialverhaltens des ersten, zweiten und zehnten Lastzyklus in Abbildung 7.81 (*links*) wird die Zeitabhängigkeit des elasto-viskoplastischen Materialmodells deutlich. Durch Verwendung der niedrigeren Anzahl an Lastschritten kommt es zu einer schnelleren Lastaufbringung als im ursprünglichen Berechnungsbeispiel. Während sich die Eulerwinkel langsamer entwickeln und somit die Spannungsspitze innerhalb des ersten Zyklus langsamer abgebaut wird, kommt es zu einem deutlich stärkeren Zuwachs an irreversiblen Martensit, siehe 7.81 (*rechts*). Umgekehrt wird die Spannungsspitze innerhalb des ersten Zyklus durch die Berechnung mit 4000 Lastschritten je Zyklus deutlich schneller abgebaut als in der Ausgangsberechnung und auch der irreversible Martensit entwickelt sich deutlich langsamer. Es ist jedoch anzumerken, dass sowohl der absolute Wert  $\bar{\rho}$  als auch die bleibende Dehnung der unterschiedlichen Simulationen übereinstimmen. Des Weiteren bleibt auch der Beginn der Rücktransformation nicht unbeeinflusst durch die unterschiedlich schnelle Lastaufbringung: je mehr Lastschritte pro Zyklus verwendet werden, umso früher setzt die Phasentransformation von Martensit zu Austenit ein und umso schmaler ist auch die resultierende Hysteresekurve, deren oberes Plateau jeweils gegen den gleichen Wert konvergiert.

Das zweite Berechnungsbeispiel mit elasto-viskoplastischer Evolution der Phasenanteile ist die bereits vorgestellte Lochscheibe. Die Berechnung erfolgt wieder unter gleichen Randbedingungen, aber diesmal, wie erneut in Abbildung 7.82 dargestellt, unter Verwendung von 1000

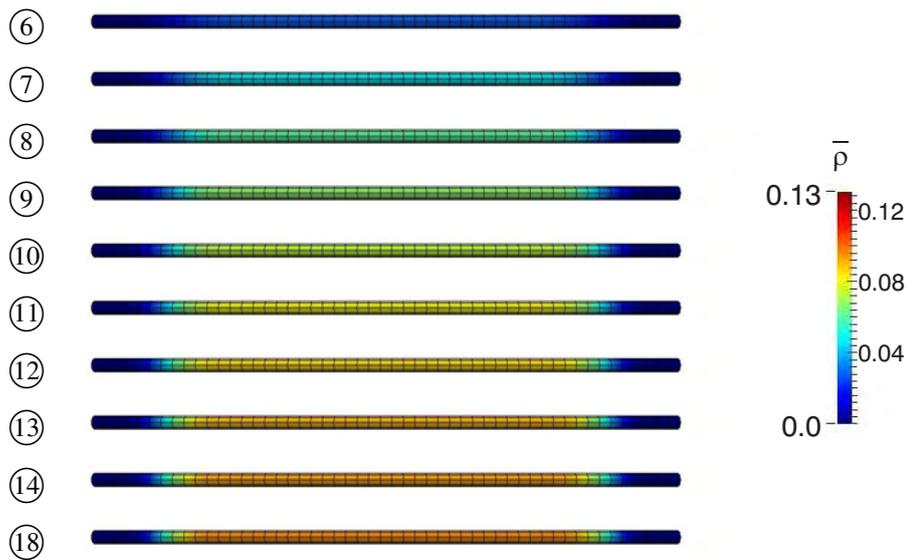


Abbildung 7.79: Zugdraht, Modell 2b, irreversibler Martensitgehalt nach den einzelnen Zyklen, 612 Elemente, 2000 Lastschritte je Zyklus.

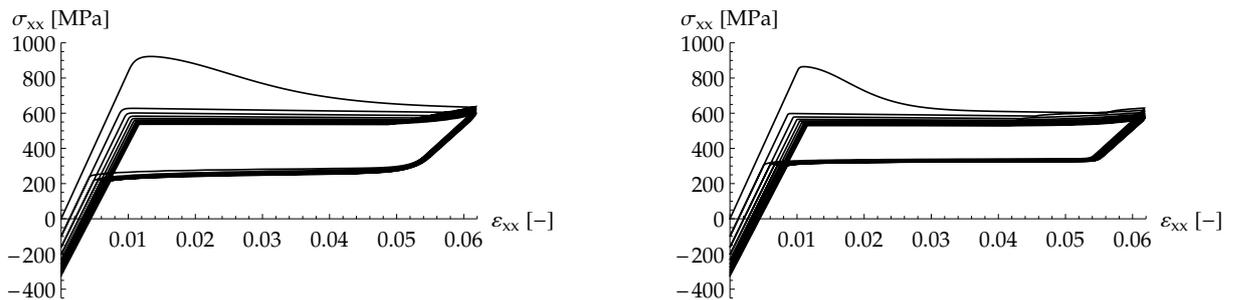


Abbildung 7.80: Zugdraht mit unterschiedlicher Anzahl an Lastschritten, Modell 2b, *links*: 1000 Schritte pro Zyklus, *rechts*: 4000 Schritte pro Zyklus.

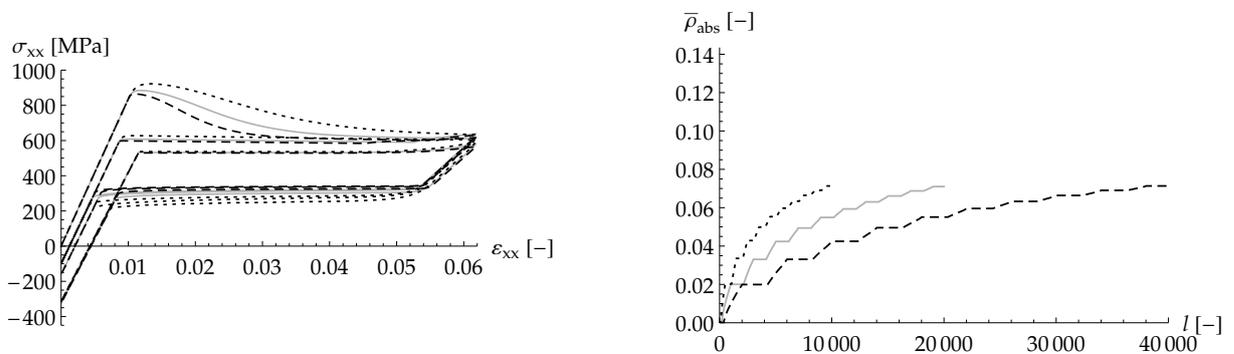


Abbildung 7.81: Zugdraht mit unterschiedlicher Anzahl an Lastschritten (1000 (gepunktet), 2000 (grau), 4000 (strichliert)), Modell 2b, *links*: Spannungs-Dehnungs-Diagramm des ersten, zweiten und zehnten Zyklus, *rechts*: irreversibler Martensit.

Lastschritten je Zyklus und mit Hilfe von  $\Delta t_T = 0.9 \text{ 1/GPa}$ .

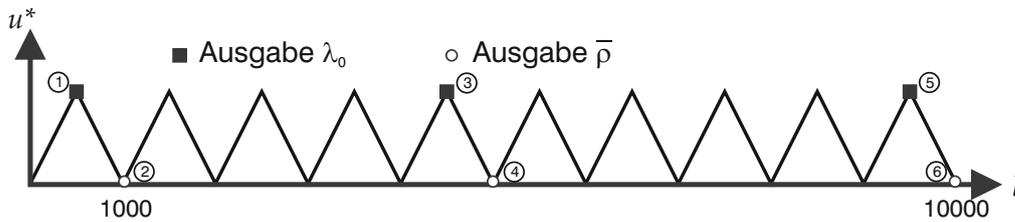


Abbildung 7.82: Lochscheibe, Modell 2b, 1000 Lastschritte je Zyklus, vorgegebene Verschiebung der einzelnen Lastschritte mit Markierung der ausgegebenen Belastungsschritte.

Wiederum mit deutlich schnellerer Eulerwinkelkorrektur und somit größerer Spannungsspitze innerhalb des ersten Zyklus, stellen sich dennoch gut vergleichbare Verläufe verglichen mit dem ratenunabhängigen Modell 2a ein, siehe Abbildung 7.83.

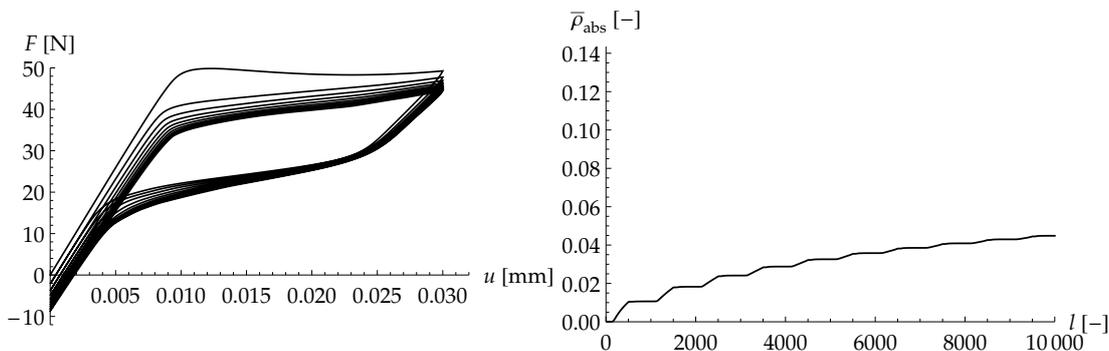


Abbildung 7.83: Lochscheibe, Modell 2b, 1000 Lastschritte je Zyklus, *links*: Last-Verformungs-Diagramm, *rechts*: irreversibler Martensit.

Auch können die Konturdiagramme des Austenitgehalts in Abbildung 7.84 und des totalen irreversiblen Martensits in Abbildung 7.85 die gleiche bogenartige Transformation bzw. irreversible Martensitstruktur aufweisen. Jedoch stellen sich im Vergleich zu den ratenunabhängigen Berechnungen aufgrund der schnelleren Winkelevolution deutlich schneller symmetrische Verteilungen des Martensits ein. Das Modell 2b ist folglich für nicht homogene Randbedingungen in der Lage lokalisierte Phasenfronten darzustellen. Werden nun wiederum 2000 Lastschritte je Zyklus verwendet und wird somit die Last deutlich langsamer aufgebracht, ergibt sich das in Abbildung 7.86 dargestellte Materialverhalten. Wie bereits am vorherigen Berechnungsbeispiel des zyklisch belasteten Zugdrahts, setzt infolge der langsameren Lastaufbringung eine schnellere Entwicklung der Eulerwinkel ein, was einen stärker ausgeprägten Spannungsabfall innerhalb des ersten Zyklus zur Folge hat. Des Weiteren tritt auch hier durch die langsamere Belastung die Rücktransformation bereits bei einer höheren Spannung auf verglichen mit der schnelleren Lastaufbringung. Wiederum ist die Hysteresekurve schmäler verglichen mit Abbildung 7.83, wobei das obere Plateau wie im vorherigen Berechnungsbeispiel gegen den gleichen Wert konvergiert und auch die bleibende Dehnung für beide Belastungsgeschwindigkeiten übereinstimmt.

Die Möglichkeit, auch mit dem Materialmodell 2b lokale Phasentransformationen abzubilden, wird ebenfalls durch das zuletzt wiederholte Berechnungsbeispiel des Sinusrings gezeigt.

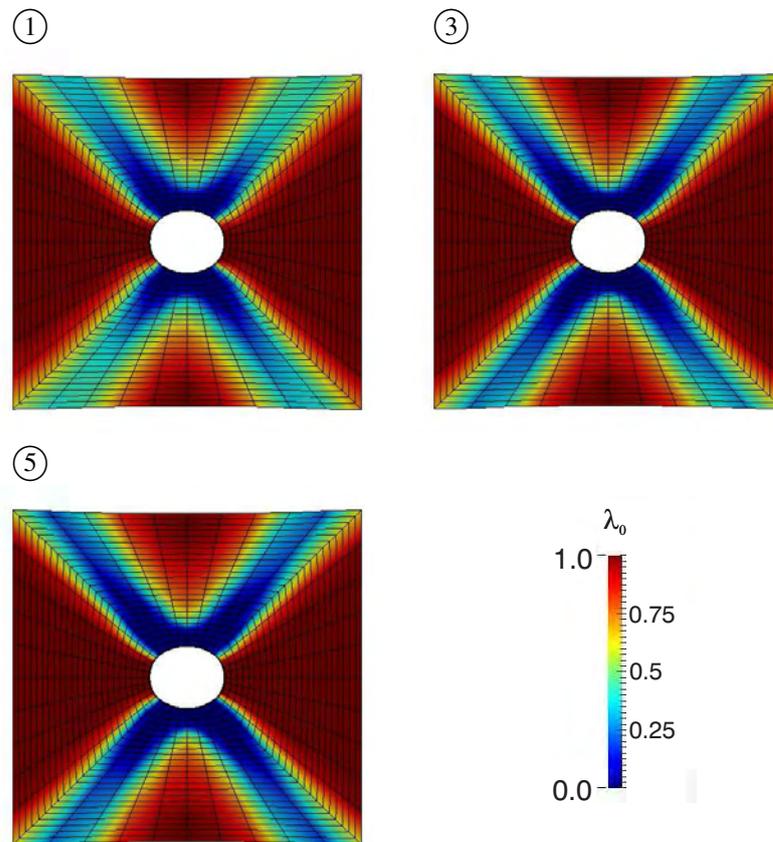


Abbildung 7.84: Lochscheibe, Modell 2b, 1000 Lastschritte je Zyklus, Austenitgehalt unterschiedlicher Lastschritte.

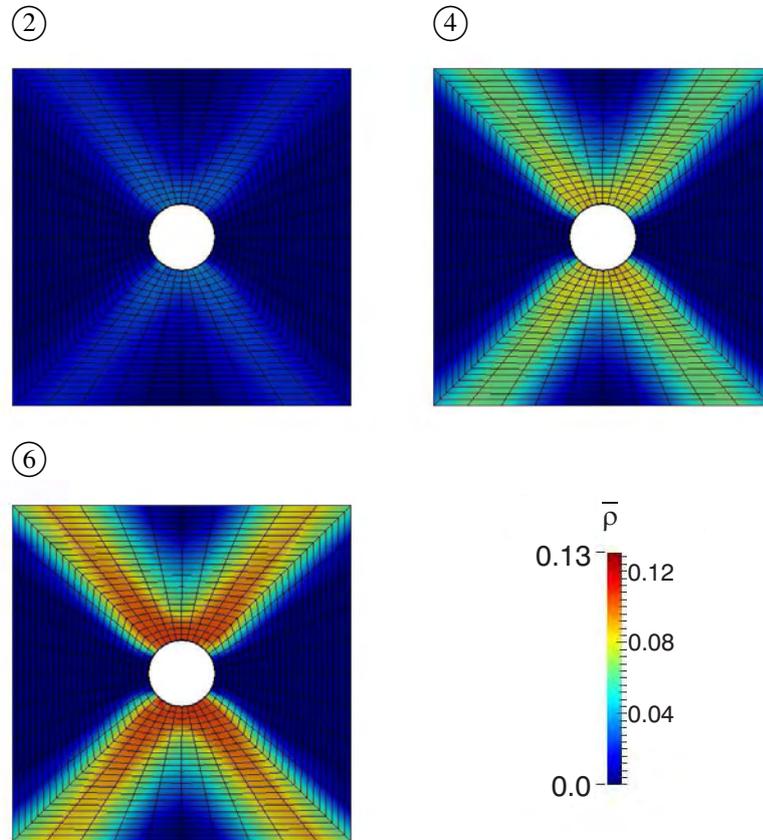


Abbildung 7.85: Lochscheibe, Modell 2b, 1000 Lastschritte je Zyklus, Martensitgehalt unterschiedlicher Belastungsschritte.

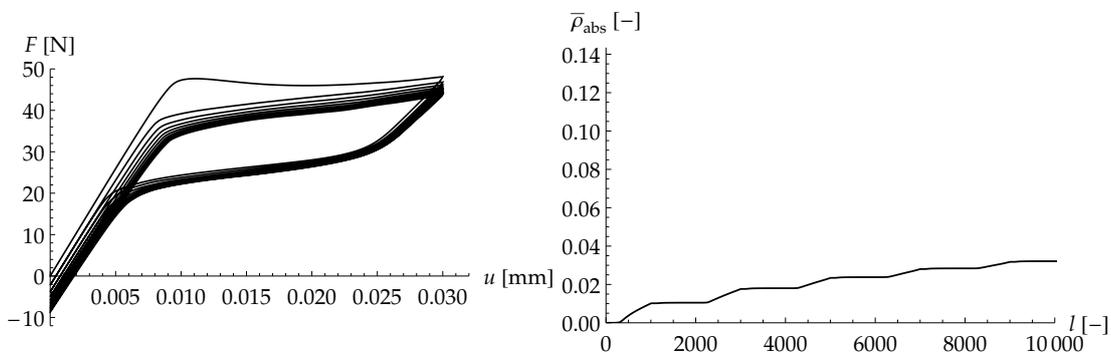


Abbildung 7.86: Lochscheibe, Modell 2b, 2000 Lastschritte je Zyklus, *links*: Last-Verformungs-Diagramm, *rechts*: irreversibler Martensit.

Die Berechnung des Sinusrings erfolgt, wie in Abbildung 7.87 dargestellt, zunächst unter Verwendung von 2000 Lastschritten pro Zyklus verglichen mit dem Ausgangsmodell 2a. Wieder

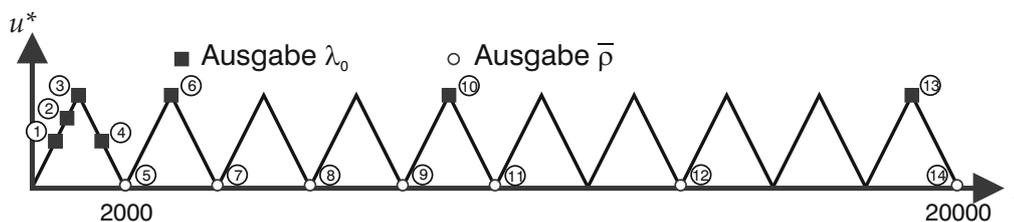


Abbildung 7.87: Sinusring, Modell 2b, 2000 Lastschritte je Zyklus, vorgegebene Verschiebungen der einzelnen Lastschritte mit Markierung der ausgegebenen Belastungsschritte.

stellt sich eine schnellere Korrektur der Eulerwinkel und damit ein schneller abgebauter Einfluss dieser auf das Last-Verformungs-Diagramm in Abbildung 7.88 ein. Der gebildete irreversible Martensit  $\bar{\rho}_{\text{abs}}$  konvergiert gegen einen vergleichbaren Wert, wie in der ratenunabhängigen Berechnung. Auch zeigen die Konturdiagramme für die Entwicklung des Austenits und des totalen

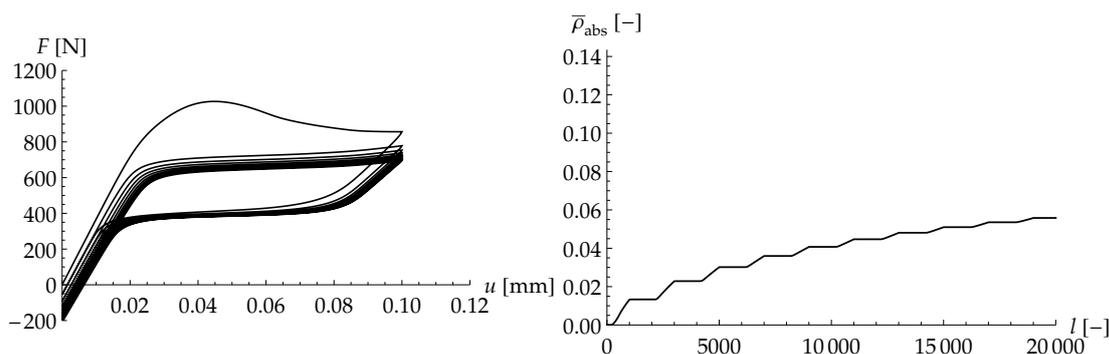


Abbildung 7.88: Sinusring, Modell 2b, 2000 Lastschritte je Zyklus, links: Last-Verformungs-Diagramm, rechts: irreversibler Martensit.

irreversiblen Martensits in den Abbildungen 7.89 und 7.90 diesmal übereinstimmende Ergebnisse. Auch die deutlich schneller stattfindende Evolution der Eulerwinkel hat keinen wesentlichen Einfluss auf die reversiblen und irreversiblen Phasentransformationen.

Abbildung 7.91 zeigt das Spannungs-Dehnungs-Diagramm sowie die Entwicklung des irreversiblen Martensits für eine Lastaufbringung in 4000 Schritten je Belastungszyklus. Äquivalent zu den bisherigen Simulationen zeigt sich auch im Fall des Sinusrings eine schnellere Anpassung der durch  $\alpha$  gekennzeichneten Orientierung der transformierenden Körner und eine leicht verzögert einsetzende Rücktransformation. Ansonsten stimmen jedoch auch in diesem Berechnungsbeispiel die bleibenden Dehnungen und der Anteil des irreversiblen Martensits sowie die Entwicklung des oberen Plateaus überein.

Ein wesentlicher Vorteil der ratenabhängigen Evolution der Phasenanteile verglichen mit der ratenunabhängigen Entwicklung kann vor allem in der Betrachtung der Rechenzeiten erwartet. Tabelle 7.1 liefert einen Überblick über die einzelnen Berechnungszeiten und verwendeten Lastschritte pro Zyklus für die Strukturen, die im Rahmen beider Modellansätze berechnet wurden. Daraus wird deutlich, dass – auch unter Berücksichtigung der unterschiedlichen Zahl an Lastschritten – das Modell 2b für die Drahtstrukturen geringere Berechnungszeiten benötigt als

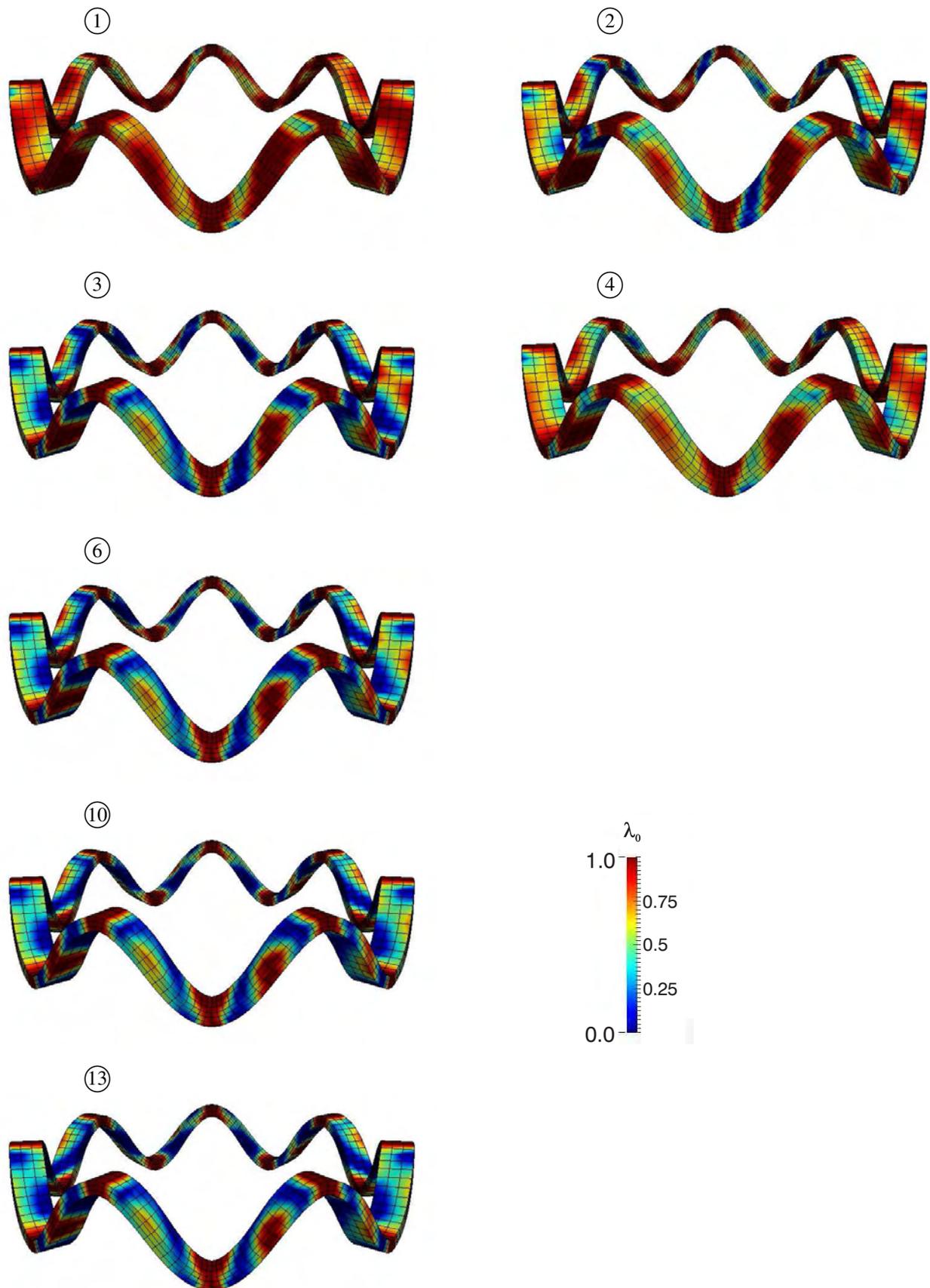


Abbildung 7.89: Sinusring, Modell 2b, 2000 Lastschritte je Zyklus, Austenitgehalt unterschiedlicher Lastschritte.

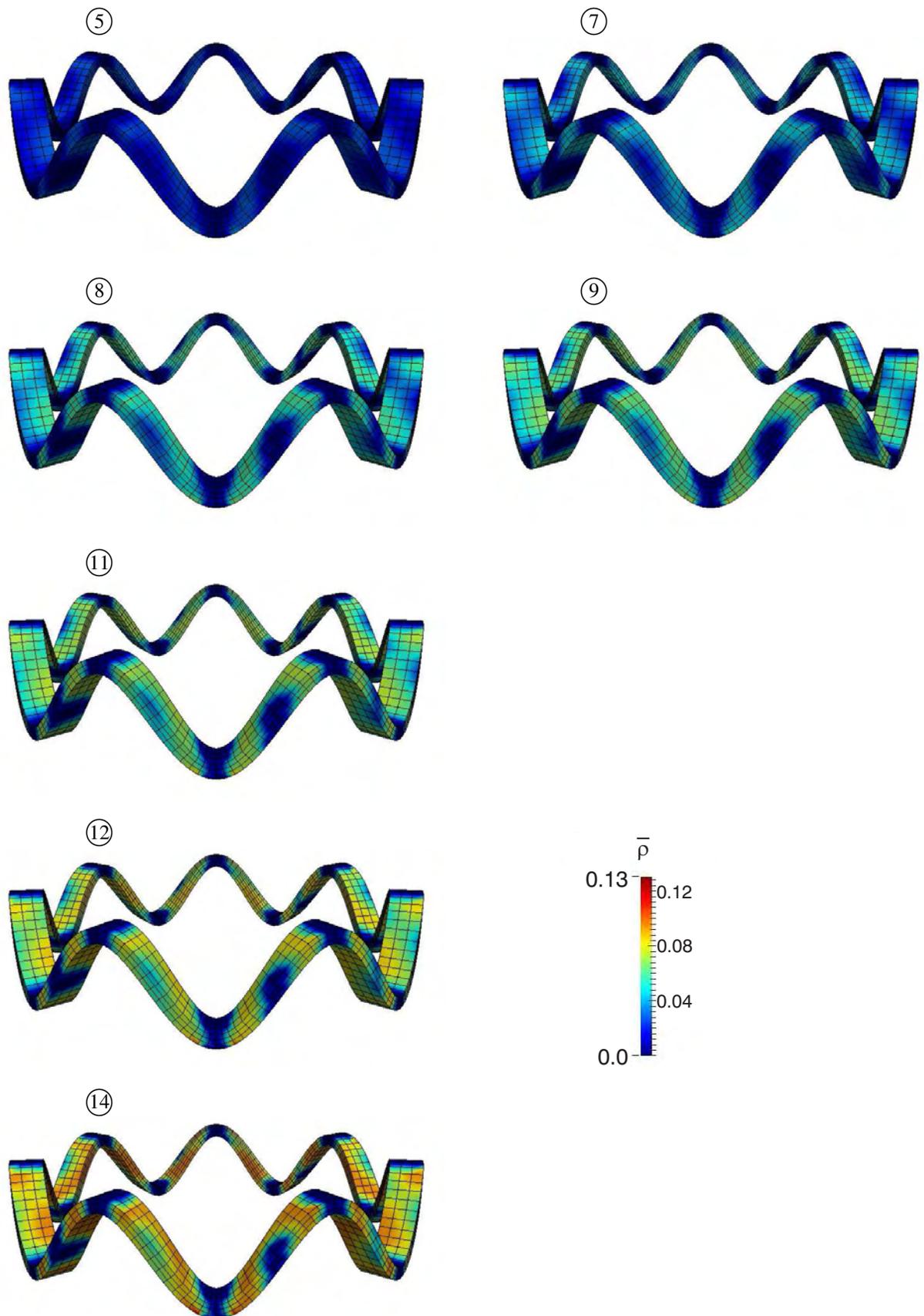


Abbildung 7.90: Sinusring, Modell 2b, 2000 Lastschritte je Zyklus, irreversibler Martensitgehalt unterschiedlicher Lastschritte.

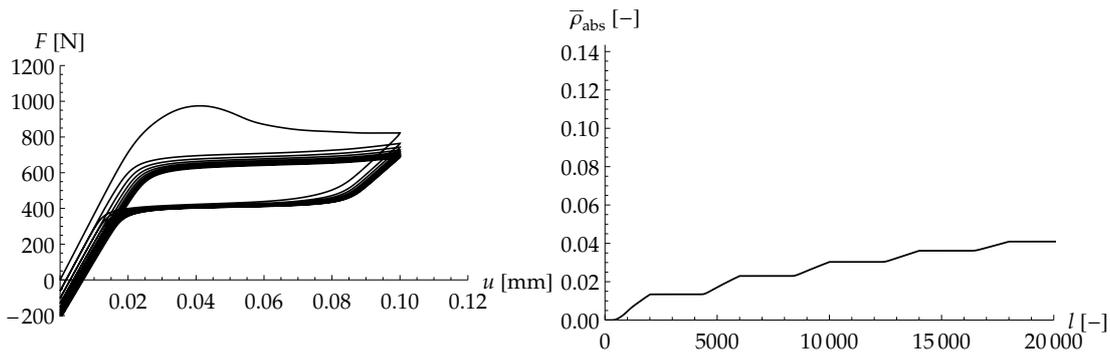


Abbildung 7.91: Sinusring, Modell 2b, 4000 Lastschritte je Zyklus, *links*: Last-Verformungs-Diagramm, *rechts*: irreversibler Martensit.

	Modell 2a		Modell 2b	
	Zeit [s]	Lastschritte je Zyklus	Zeit [s]	Lastschritte je Zyklus
Draht, 612 Elemente	17307	4000	12917	4000
	–	–	5768	2000
	–	–	2954	1000
Draht, 1020 Elemente	26724	4000	10982	2000
Sinusring	32957	4000	35671	4000
	–	–	18092	2000
Lochscheibe	9260	2000	10666	2000
	–	–	4796	1000

Tabelle 7.1: Gegenüberstellung der Berechnungszeiten der Modelle 2a und 2b.

das Modell 2a. Dieser deutliche zeitliche Vorteil ist ein Resultat des viskosen Updates der Volumenfraktion in der ratenabhängigen Berechnung, während im ratenunabhängigen Modell 2a in jedem Gaußpunkt das Newton-Verfahren angewendet wird, um die Fließgrenze erneut einzuhalten. Bei den geometrisch komplexeren Strukturen der Lochscheibe und des Sinusrings und den damit verbundenen lokaleren Phasentransformationen, verfügt jedoch das ratenunabhängige Modell über einen – wenn auch geringen – zeitlichen Vorteil gegenüber dem ratenabhängigen Modell. Ein weiterer Nachteil des Materialmodells 2b ist die Notwendigkeit der Wahl des viskosen Parameters  $\Delta t_T$ , der, wie anhand von Abbildung 7.81 deutlich, einen großen Einfluss auf das berechnete Materialverhalten hat.

Aufgrund der zeitlichen Diskretisierung der Spannung und der internen Variablen verfügen jedoch beide Modellierungsansätze mit jeweils ausschließlich zwei benötigten Iterationen pro Lastschritt über eine gute numerische Stabilität.

## 8 Fazit

In der vorliegenden Arbeit werden drei Materialmodelle vorgestellt, die simultan ablaufende Prozesse während der Phasentransformation in polykristallinen Formgedächtnislegierungen abbilden und so in der Lage sind, insbesondere den Effekt der funktionalen Ermüdung sowie die damit verbundene Spannungsplateauabsenkung und Kumulation bleibender Dehnungen abzubilden.

Die Materialmodellierung erfolgt dabei auf Grundlage der variationellen Methode des Prinzips des Minimums des Dissipationspotentials. Das erste Materialmodell berücksichtigt die Bildung plastischer Dehnungen während der Phasenumwandlung. Die beiden simultan ablaufenden mikrostrukturellen Prozesse können dabei unter Verwendung einer gekoppelten Dissipationsfunktion abgebildet werden. Des Weiteren wird für die Dissipationsfunktion ein erster Ordnung homogener Ansatz gewählt, der in ratenunabhängigen Evolutionsgleichungen für die beiden internen Variablen – der reversiblen Volumenfraktion und der plastischen Dehnung – resultiert. Die Modellierung der polykristallinen Struktur des Materials erfolgt zunächst durch die getrennte Auswertung für jedes einzelne Korn mittels einer kombinierten Voigt/Reuß-Energiegrenze. In einer vorgestellten Modifizierung zur Verbesserung des Berechnungsaufwands wird der in Junker (2014b) präsentierte Ansatz mit einer sich entwickelnden Orientierungsverteilungsfunktion verwendet. Dieser Ansatz beinhaltet drei Eulerwinkel als interne Variable, die die gemittelte Orientierung der transformierenden Körner beschreiben und sich in die energetisch günstigste Richtung drehen. Die Berücksichtigung der Eulerwinkel erfolgt unter Verwendung eines zweiter Ordnung homogenen Ansatzes für die Dissipationsfunktion und resultiert somit in ratenabhängigen Evolutionsgleichungen für diese Winkel.

Sowohl die Präsentation auf Materialpunktebene als auch die Finite-Elemente-Simulationen zeigen die Möglichkeit des ersten Materialmodells die simultanen Prozesse der plastischen Deformation und der Phasenumwandlung abzubilden. Durch die angenommenen nichtlinearen Funktionen für die Materialparameter lässt sich zudem der Effekt der funktionalen Ermüdung modellieren, der durch die Bildung einer bleibenden Dehnung und die Absenkung der Transformationsspannungen deutlich wird. Die im Rahmen des Materialmodells benötigten Parameter werden auf Materialpunktebene variiert, um deren Einfluss auf die mikrostrukturellen Entwicklungen zu dokumentieren. Die Finite-Elemente-Implementierung erfolgt des Weiteren lediglich für das modifizierte Modell, da eine in jedem Korn einzeln erfolgende Auswertung zu einem erheblich größeren Berechnungsaufwand führen würde. Anhand des ersten Beispiels eines zyklisch auf Zug belasteten Drahtes, dessen Abmessungen und Belastungen mit experimentellen Untersuchungen übereinstimmen, wird zum einen die Unabhängigkeit der Ergebnisse von der Vernetzung gezeigt, zum anderen wird durch den Vergleich mit experimentellen Daten nach Wagner (2005) die qualitativ gute Abbildung des beobachteten Materialverhaltens festgestellt. Auch die nachfolgenden Berechnungen eines Zugstreifens, einer Lochscheibe, des sinusförmigen Klemmrings und der Feder zeigen die teils sehr lokal ausgeprägte Phasentransformation und gekoppelte plastische Deformation. Keine der Simulationen – weder am Materialpunkt noch auf Finite-Elemente-Ebene – zeigt jedoch die experimentell beobachtete Bildung nicht mehr zurücktransformierender Martensitanteile.

Die Berücksichtigung eben dieses stabilisierten Anteils an Martensit bildet die Basis des zweiten Materialmodells. Experimente zeigen, dass diese unumkehrbare Stabilisierung ein Resultat der während der Transformation gebildeten Versetzungen im Material ist, auf deren direkte Berücksichtigung zu Gunsten der numerischen Effizienz des Materialmodells verzichtet wird. Vereinfachend wird die eher phänomenologische Annahme getroffen, dass die diffusionslose Phasentransformation zwischen Austenit und Martensit in einen reversiblen und einen irreversiblen Anteil unterteilt werden kann. Diese beiden mikrostrukturellen Prozesse werden durch die zum reversiblen Anteil zusätzliche Einführung einer irreversiblen Volumenfraktionen als interne Variablen in das Materialmodell integriert. Ihr simultanes Auftreten wird, wie bereits im ersten Modellansatz, durch Verwendung der gekoppelten Dissipationsfunktion erreicht. Auch die polykristalline Struktur des betrachteten Materials wird wiederum unter Verwendung der repräsentativen Orientierungsverteilungsfunktion nach Junker (2014b) angenommen. Die Herleitung der Evolutionsgleichungen der internen Variablen erfolgt im Fall der Eulerwinkel mit Wahl einer zweiten Ordnung homogenen Dissipation und somit unter Erhalt ratenabhängiger Evolutionsgleichungen. Für die Berechnung der Volumenfraktionen wird hingegen einem erster Ordnung homogenen Ansatz eine Funktion gegenübergestellt, die sich aus einem erster Ordnung homogenen und einem zweiten Ordnung homogenen Ansatz zusammensetzt, um die erhaltenden Evolutionsgleichungen elasto-plastischen und elasto-viskoplastischen Typs zu vergleichen. Für die zur Modellierung des zyklischen Verhaltens verwendeten Modellparameter wird eine experimentell basierte Kalibrierung präsentiert.

Die Vorstellung zahlreicher unterschiedlicher Simulationen auf Materialpunktebene und für makroskopische Körper zeigt auch für das zweite Materialmodell die charakteristischen Effekte der sinkenden Spannungsplateaus und der bleibenden Dehnung mit konvergierendem Charakter. Zunächst erfolgt auf Basis des ratenunabhängigen Modells die Simulation des zyklisierten Zugstabes. Anhand dieses ersten Beispiels kann sowohl durch Verwendung unterschiedlicher Netze, als auch durch den Vergleich mit experimentellen Daten gezeigt werden, dass das Materialmodell netzunabhängig und in der Lage ist, die komplexen mikrostrukturellen Entwicklungen abzubilden, wenn auch die Konvergenz der Simulation langsamer erfolgt als im Experiment. Die weiteren Beispiele des Zugstreifens, der Lochscheibe, des Risses und des Klemmrings zeigen eine teils sehr deutliche Lokalisierung der Transformationen und damit verbundene klarere Phasenfronten. Durch das abschließende Randwertproblem einer zyklisch gedehnten Feder wird zudem – anders als durch die vorherigen Berechnungen – eine stärker dreidimensional stattfindende Mikrostrukturänderung dokumentiert. Wesentliche Berechnungen auf Finite-Elemente-Ebene werden im Anschluss für das Modell mit Evolution elasto-viskoplastischen Typs wiederholt und die Ergebnisse miteinander verglichen. Es zeigt sich, dass das ratenabhängige Modell zwar grundsätzlich zu einer homogeneren mikrostrukturellen Entwicklung neigt, jedoch bei inhomogenen Spannungsverteilungen mit den Ergebnissen des ratenunabhängigen Falls übereinstimmt. Anhand des zyklisch belasteten Zugdrahts wird auch für die Evolution elasto-viskoplastischen Typs der Volumenanteile gezeigt, dass netzunabhängige Ergebnisse erreicht werden können. Ein wesentlicher Nachteil des ratenabhängigen Modells besteht jedoch in der Wahl des verwendeten viskosen Parameters, der – wie gezeigt – einen erheblichen Einfluss auf die Evolution des Austenits und der reversiblen und stabilisierten Martensitphasen hat.

Ein Vergleich der Finite-Elemente-Ergebnisse der ersten beiden Modelle zeigt Übereinstimmungen hinsichtlich der transformierenden Regionen. Der Grund dafür liegt in der in beiden Modellen berücksichtigten reversiblen Phasentransformation. Aufgrund der jeweils gewählten Dissipationsfunktionen erfolgt eine klare Dominanz der reversiblen Transformation gegenüber der Entwicklung der irreversiblen Effekte. Der entsprechende Volumenanteil entwickelt sich da-

her jeweils auf eine qualitativ ähnliche Weise, wobei die plastische Deformation bzw. Bildung irreversiblen Martensits als Begleiterscheinung zur Umwandlung modelliert wird. Ein weiterer Vergleich der Materialmodelle zeigt die Möglichkeit des zweiten Ansatzes, die Stabilisierung des Martensits und damit ausbleibende Rücktransformation abzubilden. Zwar ist die Annahme einer simultanen Bildung irreversiblen Martensits eher phänomenologischen Charakters, jedoch kann auf die Verwendung exponentieller Zusammenhänge verzichtet werden und alle verwendeten Parameter des zweiten Modells lassen sich experimentell kalibrieren.

Das abschließend präsentierte dritte Materialmodell stellt einen ersten Ansatz zur Modellierung thermischen Zyklierens dar. Da experimentell während dieses zyklischen Lastfalls keine Bildung irreversiblen Martensits dokumentiert wird bzw. die Bildung von Versetzungen im Gegensatz zum mechanischen Zyklieren nicht zur Begünstigung der Phasentransformation von Austenit zu Martensit führt, können die vorherigen beiden Modellansätze nicht auf die anderen betrachteten Temperaturbereiche übertragen werden. Die Modellierung erfolgt durch Einführung einer skalaren Variable, die die Transformationshistorie des zyklisierten Bauteils speichert und einen Einfluss auf die Energie des Materials hat. Des Weiteren wird angenommen, dass sich in Richtung der Summe der Transformationsdehnung ein konvergierender Anteil irreversibler Dehnungen bildet. Die polykristalline Struktur wird wiederum durch den in Junker (2014b) präsentierten Ansatz berücksichtigt. Die Materialpunktergebnisse für das dritte Modell zeigen sowohl für die Berechnungen eines zyklischen Temperaturversuchs als auch für den bereits mehrfach präsentierten zyklischen Zugversuch qualitativ gute Ergebnisse: für den Fall des thermischen Zyklierens kann die Absenkung der Transformationstemperaturen, für den zyklischen Zugversuch die Plateausenkung und gleichzeitige Bildung bleibender Dehnungen simuliert werden.

Zur weiteren Untersuchung der Materialmodelle bietet sich zunächst eine detailliertere Validierung durch mehr experimentelle Daten an, um den Einfluss stochastischer Abweichungen und experimentell bedingter Einflüsse zu minimieren und die langsamere Konvergenz der Simulation gegenüber dem Experiment weiter zu untersuchen. Besonders das dritte Materialmodell, das neben der Modellierung der funktionalen Ermüdung durch das mechanische Zyklieren auch die Degradierung während einer zyklischen Temperaturbelastung berücksichtigt, kann durch Implementierung im Rahmen der Finite-Elemente-Methode weitergehend untersucht werden, um gleichzeitig die für die unterschiedlichen Temperaturbereiche abweichenden Effekte zu modellieren. In diesem Zusammenhang stellt eine genauere Untersuchung der thermischen Effekte einen weiteren interessanten Ansatzpunkt dar, der beispielsweise durch Berücksichtigung einer vollständigen thermomechanischen Kopplung umgesetzt werden kann. Des Weiteren kann der Effekt der Heilung untersucht werden, der die Wiederherstellung der funktionalen Eigenschaften durch thermische Behandlung beschreibt. Um jedoch die Ursache des komplexen Materialverhaltens detaillierter zu betrachten, wird eine Modellierung der Effekte auf einer niedrigeren Skala erfolgen. Auf dieser Skala kann dann durch Kopplung mit kristallplastischen Problemen eine direkte Berücksichtigung der Versetzungsbildung durchgeführt werden. Mit einem solchen Modellansatz wird zwar die Berechnung makroskopischer Problemstellungen deutlich zeitaufwendiger und komplexer, jedoch kann auch der direkte Einfluss vorhandener Versetzungen, Korngrenzen und eventuell auch anderer lokaler Effekte wie Seigerungen untersucht werden.



## Literaturverzeichnis

- [Abeyaratne u. Kim 1997] ABEYARATNE, R. ; KIM, S.-J.: Cyclic effects in shape-memory alloys: a one-dimensional continuum model. In: *International journal of solids and structures* 34 (1997), Nr. 25, S. 3273–3289
- [Abeyaratne u. Knowles 1993] ABEYARATNE, R. ; KNOWLES, J. K.: A continuum model of a thermoelastic solid capable of undergoing phase transitions. In: *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 41 (1993), Nr. 3, S. 541–571
- [Altenbach u. Altenbach 1994] ALTENBACH, J. ; ALTENBACH, H.: *Einführung in die Kontinuums-Mechanik*. Teubner, 1994
- [Auricchio u. Petrini 2004] AURICCHIO, F. ; PETRINI, L.: A three-dimensional model describing stress-temperature induced solid phase transformations: solution algorithm and boundary value problems. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 61 (2004), Nr. 6, S. 807–836
- [Auricchio u. a. 2007] AURICCHIO, F. ; REALI, A. ; STEFANELLI, U.: A three-dimensional model describing stress-induced solid phase transformation with permanent inelasticity. In: *International Journal of Plasticity* 23 (2007), Nr. 2, S. 207–226
- [Barrera u. a. 2014] BARRERA, N. ; BISCARI, P. ; URBANO, M. F.: Macroscopic modeling of functional fatigue in shape memory alloys. In: *European Journal of Mechanics-A/Solids* 45 (2014), S. 101–109
- [Bartel u. Hackl 2009] BARTEL, T. ; HACKL, K.: A micromechanical model for martensitic phase-transformations in shape-memory alloys based on energy-relaxation. In: *ZAMM-Journal of Applied Mathematics and Mechanics/Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik* 89 (2009), Nr. 10, S. 792–809
- [Bartel u. a. 2016] BARTEL, T. ; OSMAN, M. ; MENZEL, A.: A phenomenological model for the simulation of functional fatigue in shape memory alloy wires. In: *Meccanica* (2016), S. 1–16
- [Bathe 2006] BATHE, K.-J.: *Finite element procedures*. Klaus-Jurgen Bathe, 2006
- [Bedford 1985] BEDFORD, A.: *Hamilton's principle in continuum mechanics*. Bd. 139. Pitman advanced publishing program Boston/London/Melbourne, 1985
- [Bhattacharya 2003] BHATTACHARYA, K.: *Microstructure of martensite: why it forms and how it gives rise to the shape-memory effect*. Bd. 2. Oxford University Press, 2003
- [Bo u. Lagoudas 1999] BO, Z. ; LAGOUDAS, D. C.: Thermomechanical modeling of polycrystalline SMAs under cyclic loading, Part III: Evolution of plastic strains and two-way shape memory effect. In: *International Journal of Engineering Science* 37 (1999), Nr. 9, S. 1175–1203

- [Bolotin 1999] BOLOTIN, V. V.: *Mechanics of fatigue*. Bd. 11. CRC Press, 1999
- [Bouvet u. a. 2004] BOUVET, C. ; CALLOCH, S. ; LEXCELLENT, C.: A phenomenological model for pseudoelasticity of shape memory alloys under multiaxial proportional and non-proportional loadings. In: *European Journal of Mechanics-A/Solids* 23 (2004), Nr. 1, S. 37–61
- [Boyd u. Lagoudas 1996] BOYD, J. G. ; LAGOUDAS, D. C.: A thermodynamical constitutive model for shape memory materials. Part I. The monolithic shape memory alloy. In: *International Journal of Plasticity* 12 (1996), Nr. 6, S. 805–842
- [Bruhns 2003] BRUHNS, O. T.: *Advanced mechanics of solids*. Springer, 2003
- [Burow 2010] BUROW, J.: *Herstellung, Eigenschaften und Mikrostruktur von ultrafeinkörnigen NiTi-Formgedächtnislegierungen*, Ruhr-Universität Bochum, Diss., 2010
- [Carstensen u. a. 2002] CARSTENSEN, C. ; HACKL, K. ; MIELKE, A.: Non-convex potentials and microstructures in finite-strain plasticity. In: *Proceedings of the Royal Society of London. Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 458 (2002), Nr. 2018, S. 299–317
- [Coleman u. Noll 1963] COLEMAN, B. D. ; NOLL, W.: The thermodynamics of elastic materials with heat conduction and viscosity. In: *Archive for Rational Mechanics and Analysis* 13 (1963), Nr. 1, S. 167–178
- [Delville u. a. 2011] DELVILLE, R. ; MALARD, B. ; PILCH, J. ; SITTNER, P. ; SCHRYVERS, D.: Transmission electron microscopy investigation of dislocation slip during superelastic cycling of Ni–Ti wires. In: *International Journal of Plasticity* 27 (2011), Nr. 2, S. 282–297
- [Demtröder 2017] DEMTRÖDER, W.: *Mechanics and Thermodynamics*. Springer, 2017
- [Dimitrijevic u. Hackl 2008] DIMITRIJEVIC, B. J. ; HACKL, K.: A method for gradient enhancement of continuum damage models. In: *Tech. Mech* 28 (2008), Nr. 1, S. 43–52
- [Eggeler u. a. 2004] EGGELER, G. ; HORNBOGEN, E. ; YAWNY, A. ; HECKMANN, A. ; WAGNER, M. F.-X.: Structural and functional fatigue of NiTi shape memory alloys. In: *Materials Science and Engineering: A* 378 (2004), Nr. 1, S. 24–33
- [Elsgolc 1970] ELSGOLC, L. E.: *Variationsrechnung*. BI Hochschultaschenbücher, 1970
- [Fechte-Heinen 2007] FECHTE-HEINEN, R.: *Mikromechanische Modellierung von Formgedächtnismaterialien*, Ruhr-Universität Bochum, Diss., 2007
- [Filip u. Mazanec 1996] FILIP, P. ; MAZANEC, K.: The two way memory effect in TiNi alloys. In: *Scripta materialia* 35 (1996), Nr. 3, S. 349–354
- [Fish u. Belytschko 2007] FISH, J. ; BELYTSCHKO, T.: *A first course in finite elements*. John Wiley & Sons Limited, 2007
- [Gall u. Maier 2002] GALL, K. ; MAIER, H. J.: Cyclic deformation mechanisms in precipitated NiTi shape memory alloys. In: *Acta Materialia* 50 (2002), Nr. 18, S. 4643–4657
- [Govindjee u. a. 2007] GOVINDJEE, S. ; HACKL, K. ; HEINEN, R.: An upper bound to the free energy of mixing by twin-compatible lamination for n-variant martensitic phase transformations. In: *Continuum Mechanics and Thermodynamics* 18 (2007), Nr. 7-8, S. 443–453

- [Govindjee u. Hall 2000] GOVINDJEE, S. ; HALL, G. J.: A computational model for shape memory alloys. In: *International Journal of Solids and Structures* 37 (2000), Nr. 5, S. 735–760
- [Govindjee u. Kasper 1999] GOVINDJEE, S. ; KASPER, E. P.: Computational aspects of one-dimensional shape memory alloy modeling with phase diagrams. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 171 (1999), Nr. 3, S. 309–326
- [Govindjee u. Miehe 2001] GOVINDJEE, S. ; MIEHE, C.: A multi-variant martensitic phase transformation model: formulation and numerical implementation. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 191 (2001), Nr. 3, S. 215–238
- [Grossmann u. a. 2010] GROSSMANN, C. ; SCHAEFER, A. ; WAGNER, M. F.-X.: A finite element study on localized deformation and functional fatigue in pseudoelastic NiTi strips. In: *Materials Science and Engineering: A* 527 (2010), Nr. 4, S. 1172–1178
- [Gurtin u. a. 2010] GURTIN, M. E. ; FRIED, E. ; ANAND, L.: *The mechanics and thermodynamics of continua*. Cambridge University Press, 2010
- [Hackl u. Fischer 2008] HACKL, K. ; FISCHER, F. D.: On the relation between the principle of maximum dissipation and inelastic evolution given by dissipation potentials. In: *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Science* 464 (2008), Nr. 2089, S. 117–132
- [Hackl u. Heinen 2008a] HACKL, K. ; HEINEN, R.: A micromechanical model for pre textured polycrystalline shape-memory alloys including elastic anisotropy. In: *Continuum Mechanics and Thermodynamics* 19 (2008), Nr. 8, S. 499–510
- [Hackl u. Heinen 2008b] HACKL, K. ; HEINEN, R.: An upper bound to the free energy of n-variant polycrystalline shape memory alloys. In: *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 56 (2008), Nr. 9, S. 2832–2843
- [Hackl u. a. 2008] HACKL, K. ; HEINEN, R. ; SCHMAHL, W. W. ; HASAN, M.: Experimental verification of a micromechanical model for polycrystalline shape memory alloys in dependence of martensite orientation distributions. In: *Materials Science and Engineering: A* 481 (2008), S. 347–350
- [Hackl u. a. 2004a] HACKL, K. ; SCHMIDT-BALDASSARI, M. ; ZHANG, W.: A micromechanical model for polycrystalline shape-memory alloys. In: *Materials Science and Engineering: A* 378 (2004), Nr. 1, S. 503–506
- [Hackl u. a. 2004b] HACKL, K. ; ZHANG, W. ; SCHMIDT-BALDASSARI, M. ; HOPPE, U.: Micromechanics of Tension-Compression Asymmetry of Polycrystalline Shape-Memory-Alloys. In: *Materialwissenschaft und Werkstofftechnik* 35 (2004), Nr. 5, S. 284–288
- [Hamilton 1834] HAMILTON, W. R.: On a general method in dynamics; by which the study of the motions of all free systems of attracting or repelling points is reduced to the search and differentiation of one central relation, or characteristic function. In: *Philosophical transactions of the Royal Society of London* 124 (1834), S. 247–308
- [Hamilton 1835] HAMILTON, W. R.: Second essay on a general method in dynamics. In: *Philosophical transactions of the Royal Society of London* 125 (1835), S. 95–144

- [Hartl u. Lagoudas 2007] HARTL, D. J. ; LAGOUDAS, D. C.: Aerospace applications of shape memory alloys. In: *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part G: Journal of Aerospace Engineering* 221 (2007), Nr. 4, S. 535–552
- [Heinen u. Hackl 2007] HEINEN, R. ; HACKL, K.: On the calculation of energy-minimizing phase fractions in shape memory alloys. In: *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 196 (2007), Nr. 21-24, S. 2401–2412
- [Heinen u. a. 2008] HEINEN, R. ; HOPPE, U. ; HACKL, K.: Prediction of microstructural patterns in monocrystalline shape memory alloys using global energy minimization. In: *Materials Science and Engineering: A* 481 (2008), S. 362–365
- [Hermann 2011] HERMANN, M.: *Numerische Mathematik*. Walter de Gruyter, 2011
- [Hornbogen u. a. 1973] HORNBOGEN, E. ; EGGELER, G. ; WERNER, E.: *Werkstoffe*. Springer, 1973. – 146–150 S.
- [Huo u. Müller 1993] HUO, Y. ; MÜLLER, I.: Nonequilibrium thermodynamics of pseudoelasticity. In: *Continuum Mechanics and Thermodynamics* 5 (1993), Nr. 3, S. 163–204
- [Ibarra u. a. 2007] IBARRA, A. ; SAN JUAN, J. ; BOCANEGRA, E. H. ; NÓ, M. L.: Evolution of microstructure and thermomechanical properties during superelastic compression cycling in Cu–Al–Ni single crystals. In: *Acta materialia* 55 (2007), Nr. 14, S. 4789–4798
- [Jani u. a. 2014] JANI, J. M. ; LEARY, M. ; SUBIC, A. ; GIBSON, M. A.: A review of shape memory alloy research, applications and opportunities. In: *Materials & Design* 56 (2014), S. 1078–1113
- [Junker 2011] JUNKER, P.: *Simulation of Shape Memory Alloys: Material Modeling Using the Principle of Maximum Dissipation*, Ruhr-Universität Bochum, Diss., 2011
- [Junker 2014a] JUNKER, P.: An accurate, fast and stable material model for shape memory alloys. In: *Smart Materials and Structures* 23 (2014), Nr. 11, S. 115010
- [Junker 2014b] JUNKER, P.: A novel approach to representative orientation distribution functions for modeling and simulation of polycrystalline shape memory alloys. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 98 (2014), Nr. 11, S. 799–818
- [Junker 2016] JUNKER, P.: *Variational modeling of martensitic phase transformations: Hamiltonian principles, experimental validation, numerical approaches*, Ruhr-Universität Bochum, habilitation, 2016
- [Junker u. Hackl 2011a] JUNKER, P. ; HACKL, K.: About the influence of heat conductivity on the mechanical behavior of poly-crystalline shape memory alloys. In: *The International Journal of Structural Changes in Solids* 3 (2011), Nr. 1, S. 49–62
- [Junker u. Hackl 2011b] JUNKER, P. ; HACKL, K.: Finite element simulations of polycrystalline shape memory alloys based on a micromechanical model. In: *Computational Mechanics* 47 (2011), Nr. 5, S. 505–517
- [Junker u. Hackl 2013] JUNKER, P. ; HACKL, K.: A condensed variational model for thermo-mechanically coupled phase transformations in polycrystalline shape memory alloys. In: *Journal of the Mechanical Behavior of Materials* 22 (2013), Nr. 3-4, S. 111–118

- [Junker u. Hackl 2014] JUNKER, P. ; HACKL, K.: A thermo-mechanically coupled field model for shape memory alloys. In: *Continuum Mechanics and Thermodynamics* (2014), S. 1–19
- [Junker u. Hackl 2016] JUNKER, P. ; HACKL, K.: Calibration and finite element implementation of an energy-based material model for shape memory alloys. In: *Shape Memory and Superelasticity 2* (2016), Nr. 3, S. 247–253
- [Junker u. Hempel 2017] JUNKER, P. ; HEMPEL, P.: Numerical Study of the Plasticity-Induced Stabilization Effect on Martensitic Transformations in Shape Memory Alloys. In: *Shape Memory and Superelasticity* (2017), S. 1–9
- [Junker u. a. 2015] JUNKER, P. ; JAEGER, S. ; KASTNER, O. ; EGGELER, G. ; HACKL, K.: Variational prediction of the mechanical behavior of shape memory alloys based on thermal experiments. In: *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 80 (2015), S. 86–102. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jmps.2015.04.015>. – DOI 10.1016/j.jmps.2015.04.015
- [Junker u. a. 2014] JUNKER, P. ; MAKOWSKI, J. ; HACKL, K.: The principle of the minimum of the dissipation potential for non-isothermal processes. In: *Continuum Mechanics and Thermodynamics* 26 (2014), Nr. 3, S. 259–268
- [Kielhöfer 2010] KIELHÖFER, H.: Variationsrechnung. In: *Vieweg+ Teubner, Wiesbaden* (2010)
- [Krooß u. a. 2015] KROOSS, P. ; NIENDORF, T. ; KADLETZ, P. M. ; SOMSEN, C. ; GUTMANN, M. J. ; CHUMLYAKOV, Y. I. ; SCHMAHL, W. W. ; EGGELER, G. ; MAIER, H. J.: Functional Fatigue and Tension–Compression Asymmetry in [001]-Oriented Co<sub>49</sub>Ni<sub>21</sub>Ga<sub>30</sub> High-Temperature Shape Memory Alloy Single Crystals. In: *Shape Memory and Superelasticity 1* (2015), Nr. 1, S. 6–17
- [Lagoudas 2008] LAGOUDAS, D. C.: *Shape memory alloys: modeling and engineering applications*. Springer, 2008
- [Lagoudas u. Entchev 2004] LAGOUDAS, D. C. ; ENTCHEV, P. B.: Modeling of transformation-induced plasticity and its effect on the behavior of porous shape memory alloys. Part I: constitutive model for fully dense SMAs. In: *Mechanics of Materials* 36 (2004), Nr. 9, S. 865–892
- [Lanczos 1970] LANCZOS, C.: *The Variational Principles of Mechanics*. Bd. 4. Courier Corporation, 1970
- [Laplanche u. a. 2015] LAPLANCHE, G. ; KAZUCH, A. ; EGGELER, G.: Processing of NiTi shape memory sheets–Microstructural heterogeneity and evolution of texture. In: *Journal of Alloys and Compounds* 651 (2015), S. 333–339
- [Le 2010] LE, K. C.: *Introduction to Micromechanics*. Nova Science, 2010
- [Lexcelent u. Bourbon 1996] LEXCELLENT, C. ; BOURBON, G.: Thermodynamical model of cyclic behaviour of Ti–Ni and Cu–Zn–Al shape memory alloys under isothermal undulated tensile tests. In: *Mechanics of Materials* 24 (1996), Nr. 1, S. 59–73
- [Lublinter 1972] LUBLINER, J.: On the thermodynamic foundations of non-linear solid mechanics. In: *International Journal of Non-Linear Mechanics* 7 (1972), Nr. 3, S. 237–254
- [Lublinter 2008] LUBLINER, J.: *Plasticity theory*. Courier Corporation, 2008

- [Machado u. Savi 2003] MACHADO, L. G. ; SAVI, M. A.: Medical applications of shape memory alloys. In: *Brazilian Journal of Medical and Biological Research* 36 (2003), Nr. 6, S. 683–691
- [Mehrabadi u. Cowin 1990] MEHRABADI, M. M. ; COWIN, S. C.: Eigentensors of linear anisotropic elastic materials. In: *The Quarterly Journal of Mechanics and Applied Mathematics* 43 (1990), Nr. 1, S. 15–41
- [Miyazaki u. a. 1986a] MIYAZAKI, S. ; IGO, Y. ; OTSUKA, K.: Effect of thermal cycling on the transformation temperatures of Ti-Ni alloys. In: *Acta Metallurgica* 34 (1986), Nr. 10, S. 2045–2051
- [Miyazaki u. a. 1986b] MIYAZAKI, S. ; IMAI, T. ; IGO, Y. ; OTSUKA, K.: Effect of cyclic deformation on the pseudoelasticity characteristics of Ti-Ni alloys. In: *Metallurgical Transactions A* 17 (1986), Nr. 1, S. 115–120
- [Morgan u. Friend 2001] MORGAN, N. B. ; FRIEND, C. M.: A review of shape memory stability in NiTi alloys. In: *Le Journal de Physique IV* 11 (2001), Nr. 8, S. 325–332
- [Müller 2016] MÜLLER, R.: *Thermodynamik: Vom Tautropfen zum Solarkraftwerk*. Walter de Gruyter GmbH & Co KG, 2016
- [National Technology & Engineering Solutions of Sandia, LLC (NTESS), Kitware Inc. 2005] NATIONAL TECHNOLOGY & ENGINEERING SOLUTIONS OF SANDIA, LLC (NTESS), KITWARE INC.: *ParaView*. <https://www.paraview.org/>. Version: 2005–2017
- [Ortiz u. Repetto 1999] ORTIZ, M. ; REPETTO, E. A.: Nonconvex energy minimization and dislocation structures in ductile single crystals. In: *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 47 (1999), Nr. 2, S. 397–462
- [Otsuka u. Ren 2005] OTSUKA, K. ; REN, X.: Physical metallurgy of Ti–Ni-based shape memory alloys. In: *Progress in Materials Science* 50 (2005), Nr. 5, S. 511–678
- [Otsuka u. Wayman 1999] OTSUKA, K. ; WAYMAN, C. M.: *Shape memory materials*. Cambridge University Press, 1999
- [Panico u. Brinson 2007] PANICO, M. ; BRINSON, L. C.: A three-dimensional phenomenological model for martensite reorientation in shape memory alloys. In: *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 55 (2007), Nr. 11, S. 2491–2511
- [Perkins u. Muesing 1983] PERKINS, J. ; MUESING, W. E.: Martensitic transformation cycling effects in Cu-Zn-Al shape memory alloys. In: *Metallurgical Transactions A* 14 (1983), Nr. 1, S. 33–36
- [Reddy 2002] REDDY, J. N.: *Energy Principles and Variational Methods in Applied Mechanics*. John Wiley & Sons, 2002
- [Rockafellar u. Wets 1998] ROCKAFELLAR, R. T. ; WETS, R. J.-B.: *Variational analysis*. 1998
- [Saint-Sulpice u. a. 2009] SAINT-SULPICE, L. ; ARBAB CHIRANI, S. ; CALLOCH, S.: A 3D super-elastic model for shape memory alloys taking into account progressive strain under cyclic loadings. In: *Mechanics of materials* 41 (2009), Nr. 1, S. 12–26

- [Schäfer u. Wagner 2009] SCHÄFER, A. ; WAGNER, M. F.-X.: Strain mapping at propagating interfaces in pseudoelastic NiTi. In: *European Symposium on Martensitic Transformations* EDP Sciences, 2009, S. 06031
- [Schäfer 2013] SCHÄFER, M.: *Numerik im Maschinenbau*. Springer-Verlag, 2013
- [Shaw 2000] SHAW, J. A.: Simulations of localized thermo-mechanical behavior in a NiTi shape memory alloy. In: *International Journal of Plasticity* 16 (2000), Nr. 5, S. 541–562
- [Shaw u. Kyriakides 1997] SHAW, J. A. ; KYRIAKIDES, S.: On the nucleation and propagation of phase transformation fronts in a NiTi alloy. In: *Acta materialia* 45 (1997), Nr. 2, S. 683–700
- [Simon u. a. 2010] SIMON, T. ; KRÖGER, A. ; SOMSEN, C. ; DLOUHY, A. ; EGGELER, G.: On the multiplication of dislocations during martensitic transformations in NiTi shape memory alloys. In: *Acta Materialia* 58 (2010), Nr. 5, S. 1850–1860
- [Song u. a. 2006] SONG, G. ; MA, N. ; LI, H.-N.: Applications of shape memory alloys in civil structures. In: *Engineering structures* 28 (2006), Nr. 9, S. 1266–1274
- [Stebner u. Brinson 2013] STEBNER, A. P. ; BRINSON, L. C.: Explicit finite element implementation of an improved three dimensional constitutive model for shape memory alloys. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 257 (2013), S. 17–35
- [Stein u. Sagar 2008] STEIN, E. ; SAGAR, G.: Theory and finite element computation of cyclic martensitic phase transformation at finite strain. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 74 (2008), Nr. 1, S. 1–31
- [Stupkiewicz u. Petryk 2002] STUPKIEWICZ, S. ; PETRYK, H.: Modelling of laminated microstructures in stress-induced martensitic transformations. In: *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 50 (2002), Nr. 11, S. 2303–2331
- [Suresh 1998] SURESH, S.: *Fatigue of materials*. Cambridge university press, 1998
- [Tanaka u. a. 1995] TANAKA, K. ; NISHIMURA, F. ; HAYASHI, T. ; TOBUSHI, H. ; LEXCELLENT, C.: Phenomenological analysis on subloops and cyclic behavior in shape memory alloys under mechanical and/or thermal loads. In: *Mechanics of Materials* 19 (1995), Nr. 4, S. 281–292
- [Taylor 1934] TAYLOR, G. I.: The mechanism of plastic deformation of crystals. Part I. Theoretical. In: *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character* (1934), S. 362–387
- [University of California, Berkeley 2003] UNIVERSITY OF CALIFORNIA, BERKELEY: *FEAP – A Finite Element Analysis Program*. <http://projects.ce.berkeley.edu/feap/>. Version: 2003
- [Van Humbeeck 1999] VAN HUMBEECK, J.: Non-medical applications of shape memory alloys. In: *Materials Science and Engineering: A* 273 (1999), S. 134–148
- [Wagner 2005] WAGNER, M. F.-X.: *Ein Beitrag zur strukturellen und funktionalen Ermüdung von Drähten und Federn aus NiTi-Formgedächtnislegierungen*. Europ. Univ.-Verlag, 2005

- [Wagner u. a. 2008] WAGNER, M. F.-X. ; NAYAN, N. ; RAMAMURTY, U.: Healing of fatigue damage in NiTi shape memory alloys. In: *Journal of Physics D: Applied Physics* 41 (2008), Nr. 18, S. 185408
- [Wagner u. Windl 2008] WAGNER, M. F.-X. ; WINDL, W.: Lattice stability, elastic constants and macroscopic moduli of NiTi martensites from first principles. In: *Acta Materialia* 56 (2008), Nr. 20, S. 6232–6245
- [Waimann u. a. 2018] WAIMANN, J. ; HACKL, K. ; JUNKER, P.: Variational modeling and finite-element simulation of functional fatigue in polycrystalline shape memory alloys. In: *Journal of Optimization Theory and Applications - Invited special issue, under review* (2018)
- [Waimann u. a. 2015] WAIMANN, J. ; JUNKER, P. ; HACKL, K.: A variational material model for transformation-induced plasticity in polycrystalline steels. In: *Journal of the Mechanical Behavior of Materials* 24 (2015), Nr. 5-6, S. 153–159
- [Waimann u. a. 2016] WAIMANN, J. ; JUNKER, P. ; HACKL, K.: A coupled dissipation functional for modeling the functional fatigue in polycrystalline shape memory alloys. In: *European Journal of Mechanics-A/Solids* 55 (2016), S. 110–121
- [Waimann u. a. 2017] WAIMANN, J. ; JUNKER, P. ; HACKL, K.: Modeling the Cyclic Behavior of Shape Memory Alloys. In: *Shape Memory and Superelasticity* 3 (2017), S. 124–138
- [Wei u. a. 1998] WEI, Z. G. ; SANDSTRÖM, R. ; MIYAZAKI, S.: Shape-memory materials and hybrid composites for smart systems: Part I Shape-memory materials. In: *Journal of Materials Science* 33 (1998), Nr. 15, S. 3743–3762
- [Willner 2003] WILLNER, K.: *Kontinuums- und Kontaktmechanik: Synthetische und analytische Darstellung*. 2003
- [Wriggers 2013] WRIGGERS, P.: *Nichtlineare Finite-Element-Methoden*. Springer-Verlag, 2013
- [Zaki u. Moumni 2007a] ZAKI, W. ; MOUMNI, Z.: A 3D model of the cyclic thermomechanical behavior of shape memory alloys. In: *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 55 (2007), Nr. 11, S. 2427–2454
- [Zaki u. Moumni 2007b] ZAKI, W. ; MOUMNI, Z.: A three-dimensional model of the thermomechanical behavior of shape memory alloys. In: *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 55 (2007), Nr. 11, S. 2455–2490
- [Zienkiewicz u. Taylor 2000a] ZIENKIEWICZ, O. C. ; TAYLOR, R. L.: *The finite element method: Solid mechanics*. Bd. 2. Butterworth-heinemann, 2000
- [Zienkiewicz u. Taylor 2000b] ZIENKIEWICZ, O. C. ; TAYLOR, R. L.: *The finite element method: The Basis*. Bd. 1. Butterworth-heinemann, 2000

**Hinweis auf Vorveröffentlichungen**

Nach §7(1) sei darauf hingewiesen, dass Teile dieser Arbeit vorab in englischer Sprache in wissenschaftlichen Fachzeitschriften veröffentlicht wurden. Dies geschah in Absprache mit den Betreuern, Prof. Dr. rer. nat. Klaus Hackl und PD Dr.-Ing. Philipp Junker. Auf die Verwendung dieser Artikel wurde an entsprechenden Stellen in der Arbeit verwiesen. Es handelt sich hierbei um die folgenden Veröffentlichungen:

- Waimann, J., Junker, P., Hackl, K., 2014. Functional Fatigue in polycrystalline Shape Memory Alloys. Proc. Appl. Math. Mech. 14, 371–372.  
doi: 10.1002/pamm.201410173
- Waimann, J., Junker, P., Hackl, K., 2015. A micromechanical model for the transformation induced plasticity in polycrystalline steels. Proc. Appl. Math. Mech. 15, 371–372.  
doi: 10.1002/pamm.201510176
- Waimann, J., Junker, P., Hackl, K., 2016. A variational model for the functional fatigue in polycrystalline shape memory alloys. Proc. Appl. Math. Mech. 16, 405–406.  
doi: 10.1002/pamm.201610191
- Waimann, J., Junker, P., Hackl, K., 2016. A variational material model for transformation-induced plasticity in polycrystalline steels. J. Mech. Behav. Mater. 2015, 24(5–6), 153–159.  
doi: 10.1515/jmbm-2015-0022
- Waimann, J., Junker, P., Hackl, K., 2016. A coupled dissipation functional for modeling the functional fatigue in polycrystalline shape memory alloys. Eur. J. Mech. A-Solid 55(2016), 110–121.  
doi: 10.1016/j.euromechsol.2015.08.001
- Waimann, J., Junker, P., Hackl, K., 2017. Modeling the cyclic behavior of shape memory alloys. Shap.Mem. Superelasticity (2017) 3,124–138.  
doi: 10.1007/s40830-017-0105-4
- Waimann, J., Junker, P., Hackl, K., 2017. Finite element implementation and simulation of the functional fatigue in shape memory alloys. Proc. Appl. Math. Mech. 17, 479–480.  
doi: 10.1002/pamm.201710209
- Waimann, J., Junker, P., Hackl, K., 2018. A variational material model for the cyclic behavior of polycrystalline shape memory alloys. Oberwolfach Reports, *akzeptiert*.
- Waimann, J., Junker, P., Hackl, K., 2018. Finite element investigations on the cyclic behavior of shape memory alloys. Proc. Appl. Math. Mech. 18, *akzeptiert*.
- Waimann, J., Junker, P., Hackl, K., 2018. Variational modeling and finite-element simulation of functional fatigue in polycrystalline shape memory alloys. Journal of Optimization Theory and Applications - Invited special issue, *in Begutachtung*.

## Lebenslauf

### Persönliche Daten

Name	Johanna Waimann
Geburtsdatum	08.03.1989
Geburtsort	Castrop-Rauxel, Deutschland
Nationalität	deutsch
Familienstand	ledig

### Ausbildung

seit 11/2013	Doktorandin, Lehrstuhl für Mechanik-Materialtheorie, Ruhr-Universität Bochum, Deutschland
seit 11/2013	Mitglied der Graduiertenschule SiMiDe - Simulation-based Microstructure Design, Universitätsallianz Ruhr
10/2011-09/2013	Master-Studium Bauingenieurwesen Ruhr-Universität Bochum, Deutschland Spezialisierung: Konstruktiver Ingenieurbau - Computational Mechanics Abschluss: Master of Science (Note: 1,0)
10/2011-09/2013	Bachelor-Studium Bauingenieurwesen Ruhr-Universität Bochum, Deutschland Abschluss: Bachelor of Science (Note: 1,3)
08/1999-06/2008	Adalbert-Stifter Gymnasium, Castrop-Rauxel, Deutschland Abschluss: Abitur (Note: 1,9)
08/1995-06/1999	Friedrich-Harkort Grundschule, Castrop-Rauxel, Deutschland

### Berufliche Erfahrungen

seit 11/2013	Wissenschaftliche Mitarbeiterin, Lehrstuhl für Mechanik-Materialtheorie, Ruhr-Universität Bochum, Deutschland
11/2009-09/2013	Studentische Hilfskraft, Lehrstuhl für Mechanik-Materialtheorie, Ruhr-Universität Bochum, Deutschland
06/2012-08/2012	Forschungspraktikum (Betreuer: Prof. Jean H. Prévost), REACH Program, Department of Civil and Environmental Engineering, Princeton University, NJ, USA
06/2008-09/2009	Studentische Hilfskraft, W+G Ingenieurgesellschaft mbH, Dortmund

### Stipendien und Auszeichnungen

10/2009-09/2011	Stipendium des Bildungsfonds der Ruhr-Universität Bochum
12/2011	Buchpreis der Fakultät für Bau- und Umweltingenieurwissenschaften, Ruhr-Universität Bochum

**Mitteilungen aus dem Institut für Mechanik  
RUHR-UNIVERSITÄT BOCHUM  
Nr. 179**

**ISBN 978-3-935892-57-5**