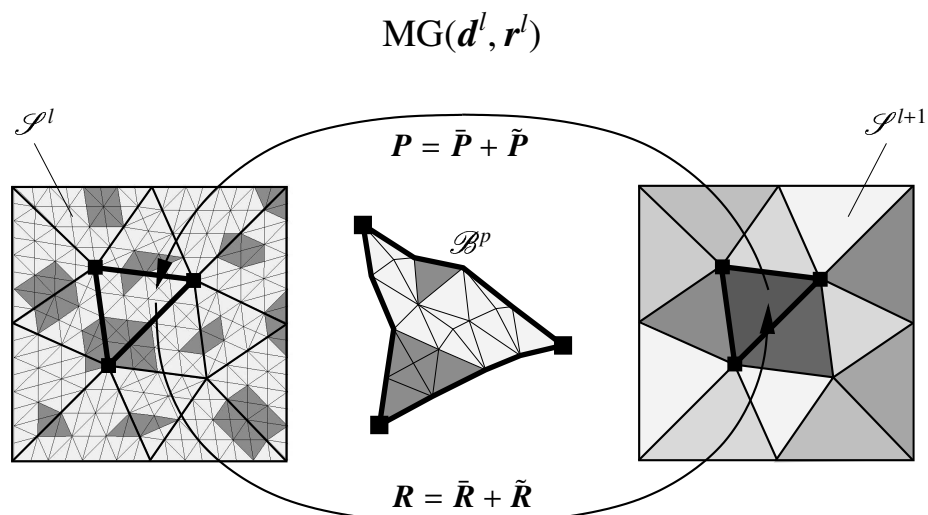




# Mehrskalenmodelle in der Festkörpermechanik und Kopplung von Mehrgittermethoden mit Homogenisierungsverfahren

Claus Bayreuther



$$\bar{W}^h(\mathbf{d}^{l+1}) = \frac{1}{|\mathcal{B}^p|} \int_{\mathcal{B}^p} W^h(\mathbf{d}^l) dV + RB(\mathbf{d}^l, \mathbf{d}^{l+1}) \rightarrow \underset{\mathbf{d}^l \in \mathcal{S}^l}{\text{MIN}} \Rightarrow \mathbf{P} = \mathbf{R}^T$$

Bericht Nr.: I-16 (2005)  
 Institut für Mechanik (Bauwesen) Lehrstuhl I  
 Professor Dr.-Ing. C. Miehe  
 Stuttgart 2005







# **Mehrskalenmodelle in der Festkörpermechanik und Kopplung von Mehrgittermethoden mit Homogenisierungsverfahren**

Von der Fakultät Bau- und Umweltingenieurwissenschaften  
der Universität Stuttgart zur Erlangung der Würde  
eines Doktor-Ingenieurs (Dr.-Ing.)  
genehmigte Abhandlung

vorgelegt von

**Claus Bayreuther**

aus Schirnsdorf in Mittelfranken

Hauptberichter: Prof. Dr.-Ing. C. Miehe

Mitberichter: Prof. Dr.-Ing. J. Schröder

Tag der Einreichung: 16. Juni 2004

Tag der mündlichen Prüfung: 21. Dezember 2004

Institut für Mechanik (Bauwesen) der Universität Stuttgart  
2005

**Herausgeber:**

Prof. Dr.-Ing. habil. C. Miehe

**Organisation und Verwaltung:**

A. Zimmermann  
Institut für Mechanik (Bauwesen)  
Lehrstuhl I  
Universität Stuttgart  
Pfaffenwaldring 7  
70550 Stuttgart  
Tel.: ++49-(0)711 / 685-6378  
Fax.: ++49-(0)711 / 685-6347

© C.G. Bayreuther  
Institut für Mechanik (Bauwesen)  
Lehrstuhl I  
Universität Stuttgart  
Pfaffenwaldring 7  
70550 Stuttgart  
Tel.: ++49-(0)711 / 685-6377  
Fax.: ++49-(0)711 / 685-6347

Alle Rechte, insbesondere das der Übersetzung in fremde Sprachen, vorbehalten. Ohne Genehmigung des Autors ist es nicht gestattet, dieses Heft ganz oder teilweise auf fotomechanischem Wege (Fotokopie, Mikrokopie) zu vervielfältigen.

ISBN 3-937859-04-7 (D 93 Stuttgart)

## Zusammenfassung

Ziel dieser Arbeit ist die Formulierung von nichtlinearen homogenisierten Ersatzmodellen für mikroheterogene Materialien und die Konstruktion problemabhängiger Transferoperatoren für Mehrgitterverfahren. Beide Themenkomplexe haben eine effiziente Beschreibung heterogener Festkörperstrukturen zum Ziel. Die Simulation von Verbundstrukturen stellt ein sehr komplexes Problem dar, insbesondere wenn die Skalenabhängigkeit des Werkstoffs miteinbezogen wird. Dies gründet darin, daß die Dimension des makroskopischen Randwertproblems und die Abmessungen der Heterogenitäten auf der Mikroskala stark voneinander abweichen können. In diesem Fall ist eine effiziente Modellierung nur durch geeignete Mehrskalenbildung möglich. In dieser Arbeit werden analytische und neu entwickelte numerische Homogenisierungsmodelle für Skalenübergänge aufbereitet. Im Gegensatz zu analytischen Konzepten gestattet die Methode der Finite Elemente universelle Einsatzmöglichkeiten der numerischen Modelle. Die neuen numerischen Ansätze basieren auf diskreten Variationsprinzipien, deren Umsetzung auf der Mikroskala die Lösung eines Randwertproblems mit speziellen Randbedingungen erfordert: (i) lineare oder (ii) periodische Randverschiebungen oder (iii) homogene Randspannungen auf dem Rand einer charakteristischen Mikrostruktur. Die Effizienz der neuen numerischen Ersatzmodelle wird anhand repräsentativer Einheitszellen verifiziert. Bei kleiner Skalenseparation führt die direkte numerische Diskretisierung des Verbundwerkstoffs in der Regel auf großdimensionierte Gleichungssysteme, die den Einsatz schneller Löser, wie Mehrgitterverfahren, bedingen. Bei Mehrgittermethoden liegt die Schwierigkeit in der Konstruktion geeigneter Transferoperatoren. In dieser Arbeit wird dieses Problem durch Einbeziehung der neu entwickelten Homogenisierungstechniken gelöst. Effizienz und Anwendungsgrenzen der neuen Transferoperatoren werden an typischen Modellproblemen im Vergleich zu alternativen Konzepten aufgezeigt.

## Abstract

Goal of this thesis is the formulation of nonlinear homogenized models for micro-heterogeneous materials and the construction of problem dependent transfer operators for multigrid methods. Both topics focus upon the efficient description of heterogeneous solid structures. The simulation of composites represents a major problem, particularly whenever scale effects inside materials are taken into account, since the dimension of the macroscopic boundary value problem may distinctly differ from the dimension of the heterogeneities on the microscale. In this case, efficient modelling is only achieved by means of an adequate multiscale formation. In this thesis, analytical and recently developed numerical homogenization models are prepared with regard to scale transitions. In contrast to analytical concepts, the finite element method allows all-purpose applications of numerical methods. The points of departure of the new approaches are discrete variational principles yielding the solution of a boundary value problem on the microscale in conjunction with special boundary conditions: (i) linear or (ii) periodic boundary displacements or (iii) homogeneous stresses on the boundary of a characteristic microstructure. The efficiency of the new homogenization models is verified within selected unit cell problems. In case of a small scale separation, the direct numerical discretization of composites generally leads to large systems of equations requiring the application of fast solvers such as multigrid methods. These multigrid methods imply the construction of suitable transfer operators. The key idea in this thesis is to incorporate the newly developed homogenization techniques. The efficiency and limits of the new transfer operators are investigated within the scope of typical model problems in comparison with alternative transfer concepts.





## Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Mechanik (Bauwesen) der Universität Stuttgart. Ich habe während dieser Zeit im Teilprojekt C6 *Mehrskalennmodelle und Mehrgitterverfahren* des Sonderforschungsbereichs 404 *Mehrfeldprobleme in der Kontinuumsmechanik* gearbeitet. In dieser Forschungsgruppe sind einzelne Ergebnisse aus der vorliegenden Arbeit eingeflossen.

An dieser Stelle möchte ich Professor Christian Miehe für die Anregung zu dieser Arbeit und die Unterstützung während meiner Tätigkeit am Institut meinen besonderen Dank aussprechen. Ich danke Herrn Professor Miehe außerdem für die Übernahme des Hauptberichts. Herrn Professor Jörg Schröder danke ich für sein großes Interesse an dieser Arbeit und die Betreuung in seiner Zeit als Akademischer Rat am Institut für Mechanik. Ferner danke ich Herrn Professor Jörg Schröder für die Übernahme des Mitberichts. Darüber hinaus möchte ich Professor Christian Wiens und Professor Gundolf Haase für die zahlreichen Ratschläge und Diskussionen im Bereich Mehrgitterverfahren danken.

Allen Mitarbeitern des Instituts für Mechanik danke ich für die sehr angenehme Arbeitsatmosphäre. Dabei möchte ich mich besonders bei meinen ehemaligen Zimmerkollegen Seokho Lee und Holger Zecha bedanken, zu denen ich auch privat ein sehr gutes freundschaftliches Verhältnis hatte. Ein weiterer Dank gebührt Andreas Koch für die hilfreichen fachlichen Diskussionen in numerischen Themen.

Meinen Eltern und insbesondere meiner Frau Susanne und meinen Kindern Niklas, Pascal und Selina danke ich für ihren starken Rückhalt und ihre großartige Unterstützung. Meinem Vater danke ich auch für das aufwendige Korrekturlesen meiner Arbeit.

Schirnsdorf, August 2005

Claus Bayreuther



# Inhaltsverzeichnis

<b>I. Einordnung und Ziele der Arbeit</b> .....	<b>1</b>
<b>II. Grundlagen der Kontinuumsmechanik, Finite Elemente und konvexen Analysis</b> ..	<b>7</b>
1. Grundlagen der Kontinuumsmechanik .....	7
1.1. Kinematische Grundlagen .....	7
1.1.1. Materieller Körper, Konfigurationen, Koordinatendarstellung .....	8
1.1.2. Deformation von Linien-, Flächen- und Volumenelementen .....	10
1.1.3. Deformation und Verzerrung .....	10
1.2. Spannungstensoren .....	11
1.3. Bilanzgleichungen der Kontinuumsmechanik .....	12
1.3.1. Erhaltung der Masse .....	13
1.3.2. Erhaltung des Impulses .....	13
1.3.3. Erhaltung des Drehimpulses .....	14
1.3.4. Erhaltung der Energie .....	14
1.3.5. Entropiegleichung .....	15
2. Variationsformulierung und Finite Elementdiskretisierung .....	16
2.1. Beschreibung des Randwertproblems .....	16
2.2. FE-Formulierung bei kleinen linear elastischen Verzerrungen .....	17
2.2.1. Schwache Formulierung des Randwertproblems .....	17
2.2.2. FE-Diskretisierung .....	18
2.3. FE-Formulierung bei kleinen nichtlinear elastischen Verzerrungen .....	19
2.3.1. Linearisierte schwache Formulierung des Randwertproblems .....	19
2.3.2. FE-Diskretisierung .....	20
2.4. Inkrementelle Variationsformulierung der Inelastizität .....	21
2.4.1. Interne Variablenformulierung .....	21
2.4.2. Inkrementelle Variationsformulierung .....	23
2.4.3. Diskrete inkrementelle Variationsformulierung .....	25
2.5. FE-Formulierung bei finiten elastischen Verzerrungen .....	27
2.5.1. Linearisierte schwache Formulierung des Randwertproblems .....	27
2.5.2. FE-Diskretisierung .....	28
2.6. Elementformulierungen .....	30
3. Auszüge aus der konvexen Analysis .....	31
3.1. Konvexe Funktionen .....	31

3.2. Legendre-Fenchel-Transformation . . . . .	32
3.3. Konstitutive Ungleichungen . . . . .	34
3.4. Lagrange-Funktionale als Sattelpunktprobleme . . . . .	35
<b>III. Mehrskalenmodellierung . . . . .</b>	<b>37</b>
1. Konzept der Mikro-Makro-Übergänge . . . . .	39
1.1. Konzept des repräsentativen Volumenelements . . . . .	40
1.2. Definition effektiver Feldvariablen . . . . .	42
1.2.1. Definition makroskopischer Deformationen und Verzerrungen . . . . .	43
1.2.2. Definition makroskopischer Spannungen . . . . .	44
1.3. Hill-Bedingung . . . . .	46
1.4. Makroskopisches und mikroskopisches Randwertproblem . . . . .	47
1.4.1. Randwertproblem auf der Makroskale . . . . .	47
1.4.2. Randwertproblem auf der Mikroskale . . . . .	48
1.4.3. Eindeutigkeit der effektiven Spannungsantwort . . . . .	49
1.4.4. Physikalischer Gültigkeitsbereich der effektiven Spannungsantwort . . . . .	51
2. Prinzipien der analytischen Homogenisierung . . . . .	52
2.1. Eshelbys Einbettungsverfahren . . . . .	52
2.1.1. Konzept vom äquivalent homogenen Körper . . . . .	52
2.1.2. Transformationsverzerrungen und -spannungen . . . . .	55
2.1.3. Eshelbytensor und konjugierter Eshelbytensor . . . . .	56
2.1.4. Konsistenzbedingungen . . . . .	57
2.2. Mean-Field-Theorie von Mori und Tanaka . . . . .	58
2.2.1. Mean-Field-Theorie . . . . .	58
2.2.2. Anwendungsbeispiel Mehreinschlußverbund . . . . .	59
2.2.3. Anwendungsbeispiel Mehrphasenverbund . . . . .	61
2.3. Hashin-Shtrikman-Variationsprinzipien zur Schrankenformulierung . . . . .	63
2.3.1. Definition effektiver Potentiale . . . . .	63
2.3.2. Variationsprinzipien und Schranken bei Vorgabe homogener Verzerrungen . . . . .	64
2.3.3. Variationsprinzipien und Schranken bei Vorgabe homogener Spannungen . . . . .	66
3. Lineare analytische Homogenisierung . . . . .	67
3.1. Homogenisierungsverfahren . . . . .	67
3.1.1. Effektive Moduli . . . . .	67
3.1.2. Effektive Flexibilitäten . . . . .	68
3.1.3. Dilute-Distribution-Modell . . . . .	69

---

3.1.4. Selbstkonsistentes Modell . . . . .	70
3.1.5. Differentialmethode . . . . .	71
3.1.6. Mehreinschluß- und Mehrphasenmodell . . . . .	74
3.2. Schranken . . . . .	77
3.2.1. Schranken der Ordnung $n$ . . . . .	78
3.2.2. Konzept der statistischen Unordnung von Kröner . . . . .	79
3.2.3. Schranken von Voigt und Reuss . . . . .	80
3.2.4. Schranken von Hashin und Shtrikman und von Walpole . . . . .	81
4. Nichtlineare analytische Homogenisierung . . . . .	82
4.1. Sekantenverfahren . . . . .	82
4.1.1. Klassisches Sekantenverfahren . . . . .	82
4.1.2. Variationsprinzip basierend auf einem äquivalent homogenen Festkörper . . . . .	84
4.1.3. Variationsprinzip basierend auf einem heterogenen Vergleichsmedium . . . . .	84
4.2. Inkrementelle Verfahren . . . . .	86
4.2.1. Klassisches inkrementelles Verfahren . . . . .	86
4.2.2. Verfahren basierend auf einer inkrementellen Variationsformulierung . . . . .	87
5. Diskrete numerische Homogenisierung . . . . .	88
5.1. Deformationsgetriebene Homogenisierung . . . . .	89
5.1.1. Kontinuierliche Mikro-Makro-Variationsformulierung . . . . .	89
5.1.2. Diskrete Variationsformulierung mit Lagrange-Nebenbedingung . . . . .	92
5.1.3. Diskrete Variationsformulierung mit Strafterm . . . . .	96
5.2. Spannungsgetriebene Homogenisierung . . . . .	98
5.2.1. Kontinuierliche Mikro-Makro-Variationsformulierung . . . . .	98
5.2.2. Diskrete Variationsformulierung mit Lagrange-Nebenbedingung . . . . .	99
5.2.3. Diskrete Variationsformulierung mit Strafterm . . . . .	100
5.3. Variationsformulierung bei starren Einschlüssen . . . . .	102
6. Modellbeispiele . . . . .	104
6.1. Mikrostruktur mit Loch . . . . .	105
6.2. Mikrostruktur mit starrem Einschluß . . . . .	109
6.3. Mehrphasige Mikrostruktur . . . . .	113
6.4. Mehrskalenanalyse . . . . .	118
<b>IV. Mehrgitterverfahren . . . . .</b>	<b>120</b>
1. Grundlagen und Eigenschaften des Mehrgitterverfahrens . . . . .	123
1.1. Algorithmische Struktur, Klassifizierung von Mehrgittermethoden . . . . .	123

1.1.1. Algorithmische Struktur . . . . .	123
1.1.2. Klassifizierung von Mehrgittermethoden . . . . .	126
1.2. Algebraische Eigenschaften des Mehrgitterverfahrens . . . . .	128
1.2.1. Algebraisch glatter Fehler und Knotenkopplungen . . . . .	128
1.2.2. Algebraisches Maß für das Glättungsverhalten des Zweigitterverfahrens . . . . .	130
1.3. Glättungsanalyse anhand eines Modellbeispiels . . . . .	131
1.3.1. Glättungskennziffern . . . . .	132
1.3.2. Glättungseigenschaft des gedämpften Jacobi-Verfahrens . . . . .	133
1.3.3. Glättungseigenschaft des lexikographischen Gauß-Seidel-Verfahrens . . . . .	134
1.4. Konvergenzverhalten des Mehrgitterverfahrens . . . . .	136
1.4.1. Konvergenzverhalten des Zweigitterverfahrens . . . . .	136
1.4.2. Konvergenzverhalten des Mehrgitterverfahrens . . . . .	139
1.5. Nichtlinearer Mehrgitteralgorithmus . . . . .	141
2. Transferoperatoren für heterogene Strukturen . . . . .	143
2.1. Alternative Transferkonzepte . . . . .	144
2.1.1. Injektion . . . . .	144
2.1.2. Geometrische Transferoperatoren . . . . .	144
2.1.3. Transferoperatoren basierend auf lokaler Schur-Komplementbildung . . . . .	144
2.1.4. Glättungsangepaßte Transferoperatoren . . . . .	146
2.1.5. Algebraisch motivierte Transferoperatoren . . . . .	147
2.2. Neue Transferkonzepte basierend auf Homogenisierung . . . . .	148
2.2.1. Diskretes Homogenisierungskonzept . . . . .	149
2.2.2. Transfer für hierarchische konforme Gitterstrukturen . . . . .	152
2.2.3. Transferoperatoren gekoppelt mit linearen Randverschiebungen . . . . .	153
2.2.4. Transferoperatoren gekoppelt mit periodischen Randverschiebungen . . . . .	153
2.2.5. Transferoperatoren gekoppelt mit homogenen Randspannungen . . . . .	154
2.2.6. Konsistenz zwischen Galerkin-Operator und effektivem Operator . . . . .	155
3. Numerische Modellbeispiele . . . . .	157
3.1. Heterogener Balken . . . . .	157
3.2. Elastische heterogene Struktur mit Loch . . . . .	159
3.3. Inelastische heterogene Struktur . . . . .	165
3.4. Periodische Struktur mit ellipsoiden Einschlüssen . . . . .	169
<b>V. Zusammenfassung und Ausblick . . . . .</b>	<b>172</b>

---

<b>VI. Anhang</b> .....	<b>177</b>
A. Eshelbytensoren für unendliche Mikrostrukturen .....	177
A.1. Konzept der Greenschen Funktion .....	177
A.2. Eshelbytensor für ellipsoide Einschlüsse .....	179
A.2.1. Eshelbytensor und konjugierter Eshelbytensor .....	180
A.2.2. Homogene Verzerrungen und Spannungen im Einschluß .....	180
A.2.3. Eshelbytensor für ellipsoide Einschlüsse .....	181
A.2.4. Eshelbytensoren für spezielle Einschlußgeometrien .....	183
A.3. Effektive Eshelbytensoren .....	185
B. Eshelbytensoren für periodische Mikrostrukturen .....	189
B.1. Fourierreihendarstellung von Verschiebungen und Verzerrungen .....	189
B.2. Isotroper linear elastischer äquivalent homogener Körper .....	191
B.3. Eshelbytensor und konjugierter Eshelbytensor .....	191
C. Eshelbytensoren im VEVZ und VESZ .....	194
C.1. Eshelbytensor im VEVZ und VESZ .....	194
C.2. Konjugierter Eshelbytensor im VEVZ und VESZ .....	196
D. Oberflächendiskretisierungen .....	197
D.1. Oberflächendiskretisierung bei kleinen Verzerrungen .....	197
D.1.1. Oberflächendiskretisierung mit linearen Elementen .....	198
D.1.2. Oberflächendiskretisierung mit quadratischen Elementen .....	198
D.2. Oberflächendiskretisierungen bei finiten Deformationen .....	199
D.2.1. Oberflächendiskretisierung mit linearen Elementen .....	199
D.2.2. Oberflächendiskretisierung mit quadratischen Elementen .....	200
D.3. Diskretisierung bei starren Einschlüssen .....	200

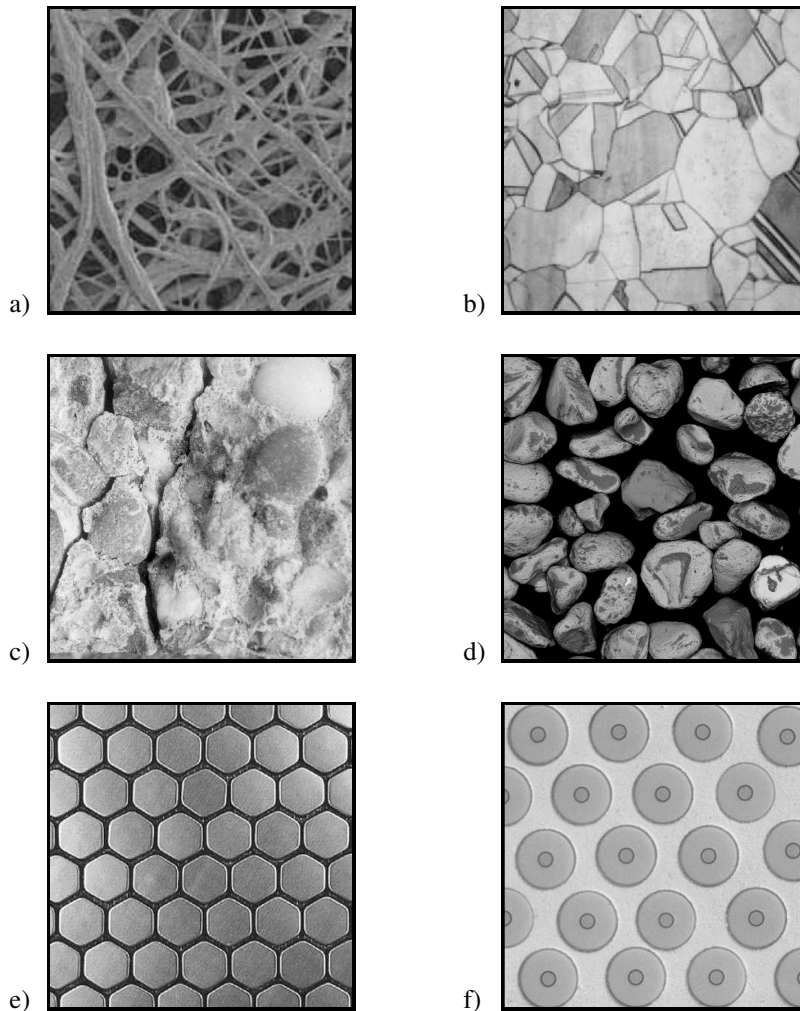




# I

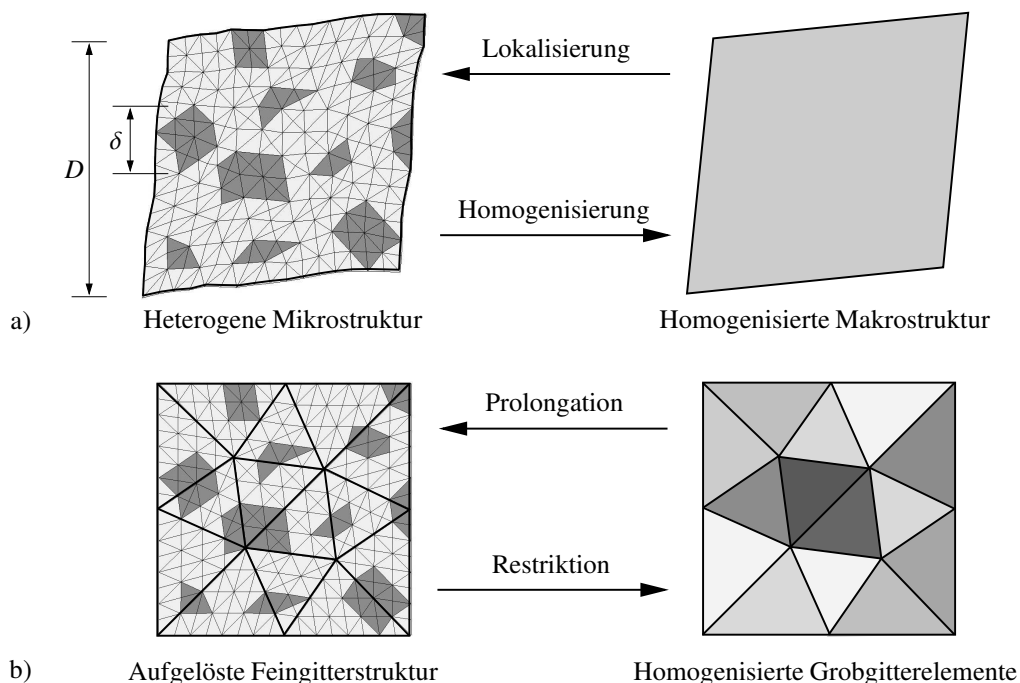
## Einordnung und Ziele der Arbeit

Mehrphasenwerkstoffe haben in den letzten Jahren in vielen technischen Anwendungen zunehmend an Bedeutung gewonnen. Dies ist darin begründet, daß sie industriell gefertigt bei idealem Verhältnis von Eigengewicht zu Festigkeit mit universellen Eigenschaften entsprechend den technischen Anforderungen hergestellt werden können. Mehrphasenwerkstoffe lassen sich als Verbundmaterialien auffassen, die aus verschiedenen Konstituierenden zusammengesetzt sind. Die einzelnen Konstituierenden charakterisieren dabei eine natürlich gegebene untere Skale (Mikroskale). Der Verbund der Phasen zu einem repräsentativen Ensemble kann als middle-



**Abbildung 1:** Beispiele für heterogene Strukturen. a) Molekülketten eines Polyamids, Längenskale  $10^{-5}$ m. b) Al-6XN-Aluminiumlegierung mit Zonen unterschiedlicher Kristallitorientierungen, Längenskale  $10^{-5}$ m. c) Poröse Betonstruktur als Mehrphasensystem aus Zementmatrix und Zuschlagkörnern unterschiedlicher Größe, Längenskale  $10^{-3}$ m. d) Diskontinuum aus mehrphasigen Sandkörnern des Namibiasandes, Längenskale  $10^{-3}$ m. e) Metallschaum mit periodischer Wabenstruktur, Längenskale  $10^{-3}$ m. f) Metallmatrixkomposit (MMC) mit titan-legierter Ti-6Al-4V-Matrix, in der SiC-Monofilamente (MFRM) periodisch angeordnet sind, Längenskale  $10^{-3}$ m.

re Skale (Mesoskale) und das zu untersuchende Randwertproblem als obere Skale (Makroskale) betrachtet werden. In [Abb. 1](#) sind typische Mikrostrukturen natürlicher und künstlicher Verbundmaterialien bei unterschiedlichen Längenskalen aufgelöst. Die Heterogenität von Mikrostrukturen tritt hier auf sehr vielfältige und komplexe Art und Weise in Erscheinung. Sie kann aus orientierten Fasern, Kristallen, Einschlüssen, Körnern, Rissen, Hohlräumen usw. bestehen und stellt die Quelle des phänomenologischen Verhaltens mikroheterogener Materialien dar. Eine sichere Fehlervorhersage von Versagenszuständen makroskopischer Systeme erfordert daher die Einbeziehung des Materialverhaltens auf der Mikroskale. Zentrale Zielsetzung der Arbeit ist, Konzepte und Algorithmen zur effizienten Simulation und Modellierung derartiger Verbundstrukturen unter Berücksichtigung der Skaleninteraktion bereitzustellen. Hierbei ist zu beachten, daß die Dimension des makroskopischen Strukturproblems und die Dimension der Heterogenitäten auf der Mikroskale stark voneinander abweichen können. Man unterscheidet daher zwei elementare Vorgehensweisen, die in [Abb. 2](#) schematisiert werden. Ist die Auflösung der Mikrostruktur infolge einer ausgeprägten Skalenseparation nicht möglich, ist der Mikro-Makro-Übergang durch ein Mehrskalenmodell zu beschreiben. Dieser Zugang wird in [Kapitel III](#) analytisch und numerisch angegangen. Kann die Mikrostruktur fein genug aufgelöst und diskretisiert werden, ist eine direkte numerische Berechnung des Randwertproblems möglich. Die Lösung des algebraisierten Feldproblems erfordert hier den Einsatz sehr leistungsfähiger Gleichungslöser. Zur Lösung der auftretenden großen dünnbesetzten Gleichungssysteme sind insbesondere Mehrgitterverfahren hervorragend geeignet. In [Kapitel IV](#) werden entsprechende Algorithmen für den effizienten Einsatz von Mehrgittermethoden aufbereitet.



**Abbildung 2:** a) Großer Skalenunterschied  $\delta \ll D$ : Mehrskalenmodellierung, bei der die makroskopisch lokal aufgelöste Mikrostruktur durch eine effektive Mesostruktur ersetzt wird. b) Kleiner Skalenunterschied  $\delta \leq D$ : Diskretisierung der heterogenen Struktur und Einsatz von Mehrgitterverfahren zur Lösung der komplexen Gleichungssysteme. Bei der Konstruktion von homogenisierungs-basierten Mehrgitter-Transferoperatoren entstehen Grobgitter mit elementweise homogenisierter Struktur. Restriktion wird mit Homogenisierung, Prolongation mit Lokalisierung assoziiert.

Bei der Mehrskalenganalyse erfolgt die Erfassung des mikroskopischen Antwortverhaltens infolge einer makroskopischen Beanspruchung durch eine geeignete Mittelwertbildung der mikroskopischen Größen über einen repräsentativen Teilbereich der Mikroskala. Man bezeichnet diese Form des Mikro-Makro-Übergangs, bei dem der heterogenen Mikrostruktur ein Ersatzmaterial mit gemittelten effektiven Parametern zugeordnet wird, als Homogenisierung. Den umgekehrten Vorgang nennt man Lokalisierung. In der materialtheoretischen und mathematischen Literatur werden verschiedene Lösungsansätze zur Konstruktion effektiver Ersatzmodelle vorgeschlagen, die sich teilweise auf spezifische Materialklassen der Konstituierenden beziehen.

Zur analytischen Beschreibung linear elastischen Materialverhaltens von Verbundmaterialien ist die Einführung eines äquivalent homogenen Ersatzkörpers mit gemittelten Materialparametern möglich. Hier haben sich bei Ingenieurwendungen das auf ESHELBY [49] basierende Einbettungsverfahren, die sogenannte Mean-Field-Theorie von TANAKA & MORI [151] und die Variationsprinzipien von HASHIN & SHTRIKMAN [69, 70] als fundamentale Verfahren und einige semi-empirische Ansätze z.B. von HALPIN & TSAI [65] durchgesetzt. In der vorliegenden Arbeit wird ein Überblick über verschiedene analytische Zugänge der Homogenisierung und der Konstruktion elastischer Ersatzmodelle gegeben. Diese enthält auch mehrere Neuentwicklungen. Hierzu zählt eine allgemeingültige Fassung der sogenannten Differentialmethode für mehrphasige Verbundkörper. Ferner werden das Mehreinschluß- und das Mehrphasenmodell basierend auf dem Konzept der Hintergrundverzerrungen und -spannungen neu motiviert, um Konzentrationstensoren auch für beliebig orientierte und unterschiedlich geformte Einschlußphasen berechnen zu können. Bislang wurde das in diesem Kontext nur für einen Verbund mit gleichmäßig orientierten und ähnlichen Einschlußphasen durchgeführt.

Im Gegensatz zu rein elastischen Phänomenen in Verbundwerkstoffen existieren bei der Präsenz nichtlinearer Effekte wie Schädigung und Plastizität keine allgemein verwendbaren analytischen Methoden zur Konstruktion effektiver Ersatzmodelle. In diesem Zusammenhang vergleiche auch die Diskussionen in HILL [76], SUQUET [145] und MÜLLER [120]. Dies ist Konsequenz der Komplexität nichtlinearer Deformationsprozesse. Das homogenisierte Materialverhalten ist zudem stark von den gewählten Modellen der einzelnen Phasen abhängig. So treten z.B. in einem Verbundmaterial mit elastischen Einschlüssen bei elastischer Matrix näherungsweise homogene Verzerrungsfelder, bei ideal elasto-plastischer Matrix extrem ausgeprägte Konzentrationen plastischer Verzerrungen in schmalen Zonen und bei elasto-plastischer Matrix mit Verfestigung beliebige Zwischenstufen in der Matrix auf. Ein wesentlicher Fortschritt in diesem Bereich sind die Arbeiten TALBOT & WILLIS [147, 148, 149] und WILLIS [172, 173, 174], welche eine Erweiterung der Hashin-Shtrikman Variationsprinzipien auf nichtlineare Verbundmaterialien basierend auf dem Konzept eines äquivalent homogenen Ersatzkörpers behandeln. Ausgehend von diesen Arbeiten wurden verschiedene neue Variationszugänge formuliert. Diese Zugänge bedienen sich eines gewählten linearen Vergleichs-Verbundmaterials, siehe PONTE CASTAÑEDA [129, 130], PONTE CASTAÑEDA & SUQUET [131], SUQUET [145], oder eines nichtlinearen Vergleichs-Verbundmaterials, vergleiche TALBOT & WILLIS [150], womit die Berechnung allgemeiner effektiver Ersatzmodelle möglich ist. ZAOUI [179] gibt Ansätze zur Berücksichtigung der Morphologie (Volumenanteile der Phasen, Zwei-Punkt-Korrelationsfunktionen der Moduli, Symmetrien der anisotropen Phasen) an, um Grenzen und Abschätzungen der effektiven Parameter zu erhalten. MICHEL, MOULINEC & SUQUET [100] und MOULINEC & SUQUET [119] betrachten periodische nichtlineare Mikrostrukturen, die sie mit Hilfe der Fouriertransformation homogenisieren. In der vorliegenden Arbeit werden grundlegende nichtlineare analytische Homogenisierungskonzepte dargestellt. Zudem wird ein Inkrementenverfahren beschrieben, in welchem

die inkrementelle Variationsformulierung von MIEHE [104] mit einer Sekantenmethode gekoppelt wird. Das Verfahren ist für die große Klasse standard-dissipativer Materialien zugänglich.

Ein großer Nachteil analytischer Homogenisierungsmodelle ist deren beschränkter Anwendungsbereich. So sind nur spezielle Einschlußgeometrien und gewisse Bereiche der Volumenverhältnisse von Einschluß- zu Matrixmaterial erfaßbar. Zahlreiche Verfahren setzen phasenweise konstante Materialparameter, Verzerrungen und Spannungen voraus, um Lösungen zu erhalten. Diese Einschränkungen haben dazu geführt, daß die Entwicklung effizienter und robuster numerischer Homogenisierungsmodelle in den letzten Jahren Gegenstand intensiver Forschung waren. Der wesentliche Vorteil numerischer Lösungsansätze ist, daß räumliche Teilgebiete mit beispielsweise großen plastischen Verformungen beliebig genau aufgelöst und diskretisiert werden können. Zudem ermöglicht auch die Entwicklung immer größerer Rechnerkapazitäten die Anwendung von Materialmodellen steigender Komplexität. Viele numerische Ansätze leiden allerdings unter bestimmten Restriktionen. So sind die numerischen FE-Verfahren von MIEHE, SCHRÖDER & BAYREUTHER [111] und GUEDES & KIKUCHI [56] nur für linear elastische periodische Verbundmaterialien geeignet. Das Voronoizellen-Finite-Elementmodell von GOSH, LEE & MOORTHY [55] für elasto-plastische periodische Verbundstrukturen und das adaptive Finite Elementverfahren von TERADA & KIKUCHI [152] für Komposite mit geschädigter periodischer Mikrostruktur basieren auf einer asymptotischen Reihenentwicklung von Verschiebungen und Spannungen. Asymptotische Reihenansätze sind nur für periodische Verbundstrukturen geeignet. DVORAK [45] geht in seinem numerischen Modell ebenso von topologiepezifischen Annahmen aus, indem er das inelastische Materialverhalten speziell von einer elastoplastischen Matrix mit periodisch verteilten diskontinuierlichen Fasern analysiert. Weiterentwicklungen stellen das adaptive Finite Elementkonzept in SWAN [146] und die vollständig diskreten Finite Elementansätze in MIEHE, SCHRÖDER & SCHOTTE [113], SMIT, BREKELMANS & MEIJER [143] und KOUZNETSOVA, BREKELMANS & BAAIJENS [88] dar, die auf beliebige periodische Verbundmaterialien bei kleinen und finiten Deformationen anwendbar sind. Variationsformulierungen zur direkten Homogenisierung diskreter nichtlinear elastischer Mikrostrukturen werden in der Arbeit MIEHE, KOCH & BAYREUTHER [109] auch für nichtperiodische Komposite behandelt.

Wesentliche Fortschritte bezüglich der direkten Homogenisierung deformationsgetriebener Mikrostrukturen mit komplexem Materialverhalten werden in den Arbeiten MIEHE [104] und MIEHE, SCHOTTE & LAMBRECHT [110] auf Basis inkrementeller Variationsprinzipien für kleine und finite inelastische Deformationen erzielt. In MIEHE [105] und MIEHE & KOCH [108] werden diese Entwicklungen in einer verallgemeinerten Darstellung für kleine und finite elastische und inelastische Deformationen vollständig diskret reformuliert. Den Ausgangspunkt dieser Arbeit bilden auf der Mikroskala definierte Variationsfunktionale mit der Struktur der Hill-Bedingung, in denen die makroskopische Deformation als Primärvariable einfließt. Durch Variation erhält man einerseits die Lösung eines auf der Mikroskala zugeordneten Randwertproblems, andererseits effektive Feldgrößen und Materialparameter. Ergebnisse dieser Arbeiten und Neuentwicklungen im Kontext einer makroskopisch spannungsgetriebenen Homogenisierung werden mit dem Ziel einer verallgemeinerten Darstellung in der vorliegenden Arbeit algorithmisch aufbereitet. Ein völlig neuer Aspekt ist hierbei auch die Berücksichtigung starrer Einschlüsse. In der Terminologie von KOUZNETSOVA [87] ist der favorisierte Homogenisierungsvorgang erster Ordnung. Die grundlegenden Eigenschaften des Mehrskalenkonzpts lassen sich wie folgt zusammenfassen: (i) makroskopisch sind keine konstitutiven Annahmen nötig, (ii) auf allen Skalen können beliebig große Deformationen auftreten, (iii) die Mikrostruktur darf beliebig komplex sein, (iv) das phänomenologische Materialverhalten der Konstituierenden kann nichtlinear und zeitabhängig

sein, (v) strukturierte und unstrukturierte Finite Elementdiskretisierungen sind zulässig, (vi) eine Mehrskalenanalyse periodischer und nichtperiodischer Mikrostrukturen ist realisierbar. Ein Vergleich mit analytischen Methoden unterstreicht die Qualität des neuen numerischen Verfahrens. Spezielle Anwendungen des Mehrskalenkonzepts sind u.a. den Arbeiten MIEHE, GÖKTEPE & LULEI [107] für polymere Materialien mit der typisch langkettigen Mikrostruktur in Abb. 1a und MIEHE & DETTMAR [106] für Diskontinua mit der granularen Struktur in Abb. 1d zu finden. Basierend auf den genannten Variationsprinzipien hat KOCH [85] im Rahmen der nichtlinearen Elastizität kleiner Verzerrungen Fehlerindikatoren zur Durchführung einer numerisch adaptiven Homogenisierungsanalyse heterogener Mikrostrukturen entwickelt und angewendet.

Zielsetzungen der Arbeit im Rahmen der Mehrskalenmodellierung im Überblick:

- 1.) Definition des Mikro-Makro-Übergangs.
- 2.) Darstellung linearer und nichtlinearer analytischer Verfahren mit Neuentwicklungen.
- 3.) Numerisches Mehrskalenmodell im deformations- und spannungsgetriebenen Kontext.
- 4.) Numerische und analytische Verfahren im Vergleich am Beispiel typischer Mikrostrukturen.
- 5.) Komplexe Modellbeispiele zur Verifikation des numerischen Mehrskalenmodells.

Bei Randwertproblemen, in denen die direkte diskrete Auflösung der heterogenen Struktur eine sehr hohe Komplexität erreichen kann, treten gewöhnlich große dünnbesetzte Gleichungssysteme auf. Das Cholesky- oder das Gauß-Eliminations-Verfahren sind hier als direkte Löser unwirtschaftlich. Der numerische Aufwand eines direkten Löser gemessen in der Anzahl der Unbekannten  $N$  ist im ungünstigsten Fall proportional zu  $N^3$ . Im Gegensatz dazu kann mit Mehrgitterverfahren als iterative Löser eine Komplexität proportional zu  $N$  erzielt werden. Ein entscheidender Punkt für die Effizienz von Mehrgitterverfahren liegt in der Konstruktion geeigneter Transfer- und Grobgitteroperatoren. Diese sollten die Skalenabhängigkeit der Strukturmodelle berücksichtigen. Die grundlegende Eigenschaft der Skalenabhängigkeit von Modellen der Strukturmechanik mit komplexem Werkstoffverhalten wurde bislang bei der Entwicklung von numerischen Lösungsverfahren in der Literatur nur wenig berücksichtigt. Ziel der vorliegenden Arbeit ist die Zusammenführung von Zugängen der materialtheoretischen Mehrskalenmodellierung und Mehrgittermethoden, um daraus eine neue Qualität iterativer Löser für komplexe und hochgradig nichtlineare strukturmechanische Probleme zu erhalten.

Die Konstruktion von Grobgitteroperatoren kann algebraisch im Sinne der sogenannten matrixabhängigen Verfahren als eine spezielle Form der diskreten Homogenisierung verstanden werden. Dadurch erlangen die algebraischen Ansätze ALCOUFFE ET AL. [2], DENDY [40], RUGE & STÜBEN [138], WESSELING [167], DE ZEEUW [42] u.a. eine neue Bedeutung. In dem von BANK & XU [5] und REUSKEN [132] vorgeschlagenen Verfahren kann der Grobgitteroperator, der als Schurkomplement aus einer blockweisen Zerlegung des Feingitteroperators hervorgeht, als homogenisierte Größe aufgefaßt werden. Derartige Schurkomplement-Mehrgitterverfahren erweisen sich in WAGNER, KINZELBACH & WITTUM [161] für stochastische Grundwassermodelle als sehr robust. FUHRMANN [53] beschreibt ein ähnliches Verfahren. In einer vergleichenden Studie interpretiert KNAPEK [83] verschiedene algebraische Mehrgitteransätze als Homogenisierung. Im Zusammenhang algebraischer Mehrgitteransätze mit Homogenisierungstechniken zur Konstruktion von Grobgittermatrizen für Probleme auf Gebieten mit komplizierter Geometrie sei auf HACKBUSCH & SAUTER [61, 62] verwiesen. In allen Modellen wird die automatische Generierung von Grobgitteroperatoren rein heuristisch motiviert. Die Heterogenität des Strukturproblems wird auf rein abstrakter Ebene und nicht im Sinne obiger Mehrskalenmodelle erfaßt.



Vom Standpunkt der Materialtheorie lassen sich Mehrgitterverfahren als abstrakte Mehrskalmodelle auffassen. [Abb. 2b](#) folgend kann der Übergang vom Fein- zum Grobgitter mit Homogenisierung, der umgekehrte Vorgang mit Lokalisierung assoziiert werden. Ziel der Arbeit ist, ein grundlegendes Konzept zur Generierung von Grobgitteroperatoren mit Hilfe der erarbeiteten Homogenisierungskonzepte zu formulieren. Bei Strömungen in porösen Medien mit periodischer Struktur lassen sich homogenisierte Operatoren mit analytischen Methoden herleiten. Für eindimensionale Probleme siehe in diesem Kontext [ENGQUIST & LUO \[48\]](#). In der Arbeit [NEUSS \[124\]](#) werden Homogenisierungstechniken in mehreren Raumdimensionen zur Konstruktion von Grobgitteroperatoren für Diffusionsgleichungen eingesetzt. Ähnliche Entwicklungen im Bereich strukturmechanischer Mehrskalprobleme wurden von [FISH & BELSKY \[50, 51\]](#) und [HOU & WU \[78\]](#) vorgenommen. Bisherige Ansätze haben allerdings den großen Nachteil, Transfer- und Grobgitteroperatoren nur für periodische Komposite mit linearem Materialverhalten bereitzustellen. Sie lassen sich nicht auf andere Materialklassen übertragen. Wesentliche Fortschritte wurden mit den Arbeiten [BAYREUTHER & MIEHE \[7, 8, 9, 10\]](#) und [BAYREUTHER, MIEHE & SCHRÖDER \[12, 13\]](#) erzielt. Die zentralen Ergebnisse werden hier in kompakter Form neu aufbereitet. In den genannten Arbeiten wurden problemabhängige Transferoperatoren für allgemeine Mikrostrukturen mit strukturierter oder unstrukturierter hierarchischer Gebietsdiskretisierung für lineare und nichtlineare Problemstellungen entwickelt. Wesentlicher Gesichtspunkt war hierbei die Interpretation eines Zweigitterzyklusses des Mehrgitterverfahrens als abstraktes Zweiskalenmodell. Das vollständig aufgelöste Randwertproblem mit der Erfassung der Heterogenitäten stellt die feinste Skala dar. Hier wird angenommen, daß Feingitterelemente der feinsten Gitterebene die Heterogenitäten hinreichend genau auflösen. Das neue Transferkonzept bewirkt, daß die heterogene Struktur des Feingitters entsprechend [Abb. 2b](#) in eine elementweise homogenisierte Grobgitterstruktur übergeht. In einer vergleichenden numerischen Studie werden die neuen Transferkonzepte hinsichtlich Effizienz unterschiedlichen, aus der Literatur bekannten Verfahren gegenübergestellt. Hierzu werden eine Reihe typischer Modellprobleme untersucht, um die Effizienz und Anwendungsgrenzen der neuen Transferidee aufzuzeigen.

Zielsetzungen der Arbeit im Rahmen der Mehrgitterverfahren im Überblick:

- 1.) Darstellung der Homogenisierung in einem diskreten Teilbereich.
- 2.) Beschreibung alternativer Transferkonzepte.
- 2.) Beschreibung des neuen homogenisierungsbasierten Transferkonzepts.
- 4.) Numerische Studie mit wertendem Vergleich von neuen mit herkömmlichen Verfahren.

## II

# Grundlagen der Kontinuumsmechanik, Finite Elemente und konvexen Analysis

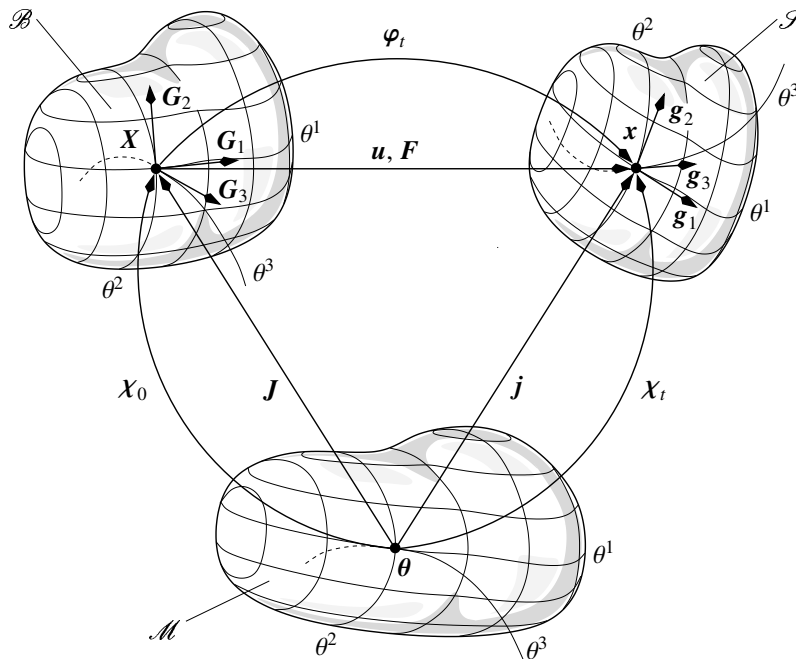
Es werden hier grundlegende Elemente der Kontinuumsmechanik, der Methode der Finite Elemente und der konvexen Analysis für den Hauptteil dieser Arbeit aufbereitet.

## 1. Grundlagen der Kontinuumsmechanik

In diesem Abschnitt werden wesentliche kontinuumsmechanische Grundlagen in Anlehnung an die Arbeiten MIEHE [103, 101, 102] bereitgestellt. Allgemeine Darstellungen zur Kontinuumsmechanik finden sich in TRUESDELL & NOLL [155], MARSDEN & HUGHES [97], MALVERN [96] oder OGDEN [128]. Es wird der allgemeine Fall großer Deformationen betrachtet. Der Übergang zu kleinen Verzerrungen wird durch Linearisierung der geometrisch nichtlinearen Größen an der Referenzkonfiguration gewonnen. Der Abschnitt behandelt kinematische Grundlagen, das Konzept der Spannungen und die physikalischen Bilanzsätze der Kontinuumsmechanik.

### 1.1. Kinematische Grundlagen

Die wesentlichen kinematischen Zusammenhänge bei der Beschreibung von Deformationsprozessen in der Kontinuumsmechanik werden in [Abb. 3](#) aufgezeigt.

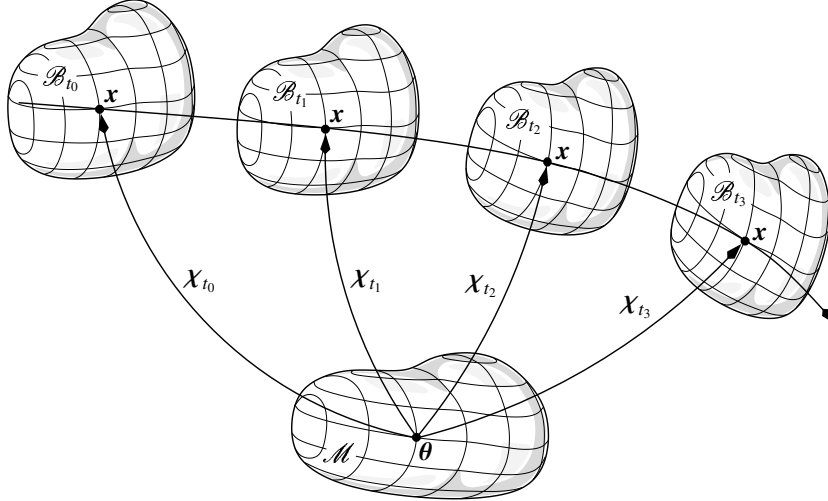


**Abbildung 3:** Plazierungen des materiellen Körpers  $\mathcal{M}$  im Euklidischen Raum  $\mathbb{R}^3$ . Die Referenzkonfiguration  $\mathcal{B} \subset \mathbb{R}^3$  bezeichnet den ungestörten Ausgangszustand, die Momentankonfiguration  $\mathcal{S} \subset \mathbb{R}^3$  den deformierten Zustand des Körpers  $\mathcal{M}$ .  $\chi_0, \chi_t$  und  $\varphi_t$  sind Punktabbildungen zwischen  $\theta \in \mathcal{M}$ ,  $X \in \mathcal{B}$  und  $x \in \mathcal{S}$ .  $J, j$  und  $F$  sind die dazugehörigen Tangentenabbildungen.  $u = x - X$  ist die Verschiebung des Körpers  $\mathcal{M}$  im Euklidischen Raum.  $\{G_i\}_{i \in \{1,2,3\}}$  und  $\{g_i\}_{i \in \{1,2,3\}}$  sind lokal an den Punkten  $X \in \mathcal{B}$  und  $x \in \mathcal{S}$  angeheftete kovariante krummlinige Koordinatenbasen.



### 1.1.1. Materieller Körper, Konfigurationen, Koordinatendarstellung

Im Sinne einer phänomenologischen Beschreibung von Deformationsprozessen definiert man den materiellen Körper  $\mathcal{M}$  als ein physikalisches Objekt, das mit physikalischen Eigenschaften wie Textur, Dichte, usw. ausgestattet ist. Er besteht aus einer Menge materieller Punkte  $\theta \in \mathcal{M}$ , die zum Zeitpunkt  $t$  das Gebiet  $\mathcal{B}_t \subset \mathcal{M}$  im Euklidischen Anschauungsraum  $\mathcal{R}^3$  besetzen.



**Abbildung 4:** Beschreibung der Deformation eines im Euklidischen Raum  $\mathcal{R}^3$  eingebetteten materiellen Körpers  $\mathcal{M}$  durch eine Schar von Konfigurationen  $\mathcal{B}_t$ .

Als Konfiguration des Körpers  $\mathcal{M}$  bezeichnet man seine Platzierung im Euklidischen Raum  $\mathcal{R}^3$ , siehe [Abb. 4](#). Sie ist definiert als bijektive Abbildung

$$\chi_t : \begin{cases} \mathcal{M} \rightarrow \mathcal{B}_t \subset \mathcal{R}^3 \\ \theta \mapsto \mathbf{x} = \chi_t(\theta) \end{cases} \quad (\text{II.1.1})$$

die jedem materiellen Punkt  $\theta \in \mathcal{M}$  zu einem festen Zeitpunkt  $t \in \mathcal{R}_+$  die Position  $\mathbf{x} \in \mathcal{B}_t$  im Euklidischen Raum  $\mathcal{R}^3$  eindeutig zuordnet.  $\mathcal{R}_{(+)}$  ist die Menge der (positiv) reellen Zahlen. Es wird angenommen, daß alle Abbildungen genügend oft stetig differenzierbar sind und die inversen Abbildungen, soweit erforderlich, existieren. Tiefgestellte Indizes kennzeichnen hier das Festhalten einer Variablen. Demnach beschreibt  $\chi_t(\theta)$  die Bewegung des materiellen Punktes  $\theta$  als Schar von Platzierungen zu verschiedenen Zeitpunkten  $t$  und  $\chi_\theta(t)$  die Bahnkurve des materiellen Punktes  $\theta$ . Die Referenzkonfiguration  $\mathcal{B}$  des materiellen Körpers wird im Folgenden als der ungestörte Ausgangszustand  $\mathcal{B}_0$  zum Zeitpunkt  $t = 0$  identifiziert mit der Platzierung

$$\chi_0 : \begin{cases} \mathcal{M} \rightarrow \mathcal{B} \subset \mathcal{R}^3 \\ \theta \mapsto \mathbf{x} = \chi(\theta) \end{cases} \quad (\text{II.1.2})$$

Bei Deformationsprozessen wird die Referenzkonfiguration als bekannt vorausgesetzt und alternativ auch als materielle oder Lagrangesche Konfiguration bezeichnet. Die aus der Referenzkonfiguration  $\mathcal{B}$  durch Deformation entstehende aktuelle Platzierung  $\mathcal{B}_t$  wird Momentankonfiguration oder auch räumliche oder Eulersche Konfiguration genannt. Deformationsprozesse werden im Euklidischen Raum mit Hilfe der nichtlinearen Deformationsabbildung  $\varphi_t = \chi_t(\theta) \circ \chi_0^{-1}(\theta)$  beschrieben. Sie ist umkehrbar eindeutig aufgrund der vorausgesetzten Bijektivität der Platzierungen  $\chi_0$  und  $\chi_t$ . Die Deformationsabbildung bildet materielle Punkte

$X \in \mathcal{B}$  zum Zeitpunkt  $t$  auf Punkte  $x$  der Momentankonfiguration  $\mathcal{S} \equiv \mathcal{B}_t$  ab, daher gilt

$$\varphi_t : \begin{cases} \mathcal{B} \rightarrow \mathcal{S} \subset \mathbb{R}^3 \\ X \mapsto x = \varphi_t(X) \end{cases} \quad (\text{II.1.3})$$

Daraus ergeben sich für einen materiellen Punkt die alternativen Darstellungen

$$\mathbf{x} = \varphi_t(\mathbf{X}) = \chi_t \circ \chi_0^{-1} \quad \text{und} \quad \mathbf{X} = \varphi_t^{-1}(\mathbf{x}) = \chi_0 \circ \chi_t^{-1} \quad (\text{II.1.4})$$

im Euklidischen Raum mit den Kompositionen  $\chi_t \circ \chi_0^{-1} = \chi_t(\chi_0^{-1}(\mathbf{X}))$  und  $\chi_0 \circ \chi_t^{-1} = \chi_0(\chi_t^{-1}(\mathbf{x}))$ . Die Verschiebung eines materiellen Punktes ist definiert durch den Vektor

$$\mathbf{u} = \mathbf{x} - \mathbf{X} \quad (\text{II.1.5})$$

Der Verschiebungsvektor wird zusammen mit den genannten nichtlinearen Abbildungen in [Abb. 3](#) visualisiert.

Im Euklidischen Raum kann die Bewegung des Körpers  $\mathcal{M}$  in einem raumfesten kartesischen Bezugssystem beschrieben werden. In [Abb. 3](#) wird eine allgemeine Koordinatendarstellung mittels konvektiver oder krummliniger Koordinaten gezeigt, bei der an jedem materiellen Punkt  $\theta$  ein Basissystem angeheftet wird. Die zugehörigen kovarianten Basisvektoren

$$\mathbf{G}_i = \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \theta^i} \quad \text{und} \quad \mathbf{g}_i = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \theta^i}, \quad i \in \{1, 2, 3\} \quad (\text{II.1.6})$$

sind Tangentenvektoren an den konvektiven Koordinatenlinien  $\{\theta^1, \theta^2, \theta^3\}$ . Sie sind gleichzeitig Spaltenvektoren der Tangentenabbildungen

$$\mathbf{J} = [\mathbf{G}_1, \mathbf{G}_2, \mathbf{G}_3] \quad \text{und} \quad \mathbf{j} = [\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \mathbf{g}_3] \quad (\text{II.1.7})$$

Für Ausführungen in den folgenden Abschnitten ist es sinnvoll, Tangentialräume  $\mathcal{T}_X \mathcal{B}$  und  $\mathcal{T}_x \mathcal{S}$  der materiellen und räumlichen Konfiguration einzuführen. Sie werden von den Tangentenvektoren (II.1.6) aufgespannt. Basierend auf den Orthogonalitätsbedingungen

$$\mathbf{G}^i \cdot \mathbf{G}_j = \delta^i_j \quad \text{und} \quad \mathbf{g}^i \cdot \mathbf{g}_j = \delta^i_j \quad (\text{II.1.8})$$

mit Kronecker-Symbol  $\delta^i_j$  führt man kontravariante Basissysteme  $\{\mathbf{G}^i\}_{i \in \{1,2,3\}}$  und  $\{\mathbf{g}^i\}_{i \in \{1,2,3\}}$  ein. Sie spannen die Kotangentialräume  $\mathcal{T}_X^* \mathcal{B} \perp \mathcal{T}_X \mathcal{B}$  und  $\mathcal{T}_x^* \mathcal{S} \perp \mathcal{T}_x \mathcal{S}$  der materiellen und räumlichen Konfiguration auf. Kronecker-Symbole haben den Wert 1 bei gleichen Indizes, sonst Null. Von Basissystemen fordert man, daß die Basisvektoren linear unabhängig sind und eine Länge ungleich Null besitzen. Metrikensoren bilden kontra- und kovariante Objekte aufeinander ab. Kovariante Metrikoeffizienten sind definiert als Skalarprodukte der kovarianten Basisvektoren

$$G_{ij} = \mathbf{G}_i \cdot \mathbf{G}_j \quad \text{und} \quad g_{ij} = \mathbf{g}_i \cdot \mathbf{g}_j \quad (\text{II.1.9})$$

kontravariante Metrikoeffizienten als Skalarprodukte der kontravarianten Basisvektoren. Bei Wahl eines kartesischen Bezugssystems sind Metrikoeffizienten durch Kronecker-Symbole  $\delta_{ij}$  zu ersetzen. Aufgrund der Kommutativität des Skalarprodukts ist die Matrix der Metrikoeffizienten symmetrisch. Metrikoeffizienten mit gleichen Indizes repräsentieren die Quadrate der Längen der zugeordneten Basisvektoren, Metrikoeffizienten mit unterschiedlichen Indizes die Produkte der Längen und die Winkel zwischen den entsprechenden Basisvektoren.

### 1.1.2. Deformation von Linien-, Flächen- und Volumenelementen

Es werden drei fundamentale, die Deformation beschreibende Abbildungen eingeführt

$$\left. \begin{aligned} d\mathbf{x} &= \mathbf{F} \cdot d\mathbf{X} && \text{Deformation von Linienelementen} \\ d\mathbf{a} &= \text{cof}[\mathbf{F}] \cdot d\mathbf{A} && \text{Deformation von Flächenelementen} \\ dv &= J dV && \text{Deformation von Volumenelementen} \end{aligned} \right\} \quad (\text{II.1.10})$$

mit den zugehörigen Abbildungsoperatoren

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{F} &= \partial_{\mathbf{x}} \boldsymbol{\varphi}_t && \text{Deformationsgradient} \\ \text{cof}[\mathbf{F}] &= J \mathbf{F}^{-T} && \text{Kofaktor} \\ J &= \det[\mathbf{F}] \sqrt{\det[\mathbf{g}]} / \sqrt{\det[\mathbf{G}]} && \text{Jakobideterminante} \end{aligned} \right\} \quad (\text{II.1.11})$$

Der Deformationsgradient  $\mathbf{F}$  ist die Fréchet-Ableitung der Deformationsabbildung  $\boldsymbol{\varphi}_t$ . Er transformiert Linienelemente  $d\mathbf{X} \in \mathcal{T}_X \mathcal{B}$  aus der Referenzlage  $\mathbf{X} \in \mathcal{B}$  in Linienelemente  $d\mathbf{x} \in \mathcal{T}_x \mathcal{S}$  mit der aktuellen Position  $\mathbf{x} \in \mathcal{S}$ . Materie darf sich während der Deformation nicht durchdringen, sodaß  $\det[\mathbf{F}] > 0$  gelten muß. Die Abbildung materieller Flächenelemente  $d\mathbf{A} \in \mathcal{T}_X^* \mathcal{B}$  in die räumlichen Gegenstücke  $d\mathbf{a} \in \mathcal{T}_x^* \mathcal{S}$  bezeichnet man als Nansonsche Formel. Flächenelemente  $d\mathbf{A} = \mathbf{N} dA$  und  $d\mathbf{a} = \mathbf{n} da$  sind gewichtete Normalenvektoren  $\mathbf{N}$  und  $\mathbf{n}$  der infinitesimalen Flächen  $dA$  aus  $\mathcal{B}$  und  $da$  aus  $\mathcal{S}$ . Aus (II.1.10)<sub>1</sub> folgt, daß der Deformationsgradient

$$\mathbf{F} : \left\{ \begin{array}{l} \mathcal{T}_X \mathcal{B} \rightarrow \mathcal{T}_x \mathcal{S} \\ \mathbf{T} \mapsto \mathbf{t} = \mathbf{F} \cdot \mathbf{T} \end{array} \right. \quad (\text{II.1.12})$$

kontravariante Vektoren  $\mathbf{T} \in \mathcal{B}$  in ebensolche Vektoren  $\mathbf{t} \in \mathcal{S}$  transformiert. Mit (II.1.10)<sub>2</sub> und (II.1.11)<sub>2</sub> ergibt sich als Abbildungsvorschrift für kovariante Vektoren  $\mathbf{N}$  und  $\mathbf{n}$

$$\det[\mathbf{F}] \mathbf{F}^{-T} : \left\{ \begin{array}{l} \mathcal{T}_X^* \mathcal{B} \rightarrow \mathcal{T}_x^* \mathcal{S} \\ \mathbf{N} \mapsto \mathbf{n} = \det[\mathbf{F}] \mathbf{F}^{-T} \cdot \mathbf{N} \end{array} \right. \quad (\text{II.1.13})$$

### 1.1.3. Deformation und Verzerrung

Deformationsabhängige Metriktensoren messen die bei Deformationsabbildungen einhergehenden Längenänderungen infinitesimaler Linienelemente. Zu ihrer Definition werden ein materielles und ein räumliches infinitesimales Linienelement  $d\mathbf{X}$  und  $d\mathbf{x}$  betrachtet, die über (II.1.10)<sub>1</sub> miteinander verbunden sind. Die materielle und räumliche Länge  $ds$  und  $dS$  dieser Linienelemente sind die Wurzeln aus den Skalarprodukten

$$dS = |d\mathbf{X}|_G = \sqrt{d\mathbf{X} \cdot (\mathbf{G} \cdot d\mathbf{X})} \quad \text{und} \quad ds = |d\mathbf{x}|_g = \sqrt{d\mathbf{x} \cdot (\mathbf{g} \cdot d\mathbf{x})} \quad (\text{II.1.14})$$

Der am Betrag indizierte Metriktensor zeigt an, bezüglich welcher Metrik die Länge des jeweiligen Linienelements gemessen wird. (II.1.10)<sub>1</sub> in obige Gleichungen eingesetzt liefert

$$dS = |d\mathbf{x}|_c = \sqrt{d\mathbf{x} \cdot (\mathbf{c} \cdot d\mathbf{x})} \quad \text{und} \quad ds = |d\mathbf{X}|_C = \sqrt{d\mathbf{X} \cdot (\mathbf{C} \cdot d\mathbf{X})} \quad (\text{II.1.15})$$

mit den symmetrischen positiv definiten Deformationstensoren

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{C} &= \mathbf{F}^T \mathbf{g} \mathbf{F} && \text{Rechter Cauchy-Green-Tensor} \\ \mathbf{c} &= \mathbf{F}^{-T} \mathbf{G} \mathbf{F}^{-1} && \text{Cauchy-Deformationstensor} \end{aligned} \right\} \quad (\text{II.1.16})$$

Wegen  $\det[\mathbf{F}] > 0$  gilt auch hier  $\det[\mathbf{C}] > 0$  und  $\det[\mathbf{c}] > 0$ .

Tensorielle Verzerrungsmaße beschreiben relative Längenänderungen infinitesimaler Linienelemente. Als Maß für die Verzerrung eines infinitesimalen Linienelements betrachtet man die Differenz der räumlichen und der materiellen Linienquadrate  $\delta := \frac{1}{2}(ds^2 - dS^2)$ . Das sogenannte Greensche Verzerrungsmaß

$$\delta_{Green} = \frac{1}{2} (|d\mathbf{X}|_C^2 - |d\mathbf{X}|_G^2) \quad (\text{II.1.17})$$

vergleicht die räumliche Metrik  $\mathbf{C}$  mit der materiellen Metrik  $\mathbf{G}$  bezogen auf die Lagrangesche Mannigfaltigkeit. Das Eulersche Gegenstück ist das sogenannte Almansische Verzerrungsmaß

$$\delta_{Almansi} = \frac{1}{2} (|d\mathbf{x}|_g^2 - |d\mathbf{x}|_c^2) \quad (\text{II.1.18})$$

Berücksichtigt man (II.1.14) und (II.1.15), erhält man aus obigen Gleichungen

$$\delta_{Green} = d\mathbf{X} \cdot (\mathbf{E} \cdot d\mathbf{X}) \quad \text{und} \quad \delta_{Almansi} = d\mathbf{x} \cdot (\mathbf{e} \cdot d\mathbf{x}) \quad (\text{II.1.19})$$

mit den symmetrischen positiv definiten Verzerrungstensoren

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{E} &= \frac{1}{2} (\mathbf{C} - \mathbf{G}) && \text{Greenscher Verzerrungstensor} \\ \mathbf{e} &= \frac{1}{2} (\mathbf{g} - \mathbf{c}) && \text{Almansischer Verzerrungstensor} \end{aligned} \right\} \quad (\text{II.1.20})$$

Im undeforinierten Zustand des materiellen Körpers sind beide Verzerrungstensoren gleich null, wohingegen Deformationstensoren gleich den Metriken sind.

## 1.2. Spannungstensoren

Die Spannung ist ein zentraler Begriff der phänomenologischen thermomechanischen Kontinuumstheorie. Als Vorbetrachtung wird der Gesamtkörper entsprechend Abb. 5 in Teilkörper zerlegt. Dem Eulerschen Schnittprinzip folgend muß jeder Teilkörper für sich im Gleichgewicht sein. Die mechanische Wirkung des räumlichen Restkörpers  $\mathcal{S}_p$  in Abb. 5 wird durch Spannungsvektoren  $\mathbf{t}$  auf der Oberfläche  $\partial\mathcal{S}_p$  berücksichtigt. Mit der auf ein Flächenelement  $da$  bezogenen infinitesimalen Oberflächkraft  $\mathbf{t} da$  im materiellen Punkt  $\mathbf{x} \in \mathcal{S}_p$  wird der sogenannte Cauchysche Spannungstensor  $\boldsymbol{\sigma}$  durch das Cauchy-Theorem

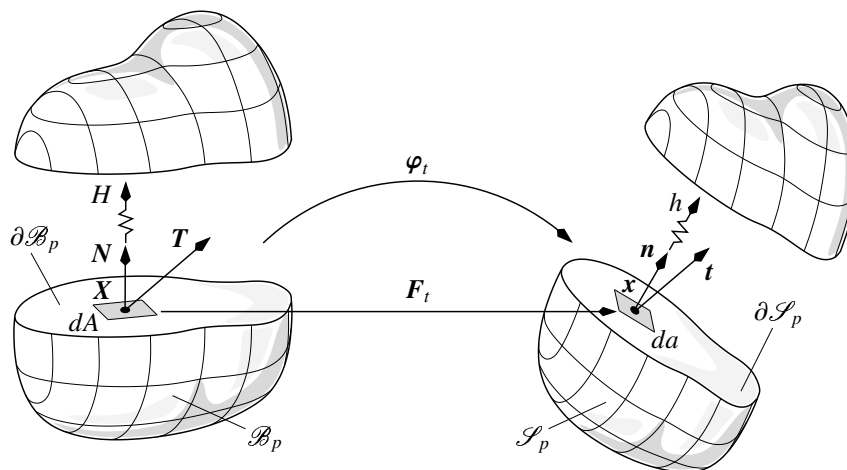
$$\mathbf{t}(\mathbf{x}, \mathbf{t}, \mathbf{n}) = \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, \mathbf{t}) \cdot \mathbf{n} \quad (\text{II.1.21})$$

definiert. Dabei ist  $\mathbf{n}$  der nach außen zeigende Normaleneinheitsvektor des Flächenelements  $da$  im Punkt  $\mathbf{x}$ . Gleichung (II.1.21) läßt sich aus einer Kräftegleichgewichtsbetrachtung an einem infinitesimalen Tetraederelement ableiten. Man bezeichnet den Cauchyschen Spannungstensor auch als wahren Spannungstensor, da er die in der Momentankonfiguration wirkenden Spannungen auf das aktuelle Flächenelement  $da$  bezieht. Alle weiteren Spannungstensoren sind reine Rechengrößen. Die Einführung des 1. Piola-Kirchhoff-Spannungstensors  $\mathbf{P}$  (1. P.-K.-Spannungen) ermöglicht einen Bezug der aktuellen Spannungen auf das zugehörige Flächenelement  $dA$  der Referenzkonfiguration. Sie werden auch als Nominalspannungen bezeichnet.  $\mathbf{P}$  ist definiert durch das materielle Gegenstück zum räumlichen Cauchy-Theorem (II.1.21)

$$\mathbf{T}(\mathbf{X}, \mathbf{t}, \mathbf{N}) = \mathbf{P}(\mathbf{X}, \mathbf{t}) \cdot \mathbf{N} \quad \text{mit} \quad \mathbf{T} dA = \mathbf{t} da \quad (\text{II.1.22})$$

mit dem materiellen Normaleneinheitsvektor  $\mathbf{N}$  von  $dA$ . Durch das Cauchy-ähnliche Theorem

$$\tilde{\mathbf{T}}(\mathbf{X}, \mathbf{N}) = \mathbf{S}(\mathbf{X}) \cdot \mathbf{N} \quad \text{mit} \quad \mathbf{F} \cdot \tilde{\mathbf{T}} = \mathbf{T} \quad (\text{II.1.23})$$



**Abbildung 5:** Schnittprinzip: Berücksichtigung der mechanischen und thermischen Wirkung des materiellen und räumlichen Teilkörpers  $\mathcal{B}_p$  und  $\mathcal{S}_p$  durch Kontaktspannungen und -wärmeflüsse an der Oberfläche  $\partial\mathcal{B}_p$  und  $\partial\mathcal{S}_p$ .

in der Lagrangeschen Konfiguration wird schließlich der 2. Piola-Kirchhoff-Spannungstensor  $\mathbf{S}$  (2. P.-K.-Spannungen) definiert. Die Cauchy-, Kirchhoff- und 1. und 2. Piola-Kirchhoff-Spannungen sind im folgenden Gleichungssatz zusammengefasst:

$$\left. \begin{array}{ll} \boldsymbol{\sigma} & \text{Cauchyscher Spannungstensor} \\ \boldsymbol{\tau} = \mathbf{J}\boldsymbol{\sigma} & \text{Kirchhoffscher Spannungstensor} \\ \mathbf{P} = \mathbf{J}\boldsymbol{\sigma}\mathbf{F}^{-T} & \text{1. Piola-Kirchhoff-Spannungstensor} \\ \mathbf{S} = \mathbf{J}\mathbf{F}^{-1}\boldsymbol{\sigma}\mathbf{F}^{-T} & \text{2. Piola-Kirchhoff-Spannungstensor} \end{array} \right\} \quad (\text{II.1.24})$$

### 1.3. Bilanzgleichungen der Kontinuumsmechanik

Die Bilanzgleichungen sind stofffreie Grundgleichungen, die für alle Materialklassen gültig sind. Die Bilanzgleichungen stellen globale Aussagen dar und beschreiben die Änderung einer zu bilanzierenden physikalischen Größe  $\Psi$  in Form eines Oberflächenzufflusses  $\boldsymbol{\phi} \cdot \mathbf{n}$ , einer Zufuhr oder Quelle  $\boldsymbol{\xi}$  aus dem Inneren sowie einer Produktion  $\boldsymbol{\nu}$  im Inneren des betrachteten Körpers. Für den in [Abb. 5](#) dargestellten Teilkörper  $\mathcal{S}_p$  in der Momentankonfiguration hat die Bilanzgleichung die allgemeine Struktur

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{S}_p} \psi \, dv = \int_{\mathcal{S}_p} \boldsymbol{\xi} \, dv + \int_{\partial\mathcal{S}_p} \boldsymbol{\phi} \cdot \mathbf{n} \, da + \int_{\mathcal{S}_p} \boldsymbol{\nu} \, dv \quad \text{bzw.} \quad \frac{d}{dt} \Psi = \Xi + \Phi + \Upsilon \quad (\text{II.1.25})$$

Hierbei ist  $\mathbf{n}$  die nach außen gerichtete Einheitsnormale auf  $\partial\mathcal{S}_p$ . Verschwindet der Produktionsterm  $\Upsilon$ , so bezeichnet man  $\Psi$  als Erhaltungsgröße. Aus den globalen Bilanzgleichungen können durch Anwendung des Transporttheorems und des Gaußschen Integralsatzes lokale Bilanzgleichungen der Form

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \text{div}[\boldsymbol{\psi} \cdot \dot{\mathbf{x}}] = \boldsymbol{\xi} + \text{div}[\boldsymbol{\phi}] + \boldsymbol{\nu} \quad (\text{II.1.26})$$

abgeleitet werden. Für ein Teilsystem des Gesamtkörpers entsprechend [Abb. 5](#) werden im Rahmen der rationalen Kontinuumsthermomechanik die fünf Bilanzgleichungen für Masse, Impuls, Drehimpuls, Energie und Entropie aufgestellt. In der materiellen Fassung werden die lokalen Bilanzgleichungen jeweils in den arbeitskonjugierten Größen  $\{\mathbf{P}, \mathbf{F}\}$ , bei räumlicher Darstellung in den Größen  $\{\boldsymbol{\sigma}, \partial_x \mathbf{u}\}$  formuliert.

### 1.3.1. Erhaltung der Masse

Die Erhaltung der Masse ist Grundlage der nichtrelativistischen Mechanik und fordert das Verschwinden der materiellen Zeitableitung der Masse  $M$  des materiellen und räumlichen Teilkörpers  $\mathcal{B}_p$  und  $\mathcal{S}_p$ . Die globale Massenbilanz lautet daher

$$\dot{M} = 0 \quad (\text{II.1.27})$$

Mit Annahme einer materiellen Dichte  $\rho_0$  im unverformten Teilkörper  $\mathcal{B}_p$  und einer räumlichen Dichte  $\rho$  im verformten Teilkörper  $\mathcal{S}_p$  ergibt sich als Masse

$$M = \int_{\mathcal{B}_p} \rho_0(\mathbf{X}) dV = \int_{\mathcal{S}_p} \rho(\mathbf{x}, t) dv \quad (\text{II.1.28})$$

Diese Gleichung in (II.1.27) eingesetzt liefert für die Punkte  $\mathbf{X} \in \mathcal{B}_p$  und  $\mathbf{x} \in \mathcal{S}_p$  die materielle und räumliche Form der lokalen Massenbilanz

$$\dot{\rho}_0(\mathbf{X}) = 0 \quad \text{und} \quad \dot{\rho}(\mathbf{x}, t) + \rho(\mathbf{x}, t) \operatorname{div}[\dot{\mathbf{x}}] = 0 \quad (\text{II.1.29})$$

Bei der räumlichen Formulierung der lokalen Massenbilanz wurde von der Jakobiabbildung (II.1.10)<sub>3</sub> und der Ableitung  $\dot{J} = J \operatorname{div}[\dot{\mathbf{x}}]$  Gebrauch gemacht.

### 1.3.2. Erhaltung des Impulses

Der Erhaltungssatz des Impulses liefert die das mechanische Teilproblem beschreibenden Kerngleichungen. Er stellt den Zusammenhang zwischen der Bewegungsänderung eines Körpers und der auf ihn einwirkenden Kräfte her (kinetisches Kräftegleichgewicht). Demnach ist die zeitliche Änderung des Impulses  $\mathbf{I}$  gleich der Summe  $\mathbf{f}$  aller auf den Körper wirkenden Kräfte, d.h.

$$\dot{\mathbf{I}} = \mathbf{f} \quad (\text{II.1.30})$$

Gleichung (II.1.30) ist die globale Form der Impulsbilanz. Der Impulsvektor ist definiert als

$$\mathbf{I} := \int_{\mathcal{B}_p} \dot{\mathbf{x}} dM = \int_{\mathcal{S}_p} \dot{\mathbf{x}} dm \quad (\text{II.1.31})$$

mit den infinitesimalen Massen  $dM = \rho_0(\mathbf{X}) dV$  und  $dm = \rho(\mathbf{x}, t) dv$ . Der Kraftvektor

$$\mathbf{f} := \int_{\mathcal{B}_p} \boldsymbol{\gamma} dM + \int_{\partial\mathcal{B}_p} \mathbf{T} dA = \int_{\mathcal{S}_p} \boldsymbol{\gamma} dm + \int_{\partial\mathcal{S}_p} \mathbf{t} da \quad (\text{II.1.32})$$

ist die Gesamtkraft aus im Körper definierten Volumenlasten  $\boldsymbol{\gamma}$  und an dessen Oberfläche wirkenden materiellen und räumlichen Kraftvektoren  $\mathbf{T}$  und  $\mathbf{t}$ . Mit der lokalen Massenbilanz (II.1.29), den Cauchy-Theoremen (II.1.21) und (II.1.22) und dem Gaußschen Integralsatz erhält man in  $\mathbf{X} \in \mathcal{B}_p$  und  $\mathbf{x} \in \mathcal{S}_p$  als materielle und räumliche Form der lokalen Impulsbilanz

$$\operatorname{DIV}[\mathbf{P}] + \rho_0 \boldsymbol{\gamma} = \rho_0 \ddot{\mathbf{x}} \quad \text{und} \quad \operatorname{div}[\boldsymbol{\sigma}] + \rho \boldsymbol{\gamma} = \rho \ddot{\mathbf{x}} \quad (\text{II.1.33})$$

In (II.1.33) bezieht sich der Divergenzoperator  $\operatorname{DIV}[\{\cdot\}] = \partial_X \cdot \{\cdot\}$  auf den Punkt  $\mathbf{X} \in \mathcal{B}_p$  und  $\operatorname{div}[\{\cdot\}] = \partial_x \cdot \{\cdot\}$  auf  $\mathbf{x} \in \mathcal{S}_p$ . Die lokale Form (II.1.33) der Impulserhaltung wird auch erste Cauchy'sche Bewegungsgleichung genannt.

### 1.3.3. Erhaltung des Drehimpulses

Der Erhaltungssatz des Drehimpulses fordert axiomatisch, daß die materielle Zeitableitung des Drehimpulsvektors  $\mathbf{D}_0$  des Körpers  $\mathcal{M}$  bezüglich des raumfesten Bezugspunktes  $\mathbf{0}$  gleich der Summe aller an den Körper angreifenden Momente  $\mathbf{m}_0$  ist, wonach

$$\dot{\mathbf{D}}_0 = \mathbf{m}_0 \quad (\text{II.1.34})$$

In der globalen Drallbilanz (II.1.34) ist der Drehimpulsvektor  $\mathbf{D}_0$  definiert durch

$$\mathbf{D}_0 := \int_{\mathcal{B}_p} \mathbf{x} \times \dot{\mathbf{x}} dM = \int_{\mathcal{S}_p} \mathbf{x} \times \dot{\mathbf{x}} dm \quad (\text{II.1.35})$$

mit  $dM = \rho_0(\mathbf{X}) dV$  sowie  $dm = \rho(\mathbf{x}, t) dv$  und das Moment  $\mathbf{m}_0$  durch

$$\mathbf{m}_0 := \int_{\mathcal{B}_p} \mathbf{x} \times \boldsymbol{\gamma} dM + \int_{\partial\mathcal{B}_p} \mathbf{x} \times \mathbf{T} dA = \int_{\mathcal{S}_p} \mathbf{x} \times \boldsymbol{\gamma} dm + \int_{\partial\mathcal{S}_p} \mathbf{x} \times \mathbf{t} da \quad (\text{II.1.36})$$

Mit der lokalen Massenbilanz (II.1.29), der Identität  $\dot{\mathbf{x}} \times \dot{\mathbf{x}} = \mathbf{0}$ , den Cauchy-Theoremen (II.1.21) und (II.1.22), dem Gaußschen Integralsatz und der lokalen Impulsbilanz (II.1.33) erhält man als materielle und räumliche Form der lokalen Drallbilanz in  $\mathbf{X} \in \mathcal{B}_p$  und  $\mathbf{x} \in \mathcal{S}_p$

$$\mathbf{P}\mathbf{F}^T = \mathbf{F}\mathbf{P}^T \quad \text{und} \quad \boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}^T \quad (\text{II.1.37})$$

Die lokale Form des Momentengleichgewichts (II.1.37) entspricht der zweiten Cauchyschen Bewegungsgleichung. Sie wird in der Regel als Selbstverständlichkeit vorausgesetzt.

### 1.3.4. Erhaltung der Energie

Der erste Hauptsatz der Thermodynamik postuliert die Energieerhaltung und liefert die das thermodynamische Teilproblem beschreibenden Kerngleichungen. Dem ersten Hauptsatz der Thermodynamik folgend ändert sich im freigeschnittenen Teilkörper  $\mathcal{B}_p$  bzw.  $\mathcal{S}_p$  die totale Energie aus kinetischer Energie  $K$  und innerer potentieller Energie  $E$  nur durch die an ihm verrichtete mechanische Leistung  $P_{ext}$  und thermische Leistung  $Q$ , sodaß

$$\frac{d}{dt}(K + E) = P_{ext} + Q \quad (\text{II.1.38})$$

Unter spezifischer Energie versteht man die Komposition aus

$$K = \int_{\mathcal{B}_p} \frac{1}{2} \dot{\mathbf{x}} \cdot \dot{\mathbf{x}} dM = \int_{\mathcal{S}_p} \frac{1}{2} \dot{\mathbf{x}} \cdot \dot{\mathbf{x}} dm \quad \text{und} \quad E = \int_{\mathcal{B}_p} e dM = \int_{\mathcal{S}_p} e dm \quad (\text{II.1.39})$$

mit  $dM = \rho_0(\mathbf{X}) dV$  und  $dm = \rho(\mathbf{x}, t) dv$ . Die skalare Zustandsgröße  $e$  ist die lokal gespeicherte massespezifische Energie infolge mechanischer und thermischer Beanspruchung. Die mechanische und thermische Leistung ist definiert als

$$\left. \begin{aligned} P_{ext} &= \int_{\mathcal{B}_p} \dot{\mathbf{x}} \cdot \boldsymbol{\gamma} dM + \int_{\mathcal{B}_p} \dot{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{T} dA = \int_{\mathcal{S}_p} \dot{\mathbf{x}} \cdot \boldsymbol{\gamma} dm + \int_{\mathcal{S}_p} \dot{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{t} da \\ Q &= \int_{\mathcal{B}_p} r dM - \int_{\partial\mathcal{B}_p} H dA = \int_{\mathcal{S}_p} r dm - \int_{\partial\mathcal{S}_p} h da \end{aligned} \right\} \quad (\text{II.1.40})$$



Thermische Leistung entsteht durch die massespezifische Wärmezufuhr  $r$  aus dem Körperinnern und dem in [Abb. 5](#) dargestellten Wärmefluß über die Körperoberfläche. Entsprechend den Darstellungen [\(II.1.21\)](#) und [\(II.1.22\)](#) wird der Wärmefluß durch die dem Cauchy-Theorem ähnlichen Strukturen  $h(\mathbf{x}, t, \mathbf{n}) = \mathbf{q}(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{n}$  und  $H(\mathbf{X}, t, \mathbf{N}) = \mathbf{Q}(\mathbf{X}, t) \cdot \mathbf{N}$  definiert. Mit der lokalen Massenbilanz [\(II.1.29\)](#), dem Gaußschen Integralsatz und der lokalen Impulsbilanz [\(II.1.33\)](#) erhält man für  $\mathbf{X} \in \mathcal{B}_p$  und  $\mathbf{x} \in \mathcal{S}_p$  als materielle und räumliche Form der lokalen Energiebilanz

$$\rho_0 \dot{e} = \mathbf{P} : \dot{\mathbf{F}} - \text{DIV}[\mathbf{Q}] + \rho_0 r \quad \text{und} \quad \rho \dot{e} = \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{d} - \text{div}[\mathbf{q}] + \rho r \quad (\text{II.1.41})$$

Hier ist  $\mathbf{d} = \mathbf{F}^{-T} [\frac{1}{2} \dot{\mathbf{C}}] \mathbf{F}^{-1}$  der Deformationsgeschwindigkeitsgradient. Aus der lokalen Form der inneren Energiebilanz [\(II.1.41\)](#) ergeben sich die globalen Aussagen

$$\dot{E} = Q + P_{int} \stackrel{(\text{II.1.38})}{\implies} \dot{K} = P_{ext} - P_{int} \quad (\text{II.1.42})$$

Die interne Spannungsleistung  $P_{int} = \int_{\mathcal{B}_p} \mathcal{P}_{int} dV = \int_{\mathcal{S}_p} \mathcal{P}_{int} dv$  mit

$$\mathcal{P}_{int} = J \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{d} = \boldsymbol{\tau} : \mathbf{d} = \mathbf{P} : \dot{\mathbf{F}} = \mathbf{S} : \dot{\mathbf{E}} \quad (\text{II.1.43})$$

stellt die Änderung der inneren Elementararbeit des Systems dar.

### 1.3.5. Entropieungleichung

Im Gegensatz zu den bisherigen Bilanzgleichungen dient die Entropiebilanz im Allgemeinen nicht zur Bestimmung von Änderungen physikalischer Größen als vielmehr zur Vorhersage der Richtung eines thermodynamischen Prozesses in Form einer Ungleichung. Der zweite Hauptsatz der Thermodynamik fordert, daß die Änderung der Entropie  $\dot{H}$  nie kleiner ist als der Quotient aus thermischer Leistung  $Q$  und absoluter Temperatur  $\vartheta > 0$ . Demnach ist

$$\dot{H} \geq \frac{Q}{\vartheta} \quad (\text{II.1.44})$$

Die Entropieproduktion  $\Gamma = \dot{H} - Q/\vartheta$  ist daher nie negativ. Im Kontext irreversibler thermodynamischer Prozesse ist  $\Gamma$  keine Erhaltungsgröße. Im freigeschnittenen Körper  $\mathcal{B}_p$  bzw.  $\mathcal{S}_p$  sind die Entropie  $H$  und Entropieproduktion  $\Gamma$  definiert als

$$H := \int_{\mathcal{B}_p} \eta dM = \int_{\mathcal{S}_p} \eta dm \quad \text{und} \quad \Gamma = \int_{\mathcal{B}_p} \gamma dM = \int_{\mathcal{S}_p} \gamma dm \quad (\text{II.1.45})$$

mit  $dM = \rho_0(\mathbf{X}) dV$  und  $dm = \rho(\mathbf{x}, t) dv$ . Die massespezifischen Zustandsgrößen  $\eta$  und  $\gamma$  werden lokale Entropie und lokale Entropieproduktion genannt. Setzt man [\(II.1.40\)<sub>2</sub>](#) und [\(II.1.45\)](#) in  $\Gamma = \dot{H} - Q/\vartheta \geq 0$  ein, gelangt man zur Clausius-Duhem-Ungleichung. Koppelt man diese mit der lokalen inneren Energiebilanz [\(II.1.41\)](#), wobei die innere Energie  $e$  durch die Legendre-Transformation  $e = \bar{\psi} + \eta\vartheta$  der massespezifischen Helmholtz-Energie zu ersetzen ist, erhält man in  $\mathbf{X} \in \mathcal{B}_p$  als materielle Form der Clausius-Duhem-Ungleichung  $\mathcal{D} := \rho_0 \vartheta \gamma \geq 0$  bzw.

$$\mathcal{D} := \mathbf{P} : \dot{\mathbf{F}} - \rho_0(\dot{\bar{\psi}} + \eta\dot{\vartheta}) - \frac{Q}{\vartheta} \partial_X \vartheta \geq 0 \quad (\text{II.1.46})$$

und in  $\mathbf{x} \in \mathcal{S}_p$  als räumliche Form der Clausius-Duhem-Ungleichung  $\mathcal{D} := \rho \vartheta \gamma \geq 0$  bzw.

$$\mathcal{D} := \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{d} - \rho(\dot{\bar{\psi}} + \eta\dot{\vartheta}) - \frac{q}{\vartheta} \partial_x \vartheta \geq 0 \quad (\text{II.1.47})$$

Die Zustandsgröße  $\mathcal{D}$  nennt man Dissipation. Für reversible Prozesse ist  $\mathcal{D} = 0$ . Im Sinne der rationalen Thermodynamik schränken die Ungleichungen [\(II.1.46\)](#) und [\(II.1.47\)](#) die Form der konstitutiven Materialfunktionen hinsichtlich ihrer thermodynamischen Konsistenz a priori ein.



## 2. Variationsformulierung und Finite Elementdiskretisierung

Hier werden Grundlagen zur Beschreibung und Diskretisierung der in dieser Arbeit relevanten Randwertprobleme behandelt. Dabei notwendige Notationen und elementare Feldgleichungen werden eingeführt. Eine analytische Lösung der Randwertprobleme ist im Allgemeinen nicht möglich. Mit Hilfe der auf Energie- oder Arbeitsprinzipien basierenden Methode der Finite Elemente ist die approximative Lösung der Randwertprobleme jedoch durchführbar. Ausgangspunkt solcher energetischer Prinzipien sind in der Elastostatik das Galerkin-Verfahren oder die totale gespeicherte Formänderungsenergie. Für standard-dissipative Materialien wurde in den Arbeiten MIEHE [104] und MIEHE, SCHOTTE & LAMBRECHT [110] ein inkrementelles Variationsverfahren zur Inelastizität entwickelt. Grundidee und wesentliche algorithmische Aspekte des Verfahrens werden im Rahmen kleiner Verzerrungen dargestellt. Eine detaillierte algorithmische Aufbereitung des inkrementellen Variationsverfahrens zur finiten Inelastizität kann auch der Dissertation von LAMBRECHT [93] entnommen werden. Der Abschnitt endet mit einer Übersicht und Erläuterung der in dieser Arbeit eingesetzten Elementformulierungen.

### 2.1. Beschreibung des Randwertproblems

In diesem Abschnitt werden Notationen mit formalem Charakter eingeführt. Eine erschöpfende Beschreibung des Randwertproblems umfaßt die Lösung eines Satzes von gekoppelten partiellen Differentialgleichungen unter Berücksichtigung gegebener Randbedingungen. Im Rahmen kleiner Verzerrungen sei  $\mathcal{B} \in \mathcal{R}^3$  das Kontinuum, hinsichtlich dem folgender Differentialgleichungssatz der statischen, kinematischen und konstitutiven Feldgleichung betrachtet wird:

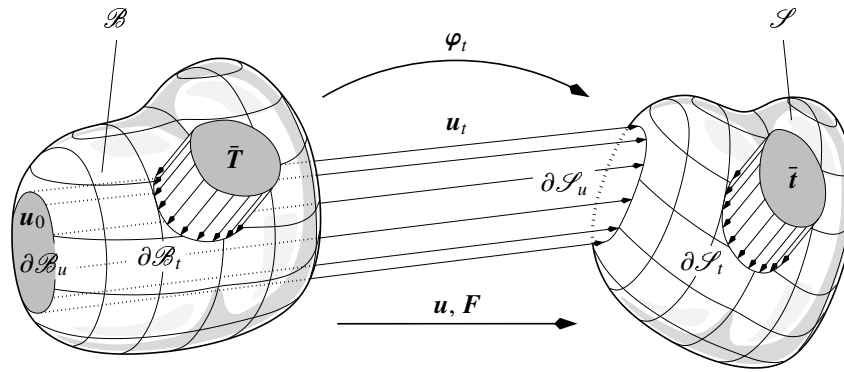
$$\left. \begin{aligned} \operatorname{div}[\boldsymbol{\sigma}] + \rho\boldsymbol{\gamma} &= \mathbf{0} \\ \boldsymbol{\varepsilon} - \operatorname{sym}[\partial_x \mathbf{u}] &= \mathbf{0} \\ \boldsymbol{\sigma} - \partial_\varepsilon \psi &= \mathbf{0} \end{aligned} \right\} \text{ in } \mathcal{B} \quad (\text{II.2.1})$$

Die Variablen  $\{\mathbf{u}, \boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\varepsilon}\}$  stellen das Verschiebungs-, Spannungs- und Verzerrungsfeld dar mit  $\mathbf{u} \in \mathcal{H}^1(\mathcal{B})^3$  und  $\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\varepsilon} \in \mathcal{S}(3)$ .  $\mathcal{H}^1(\mathcal{B})^3 \subset \mathcal{R}^3$  sei der Hilbertraum einfach differenzierbarer Funktionen, und  $\mathcal{S}(3)$  sei der Hilbertraum symmetrischer Tensoren in  $\mathcal{R}^3$ . Der Verzerrungstensor  $\boldsymbol{\varepsilon}$  ergibt sich durch Linearisierung des geometrisch nichtlinearen Verzerrungsmaßes (II.1.20)<sub>1</sub> an der Referenzkonfiguration. Bei rein elastischen Verformungen sei  $\psi = \psi(\boldsymbol{\varepsilon})$  eine bezüglich dem Argument  $\boldsymbol{\varepsilon}$  konvexe Freie Energiefunktion. Bei inelastischem Materialverhalten ist die Entwicklung interner Variablen zusätzlich durch den Differentialgleichungssatz

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{A}(\boldsymbol{\varepsilon}, \dot{\mathcal{I}}, \mathcal{I}) &= \mathbf{0} \\ \mathcal{F} + \partial_{\mathcal{I}} \psi &= \mathbf{0} \\ 0 \leq f(\mathcal{F}, \mathcal{I}) \leq c & \end{aligned} \right\} \text{ in } \mathcal{B} \quad (\text{II.2.2})$$

zu beschreiben.  $\psi = \psi(\boldsymbol{\varepsilon}, \mathcal{I})$  sei hier eine konvexe Energie-Speicherfunktion, für die eine Abhängigkeit von den Verzerrungen  $\boldsymbol{\varepsilon}$  und einem Vektor  $\mathcal{I} \in \mathcal{R}^p$  mit  $p$  internen Variablen angenommen wird. Die Spannungsantwort des Materials  $\mathcal{B}$  sei a priori durch die Clausius-Duhem-Ungleichung (II.1.46) bzw. (II.1.47) thermodynamisch konsistent eingeschränkt. Die Evolution der internen Variablen  $\dot{\mathcal{I}}$  wird implizit durch die Funktion  $\mathbf{A}$  erfaßt. Der Vektor  $\mathcal{F} \in \mathcal{R}^p$  enthält  $p$  zu den internen Variablen  $\mathcal{I}$  konjugierte thermodynamische Kräfte. Die kanonische Fließfunktion  $0 \leq f \leq c$  definiert das elastische Gebiet mit materialspezifischer Schranke  $c \in \mathcal{R}_+$ . Die Vorgabe von Randspannungen  $\bar{\boldsymbol{\tau}}$  und Randverschiebungen  $\bar{\mathbf{u}}$  als Randbedingungen

$$\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} = \bar{\boldsymbol{\tau}} \text{ auf } \partial\mathcal{B}_t \quad \text{und} \quad \mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} \text{ auf } \partial\mathcal{B}_u \quad (\text{II.2.3})$$



**Abbildung 6:** Randwertproblem. Die Oberfläche des materiellen und räumlichen Körpers  $\mathcal{B}$  und  $\mathcal{S}$  teilt sich in einen Bereich mit Dirichlet-Randbedingungen  $\mathbf{u} = \mathbf{u}_0 \in \partial\mathcal{B}_u$  bzw.  $\mathbf{u} = \mathbf{u}_t \in \partial\mathcal{S}_u$  und in einen weiteren Bereich mit Neumann-Randbedingungen  $\mathbf{T} = \bar{\mathbf{T}} \in \partial\mathcal{B}_t$  bzw.  $\mathbf{t} = \bar{\mathbf{t}} \in \partial\mathcal{S}_t$ .

an der Oberfläche  $\partial\mathcal{B}$  des materiellen Körpers  $\mathcal{B}$ , auf der  $\mathbf{n}$  als Einheitsnormale definiert ist, vervollständigt das Randwertproblem.  $\partial\mathcal{B}$  wird dazu in die Bereiche  $\partial\mathcal{B}_u$  und  $\partial\mathcal{B}_t$  mit den Eigenschaften  $\partial\mathcal{B} = \partial\mathcal{B}_t \cup \partial\mathcal{B}_u$  und  $\partial\mathcal{B}_t \cap \partial\mathcal{B}_u = \emptyset$  aufgeteilt. Abb. 6 schematisiert ein Randwertproblem bei finiten Verzerrungen. In der Zweipunktendarstellung der arbeitskonjugierten Größen  $\mathbf{P}, \mathbf{F} \in \mathcal{GL}(3)$  lautet der zugehörige Differentialgleichungssatz

$$\left. \begin{aligned} \text{DIV}[\mathbf{P}] + \rho_0 \boldsymbol{\gamma} &= \mathbf{0} \\ \mathbf{F} - \partial_{\mathbf{x}} \boldsymbol{\varphi} &= \mathbf{0} \\ \mathbf{P} - \partial_{\mathbf{F}} \psi &= \mathbf{0} \end{aligned} \right\} \text{ in } \mathcal{B} \quad (\text{II.2.4})$$

$\mathcal{GL}(3)$  bezeichnet hier die Menge aller linearen Operatoren in  $\mathcal{R}^3$ . Formulierungen in den arbeitskonjugierten Variablen  $\{\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{g}\}$ ,  $\{\boldsymbol{\tau}, \mathbf{g}\}$  oder  $\{\mathbf{S}, \mathbf{C}\}$  sind absolut gleichwertig mit (II.2.4). In (II.2.1)<sub>3</sub> sei  $\psi = \psi(\mathbf{F})$  eine zumindest rang-1-konvexe Freie Energiefunktion. Die zugehörigen Randbedingungen werden in der Referenzkonfiguration  $\mathcal{B}$  definiert durch

$$\mathbf{P}\mathbf{N} = \bar{\mathbf{T}} \text{ auf } \partial\mathcal{B}_t \quad \text{und} \quad \mathbf{u} = \mathbf{u}_0 \text{ auf } \partial\mathcal{B}_u \quad (\text{II.2.5})$$

mit  $\partial\mathcal{B} = \partial\mathcal{B}_t \cup \partial\mathcal{B}_u$  und  $\partial\mathcal{B}_t \cap \partial\mathcal{B}_u = \emptyset$ . Vektor  $\mathbf{N}$  ist hier Einheitsnormale auf  $\partial\mathcal{B}_t$ .

## 2.2. FE-Formulierung bei kleinen linear elastischen Verzerrungen

### 2.2.1. Schwache Formulierung des Randwertproblems

Zur approximativen Lösung der gekoppelten starken Formen (II.2.1) des Randwertproblems werden die zugehörigen schwachen Formen

$$\left. \begin{aligned} G_u &= \int_{\mathcal{B}} \partial_{\mathbf{x}} \delta \mathbf{u} : \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\varepsilon}) dV - G_{ext} = 0 \\ G_{\boldsymbol{\sigma}} &= \int_{\mathcal{B}} \delta \boldsymbol{\sigma} : (\boldsymbol{\varepsilon} - \text{sym}[\partial_{\mathbf{x}} \mathbf{u}]) dV = 0 \\ G_{\boldsymbol{\varepsilon}} &= \int_{\mathcal{B}} \delta \boldsymbol{\varepsilon} : (\boldsymbol{\sigma} - \partial_{\boldsymbol{\varepsilon}} \psi(\boldsymbol{\varepsilon})) dV = 0 \end{aligned} \right\} \text{ in } \mathcal{B} \quad (\text{II.2.6})$$

mit der virtuellen Arbeit der äußeren Lasten

$$G_{ext} = \int_{\mathcal{B}} \delta \mathbf{u} \cdot \rho \boldsymbol{\gamma} dV + \int_{\partial\mathcal{B}_t} \delta \mathbf{u} \cdot \bar{\mathbf{t}} dA \quad (\text{II.2.7})$$

betrachtet. Ausgangspunkt für obige Darstellungen ist das Galerkin-Verfahren, bei dem die Gleichungen in (II.2.1) mit Testfunktionen  $\delta \mathbf{u} \in \{\mathbf{u} \in \mathcal{H}^1(\mathcal{B})^3 \mid \mathbf{u}|_{\partial \mathcal{B}_u} = \mathbf{0}\}$  und  $\delta \boldsymbol{\sigma}, \delta \boldsymbol{\varepsilon} \in \mathcal{S}(3)$  multipliziert und anschließend partiell integriert werden. Der unter (II.2.6) aufgezeigte Gleichungssatz ist allgemeingültig, da keine weiteren Annahmen, wie z.B. die Existenz eines Potentials, vorausgesetzt werden. Er wird nachfolgend im Rahmen der Standard-Verschiebungsmethode für kleine linear elastische Verzerrungen eingeschränkt. Die geometrische und konstitutive Feldgleichung (II.2.1)<sub>2</sub> und (II.2.1)<sub>3</sub> werden hier jeweils vorausgesetzt. Die in  $\mathbf{x} \in \mathcal{B}$  auftretenden Verzerrungen und Spannungen sind gegeben durch

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \text{sym}[\partial_x \mathbf{u}] \quad \text{und} \quad \boldsymbol{\sigma} = \partial_{\boldsymbol{\varepsilon}} \psi(\boldsymbol{\varepsilon}) = \mathbb{C} : \boldsymbol{\varepsilon} \quad (\text{II.2.8})$$

Die virtuellen Verzerrungen  $\delta \boldsymbol{\varepsilon} = \text{sym}[\partial_x \delta \mathbf{u}]$  sind eine Funktion der virtuellen Verschiebungen. Die in  $\mathbf{x} \in \mathcal{B}$  gespeicherte Freie Energie  $\psi$  ist eine quadratische Funktion der Verzerrungen

$$\psi(\boldsymbol{\varepsilon}) = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbb{C} : \boldsymbol{\varepsilon} \quad (\text{II.2.9})$$

Dem Hookeschen Elastizitätsgesetz folgend ist der vierstufige positiv definite Elastizitätstensor

$$\mathbb{C} = \kappa \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} + 2\mu (\mathbb{1} - \frac{1}{3} \mathbf{1} \otimes \mathbf{1}) \quad (\text{II.2.10})$$

konstant und besitzt die Symmetrieeigenschaften  $\mathbb{C}_{abcd} = \mathbb{C}_{bacd} = \mathbb{C}_{abdc} = \mathbb{C}_{cdab}$ . Es bezeichnet  $\kappa$  den Kompressionsmodul und  $\mu$  den Schubmodul.  $\mathbb{1}_{ijkl} = \frac{1}{2} (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk})$  und  $1_{ij} = \delta_{ij}$  sind der vier- und zweistufige Einheitstensor. Mit diesen Betrachtungen verbleibt von (II.2.6) nur

$$G_u(\mathbf{u}, \delta \mathbf{u}) = \int_{\mathcal{B}} \delta \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbb{C} : \boldsymbol{\varepsilon} dV - G_{ext}(\delta \mathbf{u}) = 0 \quad (\text{II.2.11})$$

mit der virtuellen äußeren Arbeit  $G_{ext}$ . Alternativ zu obigem Prinzip der virtuellen Verschiebungen kann die schwache Form (II.2.11) aus dem Prinzip vom Minimum der gespeicherten Formänderungsenergie  $\int_{\mathcal{B}} \psi dV$  im elastisch deformierten Körper  $\mathcal{B}$  hergeleitet werden:

$$\Pi(\mathbf{u}) := \int_{\mathcal{B}} \psi(\boldsymbol{\varepsilon}) dV - \int_{\mathcal{B}} \mathbf{u} \cdot \rho \boldsymbol{\gamma} dV - \int_{\partial \mathcal{B}_t} \mathbf{u} \cdot \bar{\mathbf{t}} dA \rightarrow \min_{\mathbf{u}} \quad (\text{II.2.12})$$

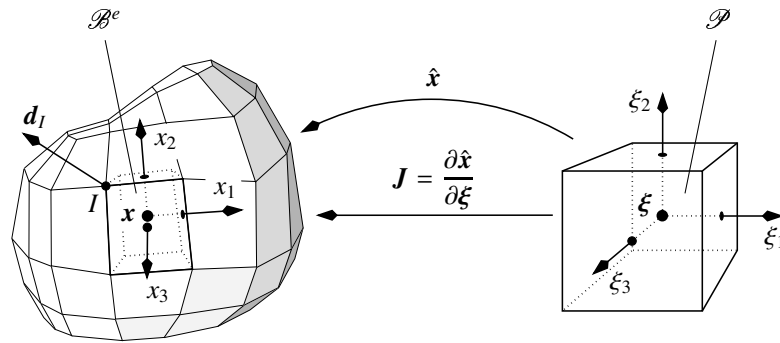
Notwendige Bedingung für die Minimierung des Funktionals  $\Pi$  ist das Verschwinden der ersten Variation  $\delta \Pi$  bezüglich den Verschiebungen  $\mathbf{u}$ . Die erste Variation  $\delta \Pi = 0$  führt auf die den Gleichgewichtszustand des elastischen Körpers  $\mathcal{B}$  bestimmende Variationsgleichung  $\delta \Pi \equiv G_u = 0$ . Das Variationsprinzip gilt nur im Fall elastischen Materialverhaltens.

### 2.2.2. FE-Diskretisierung

Es wird eine FE-Diskretisierung des Lösungsgebiets  $\mathcal{B}$  durchgeführt, siehe Abb. 7. Dazu wird  $\mathcal{B}$  durch ein Netz aus  $n_{ele}$  Finite Elementen  $\mathcal{B}^e \subset \mathcal{B}$  mit der Näherung  $\mathcal{B} = \bigoplus_{e=1}^{n_{ele}} \mathcal{B}^e$  approximiert. Als Finite Elementapproximationen der Verschiebungen  $\{\mathbf{u}^h, \delta \mathbf{u}^h\}$  und Verzerrungen  $\{\boldsymbol{\varepsilon}^h, \delta \boldsymbol{\varepsilon}^h\}$  werden im Elementgebiet  $\mathcal{B}^e$  die Ansätze

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{u}^h &= \sum_I N_I(\boldsymbol{\xi}) \mathbf{d}_I^e = \mathbf{N}(\boldsymbol{\xi}) \mathbf{d}^e \Rightarrow \delta \mathbf{u}^h = \sum_I N_I(\boldsymbol{\xi}) \delta \mathbf{d}_I^e = \mathbf{N}(\boldsymbol{\xi}) \delta \mathbf{d}^e \\ \boldsymbol{\varepsilon}^h &= \sum_I \mathbf{B}_I(\boldsymbol{\xi}) \mathbf{d}_I^e = \mathbf{B}(\boldsymbol{\xi}) \mathbf{d}^e \Rightarrow \delta \boldsymbol{\varepsilon}^h = \sum_I \mathbf{B}_I(\boldsymbol{\xi}) \delta \mathbf{d}_I^e = \mathbf{B}(\boldsymbol{\xi}) \delta \mathbf{d}^e \end{aligned} \right\} \quad (\text{II.2.13})$$

gewählt. Hier sind  $\mathbf{d}^e$  die diskreten Elementknotenverschiebungen sowie  $\mathbf{N}$  und  $\mathbf{B} = \partial_{\boldsymbol{\xi}} \mathbf{N}$  die in den natürlichen Koordinaten  $\boldsymbol{\xi} = (\xi_1, \xi_2, \xi_3)^T$  des Parameterraums  $\mathcal{P}$  mit  $-1 < \xi_1, \xi_2, \xi_3 < 1$



**Abbildung 7:** Isoparametrische Abbildung eines Finite Elements vom Parameterraum  $\mathcal{P}$  in den physikalischen Elementraum  $\mathcal{B}^e$ .

parametrisierten polynomialen Ansatzfunktionen und  $B$ -Matrizen.  $I$  ist Elementknotenindex. Mit (II.2.13) nimmt (II.2.11) die diskrete Form

$$G_u^h(\mathbf{u}^h, \delta \mathbf{u}^h) = \sum_{e=1}^{n_{ele}} \left\{ \delta \mathbf{d}^{eT} \int_{\mathcal{B}^e} \mathbf{B}^T [\mathbf{C}] \mathbf{B} dV d^e - \int_{\mathcal{B}^e} \mathbf{N}^T \rho \gamma dV - \int_{\partial \mathcal{B}^e} \mathbf{N}^T \bar{\mathbf{t}} dA \right\} = 0 \quad (\text{II.2.14})$$

an. Im Folgenden ist  $\{\{\cdot\}\}$  stets die Matrixdarstellung des Tensors  $\{\cdot\}$ . Aus (II.2.14) ergibt sich das zu lösende lineare Gleichungssystem

$$\mathbf{K} \mathbf{d} = \mathbf{f} \quad (\text{II.2.15})$$

mit Verschiebungsvektor  $\mathbf{d} = \mathbf{A} \sum_{e=1}^{n_{ele}} \mathbf{d}^e$  sowie der Steifigkeitsmatrix und dem Kraftvektor

$$\mathbf{K} = \mathbf{A} \sum_{e=1}^{n_{ele}} \int_{\mathcal{B}^e} \mathbf{B}^T [\mathbf{C}] \mathbf{B} dV \quad \text{und} \quad \mathbf{f} = \mathbf{A} \sum_{e=1}^{n_{ele}} \left\{ \int_{\mathcal{B}^e} \mathbf{N}^T \rho \gamma dV + \int_{\partial \mathcal{B}^e} \mathbf{N}^T \bar{\mathbf{t}} dA \right\} \quad (\text{II.2.16})$$

Hier ist  $\mathbf{A}$  der sogenannte Assemblierungsoperator. Beim Integrieren ist die sogenannte isoparametrische Abbildung  $\mathbf{x} \equiv \hat{\mathbf{x}}(\boldsymbol{\xi}) = \sum_I N_I(\boldsymbol{\xi}) \mathbf{x}_I$  zur Berechnung der Jakobimatrix  $\mathbf{J} = \partial \mathbf{x} / \partial \boldsymbol{\xi}$  zu berücksichtigen. Abb. 7 folgend transformiert die isoparametrische Abbildung Finite Elemente vom Parameterraum  $\mathcal{P}$  der Ansatzfunktionen in den physikalischen Raum  $\mathcal{B}^e$ .

## 2.3. FE-Formulierung bei kleinen nichtlinear elastischen Verzerrungen

### 2.3.1. Linearisierte schwache Formulierung des Randwertproblems

In der geometrisch linearen Theorie gelten die schwachen Formen (II.2.6) der gekoppelten Feldgleichungen (II.2.1) gleichermaßen für physikalisch linear und nichtlinear elastische Probleme. Bei nichtlinearem Materialverhalten sind die Freie Energie  $\psi$  und die Spannungen  $\boldsymbol{\sigma}$  nichtlineare Funktionen der Verzerrungen. Im Rahmen der Standard-Verschiebungsmethode wird analog zu linearen Problemen im vorangehenden Abschnitt verfahren. Verzerrungen und Spannungen sind a priori gegeben durch

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \text{sym}[\partial_x \mathbf{u}] \quad \text{und} \quad \boldsymbol{\sigma} = \partial_{\boldsymbol{\varepsilon}} \psi(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})) \quad (\text{II.2.17})$$

Die schwache Form (II.2.11) ist hier ein in den Verzerrungen nichtlineares Funktional

$$G_u(\mathbf{u}, \delta \mathbf{u}) = \int_{\mathcal{B}} \delta \boldsymbol{\varepsilon} : \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})) dV - G_{ext}(\delta \mathbf{u}) = 0 \quad (\text{II.2.18})$$

Die virtuelle Arbeit  $G_{ext}$  der äußeren Lasten ist in (II.2.7) dargestellt. Analog zu linearen Problemen läßt sich (II.2.18) alternativ aus dem Prinzip vom Minimum der im Körper  $\mathcal{B}$  gespeicherten Formänderungsenergie gewinnen. Im Hinblick auf eine iterative Lösung mit dem Newton-Verfahren wird das nichtlineare Funktional (II.2.18) an einer bekannten eingefrorenen Verschiebung  $\bar{\mathbf{u}}$  linearisiert. Die Linearisierung von  $G_u$  an der Stelle  $\bar{\mathbf{u}}$  ist gegeben durch eine Taylor-Reihenentwicklung erster Ordnung

$$\left. \begin{aligned} \text{Lin } G_u(\bar{\mathbf{u}}, \delta \mathbf{u}, \Delta \mathbf{u}) &= G_u(\bar{\mathbf{u}}, \delta \mathbf{u}) + \Delta G_u(\bar{\mathbf{u}}, \delta \mathbf{u}, \Delta \mathbf{u}) = 0 \\ \Delta G_u(\bar{\mathbf{u}}, \delta \mathbf{u}, \Delta \mathbf{u}) &= \int_{\mathcal{B}} \delta \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbb{C}(\boldsymbol{\varepsilon}(\bar{\mathbf{u}})) : \Delta \boldsymbol{\varepsilon} dV \end{aligned} \right\} \quad (\text{II.2.19})$$

Die inkrementellen Verzerrungen  $\Delta \boldsymbol{\varepsilon} = \text{sym}[\partial_x \Delta \mathbf{u}]$  sind lineare Funktionen der inkrementellen Verschiebungen  $\Delta \mathbf{u} = \mathbf{u} - \bar{\mathbf{u}} \in \{\mathbf{v} \in \mathcal{H}^1(\mathcal{B})^3 | \mathbf{v}|_{\partial \mathcal{B}_u} = \mathbf{0}\}$ . In obiger Darstellung sind  $\mathbb{C} := \partial_{\boldsymbol{\varepsilon}} \boldsymbol{\sigma} = \partial_{\boldsymbol{\varepsilon} \boldsymbol{\varepsilon}}^2 \psi$  die inkrementellen Tangentenmoduli mit den Symmetrieeigenschaften  $\mathbb{C}_{abcd} = \mathbb{C}_{bacd} = \mathbb{C}_{abdc} = \mathbb{C}_{cdab}$ . Das linearisierte Funktional (II.2.19) ist linear in  $\Delta \mathbf{u}$ . Im Lösungspunkt ist  $\Delta \boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{0}$  und infolgedessen  $G_u = 0$ .

### 2.3.2. FE-Diskretisierung

Der FE-Diskretisierungsansatz ist identisch zur linearen Theorie. Das Gebiet  $\mathcal{B}$  wird entsprechend Abb. 7 in Elementräume  $\mathcal{B}^e$  mit  $\mathcal{B} = \bigoplus_{e=1}^{n_{ele}} \mathcal{B}^e$  zerlegt. Als Finite Elementapproximationen der Verschiebungen  $\{\mathbf{u}^h, \delta \mathbf{u}^h\}$  und Verzerrungen  $\{\boldsymbol{\varepsilon}^h, \delta \boldsymbol{\varepsilon}^h\}$  werden im Elementgebiet  $\mathcal{B}^e$  die Ansätze (II.2.13) und für die inkrementellen Variablen  $\Delta \mathbf{u}$  und  $\Delta \boldsymbol{\varepsilon}$  die Darstellungen

$$\left. \begin{aligned} \Delta \mathbf{u}^h &= \sum_I N_I(\boldsymbol{\xi}) \Delta \mathbf{d}_I^e = \mathbf{N}(\boldsymbol{\xi}) \Delta \mathbf{d}^e \\ \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^h &= \sum_I \mathbf{B}_I(\boldsymbol{\xi}) \Delta \mathbf{d}_I^e = \mathbf{B}(\boldsymbol{\xi}) \Delta \mathbf{d}^e \end{aligned} \right\} \quad (\text{II.2.20})$$

gewählt. Ansatzfunktion und  $B$ -Matrizen sind identisch zur linearen Theorie. Die Diskretisierungsansätze in (II.2.19) eingesetzt ergeben das bezüglich  $\bar{\mathbf{u}}^h$  linearisierte diskrete Funktional

$$\text{Lin } G_u^h(\bar{\mathbf{u}}^h, \delta \mathbf{u}^h, \Delta \mathbf{u}^h) = \sum_{e=1}^{n_{ele}} \delta \mathbf{d}^{eT} \mathbf{k}^e \Delta \mathbf{d}^e + \sum_{e=1}^{n_{ele}} \delta \mathbf{d}^{eT} \mathbf{r}^e = 0 \quad (\text{II.2.21})$$

das aus  $n_{ele}$  Elementsteifigkeitsmatrizen und Elementresiduen

$$\mathbf{k}^e = \partial_{\mathbf{d}^e} \mathbf{r}^e = \int_{\mathcal{B}^e} \mathbf{B}^T [\mathbb{C}(\boldsymbol{\varepsilon}(\bar{\mathbf{u}}^h))] \mathbf{B} dV \quad \text{und} \quad \mathbf{r}^e = \int_{\mathcal{B}^e} \mathbf{B}^T [\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\varepsilon}(\bar{\mathbf{u}}^h))] dV - \mathbf{f}_{ext}^e \quad (\text{II.2.22})$$

assembliert wird. Der externe Knotenkraftvektor  $\mathbf{f}_{ext} := \mathbf{A}_{e=1}^{n_{ele}} \mathbf{f}_{ext}^e$  ist gleich dem Kraftvektor  $\mathbf{f}$  in (II.2.16)<sub>2</sub>. Mit der Definition der globalen Tangentenmatrix und des Residuums

$$\mathbf{K} := \mathbf{A}_{e=1}^{n_{ele}} \mathbf{k}^e \quad \text{und} \quad \mathbf{r} := \mathbf{A}_{e=1}^{n_{ele}} \mathbf{r}^e \quad (\text{II.2.23})$$

ergibt sich aus (II.2.21) das iterativ nach  $\Delta \mathbf{d} = \mathbf{A}_{e=1}^{n_{ele}} \Delta \mathbf{d}^e$  zu lösende lineare Gleichungssystem

$$\mathbf{K} \Delta \mathbf{d} = -\mathbf{r} \quad (\text{II.2.24})$$

Das Ergebnis wird auf den aktuellen Verschiebungsvektor  $\bar{\mathbf{d}}$  in der Form

$$\mathbf{d} = \bar{\mathbf{d}} + \Delta \mathbf{d} \quad (\text{II.2.25})$$

aufaddiert. Im Lösungspunkt sind die Verschiebungsinkremente  $\Delta \mathbf{d} = \mathbf{0}$ . Das Iterationsende ist erreicht, wenn die residuale Norm  $|\mathbf{r}| = \sqrt{\mathbf{r}^T \mathbf{r}}$  eine gegebene kleine Toleranz unterschreitet.

## 2.4. Inkrementelle Variationsformulierung der Inelastizität

In diesem Abschnitt wird eine inkrementelle Variationsformulierung der Inelastizität behandelt, die in MIEHE [104] und MIEHE, SCHOTTE & LAMBRECHT [110] dargestellt ist. Der Akzent liegt auf einer allgemeinen Formulierung der Inelastizität für standard-dissipative Materialien, deren Verhalten durch eine Speicher- und eine Dissipationsfunktion beschrieben wird. Im Rahmen dieser Formulierung lassen sich die Evolutionsgleichungen der internen Variablen aus dem Prinzip der maximalen Dissipation herleiten. Die Variationsformulierung führt auf ein inkrementelles hyperelastisches Spannungspotential als Lösung eines lokalen Minimierungsproblems hinsichtlich der internen Variablen. Spannungen und Tangentenmoduli ergeben sich aus erster und zweiter Ableitung des inkrementellen Potentials.

### 2.4.1. Interne Variablenformulierung

In (II.2.2) sind die wesentlichen Gleichungen zur Inelastizität dargestellt. Ziel nachfolgender Ausführungen ist, den Gleichungssatz im Kontext der internen Variablenformulierung zu motivieren. Dem zweiten Hauptsatz der Thermodynamik folgend wird das lokale konstitutive Materialverhalten bei isothermen Prozessen durch die Clausius-Duhem-Ungleichung

$$\mathcal{D} := \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} - \dot{\psi} \geq 0 \quad (\text{II.2.26})$$

a priori eingeschränkt. Der lokale elastische Speichermechanismus wird durch die volumenspezifische Freie Energie  $\psi = \psi(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{I})$  charakterisiert, die von den totalen Verzerrungen  $\boldsymbol{\varepsilon} = \text{sym}[\partial_x \boldsymbol{u}]$  und von einem Vektor  $\boldsymbol{I} \in \mathcal{R}^p$  mit  $p$  internen Variablen abhängt. Das deformationsabhängige inelastische Materialverhalten wird durch eine interne Variablenformulierung beschrieben, wie sie in den Arbeiten COLEMAN & GURTIN [37] und LUBLINER [94] dargestellt ist. Mit der zeitlichen Ableitung der Freien Energie in

$$\mathcal{D} = (\boldsymbol{\sigma} - \partial_{\boldsymbol{\varepsilon}} \psi) : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} - \partial_{\boldsymbol{I}} \psi \cdot \dot{\boldsymbol{I}} \geq 0 \quad (\text{II.2.27})$$

und dem Standardargument von COLEMAN & GURTIN [37], wonach die Dissipationsungleichung für rein elastische Verzerrungen  $\dot{\boldsymbol{I}} = \boldsymbol{0}$  und für beliebige Verzerrungsraten  $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}} \neq \boldsymbol{0}$  erfüllt sein muß, ergeben sich die konstitutive Gleichung der Spannungen

$$\boldsymbol{\sigma} = \partial_{\boldsymbol{\varepsilon}} \psi(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{I}) \quad (\text{II.2.28})$$

und die reduzierte Form der Clausius-Duhem-Ungleichung

$$\mathcal{D} = \mathcal{F} \cdot \dot{\boldsymbol{I}} \geq 0 \quad \text{mit} \quad \mathcal{F} = -\partial_{\boldsymbol{I}} \psi(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{I}) \quad (\text{II.2.29})$$

$\mathcal{F}$  bezeichnet die thermodynamischen Kräfte konjugiert zu den internen Variablen  $\boldsymbol{I}$ . Die thermodynamischen Kräfte und die internen Variablen werden durch das konvexe elastische Gebiet

$$\mathcal{E} := \{\mathcal{F} \mid f(\mathcal{F}, \boldsymbol{I}) \leq c\} \quad (\text{II.2.30})$$

eingeschränkt, welches durch die kanonische Fließfunktion  $f : \mathcal{R}^p \rightarrow \mathcal{R}$  definiert wird. Die Konstante  $c \in \mathcal{R}_+$  ist eine gegebene materialspezifische Schranke. Die kanonische Fließfunktion  $f$  ist (i) konvex  $f(\theta \mathcal{F}_2 + (1 - \theta) \mathcal{F}_1, \boldsymbol{I}) \leq \theta f(\mathcal{F}_2, \boldsymbol{I}) + (1 - \theta) f(\mathcal{F}_1, \boldsymbol{I})$  für  $\{\mathcal{F}_1, \mathcal{F}_2\} \in \mathcal{E}$  und  $\theta \in [0, 1]$ , (ii) positiv homogen vom Grad 1  $f(\theta \mathcal{F}, \boldsymbol{I}) = \theta f(\mathcal{F}, \boldsymbol{I})$  für  $\theta > 0$ , (iii) null im Ursprung  $f(\boldsymbol{0}, \boldsymbol{I}) = 0$  und (iv) immer positiv  $f(\mathcal{F}, \boldsymbol{I}) \geq 0$ .



Die Evolution  $\dot{\mathcal{I}}$  der internen Variablen wird nachfolgend im Rahmen normal-dissipativer Materialien definiert. Die Klasse der normal-dissipativen Materialien umfaßt Materialmodelle der Elastizität, Viskoelastizität, Plastizität, Viskoplastizität und Schädigung. Die Evolution  $\dot{\mathcal{I}}$  wird lokal durch die konstitutive Gleichung

$$\partial_{\mathcal{I}}\psi(\boldsymbol{\varepsilon}, \mathcal{I}) + \partial_{\dot{\mathcal{I}}}\phi(\dot{\mathcal{I}}, \mathcal{I}) = \mathbf{0} \quad (\text{II.2.31})$$

beschrieben, in der  $\phi$  als Dissipationsfunktion auftritt. (II.2.31) wird Biot-Gleichung genannt, siehe BIOT [19], ZIEGLER [180], ZIEGLER & WEHRLI [181], GERMAIN [54], HALPHEN & NGUYEN [63] und NGUYEN [126]. Ausgangspunkt der Biot-Gleichung ist die lokale Form  $\mathcal{P}_{int} = \mathcal{P}_{ext}$  der Bilanz der kinetischen Energie (II.1.42)<sub>2</sub> im quasi-statischen Fall. Definiert man dort die interne volumenspezifische Spannungsleistung  $\mathcal{P}_{int} := \dot{\psi} + \phi$  als Komposition aus elastischem Speicheranteil  $\psi$  und dissipativem Anteil  $\phi$ , so ergibt sich (II.2.31) aus der partiellen Ableitung  $\partial_{\dot{\mathcal{I}}}\mathcal{P}_{ext} = \partial_{\dot{\mathcal{I}}}\mathcal{P}_{int} = \mathbf{0}$ . Über die Legendre-Fenchel-Transformation von  $\phi$

$$\phi^*(\mathcal{F}, \mathcal{I}) = \max_{\dot{\mathcal{I}}} \{\mathcal{F} \cdot \dot{\mathcal{I}} - \phi(\dot{\mathcal{I}}, \mathcal{I})\} \quad (\text{II.2.32})$$

die in Abschnitt 3 definiert wird, gelangt man zu den alternativen Darstellungen

$$\mathcal{F} = \partial_{\dot{\mathcal{I}}}\phi(\dot{\mathcal{I}}, \mathcal{I}) \quad \text{und} \quad \dot{\mathcal{I}} = \partial_{\mathcal{F}}\phi^*(\mathcal{F}, \mathcal{I}) \quad (\text{II.2.33})$$

der Biot-Gleichung, wenn man  $\mathcal{F}$  durch (II.2.29)<sub>2</sub> ersetzt. Hier ist  $\phi^*$  die konvexe konjugierte Dissipationsfunktion. Bei gegebenem  $\phi$  können  $\mathcal{F}$  und  $\dot{\mathcal{I}}$  mittels (II.2.32) und (II.2.33) berechnet werden. Hauptziel weiterer Betrachtungen ist daher, die Dissipationsfunktion  $\phi$  geeignet zu identifizieren. Mit (II.2.33)<sub>1</sub> in (II.2.29) ergibt sich als Dissipationsungleichung

$$\mathcal{D} = \dot{\mathcal{I}} \cdot \partial_{\dot{\mathcal{I}}}\phi(\dot{\mathcal{I}}, \mathcal{I}) \geq 0 \quad (\text{II.2.34})$$

durch die  $\phi$  thermodynamisch konsistent eingeschränkt wird. Die Dissipationsungleichung ist a priori erfüllt, falls  $\phi$  bezüglich  $\dot{\mathcal{I}}$  konvex ist und  $\phi(\mathbf{0}, \mathcal{I}) = 0$  und  $\phi(\dot{\mathcal{I}}, \mathcal{I}) \geq 0$ . Das folgt unmittelbar aus der in Abschnitt 3 definierten Konvexitätsbedingung, die wegen  $\mathcal{D} = \dot{\mathcal{I}} \cdot \partial_{\dot{\mathcal{I}}}\phi(\dot{\mathcal{I}}, \mathcal{I}) > \phi(\dot{\mathcal{I}}, \mathcal{I}) - \phi(\mathbf{0}, \mathcal{I}) = \phi(\dot{\mathcal{I}}, \mathcal{I}) \geq 0$  für beliebige Evolution  $\dot{\mathcal{I}} \neq \mathbf{0}$  erfüllt ist. Im Rahmen dieser Arbeit werden ausschließlich elastoplastische Materialmodelle untersucht. In diesem Fall ist  $\phi$  typischerweise homogen vom Grad 1 bezüglich  $\dot{\mathcal{I}}$ , d.h.

$$\phi(\theta\dot{\mathcal{I}}, \mathcal{I}) = \theta\phi(\dot{\mathcal{I}}, \mathcal{I}) \quad \text{für} \quad \theta \in \mathcal{R}_+ \quad (\text{II.2.35})$$

$\phi$  hat kegelförmige Gestalt und ist im Punkt  $\dot{\mathcal{I}} = \mathbf{0}$  nicht differenzierbar. Die Einführung des sogenannten Subdifferential-Operators  $\partial$  nicht-glatte konvexer Funktionen, siehe beispielsweise MOREAU [115, 116], HALPHEN & NGUYEN [63] und NGUYEN [126], ermöglicht die Erweiterung des Definitionsbereichs von  $\partial_{\dot{\mathcal{I}}}\phi(\mathbf{0}, \mathcal{I})$  auf  $\dot{\mathcal{I}} = \mathbf{0}$ .  $\mathcal{F} = \partial_{\dot{\mathcal{I}}}\phi(\mathbf{0}, \mathcal{I})$  wird in diesem Kontext Subgradient genannt. An der Unstetigkeitsstelle  $\phi(\mathbf{0}, \mathcal{I})$  liegt die Entwicklung  $\dot{\mathcal{I}}$  der internen Variablen im von der Schar  $\partial_{\mathcal{F}}\phi^*$ , dem Subdifferential von  $\phi^*$ , aufgespannten Normalenkegel. Unter Berücksichtigung von (II.2.35) ergibt sich aus (II.2.34)

$$\mathcal{D} = \phi(\dot{\mathcal{I}}, \mathcal{I}) \geq 0 \quad (\text{II.2.36})$$

Bei bekanntem elastischen Gebiet (II.2.30), d.h. bei gegebener Funktion  $f$ , wird die Dissipationsfunktion  $\phi$  basierend auf dem klassischen Prinzip der maximalen Dissipation bestimmt. Dieses Extremalprinzip führt unter der Nebenbedingung  $\mathcal{F} \in \mathcal{E}$  bzw.  $f \leq c$  auf

$$\phi(\dot{\mathcal{I}}, \mathcal{I}) = \max_{\mathcal{F}} \{\mathcal{F} \cdot \dot{\mathcal{I}} - \lambda(f(\mathcal{F}, \mathcal{I}) - c)\} \quad (\text{II.2.37})$$

Der Lagrange-Parameter  $\lambda$ , auch plastischer Multiplikator genannt, ist Element des Kegels

$$\mathcal{K} := \{\lambda \in \mathcal{R}_+ \mid \lambda \geq 0, f(\mathcal{F}, \mathcal{I}) \leq c, \lambda(f(\mathcal{F}, \mathcal{I}) - c) = 0\} \quad (\text{II.2.38})$$

Man erhält  $\phi^*(\mathcal{F}, \mathcal{I}) = \lambda(f(\mathcal{F}, \mathcal{I}) - c)$ , wenn man (II.2.37) entsprechend Abschnitt 3 als Legendre-Fenchel-Transformierte von  $\phi^*$  auffaßt und den konvexen Bipol  $\phi^{**}$  mit  $\phi$  gleichsetzt. Die Dissipationsfunktion  $\phi$  muß dazu bezüglich dem Argument  $\dot{\mathcal{I}}$  konvex sein. Die Darstellung von  $\phi^*$  liefert zusammen mit (II.2.33)<sub>2</sub> die Evolution der internen Variablen

$$\dot{\mathcal{I}} = \lambda \partial_{\mathcal{F}} f(\mathcal{F}, \mathcal{I}) \quad (\text{II.2.39})$$

als Produkt aus dem Betrag  $\lambda$  plastischen Fließens in Richtung  $\partial_{\mathcal{F}} f$ . Die Evolution  $\dot{\mathcal{I}}$  läßt sich im Allgemeinen implizit in den Variablen  $\{\boldsymbol{\varepsilon}, \lambda\}$  darstellen gemäß dem algorithmischen Schema

$$A(\boldsymbol{\varepsilon}, \lambda) := \dot{\mathcal{I}}(\boldsymbol{\varepsilon}, \lambda) - \lambda \partial_{\mathcal{F}} f(\mathcal{F}(\boldsymbol{\varepsilon}, \mathcal{I}(\boldsymbol{\varepsilon}, \lambda)), \mathcal{I}(\boldsymbol{\varepsilon}, \lambda)) = \mathbf{0} \quad (\text{II.2.40})$$

(II.2.39) eingesetzt in (II.2.37) ergibt unter Ausnutzung der Homogenität vom Grad 1 von  $f$

$$\phi(\lambda) = \lambda c \quad (\text{II.2.41})$$

als Parameterfunktion von  $\lambda$ . In Verbindung mit (II.2.36) erhält man als interne Dissipation

$$\mathcal{D} = \lambda c \geq 0 \quad (\text{II.2.42})$$

die wegen  $\lambda, c \geq 0$  stets erfüllt ist. Im Fall plastischen Fließens  $\lambda > 0$  folgt aus den in  $\mathcal{K}$  definierten Belastungsbedingungen  $\lambda c = \lambda f$ . Die Funktion  $f$  kann daher als skalare Kraftgröße aufgefaßt werden, welche plastisches Fließen in Höhe von  $\lambda$  verursacht.

#### 2.4.2. Inkrementelle Variationsformulierung

Bei der inkrementellen Variationsformulierung werden inelastische Deformationsprozesse energetisch beschrieben. Ausgangspunkt dieser Variationsformulierung ist die Bilanz  $P_{int} = P_{ext}$  der kinetischen Energie (II.1.42)<sub>2</sub> für den quasi-statischen Fall im finiten Zeitschritt  $[t_n, t_{n+1}] \in \mathcal{R}_+$ , zu dessen Beginn  $t_n$  alle Variablen gegeben sind. Variablen zum Zeitpunkt  $t_n$  werden im Folgenden mit  $n$ , Variablen zum Zeitpunkt  $t_{n+1}$  mit  $n + 1$  indiziert. Zur Berechnung der Verschiebungen  $\mathbf{u}_{n+1}$  des elasto-plastischen Kontinuums  $\mathcal{B}$  wird ein inkrementelles Pseudopotential  $\Pi$  eingeführt, welches entsprechend dem Prinzip vom Minimum der potentiellen Energie

$$\Pi(\mathbf{u}_{n+1}) = \int_{t_n}^{t_{n+1}} P_{int} - P_{ext} dt \rightarrow \min_{\mathbf{u}_{n+1}} \quad (\text{II.2.43})$$

unter Berücksichtigung der Randbedingungen (II.2.3) zu minimieren ist. Hierbei sei

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} P_{ext} dt = \int_{\mathcal{B}} (\mathbf{u}_{n+1} - \mathbf{u}_n) \cdot \rho \boldsymbol{\gamma} dV + \int_{\partial \mathcal{B}_t} (\mathbf{u}_{n+1} - \mathbf{u}_n) \cdot \bar{\mathbf{t}} dA \quad (\text{II.2.44})$$

das externe Potential aus Volumenkräften  $\rho \boldsymbol{\gamma}$  und Randspannungsvektoren  $\bar{\mathbf{t}}$ , das mit der als

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} P_{int} dt := \int_{\mathcal{B}} W(\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}) dV \quad (\text{II.2.45})$$



definierten internen Arbeit im Gleichgewicht sein muß. Das vom aktuellen Deformationszustand  $\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1} = \text{sym}[\partial_x \mathbf{u}_{n+1}]$  abhängige inkrementelle Spannungspotential  $W$  hat hyperelastischen Charakter. Aktuelle Spannungen und Tangentenmoduli ergeben sich durch partielle Ableitung von  $W$  nach den Verzerrungen  $\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}$

$$\boldsymbol{\sigma}_{n+1} = \partial_{\boldsymbol{\varepsilon}} W(\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}) \quad \text{und} \quad \mathbb{C}_{n+1} = \partial_{\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon}}^2 W(\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}) \quad (\text{II.2.46})$$

Die volumenbezogene Arbeit  $W = \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathcal{P}_{int} dt$  sei die lokal in  $\mathcal{B}$  im Zeitintervall  $[t_n, t_{n+1}]$  gerichtete interne Spannungsleistung mit der im vorangehenden Abschnitt definierten Komposition  $\mathcal{P}_{int} := \dot{\psi} + \phi$  aus reversiblen und irreversiblen Anteil. Dem naturgemäßen Prinzip vom kleinsten Zwang entsprechend definiert man daher als minimale interne Arbeit bei eingefrorenem Deformationszustand  $\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}$

$$W(\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}) := \min_{\mathcal{I}_{n+1}} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \dot{\psi}(\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}, \mathcal{I}) + \phi(\dot{\mathcal{I}}, \mathcal{I}) dt \quad (\text{II.2.47})$$

mit Anfangsbedingung  $\mathcal{I}(t_n) = \mathcal{I}_n$ . Das Minimierungsproblem beschreibt einen Optimierungspfad der internen Variablen  $\mathcal{I}(t)$  im Zeitintervall  $t \in [t_n, t_{n+1}]$ . Um die Konsistenz von (II.2.47) mit den kontinuierlichen Formen (II.2.28) und (II.2.31) der konstitutiven Gleichungen im Grenzübergang  $t_{n+1} \rightarrow t_n$  zu belegen, wird (II.2.47) reformuliert als

$$W(\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}) = \min_{\mathcal{I}_{n+1}} \left\{ [\psi(\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}, \mathcal{I})]_{t_n}^{t_{n+1}} + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \phi(\dot{\mathcal{I}}, \mathcal{I}) dt \right\} \quad (\text{II.2.48})$$

Notwendige Bedingung des Minimierungsproblems (II.2.48) ist, daß die erste Variation des eingeklammerten Ausdrucks bezüglich den internen Variablen  $\mathcal{I}$  verschwindet, sodaß

$$[\partial_{\mathcal{I}} \psi \cdot \delta \mathcal{I}]_{t_n}^{t_{n+1}} + \int_{t_n}^{t_{n+1}} (\partial_{\dot{\mathcal{I}}} \phi \cdot \delta \dot{\mathcal{I}} + \partial_{\mathcal{I}} \phi \cdot \delta \mathcal{I}) dt = 0 \quad (\text{II.2.49})$$

Für in  $t$  differenzierbare Funktionen  $\partial_{\dot{\mathcal{I}}} \phi$  und  $\delta \mathcal{I}$  führt partielle Integration auf die Beziehung

$$[(\partial_{\mathcal{I}} \psi + \partial_{\dot{\mathcal{I}}} \phi) \cdot \delta \mathcal{I}]_{t_n}^{t_{n+1}} + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \left( -\frac{d}{dt} (\partial_{\dot{\mathcal{I}}} \phi) + \partial_{\mathcal{I}} \phi \right) \cdot \delta \mathcal{I} dt = 0 \quad (\text{II.2.50})$$

die bei Annahme beliebiger Variationen  $\delta \mathcal{I} \neq \mathbf{0}$  von der Biot-Gleichung (II.2.31) für  $t = t_{n+1}$  und von einer den Minimierungspfad der internen Variablen beschreibenden Euler-Gleichung

$$-\frac{d}{dt} (\partial_{\dot{\mathcal{I}}} \phi) + \partial_{\mathcal{I}} \phi = 0 \quad \text{für} \quad t \in [t_n, t_{n+1}] \quad (\text{II.2.51})$$

stets erfüllt wird. Im Grenzübergang  $t_{n+1} \rightarrow t_n$  wird die Form des Minimierungspfades (II.2.51) irrelevant, weil das Zeitinkrement  $t_{n+1} - t_n$  zu einem diskreten Zeitpunkt  $t_{n+1}$  degeneriert. Die Variationsformulierung (II.2.47) geht in diesem Fall in die Biot-Gleichung (II.2.31) über. Partielle Differentiation von (II.2.47) bezüglich den Verzerrungen  $\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}$  liefert ferner die Identität

$$\partial_{\boldsymbol{\varepsilon}} W(\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}) = \partial_{\boldsymbol{\varepsilon}} \psi(\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}, \mathcal{I}_{n+1}) \quad (\text{II.2.52})$$

in der  $\mathcal{I}_{n+1}$  als Lösung des Minimierungsproblems (II.2.47) gegeben sei. Ein Vergleich mit (II.2.28) belegt, daß (II.2.46)<sub>1</sub> für  $t = t_{n+1}$  konsistent in die kontinuierliche Form übergeht.

### 2.4.3. Diskrete inkrementelle Variationsformulierung

Die im vorangehenden Abschnitt beschriebene Struktur der inkrementellen Variationsformulierung beinhaltet zwei voneinander entkoppelte Lösungsschritte. Im ersten Schritt wird in jedem Punkt  $\boldsymbol{x} \in \mathcal{B}$  das lokale Minimierungsproblem (II.2.48) bei eingefrorener Deformation  $\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}$  gelöst mit dem Ziel, die internen Variablen  $\mathcal{I}_{n+1}$  aufzudatieren. Im zweiten Schritt wird über das globale Minimierungsprinzip (II.2.43) bei gegebenem Vektor  $\mathcal{I}_{n+1}$  das aktuelle Verschiebungsfeld  $\boldsymbol{u}_{n+1}$  berechnet. In der Regel ist der Zwei-Schritt-Lösungsprozeß iterativ, weil eine diskrete Darstellung des Gleichungssatzes (II.2.2) im Zeitintervall  $[t_n, t_{n+1}]$  im Allgemeinen auf ein in den Variablen  $(\boldsymbol{u}_{n+1}, \mathcal{I}_{n+1})$  gekoppeltes System von differential-algebraischen Gleichungen führt. Das global zu lösende Minimierungsproblem (II.2.43) besitzt die formale Struktur des Prinzips vom Minimum der potentiellen Energie für elastische Materialien. (II.2.43) wird daher analog zu Abschnitt 2.3 im Rahmen der Finite Elementmethode iterativ gelöst, wobei die algorithmischen Spannungen  $\boldsymbol{\sigma}_{n+1}$  und Tangentenmoduli  $\mathbb{C}_{n+1}$  zum aktuellen Zeitpunkt  $t_{n+1}$  entsprechend (II.2.46) zu identifizieren sind. Um Spannungen und Tangentenmoduli berechnen zu können, ist zuerst die Evolutionsgleichung (II.2.39) gemäß

$$\mathcal{I}_{n+1} = \mathcal{I}_n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \lambda \partial_{\mathcal{F}} f(\mathcal{F}, \mathcal{I}) dt \quad (\text{II.2.53})$$

im Zeitinkrement  $[t_n, t_{n+1}]$  in den Gaußpunkten der Finite Elemente diskret auszuwerten. Dies gelingt mit Hilfe von (II.2.48) im Rahmen eines numerischen Integrationsalgorithmus, bei dem Variablen zum Zeitpunkt  $t_n$  gegeben sind. Ein implizites Integrationschema ist in **Box 1** algorithmisch aufbereitet. Bei der numerischen Integration von (II.2.53) werden die Variablen  $\mathcal{F}_{n+1} := \mathcal{F}(\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}, \mathcal{I}_{n+1})$ ,  $\mathcal{I}_{n+1} := \mathcal{I}(\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}, \gamma_{n+1})$  und  $f_{n+1} := f(\mathcal{F}_{n+1}, \mathcal{I}_{n+1}) = f(\mathcal{F}_{n+1})$  zum Zeitpunkt  $t_{n+1}$  ausgewertet. Sie hängen funktional vom inkrementellen Parameter

$$\gamma_{n+1} := \gamma_n + \lambda \Delta t \quad \text{mit} \quad \Delta t = t_{n+1} - t_n \quad (\text{II.2.54})$$

ab. Die Deformation  $\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}$  sei eingefroren. Die Aufdatierung der internen Variablen in der Form

$$\mathbf{A}(\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}, \gamma_{n+1}) = \mathcal{I}_{n+1} - \mathcal{I}_n - (\gamma_{n+1} - \gamma_n) \partial_{\mathcal{F}} f_{n+1} = \mathbf{0} \quad (\text{II.2.55})$$

erfolgt im Allgemeinen implizit. (II.2.55) ist konsistent mit der kontinuierlichen Darstellung (II.2.40) für  $t = t_{n+1}$ . Aufgrund der impliziten Abhängigkeit lassen sich die totalen Ableitungen

$$\left. \begin{aligned} D_{\gamma} \mathcal{I}_{n+1} &= \partial_{\mathcal{F}} f_{n+1} - (\gamma_{n+1} - \gamma_n) \partial_{\mathcal{F}\mathcal{F}}^2 f_{n+1} \cdot \partial_{\mathcal{I}\mathcal{I}}^2 \psi_{n+1} \cdot D_{\gamma} \mathcal{I}_{n+1} \\ D_{\boldsymbol{\varepsilon}} \mathcal{I}_{n+1} &= -(\gamma_{n+1} - \gamma_n) \partial_{\mathcal{F}\mathcal{F}}^2 f_{n+1} \cdot (\partial_{\mathcal{I}\boldsymbol{\varepsilon}}^2 \psi_{n+1} + \partial_{\mathcal{I}\mathcal{I}}^2 \psi_{n+1} \cdot D_{\boldsymbol{\varepsilon}} \mathcal{I}_{n+1}) \end{aligned} \right\} \quad (\text{II.2.56})$$

mit  $\psi_{n+1} = \psi(\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}, \mathcal{I}_{n+1})$  zunächst nur implizit darstellen.  $D_{\{\cdot\}} := d/d\{\cdot\}$  sei als totaler Differentialoperator definiert. Die Gleichungen (II.2.56)<sub>1</sub> und (II.2.56)<sub>2</sub> explizit aufgelöst nach  $D_{\gamma} \mathcal{I}_{n+1}$  und  $D_{\boldsymbol{\varepsilon}} \mathcal{I}_{n+1}$  liefern die in **Box 1** unter Punkt 4 und 8 angegebenen expliziten Darstellungen. Der inkrementelle Parameter  $\gamma_{n+1}$ , der den Pfad der sich entwickelnden internen Variablen charakterisiert, ist basierend auf dem Minimierungsproblem (II.2.48) zu bestimmen. Die Integration der Dissipationsfunktion  $\phi$  liefert dort zusammen mit (II.2.41) und (II.2.54)

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \phi\left(\frac{\gamma_{n+1} - \gamma}{\Delta t}\right) dt = \int_{\gamma_n}^{\gamma_{n+1}} c d\gamma = (\gamma_{n+1} - \gamma_n) c \quad (\text{II.2.57})$$

**Box 1: Impliziter Integrationsalgorithmus der Inelastizität.****Elastischer Prädiktorschritt**

- 1.) Setze als Startwerte  $\gamma_{n+1} = \gamma_n$  und  $\mathcal{I}_{n+1} = \mathcal{I}_n$
- 2.) Berechne Fließfunktion  $f_{n+1}$  als Funktion von  $\mathcal{F}_{n+1} = -\partial_{\mathcal{I}}\psi_{n+1}$
- 3.) Elastische Belastung für  $f_{n+1} \leq c$ : berechne  $D_{\varepsilon}W^h = \partial_{\varepsilon}\psi_{n+1}$ ,  $D_{\varepsilon\varepsilon}^2 W^h = \partial_{\varepsilon\varepsilon}^2\psi_{n+1}$ ,  
setze  $\alpha = 0$  und gehe zu 9  
Plastische Belastung für  $f_{n+1} > c$ : setze  $\alpha = 1$  und gehe zu 4

**Plastischer Korrektorschritt**

- 4.) Berechne für plastischen Korrektorschritt
 
$$\mathbf{M} = \mathbf{1} + (\gamma_{n+1} - \gamma_n) \partial_{\mathcal{F}\mathcal{F}}^2 f_{n+1} \cdot \partial_{\mathcal{I}\mathcal{I}}^2 \psi_{n+1}$$

$$D_{\gamma}\mathcal{I}_{n+1} = \mathbf{M}^{-1} \cdot \partial_{\mathcal{F}} f_{n+1}$$

$$D_{\gamma}W^h = -f_{n+1} + c$$

$$D_{\gamma\gamma}^2 W^h = \partial_{\mathcal{F}} f_{n+1} \cdot \partial_{\mathcal{I}\mathcal{I}}^2 \psi_{n+1} \cdot D_{\gamma}\mathcal{I}_{n+1}$$
- 5.) Aktualisiere plastischen Multiplikator  $\gamma_{n+1} := \gamma_{n+1} - (D_{\gamma\gamma}^2 W^h)^{-1} D_{\gamma}W^h$
- 6.) Aktualisiere interne Variablen  $\mathcal{I}_{n+1} = \mathcal{I}_n + (\gamma_{n+1} - \gamma_n) \partial_{\mathcal{F}} f_{n+1}$
- 7.) Falls  $|D_{\gamma}W^h| > \text{tol}$ , berechne  $f_{n+1}$  mit  $\mathcal{F}_{n+1} = -\partial_{\mathcal{I}}\psi_{n+1}$  und gehe zu 4
- 8.) Berechne für Spannungen und Tangentenmoduli

$$D_{\varepsilon}\mathcal{I}_{n+1} = -\mathbf{M}^{-1} \cdot (\gamma_{n+1} - \gamma_n) \partial_{\mathcal{F}\mathcal{F}}^2 f_{n+1} \cdot \partial_{\mathcal{I}\varepsilon}^2 \psi_{n+1}$$

$$D_{\varepsilon}W^h = \partial_{\varepsilon}\psi_{n+1}$$

$$D_{\varepsilon\gamma}^2 W^h = (D_{\gamma\varepsilon}^2 W^h)^T = \partial_{\varepsilon\mathcal{I}}^2 \psi_{n+1} \cdot D_{\gamma}\mathcal{I}_{n+1}$$

$$D_{\varepsilon\varepsilon}^2 W^h = \partial_{\varepsilon\varepsilon}^2 \psi_{n+1} + \partial_{\varepsilon\mathcal{I}}^2 \psi_{n+1} \cdot D_{\varepsilon}\mathcal{I}_{n+1}$$

**Spannungen und Tangentenmoduli**

- 9.)  $\sigma_{n+1} = D_{\varepsilon}W^h$  und  $\mathbb{C}_{n+1} = D_{\varepsilon\varepsilon}^2 W^h - \alpha (D_{\gamma\gamma}^2 W^h)^{-1} D_{\varepsilon\gamma}^2 W^h \otimes D_{\gamma\varepsilon}^2 W^h$

Ausgehend von (II.2.55) und (II.2.57) wird (II.2.48) als Minimierungsproblem bezüglich  $\gamma_{n+1}$

$$W(\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}) = \min_{\gamma_{n+1} \in \mathcal{K}} W^h(\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}, \gamma_{n+1}) \quad (\text{II.2.58})$$

diskret reformuliert mit dem inkrementellen Arbeitsausdruck

$$W^h(\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}, \gamma_{n+1}) = \psi(\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}, \mathcal{I}_{n+1}) - \psi_n + (\gamma_{n+1} - \gamma_n) c \quad (\text{II.2.59})$$

Eine minimierende Lösung von (II.2.58) existiert, wenn  $W^h$  konvex, d.h.  $D_{\gamma\gamma}^2 W^h > 0$  ist. Auswertung von  $D_{\gamma\gamma}^2 W^h > 0$  ergibt, daß die Konvexitätseigenschaft für positiv definite Ableitungen  $\partial_{\mathcal{I}\mathcal{I}}^2 \psi_{n+1}$  und  $\partial_{\mathcal{F}\mathcal{F}}^2 f_{n+1}$  a priori erfüllt ist. Die Ableitung  $D_{\gamma}W^h = -\mathcal{F}_{n+1} \cdot D_{\gamma}\mathcal{I}_{n+1} + c$  läßt sich mit (II.2.56)<sub>1</sub> und unter Berücksichtigung der Homogenität vom Grad 1 von  $f_{n+1}$ , aus der sich die Eigenschaften  $\mathcal{F}_{n+1} \cdot \partial_{\mathcal{F}} f_{n+1} = f_{n+1}$  und  $\mathcal{F}_{n+1} \cdot \partial_{\mathcal{F}\mathcal{F}}^2 f_{n+1} = \mathbf{0}$  ableiten lassen, in den Ausdruck

$$D_{\gamma}W^h = -f_{n+1} + c \quad (\text{II.2.60})$$

überführen.  $D_\gamma W^h$  ist hier als negative Fließfunktion aufzufassen. Zur Lösung von (II.2.58) formuliert man daher als notwendige Karush-Kuhn-Tucker-Optimalitätsbedingungen

$$\gamma_{n+1} \geq \gamma_n \quad , \quad D_\gamma W^h \geq 0 \quad , \quad (\gamma_{n+1} - \gamma_n) D_\gamma W^h = 0 \quad (\text{II.2.61})$$

Die Belastungseigenschaft (II.2.61)<sub>2</sub> ist äquivalent mit der Forderung  $f_{n+1} < c$ . Eine plastische Belastung ist dadurch gekennzeichnet, daß sich im elastischen Prädiktorschritt mit  $\gamma_{n+1} = \gamma_n$  und  $\mathcal{I}_{n+1} = \mathcal{I}_n$  der unzulässige Wert  $D_\gamma W^h < 0$  bzw.  $f_{n+1} > c$  ergibt. Aufgabe eines daran anschließenden plastischen Korrektorschritts ist, den minimierenden Pfad  $\gamma_{n+1} > \gamma_n$  der sich entwickelnden internen Variablen so zu bestimmen, daß gerade  $D_\gamma W^h = 0$  bzw.  $f_{n+1} = c$ . Die Belastungsbedingung (II.2.61)<sub>3</sub> ist als Konsistenzbedingung zu interpretieren. Linearisierung der Konsistenzbedingung (II.2.61)<sub>3</sub> bezüglich  $\gamma_{n+1}$  führt bei eingefrorener Deformation  $\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}$  auf das algorithmische Aufdatierungsschema des inkrementellen Parameters

$$\gamma_{n+1} := \gamma_{n+1} - \alpha (D_{\gamma\gamma}^2 W^h)^{-1} D_\gamma W^h \quad (\text{II.2.62})$$

mit Belastungsschalter  $\alpha = 1$  bei plastischer Belastung  $D_\gamma W^h < 0$  bzw.  $f_{n+1} > c$  und mit  $\alpha = 0$  im Fall elastischer Belastung  $D_\gamma W^h \geq 0$  bzw.  $f_{n+1} \leq c$ . Der durch (II.2.55) und (II.2.62) definierte iterative Prozeß zur Aufdatierung der internen Variablen wird terminiert, sobald  $D_\gamma W^h$  verschwindend klein ist. Mit dem berechneten Vektor  $\mathcal{I}_{n+1}$  werden im Anschluß algorithmische Spannungen und Tangentenmoduli ermittelt. Sie werden im Fall plastischer Belastung  $D_\gamma W^h = 0$  durch Variation und Linearisierung von (II.2.58) bezüglich  $\{\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}, \gamma_{n+1}\}$  aus

$$\left. \begin{aligned} \delta \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1} : \boldsymbol{\sigma}_{n+1} &= \delta \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1} : D_\boldsymbol{\varepsilon} W^h \\ \delta \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1} : \mathbb{C}_{n+1} : \Delta \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1} &= \delta \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1} : (D_{\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon}}^2 W^h : \Delta \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1} + D_{\boldsymbol{\varepsilon}\gamma}^2 W^h : \Delta \gamma_{n+1}) \\ &\quad + \delta \gamma_{n+1} : (D_{\gamma\boldsymbol{\varepsilon}}^2 W^h : \Delta \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1} + D_{\gamma\gamma}^2 W^h : \Delta \gamma_{n+1}) \end{aligned} \right\} \quad (\text{II.2.63})$$

gewonnen. In (II.2.63)<sub>1</sub> sind (II.2.56) und die Homogenität vom Grad 1 von  $f_{n+1}$  einzubeziehen, um so den Ausdruck (II.2.28) der Spannungen zu erhalten. Aus (II.2.63)<sub>2</sub> folgt einerseits

$$\Delta \gamma_{n+1} = -\alpha (D_{\gamma\gamma}^2 W^h)^{-1} D_{\gamma\boldsymbol{\varepsilon}}^2 W^h : \Delta \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1} \quad (\text{II.2.64})$$

mit  $\alpha = 1$  im Fall plastischer Belastung. Bei Elastizität ist  $\alpha = 0$  in (II.2.64) zu setzen. Eine weitere Auswertung von (II.2.63)<sub>2</sub> ergibt mit (II.2.64) schließlich die algorithmischen Tangentenmoduli unter Punkt 9 der Box 1. Im Gegensatz zu klassischen elastoplastischen Projektionsverfahren liefert die inkrementelle Variationsformulierung stets symmetrische Moduli.

## 2.5. FE-Formulierung bei finiten elastischen Verzerrungen

### 2.5.1. Linearisierte schwache Formulierung des Randwertproblems

Die den gekoppelten Feldgleichungen (II.2.4) zugeordneten schwachen Formen lauten

$$\left. \begin{aligned} G_u &= \int_{\mathcal{B}} \partial_X \delta \mathbf{u} : \mathbf{P} \, dV - G_{ext} = 0 \\ G_P &= \int_{\mathcal{B}} \delta \mathbf{P} : (\mathbf{F} - \partial_X \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{u})) \, dV = 0 \\ G_F &= \int_{\mathcal{B}} \delta \mathbf{F} : (\mathbf{P} - \partial_F \psi(\mathbf{F})) \, dV = 0 \end{aligned} \right\} \text{ in } \mathcal{B} \quad (\text{II.2.65})$$

Bei Annahme konservativer Lasten  $\boldsymbol{\gamma}$  und  $\bar{\mathbf{T}}$  gilt für die virtuelle Arbeit der äußeren Lasten

$$G_{ext} = \int_{\mathcal{B}} \delta \mathbf{u} \cdot \rho_0 \boldsymbol{\gamma} \, dV + \int_{\partial \mathcal{B}} \delta \mathbf{u} \cdot \bar{\mathbf{T}} \, dA \quad (\text{II.2.66})$$

Im allgemeingültigen Gleichungssatz (II.2.65) wurden basierend auf dem Galerkin-Verfahren die Testfunktionen  $\delta \mathbf{u} \in \{\mathbf{u} \in \mathcal{H}^1(\mathcal{B})^3 \mid \mathbf{u}|_{\partial \mathcal{B}_u} = \mathbf{0}\}$  und  $\delta \mathbf{P}, \delta \mathbf{F} \in \mathcal{GL}(3)$  eingeführt. Zur Gewinnung der schwachen Form der statischen Feldgleichung (II.2.65)<sub>1</sub> lassen sich das Prinzip der virtuellen Verschiebungen und die Variationsformulierung der finiten Elastizität analog zur nichtlinearen Elastizität kleiner Verzerrungen anwenden. Die geometrische und konstitutive Feldgleichung (II.2.1)<sub>2</sub> und (II.2.1)<sub>3</sub> werden im Rahmen der Standard-Verschiebungsmethode a priori vorausgesetzt. Die Freie Energie  $\psi$  und die 1. P.-K.-Spannungen  $\mathbf{P}$  sind nichtlineare Funktionen des Deformationsgradienten  $\mathbf{F}$ . Im Punkt  $\mathbf{X} \in \mathcal{B}$  sind  $\mathbf{F}$  und  $\mathbf{P}$  gegeben durch

$$\mathbf{F} = \partial_X \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{u}) \quad \text{und} \quad \mathbf{P} = \partial_{\mathbf{F}} \psi(\mathbf{F}(\mathbf{u})) \quad (\text{II.2.67})$$

Die Variationen  $\delta \mathbf{F}$  sind über  $\delta \mathbf{F} = \partial_X \delta \mathbf{u}$  mit den virtuellen Verschiebungen verknüpft. Basierend auf den vorangehenden Betrachtungen verbleibt von (II.2.65) nur

$$G_u(\mathbf{u}, \delta \mathbf{u}) = \int_{\mathcal{B}} \delta \mathbf{F} : \mathbf{P}(\mathbf{F}(\mathbf{u})) \, dV - G_{ext}(\delta \mathbf{u}) = 0 \quad (\text{II.2.68})$$

Im Hinblick auf eine iterative Lösung mit dem Newton-Verfahren wird (II.2.68) analog zur nichtlinearen Elastizität kleiner Verzerrungen an einer bekannten eingefrorenen Verschiebung  $\bar{\mathbf{u}}$  linearisiert. Linearisierung von  $G_u$  an der Stelle  $\bar{\mathbf{u}}$  liefert

$$\left. \begin{aligned} \text{Lin } G_u(\bar{\mathbf{u}}, \delta \mathbf{u}, \Delta \mathbf{u}) &= G_u(\bar{\mathbf{u}}, \delta \mathbf{u}) + \Delta G_u(\bar{\mathbf{u}}, \delta \mathbf{u}, \Delta \mathbf{u}) = 0 \\ \Delta G_u(\bar{\mathbf{u}}, \delta \mathbf{u}, \Delta \mathbf{u}) &= \int_{\mathcal{B}} \delta \mathbf{F} : \mathbb{C}(\mathbf{F}(\bar{\mathbf{u}})) : \Delta \mathbf{F} \, dV \end{aligned} \right\} \quad (\text{II.2.69})$$

Der inkrementelle Deformationsgradient  $\Delta \mathbf{F} = \partial_X \Delta \mathbf{u}$  ist eine lineare Funktion der inkrementellen Verschiebungen  $\Delta \mathbf{u} = \mathbf{u} - \bar{\mathbf{u}} \in \{\mathbf{u} \in \mathcal{H}^1(\mathcal{B})^3 \mid \mathbf{u}|_{\partial \mathcal{B}_u} = \mathbf{0}\}$ . In obiger Linearisierung sind  $\mathbb{C} := \partial_{\mathbf{F}} \mathbf{P} = \partial_{\mathbf{F}\mathbf{F}}^2 \psi$  die nominellen Tangentenmoduli mit den Symmetrieeigenschaften  $\mathbb{C}_{a^A b^B} = \mathbb{C}_{b^B a^A} = \partial P_a^A / \partial F_b^B$ . Das linearisierte Funktional (II.2.69) ist linear in  $\Delta \mathbf{F}$ . Im Gleichgewichtsfall muß  $G_u$  wegen  $\Delta \mathbf{F} = \mathbf{0}$  verschwinden. Basierend auf den ratenförmigen Identitäten

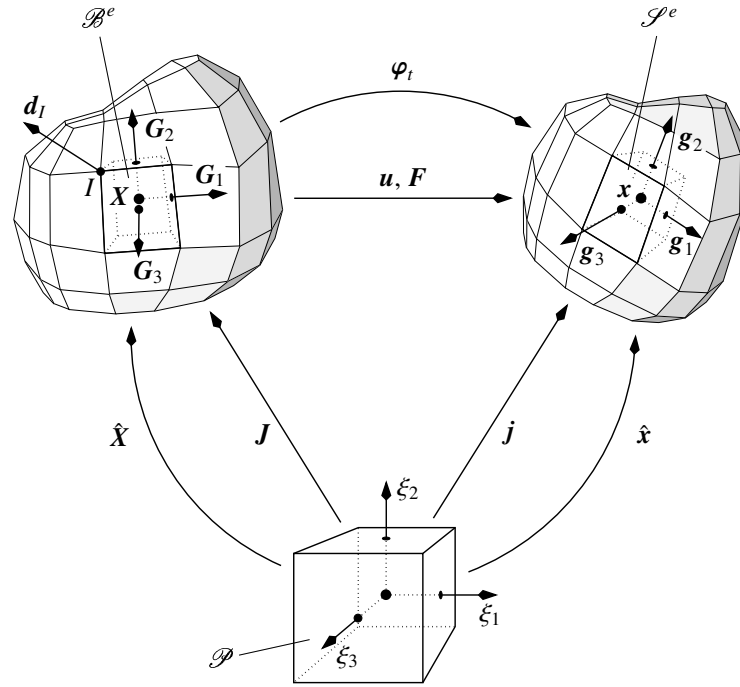
$$\dot{\mathbf{F}} : \mathbb{C} : \dot{\mathbf{F}} = \dot{\mathbf{E}} : \mathbf{S} + \dot{\mathbf{E}} : \mathbb{A} : \dot{\mathbf{E}} = \mathbf{d} : \boldsymbol{\tau} + \mathbf{d} : \mathbb{c} : \mathbf{d} \quad (\text{II.2.70})$$

mit Deformationsgeschwindigkeitsgradient  $\mathbf{d}$  sowie den alternativen Darstellungen (II.1.24) der Spannungen kann (II.2.69) sowohl in die materielle als auch in die räumliche Form mit den arbeitskonjugierten Paarungen  $\{\mathbf{S}, \dot{\mathbf{E}}\}$  und  $\{\boldsymbol{\tau}, \mathbf{d}\}$  überführt werden. Dementsprechend bezeichnen  $\mathbb{A} = 4\partial_{\mathbb{C}\mathbb{C}}^2 \psi(\mathbb{C})$  Lagrangesche und  $\mathbb{c} = 4\partial_{\mathbf{g}\mathbf{g}}^2 \psi(\mathbf{g})$  Eulersche Tangentenmoduli.

## 2.5.2. FE-Diskretisierung

Bei finiten Deformationen unterscheidet man entsprechend Abb. 8 zwischen der FE-Diskretisierung der materiellen und räumlichen Konfiguration. Im Fall der Zweipunktformulierung wird die materielle Konfiguration  $\mathcal{B}$  in Elementräume  $\mathcal{B}^e$  mit  $\mathcal{B} = \bigoplus_{e=1}^{n_{ele}} \mathcal{B}^e$  zerlegt. Als Finite Elementapproximationen der Verschiebungen  $\{\mathbf{u}^h, \delta \mathbf{u}^h, \Delta \mathbf{u}^h\}$  werden im Elementgebiet  $\mathcal{B}^e$  die Ansätze (II.2.13)<sub>1</sub> und (II.2.20)<sub>1</sub> und für die Deformationsgradienten die Näherungen

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{F}^h &= \sum_I \mathbf{B}_I(\boldsymbol{\xi}) \mathbf{d}_I^e + [\mathbf{1}] = \mathbf{B}(\boldsymbol{\xi}) \mathbf{d}^e + [\mathbf{1}] \\ \delta \mathbf{F}^h &= \sum_I \mathbf{B}_I(\boldsymbol{\xi}) \delta \mathbf{d}_I^e = \mathbf{B}(\boldsymbol{\xi}) \delta \mathbf{d}^e \\ \Delta \mathbf{F}^h &= \sum_I \mathbf{B}_I(\boldsymbol{\xi}) \Delta \mathbf{d}_I^e = \mathbf{B}(\boldsymbol{\xi}) \Delta \mathbf{d}^e \end{aligned} \right\} \quad (\text{II.2.71})$$



**Abbildung 8:** Isoparametrische Abbildung eines Finite Elements vom Parameterraum  $\mathcal{P}$  in die physikalischen Elementräume der materiellen und räumlichen Konfiguration  $\mathcal{B}^e$  und  $\mathcal{S}^e$ .

als Linearkombinationen der diskreten Knotenverschiebungen  $\{\mathbf{d}_I^e, \delta \mathbf{d}_I^e, \Delta \mathbf{d}_I^e\}$  gewählt. In (II.2.71)<sub>1</sub> ist  $[\mathbf{1}]$  die Matrixdarstellung des zweistufigen Einheitstensors  $\mathbf{1}$ . Die Diskretisierungsansätze in (II.2.69) eingesetzt ergeben schließlich das diskrete linearisierte Funktional

$$\text{Lin } G_u^h(\bar{\mathbf{u}}^h, \delta \mathbf{u}^h, \Delta \mathbf{u}^h) = \sum_{e=1}^{n_{ele}} \delta \mathbf{d}^{eT} \mathbf{k}^e \Delta \mathbf{d}^e + \sum_{e=1}^{n_{ele}} \delta \mathbf{d}^{eT} \mathbf{r}^e = 0 \quad (\text{II.2.72})$$

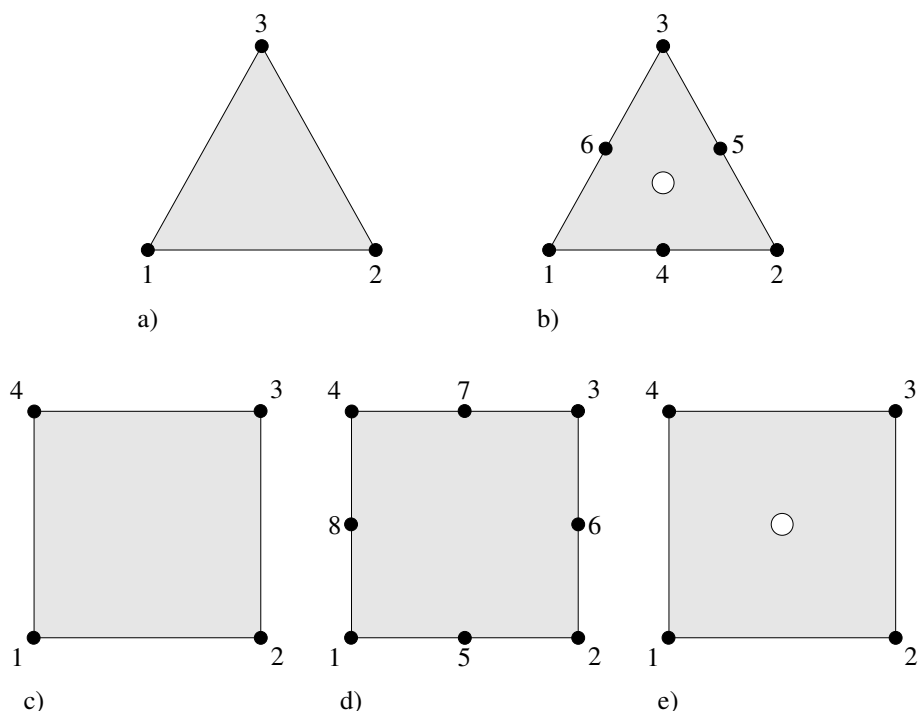
das aus  $n_{ele}$  Elementsteifigkeitsmatrizen und Elementresiduen

$$\mathbf{k}^e = \partial_{\mathbf{d}^e} \mathbf{r}^e = \int_{\mathcal{B}^e} \mathbf{B}^T [\mathbf{C}(\mathbf{F}(\bar{\mathbf{u}}^h))] \mathbf{B} dV \quad \text{und} \quad \mathbf{r}^e = \int_{\mathcal{B}^e} \mathbf{B}^T [\mathbf{P}(\mathbf{F}(\bar{\mathbf{u}}^h))] dV - \mathbf{f}_{ext}^e \quad (\text{II.2.73})$$

mit Elementvektoren  $\mathbf{f}_{ext}^e = \{ \int_{\mathcal{B}^e} \mathbf{N}^T \rho_0 \gamma dV + \int_{\partial \mathcal{B}^e} \mathbf{N}^T \bar{\mathbf{T}} dA \}$  assembliert wird. Beim Integrieren sind in (II.2.73) Finite Elemente vom Parameterraum  $\mathcal{P}$ , in dem die Ansatzfunktionen definiert sind, in den physikalischen Raum  $\mathcal{B}^e$  der materiellen Konfiguration entsprechend Abb. 8 zu transformieren. Hierbei spielen die isoparametrische Abbildung  $\mathbf{X} \equiv \hat{\mathbf{X}}(\boldsymbol{\xi}) = \sum_I N_I(\boldsymbol{\xi}) \mathbf{X}_I$  von materiellen Knotenkoordinaten  $\mathbf{X}_I \in \mathcal{B}$  und die Jakobimatrix  $\mathbf{J} = \partial \mathbf{X} / \partial \boldsymbol{\xi}$  als zugehörige Tangentenabbildung eine zentrale Rolle. Bei Projektionen in den physikalischen Elementraum  $\mathcal{S}^e$  der räumlichen Konfiguration sind gemäß Abb. 8 die isoparametrische Abbildung  $\mathbf{x} \equiv \hat{\mathbf{x}}(\boldsymbol{\xi}) = \sum_I N_I(\boldsymbol{\xi}) \mathbf{x}_I$  von räumlichen Knotenkoordinaten  $\mathbf{x}_I \in \mathcal{S}$  und die zugehörige Tangentenabbildung  $\mathbf{j} = \mathbf{F} \mathbf{J} = \partial \mathbf{x} / \partial \boldsymbol{\xi}$  elementar. Analog zur Theorie kleiner Verzerrungen wird (II.2.72) durch eine Sequenz von linearen Gleichungssystemen (II.2.24) mit globaler Tangentenmatrix und Residuum (II.2.23) im Rahmen einer Newton-Iteration gelöst und eine Aufdatierung des Lösungsvektors nach dem Schema (II.2.25) vorgenommen. Aus den berechneten diskreten Knotenparametern  $\mathbf{d}_I$  ergeben sich die aktuellen Knotenkoordinaten zu  $\mathbf{x}_I = \mathbf{d}_I + \mathbf{X}_I$ .

## 2.6. Elementformulierungen

In dieser Arbeit werden Finite Elementdiskretisierungen mit unterschiedlichen Elementformulierungen durchgeführt. Sie werden in [Abb. 9](#) schematisiert. Elementknoten, an denen globale Verschiebungsparameter definiert werden, sind durchnummeriert. Das  $T1$ -Element sowie das  $Q1$ -Element und  $Q2$ -Serendipity-Element sind typische Elementformulierungen für Randwertprobleme der Elastostatik. Im dreiknotigen  $T1$ -Element werden Verschiebungen linear, im vierknotigen  $Q1$ -Element bilinear und im achtknotigen  $Q2$ -Serendipity-Element quadratisch angesetzt. Bei elastoplastischen Randwertproblemen, bei denen sich der betrachtete Festkörper



**Abbildung 9:** Elementformulierungen mit Verschiebungsansatz (•) und Druckansatz (○): a)  $T1$ -Element, b)  $T2P0$ -Element, c)  $Q1$ -Element, d)  $Q2$ -Serendipity-Element und e)  $Q1P0$ -Element.

plastisch inkompressibel verhält, führen Standard-Verschiebungselemente zu volumetrischen Verfestigungseffekten (volumetrische Locking-Effekte). Hybride Elementformulierungen, die auf einer Zerlegung des Spannungstensors in einen volumetrischen und einen isochoren Anteil beruhen, schaffen Abhilfe. Aus diesem Grunde werden in dieser Arbeit ferner das  $Q1P0$ - und das  $T2P0$ -Element verwendet. Im  $Q1P0$ -Element werden Verschiebungen bilinear und der Druck als innerer Elementfreiwert konstant angesetzt. Der Rechenaufwand dieses Elementtyps liegt nur geringfügig höher als der des  $Q1$ -Verschiebungselements, da der Druckfreiheitsgrad auf Elementebene statisch kondensiert wird. Im  $T2P0$ -Element werden Verschiebungen quadratisch und der Druck als innerer Elementfreiwert konstant angesetzt. Der Druckfreiheitsgrad wird ebenfalls auf Elementebene statisch kondensiert. Im Gegensatz zum  $Q1P0$ -Element erfüllt das  $T2P0$ -Element die sogenannte Babuška-Brezzi-Bedingung. In diesem Zusammenhang und im Hinblick auf weiterführende Untersuchungen gemischter Elementformulierungen sei beispielsweise auf BRAESS [22] und darin enthaltene Referenzen verwiesen.



### 3. Auszüge aus der konvexen Analysis

Ziel dieses Abschnitts ist, die für den Hauptteil dieser Arbeit wesentlichen Elemente der konvexen Analysis darzustellen. Der zur Mehrskalenmodellierung nötige mathematische Rahmen wird durch eine grundlegende Diskussion konvexer Funktionen und der Legendre-Fenchel-Transformation aufgespannt. Der gültige Anwendungsbereich der in dieser Arbeit behandelten Verfahren zur Mehrskalenmodellierung und Mehrgitterverfahren bezieht sich auf eine Modellproblemklasse, bei der instabile Verformungsmechanismen grundsätzlich ausgeschlossen werden. In dieser Arbeit soll das Materialverhalten durch konstitutive Ungleichungen in der Weise eingegrenzt werden, daß derartige Mechanismen irrelevant sind. Die in der Mehrskalenanalyse fundamentale Mikro-Makro-Homogenitätsbedingung wird als Lagrange-Funktional formuliert. Es wird hier gezeigt, daß Lagrange-Funktionale allgemein die Lösung einer Sattelpunktaufgabe bedingen. Zu der in den Abschnitten 3.1, 3.2 und 3.4 angeschnitten Thematik bilden ROCKAFELLAR [134] und EKELAND & TEMAM [47] die Basisliteratur.

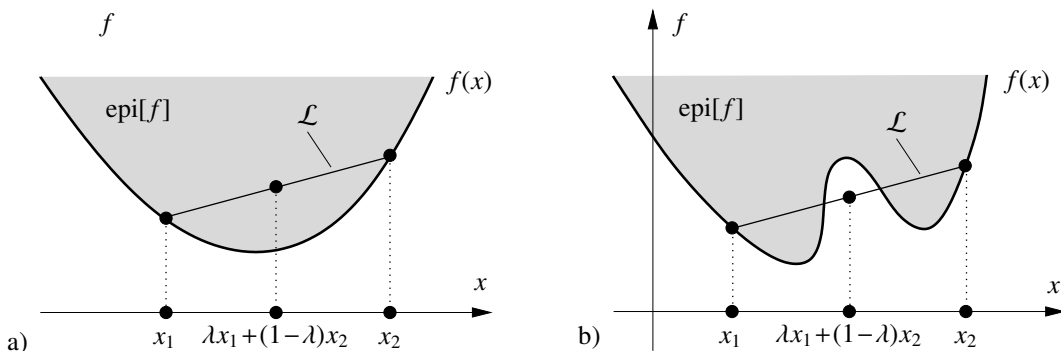
#### 3.1. Konvexe Funktionen

Es sei  $\mathcal{V}$  ein reeller Vektorraum und  $\mathcal{A}$  eine konvexe Untermenge von  $\mathcal{V}$ .  $\langle \cdot, \cdot \rangle$  sei das auf  $\mathcal{V}$  definierte Skalarprodukt. Eine Menge wird konvex genannt, wenn jedes Linienelement  $[\mathbf{v}, \mathbf{w}] = \{\lambda \mathbf{v} + (1 - \lambda) \mathbf{w} \mid 0 \leq \lambda \leq 1\}$  mit Endpunkten  $\mathbf{v}, \mathbf{w} \in \mathcal{V}$  in ihr enthalten ist. Eine konvexe Funktion  $f$  beschreibt die Abbildung  $f : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{R}$  und ist definiert durch die Eigenschaft

$$f(\lambda x_1 + (1 - \lambda)x_2) \leq \lambda f(x_1) + (1 - \lambda)f(x_2) \quad \forall \lambda \in [0, 1], \forall x_1, x_2 \in \mathcal{V} \quad (\text{II.3.1})$$

Im Fall der strikten Konvexität ist für  $x_1 \neq x_2$  nur das Ungleichungssymbol in (II.3.1) gültig. Die Ungleichung (II.3.1) besagt, daß jede Verbindungslinie zwischen den Punkten  $(x_1, f(x_1))$  und  $(x_2, f(x_2))$  oberhalb von  $f$  sein muß. Liegt diese Verbindungslinie unterhalb des Funktionsgraphen, spricht man von einer konkaven Funktion. In diesem Fall ändert das Ungleichheitszeichen in (II.3.1) die Richtung. Durch Vorzeichenwechsel gelingt es, eine konkave in eine konvexe Funktion zu überführen. In Abb. 10 sind typische Beispiele einer konvexen und einer nichtkonvexen skalarwertigen Funktion dargestellt. Die grau hinterlegten Flächen in dieser Abbildung charakterisieren den Epigraph der Funktion  $f$

$$\text{epi}[f] = \{x \in \mathcal{V}, a \in \mathcal{R} \mid f(x) \leq a\} \quad (\text{II.3.2})$$



**Abbildung 10:** a) Konvexe und b) nichtkonvexe Funktion  $f$ . Die Verbindungslinie  $\mathcal{L} : [\mathbf{v}, \mathbf{w}] = \{\lambda \mathbf{v} + (1 - \lambda) \mathbf{w} \mid 0 \leq \lambda \leq 1\}$  mit Endpunkten  $\mathbf{v} = (x_1, f(x_1))^T$  und  $\mathbf{w} = (x_2, f(x_2))^T$  liegt stets oberhalb einer strikt konvexen Funktion  $f$ . Der Epigraph  $\text{epi}[f]$  ist die Menge aller Punkte oberhalb von  $f$ .



als Menge aller Punkte oberhalb von  $f$ . Abb. 10 zeigt, daß  $f$  genau dann und nur dann konvex ist, falls  $\text{epi}[f]$  eine konvexe Menge ist. Aus (II.3.1) können alternative Konvexitätseigenschaften hergeleitet werden. Hierzu wird angenommen, daß  $f$  eine für alle  $\mathbf{x} \in \mathcal{V}$  stetig differenzierbare Funktion sei. Division von (II.3.1) durch  $\lambda$  und anschließende Grenzwertbildung für  $\lambda \rightarrow 0$  unter Berücksichtigung der Gateaux-Ableitung  $\lim_{\lambda \rightarrow 0} [f(\mathbf{x}_2 + \lambda(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)) - f(\mathbf{x}_2)] / \lambda = \langle \partial_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}_2), \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2 \rangle$  führt auf eine zu (II.3.1) äquivalente Darstellung. Vertauscht man dort die Argumente  $\mathbf{x}_1$  und  $\mathbf{x}_2$  erhält man insgesamt zwei zu (II.3.1) äquivalente Ungleichungen

$$f(\mathbf{x}_2) + \langle \partial_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}_2), \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2 \rangle \leq f(\mathbf{x}_1) \quad \forall \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in \mathcal{V} \quad (\text{II.3.3a})$$

$$f(\mathbf{x}_1) + \langle \partial_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}_1), \mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1 \rangle \leq f(\mathbf{x}_2) \quad \forall \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in \mathcal{V} \quad (\text{II.3.3b})$$

Addition beider Ungleichungen ergibt als weitere äquivalente Aussage zur Konvexität

$$\langle \partial_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}_2) - \partial_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}_1), \mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1 \rangle \geq 0 \quad \forall \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in \mathcal{V} \quad (\text{II.3.4})$$

Demnach liegt jede Tangentialebene  $\partial_{\mathbf{x}} f$  stets unterhalb von  $f$ . Ist  $f$  beispielsweise an der Stelle  $\mathbf{x}_1$  nicht stetig differenzierbar, so ist  $\partial_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}_1)$  durch das sogenannte Subdifferential an der Stelle  $\mathbf{x}_1$  zu ersetzen, siehe z.B. EKELAND & TEMAM [47] oder ROCKAFELLAR [134]. Sei nun  $f$  zweifach stetig differenzierbar. Führt man in (II.3.4) die Substitutionen  $\Delta \mathbf{x} := \mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1$  und  $\mathbf{x} := \mathbf{x}_2 + \lambda \Delta \mathbf{x}$  ein, dividiert danach durch  $\lambda$  und vollzieht den Grenzübergang  $\lambda \rightarrow 0$ , erzielt man als weitere zu (II.3.1), (II.3.3a,b) und (II.3.4) äquivalente Konvexitätsbedingung

$$\langle \partial_{\mathbf{x}\mathbf{x}}^2 f(\mathbf{x}) \Delta \mathbf{x}, \Delta \mathbf{x} \rangle \geq 0 \quad \forall \mathbf{x}, \Delta \mathbf{x} \in \mathcal{V} \quad (\text{II.3.5})$$

Sie fordert die positive Semidefinitheit der zweiten Ableitung  $\partial_{\mathbf{x}\mathbf{x}}^2 f$ . Positive Definitheit der zweiten Ableitung ist gleichbedeutend mit strikter Konvexität der Funktion  $f$ .

### 3.2. Legendre-Fenchel-Transformation

Es seien  $\mathcal{V}$  und  $\mathcal{V}^*$  zwei reelle Vektorräume, die durch das Skalarprodukt  $\langle \cdot, \cdot \rangle \in \mathcal{V}^* \times \mathcal{V} = \mathcal{R}$  einander dual zugeordnet sind.  $f : \mathcal{V} \rightarrow \mathcal{R}$  sei wegen  $f(\mathbf{x}) \leq \lim_{\mathbf{y} \rightarrow \mathbf{x}} f(\mathbf{y}) < a$  mit  $a \in \mathcal{R}$  eine folgenunterhalbstetige Funktion. Die Folgenunterhalbstetigkeit ermöglicht die Konstruktion von Hyperebenen  $\langle \mathbf{x}^*, \mathbf{x} \rangle - \xi$  mit  $\xi \in \mathcal{R}$ , die zu gegebenem  $\mathbf{x} \in \mathcal{V}$  stets unterhalb von  $f$  liegen. Die Beziehung  $f \geq \langle \mathbf{x}^*, \mathbf{x} \rangle - \xi$  ist gleichbedeutend mit  $\xi \geq \langle \mathbf{x}^*, \mathbf{x} \rangle - f$ . Als Legendre-Fenchel- oder auch Young-Fenchel-Transformierte  $f^* : \mathcal{V}^* \rightarrow \mathcal{R}$  von  $f$  bezeichnet man von allen diejenige Hyperebene, die zu gegebenem  $\mathbf{x} \in \mathcal{V}$  maximal ist. Mit  $\xi := f^*$  folgt

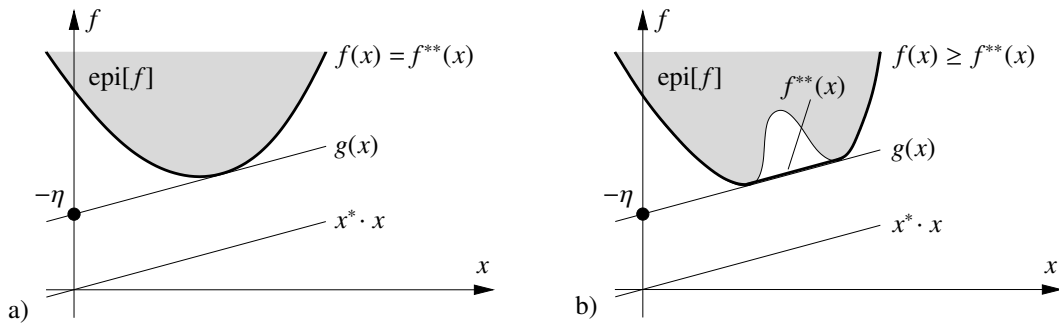
$$f^*(\mathbf{x}^*) = \sup_{\mathbf{x} \in \mathcal{V}} \{ \langle \mathbf{x}^*, \mathbf{x} \rangle - f(\mathbf{x}) \} \quad \forall \mathbf{x}^* \in \mathcal{V}^* \quad (\text{II.3.6})$$

Man nennt  $f^*$  auch Polfunktion. Es zeigt sich, daß für  $\mathbf{x}_1^*, \mathbf{x}_2^* \in \mathcal{V}^*$  und  $\lambda \in [0, 1]$

$$\begin{aligned} f^*(\lambda \mathbf{x}_1^* + (1 - \lambda) \mathbf{x}_2^*) &= \sup_{\mathbf{x} \in \mathcal{V}} \{ \lambda \langle \mathbf{x}_1^*, \mathbf{x} \rangle + (1 - \lambda) \langle \mathbf{x}_2^*, \mathbf{x} \rangle - f(\mathbf{x}) \} \\ &\leq \lambda \sup_{\mathbf{x} \in \mathcal{V}} \{ \langle \mathbf{x}_1^*, \mathbf{x} \rangle - f(\mathbf{x}) \} + (1 - \lambda) \sup_{\mathbf{x} \in \mathcal{V}} \{ \langle \mathbf{x}_2^*, \mathbf{x} \rangle - f(\mathbf{x}) \} \\ &= \lambda f^*(\mathbf{x}_1^*) + (1 - \lambda) f^*(\mathbf{x}_2^*) \end{aligned} \quad (\text{II.3.7})$$

womit  $f^*$  entsprechend (II.3.1) konvex ist. Es sei angemerkt, daß hier  $f$  nicht zwingend konvex sein muß. Die Legendre-Fenchel-Transformation der Form (II.3.6) kann wiederholt auf  $f^*$  angewandt werden. Man erhält auf diese Weise die zu  $f^*$  konjugierte konvexe Bipolfunktion

$$f^{**}(\mathbf{x}) = \sup_{\mathbf{x}^* \in \mathcal{V}^*} \{ \langle \mathbf{x}, \mathbf{x}^* \rangle - f^*(\mathbf{x}^*) \} \quad \forall \mathbf{x} \in \mathcal{V} \quad (\text{II.3.8})$$



**Abbildung 11:** Geometrische Veranschaulichung der Legendre-Fenchel-Transformation anhand einer a) strikt konvexen, b) nichtkonvexen Funktion  $f$  mit  $\eta := f^*$ .  $f^{**}$  ist stets konvexe Hülle von  $f$ .

Von besonderem Interesse ist nun festzustellen, inwieweit  $f$ ,  $f^*$  und  $f^{**}$  zueinander in Bezug stehen. Es werden Hyperebenen  $f \geq \langle \mathbf{x}^*, \mathbf{x} \rangle - \eta$  mit  $\eta \in \mathcal{R}$  eingeführt, die darüber Aufschluß geben sollen. Für die skalarwertigen Funktionen  $f$  in Abb. 11a und b sind jeweils zwei solche Hyperebenen als Geraden eingezeichnet. Sie liegen alle unterhalb von  $f$ . Mit der Forderung  $f \geq \langle \mathbf{x}^*, \mathbf{x} \rangle - \eta$  und mit (II.3.6) ergibt sich die Ungleichungskette  $\eta \geq f^* \geq \langle \mathbf{x}^*, \mathbf{x} \rangle - \eta$ . Wählt man unter allen diejenigen Hyperebenen  $g(\mathbf{x}) := \sup_{\mathbf{x}^*} \{\langle \mathbf{x}^*, \mathbf{x} \rangle - \eta\}$  mit kleinstem Parameter  $\eta := f^*$ , bei denen  $\langle \mathbf{x}^*, \mathbf{x} \rangle - \eta$  zu gegebenem  $\mathbf{x}^* \in \mathcal{V}^*$  maximal ist, erhält man gerade die Darstellung der Bipolfunktion (II.3.8). Wegen  $f \geq g$  folgt aus diesen Betrachtungen

$$f(\mathbf{x}) \geq f^{**}(\mathbf{x}) \quad (\text{II.3.9})$$

Diese Ungleichung besagt, daß  $f^{**}$  konvexe Hülle von  $f$  ist und  $\text{epi}[f] \subset \text{epi}[f^{**}]$ . Die Hyperebene  $g(\mathbf{x})$  ist zudem Stützhyperebene an  $\text{epi}[f^{**}]$ . Ist  $f = g$  gerade gleich dem punktwweisen Supremum aller möglichen Hyperebenen, so ist  $f = f^{**}$  und damit  $f$  eine konvexe Funktion. In diesem Fall ist  $g(\mathbf{x})$  auch Stützhyperebene an  $\text{epi}[f]$  und es gilt  $\text{epi}[f] = \text{epi}[f^{**}]$ . In Abb. 11 wird der durch die Legendre-Fenchel-Transformation (II.3.6) definierte Zusammenhang zwischen der Funktion  $f \geq f^{**}$ , der Stützhyperebene  $g$  und der Legendre-Fenchel-Transformierten  $f^* = \eta$  geometrisch visualisiert. Ist  $f$  eine strikt konvexe Funktion, so sind

$$(i) \mathbf{x}^* = \partial_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) \quad , \quad (ii) \mathbf{x} = \partial_{\mathbf{x}^*} f^*(\mathbf{x}^*) \quad , \quad (iii) f(\mathbf{x}) + f^*(\mathbf{x}^*) = \langle \mathbf{x}^*, \mathbf{x} \rangle \quad (\text{II.3.10})$$

äquivalent. Ein entsprechender Beweis basiert auf den Konvexitätseigenschaften (II.3.3a,b). Zunächst werden die Argumente  $\mathbf{x}_1$  und  $\mathbf{x}_2$  in (II.3.3a) durch  $\mathbf{x}$  und  $\mathbf{y}$  ersetzt. Man erhält als Ungleichung  $\langle \mathbf{x}^*, \mathbf{x} \rangle - f(\mathbf{x}) \geq \langle \mathbf{x}^*, \mathbf{y} \rangle - f(\mathbf{y})$  für alle  $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathcal{V}$ , wobei  $\mathbf{x}^* \in \mathcal{V}^*$  das Subdifferential in (i) ist. In Bezug auf (II.3.6) grenzt  $f^*$  die linke Ungleichungsseite nach oben ein, ist aber gemäß (iii) gleichzeitig identisch mit der rechten Ungleichungsseite. Aussagen (i) und (iii) in (II.3.10) müssen daher äquivalent sein. Mit analogen Betrachtungen läßt sich die Äquivalenz zwischen (ii) und  $f^{**} + f^* = \langle \mathbf{x}^*, \mathbf{x} \rangle$  zeigen. Für strikt konvexes  $f$  folgt aus  $f = f^{**}$  die Äquivalenz zwischen (ii) und (iii) und schließlich zwischen (i) und (ii).

Die bisherige Diskussion folgenunterhalbstetiger Funktionen kann für folgenoberhalbstetige Funktionen  $f(\mathbf{x}) \geq \lim_{\mathbf{y} \rightarrow \mathbf{x}} f(\mathbf{y}) > b$  mit  $b \in \mathcal{R}$  analog fortgeführt werden. Die Legendre-Fenchel-Transformierte  $f_* : \mathcal{V}_* \rightarrow \mathcal{R}$  von  $f$  ergibt sich hier in der Form

$$f_*(\mathbf{x}_*) = \inf_{\mathbf{x} \in \mathcal{V}} \{\langle \mathbf{x}_*, \mathbf{x} \rangle - f(\mathbf{x})\} \quad \forall \mathbf{x}_* \in \mathcal{V}_* \quad (\text{II.3.11})$$

Die Polfunktion  $f_*$  ist konkav. Da eine konkave Funktion  $f$  mit  $-f$  in eine konvexe transformiert wird, können ohne Einschränkung alle Beziehungen für folgenunterhalbstetige Funktionen in entsprechende Darstellungen für folgenoberhalbstetige Funktionen überführt werden.

### 3.3. Konstitutive Ungleichungen

Konstitutive Ungleichungen werden hier im Rahmen finiter Deformationen diskutiert basierend auf den arbeitskonjugierten Größen  $\{\mathbf{P}, \mathbf{F}\}$ . Eine grundlegende Diskussion dieser Thematik ist beispielsweise BALL [4], KRAWIETZ [89] und DACOROGNA [38] zu entnehmen. Es sei  $W$  die im betrachteten Kontinuum  $\mathcal{B}$  verrichtete innere Arbeit. Bei elastischen Verformungen ist  $W$  die in  $\mathcal{B}$  gespeicherte Freie Energie. Ausgangspunkt der Betrachtungen bilden die in Abschnitt 3.1 äquivalenten Aussagen zur Konvexität. Zur Konstruktion konstitutiver Ungleichungen ist dort die Funktion  $f$  durch  $W$  zu ersetzen. Führt man in (II.3.1) die Substitutionen  $\Delta \mathbf{F} := \mathbf{F}_1 - \mathbf{F}_2$  und  $\mathbf{F} := \mathbf{F}_2$  anstelle von  $\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2$  und  $\mathbf{x}_2$  ein, gelangt man zur Konvexitätsungleichung

$$W(\mathbf{F} + \lambda \Delta \mathbf{F}) \leq W(\mathbf{F}) + \lambda[W(\mathbf{F} + \Delta \mathbf{F}) - W(\mathbf{F})] \quad \forall \lambda \in [0, 1] \quad (\text{II.3.12})$$

Konvexität garantiert zwar Stabilität des Kontinuums  $\mathcal{B}$  gegen beliebige Störungen  $\Delta \mathbf{F}$  unter Totlast bei beliebigen Randbedingungen, ist aber zur Beschreibung realen Materialverhaltens zu restriktiv. In diesem Kontext sei auf MARSDEN & HUGHES [97], SCHRÖDER [141] und auf darin enthaltene Referenzen verwiesen. Im Gegensatz zur Konvexität verletzt Polykonvexität keine physikalischen Prinzipien, wie z.B. das Prinzip der materiellen Objektivität. Ersetzt man in (II.3.3a) die drei Argumente  $\mathbf{x}_2$ ,  $\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2$  und  $\mathbf{x}_1$  nacheinander durch  $\xi = \{\mathbf{F}, \text{cof}[\mathbf{F}], \det[\mathbf{F}]\}$ ,  $\Delta \xi$  und  $\xi + \Delta \xi$ , so erhält man als Bedingung für Polykonvexität

$$W(\xi + \Delta \xi) \geq W(\xi) + \partial_{\mathbf{F}} W(\xi) : \Delta \mathbf{F} + \partial_{\mathbf{H}} W(\xi) : \Delta \mathbf{H} + \partial_J W(\xi) : \Delta J \quad (\text{II.3.13})$$

mit Kofaktor  $\mathbf{H} = \text{cof}[\mathbf{F}]$  und Jakobideterminante  $J = \det[\mathbf{F}]$ . Polykonvexität fordert Stabilität des Kontinuums  $\mathcal{B}$  lokal in einem materiellen Punkt gegen beliebige Störungen der Länge, der Fläche und des Volumens. Konvexität ist eine hinreichende Bedingung für Polykonvexität. Zahlreiche bekannte Materialmodelle haben die in (II.3.13) dargestellte polykonvexe Struktur. Hierzu zählen die Neo-Hooke-, die Mooney-Rivlin- und die Ogden-Materialien. Eine Zusammenstellung dieser Modelle findet man in CIARLET [35]. Polykonvexität ist nach BALL [4] hinreichend für Quasikonvexität. Substituiert man  $\xi := \bar{\mathbf{F}} = \text{const.}$  und  $\Delta \xi := \partial_{\mathbf{x}} \tilde{\mathbf{w}}$  in (II.3.13) und integriert (II.3.13) danach über  $\mathcal{B}$  ergibt sich bei Wahl homogener Verschiebungsrandbedingungen die erstmals von MORREY [118] eingeführte Bedingung der Quasikonvexität

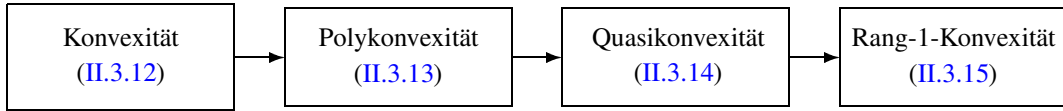
$$\frac{1}{|\mathcal{B}|} \int_{\mathcal{B}} W(\bar{\mathbf{F}} + \partial_{\mathbf{x}} \tilde{\mathbf{w}}) dV \geq W(\bar{\mathbf{F}}) \quad (\text{II.3.14})$$

$\tilde{\mathbf{w}}$  ist wegen  $\tilde{\mathbf{w}} = \mathbf{0}$  auf  $\partial \mathcal{B}$  als Fluktuationsverschiebungsfeld innerhalb von  $\mathcal{B}$  aufzufassen. Die Forderung nach Quasikonvexität ist äquivalent zur isothermen Stabilität eines allseits festgehaltenen homogenen Körpers. Demnach liefert ein am Rand festgehaltener homogener Körper unter allen isothermen Zuständen nur bei homogenen Deformationen den kleinsten Wert für  $W$ . Die Forderung nach Quasikonvexität weist das Problem auf, daß beispielsweise die Wachstumsbedingung  $W(\mathbf{F}) \rightarrow \infty$  für  $\det[\mathbf{F}] \rightarrow 0$  nicht beschreibbar ist und daß sie als Integralungleichung schwer ausgewertet werden kann. Rang-1-Konvexität ist die schwächste unter allen Konvexitätsbedingungen. Rang-1-Konvexität fordert

$$(\mathbf{m} \otimes \mathbf{M}) : \mathbb{C} : (\mathbf{m} \otimes \mathbf{M}) \geq 0 \quad (\text{II.3.15})$$

mit  $\mathbb{C} := \partial_{\mathbf{F}} \mathbf{P} = \partial_{\mathbf{F}\mathbf{F}}^2 W(\mathbf{F})$ . Sie leitet sich aus (II.3.5) ab, indem man die Störung  $\Delta \mathbf{x}$  durch den Rang-1-Tensor  $\Delta \mathbf{F} = \mathbf{m} \otimes \mathbf{M}$  ersetzt. Ungleichung (II.3.15) wird auch Legendre-Hadamard-Bedingung genannt. Ist die Ungleichung strikt erfüllt, so genügt  $W$  der Bedingung der strengen

Elliptizität. In Abb. 12 wird der Zusammenhang zwischen den Konvexitätsbegriffen nochmals aufgezeigt. Bei kleinen Verzerrungen fallen die Konvexitätseigenschaften (II.3.12)–(II.3.15) zusammen. Notwendig und hinreichend für Stabilität des Kontinuums  $\mathcal{B}$  gegen Störungen des Gleichgewichtszustands ist dort die Konvexitätsungleichung.



**Abbildung 12:** Hierarchie der Konvexitätsbegriffe. Pfeile zwischen Boxen  $\square \rightarrow \square$  zeigen an, daß “\*“ hinreichend für “o“ ist. Eingeklammerte Nummern verweisen auf die zugehörigen Gleichungen.

### 3.4. Lagrange-Funktionale als Sattelpunktprobleme

Lagrange-Funktionale spielen bei Variationsformulierungen in der Mehrskalenmodellierung eine wesentliche Rolle. In diesem Abschnitt wird gezeigt, daß sich diese Lagrange-Funktionale allgemein als Sattelpunktaufgaben darstellen lassen. Es seien  $\mathcal{V}$  und  $\mathcal{W}$  zwei reelle Hilberträume. Die Vektoren  $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in \mathcal{V}$  und  $\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu} \in \mathcal{W}$  seien Elemente dieser Räume. Das Produkt  $\mathcal{X} = \mathcal{V} \times \mathcal{W}$  wird durch die Skalarprodukte  $\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle_{\mathcal{X}} = \langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle_{\mathcal{V}} + \langle \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu} \rangle_{\mathcal{W}}$  mit  $\mathbf{x} = (\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda})^T$  und  $\mathbf{y} = (\mathbf{v}, \boldsymbol{\mu})^T$  ebenfalls zu einem Hilbertraum.  $\mathcal{V}^*$  und  $\mathcal{X}^*$  seien die zu  $\mathcal{V}$  und  $\mathcal{X}$  dualen Räume. Es werden zwei beliebige Bilinearformen  $a : \mathcal{V} \times \mathcal{V} \rightarrow \mathcal{R}$  und  $b : \mathcal{V} \times \mathcal{W} \rightarrow \mathcal{R}$  sowie ein Funktional  $\mathbf{f} \in \mathcal{V}^*$  eingeführt. Die Bilinearformen seien stetig, d.h.  $|a(\mathbf{u}, \mathbf{v})| \leq C_1 \|\mathbf{u}\|_{\mathcal{V}} \|\mathbf{v}\|_{\mathcal{V}}$  für alle  $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in \mathcal{V}$  und  $C_1 \in \mathcal{R}_+$  sowie  $|b(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda})| \leq C_2 \|\mathbf{u}\|_{\mathcal{V}} \|\boldsymbol{\lambda}\|_{\mathcal{W}}$  für alle  $\mathbf{u} \in \mathcal{V}$ ,  $\boldsymbol{\lambda} \in \mathcal{W}$  und  $C_2 \in \mathcal{R}_+$ . Ferner sei die Bilinearform  $a$  symmetrisch  $a(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = a(\mathbf{v}, \mathbf{u})$  für alle  $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in \mathcal{V}$  und elliptisch  $a(\mathbf{u}, \mathbf{u}) \geq C \|\mathbf{u}\|_{\mathcal{V}}^2$  mit  $C \in \mathcal{R}_+$  und  $\mathbf{u} \neq \mathbf{0}$ . Die in der Mehrskalenanalyse auftretenden hochgradig nichtlinearen Mikro-Makro-Variationsfunktionale werden im Rahmen einer Newton-Iteration inkrementenweise auf die quadratische Form

$$\left. \begin{aligned} L : \mathcal{V} \times \mathcal{W} &\rightarrow \mathcal{R} \\ L(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}) &:= J(\mathbf{u}) + b(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}) \end{aligned} \right\} \quad (\text{II.3.16})$$

reduziert. Darin sind  $J(\mathbf{u}) = \frac{1}{2}a(\mathbf{u}, \mathbf{u}) - \mathbf{f}(\mathbf{u})$  als Energiefunktional und  $b(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda})$  als Lagrange-Nebenbedingung zu werten. Im Lösungspunkt  $\{\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}\} \in \mathcal{V} \times \mathcal{W}$  hat das Lagrange-Funktional  $L$  den Gleichungen

$$\left. \begin{aligned} a(\mathbf{u}, \mathbf{v}) + b(\mathbf{v}, \boldsymbol{\lambda}) &= \mathbf{f}(\mathbf{v}) \quad \forall \mathbf{v} \in \mathcal{V} \\ b(\mathbf{u}, \boldsymbol{\mu}) &= 0 \quad \forall \boldsymbol{\mu} \in \mathcal{W} \end{aligned} \right\} \quad (\text{II.3.17})$$

zu genügen. Aus (II.3.17) erhält man

$$c(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = g(\mathbf{y}) \quad \forall \mathbf{y} \in \mathcal{X} \quad (\text{II.3.18})$$

wenn man  $c(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = a(\mathbf{u}, \mathbf{v}) + b(\mathbf{v}, \boldsymbol{\lambda}) + b(\mathbf{u}, \boldsymbol{\mu})$  als Bilinearform  $c : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{R}$  und  $g(\mathbf{y}) = \mathbf{f}(\mathbf{v})$  mit  $g \in \mathcal{X}^*$  einführt. Man nennt nun (II.3.18) eine Sattelpunktaufgabe, falls

$$L(\mathbf{u}, \boldsymbol{\mu}) \leq L(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}) \leq L(\mathbf{v}, \boldsymbol{\lambda}) \quad \forall (\mathbf{v}, \boldsymbol{\mu})^T \in \mathcal{X} \quad (\text{II.3.19})$$

Aus  $L(\mathbf{v}, \boldsymbol{\lambda}) - L(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}) = \frac{1}{2}a(\mathbf{u}-\mathbf{v}, \mathbf{u}-\mathbf{v}) - [a(\mathbf{u}, \mathbf{u}-\mathbf{v}) + b(\mathbf{u}-\mathbf{v}, \boldsymbol{\lambda}) - \mathbf{f}(\mathbf{u}-\mathbf{v})]$  folgt in Verbindung mit (II.3.17)<sub>1</sub> und der Elliptizität von  $a$  der rechte Teil der Ungleichheitskette  $L(\mathbf{v}, \boldsymbol{\lambda}) -$

$L(\mathbf{u}, \lambda) = \frac{1}{2}a(\mathbf{u}-\mathbf{v}, \mathbf{u}-\mathbf{v}) \geq \frac{1}{2}C\|\mathbf{u}-\mathbf{v}\|_{\mathcal{V}}^2 \geq 0$ . Wäre die Bilinearform  $c$  symmetrisch und positiv definit, so wäre neben  $\mathbf{u}$  auch  $\lambda$  ein minimierendes Argument von (II.3.18). Da aber beispielsweise  $c(\mathbf{x}, \mathbf{x}) = 0$  für  $\mathbf{x} = (\mathbf{0}, \lambda)^T \neq \mathbf{0}$  gilt, ist die positive Definitheit von  $c$  nicht gewährleistet. Zusammen mit  $L(\mathbf{u}, \lambda) - L(\mathbf{u}, \mu) = b(\mathbf{u}, \lambda - \mu) = 0$ , was unmittelbar aus (II.3.17)<sub>2</sub> folgt, ergibt sich schließlich der linke Teil der Ungleichungskette in (II.3.19). Aus der Ungleichungskette (II.3.19) schließt man umgekehrt auf die Gültigkeit der Gleichungen (II.3.17). Es erfülle  $(\mathbf{u}, \lambda)^T \in \mathcal{X}$  die Ungleichungskette (II.3.19) für alle  $(\mathbf{v}, \mu)^T \in \mathcal{X}$ . Aus (II.3.19) ergibt sich wegen  $0 \leq L(\mathbf{u}, \lambda) - L(\mathbf{u}, \lambda \mp \mu) = \pm b(\mathbf{u}, \mu)$  die Gleichung (II.3.17)<sub>2</sub>. Um von (II.3.19) auf (II.3.17)<sub>1</sub> schließen zu können, wird die logische Kontraposition bewiesen. Es existiere ein Vektor  $(\mathbf{v}, \lambda)^T \in \mathcal{X}$ , der (II.3.17)<sub>1</sub> nicht genügt. In diesem Fall läßt sich auch ein Vektor  $(\mathbf{s}, \lambda)^T \in \mathcal{X}$  finden, für den (II.3.19) nicht gilt. Mit der Substitution  $(\mathbf{s}, \lambda)^T = (\mathbf{u} + t\mathbf{v}, \lambda)^T$ ,  $t \in \mathcal{R}$ , wird die Differenz  $L(\mathbf{s}, \lambda) - L(\mathbf{u}, \lambda) = \frac{1}{2}t^2a(\mathbf{v}, \mathbf{v}) + t(a(\mathbf{u}, \mathbf{v}) + b(\mathbf{v}, \lambda) - f(\mathbf{v})) = C_3t^2 + C_4t = C_3t(t + C_4/C_3)$  für  $C_3, C_4 \in \mathcal{R}_+$  und bei der Wahl  $t = -C_4/2C_3$  negativ. Das steht im Widerspruch zu (II.3.19). Insgesamt ist damit gezeigt, daß die Lösung von (II.3.18) eine Sattelpunktaufgabe darstellt. Voraussetzung für die Lösbarkeit von (II.3.18) sind die nach Babuška und Brezzi benannten Inf-Sup-Bedingungen, die hier für den Fall einer symmetrischen Bilinearform  $a$  angegeben werden:

$$\left. \begin{array}{l} \inf_{\mathbf{v} \in \mathcal{V}} \left\{ \sup_{\mathbf{w} \in \mathcal{V}} \{ |a(\mathbf{v}, \mathbf{w})| : \mathbf{w} \in \mathcal{V}_0, \|\mathbf{w}\|_{\mathcal{V}} = 1 \} : \mathbf{v} \in \mathcal{V}_0, \|\mathbf{v}\|_{\mathcal{V}} = 1 \right\} > 0 \\ \inf_{\mu \in \mathcal{W}} \left\{ \sup_{\mathbf{v} \in \mathcal{V}} \{ |b(\mathbf{v}, \mu)| : \mathbf{v} \in \mathcal{V}, \|\mathbf{v}\|_{\mathcal{V}} = 1 \} : \mu \in \mathcal{W}, \|\mu\|_{\mathcal{W}} = 1 \right\} > 0 \end{array} \right\} \quad (\text{II.3.20})$$

Hierbei ist  $\mathcal{V}_0 = \{ \mathbf{v} \in \mathcal{V} \mid b(\mathbf{v}, \mu) = 0 \quad \forall \mu \in \mathcal{W} \} \subset \mathcal{V}$ .

Die Sattelpunktlösung von (II.3.18) ergibt sich aus einer Inf-Sup-Formulierung des Lagrange-Funktional  $L(\mathbf{v}, \mu)$ , bei der bezüglich  $\mathbf{v} \in \mathcal{V}$  minimiert und bezüglich  $\mu \in \mathcal{W}$  maximiert wird. Im Folgenden wird gezeigt, daß die Optimierungsreihenfolge beliebig ist. Aus (II.3.19) folgt

$$\sup_{\mu \in \mathcal{W}} L(\mathbf{u}, \mu) = L(\mathbf{u}, \lambda) = \inf_{\mathbf{v} \in \mathcal{V}} L(\mathbf{v}, \lambda) \quad (\text{II.3.21})$$

Daraus erhält man als untere und obere Schranke des Lagrange-Funktional

$$\inf_{\mathbf{v} \in \mathcal{V}} \sup_{\mu \in \mathcal{W}} L(\mathbf{v}, \mu) \leq \sup_{\mu \in \mathcal{W}} L(\mathbf{u}, \mu) = \inf_{\mathbf{v} \in \mathcal{V}} L(\mathbf{v}, \lambda) \leq \sup_{\mu \in \mathcal{W}} \inf_{\mathbf{v} \in \mathcal{V}} L(\mathbf{v}, \mu) \quad (\text{II.3.22})$$

Insbesondere gilt für die obere Schranke  $\sup_{\mu} \inf_{\mathbf{v}} L(\mathbf{v}, \mu) \leq \sup_{\mu} L(\mathbf{r}, \mu)$  mit beliebigem  $\mathbf{r} \in \mathcal{V}$  und somit auch  $\sup_{\mu} \inf_{\mathbf{v}} L(\mathbf{v}, \mu) \leq \inf_{\mathbf{r}} \sup_{\mu} L(\mathbf{r}, \mu)$ . Die letzte Ungleichung liefert zusammen mit (II.3.22) die gewünschte Identität

$$\inf_{\mathbf{v} \in \mathcal{V}} \sup_{\mu \in \mathcal{W}} L(\mathbf{v}, \mu) = L(\mathbf{u}, \lambda) = \sup_{\mu \in \mathcal{W}} \inf_{\mathbf{v} \in \mathcal{V}} L(\mathbf{v}, \mu) \quad (\text{II.3.23})$$

# III

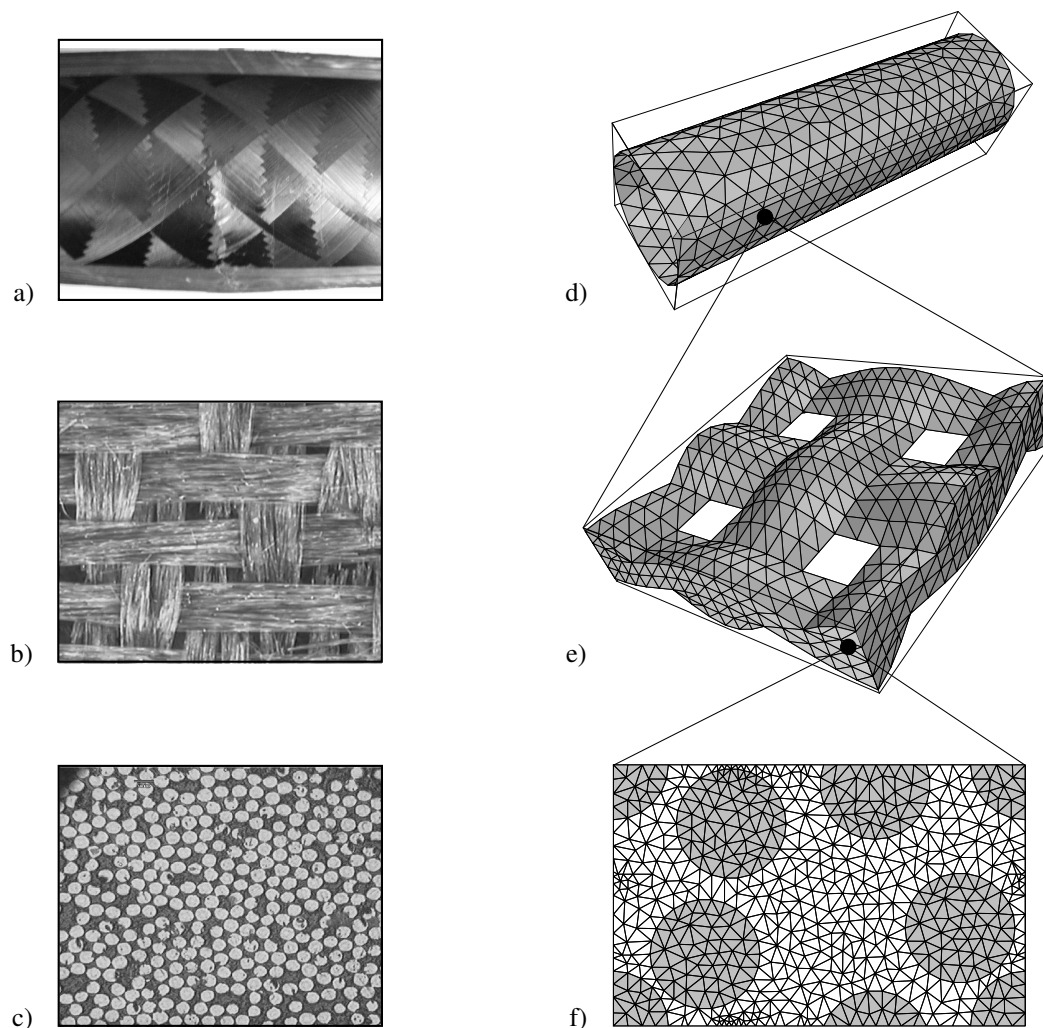
## Mehrskalenmodellierung

Mehrskalenmodelle werden in der kontinuumsmechanischen Materialtheorie zur Modellierung von Mehrphasenwerkstoffen eingesetzt. Unter Mehrphasenwerkstoffe sind Verbundmaterialien jeglicher Art zu verstehen. Am Beispiel des in [Abb. 13a–c](#) dargestellten faserverstärkten Werkstoffs wird die mit der Mehrskalmodellierung verbundene Problematik verständlich. Diese besteht grundsätzlich in der Beschreibung komplexer Wechselwirkungen zwischen den Skalen, in die ein mikroheterogener Verbundwerkstoff topologisch aufgelöst werden kann. Auf der Mikroskala führen die in weicher Matrix eingelagerten steifen Polyamidfasern auf stark inhomogene Spannungs- und Verzerrungsfelder. Zudem bewirkt die monolithische Ausrichtung der Fasern einen transversalen Anisotropieeffekt auf der Mikroskala. Effekte der Mikrostruktur beeinflussen das lokale übergeordnete Materialverhalten der Mesosstruktur, einem aus Mikrofaserbündeln geflochtenen Gewebe. Fluktuationen in Spannungs- und Verzerrungsfeldern, die auf der Mikrostruktur zu beobachten sind, sind auf der Mesoskala kaum meßbar. Die orthotrope Strukturtopologie der Mesoskala wiederum kann bei entsprechender Belastung für die Initiierung von Schadensmechanismen verantwortlich sein, welche im fortschreitenden Beanspruchungsprozeß zu einem makroskopischen Versagen der Kabelkonstruktion führen können. Aufgrund der Komplexität solcher mikroheterogenen Strukturen ist eine erschöpfende makroskopische Beschreibung unter Berücksichtigung der Heterogenitäten im Allgemeinen unmöglich. Vielmehr ist eine effiziente Beschreibung mit sogenannten effektiven Ersatzmodellen erforderlich. Die Konstruktion solcher Ersatzmodelle wird als Homogenisierung bezeichnet. Für allgemeine Darstellungen zur Homogenisierung sei auf [ABOUDI \[1\]](#), [BAKHVALOV & PANASENKO \[3\]](#), [BENSOUSSAN, LIONS & PAPANICOLAOU \[14\]](#), [BERAN \[16\]](#), [HASHIN \[67\]](#), [MILTON \[114\]](#), [NEMAT-NASSER & HORI \[123\]](#), [PONTE CASTAÑEDA & SUQUET \[131\]](#), [SANCHEZ-PALENCIA & ZAOUÏ \[140\]](#), [TALBOT & WILLIS \[149\]](#) und darin enthaltene Referenzen verwiesen. Notwendige Voraussetzung derartiger Modelle sind große Skalenunterschiede. In diesem Fall erfolgt der Skalenübergang entsprechend [Abb. 13d–f](#) von der Meso- oder Mikroskala zu der jeweils übergeordneten Skale punktweise. In [Abb. 13e](#) bzw. [f](#) wird dazu ein charakteristischer Teilbereich der heterogenen Struktur diskretisiert und einem Homogenisierungsprozeß zugeführt, um lokal effektive Variablen der übergeordneten Skale zu berechnen. Als Teilbereiche werden sogenannte repräsentative Volumenelemente ( $\mathcal{RVE}$ ) eingeführt, deren Größe so zu wählen ist, daß sie die wesentlichen mechanischen und topologischen Charakteristiken der jeweiligen Skale enthalten. Diese Überlegungen führen zu dem Schluß, daß der Skalenübergang mittels Homogenisierungstechniken im Kontext folgender elementarer Aufgabenstellungen zu sehen ist:

- 1.) Wahl eines geeigneten  $\mathcal{RVE}$ s auf der feinen Skale,
- 2.) Definition physikalisch sinnvoller effektiver Variablen auf der übergeordneten Skale,
- 3.) Bereitstellung geeigneter Randbedingungen für das  $\mathcal{RVE}$ ,
- 4.) Verknüpfung der Skalen basierend auf dem Konzept eines  $\mathcal{RVE}$ s,
- 5.) Berechnung effektiver Variablen mittels Homogenisierung.

Das Konzept der Mikro-Makro-Übergänge beinhaltet deren Lösung. Die prinzipielle Vorgehensweise beim Skalenübergang wird ohne Einschränkung der Allgemeinheit an zweiskaligen Kompositen mit ausgezeichneter Mikro- und Makroskala aufgezeigt. Das  $\mathcal{RVE}$  mit effektiven bzw. homogenisierten Parametern kann hierbei als Mesoskala aufgefaßt werden.



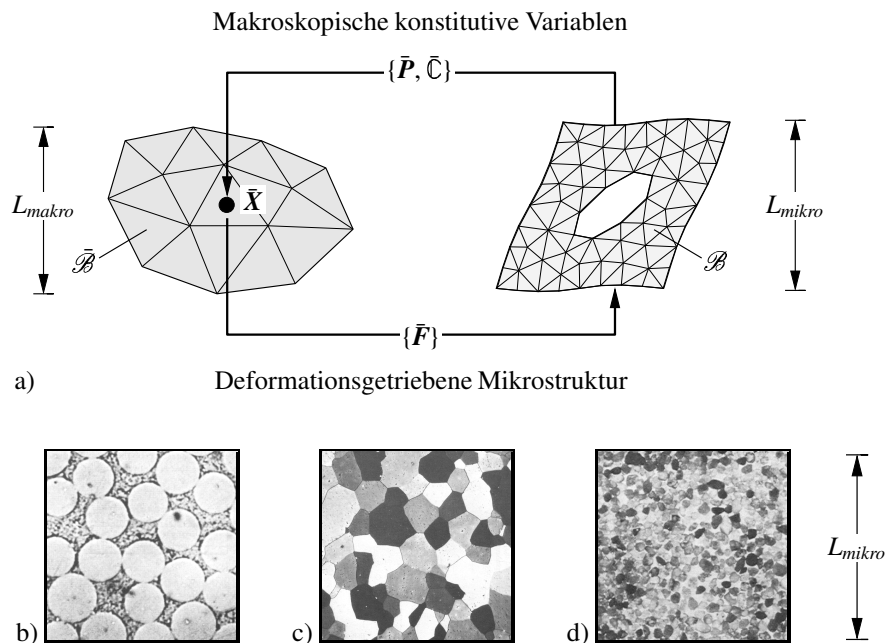


**Abbildung 13:** Mikro-Makro-Übergang in einem faserverstärkten Kabel. a) Längsschnitt durch das Kabel. Makrostruktur der Längenskale  $\sim 10^0$  m enthält schalenförmige Bewehrung aus Polyamidgewebe. b) Mesostruktur aus einem mit gebündelten Mikrofasern geflochtenen Gewebe der Längenskale  $\sim 10^{-3}$  m. c) Zweiphasige Mikrostruktur aus miteinander verklebten Polyamid-Mikrofasern der Längenskale  $\sim 10^{-6}$  m. d–f) Simulation des faserverstärkten Kabels: d) Finite Elementdiskretisierung der Makrostruktur als Schale. e) Finite Elementdiskretisierung eines Gewebeausschnitts der Mesostruktur. Dieser beschreibt punktweise das übergeordnete Materialverhalten der Makrostruktur. f) Finite Elementdiskretisierung einer repräsentativen Mikrostruktur, die das konstitutive Materialverhalten der Mesostruktur punktweise festlegt. Die Abbildungen wurden aus dem Vortrag *FFT-based algorithm for analysis of heterogeneous materials with complex microstructure* von Jan Zeman der Technischen Universität Prag entnommen. Sie werden hier modifiziert wiedergegeben.

In diesem Kapitel werden analytische den neu entwickelten numerischen Homogenisierungsmodellen gegenübergestellt. Analytische Verfahren sind in der Praxis weit verbreitet. Als Beispiele seien die auf HILL [75] basierenden Ansätze von HALPIN & KARDOS [64] und HALPIN & TSAI [65] genannt. Numerische Konzepte haben daher nicht den Anspruch, bewährte analytische Methoden zu ersetzen, sondern vielmehr deren Anwendungsbereich zu erweitern. Am Ende des Kapitels werden analytische und entwickelte numerische Methoden im Rahmen kanonischer Modellprobleme verglichen. Übereinstimmungen rechtfertigen einerseits analytische Ansätze, andererseits bestätigen sie aber die Effizienz der neuen numerischen Modelle.

# 1. Konzept der Mikro-Makro-Übergänge

Wechselwirkungen zwischen den Skalen und deren Komplexität wurden bereits im Vorspann dieses Kapitels am Beispiel eines faserverstärkten Werkstoffs aufgezeigt. Übergeordnetes Ziel des Mikro-Makro-Konzepts ist die Beschreibung derartiger Skaleninteraktionen. Dies erfordert die Kenntnis der mechanischen Eigenschaften, der Geometrie und Orientierung der einzelnen Konstituierenden der Mikrostruktur, um hieraus eine phänomenologische Beschreibung makroskopischen Materialverhaltens abzuleiten. Voraussetzung für die Anwendung des Konzepts ist das Prinzip der lokalen Wirkung, wonach Makrovariablen in einem infinitesimalen Teilbereich der Makroskala gleichförmig sind. Auf der Mikroskala hingegen oszillieren die Feldgrößen infolge der Heterogenität. Im Rahmen einer makroskopischen Beschreibung geht man davon aus, daß sich die Mikrostruktur in der infinitesimalen Umgebung eines materiellen Punktes der Makroskala auf der Mikroskala hinreichend genau auflösen läßt. Der aufgelöste Teilbereich der Mikrostruktur muß als  $\mathcal{RVE}$  wesentliche Eigenschaften der Mikrostruktur enthalten. Für den Skalenübergang benötigt man die Definition physikalisch sinnvoller Makrovariablen, die Bereitstellung geeigneter Randbedingungen im  $\mathcal{RVE}$  zur Berechnung der mikroskopischen Feldgrößen und die Verknüpfung der Skalen. HILL [77] zufolge ist es sinnvoll, Makrovariablen allein durch Randdaten auf der Oberfläche des  $\mathcal{RVE}$ s zu definieren. Einerseits wird bei experimentellen Untersuchungen im Allgemeinen eine Messung der Belastung und der mittleren Verschiebungen über die Auswertung der entsprechenden Größen an gegenüberliegenden Flächen einer repräsentativen Zelle gemessen. Andererseits sind Makrovariablen mit dieser Eigenschaft besonders geeignet, den Übergang zwischen den Skalen herzustellen. In Abb. 14a wird das Konzept der Mikro-Makro-Übergänge visualisiert. Auf der Makroskala  $L_{makro}$  des Verbundkörpers wird das makroskopische Randwertproblem definiert, insbesondere die Abmessungen und



**Abbildung 14:** a) Homogenisierung diskreter Mikrostrukturen  $\mathcal{B}$  bei makroskopisch vorgegebenem Deformationsgradienten  $\bar{\mathbf{F}}$ . Lösung eines Randwertproblems auf der lokal in  $\bar{\mathbf{X}} \in \bar{\mathcal{B}}$  angehängten Mikrostruktur  $\mathcal{B}$  liefert effektive Spannungen  $\bar{\mathbf{P}}$  und Tangentenmoduli  $\bar{\mathbf{C}}$ . b–d) Beispiele realer Mikrostrukturen: faserverstärktes Verbundmaterial, ein Polykristall mit unterschiedlich orientierten Kristalliten und ein Konglomerat aus Partikeln.



Randbedingungen. Mikrostrukturen werden punktweise mit der Makrostruktur verknüpft. Bei Finite Elementsimulationen werden diskrete  $\mathcal{RVE}$ s der Mikrostruktur den Element-Gaußpunkten  $\bar{\mathbf{X}} \in \bar{\mathcal{B}}$  der Makroskala zugeordnet. Die Mikrostruktur  $\mathcal{B}$  mit Längenskala  $L_{\text{mikro}}$  deformiert sich unter dem Einfluß der in  $\bar{\mathbf{X}}$  auftretenden makroskopischen Deformationen oder Spannungen. In Abb. 14 wird das  $\mathcal{RVE}$  durch die makroskopische Größe  $\bar{\mathbf{F}}$  in  $\bar{\mathbf{X}}$  getrieben. In den Arbeiten MIEHE, KOCH & BAYREUTHER [109], MIEHE [104, 105] und MIEHE, SCHOTTE & LAMBRECHT [110] findet diese Größe Eingang in einem im  $\mathcal{RVE}$  postulierten Variationsfunktional, dessen Struktur der Hill-Bedingung entspricht. Dieses Variationsfunktional stellt einen fundamentalen energetischen Zusammenhang zwischen Mikro- und Makrovariablen her, bei dem sich die lokale innere Arbeit in  $\bar{\mathbf{X}} \in \bar{\mathcal{B}}$  als Mittelwert der im  $\mathcal{RVE}$  der Mikrostruktur verrichteten Arbeit ergibt. Der Skalenübergang gliedert sich formal in zwei Schritte. Auf der Mikrostruktur wird zunächst ein mikroskopisches Randwertproblem zur Berechnung der Mikrovariablen gelöst assoziiert mit kanonischen Randbedingungen. Mit geeigneten Mittelungsschemata werden daraus im Anschluß die makroskopischen Gegenstücke bestimmt, die als kontinuumsmechanische Größen des materiellen Punktes  $\bar{\mathbf{X}}$  zur Lösung des makroskopischen Randwertproblems bereitgestellt werden. Im deformationsgetriebenen Homogenisierungsprozeß der Abb. 14 sind dies die makroskopischen Spannungen  $\bar{\mathbf{P}}$  und die makroskopischen Tangentenmoduli  $\bar{\mathbf{C}}$ . In Abb. 14b–d sind typische mikroheterogene Verbundmaterialien als Anwendungsbeispiele des Mikro-Makro-Konzepts dargestellt.

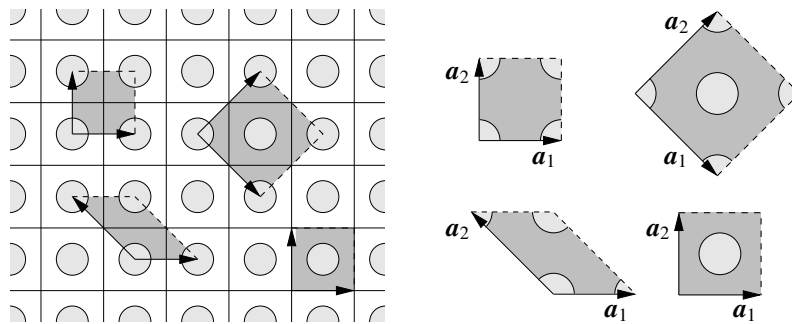
### 1.1. Konzept des repräsentativen Volumenelements

Bei der Beschreibung mikroheterogener Materialien sind die kontinuumsmechanischen Eigenschaften der Makrostruktur durch die Geometrie und die mechanischen Eigenschaften der Konstituierenden, wie Einschlüsse, Risse, Hohlräume, in der Mikrostruktur charakterisiert. Zu deren Beschreibung wird das Konzept des repräsentativen Volumenelements eingeführt, siehe dazu HILL [74], HASHIN [67], HUET [79], KRÖNER [92], NEMAT-NASSER & HORI [123] und WILLIS [173]. Das  $\mathcal{RVE}$  wurde von HILL [74] im klassischen Sinne definiert:

*“... a sample that (a) is structurally entirely typical of the whole mixture on average, and (b) contains a sufficient number of inclusions for the apparent overall moduli to be effectively independent of the surface values of traction and displacement, so long as these values are macroscopically uniform.”*

Demnach ist das  $\mathcal{RVE}$  ein Teilvolumen der Mikrostruktur, welches unabhängig von Randbedingungen und von seiner Plazierung die gleichen makroskopischen Parameter liefert. Die Struktur des  $\mathcal{RVE}$ s ist in der Regel durch eine große Anzahl von Mikroheterogenitäten gekennzeichnet. Das liegt in der stochastischen Natur der Dinge. Je komplexer die Struktur des  $\mathcal{RVE}$ s gewählt wird, desto mehr streben in einem Ensemble von  $\mathcal{RVE}$ s berechnete, als Makrovariablen definierte Ensemblemittelwerte gegen einen stationären repräsentativen Wert. Der Ensemblemittelwert oder Erwartungswert einer mikroskopischen Größe entspricht hier dem Wert, den man im Durchschnitt an einem Punkt der Mikrostruktur in einem Ensemble von  $\mathcal{RVE}$ s erwartet. Ist ein  $\mathcal{RVE}$  gefunden worden, in dem Ensemblemittelwerte weitgehend stationär sind, nennt man es statistisch homogen. Hierzu und zu allgemeinen statistischen Betrachtungen in der Mikrostruktur siehe BERAN [16], JEULIN & OSTOJA-STARZEWSKI [81], MILTON [114] und TORQUATO [153]. Ein statistisch homogenes  $\mathcal{RVE}$  ist darüber hinaus ergodisch, wenn Ensemblemittelwerte und über die gesamte Struktur eines einzelnen  $\mathcal{RVE}$ s gebildete Mittelwerte mikroskopischer Parameter identisch sind. In einem statistisch homogenen  $\mathcal{RVE}$  gewährleistet Ergodizität eine

bezüglich der Wahl des  $\mathcal{RVE}$ s invariante Mittelwertbildung in einem einzelnen  $\mathcal{RVE}$ . Aus obigen Betrachtungen wird ersichtlich, daß eine pragmatische Aussage über Größe und Geometrie des  $\mathcal{RVE}$ s im Allgemeinen unmöglich ist. Im Spezialfall zweiphasiger linear elastischer Komposite mit statistisch homogen verteilten kugelförmigen Einschlüssen gelingt es DRUGAN & WILLIS [44] und GUSEV [57], darüber sehr genau Aufschluß zu geben. Unter Berücksichtigung mikroskopischer Materialinstabilitäten bei finiten elastischen Deformationen haben MÜLLER [120], SCHRÖDER [141] und MIEHE, SCHRÖDER & BECKER [112] Methoden für zweiphasige periodische Verbundmaterialien entwickelt, die es erlauben, die Größe des  $\mathcal{RVE}$ s in Abhängigkeit von der Wellenlänge des kritischen Bifurkationsmodes zu bestimmen. Werden Instabilitäten ausgeschlossen, können in einer periodischen Mikrostruktur  $\mathcal{RVE}$ s entsprechend Abb. 16 definiert werden. In dieser Abbildung sind vier verschiedene  $\mathcal{RVE}$ s angegeben. Die Wahl des

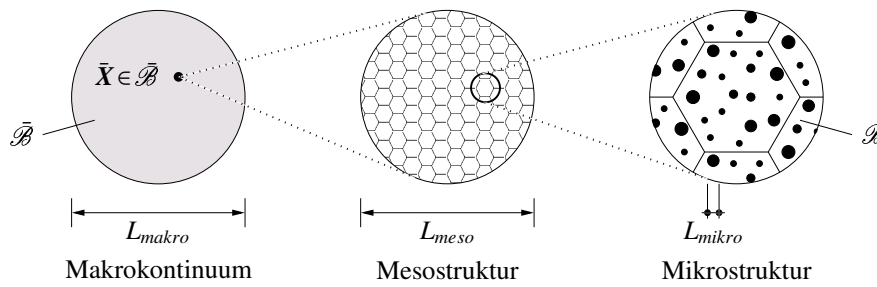


**Abbildung 15:** Nichteindeutige Wahl eines repräsentativen Volumenelements einer periodischen Mikrostruktur. Die Mikrostruktur entsteht durch periodisches Versetzen der repräsentativen Volumenelemente in Richtung der Referenzvektoren  $\mathbf{a}_1$  und  $\mathbf{a}_2$ .

$\mathcal{RVE}$ s ist nicht eindeutig. Zur Beschreibung der Periodizität wird in Abb. 16 ein Referenzkoordinatensystem mit linear unabhängigen Vektoren  $\mathbf{a}_1$  und  $\mathbf{a}_2$  eingeführt. Das Referenzsystem muß so gewählt werden, daß die mechanischen Eigenschaften der Struktur unter Translation der Form  $n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2$  mit  $n_1, n_2 \in \mathcal{L}$  invariant sind. Auch die Wahl des Referenzsystems ist somit nicht eindeutig. Die natürlichste Wahl eines zweidimensionalen  $\mathcal{RVE}$ s ist das durch die Referenzvektoren aufgespannte Parallelogramm. Grundsätzlich muß das  $\mathcal{RVE}$  bei periodischen Strukturen so gewählt werden, daß die Gesamtstruktur durch Translation entlang der Referenzvektoren aufgebaut wird. Voraussetzung für die Anwendung des Konzepts vom repräsentativen Volumenelement ist das Vorliegen einer Makroskala  $L_{\text{makro}}$  des Komposits, einer Mesoskala  $L_{\text{meso}}$ , die hier mit dem  $\mathcal{RVE}$  assoziiert wird, und einer Mikroskala  $L_{\text{mikro}}$  der Mikrostruktur, die durch die größte maßgebende charakteristische Abmessung der Mikroheterogenitäten gekennzeichnet ist. In der Regel sind nur  $\mathcal{RVE}$ s mit unendlicher Ausdehnung statistisch homogen. Um statistische Homogenität bei finit begrenzten  $\mathcal{RVE}$ s bewerkstelligen zu können, fordert man

$$L_{\text{mikro}} < L_{\text{meso}} \ll L_{\text{makro}} \quad \text{oder} \quad L_{\text{mikro}} \ll L_{\text{meso}} \ll L_{\text{makro}} \quad (\text{III.1.1})$$

Entscheidend ist das Verhältnis  $L_{\text{meso}} \ll L_{\text{makro}}$ . Das Verhältnis zwischen Mikro-, Meso- und Makroskala nennt HASHIN [67] das MMM-Prinzip der Skalenseparation. Die Skalenseparation wird in Abb. 16 visualisiert. Die Bedingung  $L_{\text{meso}} \ll L_{\text{makro}}$  bewirkt, daß die abgebildete Mesosstruktur punktweise mit der Makroskala verknüpft ist.  $L_{\text{mikro}} \ll L_{\text{meso}}$  wird beispielsweise von den im Abschnitt 3 behandelten, auf dem Eshelbyprinzip basierenden Einbettungsverfahren erfüllt.  $L_{\text{mikro}} < L_{\text{meso}}$  gilt insbesondere bei Verbundmaterialien mit periodischer Mikrostruktur.



**Abbildung 16:** Schematische Darstellung unterschiedlicher Längenskalen eines mikroheterogenen Verbundkörpers  $\bar{\mathcal{B}}$ : Längenskala  $L_{\text{makro}}$  des Makrokontinuums  $\bar{\mathcal{B}}$ , Längenskala  $L_{\text{meso}}$  der in  $\bar{X}$  angehefteten Mesostruktur und Längenskala  $L_{\text{mikro}}$  von Einschlüssen der Mikrostruktur  $\mathcal{B}$ .

Aus  $L_{\text{meso}} \ll L_{\text{makro}}$  ergibt sich die für Homogenisierungsprozesse wichtige Eigenschaft, daß im  $\mathcal{RVE}$  auftretende Volumen- und Trägheitskräfte im Vergleich zur Makroskala vernachlässigbar sind. Ein anschaulicher Beweis findet sich in WIDJAJAKUSUMA [170]. Die im  $\mathcal{RVE}$  gültige globale Impulsbilanz (II.1.30) wird dort der Grenzwertbetrachtung  $L_{\text{meso}} \rightarrow 0$  zugeführt, bei der das Volumen  $V = A \cdot L_{\text{meso}}$  des  $\mathcal{RVE}$ s bei gleichbleibender Oberfläche  $A$  gegen Null strebt. Volumen- und Trägheitskräfte verschwinden dabei. Das verbleibende Oberflächenintegral läßt sich mittels Gaußschem Integralsatz und Lokalisierungstheorem in die im  $\mathcal{RVE}$  maßgebende lokale Impulsbilanz überführen

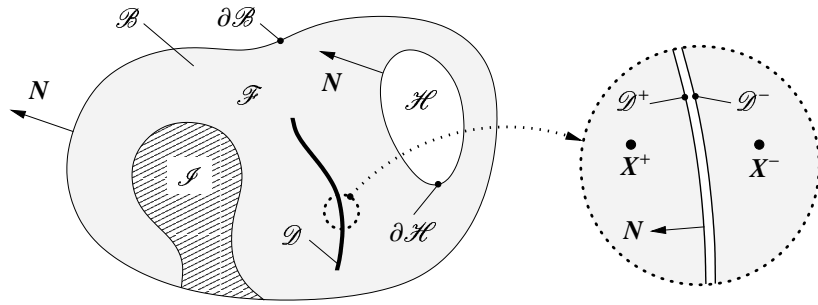
$$\text{DIV}[\mathbf{P}] = \mathbf{0} \quad \text{oder} \quad \text{div}[\boldsymbol{\sigma}] = \mathbf{0} \quad (\text{III.1.2})$$

## 1.2. Definition effektiver Feldvariablen

Im Punkt  $\bar{X} \in \bar{\mathcal{B}}$  des Makrokontinuums  $\bar{\mathcal{B}}$  werden zwei Familien von Variablen betrachtet, die makroskopischen Variablen des homogenisierten Körpers und die in  $\bar{X}$  parametrisierten mikroskopischen Variablen des  $\mathcal{RVE}$ s. Ziel ist, geeignete makroskopische Größen als Funktionen der mikroskopischen Variablen allein durch Randdaten auf der Oberfläche des  $\mathcal{RVE}$ s zu definieren. Im Rahmen finiter Deformationen stellt sich heraus, daß der makroskopische Deformationsgradient und der dazu arbeitskonjugierte 1. P.-K.-Spannungstensor ebensolche ideale Makrovariablen sind. Das betrachtete  $\mathcal{RVE}$  sei ergodisch und genüge dem Konzept des repräsentativen Volumenelements. In Abb. 17 ist ein  $\mathcal{RVE}$  der Referenzkonfiguration mit typisch heterogenem Muster dargestellt. Matrix  $\mathcal{M}$ , Einschlüsse  $\mathcal{I}$  und Hohlräume  $\mathcal{H}$  seien die als Phasen ausgezeichneten Teilbereiche der Mikrostruktur  $\mathcal{B}$ , in denen Feldvariablen stetig und integrierbar sind. Zudem soll die Mikrostruktur geometrische Diskontinuitäten  $\mathcal{D} = \mathcal{D}^+ + \mathcal{D}^-$  aufweisen, an denen Feldvariablen  $\{\cdot\}$  entsprechend Abb. 17 als Sprungfunktionen

$$[[\{\cdot\}]](\mathbf{X}^{\mathcal{D}}) = \lim_{X^+ \rightarrow X^{\mathcal{D}^+}} \{\cdot\}(X^+) - \lim_{X^- \rightarrow X^{\mathcal{D}^-}} \{\cdot\}(X^-) \quad (\text{III.1.3})$$

definiert sind. Geometrische Diskontinuitäten können als Hohlräume aufgefaßt werden, bei denen eine der drei Dimensionen infinitesimal klein ist. In diesem Sinne teilt  $\partial\mathcal{F} = \partial\mathcal{B} + \partial\mathcal{H} + \mathcal{D}$  die Mikrostruktur  $\mathcal{B}$  in zwei glatte Teilbereiche: in einen inneren Festkörperbereich  $\mathcal{F} = \mathcal{M} + \mathcal{I}$  und in einen äußeren Bereich. Normalenvektoren  $N$  auf  $\partial\mathcal{H}$  und  $\mathcal{D}$  zeigen stets ins Innere von  $\mathcal{F}$ , auf  $\partial\mathcal{B}$  hingegen weisen sie nach außen. Bei kleinen Verzerrungen sei auf  $\partial\mathcal{B}$ ,  $\partial\mathcal{H}$  und  $\mathcal{D}$  der Normalenvektor  $\mathbf{n}$  definiert. Wesentliche Voraussetzung für die Anwendung des Konzepts vom repräsentativen Volumenelement ist eine ausgeprägte Separation von Mikro- und Makroskala. In diesem Fall lassen sich mikroskopische Feldgrößen, wie



**Abbildung 17:**  $\mathcal{RVE}$  der Mikrostruktur in der Referenzkonfiguration mit Einschluß  $\mathcal{I}$ , Hohlraum  $\mathcal{H}$  und Diskontinuität  $\mathcal{D} = \mathcal{D}^+ + \mathcal{D}^-$ .

Deformationen, Verzerrungen, Spannungen, in der Form

$$\{\cdot\} = \overline{\{\cdot\}} + \tilde{\{\cdot\}} \quad (\text{III.1.4})$$

als Komposition eines makroskopisch homogenen Anteils  $\overline{\{\cdot\}}$  und eines mikroskopischen Fluktuationsterms  $\tilde{\{\cdot\}}$  darstellen. In einem  $\mathcal{RVE}$  ohne Diskontinuitäten sind Makrovariablen  $\{\cdot\}$  mit dem Volumenmittelwert  $\overline{\{\cdot\}} = \frac{1}{V} \int_{\mathcal{B}} \{\cdot\} dV$  gleichzusetzen bezogen auf das Volumen  $V = |\mathcal{B}|$  des in der Referenzlage verharrenden  $\mathcal{RVE}$ s.

### 1.2.1. Definition makroskopischer Deformationen und Verzerrungen

Bei großem Skalenunterschied läßt sich das Verschiebungsfeld im  $\mathcal{RVE}$

$$\varphi = \bar{F}X + \tilde{w} \quad \forall X \in \mathcal{B} \quad (\text{III.1.5})$$

als Überlagerung eines makroskopisch gleichförmigen Modes  $\bar{F}X$  und eines mikroskopischen Fluktuationsverschiebungsfelds  $\tilde{w}$  darstellen. In (III.1.5) sei  $\tilde{w}$  eine zumindest einfach stetig differenzierbare Funktion der Ortsvariablen  $X$ . Als Makrovariable ist  $\bar{F}$  entsprechend den Vorbemerkungen zu diesem Abschnitt 1 aus Randtermen der mikroskopischen Größe  $F$  auf  $\partial\mathcal{B}$  zu bilden. Unter dieser kinematischen Voraussetzung kommt der Volumenmittelwert

$$\frac{1}{V} \int_{\mathcal{F}+\mathcal{H}} F dV = \frac{1}{V} \left\{ \int_{\partial\mathcal{B}} \varphi \otimes N dA - \int_{\mathcal{D}} [[\varphi]] \otimes N dA \right\} \quad (\text{III.1.6})$$

der in  $\mathcal{F}$  und  $\mathcal{H}$  stetigen Variablen  $F$  als makroskopische Größe nicht in Betracht. Bei der Umformung des Volumenintegrals wurde in (III.1.6) vom Gaußschen Integralsatz Gebrauch gemacht. Der makroskopische Deformationsgradient

$$\bar{F} = \frac{1}{V} \int_{\partial\mathcal{B}} \varphi \otimes N dA = \frac{1}{V} \left\{ \int_{\mathcal{F}+\mathcal{H}} F dV + \int_{\mathcal{D}} [[\varphi]] \otimes N dA \right\} \quad (\text{III.1.7})$$

wird basierend auf (III.1.6) als Funktion der Randdeformation  $\varphi \in \partial\mathcal{B}$  definiert, der in Abwesenheit von Unstetigkeiten im  $\mathcal{RVE}$  gleich dem Volumenmittelwert von  $F$  ist. Die mikroskopische Rate  $\dot{F} = \partial_X \dot{\varphi}$  ist mit der makroskopischen Rate  $\dot{\bar{F}} \equiv \dot{\bar{F}}$  ebenso in der Form (III.1.7) zu verknüpfen. In (III.1.7) garantiert  $N \cdot [[\varphi]] > 0$ , daß sich Materie an Unstetigkeitsstellen  $X \in \mathcal{D}$  nicht durchdringen kann. Einsetzen von (III.1.5) in (III.1.7) ergibt als Nebenbedingung

$$\int_{\partial\mathcal{B}} \tilde{w} \otimes N dA = \mathbf{0} \quad (\text{III.1.8})$$

für Verschiebungsfuktuationen. Formal gesehen können jetzt mit dem effektiven Deformationsgradienten (III.1.7) weitere kontinuumsmechanische Verzerrungs- und Deformationsmaße auf der Makroskale abgeleitet werden. In der Regel weichen auf diese Weise gewonnene Makrovariablen von denen ab, die im  $\mathcal{R}\mathcal{V}\mathcal{E}$  ebenso wie  $\bar{\mathbf{F}}$  als homogenisierte Funktionen der Randverschiebungen auf  $\partial\mathcal{B}$  definiert werden. Beispielsweise gilt für den effektiven Rechten Cauchy-Green-Tensor im Allgemeinen  $\bar{\mathbf{C}} = \overline{\mathbf{F}^T \mathbf{F}} = \bar{\mathbf{F}}^T \bar{\mathbf{F}} + \overline{\tilde{\mathbf{F}}^T \tilde{\mathbf{F}}} \neq \bar{\mathbf{F}}^T \bar{\mathbf{F}}$  mit  $\tilde{\mathbf{F}} = \partial_{\mathbf{x}} \tilde{\mathbf{w}}$ . Als homogenisierte Größen haben alle Verzerrungs- und Deformationsmaße mit Ausnahme des Deformationsgradienten die unangenehme Eigenschaft, daß sie in einem  $\mathcal{R}\mathcal{V}\mathcal{E}$  ohne Diskontinuitäten nicht als Volumenmittelwerte der zugehörigen Mikrovariablen darstellbar sind. Man betrachtet daher  $\bar{\mathbf{F}}$  als zentrale kinematische Makrovariable, mit der alle anderen kinematischen Größen auf der Makroskale zu bilden sind. Im Rahmen der Theorie kleiner Verzerrungen stellt sich das Verschiebungsfeld analog zu (III.1.5) in der Form

$$\mathbf{u} = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \mathbf{x} + \tilde{\mathbf{w}} \quad \forall \mathbf{x} \in \mathcal{B} \quad (\text{III.1.9})$$

als Überlagerung eines makroskopisch linearen Anteils  $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \mathbf{x}$  und eines Fluktuationsterms  $\tilde{\mathbf{w}}$  dar. Das makroskopische Verzerrungsfeld

$$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}} = \frac{1}{V} \int_{\partial\mathcal{B}} \text{sym}[\mathbf{u} \otimes \mathbf{n}] dA = \frac{1}{V} \left\{ \int_{\mathcal{F}+\mathcal{H}} \boldsymbol{\varepsilon} dV + \int_{\mathcal{D}} \text{sym}[[\mathbf{u}] \otimes \mathbf{n}] dA \right\} \quad (\text{III.1.10})$$

und seine Rate sind wie  $\bar{\mathbf{F}}$  als Funktionen der Randverschiebungen  $\mathbf{u} \in \partial\mathcal{B}$  zu formulieren.

### 1.2.2. Definition makroskopischer Spannungen

Die makroskopischen 1. P.-K.-Spannungen  $\bar{\mathbf{P}}$  werden hier aus in  $\mathcal{F}$  stetigen Spannungen  $\mathbf{P}$  gewonnen. Es wird angenommen, daß mit Ausnahme des Festkörperskeletts  $\mathcal{F}$  alle anderen Teilbereiche von  $\mathcal{B}$  spannungsfrei sind. Mit Hilfe des Gaußschen Integralsatzes erhält man zusammen mit (III.1.2)<sub>1</sub> als Volumenmittelwert

$$\frac{1}{V} \int_{\mathcal{F}} \mathbf{P} dV = \frac{1}{V} \left\{ \int_{\partial\mathcal{B}} \mathbf{P} \mathbf{N} \otimes \mathbf{X} dA - \int_{\mathcal{D}} [[\mathbf{P} \mathbf{N}]] \otimes \mathbf{X} dA \right\} \quad (\text{III.1.11})$$

Die Kontinuitätsbedingung  $[[\mathbf{P}]] \mathbf{N} = \mathbf{0}$  bewahrt an Unstetigkeitsstellen  $\mathbf{X} \in \mathcal{D}$  das Kräftegleichgewicht. Die effektiven 1. P.-K.-Spannungen

$$\bar{\mathbf{P}} = \frac{1}{V} \int_{\partial\mathcal{B}} \mathbf{T} \otimes \mathbf{X} dA = \frac{1}{V} \int_{\mathcal{F}} \mathbf{P} dV \quad (\text{III.1.12})$$

können daher alternativ als Funktionen der Randspannungsvektoren  $\mathbf{T} = \mathbf{P} \mathbf{N} \in \partial\boldsymbol{\varphi}(\mathcal{B})$  oder als Volumenmittelwerte der Mikrospannungen  $\mathbf{P}$  definiert werden. Spannungsraten  $\dot{\bar{\mathbf{P}}}$  sind mit den effektiven Raten  $\dot{\bar{\mathbf{P}}} \equiv \dot{\bar{\mathbf{P}}}$  ebenso in der Form (III.1.12) gekoppelt. Randspannungsvektoren müssen Kräfte- und Momentengleichgewicht

$$\int_{\partial\mathcal{B}} \mathbf{T} dA = \mathbf{0} \quad \text{und} \quad \int_{\partial\mathcal{B}} \mathbf{x} \times \mathbf{T} dA = \mathbf{0} \quad (\text{III.1.13})$$

des  $\mathcal{R}\mathcal{V}\mathcal{E}$ s erfüllen.  $\mathbf{x} \in \boldsymbol{\varphi}(\mathcal{B})$  ist ein Element der aktuellen Konfiguration. Kräftegleichgewicht gewährleistet bezüglich der Wahl des Koordinatenursprungs translationsinvariante effektive Spannungen  $\bar{\mathbf{P}}$ , da (III.1.12) bei einem um  $\mathbf{X}_0 \in \mathcal{B}$  in seiner Lage verschobenen  $\mathcal{R}\mathcal{V}\mathcal{E}$

wegen  $\int_{\partial\mathcal{B}} \mathbf{T} \otimes \mathbf{X}_0 dA = \int_{\partial\mathcal{B}} \mathbf{T} dA \otimes \mathbf{X}_0 = \mathbf{0}$  gleich bleibt. Abschnitt 1.3.3 des Kapitels II folgend ist die Symmetrieeigenschaft  $\overline{\mathbf{P}\mathbf{F}^T} = \overline{\mathbf{F}\mathbf{P}^T}$  mit  $\overline{\mathbf{P}\mathbf{F}^T} = \frac{1}{V} \int_{\partial\mathcal{B}} \mathbf{T} \otimes \boldsymbol{\varphi} dA$  eine Konsequenz von (III.1.13)<sub>2</sub>. Aus dieser Symmetrieeigenschaft ergibt sich in Verbindung mit der Zerlegung  $\mathbf{P} = \bar{\mathbf{P}} + \tilde{\mathbf{P}}$  und den kinematischen Beziehungen (III.1.5) und (III.1.8)

$$\bar{\mathbf{P}}\bar{\mathbf{F}}^T + \int_{\partial\mathcal{B}} \tilde{\mathbf{P}}\mathbf{N} \otimes \tilde{\mathbf{w}} dA = \bar{\mathbf{F}}\bar{\mathbf{P}}^T + \int_{\partial\mathcal{B}} \tilde{\mathbf{w}} \otimes \tilde{\mathbf{P}}\mathbf{N} dA \quad (\text{III.1.14})$$

In einem statistisch homogenen  $\mathcal{R}\mathcal{V}\mathcal{E}$  sind effektive Spannungen invariant bezüglich auf  $\partial\mathcal{B}$  definierten Randbedingungen. Es ist daher sinnvoll, als Pendant zur mikroskopischen Symmetrie (II.1.37) eine ebensolche Symmetrie

$$\bar{\mathbf{P}}\bar{\mathbf{F}}^T = \bar{\mathbf{F}}\bar{\mathbf{P}}^T \quad (\text{III.1.15})$$

auf der Makroskala zu fordern. Die makroskopische Drallbilanz (III.1.15) wird automatisch erfüllt, wenn die makroskopischen Größen (III.1.7) und (III.1.12) stets auf die aktuelle Konfiguration des  $\mathcal{R}\mathcal{V}\mathcal{E}$ s bezogen werden. In diesem Fall ergibt sich (III.1.15) zu  $\bar{\mathbf{P}} = \bar{\mathbf{P}}^T$  mit  $\bar{\mathbf{F}} = \mathbf{1}$  als zweistufiger Einheitstensor. Im nächsten Abschnitt 1.3 wird gezeigt, daß die makroskopische Drallbilanz (III.1.15) auch bei Annahme linearer oder periodischer Randverschiebungen oder homogener Randspannungen auf  $\partial\mathcal{B}$  a priori gewährleistet ist. Raten effektiver 1. P.-K.-Spannungen weisen bei ähnlichen Voraussetzungen ebenso Symmetrien der Form (III.1.15) auf. Mit  $\bar{\mathbf{F}}$  und  $\bar{\mathbf{P}}$  können aus (II.1.24) weitere makroskopische Spannungsmaße gewonnen werden. Homogenisierte und auf diese Weise erhaltene makroskopische Kirchhoff- und Cauchy-Spannungen sind unter der Voraussetzung der makroskopischen Drehimpulserhaltung (III.1.15) identisch. Mit Hilfe des Gaußschen Integralsatzes ergeben sich unter Berücksichtigung von  $J \operatorname{div}[\boldsymbol{\sigma}] = \operatorname{div}[\boldsymbol{\tau}] = \mathbf{0}$  in  $\mathcal{B}$  als effektive Kirchhoff-Spannungen

$$\bar{\boldsymbol{\tau}} = \frac{1}{V} \int_{\mathcal{F}} \mathbf{P}\mathbf{F}^T dV = \frac{1}{V} \int_{\partial\mathcal{B}} J \operatorname{sym}[\mathbf{t} \otimes \boldsymbol{\varphi}] dA \equiv \bar{\mathbf{P}}\bar{\mathbf{F}}^T \quad (\text{III.1.16})$$

und als effektive Cauchy-Spannungen

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{1}{v} \int_{\varphi(\mathcal{F})} \boldsymbol{\sigma} dv = \frac{1}{v} \int_{\partial\varphi(\mathcal{B})} \operatorname{sym}[\mathbf{t} \otimes \boldsymbol{\varphi}] da \equiv \frac{1}{\bar{J}} \bar{\mathbf{P}}\bar{\mathbf{F}}^T \quad (\text{III.1.17})$$

mit dem Volumen  $v$  des aktuellen  $\mathcal{R}\mathcal{V}\mathcal{E}$ s. In (III.1.16) und (III.1.17) wurde das Cauchy-Theorem (II.1.21) einbezogen. Die effektive Jakobideterminante ist mit

$$\bar{J} = \frac{v}{V} = \frac{1}{V} \int_{\mathcal{F}+\mathcal{H}} J dV = \frac{1}{V} \int_{\varphi(\mathcal{F}+\mathcal{H})} dv \quad (\text{III.1.18})$$

zu identifizieren. Effektive 2. P.-K.-Spannungen  $\bar{\mathbf{S}} = \overline{\mathbf{F}^{-1}\mathbf{P}}$  lassen sich basierend auf dem Gaußschen Integralsatz und der Identität  $\operatorname{DIV}[\mathbf{P}] = \mathbf{F} \operatorname{DIV}[\mathbf{F}^{-1}\mathbf{P}] = \mathbf{0}$  in  $\mathcal{B}$  alternativ als Funktionen der Lagrangeschen Spannungsvektoren  $\mathbf{F}^{-1}\mathbf{T} \in \partial\mathcal{B}$  und als Volumenmittelwert von  $\mathbf{F}^{-1}\mathbf{P}$  darstellen. Generell gilt  $\bar{\mathbf{S}} \neq \bar{\mathbf{F}}^{-1}\bar{\mathbf{P}}$ . Unter den Voraussetzungen eines statistisch homogenen  $\mathcal{R}\mathcal{V}\mathcal{E}$ s ist  $\bar{\mathbf{S}}$  unabhängig von darin definierten Randbedingungen. In diesem Fall ist

$$\bar{\mathbf{S}} = \frac{1}{V} \int_{\mathcal{F}} \mathbf{F}^{-1}\mathbf{P} dV = \frac{1}{V} \int_{\partial\mathcal{B}} \operatorname{sym}[\mathbf{F}^{-1}\mathbf{T} \otimes \mathbf{X}] dA \equiv \bar{\mathbf{F}}^{-1}\bar{\mathbf{P}} \quad (\text{III.1.19})$$



Im nächsten Abschnitt wird gezeigt, daß in Einheitszellen einer periodischen Mikrostruktur im Allgemeinen  $\bar{\mathbf{S}} \neq \bar{\mathbf{F}}^{-1} \bar{\mathbf{P}}$ . Effektive 2. P.-K.-Spannungen  $\bar{\mathbf{S}}$  sind stets mit  $\bar{\mathbf{F}}^{-1} \bar{\mathbf{P}}$  gleichzusetzen, wenn als Bezugsplatzierung die aktuelle Konfiguration des  $\mathcal{RVE}$ s angenommen wird. Hier gilt wegen  $\mathbf{F} = \mathbf{1}$  die Beziehung  $\bar{\mathbf{S}} = \bar{\mathbf{P}}$ . Zusammenfassend besteht zwischen 1. P.-K.-, Kirchhoff- und Cauchy-Spannungen generell der Zusammenhang

$$\boxed{\bar{\mathbf{P}} = \bar{\boldsymbol{\tau}} \bar{\mathbf{F}}^{-T} = \bar{\mathbf{J}} \bar{\boldsymbol{\sigma}} \bar{\mathbf{F}}^{-T}} \quad (\text{III.1.20})$$

wenn die makroskopische Drallbilanz (III.1.15) erfüllt ist. Zwischen den zugehörigen makroskopischen Spannungsraten kann ein ebensolcher Bezug hergestellt werden. Bei kleinen Verzerrungen ergibt sich der makroskopische Spannungstensor

$$\boxed{\bar{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{1}{V} \int_{\mathcal{F}} \boldsymbol{\sigma} dV = \frac{1}{V} \int_{\partial \mathcal{B}} \text{sym}[\mathbf{t} \otimes \mathbf{x}] dA} \quad (\text{III.1.21})$$

für  $\mathbf{x} \in \mathcal{B}$  in voller Analogie zu (III.1.12) als Funktion der Randspannungen  $\mathbf{t} = \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} \in \partial \mathcal{B}$  oder als Volumenmittelwert. Die Kontinuitätsbedingung  $[[\boldsymbol{\sigma}]] \mathbf{n} = \mathbf{0}$  bewahrt das Kräftegleichgewicht an Unstetigkeitsstellen  $\mathbf{x} \in \mathcal{D}$ . Aus der Symmetrie  $\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}^T$  der mikroskopischen Spannungen folgt  $\bar{\boldsymbol{\sigma}} = \bar{\boldsymbol{\sigma}}^T$ . Damit effektive Spannungen (III.1.21) zudem unabhängig vom Koordinatenursprung sind, müssen Spannungsvektoren  $\mathbf{t}$  das Kräftegleichgewicht  $\int_{\partial \mathcal{B}} \mathbf{t} dA = \mathbf{0}$  erhalten.

### 1.3. Hill-Bedingung

Die nach HILL [77] benannte Hill-Bedingung ist eine fundamentale Beziehung in der Mehrskalenmodellierung. Sie fordert, daß die makroskopische Spannungsleistung  $\bar{\mathbf{P}} : \dot{\bar{\mathbf{F}}}$  (oder Formänderungsarbeit oder virtuelle Arbeit) gleich dem Mittelwert  $\overline{\mathbf{P} : \dot{\mathbf{F}}}$  der mikroskopischen Spannungsleistung (oder Arbeit oder virtuellen Arbeit) im  $\mathcal{RVE}$  ist, d.h.

$$\boxed{\bar{\mathbf{P}} : \dot{\bar{\mathbf{F}}} = \overline{\mathbf{P} : \dot{\mathbf{F}}}} \quad (\text{III.1.22})$$

Siehe in diesem Zusammenhang auch HUET [79]. In STOLZ [144] wird die Hill-Bedingung auch Hill-Mandel-Makrohomogenitätsbedingung genannt. Aus der Hill-Bedingung können auf kanonische Weise drei typische Randbedingungen für das  $\mathcal{RVE}$  abgeleitet werden. Diese sind für die arbeitskonjugierten Variablen  $\{\mathbf{P}, \mathbf{F}\}$  zu spezifizieren. Bei der Auswertung der Hill-Bedingung wird angenommen, daß Hohlräume  $\mathcal{H}$  spannungsfrei sind. Der effektive Mittelwert

$$\overline{\mathbf{P} : \dot{\mathbf{F}}} = \frac{1}{V} \int_{\partial \mathcal{B}} \mathbf{P} \mathbf{N} \cdot \dot{\boldsymbol{\varphi}} dA = \frac{1}{V} \left\{ \int_{\mathcal{F}} \mathbf{P} : \dot{\mathbf{F}} dV + \int_{\mathcal{D}} \mathbf{P} \mathbf{N} \cdot [[\dot{\boldsymbol{\varphi}}]] dA \right\} \quad (\text{III.1.23})$$

ist entsprechend den Vorbemerkungen zu diesem Abschnitt 1.2 als Randterm aus Randspannungen und -verschiebungen auf  $\partial \mathcal{B}$  definiert. Das Oberflächenintegral in (III.1.23) wird mit Hilfe des Gaußschen Integralsatzes und der lokalen Impulsbilanz (III.1.2)<sub>1</sub> in zwei Terme, einen Volumenmittelwert und einen Sprungterm, umgeformt. In einem  $\mathcal{RVE}$  ohne Diskontinuitäten ist  $\overline{\mathbf{P} : \dot{\mathbf{F}}}$  gleich dem Volumenmittelwert von  $\mathbf{P} : \dot{\mathbf{F}}$ . In Verbindung mit der Zerlegung  $\mathbf{P} = \bar{\mathbf{P}} + \tilde{\mathbf{P}}$  und den kinematischen Beziehungen (III.1.5) und (III.1.8) ergibt sich aus (III.1.23)

$$\overline{\mathbf{P} : \dot{\mathbf{F}}} - \bar{\mathbf{P}} : \dot{\bar{\mathbf{F}}} = \frac{1}{V} \int_{\partial \mathcal{B}} \tilde{\mathbf{P}} \mathbf{N} \cdot \dot{\boldsymbol{\varphi}} dA \quad (\text{III.1.24})$$

Die Hill-Bedingung wird erhalten, wenn die rechte Seite von (III.1.24) verschwindet. Dies ist der Fall bei (i) linearen Verschiebungen  $\tilde{\mathbf{w}} = \boldsymbol{\varphi} - \bar{\mathbf{F}}\mathbf{X} = \mathbf{0}$ , (ii) periodischen Verschiebungen oder (iii) homogenen Spannungen  $\tilde{\mathbf{P}}\mathbf{N} = (\mathbf{P} - \bar{\mathbf{P}})\mathbf{N} = \mathbf{0}$  auf dem Rand  $\partial\mathcal{B}$ . Bei periodischen Randverschiebungen wird der Rand  $\partial\mathcal{B}$  entsprechend Abb. 18b in Randabschnitte  $\partial\mathcal{B}^+$  und  $\partial\mathcal{B}^-$  unterteilt, in denen Randpunkte  $\mathbf{X}^+ \in \partial\mathcal{B}^+$  und  $\mathbf{X}^- \in \partial\mathcal{B}^-$  mit nach außen gerichteten Normalenvektoren  $\mathbf{N}^+ = -\mathbf{N}^-$  einander zugeordnet sind. In den Randpunkten sind Fluktuationsverschiebungen durch  $\tilde{\mathbf{w}} := \tilde{\mathbf{w}}^+ = \tilde{\mathbf{w}}^-$  miteinander gekoppelt. Setzt man (III.1.5) mit dieser Eigenschaft in (III.1.24) ein, erhält man unter der Voraussetzung (III.1.22)

$$\int_{\partial\mathcal{B}^+} \tilde{\mathbf{T}}^+ \cdot \dot{\tilde{\mathbf{w}}} \, dA + \int_{\partial\mathcal{B}^-} \tilde{\mathbf{T}}^- \cdot \dot{\tilde{\mathbf{w}}} \, dA = \int_{\partial\mathcal{B}^+} (\tilde{\mathbf{T}}^+ + \tilde{\mathbf{T}}^-) \cdot \dot{\tilde{\mathbf{w}}} \, dA = 0 \quad (\text{III.1.25})$$

mit Spannungsvektoren  $\tilde{\mathbf{T}}^+ = \tilde{\mathbf{P}}^+\mathbf{N}^+$  und  $\tilde{\mathbf{T}}^- = \tilde{\mathbf{P}}^-\mathbf{N}^-$ . Randspannungen  $\mathbf{T}^+ = -\mathbf{T}^-$  müssen demnach antiperiodisch auf  $\partial\mathcal{B}$  sein, damit bei beliebigen Verschiebungsfuktuationen  $\tilde{\mathbf{w}}$  die Hill-Bedingung erfüllt ist. In den Einheitszellen einer periodischen Mikrostruktur ist zu beachten, daß aus der Antiperiodizität der Spannungsvektoren in der Regel  $\bar{\mathbf{S}} = \frac{1}{V} \int_{\partial\mathcal{B}} \mathbf{F}^{-1}\mathbf{T} \otimes \mathbf{X} \, dA = \frac{1}{V} \int_{\partial\mathcal{B}^+} \mathbf{F}^{-1}\mathbf{T} \otimes [\mathbf{X}] \, dA \neq \bar{\mathbf{F}}^{-1}\bar{\mathbf{P}}$  folgt. Die oben genannten Randbedingungen (i)–(iii) erhalten die makroskopische Drallbilanz (III.1.15) ohne zusätzliche Anforderungen an die Größe des  $\mathcal{R}\mathcal{V}\mathcal{E}$ s, sodaß die Identität der makroskopischen Spannungsmaße (III.1.20) stets gewährleistet ist. Bei kleinen Verzerrungen schreibt sich die Hill-Bedingung

$$\boxed{\bar{\boldsymbol{\sigma}} : \dot{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}} = \overline{\boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}}} \quad (\text{III.1.26})$$

analog zu (III.1.22). Diese ist erfüllt, wenn als Randbedingungen auf  $\partial\mathcal{B}$  entweder (i) lineare Randverschiebungen  $\tilde{\mathbf{w}} = \mathbf{u} - \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}\mathbf{x} = \mathbf{0}$ , (ii) periodische Randverschiebungen  $\tilde{\mathbf{w}}^+ = \tilde{\mathbf{w}}^-$  und antiperiodische Randspannungen  $\tilde{\boldsymbol{\sigma}}^+\mathbf{n} = -\tilde{\boldsymbol{\sigma}}^-\mathbf{n}$  oder (iii) homogene Randspannungen  $\tilde{\boldsymbol{\sigma}}\mathbf{n} = (\boldsymbol{\sigma} - \bar{\boldsymbol{\sigma}})\mathbf{n} = \mathbf{0}$  angenommen werden.

## 1.4. Makroskopisches und mikroskopisches Randwertproblem

Das Randwertproblem auf der Makro- und Mikroskala wird hier in Anlehnung an Abschnitt 2.1 spezifiziert. Größen auf der Makroskala werden zur Unterscheidung von den mikroskopischen mit einem Überstrich versehen. Um Stabilität des Makrokontinuums zu bewahren, werden Voraussetzungen aufgezeigt, unter denen Eindeutigkeit der effektiven Spannungsantwort gewährleistet ist. Der Definitionsbereich effektiver Variablen kann durch speziell gewählte Randbedingungen im  $\mathcal{R}\mathcal{V}\mathcal{E}$  eingegrenzt werden. Die in dieser Arbeit diskutierten Homogenisierungsmodelle können so hinsichtlich Effizienz physikalisch verifiziert werden.

### 1.4.1. Randwertproblem auf der Makroskala

Im Rahmen finiter Deformationen sei  $\bar{\mathcal{B}} \subset \mathcal{R}^3$  die Referenzkonfiguration des betrachteten materiellen Körpers. Auf der Makroskala ist

$$\text{DIV}[\bar{\mathbf{P}}] + \bar{\rho}_0\bar{\boldsymbol{\gamma}} = \mathbf{0} \quad \text{in } \bar{\mathcal{B}} \quad (\text{III.1.27})$$

die Impulsbilanz in der Lagrangeschen Darstellung. Im Kontext einer deformationsgetriebenen Homogenisierung, bei der makroskopische Spannungen  $\bar{\mathbf{P}}$  auf der Mikroskala als Funktionen der Mikroheterogenität und des makroskopischen Deformationsgradienten

$$\bar{\mathbf{F}} = \partial_{\bar{\mathbf{x}}}\bar{\boldsymbol{\varphi}}(\bar{\mathbf{X}}) \quad \text{in } \bar{\mathcal{B}} \quad (\text{III.1.28})$$



zu berechnen sind, ist die nichtlineare Deformationsabbildung  $\bar{\varphi}$  eine auf der Makroskale vorgegebene Größe. Die Deformationsabbildung muß mindestens einfach stetig differenzierbar sein. Die Jakobideterminante des makroskopischen Deformationsgradienten ist  $\bar{J} = \det[\bar{F}] > 0$ . Im Fall einer spannungsgetriebenen Homogenisierung ist  $\bar{F}$  bei gegebenem makroskopischen Spannungszustand  $\bar{P}$  als Mittelwert auf der Mikroskale zu bestimmen. Analog zu (II.2.5) sind bei der Lösung des makroskopischen Randwertproblems die Randbedingungen

$$\bar{P}\bar{N} = \bar{T} \text{ auf } \partial\bar{\mathcal{B}}_t \quad \text{und} \quad \bar{u} = \bar{u}_0 \text{ auf } \partial\bar{\mathcal{B}}_u \quad (\text{III.1.29})$$

mit der Zerlegung  $\partial\bar{\mathcal{B}} = \partial\bar{\mathcal{B}}_t \cup \partial\bar{\mathcal{B}}_u$ ,  $\partial\bar{\mathcal{B}}_t \cap \partial\bar{\mathcal{B}}_u = \emptyset$ , in einen Anteil  $\partial\bar{\mathcal{B}}_t$  mit vorgeschriebenen Lasten  $\bar{T}$  und einen Anteil  $\partial\bar{\mathcal{B}}_u$  mit vorgeschriebenen Verschiebungen  $\bar{u}_0$  einzuhalten. Vektor  $\bar{N}$  ist die nach außen weisende Normale auf  $\partial\bar{\mathcal{B}}_t$ . Bei kleinen Verzerrungen sei  $\bar{\mathcal{B}} \subset \mathcal{R}^3$  das Makrokontinuum, in dem der Gleichgewichtszustand durch

$$\text{div}[\bar{\sigma}] + \bar{\rho}\bar{\gamma} = \mathbf{0} \quad \text{in } \bar{\mathcal{B}} \quad (\text{III.1.30})$$

beschrieben wird. Analog zu finiten Deformationen wird im Rahmen einer verzerrungsgesteuerten Homogenisierung die kinematische Feldgleichung

$$\bar{\varepsilon} = \text{sym}[\partial_{\bar{x}}\bar{u}] \quad \text{in } \bar{\mathcal{B}} \quad (\text{III.1.31})$$

auf der Makroskale vorausgesetzt und der zugehörige effektive Spannungstensor  $\bar{\sigma}$  bestimmt. Bei spannungsgetriebener Homogenisierung ist  $\bar{\varepsilon}$  bei vorgeschriebenem  $\bar{\sigma}$  auf der Mikroskale zu berechnen. Als wesentliche Randbedingungen sind analog zu (III.1.29)

$$\bar{\sigma}\bar{n} = \bar{t} \text{ auf } \partial\bar{\mathcal{B}}_t \quad \text{und} \quad \bar{u} = \bar{u}_0 \text{ auf } \partial\bar{\mathcal{B}}_u \quad (\text{III.1.32})$$

mit vorgeschriebenen Lasten  $\bar{t}$  auf  $\partial\bar{\mathcal{B}}_t$  und mit vorgeschriebenen Verschiebungen  $\bar{u}_0$  auf  $\partial\bar{\mathcal{B}}_u$  einzubeziehen. Vektor  $\bar{n}$  ist die nach außen zeigende Normale auf  $\partial\bar{\mathcal{B}}_t$ .

#### 1.4.2. Randwertproblem auf der Mikroskale

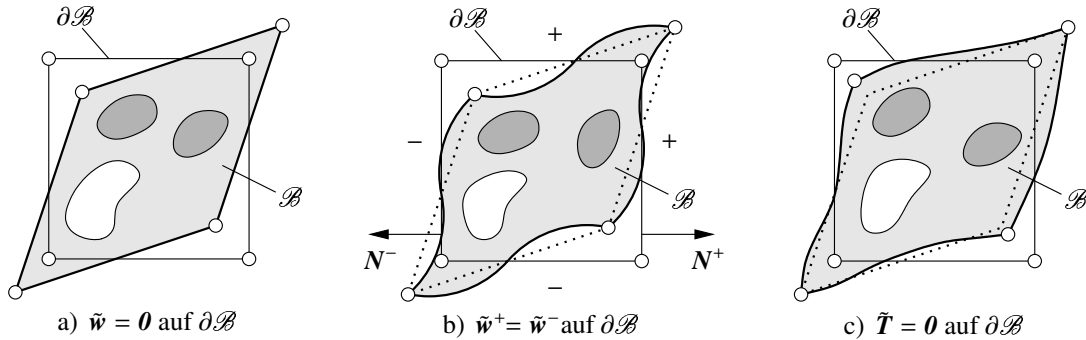
Es sei  $\mathcal{B} \subset \mathcal{R}^3$  ein charakteristischer Ausschnitt der Mikrostruktur in der Referenzkonfiguration. Auf der Mikroskale werden als statische, kinematische und konstitutive Feldgleichung

$$\left. \begin{array}{l} \text{DIV}[\mathbf{P}] = \mathbf{0} \\ \mathbf{F} - \partial_X \boldsymbol{\varphi} = \mathbf{0} \\ \mathbf{P} - \partial_F W = \mathbf{0} \end{array} \right\} \text{ in } \mathcal{B} \quad (\text{III.1.33})$$

betrachtet. Bei elastischen Deformationen ist  $W$  die Freie Energiefunktion  $\psi$ , bei inelastischen Verformungsprozessen ein inkrementelles Spannungspotential. Auf  $\partial\mathcal{B}$  stellen Schnittkräfte des aus der Mikrostruktur herausgetrennten Teilbereichs  $\mathcal{B}$  wahre Randbedingungen dar, mit denen basierend auf obigen Feldgleichungen der reale Verschiebungszustand in  $\mathcal{B}$  berechnet werden kann. Da die Schnittkräfte in der Regel unbekannt sind, wird als Approximation eine der Randbedingungen

<div style="display: flex; justify-content: space-between; align-items: center;"> <div style="flex: 1;"> <ul style="list-style-type: none"> <li>(i) Lineare Randverschiebungen <math>\boldsymbol{\varphi} = \bar{F}X</math></li> <li>(ii) Periodische Randverschiebungen <math>\tilde{w}^+ = \tilde{w}^- \wedge \tilde{T}^+ = -\tilde{T}^-</math></li> <li>(iii) Homogene Randspannungen <math>\mathbf{T} = \bar{P}N</math></li> </ul> </div> <div style="flex: 0.5; font-size: 3em; font-weight: bold; line-height: 1;">}</div> <div style="flex: 0.5; text-align: right;">auf <math>\partial\mathcal{B}</math> (III.1.34)</div> </div>
--

vorgegeben, welche auf kanonische Weise aus der Hill-Bedingung (III.1.24) extrahiert werden. Zudem ist die Größe des  $\mathcal{RVE}$ s nichtperiodischer Mikrostrukturen so zu wählen, daß in  $\mathcal{B}$  berechnete Makrovariablen weitgehend invariant bezüglich beliebigen Randbedingungen sind. In Abb. 18 werden die Randbedingungen (i)–(iii) anhand einer typischen Mikrostruktur visuali-



**Abbildung 18:** Homogenisierung auf Basis alternativer Randbedingungen: a) lineare Randverschiebungen, b) periodische Randverschiebungen und antiperiodische Spannungsrandbedingungen und c) homogene Spannungsrandbedingungen.

siert. In einem weiteren Subabschnitt wird gezeigt, daß Randbedingung (i) und (iii) die effektive Materialantwort generell nach oben und unten einschränken. Bei beliebiger Wahl eines finiten  $\mathcal{RVE}$ s kann der physikalisch zulässige Bereich für Makrovariablen somit eingegrenzt werden. Bei periodischen Mikrostrukturen ist die Ausdehnung von  $\mathcal{B}$  auf eine Einheitszelle begrenzt. Aufgrund der Topologie der Mikrostruktur sind Fluktuationen in Deformationen typischerweise periodisch, sodaß hier die Vorgabe periodischer Randverschiebungen auf  $\partial\mathcal{B}$  exakt ist. Wie in Abschnitt 1.3 bereits beschrieben, wird der Rand hierbei in zwei Bereiche  $\partial\mathcal{B}^+$  und  $\partial\mathcal{B}^-$  aufgeteilt, in denen Verschiebungen von einander zugeordneten Punkten  $\mathbf{X}^+ \in \partial\mathcal{B}^+$  und  $\mathbf{X}^- \in \partial\mathcal{B}^-$  miteinander gekoppelt werden. Bei kleinen Verzerrungen sei  $\mathcal{B} \in \mathcal{R}^3$  der Mikrostrukturausschnitt, hinsichtlich dem folgende Feldgleichungen betrachtet werden:

$$\left. \begin{aligned} \operatorname{div}[\boldsymbol{\sigma}] &= \mathbf{0} \\ \boldsymbol{\varepsilon} - \operatorname{sym}[\partial_x \mathbf{u}] &= \mathbf{0} \\ \boldsymbol{\sigma} - \partial_\varepsilon W &= \mathbf{0} \end{aligned} \right\} \text{ in } \mathcal{B} \quad (\text{III.1.35})$$

Bei elastischen Deformationen ist  $W$  die Freie Energiefunktion  $\psi$ , bei inelastischen Verformungsprozessen das in (II.2.48) definierte interne Spannungspotential  $W$ . Randbedingungen werden analog zu (III.1.34) definiert als

$$\left. \begin{aligned} \text{(i) Lineare Randverschiebungen} & \quad \mathbf{u} = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \mathbf{x} \\ \text{(ii) Periodische Randverschiebungen} & \quad \tilde{\mathbf{w}}^+ = \tilde{\mathbf{w}}^- \wedge \tilde{\mathbf{t}}^+ = -\tilde{\mathbf{t}}^- \\ \text{(iii) Homogene Randspannungen} & \quad \mathbf{t} = \bar{\boldsymbol{\sigma}} \mathbf{n} \end{aligned} \right\} \text{ auf } \partial\mathcal{B} \quad (\text{III.1.36})$$

### 1.4.3. Eindeutigkeit der effektiven Spannungsantwort

In dieser Arbeit werden makroskopische Randwertprobleme frei von Struktur- und Materialinstabilitäten betrachtet. Globale Strukturstabilität ist gewährleistet, wenn das lokal in der Mikrostruktur gespeicherte effektive Potential  $\bar{\Pi}$  eindeutig von einer makroskopisch zulässigen Deformation  $\bar{\boldsymbol{\varphi}}$ , welche den wesentlichen Randbedingungen (III.1.29) genügt, absolut minimiert

wird. Ist  $\bar{\varphi}_1 : \bar{\mathcal{B}} \mapsto \mathcal{R}^3$  ein solcher absoluter Minimierer von  $\bar{\Pi}$ , gilt

$$\bar{\Pi}(\bar{\varphi}_2) - \bar{\Pi}(\bar{\varphi}_1) > 0 \quad (\text{III.1.37})$$

für alle kinematisch zulässigen makroskopischen Deformationen  $\bar{\varphi}_2 : \bar{\mathcal{B}} \mapsto \mathcal{R}^3$  mit  $\bar{\varphi}_2 \neq \bar{\varphi}_1$ . Globale Materialstabilität steht mit Strukturstabilität der Mikrostruktur  $\mathcal{B}$  im Zusammenhang, folgt man den Arbeiten KRAWIETZ [89], MÜLLER [120], SCHRÖDER [141] und MIEHE, SCHRÖDER & BECKER [112]. Dies wird am Beispiel einer zu  $\bar{\mathbf{F}}$  gehörigen makroskopisch stabilen Platzierung der Makrostruktur ersichtlich, in der die Bedingung der Polykonvexität erfüllt sei. Polykonvexität fordert gemäß (II.3.13)

$$\bar{W}(\bar{\mathbf{F}} + \Delta\bar{\mathbf{F}}) \geq \bar{W}(\bar{\mathbf{F}}) + \bar{\mathbf{P}}(\bar{\mathbf{F}}) : \Delta\bar{\mathbf{F}} + \partial_{\bar{\mathbf{H}}}\bar{W}(\bar{\mathbf{F}}) : \Delta\bar{\mathbf{H}} + \partial_{\bar{\mathbf{J}}}\bar{W}(\bar{\mathbf{F}}) \Delta\bar{\mathbf{J}} \quad (\text{III.1.38})$$

mit effektivem Kofaktor  $\bar{\mathbf{H}} = \text{cof}[\bar{\mathbf{F}}]$ , effektiver Jakobideterminante  $\bar{\mathbf{J}} = \det[\bar{\mathbf{F}}]$  und den Inkrementen  $\Delta\bar{\mathbf{H}} = \text{cof}[\bar{\mathbf{F}} + \Delta\bar{\mathbf{F}}] - \text{cof}[\bar{\mathbf{F}}]$  sowie  $\Delta\bar{\mathbf{J}} = \det[\bar{\mathbf{F}} + \Delta\bar{\mathbf{F}}] - \det[\bar{\mathbf{F}}]$ . Für infinitesimal kleine Störung  $\Delta\bar{\mathbf{F}}$  bestehen für die Frobenius-Normen der letzten beiden Summanden auf der rechten Seite von (III.1.38) die Proportionalitäten  $|\partial_{\bar{\mathbf{H}}}\bar{W} : \Delta\bar{\mathbf{H}}| \sim |\Delta\bar{\mathbf{F}}|^2$  und  $|\partial_{\bar{\mathbf{J}}}\bar{W} \Delta\bar{\mathbf{J}}| \sim |\Delta\bar{\mathbf{F}}|^3$ . Aus (III.1.38) erhält man damit eine untere Schranke

$$\bar{W}(\bar{\mathbf{F}} + \Delta\bar{\mathbf{F}}) - \bar{W}(\bar{\mathbf{F}}) \geq \bar{\mathbf{P}} : \Delta\bar{\mathbf{F}} + \mathcal{O}(|\Delta\bar{\mathbf{F}}|^2) \quad (\text{III.1.39})$$

in der  $\mathcal{O}(|\Delta\bar{\mathbf{F}}|^2)$  vernachlässigbare Terme mit quadratischer und höherer Ordnung von  $\Delta\bar{\mathbf{F}}$  enthält. Strukturstabilität auf der Mikroskala bedingt, daß zu jeder Wahl  $\bar{\mathbf{F}}$  im  $\mathcal{RV}\mathcal{E}$  genau eine Mikroplatzierung  $\bar{\mathbf{w}}$  existiert, die  $\bar{W}(\bar{\mathbf{F}} + \partial_{\mathbf{X}}\bar{\mathbf{w}})$  absolut minimiert. In einer durch  $\bar{\mathbf{F}} + \Delta\bar{\mathbf{F}}$  definierten infinitesimal zu  $\bar{\mathbf{F}}$  benachbarten Ruhelage sei ferner  $\bar{\mathbf{w}} + \Delta\bar{\mathbf{w}}$  das minimierende Fluktuationfeld. Basierend auf einer Taylor-Reihenentwicklung bezüglich  $\bar{\mathbf{F}}$  liefert

$$\begin{aligned} \bar{W}(\bar{\mathbf{F}} + \Delta\bar{\mathbf{F}}) - \bar{W}(\bar{\mathbf{F}}) &= \overline{W(\bar{\mathbf{F}} + \Delta\bar{\mathbf{F}} + \partial_{\mathbf{X}}(\bar{\mathbf{w}} + \Delta\bar{\mathbf{w}}))} - \overline{W(\bar{\mathbf{F}} + \partial_{\mathbf{X}}\bar{\mathbf{w}})} \\ &\leq \overline{W(\bar{\mathbf{F}} + \Delta\bar{\mathbf{F}} + \partial_{\mathbf{X}}\bar{\mathbf{w}})} - \overline{W(\bar{\mathbf{F}} + \partial_{\mathbf{X}}\bar{\mathbf{w}})} \\ &= \overline{\partial_{\bar{\mathbf{F}}}W} : \Delta\bar{\mathbf{F}} + \mathcal{O}(|\Delta\bar{\mathbf{F}}|^2) \\ &= \bar{\mathbf{P}} : \Delta\bar{\mathbf{F}} + \mathcal{O}(|\Delta\bar{\mathbf{F}}|^2) \end{aligned} \quad (\text{III.1.40})$$

eine obere Schranke, die zusammen mit (III.1.39) schließlich die Abschätzung

$$\bar{\mathbf{P}} : \Delta\bar{\mathbf{F}} + \mathcal{O}(|\Delta\bar{\mathbf{F}}|^2) \leq \bar{W}(\bar{\mathbf{F}} + \Delta\bar{\mathbf{F}}) - \bar{W}(\bar{\mathbf{F}}) \leq \bar{\mathbf{P}} : \Delta\bar{\mathbf{F}} + \mathcal{O}(|\Delta\bar{\mathbf{F}}|^2) \quad (\text{III.1.41})$$

ergibt.  $\bar{W}$  ist an der Stelle  $\bar{\mathbf{F}}$  offensichtlich Fréchet-differenzierbar, d.h.  $\bar{\mathbf{P}} = \overline{\partial_{\bar{\mathbf{F}}}W} = \partial_{\bar{\mathbf{F}}}\bar{W}$ . Jedem  $\bar{\mathbf{F}}$  ist demnach eindeutig eine Ersatzbeanspruchung  $\bar{\mathbf{P}}$  zuzuordnen. Eine weitere Konsequenz von (III.1.41) ist, daß Strukturstabilität auf der Mikroskala Materialstabilität auf der Makroskala bedingt. Zusätzlich werden in dieser Arbeit lokale Versagensmechanismen im  $\mathcal{RV}\mathcal{E}$  durch Annahme einer zumindest rang-1-konvexen Freien Energiefunktion ausgeklammert. Im Rahmen der Theorie kleiner Verzerrungen führt die in einer Platzierung  $\bar{\mathbf{e}}$  gültige Konvexitätsbedingung ebenso auf eine Abschätzung der Form (III.1.41), die auf Eindeutigkeit der effektiven Spannungsantwort und auf Fréchet-Differenzierbarkeit von  $\bar{W}$  schließen läßt. Um materielle Stabilität auf der Mikroskala zu gewährleisten werden bei kleinen Verzerrungen ausschließlich konvexe Freie Energiefunktionen betrachtet.

#### 1.4.4. Physikalischer Gültigkeitsbereich der effektiven Spannungsantwort

Ziel ist hier, den physikalisch sinnvollen Bereich der effektiven Materialantwort unter den im vorangehenden Abschnitt festgelegten Voraussetzungen rigoros einzugrenzen. Hierzu ist der Schrankencharakter des in der Mikrostruktur gespeicherten effektiven Spannungspotentials  $\bar{W}$  bei unterschiedlichen Randbedingungen im  $\mathcal{RVC}$  zu analysieren. Als Randbedingungen werden speziell lineare Verschiebungen und homogene Spannungen auf dem Rand  $\partial\mathcal{B}$  der repräsentativen Mikrostruktur  $\mathcal{B}$  betrachtet. Lineare Randdeformationen  $\varphi = \bar{F}X$  mit  $X \in \partial\mathcal{B}$  sind im Rahmen einer deformationsgesteuerten Homogenisierung mit  $\bar{F}$ , homogene Randspannungen  $T = \bar{P}N$  im Zuge einer spannungsgesteuerten Homogenisierung mit  $\bar{P}$  als makroskopisch treibende Variablen vorzugeben. Bei linearen Randverschiebungen seien  $\bar{W}(\mathcal{E})$  und  $\bar{W}^*(\bar{P}(\mathcal{E}))$  mit  $\mathcal{E} := \bar{F}$  und bei homogenen Randspannungen  $\bar{W}(\bar{F}(\mathcal{S}))$  und  $\bar{W}^*(\mathcal{S})$  mit  $\mathcal{S} := \bar{P}$  die zueinander dualen effektiven Potentialfunktionen. Diese sind mit Potentialfunktionen zu vergleichen, die bei willkürlichen Randbedingungen unter dem Vorbehalt, daß sie der Hill-Bedingung genügen, entstehen. Für Potentialfunktionen gelten basierend auf (II.3.10) die Beziehungen

$$\left. \begin{aligned} \bar{W}^*(\bar{P}) &= \bar{P} : \bar{F} - \bar{W}(\bar{F}(\bar{P})) \\ \bar{W}^*(\mathcal{S}) &= \mathcal{S} : \bar{F} - \bar{W}(\bar{F}(\mathcal{S})) \\ \bar{W}^*(\bar{P}(\bar{F})) &= \bar{P} : \bar{F} - \bar{W}(\bar{F}) \\ \bar{W}^*(\bar{P}(\mathcal{E})) &= \bar{P} : \mathcal{E} - \bar{W}(\mathcal{E}) \end{aligned} \right\} \quad (\text{III.1.42})$$

mit  $\bar{W} \equiv \bar{W}^{**}$ . Es werden ferner die Legendre-Fenchel-Transformierten

$$\bar{W}^*(\mathcal{S}) \geq \mathcal{S} : \bar{F} - \bar{W}(\bar{F}(\bar{P})) \quad \text{und} \quad \bar{W}^{**}(\mathcal{E}) \geq \mathcal{E} : \bar{P} - \bar{W}^*(\bar{P}(\bar{F})) \quad (\text{III.1.43})$$

eingeführt, wobei  $\bar{W}(\mathcal{E}) = \bar{W}^{**}(\mathcal{E})$ . Mit (III.1.43)<sub>1</sub> und (III.1.42)<sub>1,2</sub> schließt man auf

$$\bar{W}^*(\mathcal{S}) \geq \bar{F} : (\mathcal{S} - \bar{P}) + \bar{W}^*(\bar{P}) \quad \text{und} \quad \bar{W}(\bar{F}(\bar{P})) \geq \bar{W}(\bar{F}(\mathcal{S})) \quad (\text{III.1.44})$$

sowie mit (III.1.43)<sub>2</sub> und (III.1.42)<sub>3,4</sub> auf

$$\bar{W}(\mathcal{E}) \geq (\mathcal{E} - \bar{F}) : \bar{P} + \bar{W}(\bar{F}) \quad \text{und} \quad \bar{W}^*(\bar{P}(\bar{F})) \geq \bar{W}^*(\bar{P}(\mathcal{E})) \quad (\text{III.1.45})$$

Kombination der Gleichungen (III.1.44) und (III.1.45) führt aufgrund der Identitäten  $\mathcal{E} \equiv \bar{F}$  und  $\mathcal{S} \equiv \bar{P}$  schließlich auf die gesuchten Schranken

$$\bar{W}(\mathcal{E}) \geq \bar{W}(\bar{F}) \geq \bar{W}(\bar{F}(\mathcal{S})) \quad \text{und} \quad \bar{W}^*(\mathcal{S}) \geq \bar{W}^*(\bar{P}) \geq \bar{W}^*(\bar{P}(\mathcal{E})) \quad (\text{III.1.46})$$

Demnach assoziieren lineare Randverschiebungen auf  $\partial\mathcal{B}$  die steifste und homogene Randspannungen auf  $\partial\mathcal{B}$  die weichste effektive Spannungsantwort. Dasselbe Ergebnis erzielt man im Rahmen der Theorie kleiner Verzerrungen.

## 2. Prinzipien der analytischen Homogenisierung

Analytische Homogenisierungsmodelle werden in dieser Arbeit nur im Kontext kleiner Verzerrungen diskutiert. Die wesentliche Schwierigkeit bei großen Deformationen besteht darin, daß zusätzlich geometrisch nichtlineare Effekte zu berücksichtigen sind, die vom Eshelbytensor kleiner Verzerrungen nicht erfaßt werden. Zur Konstruktion eines entsprechend verallgemeinerten Eshelbytensors für finite Deformationen siehe beispielsweise NEMAT-NASSER & HORI [122]. Nichtlineare Homogenisierungsmodelle bedienen sich im Rahmen der linearen Theorie kleiner Verzerrungen formulierter Grundprinzipien der Homogenisierung, mit denen sich dieser Abschnitt eingehend befaßt. Dazu gehören Eshelbys Einbettungsverfahren, die Mean-Field-Theorie von Tanaka und Mori und die Hashin-Shtrikman-Variationsprinzipien. Die betrachteten Modelle beschränken sich hier auf Mikrostrukturen frei von geometrischen Diskontinuitäten.

### 2.1. Eshelbys Einbettungsverfahren

Das von ESHELBY [49] entwickelte Einbettungsverfahren ist in technischen Anwendungen weit verbreitet. Es beschreibt die Verzerrungs- und Spannungsfelder innerhalb eines Festkörpers infolge der spontanen Gestaltänderung eines Teilgebiets. Analytische Lösungen hierzu existieren für elliptische Einschlüsse, im Allgemeinen sind jedoch numerische Untersuchungen erforderlich. In nachfolgenden Ausführungen sei  $\mathcal{B}$  eine heterogene Mikrostruktur mit Matrixphase  $\mathcal{M}$  und Einschlußphase  $\mathcal{I}$ . Bei periodischem Grundmuster sei  $\mathcal{B}$  eine Einheitszelle.

#### 2.1.1. Konzept vom äquivalent homogenen Körper

Beim Einbettungsverfahren wird die heterogene Mikrostruktur durch ein homogenes Kontinuum ( $\mathcal{EHS}$ ) mit Moduli  $\mathbb{C}^E = \mathbb{C}^{\mathcal{M}}$  oder  $\mathbb{C}^E = \bar{\mathbb{C}}$  und Flexibilitäten  $\mathbb{D}^E = \mathbb{D}^{\mathcal{M}}$  oder  $\mathbb{D}^E = \bar{\mathbb{D}}$  des Matrixmaterials oder der a priori unbekanntem effektiven Struktur ersetzt. In einem weiteren Schritt führt man im  $\mathcal{EHS}$  spannungsfrei sogenannte Transformationsverzerrungen oder verzerrungsfrei sogenannte Transformationsspannungen ein, um identische Spannungs- und Verzerrungsfelder wie im heterogenen Ausgangsmaterial zu erzeugen. Aus dieser Vorgehensweise wird ersichtlich, weshalb NEMAT-NASSER & HORI [123] Eshelbys Einbettungsverfahren als Konzept vom äquivalent homogenen Körper bezeichnen. Transformationsfelder haben die Aufgabe, im  $\mathcal{EHS}$  einen inneren Spannungs- und Verzerrungszustand zu erzeugen. Dieser überlagert den im  $\mathcal{EHS}$  durch  $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$  oder  $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$  induzierten homogenen Spannungs- und Verzerrungszustand. Wird die Mikrostruktur durch  $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$  deformationsgesteuert, ergibt sich als endgültiger Verzerrungszustand

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \in \mathcal{B} \quad (\text{III.2.1})$$

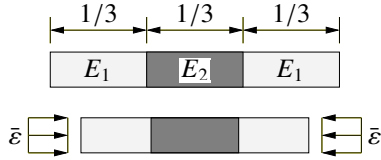
Im spannungsgesteuerten Kontext mit  $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$  als treibende Variable ist

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \bar{\boldsymbol{\sigma}} + \tilde{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \in \mathcal{B} \quad (\text{III.2.2})$$

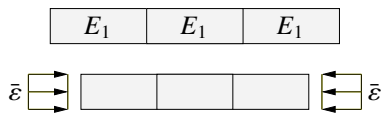
Fluktuationsverzerrungen  $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}$  genügen hier als Eigenverzerrungen der Bedingung  $\int_{\mathcal{B}} \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} dV = \mathbf{0}$ , Fluktuationsspannungen  $\tilde{\boldsymbol{\sigma}}$  als Eigenspannungen der Bedingung  $\int_{\mathcal{B}} \tilde{\boldsymbol{\sigma}} dV = \mathbf{0}$ . Die homogene Grundstruktur des  $\mathcal{EHS}$  erlaubt die geschlossene analytische Lösung von Transformations- und Fluktuationfeldvariablen mit Hilfe des sogenannten Eshelbytensors. Zwischen dem Einbettungsverfahren von Eshelby und dem Kraftgrößenverfahren zur Schnittgrößenberechnung eines statisch unbestimmten Systems bestehen interessante Gemeinsamkeiten. Eine vergleichende Studie wird in Abb. 19 visualisiert. Ähnliche Parallelen bestehen zum Verschiebungsgrößenverfahren. Der einfach statisch unbestimmt gelagerte Balken in Abb. 19 wird durch Entfernen

**Eshelbys Einbettungsverfahren**

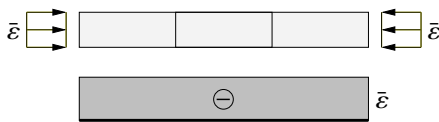
Heterogener Stab mit Einschluß



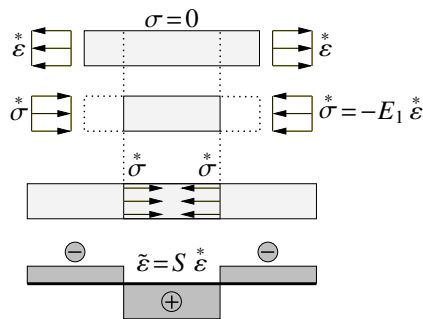
Äquivalent homogener Stab (EHP)



Homogene Verzerrung



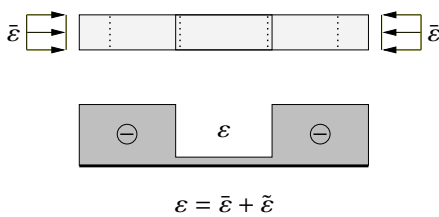
Inhomogene Verzerrungsfluktuation



Konsistenzbedingung im Einschluß

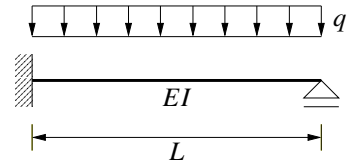
$$\sigma = E_2(\bar{\varepsilon} + \tilde{\varepsilon}) \stackrel{!}{=} E_1(\bar{\varepsilon} + \tilde{\varepsilon}) + \sigma^*$$

Endgültiger Verzerrungszustand

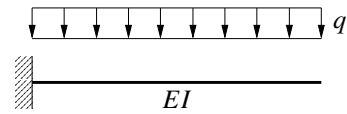


**Kraftgrößenverfahren**

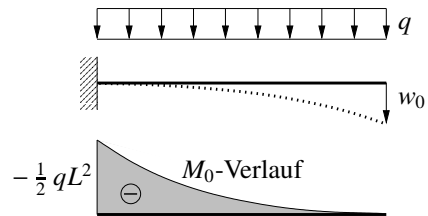
Einfach statisch unbestimmter Balken



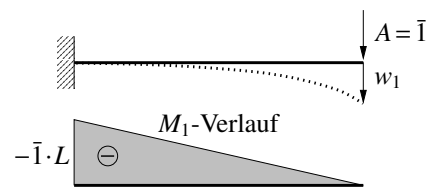
Statisch bestimmtes Grundsystem



Momentenverlauf im Nullzustand



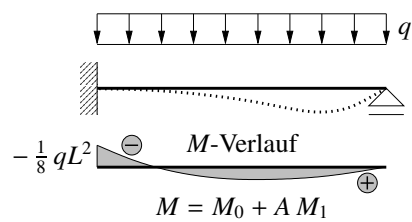
Momentenverlauf im Einheitszustand



Verträglichkeitsbedingung

$$w_0 + A w_1 \stackrel{!}{=} 0$$

Endgültiger Momentenverlauf



**Abbildung 19:** Eshelbys Einbettungsverfahren am Beispiel eines heterogenen Stabes mit Elastizitätsmoduli  $E_1$  und  $E_2$  im Vergleich mit dem Kraftgrößenverfahren am Beispiel eines einfach statisch unbestimmt gelagerten Balkens mit Biegesteifigkeit  $EI$ .

**Box 2:** Elementarer Gleichungssatz formuliert für ein Matrix-Einschluß-Komposit.

**Einführung einer homogenen Ersatzstruktur ( $\mathcal{EHS}$ )**

Ersetze heterogene Mikrostruktur durch  $\mathcal{EHS}$  mit

- a) Matrixmoduli der heterogenen Struktur:  $\mathbb{C}^E = \mathbb{C}^{\mathcal{M}}$  ,  $\mathbb{D}^E = \mathbb{D}^{\mathcal{M}}$  oder  
 b) Moduli der effektiven Struktur:  $\mathbb{C}^E = \bar{\mathbb{C}}$  ,  $\mathbb{D}^E = \bar{\mathbb{D}}$

**Deformations- und spannungsgetriebener  $\mathcal{EHS}$**

- a)  $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$  als treibende Variable im  $\mathcal{EHS}$

Zerlegung der Verzerrungen

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}$$

Fluktuationsverzerrungen im Einschluß

$$\begin{aligned} \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} &= \mathbb{S} : \boldsymbol{\varepsilon}^* \\ &= (\mathbb{I} - \mathbb{D}^E : \mathbb{T} : \mathbb{C}^E) : \boldsymbol{\varepsilon}^* \\ &= -\mathbb{S} : \mathbb{D}^E : \boldsymbol{\sigma}^* \\ &= \mathbb{D}^E : (\mathbb{T} - \mathbb{I}) : \boldsymbol{\sigma}^* \end{aligned}$$

Konsistenzbedingung im Einschluß

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbb{C}^{\mathcal{J}} : (\bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}) \stackrel{!}{=} \mathbb{C}^E : (\bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} - \boldsymbol{\varepsilon}^*)$$

- b)  $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$  als treibende Variable im  $\mathcal{EHS}$

Zerlegung der Spannungen

$$\boldsymbol{\sigma} = \bar{\boldsymbol{\sigma}} + \tilde{\boldsymbol{\sigma}}$$

Fluktuationsspannungen im Einschluß

$$\begin{aligned} \tilde{\boldsymbol{\sigma}} &= \mathbb{T} : \boldsymbol{\sigma}^* \\ &= (\mathbb{I} - \mathbb{C}^E : \mathbb{S} : \mathbb{D}^E) : \boldsymbol{\sigma}^* \\ &= -\mathbb{T} : \mathbb{C}^E : \boldsymbol{\varepsilon}^* \\ &= \mathbb{C}^E : (\mathbb{S} - \mathbb{I}) : \boldsymbol{\varepsilon}^* \end{aligned}$$

Konsistenzbedingung im Einschluß

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbb{D}^{\mathcal{J}} : (\bar{\boldsymbol{\sigma}} + \tilde{\boldsymbol{\sigma}}) \stackrel{!}{=} \mathbb{D}^E : (\bar{\boldsymbol{\sigma}} + \tilde{\boldsymbol{\sigma}} - \boldsymbol{\sigma}^*)$$

des horizontal verschieblichen Lagers in ein statisch bestimmtes überführt. Beim Einbettungsverfahren entspricht dieser Vorgang dem Ersetzen der heterogenen Struktur durch den  $\mathcal{EHS}$ . Der Momentenverlauf im Nullzustand des Kraftgrößenverfahrens stellt sich zwängungsfrei ein. Der  $\mathcal{EHS}$  verhält sich gleichermaßen zwängungsfrei bei homogener Belastung  $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$ . Im Einheitszustand des Kraftgrößenverfahrens wird der Momentenverlauf infolge einer spontan am entfernten Lager eingeführten Einheitskraft  $A = \bar{\mathbb{I}}$  berechnet. Beim Einbettungsverfahren werden Fluktuationsfelder infolge spontan im Einschluß auftretender Transformationsspannungen  $\boldsymbol{\sigma}^*$  erzeugt und ermittelt. Durch Transformationsspannungen wird die infolge  $\boldsymbol{\varepsilon}^*$  im freigeschnittenen Einschluß induzierte Fehlpassung rückgängig gemacht, um den Einschluß passend in die Grundstruktur wieder einbetten zu können. Das Gedankenmodell vom Entfernen und Einbetten des Einschlusses gab Eshelbys Einbettungsverfahren den Namen. Zwischen Fluktuations- und Transformationsverzerrungen hat ESHELBY [49] den linearen Zusammenhang

$$\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbb{S} \boldsymbol{\varepsilon}^* \quad (\text{III.2.3})$$

gefunden mit dem sogenannten Eshelbytensor  $\mathbb{S}$ . Beim Kraftgrößenverfahren ergibt sich der resultierende Momentenverlauf aus einer geometrischen Verträglichkeitsbedingung für die Vertikalverschiebung am entfernten Lager. Beim Einbettungsverfahren wird im Einschluß Konsistenz zwischen den Spannungsfeldern der realen heterogenen Struktur und dem  $\mathcal{EHS}$  gefordert. Zusammen mit (III.2.3) ergeben sich daraus als Transformationsfeldvariablen

$$\boldsymbol{\varepsilon}^* = \frac{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}}{(1 - E_2/E_1)^{-1} - \mathbb{S}} \quad \text{und} \quad \boldsymbol{\sigma}^* = -E_1 \boldsymbol{\varepsilon}^* \quad (\text{III.2.4})$$



und als Fluktuationsverzerrungen

$$\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbb{S} \boldsymbol{\varepsilon}^* = -\mathbb{S} \boldsymbol{\sigma}^* / E_1 \quad (\text{III.2.5})$$

Aus (III.2.1) erhält man schließlich als endgültigen Verzerrungszustand

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}}{1 - \mathbb{S}(1 - E_2/E_1)} \quad (\text{III.2.6})$$

In einem weiteren Schritt können effektive Spannungen und Moduli berechnet werden. Elementare Gleichungen des Einbettungsverfahrens sind für ein Matrix-Einschluß-Komposit in [Box 2](#) zur Übersicht dargestellt. Sie werden in den Folgeabschnitten eingehend motiviert.

### 2.1.2. Transformationsverzerrungen und -spannungen

Eine Möglichkeit, Konsistenz mit Spannungen und Verzerrungen der heterogenen Ausgangsstruktur herzustellen, besteht darin, im  $\mathcal{EHS}$  spannungsfrei Transformationsverzerrungen

$$\boldsymbol{\varepsilon}^*(\mathbf{x}) = \begin{cases} \mathbf{0} & \text{in } \mathcal{M} \\ \boldsymbol{\varepsilon}^*(\mathbf{x}) & \text{in } \mathcal{I} \end{cases} \quad (\text{III.2.7})$$

spontan einzuführen. Dieser Vorgang wird in [Abb. 20](#) visualisiert. Im ersten Schritt wird der Einschluß  $\mathcal{I}$  aus dem  $\mathcal{EHS}$  herausgelöst und durch Transformationsverzerrungen  $\boldsymbol{\varepsilon}^*$  spannungsfrei deformiert. Um den Einschluß wieder paßgenau in den  $\mathcal{EHS}$  einfügen zu können, wird er durch Randspannungen auf seine Ausgangsform gestaucht. Die Randspannungen erzeugen im Einschluß den Spannungszustand

$$\boldsymbol{\sigma}^*(\mathbf{x}) = -\mathbb{C}^E : \boldsymbol{\varepsilon}^*(\mathbf{x}) \quad (\text{III.2.8})$$

Nachdem der Einschluß im  $\mathcal{EHS}$  wieder eingesetzt wurde, entfernt man die Randspannungen an der Einschlußberandung. Dabei stellt sich aufgrund der Dehnungsbehinderung durch das umgebende äquivalent homogene Material ein innerer Verzerrungs- und Spannungszustand ein. Auf diese Weise erhält man im  $\mathcal{EHS}$  die Spannungen

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \begin{cases} \mathbb{C}^E : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) & \text{in } \mathcal{M} \\ \mathbb{C}^E : (\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) - \boldsymbol{\varepsilon}^*(\mathbf{x})) & \text{in } \mathcal{I} \end{cases} \quad (\text{III.2.9})$$

und die Verzerrungen

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) = \begin{cases} \mathbb{D}^E : \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) & \text{in } \mathcal{M} \\ \mathbb{D}^E : \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\varepsilon}^*(\mathbf{x}) & \text{in } \mathcal{I} \end{cases} \quad (\text{III.2.10})$$

Werden im  $\mathcal{EHS}$  verzerrungsfrei Transformationsspannungen

$$\boldsymbol{\sigma}^*(\mathbf{x}) = \begin{cases} \mathbf{0} & \text{in } \mathcal{M} \\ \boldsymbol{\sigma}^*(\mathbf{x}) & \text{in } \mathcal{I} \end{cases} \quad (\text{III.2.11})$$

spontan eingeführt, stellt sich in  $\mathcal{B}$  ein Spannungs- und Verzerrungszustand der Form (III.2.9) und (III.2.10) ein mit  $\boldsymbol{\varepsilon}^* = -\mathbb{D}^E : \boldsymbol{\sigma}^*$ .



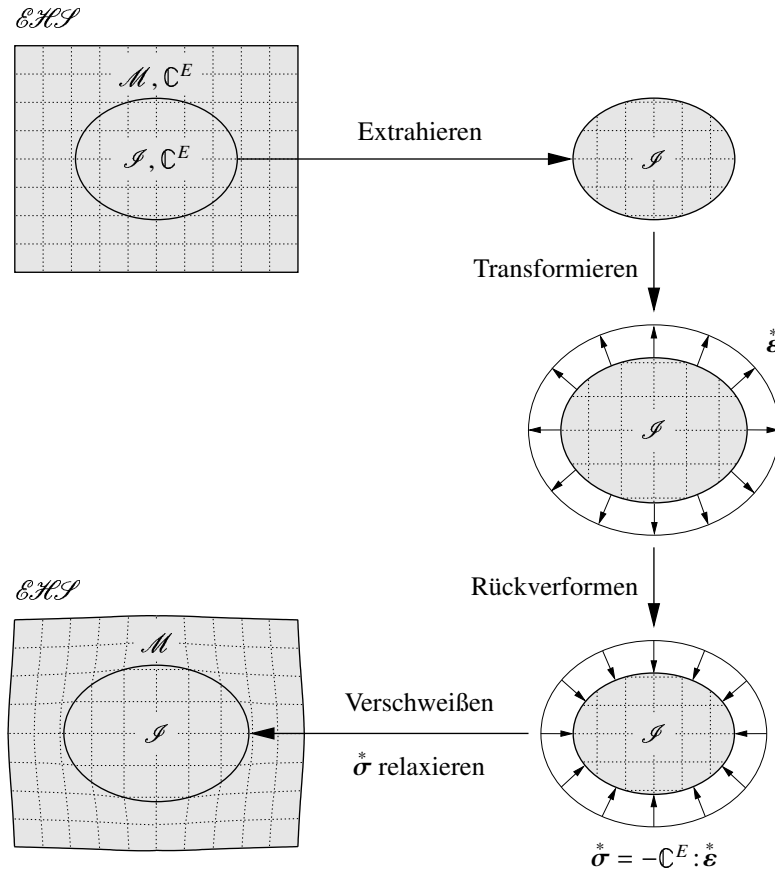


Abbildung 20: Transformationsspannungen und -verzerrungen im  $\mathcal{EHS}$ .

### 2.1.3. Eshelbytensor und konjugierter Eshelbytensor

Der Eshelbytensor  $\mathbb{S}$  beschreibt den linearen Zusammenhang

$$\varepsilon' = \mathbb{S} : \varepsilon^* \quad (\text{III.2.12})$$

zwischen Transformationsverzerrungen  $\varepsilon^*$  und Fluktuationsverzerrungen  $\varepsilon'$  innerhalb eines Teilgebiets  $\mathcal{I}$ . Der konjugierte Eshelbytensor  $\mathbb{T}$  stellt einen ebensolchen linearen Zusammenhang

$$\sigma' = \mathbb{T} : \sigma^* \quad (\text{III.2.13})$$

zwischen Transformationsspannungen  $\sigma^*$  und Fluktuationsspannungen  $\sigma'$  in  $\mathcal{I}$  her. Ist  $\bar{\varepsilon}$  die treibende makroskopische Variable im  $\mathcal{EHS}$ , sind Fluktuationsverzerrungen  $\varepsilon'$  in (III.2.12) mit Eigenverzerrungen  $\bar{\varepsilon}$  und Fluktuationsspannungen  $\sigma'$  in (III.2.13) mit  $\sigma - \mathbb{C}^E : \bar{\varepsilon}$  zu identifizieren. Ist hingegen  $\bar{\sigma}$  die makroskopisch treibende Größe, wird  $\varepsilon'$  durch  $\varepsilon - \mathbb{D}^E : \bar{\sigma}$  und  $\sigma'$  durch den Eigenspannungszustand  $\bar{\sigma}$  ersetzt. Analytische Lösungen des Eshelbytensors für unendliche Kontinua werden in ESHELBY [49] formuliert und sind im Abschnitt A des Anhangs aufbereitet. Unter der Annahme gebietsweise konstanter Transformationsfelder werden im Abschnitt B des Anhangs Eshelbytensoren für Einheitszellen periodischer Mikrostrukturen konstruiert. Bei homogener, linear elastischer und unendlich ausgedehnter Matrix  $\mathcal{M}$  und ellipsoiden Einschlüssen  $\mathcal{I}$  sind die Variablen  $\sigma$  und  $\varepsilon$  im Einschluß  $\mathcal{I}$  homogen verteilt, andernfalls sind sie im Allgemeinen ortsabhängig. Siehe dazu Abschnitt A.2.2 des Anhangs.  $\mathbb{S}$  und  $\mathbb{T}$  berechnen sich aus den Halbachsenverhältnissen des Einschlußellipsoids und den Materialpara-

metern des  $\mathcal{EHS}$ . Gleichung (A.18) des Anhangs entnimmt man die Darstellungen

$$\mathbb{S} = \mathbb{P} : \mathbb{C}^E \quad \text{und} \quad \mathbb{T} = \mathbb{I} - \mathbb{C}^E : \mathbb{P} \quad (\text{III.2.14})$$

Bei periodischen Mikrostrukturen sei  $\mathbb{P}$  über das Einschlußvolumen gemittelt. Der in (A.17) und (B.27) definierte Tensor  $\mathbb{P}$  ist selbstadjungiert und besitzt die Symmetrieeigenschaften  $\mathbb{P}_{ijkl} = \mathbb{P}_{jikl} = \mathbb{P}_{ijlk} = \mathbb{P}_{lkij}$ . Für den Eshelbytensor ergeben sich daraus die Symmetrien

$$\mathbb{S}_{ijkl} = \mathbb{S}_{jikl} = \mathbb{S}_{ijlk} \quad (\text{III.2.15})$$

Im Allgemeinen ist  $\mathbb{S}_{ijkl} \neq \mathbb{S}_{klij}$ . Mit (III.2.14)<sub>1</sub> und den Symmetrieeigenschaften von  $\mathbb{P}$  folgt

$$\mathbb{C}^E : \mathbb{S} = \mathbb{S} : \mathbb{C}^E \quad \text{und} \quad \mathbb{S} : \mathbb{D}^E = \mathbb{D}^E : \mathbb{S} \quad (\text{III.2.16})$$

Für den konjugierten Eshelbytensor  $\mathbb{T}$  erhält man unter Berücksichtigung von (III.2.14)<sub>2</sub>

$$\mathbb{T}_{ijkl} = \mathbb{T}_{jikl} = \mathbb{T}_{ijlk} \quad (\text{III.2.17})$$

im Allgemeinen aber  $\mathbb{T}_{ijkl} \neq \mathbb{T}_{klij}$ , sowie

$$\mathbb{D}^E : \mathbb{T} = \mathbb{T} : \mathbb{D}^E \quad \text{und} \quad \mathbb{T} : \mathbb{C}^E = \mathbb{C}^E : \mathbb{T} \quad (\text{III.2.18})$$

Zwischen  $\mathbb{S}$  und  $\mathbb{T}$  bestehen wegen (III.2.14)<sub>2</sub> zwei äquivalente Relationen

$$\mathbb{S} + \mathbb{D}^E : \mathbb{T} : \mathbb{C}^E = \mathbb{I} \quad \text{und} \quad \mathbb{T} + \mathbb{C}^E : \mathbb{S} : \mathbb{D}^E = \mathbb{I} \quad (\text{III.2.19})$$

Sie ermöglichen zusammen mit (III.2.8) weitere zu (III.2.12) und (III.2.13) äquivalente Darstellungen von Fluktuationsverzerrungen und -spannungen. Siehe dazu [Box 2](#).

#### 2.1.4. Konsistenzbedingungen

Die Konsistenzbedingungen erzwingen im  $\mathcal{EHS}$  identische Verzerrungs- und Spannungsverläufe wie im heterogenen Ausgangsmaterial. In einem Matrix-Einschluß-Komposit, bei dem als  $\mathcal{EHS}$  Matrixmaterial gewählt wird, fordern sie

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \mathbb{C}^{\mathcal{J}} : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) \stackrel{!}{=} \mathbb{C}^E : (\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) - \boldsymbol{\varepsilon}^*(\mathbf{x})) \quad \text{in } \mathcal{J} \quad (\text{III.2.20a})$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) = \mathbb{D}^{\mathcal{J}} : \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) \stackrel{!}{=} \mathbb{D}^E : (\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) - \boldsymbol{\sigma}^*(\mathbf{x})) \quad \text{in } \mathcal{J} \quad (\text{III.2.20b})$$

Einschlußspannungen und -verzerrungen im  $\mathcal{EHS}$  ergeben sich hier basierend auf (III.2.8)–(III.2.10). Algebraische Umformungen von (III.2.20a,b) führen auf die Darstellungen

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) = \mathbb{E}^{\mathcal{J}} : \boldsymbol{\varepsilon}^*(\mathbf{x}) \quad \text{mit} \quad \mathbb{E}^{\mathcal{J}} = (\mathbb{C}^E - \mathbb{C}^{\mathcal{J}})^{-1} : \mathbb{C}^E \quad \text{in } \mathcal{J} \quad (\text{III.2.21a})$$

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \mathbb{F}^{\mathcal{J}} : \boldsymbol{\sigma}^*(\mathbf{x}) \quad \text{mit} \quad \mathbb{F}^{\mathcal{J}} = (\mathbb{D}^E - \mathbb{D}^{\mathcal{J}})^{-1} : \mathbb{D}^E \quad \text{in } \mathcal{J} \quad (\text{III.2.21b})$$

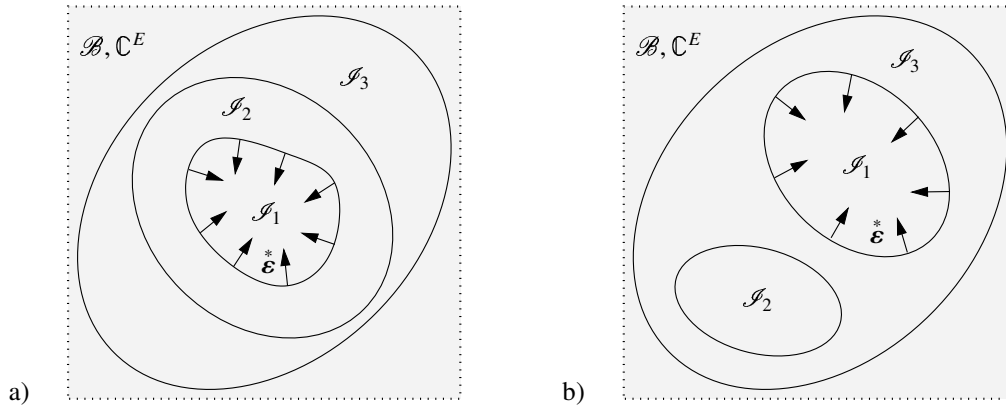
Die Konsistenzbedingungen und Eshelbys Beziehungen (III.2.12) und (III.2.13) behalten ihre Form auch bei spontan im Einschluß des heterogenen Ausgangsmaterials auftretenden Verzerrungen  $\boldsymbol{\varepsilon}'$  oder Spannungen  $\boldsymbol{\sigma}'$ , wenn man dort als Deformation  $\boldsymbol{\varepsilon} := \boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}'$  bzw. als Spannungszustand  $\boldsymbol{\sigma} := \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}'$  ansetzt. Temperaturdehnungen und plastische Verformungen sind zwei typische Beispiele für spontane Gestaltänderungen.

## 2.2. Mean-Field-Theorie von Mori und Tanaka

Die sogenannte Mean-Field-Theorie wurde von TANAKA & MORI [151] und MORI & TANAKA [117] formuliert. Sie dient als Plattform für weitläufige Entwicklungen in der Mikromechanik zur makroskopischen Beschreibung von Spannungs- und Verzerrungsfeldern komplexer Mikrostrukturen. Diese grundlegenden Arbeiten sind unter anderem Ausgangspunkt des sogenannten Mehreinschluß- und Mehrphasenmodells der Homogenisierung. Ohne Einschränkung der Allgemeinheit wird in nachfolgenden Untersuchungen angenommen, daß die Mikrostruktur durch  $\bar{\varepsilon}$  makroskopisch deformationsgesteuert wird.

### 2.2.1. Mean-Field-Theorie

Es werden zwei dreiphasige Mikrostrukturen  $\mathcal{B}$  mit unterschiedlicher Topologie betrachtet. Die erste Mikrostruktur enthalte einen zweiphasigen ellipsoiden Einschluß mit einer Phase  $\mathcal{I}_2$  und einer beliebig berandeten Phase  $\mathcal{I}_1 \subset \mathcal{I}_2$ . Der diesem Verbundmaterial zugeordnete  $\mathcal{EHS}$  ist in Abb. 21a dargestellt. Die darin markierten Teilgebiete  $\mathcal{I}_1$  und  $\mathcal{I}_2$  werden dort von einem weiteren Ellipsoid  $\mathcal{I}_3 \supset \mathcal{I}_2 \supset \mathcal{I}_1$  eingeschlossen. Die zweite Mikrostruktur enthalte zwei disjunkte Einschlußphasen  $\mathcal{I}_1$  und  $\mathcal{I}_2$ , für die  $\mathcal{I}_1 \cap \mathcal{I}_2 = \emptyset$  gilt. Der zugehörige  $\mathcal{EHS}$  ist Abb. 21b zu entnehmen. Die ellipsoiden Teilbereiche  $\mathcal{I}_1$  und  $\mathcal{I}_2$  werden auch dort innerhalb eines Ellipsoids  $\mathcal{I}_3$  angeordnet. Der äquivalent homogene Körper  $\mathcal{B}$  sei in beiden Fällen unendlich ausgedehnt angenommen und mit Moduli  $\mathbb{C}^E$  versehen. Grundlegendes Ziel der Arbeiten TANAKA & MO-



**Abbildung 21:** Mean-Field-Theorie von Tanaka und Mori am Beispiel eines unendlich angenommenen äquivalent homogenen Körpers  $\mathcal{B}$  mit den ellipsoiden Teilbereichen  $\mathcal{I}_3$ ,  $\mathcal{I}_2 \subset \mathcal{I}_3$  und einem beliebig berandeten Teilgebiet  $\mathcal{I}_1 \subset \mathcal{I}_3$ , welches durch Transformationsverzerrungen spontan deformiert wird. a)  $\mathcal{EHS}$  einer Mikrostruktur mit mehrphasigem Einschluß, in dem  $\mathcal{I}_1 \subset \mathcal{I}_2$ , und b)  $\mathcal{EHS}$  einer mehrphasigen Mikrostruktur, in dem Einschlüsse  $\mathcal{I}_1 \cap \mathcal{I}_2 = \emptyset$  disjunkt verteilt sind.

RI [151] und MORI & TANAKA [117] ist nun, effektive Spannungs- und Verzerrungsfelder im Teilbereich  $\mathcal{I}_3 - \mathcal{I}_2$  des  $\mathcal{EHS}$  infolge einer spontanen Gestaltänderung  $\varepsilon^*$  in  $\mathcal{I}_1$  zu beschreiben. Dieses Ergebnis ist fundamental, wenn Phasenmittelwerte von Spannungs- und Verzerrungsfeldern eines Mehreinschluß- oder Mehrphasenkomposits zu berechnen sind. In Bezugnahme auf Gleichung (A.10)<sub>1</sub> stellt sich im  $\mathcal{EHS}$ , der hier durch Vorgabe von  $\bar{\varepsilon}$  deformationsgetrieben sei, der Verzerrungszustand

$$\tilde{\varepsilon}(\mathbf{x}) = \int_{\mathcal{I}_1} \Gamma(\mathbf{x} - \mathbf{y}) : \mathbb{C}^E : \varepsilon^*(\mathbf{y}) dV(\mathbf{y}) \quad \forall \mathbf{x} \in \mathcal{B} \quad (\text{III.2.22})$$

ein. Mittelwertbildung  $\langle \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} \rangle_{\Gamma} = \frac{1}{|\Gamma|} \int_{\Gamma} \boldsymbol{\varepsilon} dV$  im Teilgebiet  $\Gamma := \mathcal{J}_3 - \mathcal{J}_2$  führt auf

$$\langle \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} \rangle_{\mathcal{J}_3 - \mathcal{J}_2} = \frac{1}{|\mathcal{J}_3 - \mathcal{J}_2|} \int_{\mathcal{J}_3 - \mathcal{J}_2} \left\{ \int_{\mathcal{J}_1} \boldsymbol{\Gamma}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) : \mathbb{C}^E : \boldsymbol{\varepsilon}^*(\mathbf{y}) dV(\mathbf{y}) \right\} dV(\mathbf{x}) \quad (\text{III.2.23})$$

Vertauschen der Integrationsreihenfolge ergibt

$$\langle \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} \rangle_{\mathcal{J}_3 - \mathcal{J}_2} = \frac{1}{|\mathcal{J}_3 - \mathcal{J}_2|} \int_{\mathcal{J}_1} \left\{ \int_{\mathcal{J}_3 - \mathcal{J}_2} \boldsymbol{\Gamma}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) dV(\mathbf{x}) \right\} : \mathbb{C}^E : \boldsymbol{\varepsilon}^*(\mathbf{y}) dV(\mathbf{y}) \quad (\text{III.2.24})$$

Bezieht man hier die Darstellungen (A.17) und (A.18)<sub>1</sub> des Integraloperators  $\mathbb{P}$  und des Eshelbytensors  $\mathbb{S}$  mit ein, führen weitere Umformungen schließlich auf

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} \rangle_{\mathcal{J}_3 - \mathcal{J}_2} &= \frac{1}{|\mathcal{J}_3 - \mathcal{J}_2|} (\mathbb{P}^{\mathcal{J}_3} - \mathbb{P}^{\mathcal{J}_2}) : \mathbb{C}^E : \int_{\mathcal{J}_1} \boldsymbol{\varepsilon}^*(\mathbf{y}) dV(\mathbf{y}) \\ &= \frac{|\mathcal{J}_1|}{|\mathcal{J}_3 - \mathcal{J}_2|} (\mathbb{P}^{\mathcal{J}_3} - \mathbb{P}^{\mathcal{J}_2}) : \mathbb{C}^E : \langle \boldsymbol{\varepsilon}^* \rangle_{\mathcal{J}_1} \\ &= \frac{v_1}{v_3 - v_2} (\mathbb{S}^{\mathcal{J}_3} - \mathbb{S}^{\mathcal{J}_2}) : \langle \boldsymbol{\varepsilon}^* \rangle_{\mathcal{J}_1} \end{aligned} \quad (\text{III.2.25})$$

mit Phasenmittelwert  $\langle \boldsymbol{\varepsilon}^* \rangle_{\mathcal{J}_1}$  und Volumenanteilen  $v_1 = |\mathcal{J}_1|/|\mathcal{B}|$ ,  $v_2 = |\mathcal{J}_2|/|\mathcal{B}|$ ,  $v_3 = |\mathcal{J}_3|/|\mathcal{B}|$ . Als Verzerrungs- und Spannungsmittelwerte von  $\mathcal{J}_3 - \mathcal{J}_2$  erhält man insgesamt

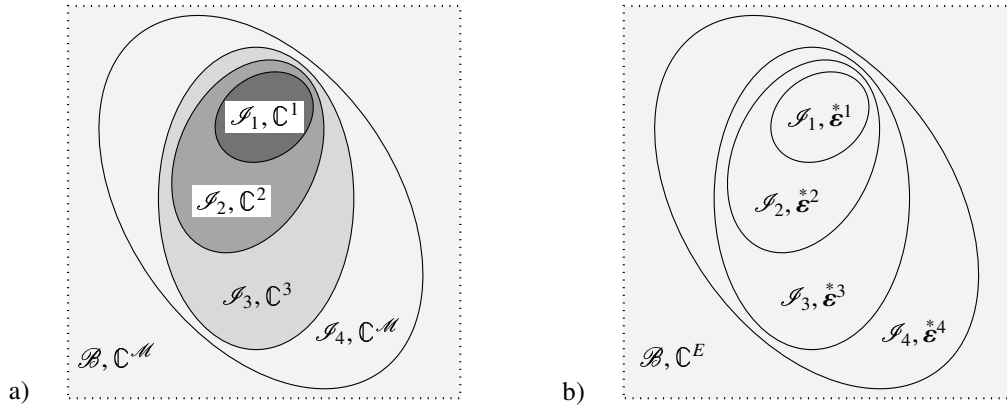
$$\langle \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} \rangle_{\mathcal{J}_3 - \mathcal{J}_2} = \frac{v_1}{v_3 - v_2} (\mathbb{S}^{\mathcal{J}_3} - \mathbb{S}^{\mathcal{J}_2}) : \langle \boldsymbol{\varepsilon}^* \rangle_{\mathcal{J}_1} \quad (\text{III.2.26a})$$

$$\langle \boldsymbol{\sigma}' \rangle_{\mathcal{J}_3 - \mathcal{J}_2} = \mathbb{C}^E : \langle \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} \rangle_{\mathcal{J}_3 - \mathcal{J}_2} \quad (\text{III.2.26b})$$

mit Fluktuationsspannungen  $\boldsymbol{\sigma}' := \boldsymbol{\sigma} - \mathbb{C}^E : \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}$ . Die Darstellung der Fluktuationsspannungen (III.2.26b) ist Box 2 mit  $\langle \boldsymbol{\varepsilon}^* \rangle_{\mathcal{J}_2 - \mathcal{J}_1} = \mathbf{0}$  entnommen. Ist  $\mathcal{B}$  die Einheitszelle einer periodischen Mikrostruktur, muß  $\boldsymbol{\varepsilon}^* \approx \langle \boldsymbol{\varepsilon}^* \rangle_{\mathcal{J}_1}$  als Approximation a priori vorausgesetzt werden, um (III.2.26a,b) zu erhalten. Zu beachten ist ferner, daß  $\mathbb{P}^{\mathcal{J}_\alpha}$  in diesem Spezialfall über das Volumen des Einschlusses  $\mathcal{J}_\alpha$  zu mitteln ist. Die Eshelbytensoren  $\mathbb{S}^{\mathcal{J}_2}$  und  $\mathbb{S}^{\mathcal{J}_3}$  berechnen sich generell aus den Halbachsenverhältnissen der Einschlußellipsoide  $\mathcal{J}_2$  und  $\mathcal{J}_3$  und den Materialparametern des  $\mathcal{EHS}$ . Demzufolge ist  $\mathbb{S}^{\mathcal{J}_2} = \mathbb{S}^{\mathcal{J}_3}$  und  $\langle \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} \rangle_{\mathcal{J}_3 - \mathcal{J}_2} = \mathbf{0}$ , wenn  $\mathcal{J}_2$  und  $\mathcal{J}_3$  bei gleichen Halbachsenverhältnissen koaxial und ähnlich sind.

### 2.2.2. Anwendungsbeispiel Mehreinschlußverbund

Ausgehend von der elementaren Beziehung (III.2.26a,b) wird eine Verallgemeinerung auf  $n$ -phasige Mikrostrukturen angestrebt. Als erstes Modellproblem wird eine Mikrostruktur mit  $(n-1)$ -phasigem Einschluß betrachtet. Die Anordnung der Phasen  $\mathcal{J}_1 \subset \mathcal{J}_2 \subset \dots \subset \mathcal{J}_n$ , die mit unterschiedlichen Steifigkeiten  $\mathbb{C}^1, \mathbb{C}^2, \dots, \mathbb{C}^n = \mathbb{C}^{\mathcal{M}}$  jeweils durch eine ellipsoide Berandung voneinander abgegrenzt sind, ist in Abb. 22a für einen dreiphasigen Einschluß exemplarisch dargestellt. Das mit  $\mathcal{J}_n$  indizierte Ellipsoid umschließt alle anderen Phasen des Komposits. Koaxialität der Ellipsoide ist nicht zwingend erforderlich, ist aber als Spezialfall in nachfolgenden Betrachtungen stets enthalten. In Abb. 22b ist im  $\mathcal{EHS}$  die Topologie der heterogenen Ausgangsstruktur durch die ellipsoiden Begrenzungslinien der einzelnen Phasen sichtbar. Um nun Konsistenz von Spannungen und Verzerrungen zwischen heterogenem Material und  $\mathcal{EHS}$  zu



**Abbildung 22:** a) Komposit und b) äquivalent homogener Körper mit dreiphasigem Einschluß, der im ellipsoiden Teilbereich  $\mathcal{I}_4$  des unendlich gedachten Gebiets  $\mathcal{B}$  eingebettet ist.

erzielen, werden in den Teilbereichen  $\mathcal{I}_1, (\mathcal{I}_2 - \mathcal{I}_1), \dots, (\mathcal{I}_n - \mathcal{I}_{n-1})$  nacheinander homogene Transformationsverzerrungen  $\mathcal{E}^1, \mathcal{E}^2, \dots, \mathcal{E}^n$  spontan eingeführt, so wie es im Fall des  $\mathcal{EHS}$  in Abb. 22b schematisiert wird. Transformationsverzerrungen  $\mathcal{E}^\beta$  für  $1 < \beta \leq n$  werden erzeugt, indem man  $\mathcal{E}^\beta$  in  $\mathcal{I}_\beta$  und  $-\mathcal{E}^\beta$  in  $\mathcal{I}_{\beta-1}$  vorgibt. Auf diese Weise lassen sich die Verzerrungsmittelwerte  $\langle \tilde{\mathcal{E}} \rangle_{\mathcal{I}_1}$  infolge  $\mathcal{E}^\beta \in \mathcal{I}_\beta - \mathcal{I}_{\beta-1}$  für  $1 < \beta \leq n$  mit Hilfe der Standardbeziehung (III.2.12) von Eshelby motivieren. Sie ergeben sich aus der Differenz  $\langle \tilde{\mathcal{E}} \rangle_{\mathcal{I}_1} = \langle \tilde{\mathcal{E}} \rangle_{\mathcal{I}_\beta} - \langle \tilde{\mathcal{E}} \rangle_{\mathcal{I}_{\beta-1}}$  unter der Voraussetzung, daß Transformationsverzerrungen in ellipsoiden Bereichen der Gesamtstruktur konstant sind. Als Phasenmittelwerte ergeben sich schließlich

$$\langle \tilde{\mathcal{E}} \rangle_{\mathcal{I}_1} = \begin{cases} (\mathbb{S}^{\mathcal{I}_\beta} - \mathbb{S}^{\mathcal{I}_{\beta-1}}) : \mathcal{E}^\beta & , \mathcal{I}_\beta \neq \mathcal{I}_1 \\ \mathbb{S}^{\mathcal{I}_1} : \mathcal{E}^1 & , \mathcal{I}_\beta = \mathcal{I}_1 \end{cases} \quad (\text{III.2.27})$$

Bei der Berechnung der Verzerrungsmittelwerte  $\langle \tilde{\mathcal{E}} \rangle_{\mathcal{I}_\alpha - \mathcal{I}_{\alpha-1}}$  für  $1 < \alpha \leq n$  sind vier Fälle zu unterscheiden, in denen nach Art der Konstellation der räumlichen Teilgebiete  $\mathcal{I}_\alpha - \mathcal{I}_{\alpha-1}$  und  $\mathcal{I}_\beta$  mit Transformationsverzerrungen  $\mathcal{E}^\beta$ ,  $\beta \neq \alpha$  und  $1 \leq \beta \leq n$ , differenziert wird. Der Fall  $\mathcal{I}_\alpha \subset \mathcal{I}_\beta \neq \mathcal{I}_1$  entspricht der geometrischen Konstellation, die als Mittelwerte (III.2.27)<sub>1</sub> ergibt. Verzerrungsmittelwerte  $\langle \tilde{\mathcal{E}} \rangle_{\mathcal{I}_\alpha - \mathcal{I}_{\alpha-1}}$  sind daher analog zu bilden. Im Fall  $\mathcal{I}_\alpha \supset \mathcal{I}_\beta \neq \mathcal{I}_1$  werden die Verzerrungsmittelwerte aus (III.2.26a) durch Überlagerung der Belastungszustände  $\mathcal{E}^\beta \in \mathcal{I}_\beta$  und  $-\mathcal{E}^\beta \in \mathcal{I}_{\beta-1}$  gewonnen. Für  $\mathcal{I}_\alpha = \mathcal{I}_\beta \neq \mathcal{I}_1$  ist  $\langle \tilde{\mathcal{E}} \rangle_{\mathcal{I}_\alpha - \mathcal{I}_{\alpha-1}}$  eine Komposition aus  $\mathcal{E}^\alpha \in \mathcal{I}_\alpha$  und  $-\mathcal{E}^\alpha \in \mathcal{I}_{\alpha-1}$ . Der letzte Fall  $\mathcal{I}_\beta = \mathcal{I}_1$  beinhaltet die bereits in Abb. 21a angenommene Konstellation. Insgesamt leiten sich aus diesen Betrachtungen die Darstellungen

$$\langle \tilde{\mathcal{E}} \rangle_{\mathcal{I}_\alpha - \mathcal{I}_{\alpha-1}} = \begin{cases} (\mathbb{S}^{\mathcal{I}_\beta} - \mathbb{S}^{\mathcal{I}_{\beta-1}}) : \mathcal{E}^\beta & , \mathcal{I}_\alpha \subset \mathcal{I}_\beta \neq \mathcal{I}_1 \\ \frac{v_\beta - v_{\beta-1}}{v_\alpha - v_{\alpha-1}} (\mathbb{S}^{\mathcal{I}_\alpha} - \mathbb{S}^{\mathcal{I}_{\alpha-1}}) : \mathcal{E}^\beta & , \mathcal{I}_\alpha \supset \mathcal{I}_\beta \neq \mathcal{I}_1 \\ \mathbb{S}^{\mathcal{I}_\alpha} : \mathcal{E}^\alpha - \frac{v_{\alpha-1}}{v_\alpha - v_{\alpha-1}} (\mathbb{S}^{\mathcal{I}_\alpha} - \mathbb{S}^{\mathcal{I}_{\alpha-1}}) : \mathcal{E}^\alpha & , \mathcal{I}_\alpha = \mathcal{I}_\beta \neq \mathcal{I}_1 \\ \frac{v_1}{v_\alpha - v_{\alpha-1}} (\mathbb{S}^{\mathcal{I}_\alpha} - \mathbb{S}^{\mathcal{I}_{\alpha-1}}) : \mathcal{E}^1 & , \mathcal{I}_\beta = \mathcal{I}_1 \end{cases} \quad (\text{III.2.28})$$

mit  $v_\alpha = |\mathcal{I}_\alpha|/|\mathcal{I}_n|$  für  $1 \leq \alpha \leq n$  ab. Die Verzerrungsfelder in (III.2.27) und (III.2.28) sind zu superponieren. Zusammen mit der in Box 2 angegebenen Beziehung zwischen Spannungsfluk-

tuationen und Transformationsverzerrungen erhält man schließlich die Fluktuationenmittelwerte

$$\langle \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} \rangle_{\mathcal{I}_\alpha - \mathcal{I}_{\alpha-1}} = \sum_{\beta=\alpha+1}^n (\mathbb{S}^{\mathcal{I}_\beta} - \mathbb{S}^{\mathcal{I}_{\beta-1}}) : \boldsymbol{\varepsilon}^{*\beta} + \mathbb{S}^{\mathcal{I}_\alpha} : \boldsymbol{\varepsilon}^{*\alpha} + \frac{1}{v_\alpha - v_{\alpha-1}} (\mathbb{S}^{\mathcal{I}_\alpha} - \mathbb{S}^{\mathcal{I}_{\alpha-1}}) : \left( v_1 \boldsymbol{\varepsilon}^{*1} - v_{\alpha-1} \boldsymbol{\varepsilon}^{*\alpha} + \sum_{\beta=2}^{\alpha-1} (v_\beta - v_{\beta-1}) \boldsymbol{\varepsilon}^{*\beta} \right) \quad (\text{III.2.29a})$$

$$\langle \boldsymbol{\sigma}' \rangle_{\mathcal{I}_\alpha - \mathcal{I}_{\alpha-1}} = \mathbb{C}^E : (\langle \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} \rangle_{\mathcal{I}_\alpha - \mathcal{I}_{\alpha-1}} - \boldsymbol{\varepsilon}^{*\alpha}) \quad (\text{III.2.29b})$$

in Phase  $\mathcal{I}_\alpha - \mathcal{I}_{\alpha-1}$  für  $1 < \alpha \leq n$  und

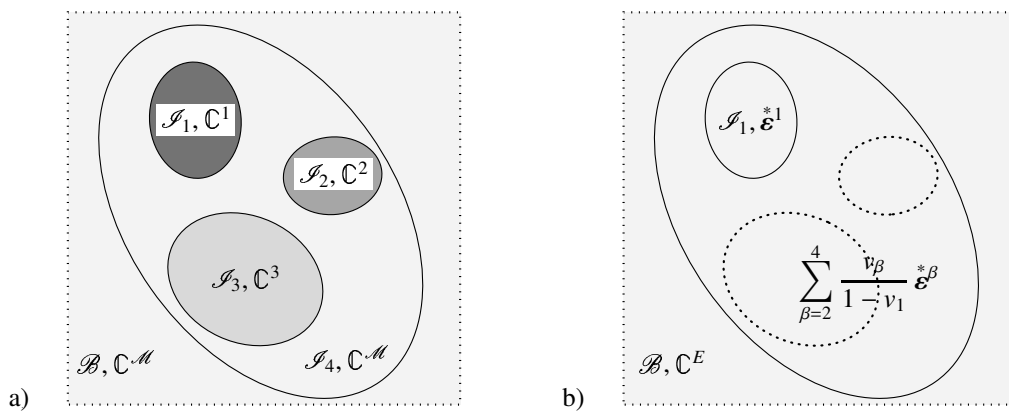
$$\langle \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} \rangle_{\mathcal{I}_1} = \mathbb{S}^{\mathcal{I}_1} : \boldsymbol{\varepsilon}^{*1} + \sum_{\beta=2}^n (\mathbb{S}^\beta - \mathbb{S}^{\beta-1}) : \boldsymbol{\varepsilon}^{*\beta} \quad (\text{III.2.30a})$$

$$\langle \boldsymbol{\sigma}' \rangle_{\mathcal{I}_1} = \mathbb{C}^E : (\langle \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} \rangle_{\mathcal{I}_1} - \boldsymbol{\varepsilon}^{*1}) \quad (\text{III.2.30b})$$

in Phase  $\mathcal{I}_1$ . Es folgt  $\mathbb{S} = \mathbb{S}^\alpha$  für  $1 \leq \alpha \leq n$ , falls alle Ellipsoide koaxial und ähnlich sind. Gleichungen (III.2.29a,b) und (III.2.30a,b) reduzieren sich in diesem speziellen Fall auf  $\langle \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} \rangle_{\mathcal{I}_\alpha - \mathcal{I}_{\alpha-1}} = \mathbb{S} : \boldsymbol{\varepsilon}^{*\alpha}$  und  $\langle \boldsymbol{\sigma}' \rangle_{\mathcal{I}_\alpha - \mathcal{I}_{\alpha-1}} = \mathbb{C}^E : (\mathbb{S} - \mathbb{I}) : \boldsymbol{\varepsilon}^{*\alpha}$  für  $1 < \alpha \leq n$  sowie auf  $\langle \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} \rangle_{\mathcal{I}_1} = \mathbb{S} : \boldsymbol{\varepsilon}^{*1}$  und  $\langle \boldsymbol{\sigma}' \rangle_{\mathcal{I}_1} = \mathbb{C}^E : (\mathbb{S} - \mathbb{I}) : \boldsymbol{\varepsilon}^{*1}$  für  $\alpha = 1$ .

### 2.2.3. Anwendungsbeispiel Mehrphasenverbund

Als zweites Modellproblem wird eine Mikrostruktur mit  $n-1$  disjunkt verteilten Einschlüssen betrachtet. Die jeweils ellipsoid begrenzten Einschlußphasen  $\mathcal{I}_1 \subset \mathcal{I}_2 \subset \dots \subset \mathcal{I}_n$  sind mit unterschiedlichen Steifigkeiten  $\mathbb{C}^1, \mathbb{C}^2, \dots, \mathbb{C}^n = \mathbb{C}^M$  versehen. Das Ellipsoid  $\mathcal{I}_n$  enthält alle Phasen des Komposits. In Abb. 23 ist exemplarisch ein vierphasiges Material mit zugehörigem  $\mathcal{EHS}$  dargestellt. Beim Mehrphasenmodell wird der Einfluß spontaner Gestaltänderungen in  $\mathcal{B}$ , ausgelöst durch Einführung phasenweise homogen verteilter Transformationsverzerrungen  $\boldsymbol{\varepsilon}^{*\beta}$  in  $\mathcal{I}_\beta$  mit  $1 \leq \beta < n$  und  $\boldsymbol{\varepsilon}^{*n}$  in  $\Gamma = \mathcal{I}_n - \sum_{\alpha=1}^{n-1} \mathcal{I}_\alpha$ , auf jede einzelne Phase analysiert



**Abbildung 23:** a) Komposit mit drei Einschlußphasen, die im ellipsoiden Teilbereich  $\mathcal{I}_4$  des unendlich gedachten Gebiets  $\mathcal{B}$  eingebettet sind. b) Äquivalent homogener Körper. Phasenmittelwerte  $\langle \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} \rangle_{\mathcal{I}_1}$  der Verzerrungsfluktuationen im Einschluß  $\mathcal{I}_1$  werden berechnet, indem man in  $\mathcal{I}_1$  bzw.  $\mathcal{I}_n - \mathcal{I}_1$  gleichmäßig Transformationsverzerrungen  $\boldsymbol{\varepsilon}^{*1}$  bzw.  $\sum_{\beta=2}^4 \frac{v_\beta}{1-v_1} \boldsymbol{\varepsilon}^{*\beta}$  spontan definiert.

und in den Homogenisierungsprozeß einbezogen. In [Abb. 23b](#) wird dies beispielhaft am Ein-  
schluß  $\mathcal{J}_1$  demonstriert. Der Zusammenhang zwischen Transformationsverzerrungen  $\mathbf{\tilde{\epsilon}}^\beta \in \mathcal{J}_\beta$ ,  
die über das Volumen von  $\mathcal{J}_n - \mathcal{J}_\alpha$  mit  $1 \leq \alpha < n$  und  $\alpha \neq \beta$  zu verschmieren sind, und Phasen-  
verzerrungen  $\langle \tilde{\mathbf{\epsilon}} \rangle_{\mathcal{J}_\alpha} \in \mathcal{J}_\alpha$  läßt sich analog zu Gleichung [\(III.2.27\)](#)<sub>1</sub> motivieren. Der Einfluß von  
 $\mathbf{\tilde{\epsilon}}^n \in \Gamma$  auf die Phasenmittelwerte  $\langle \tilde{\mathbf{\epsilon}} \rangle_{\mathcal{J}_\alpha}$  für  $1 \leq \alpha < n$  wird durch Überlagerung der Belastungs-  
zustände  $\mathbf{\tilde{\epsilon}}^n \in \mathcal{J}_n$  und  $-\mathbf{\tilde{\epsilon}}^n \in \mathcal{J}$  realisiert unter der Annahme, daß Transformationsverzerrungen  
innerhalb eines ellipsoiden Teilbereichs homogen sind. Transformationsverzerrungen  $\mathbf{\tilde{\epsilon}}^\alpha \in \mathcal{J}_\alpha$   
mit  $1 \leq \alpha < n$  bewirken daselbst ein Fluktuationsverzerrungsfeld der Form [\(III.2.12\)](#). Aus die-  
sen Überlegungen ergeben sich die Phasenmittelwerte

$$\langle \tilde{\mathbf{\epsilon}} \rangle_{\mathcal{J}_\alpha} = \begin{cases} (\mathbb{S}^{\mathcal{J}_n} - \mathbb{S}^{\mathcal{J}_\alpha}) : \mathbf{\tilde{\epsilon}}^n & , \mathcal{J}_\beta = \mathcal{J}_n \\ \mathbb{S}^{\mathcal{J}_\alpha} : \mathbf{\tilde{\epsilon}}^\alpha & , \mathcal{J}_\beta = \mathcal{J}_\alpha \\ \frac{v_\beta}{1 - v_\alpha} (\mathbb{S}^{\mathcal{J}_n} - \mathbb{S}^{\mathcal{J}_\alpha}) : \mathbf{\tilde{\epsilon}}^\beta & , \mathcal{J}_\alpha \neq \mathcal{J}_\beta \neq \mathcal{J}_n \end{cases} \quad (\text{III.2.31})$$

mit  $v_\alpha = |\mathcal{J}_\alpha|/|\mathcal{J}_n|$  für  $1 \leq \alpha < n$ . Zur Berechnung der Mittelwerte  $\langle \tilde{\mathbf{\epsilon}} \rangle_\Gamma$  läßt sich die Mean-  
Field-Theorie anwenden. Die Wechselwirkung zwischen  $\mathbf{\tilde{\epsilon}}^\alpha$  innerhalb eines einzelnen Ein-  
schlusses  $\mathcal{J}_\alpha$  und den Verzerrungen  $\langle \tilde{\mathbf{\epsilon}} \rangle_\Gamma$  in  $\Gamma$  wird demnach basierend auf [\(III.2.26a\)](#)<sub>1</sub> durch  
 $v_n \langle \tilde{\mathbf{\epsilon}} \rangle_\Gamma = v_\alpha (\mathbb{S}^{\mathcal{J}_n} - \mathbb{S}^{\mathcal{J}_\alpha}) : \mathbf{\tilde{\epsilon}}^\alpha = v_\alpha (\mathbb{S}^{\mathcal{J}_n} : \mathbf{\tilde{\epsilon}}^\alpha - \langle \tilde{\mathbf{\epsilon}} \rangle_\alpha)$  mit  $v_n = |\Gamma|/|\mathcal{J}_n|$  beschrieben. Im Phasenver-  
bund folgt daraus mit  $\mathbf{\tilde{\epsilon}}^n \in \Gamma$  und  $\mathbf{\tilde{\epsilon}}^\alpha \in \mathcal{J}_\alpha$  für  $1 \leq \alpha < n$  schließlich

$$\langle \tilde{\mathbf{\epsilon}} \rangle_\Gamma = \mathbb{S}^{\mathcal{J}_n} : \mathbf{\tilde{\epsilon}}^n + \sum_{\alpha=1}^{n-1} \frac{v_\alpha}{v_n} (\mathbb{S}^{\mathcal{J}_n} : \mathbf{\tilde{\epsilon}}^\alpha - \langle \tilde{\mathbf{\epsilon}} \rangle_{\mathcal{J}_\alpha}) \quad (\text{III.2.32})$$

Diese Gleichung kann alternativ aus den Mischungsansätzen  $v_n \langle \tilde{\mathbf{\epsilon}} \rangle_\Gamma = \langle \tilde{\mathbf{\epsilon}} \rangle_{\mathcal{J}_n} - \sum_{\alpha=1}^{n-1} v_\alpha \langle \tilde{\mathbf{\epsilon}} \rangle_{\mathcal{J}_\alpha}$  mit  
 $\langle \tilde{\mathbf{\epsilon}} \rangle_{\mathcal{J}_n} = \mathbb{S}^{\mathcal{J}_n} : \mathbf{\tilde{\epsilon}}^n$  und  $\mathbf{\tilde{\epsilon}}^n = v_n \mathbf{\tilde{\epsilon}}^n + \sum_{\alpha=1}^{n-1} v_\alpha \mathbf{\tilde{\epsilon}}^\alpha$  gewonnen werden. Zur Berechnung der effektiven  
Phasenverzerrungen sind die Ansätze [\(III.2.31\)](#) und [\(III.2.32\)](#) zu überlagern. Berücksichtigt  
man die in [Box 2](#) angegebene Beziehung zwischen Spannungsfluktuationen und Transfor-  
mationsverzerrungen, erhält man schließlich in Phase  $\mathcal{J}_\alpha$  für  $1 \leq \alpha < n$  als Fluktuationsmittelwerte

$$\langle \tilde{\mathbf{\epsilon}} \rangle_{\mathcal{J}_\alpha} = \mathbb{S}^{\mathcal{J}_\alpha} : \mathbf{\tilde{\epsilon}}^\alpha + \sum_{\substack{\beta=1 \\ \alpha \neq \beta}}^n \frac{v_\beta}{1 - v_\alpha} (\mathbb{S}^{\mathcal{J}_n} - \mathbb{S}^{\mathcal{J}_\alpha}) : \mathbf{\tilde{\epsilon}}^\beta \quad (\text{III.2.33a})$$

$$\langle \boldsymbol{\sigma}' \rangle_{\mathcal{J}_\alpha} = \mathbb{C}^E : (\langle \tilde{\mathbf{\epsilon}} \rangle_{\mathcal{J}_\alpha} - \mathbf{\tilde{\epsilon}}^\alpha) \quad (\text{III.2.33b})$$

und in Phase  $\Gamma$

$$\langle \tilde{\mathbf{\epsilon}} \rangle_\Gamma = \mathbb{S}^{\mathcal{J}_n} : \mathbf{\tilde{\epsilon}}^n + \sum_{\alpha=1}^{n-1} \frac{v_\alpha}{v_n(1 - v_\alpha)} (\mathbb{S}^{\mathcal{J}_n} - \mathbb{S}^{\mathcal{J}_\alpha}) : \left( \mathbf{\tilde{\epsilon}}^\alpha - \sum_{\beta=1}^n v_\beta \mathbf{\tilde{\epsilon}}^\beta \right) \quad (\text{III.2.34a})$$

$$\langle \boldsymbol{\sigma}' \rangle_\Gamma = \mathbb{C}^E : (\langle \tilde{\mathbf{\epsilon}} \rangle_\Gamma - \mathbf{\tilde{\epsilon}}^n) \quad (\text{III.2.34b})$$

Sind alle Ellipsoide koaxial und ähnlich, ergibt sich aus [\(III.2.33a,b\)](#) und [\(III.2.34a,b\)](#) we-  
gen  $\mathbb{S} = \mathbb{S}^\alpha$  für  $1 \leq \alpha \leq n$  als Konsequenz  $\langle \tilde{\mathbf{\epsilon}} \rangle_{\mathcal{J}_\alpha} = \mathbb{S} : \mathbf{\tilde{\epsilon}}^\alpha$  und  $\langle \boldsymbol{\sigma}' \rangle_{\mathcal{J}_\alpha} = \mathbb{C}^E : (\mathbb{S} - \mathbb{I}) : \mathbf{\tilde{\epsilon}}^\alpha$  für  
 $1 \leq \alpha < n$  sowie  $\langle \tilde{\mathbf{\epsilon}} \rangle_\Gamma = \mathbb{S} : \mathbf{\tilde{\epsilon}}^n$  und  $\langle \boldsymbol{\sigma}' \rangle_\Gamma = \mathbb{C}^E : (\mathbb{S} - \mathbb{I}) : \mathbf{\tilde{\epsilon}}^n$  für  $\alpha = n$ .



## 2.3. Hashin-Shtrikman-Variationsprinzipien zur Schrankenformulierung

Neben dem Prinzip vom Minimum der potentiellen Energie und dem der komplementären potentiellen Energie bilden Hashin-Shtrikman-Variationsfunktionale eine weitere wesentliche Voraussetzung zur Konstruktion analytisch rigoroser Schranken effektiver Makrovariablen. Sie werden in diesem Abschnitt im deformationsgetriebenen Kontext durch Vorgabe makroskopischer Verzerrungen  $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$  und im spannungsgetriebenen Kontext durch Vorgabe makroskopischer Spannungen  $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$  in einer verallgemeinerten Form aufbereitet. Als Basisliteratur dienen hierzu die Arbeiten von TALBOT & WILLIS [149] und PONTE CASTAÑEDA & SUQUET [131].

### 2.3.1. Definition effektiver Potentiale

Makrovariablen  $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$  und  $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$  erzeugen im  $\mathcal{EHS}$  der Mikrostruktur  $\mathcal{B}$ , die mit Moduli  $\mathbb{C}^E$  und Flexibilitäten  $\mathbb{D}^E$  versehen ist, einen homogenen Spannungs- und Verzerrungszustand. Mit der heterogenen Ausgangsstruktur konsistente Spannungen und Verzerrungen werden durch spontan in  $\mathcal{B}$  definierte Transformationsspannungen  $\overset{*}{\boldsymbol{\sigma}}$  oder -verzerrungen  $\overset{*}{\boldsymbol{\varepsilon}}$  erzielt. Zwischen  $\overset{*}{\boldsymbol{\sigma}}$  und Verzerrungen  $\boldsymbol{\varepsilon}$  sowie  $\overset{*}{\boldsymbol{\varepsilon}}$  und Spannungen  $\boldsymbol{\sigma}$  bestehen wegen (III.2.8)–(III.2.10) die Beziehungen

$$\overset{*}{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{x}) = \delta\mathbb{C}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) \quad \text{mit} \quad \delta\mathbb{C}(\mathbf{x}) = \mathbb{C}(\mathbf{x}) - \mathbb{C}^E \quad \forall \mathbf{x} \in \mathcal{B} \quad (\text{III.2.35a})$$

$$\overset{*}{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{x}) = \delta\mathbb{D}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) \quad \text{mit} \quad \delta\mathbb{D}(\mathbf{x}) = \mathbb{D}(\mathbf{x}) - \mathbb{D}^E \quad \forall \mathbf{x} \in \mathcal{B} \quad (\text{III.2.35b})$$

Die Hashin-Shtrikman-Variationsprinzipien setzen die Existenz effektiver Potentiale voraus, aus denen durch Variation sowohl die konstitutiven Beziehungen (III.2.35a,b) als auch die für Mikrostrukturen geltende Gleichgewichtsbedingung (III.1.2)<sub>2</sub> als Euler-Gleichungen hervorgehen. Als ersten Schritt führen die Autoren TALBOT & WILLIS [149] und PONTE CASTAÑEDA & SUQUET [131] die im homogenen  $\mathcal{EHS}$  gespeicherte konvexe Freie Energie  $W^E = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbb{C}^E : \boldsymbol{\varepsilon}$  so ein, daß ihre Differenz  $(W - W^E)$  zur Verzerrungsenergie  $W = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbb{C} : \boldsymbol{\varepsilon}$  des heterogenen Ausgangsmaterials strikt konkav bzw. negativ definit ist. Abschnitt 3.2 des Kapitels II folgend ist der dem Ausdruck  $(W - W^E)$  zugeordnete strikt konkave Pol und Bipol definiert durch

$$(W - W^E)_*(\overset{*}{\boldsymbol{\sigma}}) = \inf_{\boldsymbol{\varepsilon}} \{ \overset{*}{\boldsymbol{\sigma}} : \boldsymbol{\varepsilon} - (W - W^E)(\boldsymbol{\varepsilon}) \} \quad (\text{III.2.36a})$$

$$(W - W^E)(\boldsymbol{\varepsilon}) = \inf_{\overset{*}{\boldsymbol{\sigma}}} \{ \overset{*}{\boldsymbol{\sigma}} : \boldsymbol{\varepsilon} - (W - W^E)_*(\overset{*}{\boldsymbol{\sigma}}) \} \quad (\text{III.2.36b})$$

mit  $(W - W^E)_{**} \equiv (W - W^E)$ . Analog zu obiger Vorgehensweise definieren dieselben Autoren das komplementäre konvexe Potential  $U^E = \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} : \mathbb{D}^E : \boldsymbol{\sigma}$  derart, daß dessen Abweichung  $(U - U^E)$  von  $U = \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} : \mathbb{D} : \boldsymbol{\sigma}$  strikt konvex bzw. positiv definit ist. Daraus ergibt sich

$$(U - U^E)^*(\overset{*}{\boldsymbol{\varepsilon}}) = \sup_{\boldsymbol{\sigma}} \{ \overset{*}{\boldsymbol{\varepsilon}} : \boldsymbol{\sigma} - (U - U^E)(\boldsymbol{\sigma}) \} \quad (\text{III.2.37a})$$

$$(U - U^E)(\boldsymbol{\sigma}) = \sup_{\overset{*}{\boldsymbol{\varepsilon}}} \{ \overset{*}{\boldsymbol{\varepsilon}} : \boldsymbol{\sigma} - (U - U^E)^*(\overset{*}{\boldsymbol{\varepsilon}}) \} \quad (\text{III.2.37b})$$

mit  $(U - U^E)^{**} \equiv (U - U^E)$ . Partielle Differentiation von (III.2.36a) nach  $\boldsymbol{\varepsilon}$  und von (III.2.37a) nach  $\boldsymbol{\sigma}$  liefert als Optimalitätsbedingungen (III.2.35a,b). Die gesuchten effektiven Potentialfunktionen  $\bar{W}$  und  $\bar{U}$  werden schließlich aus (III.2.36b) und (III.2.37b) gewonnen, indem man das Prinzip vom Minimum der potentiellen Energie auf (III.2.36b) und das dazu komplementäre Prinzip auf (III.2.37b) anwendet. Im Detail gilt

$$\bar{W}(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}) = \inf_{\boldsymbol{\varepsilon} \in \mathcal{Q}(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}})} \{ \inf_{\overset{*}{\boldsymbol{\sigma}}} \langle W^E(\boldsymbol{\varepsilon}) + \overset{*}{\boldsymbol{\sigma}} : \boldsymbol{\varepsilon} - (W - W^E)_*(\overset{*}{\boldsymbol{\sigma}}) \rangle \} \quad (\text{III.2.38a})$$

$$\bar{U}(\bar{\boldsymbol{\sigma}}) = \inf_{\boldsymbol{\sigma} \in \mathcal{F}(\bar{\boldsymbol{\sigma}})} \{ \sup_{\overset{*}{\boldsymbol{\varepsilon}}} \langle U^E(\boldsymbol{\sigma}) + \overset{*}{\boldsymbol{\varepsilon}} : \boldsymbol{\sigma} - (U - U^E)^*(\overset{*}{\boldsymbol{\varepsilon}}) \rangle \} \quad (\text{III.2.38b})$$



Verschiebungen müssen mit den durch  $\mathcal{U}(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}) = \{\mathbf{u} \in \mathcal{H}^1(\mathcal{B})^3 \mid \mathbf{u} \text{ genügt (III.1.10)}\}$  und Spannungen mit den durch  $\mathcal{T}(\bar{\boldsymbol{\sigma}}) = \{\boldsymbol{\sigma} \in \mathcal{S}(3) \mid \boldsymbol{\sigma} \text{ genügt (III.1.21)}\}$  definierten Randbedingungen verträglich sein. Das Klammerpaar  $\langle \{\cdot\} \rangle \equiv \frac{1}{|\mathcal{B}|} \int_{\mathcal{B}} \{\cdot\} dV$ , welches im Kontext der Ensemblemittelung verwendet wird, gestattet hier eine einfache Darstellungsweise. Es wird in dieser Arbeit aber grundsätzlich davon ausgegangen, daß  $\mathcal{B}$  die nötigen Rahmenbedingungen einer ergodischen Mikrostruktur erfüllt und somit Volumen- und Ensemblemittelung gleichbedeutend sind. Siehe in diesem Zusammenhang auch Abschnitt 1.1. Eine Analyse der ersten Variation von (III.2.38a,b) zeigt, daß beide effektiven Potentiale die Kompatibilität mit dem mikroskopischen Randwertproblem gewährleisten. Erste Variation von (III.2.38a) bezüglich den Variablen  $\mathbf{u}$  und  $\bar{\boldsymbol{\sigma}}^*$  liefert unter Berücksichtigung des Gaußschen Integralsatzes als Euler-Gleichungen

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbb{C}^E : \boldsymbol{\varepsilon} + \bar{\boldsymbol{\sigma}}^* \quad , \quad (\boldsymbol{\sigma} - \mathbb{C}^E : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}) \cdot \mathbf{n} = \mathbf{0} \text{ auf } \partial\mathcal{B} \quad , \quad \text{div}[\boldsymbol{\sigma}] = \mathbf{0} \text{ in } \mathcal{B} \quad (\text{III.2.39})$$

Hier ist zu beachten, daß  $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$  im  $\mathcal{EHS}$  den homogenen Spannungszustand  $\mathbb{C}^E : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$  erzeugt.  $\mathbf{n}$  ist Normalenvektor auf  $\partial\mathcal{B}$ . Durch Variation von (III.2.38b) bezüglich  $\boldsymbol{\sigma}$  und  $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^*$  gelangt man unter Berücksichtigung des Gaußschen Integralsatzes zu den Euler-Gleichungen

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbb{D}^E : \boldsymbol{\sigma} + \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^* \quad , \quad (\mathbb{C}^E : \boldsymbol{\varepsilon} - \bar{\boldsymbol{\sigma}}) \cdot \mathbf{n} = \mathbf{0} \text{ auf } \partial\mathcal{B} \quad , \quad \text{div}[\boldsymbol{\sigma}] = \mathbf{0} \text{ in } \mathcal{B} \quad (\text{III.2.40})$$

Effektive Spannungen  $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$  bewirken hier den homogenen Verzerrungszustand  $\mathbb{D}^E : \bar{\boldsymbol{\sigma}}$  im  $\mathcal{EHS}$ .

### 2.3.2. Variationsprinzipien und Schranken bei Vorgabe homogener Verzerrungen

Bei einer durch  $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$  deformationsgetriebenen Mikrostruktur sind Funktionale unter Einbeziehung eines Lösungsansatzes für das mikroskopische Randwertproblem (III.2.39) zu spezifizieren, die bei entsprechender Variation möglichst scharfe obere und untere Schranken des effektiven Potentials (III.2.38a) liefern. Die Lösung des mikroskopischen Randwertproblems (III.2.39) wird durch einen Ansatz der Form (A.10)<sub>2</sub> beschrieben. Der Integrationsbereich wird aber nicht, wie in (A.10)<sub>2</sub> geschehen, auf eine einzelne Phase beschränkt, sondern auf  $\mathcal{B}$  ausgedehnt, sodaß

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} - \int_{\mathcal{B}} \boldsymbol{\Gamma}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) : [\bar{\boldsymbol{\sigma}}^*(\mathbf{y}) - \langle \bar{\boldsymbol{\sigma}}^* \rangle] dV(\mathbf{y}) \quad \forall \mathbf{x} \in \mathcal{B} \quad (\text{III.2.41})$$

Der Mittelwert  $\langle \bar{\boldsymbol{\sigma}}^* \rangle$  sorgt dafür, daß mikroskopische und makroskopische Verzerrungen für den Fall  $\langle \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) \rangle = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$  verträglich sind. Allgemein bezeichne  $\langle \{\cdot\} \rangle$  die Ensemblemittelung bzw. das über  $\mathcal{B}$  gebildete Volumenmittel einer mikroskopischen Größe  $\{\cdot\}$ . Aufgrund der Selbstadjungiertheit von  $\boldsymbol{\Gamma}$  wird in der Literatur anstelle von (III.2.41) häufig die kompakte Schreibweise

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} - \boldsymbol{\Gamma} : \bar{\boldsymbol{\sigma}}^* \quad (\text{III.2.42})$$

verwendet mit dem linearen Operator

$$\boldsymbol{\Gamma} : \bar{\boldsymbol{\sigma}}^*(\mathbf{x}) \mapsto \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{x}) = - \int_{\mathcal{B}} \boldsymbol{\Gamma}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) : [\bar{\boldsymbol{\sigma}}^*(\mathbf{y}) - \langle \bar{\boldsymbol{\sigma}}^* \rangle] dV(\mathbf{y}) \quad \forall \mathbf{x} \in \mathcal{B} \quad (\text{III.2.43})$$

In Bezug auf die sogenannte Lippmann-Schwinger-Gleichung (III.2.42) siehe beispielsweise KRÖNER [92] und WILLIS [172, 173]. Fluktuationen  $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}$  genügen hier als Eigenverzerrungen der Bedingung  $\int_{\mathcal{B}} \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} dV = \mathbf{0}$ . Inversion von (III.2.42) ergibt mit (III.2.35a)

$$\left. \begin{aligned} \boldsymbol{\varepsilon} &= (\mathbb{I} + \boldsymbol{\Gamma} : \delta\mathbb{C})^{-1} : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \quad \text{in } \mathcal{B} \\ \boldsymbol{\sigma} &= (\mathbb{C}^E + \delta\mathbb{C}) : (\mathbb{I} + \boldsymbol{\Gamma} : \delta\mathbb{C})^{-1} : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \quad \text{in } \mathcal{B} \end{aligned} \right\} \quad (\text{III.2.44})$$

Variation von (III.2.38a) bezüglich  $\overset{*}{\sigma}$  liefert bei eingefrorener Variablen  $\varepsilon$  als Optimalitätsbedingung (III.2.35a) bzw. (III.2.39)<sub>1</sub>, mit der aus (III.2.38a)

$$\overline{W}(\bar{\varepsilon}) = \inf_{u \in \mathcal{U}(\bar{\varepsilon})} \langle \varepsilon : (\mathbb{C}^E + \delta\mathbb{C}) : \varepsilon \rangle \quad (\text{III.2.45})$$

folgt. Dem Prinzip vom Minimum der potentiellen Energie folgend wird die strikt konvexe rechte Seite vom Verschiebungsfeld  $u \in \mathcal{U}(\bar{\varepsilon})$  absolut minimiert, wenn es den Euler-Gleichungen (III.2.39) genügt. Jedes andere  $u$  ergibt

$$\overline{W}(\bar{\varepsilon}) \leq \frac{1}{2} \langle \varepsilon : (\mathbb{C}^E + \delta\mathbb{C}) : \varepsilon \rangle \quad (\text{III.2.46})$$

Die obere Schranke ist durch entsprechende Wahl der Testfunktion oder Variation  $\varepsilon$  zu optimieren. Mit (III.2.44)<sub>1</sub> kann eine Klasse von Testfunktionen gewonnen werden, die analytische Auswertung des inversen Terms bereitet aber im Allgemeinen Schwierigkeiten. In einem späteren Abschnitt wird gezeigt, daß hier eine Approximation der Inversen durch eine unvollständige Neumann-Reihe Abhilfe schaffen kann. Einfrieren der Variablen  $\overset{*}{\sigma}$  und Variation bezüglich  $\tilde{\varepsilon} = \varepsilon - \bar{\varepsilon}$  ist eine weitere Möglichkeit, eine Klasse von oberen Schranken des effektiven Potentials  $\overline{W}$  zu erhalten. Die Potentialfunktion  $\overline{W}$  wird zunächst unter Berücksichtigung der Zerlegung  $\varepsilon = \bar{\varepsilon} + \tilde{\varepsilon}$  und der Eigenschaft  $\int_{\mathcal{B}} \tilde{\varepsilon} dV = \mathbf{0}$  reformuliert als

$$\overline{W}(\bar{\varepsilon}) = \overline{W}^E(\bar{\varepsilon}) + \inf_{\overset{*}{\sigma}} \{ \inf_{\tilde{w}} \langle W^E(\bar{\varepsilon}) + \overset{*}{\sigma} : \tilde{\varepsilon} \rangle + \langle \overset{*}{\sigma} : \bar{\varepsilon} - \frac{1}{2} \langle \overset{*}{\sigma} : \delta\mathbb{C}^{-1} : \overset{*}{\sigma} \rangle \} \quad (\text{III.2.47})$$

Aus einer Variation von  $\overline{W}$  bezüglich  $\tilde{w}$  erhält man die Optimalitätsbedingung  $\overset{*}{\sigma} = -\mathbb{C}^E : \tilde{\varepsilon}$ , aus der man mit (III.2.43) die Identitäten

$$\mathbb{C}^E : \Gamma = \mathbb{1} \quad \Leftrightarrow \quad \Gamma : \mathbb{C}^E = \mathbb{1} \quad \Leftrightarrow \quad \Gamma : \mathbb{C}^E : \Gamma = \Gamma \quad (\text{III.2.48})$$

extrahiert. Die Optimalitätsbedingung eingesetzt in (III.2.47) führt zusammen mit (III.2.48) auf

$$\overline{W}(\bar{\varepsilon}) = \overline{W}^E(\bar{\varepsilon}) + \inf_{\overset{*}{\sigma}} \{ \langle \overset{*}{\sigma} : \bar{\varepsilon} - \frac{1}{2} \langle \overset{*}{\sigma} : (\Gamma + \delta\mathbb{C}^{-1}) : \overset{*}{\sigma} \rangle \} \quad (\text{III.2.49})$$

Bei dem eingeklammerten Ausdruck auf der rechten Seite der Gleichung handelt es sich um das klassische nach HASHIN & SHTRIKMAN [69, 70, 71] benannte Funktional. Minimiert  $\overset{*}{\sigma}$  die rechte Seite absolut, erfüllt das Hashin-Shtrikman-Funktional die Konsistenzbedingung  $\varepsilon = \bar{\varepsilon} + \tilde{\varepsilon}$ . Bei beliebiger Wahl von  $\overset{*}{\sigma}$  erhält man hingegen die obere Schranke

$$\overline{W}(\bar{\varepsilon}) \leq \overline{W}^E(\bar{\varepsilon}) + E(\overset{*}{\sigma}) \quad , \quad E(\overset{*}{\sigma}) = \langle \overset{*}{\sigma} : \bar{\varepsilon} - \frac{1}{2} \langle \overset{*}{\sigma} : (\Gamma + \delta\mathbb{C}^{-1}) : \overset{*}{\sigma} \rangle \quad (\text{III.2.50})$$

Die Testfunktion oder Variation  $\overset{*}{\sigma}$  ist hier mit Hilfe von (III.2.35a) und (III.2.44)<sub>1</sub> geeignet zu wählen. Variiert man sowohl (III.2.46) als auch (III.2.50) zweimal bezüglich  $\bar{\varepsilon}$ , wobei  $\overset{*}{\sigma}$  durch  $\delta\mathbb{C} : \varepsilon$  zu ersetzen ist, gelangt man zu folgenden Relationen

$$\left. \begin{aligned} \mathbb{C}(\mathbf{x}) - \mathbb{C}^E \text{ n.d.} &\Leftrightarrow \bar{\mathbb{C}} - \mathbb{C}^E \text{ n.d.} \Rightarrow \bar{\mathbb{C}} - \mathbb{C}^E \leq \mathbb{C}(\mathbf{x}) - \mathbb{C}^E \\ \mathbb{C}(\mathbf{x}) - \mathbb{C}^E \text{ p.d.} &\Leftrightarrow \bar{\mathbb{C}} - \mathbb{C}^E \text{ p.d.} \Rightarrow \bar{\mathbb{C}} - \mathbb{C}^E \geq \mathbb{C}(\mathbf{x}) - \mathbb{C}^E \end{aligned} \right\} \quad \forall \mathbf{x} \in \mathcal{B} \quad (\text{III.2.51})$$

in denen n.d. für negativ definit und p.d. für positiv definit steht. Der Schrankencharakter ist demnach von der Definitheit der Differenz  $\delta\mathbb{C}$  abhängig. Ist  $\delta\mathbb{C}$  positiv definit, sind die Ungleichheitszeichen in (III.2.46) und (III.2.50) umzukehren. Auf diese Weise kann man eine Familie unterer Schranken des effektiven Potentials  $\overline{W}$  konstruieren.

### 2.3.3. Variationsprinzipien und Schranken bei Vorgabe homogener Spannungen

Im Fall einer mit  $\bar{\sigma}$  spannungsgetriebenen Mikrostruktur  $\mathcal{B}$  werden in vollständiger Analogie zum vorangehenden Subabschnitt obere und untere Schranken des effektiven komplementären Potentials  $\bar{U}$  generiert. Führt man als Analogon zu  $\Gamma$  in (III.2.43) den linearen Operator  $\Lambda : \mathcal{E}^* \mapsto \bar{\sigma} = -\Lambda : \mathcal{E}^*$  ein, entstehen die Ungleichungen

$$\boxed{\bar{U}(\bar{\sigma}) \leq \frac{1}{2} \langle \sigma : (\mathbb{D}^E + \delta \mathbb{D}) : \sigma \rangle} \quad (\text{III.2.52})$$

und

$$\boxed{\bar{U}(\bar{\sigma}) \leq \bar{U}^E(\bar{\sigma}) + S(\mathcal{E}^*) \quad , \quad S(\mathcal{E}^*) = \langle \mathcal{E}^* : \bar{\sigma} - \frac{1}{2} \langle \mathcal{E}^* : (\Lambda + \delta \mathbb{D}^{-1}) : \mathcal{E}^* \rangle} \quad (\text{III.2.53})$$

mit positiv definitem  $\delta \mathbb{D}$ , in denen  $\sigma$  und  $\mathcal{E}^*$  als Testfunktionen geeignet zu wählen sind. Bei negativ definitem  $\delta \mathbb{D}$  kehren sich die oberen Schranken (III.2.52) und (III.2.53) in untere um. Als untere Schranken sind sie äquivalent mit (III.2.46) und (III.2.50). Dank dieser Äquivalenz sind obere bzw. untere auf (III.2.46) und (III.2.50) basierende Schranken gleichzeitig untere bzw. obere Grenzen von  $\bar{U}$ . Die Äquivalenz ist gleichbedeutend mit Dualität der Schrankenformulierungen, die mit Hilfe der in Abschnitt 3.2 des Kapitels II behandelten Legendre-Fenchel-Transformation zu verifizieren ist. Startpunkt ist das effektive Potential (III.2.38a) mit positiv definitem  $\delta \mathbb{C}$  oder konvexem Potential  $(W - W^E)^*$ . Umformungen ergeben

$$\begin{aligned} \bar{W}(\bar{\varepsilon}) &= \inf_{u \in \mathcal{U}(\bar{\varepsilon})} \{ \langle W^E(\varepsilon) \rangle + \sup_{\sigma^*} \{ \langle \sigma^* : \varepsilon \rangle - \langle (W - W^E)^*(\sigma^*) \rangle \} \\ &= \inf_{u \in \mathcal{U}(\bar{\varepsilon})} \{ \langle W^E(\varepsilon) \rangle + \sup_{\sigma^*} \{ \langle \sigma^* : \varepsilon \rangle - \sup_{\mathcal{E}^*} \langle \sigma^* : \mathcal{E}^* - (U - U^E)^*(\mathcal{E}^*) \rangle \} \\ &= \inf_{u \in \mathcal{U}(\bar{\varepsilon})} \{ \langle W^E(\varepsilon) \rangle + \inf_{\mathcal{E}^*} \{ \sup_{\sigma^*} \langle \sigma^* : \varepsilon - \sigma^* : \mathcal{E}^* \rangle + \langle (U - U^E)^*(\mathcal{E}^*) \rangle \} \\ &= \inf_{u \in \mathcal{U}(\bar{\varepsilon})} \langle W^E(\varepsilon) \rangle + \inf_{\mathcal{E}^*} \langle -\mathcal{E}^* : \sigma + (U - U^E)^*(\mathcal{E}^*) \rangle \\ &= \bar{W}^E(\bar{\varepsilon}) - \sup_{\mathcal{E}^*} \langle \mathcal{E}^* : \sigma - (U - U^E)^*(\mathcal{E}^*) \rangle \end{aligned} \quad (\text{III.2.54})$$

Von der ersten zur zweiten Zeile gelangt man durch Anwendung der Legendre-Fenchel-Transformation auf  $(W - W^E)^*$ , in der  $(W - W^E)$  mit  $(U - U^E)^*$  zu identifizieren ist. Der Übergang zur vorletzten Zeile erfolgt basierend auf den konstitutiven Gleichungen (III.2.35a) und (III.2.8). Zur letzten Zeile gelangt man mit Hilfe der Definition  $\bar{W}^E := \inf_{u \in \mathcal{U}(\bar{\varepsilon})} \langle W^E(\varepsilon) \rangle$ . Führt man ferner  $\bar{U}^E := \inf_{\sigma \in \mathcal{J}(\bar{\sigma})} \langle U^E(\sigma) \rangle$  als duales effektives Potential ein, folgt aus

$$\begin{aligned} \bar{U}(\bar{\sigma}) &= \sup_{\bar{\varepsilon}} \{ \bar{\sigma} : \bar{\varepsilon} - \bar{W}(\bar{\varepsilon}) \} \\ &= \sup_{\bar{\varepsilon}} \{ \bar{\sigma} : \bar{\varepsilon} - \bar{W}^E(\bar{\varepsilon}) \} + \sup_{\mathcal{E}^*} \langle \mathcal{E}^* : \sigma - (U - U^E)^*(\mathcal{E}^*) \rangle \\ &= \bar{U}^E(\bar{\sigma}) + \sup_{\mathcal{E}^*} \langle \mathcal{E}^* : \sigma - (U - U^E)^*(\mathcal{E}^*) \rangle \\ &= \inf_{\sigma \in \mathcal{J}(\bar{\sigma})} \{ \sup_{\mathcal{E}^*} \langle U^E(\sigma) + \mathcal{E}^* : \sigma - (U - U^E)^*(\mathcal{E}^*) \rangle \} \end{aligned} \quad (\text{III.2.55})$$

schließlich die geforderte Dualität zwischen den effektiven Potentialfunktionen  $\bar{W}$  und  $\bar{U}$ . Gleichung (III.2.55) ist identisch mit (III.2.38b).

### 3. Lineare analytische Homogenisierung

In diesem Abschnitt werden Homogenisierungsmodelle und Schrankenformulierungen im Rahmen der linearen Theorie kleiner Verzerrungen aufbereitet. Zur Konstruktion effektiver Moduli und Spannungen werden fünf elementare Verfahren diskutiert: (i) das Dilute-Distribution-Modell, (ii) das selbstkonsistente Modell, (iii) die Differentialmethode, (iv) das Mehreinschluß- und (v) das Mehrphasenmodell. Die Effizienz dieser Verfahren kann durch rigorose Schranken, die effektive Potentiale, Spannungen und Moduli physikalisch nach oben und unten eingrenzen, verifiziert werden. Nach einer allgemeinen Klassifizierung von Schrankenformulierungen werden drei Schrankentypen spezifiziert: (i) die obere Voigt-, (ii) die untere Reuss-Schranke und (iii) die Hashin-Shtrikman-Schranken. In Bezug auf letztere wird eine Verallgemeinerung im Sinne von Walpole für nichtsphärische Einschlußgeometrien angestrebt. Die betrachteten Modelle beschränken sich stets auf Mikrostrukturen frei von Diskontinuitäten.

#### 3.1. Homogenisierungsverfahren

Die analytischen Homogenisierungsmodelle werden basierend auf Eshelbys Einbettungsverfahren und der Mean-Field-Theorie, beides Grundkonzepte des Abschnitts 2, konstruiert. Als  $\mathcal{RVE}$  wird in allen Modellen eine  $n$ -phasige Mikrostruktur  $\mathcal{B}$  mit den als Matrix und Einschlüsse ausgezeichneten homogenen Phasen  $\mathcal{M}$  und  $\mathcal{I}_\alpha$ ,  $1 \leq \alpha < n$ , betrachtet. Bei periodischen Mikrostrukturen sei das  $\mathcal{RVE}$  durch eine Einheitszelle begrenzt, andernfalls wird  $\mathcal{B}$  mit unendlichen Abmessungen angenommen. In der Matrixphase werden Variablen mit  $\mathcal{M}$  und in den Einschlußphasen mit  $\alpha$ ,  $1 \leq \alpha < n$ , indiziert. In einem ersten Arbeitsschritt werden Ansätze zur Berechnung effektiver Moduli und Flexibilitäten bereitgestellt, die sich je nach Wahl der Randbedingungen unterscheiden. Im zweiten Arbeitsschritt werden die erarbeiteten Ergebnisse in die Konstruktion der Homogenisierungsmodelle einbezogen. Es sei vermerkt, daß im Fall ellipsoider Einschlüsse und Hohlräume periodischer Mikrostrukturen die volumengemittelten Eshelbytensoren (B.30) und (B.31) verwendet werden.

##### 3.1.1. Effektive Moduli

Effektive Moduli werden aus der makroskopisch konstitutiven Beziehung

$$\bar{\sigma} = \bar{\mathbb{C}} : \bar{\varepsilon} \quad (\text{III.3.1})$$

extrahiert im Kontext einer durch  $\bar{\varepsilon}$  makroskopisch getriebenen Mikrostruktur. Mischungsansätze für Phasenmittelwerte von Spannungen und Verzerrungen führen auf

$$\bar{\varepsilon} := v_{\mathcal{M}} \bar{\varepsilon}^{\mathcal{M}} + \sum_{\alpha=1}^{n-1} v_{\alpha} \bar{\varepsilon}^{\alpha} \quad \text{und} \quad \bar{\sigma} := v_{\mathcal{M}} \bar{\sigma}^{\mathcal{M}} + \sum_{\alpha=1}^{n-1} v_{\alpha} \bar{\sigma}^{\alpha} \quad (\text{III.3.2})$$

mit den Volumenanteilen  $v_{\mathcal{M}} = |\mathcal{M}|/|\mathcal{B}|$  der Matrixphase und  $v_{\alpha} = |\mathcal{I}_{\alpha}|/|\mathcal{B}|$  der anderen Phasen. Da in jeder Phase homogene Materialeigenschaften vorausgesetzt werden, folgt aus  $\sigma^{\mathcal{M}} = \mathbb{C}^{\mathcal{M}} : \varepsilon^{\mathcal{M}}$  und  $\sigma^{\alpha} = \mathbb{C}^{\alpha} : \varepsilon^{\alpha}$  durch Volumenmittelung über die jeweilige Phase  $\bar{\sigma}^{\mathcal{M}} = \mathbb{C}^{\mathcal{M}} : \bar{\varepsilon}^{\mathcal{M}}$  und  $\bar{\sigma}^{\alpha} = \mathbb{C}^{\alpha} : \bar{\varepsilon}^{\alpha}$ . Von den letzten beiden Beziehungen wird die erste in (III.3.2)<sub>1</sub> und die zweite zusammen mit (III.3.1) in (III.3.2)<sub>2</sub> eingesetzt. Man erhält so

$$\mathbb{C}^{\mathcal{M}} : \bar{\varepsilon} = v_{\mathcal{M}} \bar{\sigma}^{\mathcal{M}} + \sum_{\alpha=1}^{n-1} v_{\alpha} \mathbb{C}^{\alpha} : \bar{\varepsilon}^{\alpha} \quad \text{und} \quad \bar{\mathbb{C}} : \bar{\varepsilon} = v_{\mathcal{M}} \bar{\sigma}^{\mathcal{M}} + \sum_{\alpha=1}^{n-1} v_{\alpha} \mathbb{C}^{\alpha} : \bar{\varepsilon}^{\alpha} \quad (\text{III.3.3})$$

Durch Elimination von  $v_{\mathcal{M}} \bar{\sigma}^{\mathcal{M}}$  aus beiden Gleichungen gelangt man zu

$$\bar{\mathbb{C}} : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbb{C}^{\mathcal{M}} : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} + \sum_{\alpha=1}^{n-1} v_{\alpha} (\mathbb{C}^{\alpha} - \mathbb{C}^{\mathcal{M}}) : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\alpha} \quad (\text{III.3.4})$$

Um eine geschlossene Darstellung effektiver Moduli zu erhalten, sind in einem weiteren Schritt die Phasenverzerrungen  $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\alpha}$  als Funktionen der a priori bekannten effektiven Verzerrungen  $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$  zu ermitteln. Dies gelingt in allgemein geschlossener Form, wenn die im Matrixmaterial eingebetteten Heterogenitäten ellipsoid sind. In diesem Fall sind die Phasenverzerrungen

$$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\alpha} = \mathbb{A}^{\alpha} : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \quad (\text{III.3.5})$$

linear von  $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$  abhängig. Mit (III.3.5) folgt aus (III.3.4)

$$\bar{\mathbb{C}} = \mathbb{C}^{\mathcal{M}} + \sum_{\alpha=1}^{n-1} v_{\alpha} (\mathbb{C}^{\alpha} - \mathbb{C}^{\mathcal{M}}) : \mathbb{A}^{\alpha} \quad (\text{III.3.6})$$

Hier sind nur die vierstufigen Konzentrationstensoren  $\mathbb{A}^{\alpha}$  zu bestimmen. Sie werden auch Lokalisierungstensoren oder Wu-Tensoren nach dem gleichnamigen Autor von Wu [177] genannt. Homogenisierungsmodelle unterscheiden sich prinzipiell dadurch, daß sie zur Berechnung von  $\mathbb{A}^{\alpha}$  unterschiedliche Annahmen zur Approximation der Einschlußverzerrungen treffen.

### 3.1.2. Effektive Flexibilitäten

Effektive Flexibilitäten werden aus der makroskopisch konstitutiven Beziehung

$$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}} = \bar{\mathbb{D}} : \bar{\boldsymbol{\sigma}} \quad (\text{III.3.7})$$

extrahiert im Kontext einer durch  $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$  makroskopisch getriebenen Mikrostruktur. In vollkommen analoger Weise zum vorangehenden Abschnitt gelangt man zu

$$\bar{\mathbb{D}} : \bar{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbb{D}^{\mathcal{M}} : \bar{\boldsymbol{\sigma}} + \sum_{\alpha=1}^{n-1} v_{\alpha} (\mathbb{D}^{\alpha} - \mathbb{D}^{\mathcal{M}}) : \bar{\boldsymbol{\sigma}}^{\alpha} \quad (\text{III.3.8})$$

wenn in jeder Phase die konstitutiven Gleichungen  $\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathcal{M}} = \mathbb{D}^{\mathcal{M}} : \boldsymbol{\sigma}^{\mathcal{M}}$  und  $\boldsymbol{\varepsilon}^{\alpha} = \mathbb{D}^{\alpha} : \boldsymbol{\sigma}^{\alpha}$  vorausgesetzt werden. Sind die Phasenverzerrungen  $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\alpha}$  bekannt, können aus (III.3.8) die effektiven Flexibilitäten gewonnen werden. Im speziellen Fall ellipsoider Einschlüsse und Hohlräume ist

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}}^{\alpha} = \mathbb{B}^{\alpha} : \bar{\boldsymbol{\sigma}} \quad (\text{III.3.9})$$

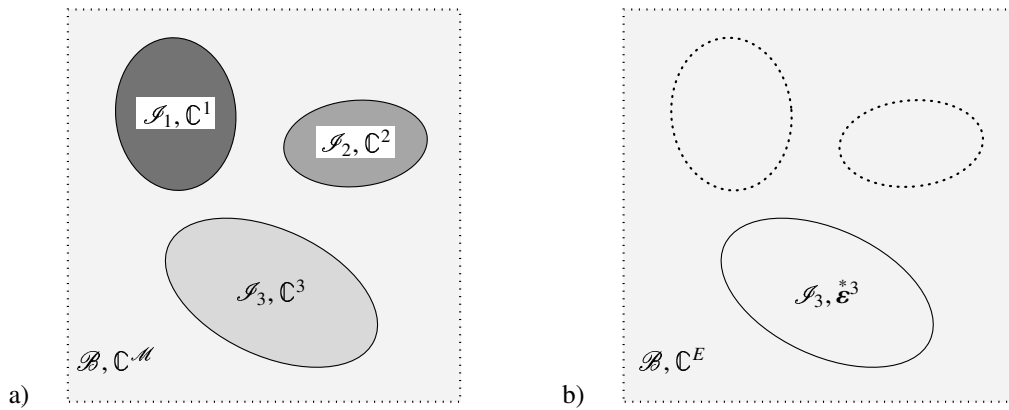
eine lineare Funktion von  $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$ . Damit folgt aus (III.3.8) analog zu (III.3.6)

$$\bar{\mathbb{D}} = \mathbb{D}^{\mathcal{M}} + \sum_{\alpha=1}^{n-1} v_{\alpha} (\mathbb{D}^{\alpha} - \mathbb{D}^{\mathcal{M}}) : \mathbb{B}^{\alpha} \quad (\text{III.3.10})$$

Ziel ist hier, den vierstufigen Konzentrationstensor oder konjugierten Wu-Tensor  $\mathbb{B}^{\alpha}$  im Rahmen geeigneter Modellannahmen zu bestimmen.

### 3.1.3. Dilute-Distribution-Modell

Das Dilute-Distribution-Modell wurde erstmals von EINSTEIN [46] für Flüssigkeiten mit feinsuspendierten starren kugelförmigen Teilchen formuliert und u.a. von DEWEY [41] und CHRISTENSEN [34] für elastische Verbundmaterialien weiterentwickelt. Interaktionen zwischen Heterogenitäten werden vollkommen vernachlässigt. Am Beispiel eines vierphasigen Komposits wird in Abb. 24 gezeigt, daß die reale Spannungs- und Verzerrungsverteilung in der Mikrostruktur in der Weise nachgebildet wird, als wäre jede Phase  $\mathcal{I}_\alpha$  als einzelner Einschluß im  $\mathcal{EHS}$  eingebettet. Spannungen und Verzerrungen in den Phasen können daher durch den elementaren Gleichungssatz Box 2 eines Matrix-Einschluß-Systems beschrieben werden. Für  $\mathbb{C}^E$  und  $\mathbb{D}^E$  des  $\mathcal{EHS}$  werden Moduli  $\mathbb{C}^M$  und Flexibilitäten  $\mathbb{D}^M$  der Matrixphase gewählt.



**Abbildung 24:** a) Vierphasiges Komposit mit drei Einschlüssen und b) zugehöriger  $\mathcal{EHS}$ . Beim Dilute-Distribution-Modell werden Interaktionen zwischen Einschlüssen vernachlässigt, wohingegen die Annahme  $\mathbb{C}^E = \bar{\mathbb{C}}$  beim selbstkonsistenten Modell Wechselwirkungen indirekt einbezieht.

**Effektive Moduli bei Vorgabe makroskopischer Verzerrungen.** Im  $\mathcal{EHS}$  wird dadurch der homogene Spannungszustand  $\mathbb{C}^M : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$  erzeugt, der in den Phasen  $\mathcal{I}_\alpha$  zusammen mit den Beziehungen (III.2.21a,b) sowie (III.2.12) und (III.2.13) auf die Darstellungen

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{\alpha*} = (\mathbb{E}^\alpha - \mathbb{S}^\alpha)^{-1} : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \quad \text{und} \quad \boldsymbol{\sigma}^{\alpha*} = (\mathbb{F}^\alpha - \mathbb{T}^\alpha)^{-1} : \mathbb{C}^M : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \quad (\text{III.3.11})$$

führt. Diese Gleichungen eingesetzt in (III.2.21a,b) ergeben mit den konstitutiven Beziehungen  $\boldsymbol{\sigma}^\alpha = \mathbb{C}^\alpha : \boldsymbol{\varepsilon}^\alpha$  Einschlußverzerrungen der Form (III.3.5) mit Konzentrationstensoren

$$\mathbb{A}^\alpha = \mathbb{E}^\alpha : (\mathbb{E}^\alpha - \mathbb{S}^\alpha)^{-1} = \mathbb{D}^\alpha : \mathbb{F}^\alpha : (\mathbb{F}^\alpha - \mathbb{T}^\alpha)^{-1} : \mathbb{C}^M \quad (\text{III.3.12})$$

Mit diesen erhält man schließlich aus (III.3.6) die effektiven Moduli  $\bar{\mathbb{C}}^{DDE} := \bar{\mathbb{C}}$  zu

$$\begin{aligned} \bar{\mathbb{C}}^{DDE} &= \mathbb{C}^M : \left\{ \mathbb{I} - \sum_{\alpha=1}^{n-1} v_\alpha (\mathbb{E}^\alpha - \mathbb{S}^\alpha)^{-1} \right\} \\ &= \left\{ \mathbb{I} + \sum_{\alpha=1}^{n-1} v_\alpha (\mathbb{F}^\alpha - \mathbb{T}^\alpha)^{-1} \right\} : \mathbb{C}^M \end{aligned} \quad (\text{III.3.13})$$

die sich durch die Symmetrieeigenschaften  $\bar{\mathbb{C}}_{ijkl}^{DDE} = \bar{\mathbb{C}}_{jikl}^{DDE} = \bar{\mathbb{C}}_{ijlk}^{DDE} = \bar{\mathbb{C}}_{klij}^{DDE}$  auszeichnen. Im Grenzfall  $\mathbb{C}_{ijkl}^\alpha \rightarrow \infty$  starrer Einschlüsse  $\mathcal{I}_\alpha$  sind  $\mathbb{E}^\alpha = \mathbb{0}$  und  $\mathbb{F}^\alpha = \mathbb{I}$  zu setzen.  $\mathbb{0}$  ist der vierstufige Nulltensor. Im Grenzfall  $\mathbb{C}_{ijkl}^\alpha \rightarrow 0$  von Hohlräumen  $\mathcal{I}_\alpha$  sind  $\mathbb{E}^\alpha = \mathbb{I}$  und  $\mathbb{F}^\alpha = \mathbb{0}$ .

**Effektive Flexibilitäten bei Vorgabe makroskopischer Spannungen.** Im  $\mathcal{EHS}$  stellt sich hier der homogene Verzerrungszustand  $\mathbb{D}^{\mathcal{M}} : \bar{\sigma}$  ein. In analoger Vorgehensweise zum vorangehenden Subabschnitt erhält man in den Phasen  $\mathcal{I}_\alpha$  die Transformationsfeldvariablen

$$\mathcal{E}^\alpha = (\mathbb{E}^\alpha - \mathbb{S}^\alpha)^{-1} : \mathbb{D}^{\mathcal{M}} : \bar{\sigma} \quad \text{und} \quad \mathcal{F}^\alpha = (\mathbb{F}^\alpha - \mathbb{T}^\alpha)^{-1} : \bar{\sigma} \quad (\text{III.3.14})$$

und Einschlußspannungen der Form (III.3.9) mit Konzentrationstensoren

$$\mathbb{B}^\alpha = \mathbb{C}^\alpha : \mathbb{E}^\alpha : (\mathbb{E}^\alpha - \mathbb{S}^\alpha)^{-1} : \mathbb{D}^{\mathcal{M}} = \mathbb{F}^\alpha : (\mathbb{F}^\alpha - \mathbb{T}^\alpha)^{-1} \quad (\text{III.3.15})$$

Damit extrahiert man aus (III.3.10) die effektiven Flexibilitäten  $\bar{\mathbb{D}}^{DDS} := \bar{\mathbb{D}}$  zu

$$\begin{aligned} \bar{\mathbb{D}}^{DDS} &= \left\{ \mathbb{I} + \sum_{\alpha=1}^{n-1} v_\alpha (\mathbb{E}^\alpha - \mathbb{S}^\alpha)^{-1} \right\} : \mathbb{D}^{\mathcal{M}} \\ &= \mathbb{D}^{\mathcal{M}} : \left\{ \mathbb{I} - \sum_{\alpha=1}^{n-1} v_\alpha (\mathbb{F}^\alpha - \mathbb{T}^\alpha)^{-1} \right\} \end{aligned} \quad (\text{III.3.16})$$

mit Symmetrien  $\bar{\mathbb{D}}_{ijkl}^{DDS} = \bar{\mathbb{D}}_{jikl}^{DDS} = \bar{\mathbb{D}}_{ijlk}^{DDS} = \bar{\mathbb{D}}_{klij}^{DDS}$ . Bei starren Phasen oder Hohlräumen  $\mathcal{I}_\alpha$  sind  $\mathbb{E}^\alpha$  und  $\mathbb{F}^\alpha$  wie im vorangehenden Subabschnitt zu setzen. Moduli und Flexibilitäten können wegen  $\bar{\mathbb{D}}^{DDS} : \bar{\mathbb{C}}^{DDE} = \bar{\mathbb{C}}^{DDE} : \bar{\mathbb{D}}^{DDS} = \mathbb{I} + \mathcal{O}(v^2)$  nur für einen sehr geringen Volumenanteil  $v$  an Heterogenitäten einander dual zugeordnet werden, sodaß  $\mathcal{O}(v^2) \rightarrow 0$ .

### 3.1.4. Selbstkonsistentes Modell

Die Modellannahmen unterscheiden sich von denen des Dilute-Distribution-Modells nur in dem Punkt, daß im  $\mathcal{EHS}$  als Materialparameter  $\mathbb{C}^E = \bar{\mathbb{C}}$  und  $\mathbb{D}^E = \bar{\mathbb{D}}$  des a priori unbekanntes effektiven Kontinuums zu wählen sind. Dadurch werden Interaktionen zwischen den Heterogenitäten indirekt einbezogen. Das selbstkonsistente Modell wurde ursprünglich von HERSHEY [73], KRÖNER [90, 91], BUDIANSKY [33] und KNEER [84] zur Berechnung effektiver Moduli von Polykristallen eingesetzt. Das selbstkonsistente Dreiphasenmodell, bei dem die Einschlüsse zusätzlich von einer Matrixhülle umgeben sind, wurde als alternativer Ansatz erstmals von FRÖHLICH & SACK [52] zur Bestimmung der effektiven Viskosität von Flüssigkeiten formuliert und danach u.a. von MACKENZIE [95], SMITH [142] und CHRISTENSEN [34] für elastische Materialien weiterentwickelt. Das Composite-Spheres-Modell von HASHIN [66] und das Composite-Cylinders-Modell von HASHIN & ROSEN [68] approximieren die Topologie des Komposits durch eine dichte Packung aus mit Matrixmaterial umhüllten Einschlüssen. Beide Ansätze führen auf dieselben effektiven Moduli wie das Dreiphasenmodell.

**Effektive Moduli bei Vorgabe makroskopischer Verzerrungen.** Die Vorgehensweise zur Berechnung effektiver Moduli unterscheidet sich nicht von der des Dilute-Distribution-Modells. Anstelle von  $\mathbb{E}^\alpha$  und  $\mathbb{F}^\alpha$  führt man hier effektive Tensoren

$$\bar{\mathbb{E}}^\alpha = (\bar{\mathbb{C}} - \mathbb{C}^\alpha)^{-1} : \bar{\mathbb{C}} \quad \text{und} \quad \bar{\mathbb{F}}^\alpha = (\bar{\mathbb{D}} - \mathbb{D}^\alpha)^{-1} : \bar{\mathbb{D}} \quad (\text{III.3.17})$$

und effektive Eshelbytensoren  $\bar{\mathbb{S}}^\alpha = \mathbb{S}^\alpha(\bar{\mathbb{C}})$  und  $\bar{\mathbb{T}}^\alpha = \mathbb{T}^\alpha(\bar{\mathbb{D}})$  ein, die mit effektiven Materialparametern  $\mathbb{C}^E = \bar{\mathbb{C}}$  und  $\mathbb{D}^E = \bar{\mathbb{D}}$  gebildet werden. Man erhält so Konzentrationstensoren

$$\mathbb{A}^\alpha = \bar{\mathbb{E}}^\alpha : (\bar{\mathbb{E}}^\alpha - \bar{\mathbb{S}}^\alpha)^{-1} = \mathbb{D}^\alpha : \bar{\mathbb{F}}^\alpha : (\bar{\mathbb{F}}^\alpha - \bar{\mathbb{T}}^\alpha)^{-1} : \bar{\mathbb{C}} \quad (\text{III.3.18})$$



der Form (III.3.12) mit effektiven Materialparametern. Mit diesen extrahiert man aus (III.3.6) die effektiven Moduli  $\bar{\mathbb{C}}^{SK} := \bar{\mathbb{C}}$  in impliziter Form

$$\begin{aligned} \bar{\mathbb{C}}^{SK} &= \mathbb{C}^{\mathcal{M}} : \left\{ \mathbb{I} - \sum_{\alpha=1}^{n-1} v_{\alpha} (\mathbb{E}^{\alpha})^{-1} : \bar{\mathbb{E}}^{\alpha} : (\bar{\mathbb{E}}^{\alpha} - \bar{\mathbb{S}}^{\alpha})^{-1} \right\} \\ &= \mathbb{C}^{\mathcal{M}} + \sum_{\alpha=1}^{n-1} v_{\alpha} (\mathbb{F}^{\alpha})^{-1} : \bar{\mathbb{F}}^{\alpha} : (\bar{\mathbb{F}}^{\alpha} - \bar{\mathbb{T}}^{\alpha})^{-1} : \bar{\mathbb{C}}^{SK} \end{aligned} \quad (\text{III.3.19})$$

wobei  $\bar{\mathbb{D}} := \bar{\mathbb{D}}^{SK}$  zu setzen ist. Sie genügen den Symmetriebedingungen  $\bar{\mathbb{C}}_{ijkl}^{SK} = \bar{\mathbb{C}}_{jikl}^{SK} = \bar{\mathbb{C}}_{ijlk}^{SK}$ , dennoch gilt im Allgemeinen  $\bar{\mathbb{C}}_{ijkl}^{SK} \neq \bar{\mathbb{C}}_{klij}^{SK}$ . Im Fall starrer Einschlüsse  $\mathbb{C}_{ijkl}^{\alpha} \rightarrow \infty$  bzw.  $\mathbb{D}_{ijkl}^{\alpha} \rightarrow 0$  sind die Grenzwerte  $(\mathbb{E}^{\alpha})^{-1} : \bar{\mathbb{E}}^{\alpha} : (\bar{\mathbb{E}}^{\alpha} - \bar{\mathbb{S}}^{\alpha})^{-1} = -\mathbb{D}^{\mathcal{M}} : \bar{\mathbb{C}}^{SK} : (\bar{\mathbb{S}}^{\alpha})^{-1}$  sowie  $\mathbb{F}^{\alpha} = \bar{\mathbb{F}}^{\alpha} = \mathbb{I}$  und bei Hohlräumen  $\mathcal{J}_{\alpha}$  mit  $\mathbb{C}_{ijkl}^{\alpha} \rightarrow 0$  bzw.  $\mathbb{D}_{ijkl}^{\alpha} \rightarrow \infty$  sind die Grenzwerte  $\mathbb{E}^{\alpha} = \bar{\mathbb{E}}^{\alpha} = \mathbb{I}$  sowie  $(\mathbb{F}^{\alpha})^{-1} : \bar{\mathbb{F}}^{\alpha} : (\bar{\mathbb{F}}^{\alpha} - \bar{\mathbb{T}}^{\alpha})^{-1} = -\mathbb{C}^{\mathcal{M}} : \bar{\mathbb{D}}^{SK} : (\bar{\mathbb{T}}^{\alpha})^{-1}$  zu berücksichtigen.

**Effektive Flexibilitäten bei Vorgabe makroskopischer Spannungen.** Die Berechnung effektiver Flexibilitäten erfolgt analog in den Teilschritten (III.3.14)–(III.3.15), wobei  $\mathbb{E}^{\alpha}$ ,  $\mathbb{F}^{\alpha}$  durch effektive Tensoren und  $\mathbb{S}^{\alpha}$ ,  $\mathbb{T}^{\alpha}$  durch effektive Eshelby-Tensoren nach dem Vorbild des vorangehenden Subabschnitts zu ersetzen sind. Mit den auf diese Weise erhaltenen Tensoren

$$\mathbb{B}^{\alpha} = \mathbb{C}^{\alpha} : \bar{\mathbb{E}}^{\alpha} : (\bar{\mathbb{E}}^{\alpha} - \bar{\mathbb{S}}^{\alpha})^{-1} : \bar{\mathbb{D}} = \bar{\mathbb{F}}^{\alpha} : (\bar{\mathbb{F}}^{\alpha} - \bar{\mathbb{T}}^{\alpha})^{-1} \quad (\text{III.3.20})$$

folgt aus (III.3.10) eine implizite Darstellung der effektiven Flexibilitäten  $\bar{\mathbb{D}}^{SK} := \bar{\mathbb{D}}$

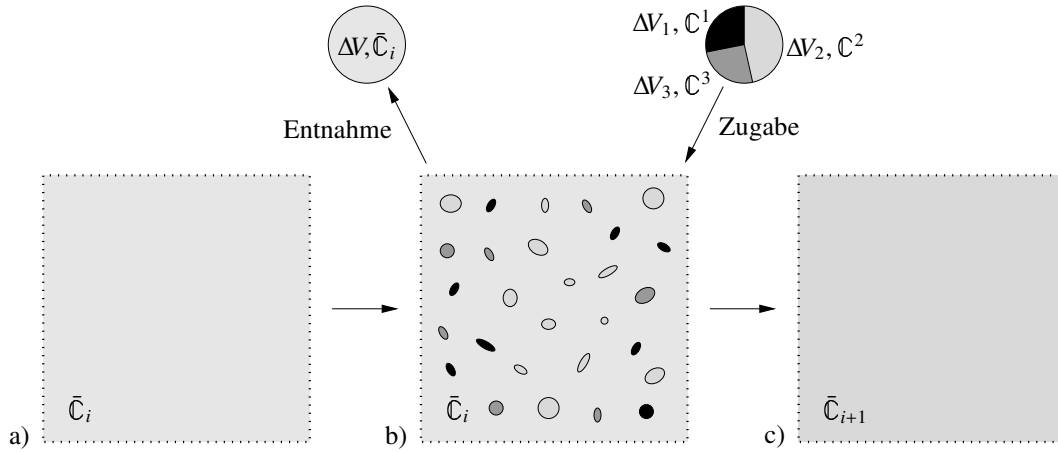
$$\begin{aligned} \bar{\mathbb{D}}^{SK} &= \mathbb{D}^{\mathcal{M}} + \sum_{\alpha=1}^{n-1} v_{\alpha} (\mathbb{E}^{\alpha})^{-1} : \bar{\mathbb{E}}^{\alpha} : (\bar{\mathbb{E}}^{\alpha} - \bar{\mathbb{S}}^{\alpha})^{-1} : \bar{\mathbb{D}}^{SK} \\ &= \mathbb{D}^{\mathcal{M}} : \left\{ \mathbb{I} - \sum_{\alpha=1}^{n-1} v_{\alpha} (\mathbb{F}^{\alpha})^{-1} : \bar{\mathbb{F}}^{\alpha} : (\bar{\mathbb{F}}^{\alpha} - \bar{\mathbb{T}}^{\alpha})^{-1} \right\} \end{aligned} \quad (\text{III.3.21})$$

Für die Flexibilitäten gilt  $\bar{\mathbb{D}}_{ijkl}^{SK} = \bar{\mathbb{D}}_{jikl}^{SK} = \bar{\mathbb{D}}_{ijlk}^{SK}$ , aber im Allgemeinen  $\bar{\mathbb{D}}_{ijkl}^{SK} \neq \bar{\mathbb{D}}_{klij}^{SK}$ , sodaß sie nicht grundsätzlich selbstadjungiert sind. Moduli und Flexibilitäten können im Gegensatz zum Dilute-Distribution-Modell durch  $\bar{\mathbb{C}}^{SK} = (\bar{\mathbb{D}}^{SK})^{-1}$  einander eindeutig zugeordnet werden. Eine Symmetrisierung von Moduli und Flexibilitäten der Form  $(\text{sym}[\bar{\mathbb{C}}^{SK}])_{ijkl} = (\text{sym}[\bar{\mathbb{C}}^{SK}])_{klij}$  und  $(\text{sym}[\bar{\mathbb{D}}^{SK}])_{ijkl} = (\text{sym}[\bar{\mathbb{D}}^{SK}])_{klij}$  hätte allerdings  $\text{sym}[\bar{\mathbb{C}}^{SK}] \neq (\text{sym}[\bar{\mathbb{D}}^{SK}])^{-1}$  zur Folge. Die Grenzfälle  $\mathbb{C}_{ijkl}^{\alpha} \rightarrow \infty$  bzw.  $\mathbb{D}_{ijkl}^{\alpha} \rightarrow 0$  für starre Phasen  $\mathcal{J}_{\alpha}$  und  $\mathbb{C}_{ijkl}^{\alpha} \rightarrow 0$  bzw.  $\mathbb{D}_{ijkl}^{\alpha} \rightarrow \infty$  für Hohlräume  $\mathcal{J}_{\alpha}$  sind wie im vorangehenden Subabschnitt zu handhaben.

### 3.1.5. Differentialmethode

Als Differentialmethode bezeichnet man ein Verfahren, bei dem die mikroheterogene Struktur sukzessive aufgebaut wird. Gestartet wird mit einem homogenen Medium, in welches infinitesimal geringe Mengen an Phasenmaterial eingestreut werden. Basierend auf den Modellannahmen des Dilute-Distribution-Modells werden aus diesem Gemenge effektive Materialparameter ermittelt. Das effektive Medium wird als neues homogenes Grundmaterial aufgefaßt, in welches erneut Phasenmaterial infinitesimal beigefügt wird. Aus diesem Gemisch werden schließlich neue effektive Moduli basierend auf den Modellannahmen des Dilute-Distribution-Modells





**Abbildung 25:** Beim Differentialverfahren wird das Komposit schrittweise erzeugt: a) Komposit mit effektiven Moduli  $\bar{C}_i$ . b) Infinitesimales Volumenelement  $\Delta V$  mit Moduli  $\bar{C}_i$  wird durch neues heterogenes Material ersetzt. c) Homogenisierungsprozeß liefert neue effektive Moduli  $\bar{C}_{i+1}$ .

berechnet. Der inkrementelle Vorgang wird solange wiederholt, bis alle Kompositphasen in den endgültigen Volumenanteilen dem Verbund beigemischt sind. In Abb. 25 wird der inkrementelle Übergang vom Grundmaterial mit effektiven Moduli  $\bar{C}_i$  zum neuen Bezugsmedium mit neuen effektiven Moduli  $\bar{C}_{i+1}$  gezeigt. Unter den Begriffen Effective-Medium-Approximation-Theorie (EMA) und Differential-Effective-Medium-Theorie (DEM) ordnet NORRIS [127] unterschiedliche Ansätze der Differentialmethode zwei grundlegenden Klassen zu. Ansätze beider Klassen unterscheiden sich in der Wahl des Referenzmediums und in den Proportionen, nach welchen Phasenmaterial im aktuellen Bezugsmedium beigemischt wird. In die als DEM bezeichnete Klasse sind u.a. die Arbeiten ROSCOE [135, 136], BOUCHER [20], McLAUGHLIN [99], CLEARY ET AL. [36] und BERRYMAN, PRIDE & WANG [18] einzureihen. In der Ausgangssituation wählen die Autoren eine der  $n$  Kompositphasen als jungfräuliches Referenzmedium, in welches das Verbundmaterial Phase für Phase inkrementell beigemischt wird. Zur Klasse der EMA zählen u.a. die Arbeiten HILL [75] und KORRINGA ET AL. [86]. Die Autoren wählen eine willkürliche homogene Ausgangsstruktur, welche durch Phasenmaterial allmählich ersetzt wird. Das aktuelle Verhältnis von Phasen- zu Gesamtphasenanteil im Komposit ist hierbei identisch mit dem endgültigen Volumenverhältnis. Modellannahmen der DEM und EMA werden von NORRIS [127] zu einem quasi übergeordneten Konzept für zweiphasige Verbundmaterialien vereinigt. Seine Ideen werden hier für ein  $n$ -phasiges Verbundmaterial verallgemeinert.

**Effektive Moduli bei Vorgabe makroskopischer Verzerrungen.** Zur Berechnung effektiver Moduli ist (III.3.6) geeignet umzuformen. In einem typischen Substitutionsvorgang entsprechend Abb. 25 ist das homogene Material mit Moduli  $\bar{C}_i$  zu Beginn des  $i$ ten Inkrements als Matrix aufzufassen. In dieses wird unter den Voraussetzungen des Dilute-Distribution-Modells Material der Phasen  $\mathcal{S}_\alpha$  in infinitesimal geringen Konzentrationen  $\Delta V_\alpha/V$ , hier bei gleichbleibendem Volumen  $V := |\mathcal{B}| = \text{const.}$ , hinzugefügt. Die Parameter  $\bar{C}_{i+1}$  sind die gesuchten effektiven Moduli am Ende desselben Inkrements, sodaß mit  $\Delta \bar{C} := \bar{C}_{i+1} - \bar{C}_i$  aus (III.3.6)

$$\Delta \bar{C} = \sum_{\alpha=1}^{n-1} (C^\alpha - \bar{C}_i) : A^\alpha \frac{\Delta V_\alpha}{V} \quad (\text{III.3.22})$$

folgt. Im ersten Inkrement  $i = 0$  wird  $\bar{C}_0 := C^M$  durch Matrixmoduli ersetzt. Entsprechend den Modellvorstellungen der EMA kann  $\bar{C}_0$  auch willkürlich gewählt werden. Aufgrund obiger An-

nahmen gelten für die Konzentrationstensoren  $\mathbb{A}^\alpha$  die Darstellungen (III.3.18) mit  $\bar{\mathbb{C}} := \bar{\mathbb{C}}_i$ . Da (III.3.22) und (III.3.19) dadurch ähnliche Strukturen besitzen, haben  $\bar{\mathbb{C}}_{i+1}$  und  $\bar{\mathbb{C}}^{SK}$  identische Symmetrieeigenschaften. Eine weitere Konsequenz davon ist  $\bar{\mathbb{C}}_i = (\bar{\mathbb{D}}_i)^{-1}$ . Um auf die Phasenkonzentrationen  $\Delta v_\alpha/V$  zu schließen, wird der im Verbund inkrementenweise eingelagerte Phasengehalt bilanziert. Abb. 25b folgend ist die Änderung des Volumenanteils  $V\Delta v_\alpha$  der Phase  $\mathcal{S}_\alpha$  gleich dem in das Komposit eingebrachten Volumen  $\Delta V_\alpha$  abzüglich dem Volumenanteil  $v_\alpha$  des entnommenen Volumenelements  $\Delta V$ , sodaß dadurch

$$V\Delta v_\alpha = \Delta V_\alpha - \Delta V v_\alpha \quad (\text{III.3.23})$$

Diese Gleichung aufgelöst nach  $\Delta V_\alpha/V$  und deren Bilanz über alle Einschlußphasen ergibt

$$\frac{\Delta V_\alpha}{V} = \Delta v_\alpha + \frac{\Delta V}{V} v_\alpha \quad \text{und} \quad \frac{\Delta V}{V} = \sum_{\beta=1}^{n-1} \Delta v_\beta + \frac{\Delta V}{V} \sum_{\beta=1}^{n-1} v_\beta \quad (\text{III.3.24})$$

Kombination beider Gleichungen führt auf

$$\frac{\Delta V_\alpha}{V} = \Delta v_\alpha + v_\alpha \sum_{\beta=1}^{n-1} \Delta v_\beta \left/ \left( 1 - \sum_{\beta=1}^{n-1} v_\beta \right) \right. \quad (\text{III.3.25})$$

Der wesentliche Unterschied zu Verfahren der DEM besteht hier in der willkürlich möglichen Wahl eines Konzentrationspfads in der  $v_1$ - $v_2$ -...- $v_{n-1}$ -Hyperebene, der durch inkrementelle Erhöhung  $\Delta v_\alpha$  der Phasenkonzentrationen  $v_\alpha$  festgelegt wird. Bei gegebenem Konzentrationspfad können effektive Moduli implizit aus den Evolutionsgleichungen (III.3.22) gewonnen werden. Der Konzentrationspfad wird hier durch Phasenparameter

$$\begin{aligned} p_\alpha &= \frac{\Delta V_\alpha}{V} \left( 1 - \sum_{\beta=1}^{n-1} v_\beta \right) \left/ \sum_{\beta=1}^{n-1} \Delta v_\beta \right. \\ &= v_\alpha + \Delta v_\alpha \left( 1 - \sum_{\beta=1}^{n-1} v_\beta \right) \left/ \sum_{\beta=1}^{n-1} \Delta v_\beta \right. \end{aligned} \quad (\text{III.3.26})$$

charakterisiert, die der Normierungsbedingung  $\sum_{\alpha=1}^{n-1} p_\alpha = 1$  genügen. Führt man  $v := \sum_{\alpha=1}^{n-1} v_\alpha$  als Volumenanteil und  $\Delta v := \sum_{\alpha=1}^{n-1} \Delta v_\alpha$  als Konzentrationsänderung der Einschlußphasen in (III.3.26) ein und substituiert danach das Ergebnis in (III.3.22), erhält man

$$\frac{\Delta \bar{\mathbb{C}}}{\Delta v} (1 - v) = \sum_{\alpha=1}^{n-1} (\mathbb{C}^\alpha - \bar{\mathbb{C}}_i) : \mathbb{A}^\alpha p_\alpha \quad (\text{III.3.27})$$

Bei gegebenen Parametern  $p_\alpha$  ergibt sich im Grenzübergang  $\bar{\mathbb{C}}_{i+1} \rightarrow \bar{\mathbb{C}}_i := \bar{\mathbb{C}}$ ,  $\Delta \bar{\mathbb{C}}/\Delta v \rightarrow d\bar{\mathbb{C}}/dv$  und  $\Delta v_\alpha/\Delta v \rightarrow dv_\alpha/dv$  eine quasi-kontinuierliche Formulierung der Evolutionsgleichungen (III.3.27) für die effektiven Moduli  $\bar{\mathbb{C}}^{DM} := \bar{\mathbb{C}}_{i+1}$

$$\begin{aligned} \frac{d\bar{\mathbb{C}}^{DM}}{dv} (1 - v) &= \sum_{\alpha=1}^{n-1} \bar{\mathbb{C}}^{DM} : (\bar{\mathbb{S}}^\alpha - \bar{\mathbb{E}}^\alpha)^{-1} p_\alpha \\ &= \sum_{\alpha=1}^{n-1} (\bar{\mathbb{F}}^\alpha - \bar{\mathbb{T}}^\alpha)^{-1} : \bar{\mathbb{C}}^{DM} p_\alpha \\ p_\alpha &= v_\alpha + \frac{dv_\alpha}{dv} (1 - v) \end{aligned} \quad (\text{III.3.28})$$

Die effektiven Eshelbytensoren  $\bar{\mathbb{S}}^\alpha$  und  $\bar{\mathbb{T}}^\alpha$  werden mit effektiven Parametern  $\bar{\mathbb{C}}^{DM}$  gebildet. Aus der Grenzwertbetrachtung  $\bar{\mathbb{C}}_{i+1} \rightarrow \bar{\mathbb{C}}^{DM}$  folgt, daß  $\bar{\mathbb{C}}^{DM}$  und  $\bar{\mathbb{C}}^{SK}$  identische Symmetrien haben sowie effektive Moduli und Flexibilitäten durch  $\bar{\mathbb{C}}^{DM} = (\bar{\mathbb{D}}^{DM})^{-1}$  einander dual zugeordnet sind. Im Fall von Hohlräumen bzw. starren Einschlüssen  $\mathcal{I}_\alpha$  sind  $\bar{\mathbb{E}}^\alpha = \mathbb{I}$ ,  $\bar{\mathbb{F}}^\alpha = \mathbb{0}$  bzw.  $\bar{\mathbb{E}}^\alpha = \mathbb{0}$ ,  $\bar{\mathbb{F}}^\alpha = \mathbb{I}$  zu setzen. Die Evolution der effektiven Moduli wird durch Konzentrationsänderungen des Phasenmaterials beschrieben. Es ist daher völlig gleichgültig, ob das Volumen  $V$  des homogenen Ausgangsmaterials wie angenommen durch einen Substitutionsvorgang konstant gehalten oder alternativ durch Supplementierung inkrementell um jeweils  $\Delta V$  erhöht wird. Folgt man NORRIS [127], können bei identischen Phasenanteilen im Endzustand und auf unterschiedlichen Konzentrationspfaden entwickelte effektive Moduli  $\bar{\mathbb{C}}^{DM}$  voneinander abweichen.

**Effektive Flexibilitäten bei Vorgabe makroskopischer Spannungen.** Die Berechnung effektiver Flexibilitäten erfolgt analog in den Teilschritten (III.3.22)–(III.3.28). Auf weitere Erläuterungen verzichtend ergeben sich die effektiven Flexibilitäten  $\bar{\mathbb{D}}^{DM} := \bar{\mathbb{D}}$  implizit aus

$$\begin{aligned} \frac{d\bar{\mathbb{D}}^{DM}}{dv}(1-v) &= \sum_{\alpha=1}^{n-1} (\bar{\mathbb{E}}^\alpha - \bar{\mathbb{S}}^\alpha)^{-1} : \bar{\mathbb{D}}^{DM} p_\alpha \\ &= \sum_{\alpha=1}^{n-1} \bar{\mathbb{D}}^{DM} : (\bar{\mathbb{T}}^\alpha - \bar{\mathbb{F}}^\alpha)^{-1} p_\alpha \\ p_\alpha &= v_\alpha + \frac{dv_\alpha}{dv}(1-v) \end{aligned} \quad (\text{III.3.29})$$

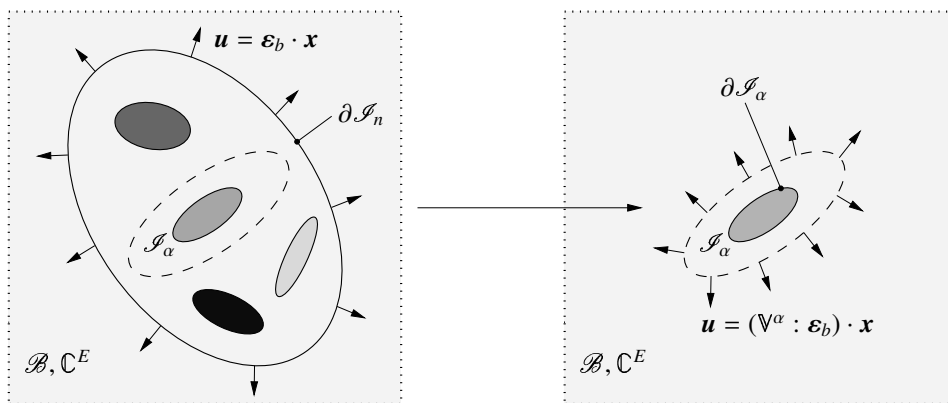
Eshelbytensoren  $\bar{\mathbb{S}}^\alpha$  und  $\bar{\mathbb{T}}^\alpha$  werden mit effektiven Parametern  $\bar{\mathbb{D}}^{DM}$  gebildet. Analoge Betrachtungen wie im vorangehenden Subabschnitt führen zu dem Schluß, daß effektive Flexibilitäten die Symmetrien  $\bar{\mathbb{D}}_{ijkl}^{DM} = \bar{\mathbb{D}}_{jikl}^{DM} = \bar{\mathbb{D}}_{ijlk}^{DM}$  besitzen. Da im Allgemeinen aber  $\bar{\mathbb{D}}_{ijkl}^{DM} \neq \bar{\mathbb{D}}_{klij}^{DM}$ , sind sie in der Regel nicht selbstadjungiert. Ferner sind effektive Flexibilitäten und Moduli durch  $\bar{\mathbb{D}}^{DM} = (\bar{\mathbb{C}}^{DM})^{-1}$  einander dual zugeordnet. Im Fall von Hohlräumen und starren Einschlüssen sind für  $\bar{\mathbb{E}}^\alpha$  und  $\bar{\mathbb{F}}^\alpha$  die im vorangehenden Subabschnitt angegebenen Werte anzunehmen.

### 3.1.6. Mehreinschluß- und Mehrphasenmodell

Beim selbstkonsistenten Modell werden Interaktionen zwischen Heterogenitäten indirekt berücksichtigt. Das hat zur Folge, daß Einschluß-Matrix-Interaktionen zwischen Einschlüssen und der Matrix insbesondere bei stark oszillierenden Steifigkeiten unterschätzt und effektive Parameter unzureichend wiedergegeben werden. Durch die auf den Arbeiten TANAKA & MORI [151] und MORI & TANAKA [117] basierende Mean-Field-Theorie war es erstmals möglich, Spannungs- und Verzerrungsfelder eines mehrphasigen Verbundmaterials direkt und somit besser zu beschreiben. Wie den Abschnitten 2.2.2 und 2.2.3 zu entnehmen ist, können damit Wechselwirkungseffekte direkt in die Modellbildung einbezogen werden. Bei der Modellbildung eines Mehreinschluß- und Mehrphasenverbunds werden im  $\mathcal{EHS}$  die Teilbereiche der Einschlußphasen  $\mathcal{I}_\alpha$  von einem ellipsoid begrenzten Ausschnitt  $\mathcal{I}_n$  der Matrixphase  $\mathcal{M}$  eingeschlossen, welcher im unendlichen Medium  $\mathcal{B}$  mit Moduli  $\mathbb{C}^E$  und Flexibilitäten  $\mathbb{D}^E$  liegt. In dem von BENVENISTE [15] erstmals formulierten Zweiphasenmodell sind ellipsoide Einschlüsse koaxial mit gleicher Orientierung in  $\mathcal{B}$  eingebettet. Im  $\mathcal{EHS}$  werden dort Moduli  $\mathbb{C} = \mathbb{C}^\mathcal{M}$  und Flexibilitäten  $\mathbb{D}^E = \mathbb{D}^\mathcal{M}$  der Matrixphase genommen. In BAYREUTHER, MIEHE & SCHRÖDER [11] wird eine vergleichende Studie des Zweiphasenmodells anhand alternativer Verfahren durchgeführt. Mit  $\mathbb{C}^E = \bar{\mathbb{C}}$  und  $\mathbb{D}^E = \bar{\mathbb{D}}$  gelangt man zum selbstkonsistenten Dreiphasenmodell. In der

Arbeit NEMAT-NASSER & HORI [123] wird das Zweiphasenmodell von Benveniste für  $n$ -phasige Komposite verallgemeinert. Sind die Ellipsoide, die unterschiedliche Phasen des heterogenen Ausgangsmaterials voneinander abgrenzen, koaxial und ähnlich, können Lösungen effektiver Moduli und Flexibilitäten explizit angeschrieben werden. Reduziert sich die Einschlussegeometrie zudem auf eine Kugelform, sind effektive Moduli mit einer der beiden Hashin-Shtrikman-Schranken identisch. Dieser Zusammenhang wird von WENG [166] aufgezeigt. Hat von allen die Matrixphase die geringste Steifigkeit  $\mathbb{C}^M$ , fallen effektive Moduli mit der unteren, bei größter Steifigkeit  $\mathbb{C}^M$  mit der oberen Hashin-Shtrikman-Grenze zusammen. In nachfolgenden Subabschnitten werden effektive Parameter basierend auf einem  $\mathcal{EHS}$  mit Moduli  $\mathbb{C}^E = \mathbb{C}^M$  und Flexibilitäten  $\mathbb{D}^E = \mathbb{D}^M$  des Matrixmaterials berechnet.

**Effektive Moduli bei Vorgabe makroskopischer Verzerrungen.** Konzentrationstensoren werden beim Mehreinschluß- und beim Mehrphasenmodell auf gleiche Weise berechnet. Der Formalismus in den Abschnitten 2.2.2 und 2.2.3 ist wesentliche Voraussetzung. Dort wird mit Hilfe der Mean-Field-Theorie der Bezug zwischen Einschlus- und Transformationsverzerrungen hergestellt, der im Allgemeinen die Lösung eines Systems von Gleichungen bedarf. Der komplexe Zusammenhang zwischen Variablen unterschiedlicher Kompositphasen muß in der Weise schematisiert werden, daß Wechselwirkungen zwischen  $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$  und Verzerrungen in der Mikrostruktur phasenweise entkoppelt beschrieben werden können. Das gelingt basierend auf dem Konzept der Hintergrundverzerrungen, welches zunächst am Beispiel des Mehrphasenverbunds betrachtet wird. Es wird in Abb. 26 schematisiert. Schneidet man in Abb. 26a den Bereich  $\mathcal{I}_n$



**Abbildung 26:** Konzept der Hintergrundverzerrungen zur Berechnung von Einschlusverzerrungen unter Berücksichtigung von Wechselwirkungen zwischen den Heterogenitäten.

aus  $\mathcal{B}$  heraus, wird sich  $\partial\mathcal{I}_n$  infolge fehlender Dehnungsbehinderung durch umgebendes Material von  $\mathcal{B}$  durchschnittlich um  $\mathbf{u} = \boldsymbol{\varepsilon}_b \cdot \mathbf{x}$  relaxieren.  $\boldsymbol{\varepsilon}_b$  nennt man Hintergrundverzerrung. Sie wird homogen in  $\mathcal{I}_n$  verteilt angenommen, deren Abweichung vom Referenzwert  $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$  durch das Auftreten von Fluktuationsverzerrungen infolge der Heterogenität begründet ist. Die Überlagerung von  $\boldsymbol{\varepsilon}_b$  und Fluktuationsverzerrungen in den Einschlusphasen muß allerdings

$$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}} = \boldsymbol{\varepsilon}_b + \sum_{\alpha=1}^{n-1} v_{\alpha} \langle \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} \rangle_{\alpha} \quad (\text{III.3.30})$$

ergeben. Zur Berechnung der Phasenmittelwerte  $\langle \boldsymbol{\varepsilon}^* \rangle_{\alpha}$  wird (III.2.33a) in die Konsistenzbedingung (III.2.20a) eingesetzt, wobei dort  $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$  gegen  $\boldsymbol{\varepsilon}_b$  auszutauschen ist. In dem für die Matrixphase

ausgezeichneten Teilbereich des  $\mathcal{EHS}$  seien wegen  $\mathbb{C}^E = \mathbb{C}^{\mathcal{M}}$  keine Transformationsverzerrungen definiert. Lösung des Systems aus  $n-1$  Gleichungen sei

$$\langle \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} \rangle_{\alpha} := (\mathbb{E}^{\alpha} - \mathbb{S}^{\alpha})^{-1} : \mathbb{V}^{\alpha} : \boldsymbol{\varepsilon}_b \quad \text{in } \mathcal{J}_{\alpha} \quad (\text{III.3.31})$$

Faßt man  $\mathbb{V}^{\alpha} : \boldsymbol{\varepsilon}_b$  entsprechend **Abb. 26b** als eine auf den einzelnen Einschluß  $\mathcal{J}_n$  lokal wirkende stationäre Verzerrung auf, um die Eigenverzerrungen oszillieren, können die Einschlußverzerrungen in  $\mathcal{J}_{\alpha}$  basierend auf den Annahmen des Dilute-Distribution-Modells ermittelt werden. Die gemittelten Einschlußverzerrungen ergeben sich mit **(III.2.21a)** und **(III.2.12)** daher zu

$$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\alpha} = \mathbb{A}_{DDE}^{\alpha} : \mathbb{V}^{\alpha} : \boldsymbol{\varepsilon}_b \quad \text{in } \mathcal{J}_{\alpha} \quad (\text{III.3.32})$$

$\mathbb{A}_{DDE}^{\alpha}$  ist der Konzentrationstensor **(III.3.12)** des Dilute-Distribution-Modells. Es gilt ferner

$$\langle \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} \rangle_{\alpha} = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\alpha} - \mathbb{V}^{\alpha} : \boldsymbol{\varepsilon}_b \quad \text{in } \mathcal{J}_{\alpha} \quad (\text{III.3.33})$$

Kombination von **(III.3.30)**, **(III.3.32)** und **(III.3.33)** führt schließlich auf den Zusammenhang **(III.3.5)** mit den gesuchten Konzentrationstensoren

$$\mathbb{A}^{\alpha} = \mathbb{A}_{DDE}^{\alpha} : \mathbb{V}^{\alpha} : \left( \mathbb{I} - \sum_{\beta=1}^{n-1} v_{\beta} \mathbb{V}^{\beta} + \sum_{\beta=1}^{n-1} v_{\beta} \mathbb{A}_{DDE}^{\beta} : \mathbb{V}^{\beta} \right)^{-1} \quad (\text{III.3.34})$$

Beim Mehreinschlußverbund sind die in den Teilbereichen  $\mathcal{J}_{\alpha} - \mathcal{J}_{\alpha-1}$  für  $\alpha > 1$  definierten Transformationsverzerrungen **(III.3.31)** über das Ellipsoid  $\mathcal{J}_{\alpha}$  zu verschmieren. Danach wird analog nach oben beschriebenem Schema verfahren, um schließlich **(III.3.34)** zu erhalten. Bei koaxialen und ähnlichen Einschlußellipsoiden  $\mathcal{J}_{\alpha}$  ergibt sich **(III.3.31)** mit  $\mathbb{V}^{\alpha} = \mathbb{I}$  und  $\mathbb{S}^{\alpha} = \mathbb{S}$ . In diesem Fall extrahiert man mit **(III.3.34)** aus **(III.3.6)** als effektive Moduli  $\bar{\mathbb{C}}^{MT} := \bar{\mathbb{C}}$

$$\begin{aligned} \bar{\mathbb{C}}^{MT} &= \mathbb{C}^{\mathcal{M}} : \left\{ \mathbb{I} - \left[ \sum_{\alpha=1}^{n-1} v_{\alpha} (\mathbb{E}^{\alpha} - \mathbb{S})^{-1} \right]^{-1} + \mathbb{S} \right\} \\ &= \left\{ \mathbb{I} - \left[ \sum_{\alpha=1}^{n-1} v_{\alpha} (\mathbb{T} - \mathbb{F}^{\alpha})^{-1} \right]^{-1} + \mathbb{I} - \mathbb{T} \right\} : \mathbb{C}^{\mathcal{M}} \end{aligned} \quad (\text{III.3.35})$$

Effektive Moduli haben die Symmetrieeigenschaften  $\bar{\mathbb{C}}_{ijkl}^{MT} = \bar{\mathbb{C}}_{jikl}^{MT} = \bar{\mathbb{C}}_{ijlk}^{MT} = \bar{\mathbb{C}}_{klij}^{MT}$ . Im Fall starrer Phasen  $\mathcal{J}_{\alpha}$  sind  $\mathbb{E}^{\alpha} = \mathbb{O}$ ,  $\mathbb{F}^{\alpha} = \mathbb{I}$  und bei Hohlräumen  $\mathcal{J}_{\alpha}$  sind  $\mathbb{E}^{\alpha} = \mathbb{I}$ ,  $\mathbb{F}^{\alpha} = \mathbb{O}$  zu setzen.

**Effektive Flexibilitäten bei Vorgabe makroskopischer Spannungen.** Die Berechnung effektiver Flexibilitäten erfolgt analog nach dem Vorbild des vorangehenden Subabschnitts. Anstelle von Hintergrundverzerrungen werden Hintergrundspannungen betrachtet. Auf weitere Ausführungen verzichtend seien effektive Flexibilitäten  $\bar{\mathbb{D}}^{MT} := \bar{\mathbb{D}}$  dual zu **(III.3.35)** gegeben durch

$$\begin{aligned} \bar{\mathbb{D}}^{MT} &= \left\{ \mathbb{I} - \left[ \sum_{\alpha=1}^{n-1} v_{\alpha} (\mathbb{S} - \mathbb{E}^{\alpha})^{-1} \right]^{-1} + \mathbb{I} - \mathbb{S} \right\} : \mathbb{D}^{\mathcal{M}} \\ &= \mathbb{D}^{\mathcal{M}} : \left\{ \mathbb{I} - \left[ \sum_{\alpha=1}^{n-1} v_{\alpha} (\mathbb{F}^{\alpha} - \mathbb{T})^{-1} \right]^{-1} + \mathbb{T} \right\} \end{aligned} \quad (\text{III.3.36})$$

mit den Symmetrieeigenschaften  $\bar{\mathbb{D}}_{ijkl}^{MT} = \bar{\mathbb{D}}_{jikl}^{MT} = \bar{\mathbb{D}}_{ijlk}^{MT} = \bar{\mathbb{D}}_{klij}^{MT}$ . Ferner sind effektive Flexibilitäten und Moduli durch  $\bar{\mathbb{D}}^{MT} = (\bar{\mathbb{C}}^{MT})^{-1}$  einander dual zugeordnet. Damit liefern das Mehreinschluß- und Mehrphasenmodell im Gegensatz zu allen anderen in dieser Arbeit diskutierten Homogenisierungsverfahren duale selbstadjungierte Moduli mit voller Symmetrie. Im Fall von Hohlräumen und starren Einschlüssen sind für  $\mathbb{E}^\alpha$  und  $\mathbb{F}^\alpha$  die im vorangehenden Subabschnitt angegebenen Werte anzunehmen.

### 3.2. Schranken

Elementare Aufgabe analytischer Schranken ist, den physikalisch zulässigen Bereich effektiven Materialverhaltens einzugrenzen. Schranken sind daher ein wesentlicher Indikator zur Verifikation der Effizienz von Homogenisierungsverfahren. Sie erlauben auch Rückschlüsse auf die Verteilung von Einschlüssen oder auf mögliche Fehlstellen in der Mikrostruktur. Liegen beispielsweise experimentell identifizierte Materialparameter oberhalb analytisch berechneter Schranken, ist dies ein Anzeichen für mögliche Mikrorisse oder andere Defekte im untersuchten Material. Schranken wurden erstmals von VOIGT [158] und REUSS [133] formuliert. In der Anwendung am weitesten verbreitet sind die von HASHIN & SHTRIKMAN [69, 70, 71] entwickelten Schranken. Sie wurden u.a. von WALPOLE [163, 164, 165], WILLIS [172, 173] und TALBOT & WILLIS [147] für anisotrope Materialien verallgemeinert. Ziel dieses Abschnitts ist, ein auf Variationsprinzipien basierendes übergeordnetes Konzept zur Konstruktion von Schranken darzustellen, aus dem eine große Klasse von Schrankenformulierungen abgeleitet werden kann. Als Spezialfälle werden die obere Voigt- und die untere Reuss-Schranke sowie obere und untere Hashin-Shtrikman-Schranken extrahiert. Als Basisliteratur zu dieser Thematik seien die Arbeiten KRÖNER [92] und WILLIS [173] empfohlen. Wesentliche Voraussetzungen bilden die im Abschnitt 2.3 aufbereiteten Grundlagen. Dort wird u.a. gezeigt, daß Schranken im Fall einer durch  $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$  deformationsgetriebenen und einer durch  $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$  spannungsgetriebenen Mikrostruktur dual zueinander sind. Eine erschöpfende Beschreibung von Schranken erfolgt daher in diesem Abschnitt nur für makroskopisch deformationsgetriebene Mikrostrukturen. Die betrachtete Mikrostruktur  $\mathcal{B}$  sei  $n$ -phasig und mit ergodischen Eigenschaften ausgestattet. Ensemble- und Volumenmittelung sind daher gleichbedeutend. Um aus den allgemeinen Schrankenformulierungen des Abschnitts 2.3 eine eindeutige Aussage zu gewinnen, werden phasenweise konstante Transformationsspannungen und -verzerrungen im  $\mathcal{EHS}$  der Mikrostruktur  $\mathcal{B}$

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}}^*(\mathbf{x}) = \sum_{\alpha=1}^n \theta^\alpha(\mathbf{x}) \boldsymbol{\sigma}^{*\alpha} \quad \text{und} \quad \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^*(\mathbf{x}) = \sum_{\alpha=1}^n \theta^\alpha(\mathbf{x}) \boldsymbol{\varepsilon}^{*\alpha} \quad \forall \mathbf{x} \in \mathcal{B} \quad (\text{III.3.37})$$

eingeführt mit dem Phasenparameter

$$\theta^\alpha(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1 & , \text{ falls } \mathbf{x} \in \mathcal{I}_\alpha \\ 0 & , \text{ andernfalls} \end{cases} \quad (\text{III.3.38})$$

Mit den Annahmen in (III.3.37) reduziert sich der Kern der in diesem Abschnitt auftretenden Integrale auf phasenweise konstante Terme. Bei Ensemblemittelung treten typischerweise Korrelationsfunktionen  $n$ ter Ordnung

$$P_{12\dots n}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n) = \langle \theta^1(\mathbf{x}_1) \theta^2(\mathbf{x}_2) \dots \theta^n(\mathbf{x}_n) \rangle \quad (\text{III.3.39})$$

auf. (III.3.39) ist die Wahrscheinlichkeit, daß gleichzeitig  $\mathbf{x}_1$  in  $\mathcal{I}_1$ ,  $\mathbf{x}_2$  in  $\mathcal{I}_2$  usw. liegt. Speziell ist  $P_\alpha = \langle \theta^\alpha(\mathbf{x}) \rangle = |\mathcal{I}_\alpha|/|\mathcal{B}| = v_\alpha$  der Volumenanteil der Phase  $\mathcal{I}_\alpha$ . Die Berechnung von Korrelationsfunktionen wird beispielsweise in MILTON [114] und TORQUATO [153] behandelt.



### 3.2.1. Schranken der Ordnung $n$

Obere Schranken  $n$ ter Ordnung sind definiert als

$$\overline{W}(\bar{\varepsilon}) \leq \frac{1}{2} \bar{\varepsilon} : \bar{\mathbb{C}}^{(n)} : \bar{\varepsilon} \quad \text{oder} \quad \bar{\mathbb{C}} \leq \bar{\mathbb{C}}^{(n)} \quad (\text{III.3.40})$$

und ergeben sich bei entsprechender Optimierung bezüglich den Variablen  $\varepsilon$  bzw.  $\sigma^*$  aus (III.2.46) bzw. (III.2.50). Rechte und linke Seite obiger Ungleichungen sind identisch, wenn man für die Testfunktionen  $\varepsilon$  und  $\sigma^*$  in (III.2.46) und (III.2.50) die Ansätze

$$\varepsilon = \mathbb{M} : \bar{\varepsilon} \quad \text{und} \quad \sigma^* = \delta\mathbb{C} : \mathbb{M} : \bar{\varepsilon} \quad (\text{III.3.41})$$

wählt. Der vierstufige Tensor  $\mathbb{M} = (\mathbb{I} + \Gamma : \delta\mathbb{C})^{-1}$  geht aus einem Koeffizientenvergleich von (III.3.41)<sub>1</sub> mit (III.2.44)<sub>1</sub> hervor und hat als Neumann-Reihe entwickelt die Form

$$\mathbb{M} = \sum_{k=0}^{\infty} (-\Gamma : \delta\mathbb{C})^{(k)} \quad \text{mit} \quad (-\Gamma : \delta\mathbb{C})^{(k)} = (-1)^k \underbrace{(\Gamma : \delta\mathbb{C}) : \dots : (\Gamma : \delta\mathbb{C})}_{k\text{-fach}} \quad (\text{III.3.42})$$

Bei der Wahl von (III.3.41) als Testfunktionen treten bei Ensemblemittelung in (III.2.46) und (III.2.50) Korrelationskoeffizienten bis unendlich hoher Ordnung auf, für die es keine Lösung gibt. Als Näherung bricht man daher die Reihe in (III.3.42) nach dem  $m$ ten Glied ab. Man erhält so eine Klasse von Testfunktionen

$$\varepsilon = \mathbb{M}_m : \bar{\varepsilon} \quad \text{und} \quad \sigma^* = \delta\mathbb{C} : \mathbb{M}_{m-1} : \bar{\varepsilon} \quad (\text{III.3.43})$$

mit

$$\mathbb{M}_m = \sum_{k=0}^m (-\Gamma : \delta\mathbb{C})^{(k)} \quad (\text{III.3.44})$$

Die Reihe  $\mathbb{M}_m$  konvergiert für  $-\mathbb{I} < \Gamma : \delta\mathbb{C} < \mathbb{I}$ . Aus dem Ensemblemittel von (III.3.43)<sub>1</sub> folgt offensichtlich  $\langle \mathbb{M}_m \rangle = \mathbb{I}$  und  $\langle \delta\mathbb{C} : \mathbb{M}_{m-1} \rangle = \mathbb{C}^E : \langle \mathbb{I} - \mathbb{M}_m \rangle = \mathbb{O}$ . Zusammen mit der Symmetrieeigenschaft  $\mathbb{M}_m^T : \delta\mathbb{C} = \delta\mathbb{C} : \mathbb{M}_m$  ergibt sich aus (III.2.46) mit (III.3.43)<sub>1</sub> die obere Schranke  $\bar{\mathbb{C}}^{(n)} = \mathbb{C}^E + \langle \delta\mathbb{C} : [\mathbb{M}_m : (\mathbb{M}_m - \mathbb{M}_{m-1}) + \mathbb{M}_{m-1}] \rangle$  oder in kompakter Darstellung

$$\boxed{\bar{\mathbb{C}}^{(n)} = \mathbb{C}^E + \langle \delta\mathbb{C} : \mathbb{M}_{n-1} \rangle \quad , \quad n = 2m + 1 > 0} \quad (\text{III.3.45})$$

Auf diese Weise erhaltene Schranken sind ungerade in  $n$ . Bekanntester Vertreter dieses Schrankentyps ist die Voigt-Grenze mit Ordnung  $n = 1$ . Schranken gerader Ordnung  $n$  ergeben sich aus (III.2.50) mit (III.3.43)<sub>2</sub> zu  $\bar{\mathbb{C}}^{(n)} = \mathbb{C}^E + \langle \delta\mathbb{C} : [\mathbb{M}_{m-1} : (\mathbb{M}_m - \mathbb{M}_{m-1}) + \mathbb{M}_{m-1}] \rangle$  oder

$$\boxed{\bar{\mathbb{C}}^{(n)} = \mathbb{C}^E + \langle \delta\mathbb{C} : \mathbb{M}_{n-1} \rangle \quad , \quad n = 2m > 0} \quad (\text{III.3.46})$$

Korrelationsfunktionen treten hier bis zur Ordnung  $n$  auf. Für negativ definitem  $\delta\mathbb{C}$  ist  $\bar{\mathbb{C}}^{(n)}$  eine obere, für positiv definitem  $\delta\mathbb{C}$  eine untere Schranke effektiver Moduli  $\bar{\mathbb{C}}$ . Der modifizierte Ansatz  $\mathbb{M}_m = \sum_{k=0}^m (-\Gamma : \delta\mathbb{C})^{(k)} : \Xi_k$  mit Nebenbedingungen  $\Xi_0 = \mathbb{I}$  und  $\Xi_k = \text{const.}$  liefert bei zusätzlicher Optimierung bezüglich  $\Xi_k$  schärfere Schranken. Damit optimierte Schranken dritter Ordnung wurden u.a. von BERAN & MOLYNEUX [17] und KRÖNER [92] entwickelt. Schranken  $\bar{\mathbb{C}}^{(n)}$  sind scharf, wenn  $\delta\mathbb{C}$  und  $\Gamma$  für  $n > 2$  mit Moduli  $\mathbb{C}^E = \bar{\mathbb{C}}^{(n-2)}$  niederer Ordnung gebildet werden und für  $n = 2$  mit Parametern

$$\bar{\mathbb{C}}_{ijkl}^{(0)} := \max_{\mathbf{x} \in \mathcal{B}} \mathbb{C}_{ijkl}(\mathbf{x}) \quad (\text{III.3.47})$$

### 3.2.2. Konzept der statistischen Unordnung von Kröner

Schranken  $\bar{\mathbb{C}}^{(n)}$  werden mit zunehmender Ordnung  $n$  optimaler. Dem entgegen steht der Umstand, Korrelationsfunktionen mit steigender Ordnung  $n$  berechnen zu müssen. Das Konzept der statistischen Unordnung, bei dem unter vereinfachten strukturtopologischen Annahmen Korrelationsfunktionen mit niedriger Ordnung auftreten, schafft hier Abhilfe. In diesem Kontext klassifiziert KRÖNER [92] Schrankenformulierungen nach dem Grad der statistischen Isotropie  $n_{iso}$ , der statistischen Homogenität  $n_{hom}$  und der statistischen Unordnung  $n_{ung}$  und bezeichnet sie symbolisch mit  $(n_{iso}, n_{hom}, n_{ung})$ . Statistisch isotrop der Ordnung  $n_{iso}$  heißt, daß Korrelationsfunktionen bis Ordnung  $n_{iso}$  rotationsinvariant bzw. isotrop sind. Bei statistischer Homogenität der Ordnung  $n_{hom}$  sind Korrelationsfunktionen nur vom Abstand  $n_{hom}$  zufällig in  $\mathcal{B}$  gewählter Punkte abhängig. Man nennt Korrelationsfunktionen in diesem Fall translationsinvariant bis Ordnung  $n_{hom}$ . Das eigentliche Kernstück in Kröners Konzept ist, unter den Voraussetzungen einer statistisch ideal ungeordneten Struktur oder bei ideal isotrop verteilten Kompositphasen Korrelationsfunktionen auf niedrigere Ordnung zu reduzieren. Die Einzelwahrscheinlichkeiten, daß in einer ungeordneten Struktur an  $n_{ung}$  zufällig ausgewählten Punkten  $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n_{ung}}$  jeweils die Phasen  $\mathcal{S}_1, \dots, \mathcal{S}_{n_{ung}}$  angetroffen werden, sind voneinander unabhängig. Demnach ist  $P_{12\dots n_{ung}} \rightarrow P_1 P_2 \dots P_{n_{ung}}$ . Eine weitere Konsequenz ist, richtungsabhängige Anteile im Kern von  $\Gamma$  zu vernachlässigen. Der Kern von  $\Gamma$  kann gemäß

$$\Gamma(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \mathbb{P}(\mathbf{x}) \delta(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \Delta(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \quad (\text{III.3.48})$$

in den isotropen Operator  $\mathbb{P}(\mathbf{x})$ , welcher in (A.17) oder (B.27) definiert ist, und den anisotropen Operator  $\Delta(\mathbf{x}, \mathbf{y})$  zerlegt werden.  $\delta(\mathbf{x}, \mathbf{y})$  ist hier die Diracsche Delta-Funktion. Obige Betrachtungen legen nahe, den Reihenansatz

$$\mathfrak{m}_m = \sum_{k=0}^m (-\mathbb{P} : \delta\mathbb{C})^{(k)} \quad (\text{III.3.49})$$

in den Testfunktionen

$$\boldsymbol{\varepsilon} = (\mathbb{I} - \Gamma : \delta\mathbb{C} : \mathfrak{m}_{m-1}) : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \quad \text{und} \quad \bar{\boldsymbol{\sigma}}^* = \delta\mathbb{C} : \mathfrak{m}_{m-1} : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \quad (\text{III.3.50})$$

in  $\mathbb{P}$  anstelle von  $\Gamma$  zu parametrisieren. In (III.3.50)<sub>1</sub> bewahrt  $\Gamma$  die Kompatibilitätsbedingung  $\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$ . Aus Ensemblemittelung von (III.3.50)<sub>1</sub> folgt offensichtlich  $\langle \mathbb{I} - \Gamma : \delta\mathbb{C} : \mathfrak{m}_{m-1} \rangle = \mathbb{I}$  und  $\langle \delta\mathbb{C} : \mathfrak{m}_{m-1} \rangle = \mathbb{0}$ . Zusammen mit der Symmetrieeigenschaft  $\mathfrak{m}_m^T : \delta\mathbb{C} = \delta\mathbb{C} : \mathfrak{m}_m$  und dem Ansatz (III.3.50)<sub>1</sub> ergibt sich aus (III.2.46) die obere Schranke

$$\begin{aligned} \bar{\mathbb{C}}^{(n)} &= \mathbb{C}^E + \langle \delta\mathbb{C} : [\mathfrak{m}_m : (\mathfrak{m}_m - \mathfrak{m}_{m-1}) + \mathfrak{m}_{m-1}] \rangle \\ &\quad + \langle \mathfrak{m}_{m-1}^T : \delta\mathbb{C} : \Delta : \delta\mathbb{C} : \Delta : \delta\mathbb{C} : \mathfrak{m}_{m-1} \rangle - \langle \mathfrak{m}_m^T : \delta\mathbb{C} : \Delta : \delta\mathbb{C} : \mathfrak{m}_m \rangle \\ &\quad + \langle (\mathfrak{m}_m - \mathfrak{m}_{m-1})^T : \delta\mathbb{C} : \Delta : \delta\mathbb{C} : (\mathfrak{m}_m - \mathfrak{m}_{m-1}) \rangle, \quad n = 2m + 1 > 0 \end{aligned} \quad (\text{III.3.51})$$

Hierbei ist  $\Delta$  ein linearer Operator der Form (III.2.43)

$$\Delta : \bar{\boldsymbol{\sigma}}^*(\mathbf{x}) \mapsto \int_{\mathcal{B}} \Delta(\mathbf{x}, \mathbf{y}) : [\bar{\boldsymbol{\sigma}}^*(\mathbf{y}) - \langle \bar{\boldsymbol{\sigma}}^* \rangle] dV(\mathbf{y}) \quad \forall \mathbf{x} \in \mathcal{B} \quad (\text{III.3.52})$$

dessen Kern  $\Delta(\mathbf{x}, \mathbf{y})$  in (III.3.48) eingeführt wurde. Der drittletzte Term auf der rechten Seite von (III.3.51) kann aufgrund der vorausgesetzten negativen Definitheit von  $\delta\mathbb{C}$  vernachlässigt



werden. Die letzten beiden Summanden auf der rechten Seite von (III.3.51) werden in der Form  $\langle \mathbb{b} : \Delta : \mathbb{b} \rangle$  mit  $\mathbb{b} = \sum_{\alpha=1}^n \theta^\alpha \bar{\mathbb{b}}^\alpha$  zusammengefaßt. Mit  $n_{ung} \geq 2$  und (III.3.52) erhält man unter Berücksichtigung der sogenannten quasikristallinen Approximation  $P_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{x} + \mathbf{z}) = P_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{x}) = P_\alpha(\mathbf{x}) = v_\alpha$  von WILLIS [172] für beliebig kleine Periode  $\mathbf{z} \in \mathcal{B}$

$$\begin{aligned} \langle \mathbb{b} : \Delta : \mathbb{b} \rangle &= \sum_{\alpha=0}^n \sum_{\beta=0}^n \bar{\mathbb{b}}^\alpha : \int_{\mathcal{B}} (P_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) - P_\alpha P_\beta) \Delta(\mathbf{x}, \mathbf{y}) dV(\mathbf{y}) : \bar{\mathbb{b}}^\beta \\ &= \sum_{\alpha=0}^n \sum_{\beta=0}^n v_\alpha (1 - v_\beta) \bar{\mathbb{b}}^\alpha : \int_{\mathcal{B}} \Delta(\mathbf{x}, \mathbf{y}) dV(\mathbf{y}) : \bar{\mathbb{b}}^\beta \end{aligned} \quad (\text{III.3.53})$$

Das Volumenmittel von  $\Delta$  ist aufgrund der gegebenen Struktur (III.3.52) identisch null, sodaß  $\langle \mathbb{b} : \Delta : \mathbb{b} \rangle = 0$ . Basierend auf obigen Betrachtungen gelangt man schließlich zu

$$\begin{aligned} \bar{\mathbb{C}}^{(n)} &= \mathbb{C}^E + \langle \delta\mathbb{C} : [\mathfrak{m}_m : (\mathfrak{m}_m - \mathfrak{m}_{m-1}) + \mathfrak{m}_{m-1}] \rangle \\ &= \mathbb{C}^E + \langle \delta\mathbb{C} : \mathfrak{m}_{n-1} \rangle, \quad n = 2m + 1 > 0 \end{aligned} \quad (\text{III.3.54})$$

mit oberen Schranken ungerader Ordnung  $n$ . Einsetzen von (III.3.50)<sub>1</sub> in (III.2.50) ergibt ferner

$$\begin{aligned} \bar{\mathbb{C}}^{(n)} &= \mathbb{C}^E + \langle \delta\mathbb{C} : [\mathfrak{m}_{m-1} : (\mathfrak{m}_m - \mathfrak{m}_{m-1}) + \mathfrak{m}_{m-1}] \rangle \\ &\quad - \langle \mathfrak{m}_{m-1}^T : \delta\mathbb{C} : \Delta : \delta\mathbb{C} : \mathfrak{m}_{m-1} \rangle, \quad n = 2m > 0 \end{aligned} \quad (\text{III.3.55})$$

Vernachlässigt man den positiv definiten Ausdruck am Ende, erhält man für

$$\begin{aligned} \bar{\mathbb{C}}^{(n)} &= \mathbb{C}^E + \langle \delta\mathbb{C} : (\mathfrak{m}_{m-1} : (\mathfrak{m}_m - \mathfrak{m}_{m-1}) + \mathfrak{m}_{m-1}) \rangle \\ &= \mathbb{C}^E + \langle \delta\mathbb{C} : \mathfrak{m}_{n-1} \rangle, \quad n = 2m > 0 \end{aligned} \quad (\text{III.3.56})$$

obere Schranken gerader Ordnung  $n$ . Für negativ definitem  $\delta\mathbb{C}$  ist  $\bar{\mathbb{C}}^{(n)}$  eine obere, für positiv definitem  $\delta\mathbb{C}$  eine untere Schranke. Die Schranken sind scharf, wenn man  $\mathbb{C}^E$  durch Moduli  $\mathbb{C}^{(n-2)}$  niederer Ordnung ersetzt. Die Schranken von HASHIN & SHTRIKMAN [69, 70, 71], WALPOLE [163, 164, 165] und DEDERICHS & ZELLER [39] ergeben sich im Grenzfall  $m \rightarrow \infty$ .

### 3.2.3. Schranken von Voigt und Reuss

Die klassischen Schranken von Voigt und Reuss basieren auf den Arbeiten VOIGT [158] und REUSS [133]. Die obere Grenze  $\bar{\mathbb{C}}^V$  von Voigt setzt voraus, daß als Testfunktion das makroskopische Verzerrungsfeld  $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$  unter Vernachlässigung von Eigenverzerrungen angenommen wird. Zur Berechnung der unteren Grenze  $\bar{\mathbb{C}}^R$  von Reuss wird dual zu  $\bar{\mathbb{C}}^V$  als Testfunktion das makroskopische Spannungsfeld  $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$  gewählt. Spannungsfuktuationen auf der Mikrostruktur werden hier ausgeschlossen. Aus (III.3.45) und (III.3.56) ergibt sich daher für  $n = 1$

$$\begin{aligned} \bar{\mathbb{C}}^V &\geq \bar{\mathbb{C}} \geq \bar{\mathbb{C}}^R \\ \bar{\mathbb{C}}^V &:= \mathbb{C}^{(1)} = \langle \mathbb{C} \rangle \quad \text{und} \quad \bar{\mathbb{C}}^R := \left( \mathbb{D}^{(1)} \right)^{-1} = \left\langle \mathbb{C}^{-1} \right\rangle^{-1} \end{aligned} \quad (\text{III.3.57})$$

In Kröners Notation sind  $\bar{\mathbb{C}}^V$  und  $\bar{\mathbb{C}}^R$  Grenzen vom Typ (1, 1, 1). Sie liegen im Allgemeinen sehr weit auseinander, weshalb sie in der Praxis eine eher untergeordnete Bedeutung haben.

### 3.2.4. Schranken von Hashin und Shtrikman und von Walpole

HASHIN & SHTRIKMAN [69, 70, 71] haben erstmals auf Variationsprinzipien basierende Schranken konstruiert. Die sogenannten Hashin-Shtrikman-Grenzen sind für statistisch homogene und isotrope Mikrostrukturen ( $n_{hom} = n_{iso} \rightarrow \infty$ ) mit kugelförmigen Einschlüssen konzipiert und werden mit Testfunktionen (III.3.50)<sub>2</sub> im Grenzfall

$$\mathfrak{m} = \lim_{m \rightarrow \infty} \mathfrak{m}_m = (\mathbb{I} + \mathbb{P} : \delta\mathbb{C})^{-1} \quad (\text{III.3.58})$$

gebildet. Aus (III.3.56) folgt damit  $\mathbb{C}^{(\infty)} = \mathbb{C}^E$  wegen  $\lim_{n \rightarrow \infty} \langle \delta\mathbb{C} : \mathfrak{m}_n \rangle = \langle \delta\mathbb{C} : \mathfrak{m} \rangle = 0$ . Ersetzt man  $\mathbb{C}^E$  in  $\mathfrak{m}$  durch effektive Moduli  $\mathbb{C}^E = \bar{\mathbb{C}}$ , erhält man aus  $\langle \delta\mathbb{C} : \mathfrak{m} \rangle = 0$  das implizite Berechnungsschema  $\bar{\mathbb{C}} = \langle \mathbb{C} : \mathfrak{m} \rangle : \langle \mathfrak{m} \rangle^{-1}$  von KRÖNER [92] und WILLIS [172] für selbstkonsistente effektive Moduli. Man gelangt zur oberen Hashin-Shtrikman-Grenze

$$\bar{\mathbb{C}}^{\overline{HS}} \geq \bar{\mathbb{C}} \quad (\text{III.3.59})$$

mit

$$\begin{aligned} \bar{\mathbb{C}}^{\overline{HS}} &= \langle \mathbb{C} : [\mathbb{I} + \mathbb{P}^{(0)} : (\mathbb{C} - \mathbb{C}^{(0)})]^{-1} \rangle : \langle [\mathbb{I} + \mathbb{P}^{(0)} : (\mathbb{C} - \mathbb{C}^{(0)})]^{-1} \rangle^{-1} \\ &= \sum_{\alpha=0}^n v_{\alpha} \mathbb{C}^{\alpha} : [\mathbb{I} + \mathbb{P}^{(0)} : (\mathbb{C}^{\alpha} - \mathbb{C}^{(0)})]^{-1} : \left\{ \sum_{\beta=0}^n v_{\beta} [\mathbb{I} + \mathbb{P}^{(0)} : (\mathbb{C}^{\beta} - \mathbb{C}^{(0)})]^{-1} \right\}^{-1} \end{aligned} \quad (\text{III.3.60})$$

wenn in  $\mathfrak{m}$  stattdessen  $\mathbb{C}^E = \mathbb{C}^{(0)}$  gesetzt wird. Bei dieser Wahl ist  $\delta\mathbb{C}$  strikt negativ definit.  $\mathbb{P}^{(0)} := \mathbb{S}(\mathbb{C}^{(0)}) : \mathbb{C}^{(0)}$  ist mit dem Eshelbytensor für kugelförmige Einschlüsse zu bilden. Die obere Schranke (III.3.60) konvertiert in eine untere, falls  $\mathbb{C}^E$  in  $\mathfrak{m}$  durch Moduli

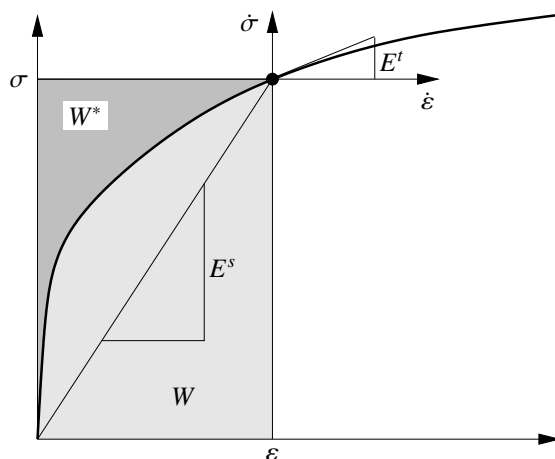
$$\mathbb{C}_{ijkl}^{(0')} := \min_{\substack{\mathbf{x} \in \mathcal{B} \\ \mathbb{C}_{ijkl} \neq 0}} \mathbb{C}_{ijkl}(\mathbf{x}) \quad (\text{III.3.61})$$

ersetzt und  $\delta\mathbb{C}$  somit positiv definit wird. Unter gewissen Voraussetzungen behalten die Schranken auch für allgemein ellipsoide Einschlüsse mit zumindest zwei identischen Halbachsenverhältnissen ihre Gültigkeit. Die Annahme, daß alle Einschlußellipsoide coaxial und ähnlich und in allen Raumrichtungen gleichförmig verteilt sind, erfüllt zumindest in der transversal isotropen Schnittebene den Tatbestand einer statistisch isotropen und homogenen Mikrostruktur. In diesem Kontext hat WALPOLE [163, 164, 165] die Hashin-Shtrikman-Schranken für transversal isotrope Mikrostrukturen erweitert. Eshelbytensoren  $\mathbb{S}(\mathbb{C}^{(0)})$  und  $\mathbb{S}(\mathbb{C}^{(0)})$  sind entsprechend der Einschlußgeometrie zu berechnen. Anstelle von Korrelationsfunktionen der Ordnung 2 treten in (III.3.60) nur Volumenfraktionen der Phasen auf, weshalb man Hashin-Shtrikman-Grenzen dem Typ  $(\infty, \infty, 2)$  zuordnet. Mit  $\mathbb{S}^{(0)} = \mathbb{P}(\mathbb{C}^{(0)}) : \mathbb{C}^{(0)}$  und  $\mathbb{S}^{(0')} = \mathbb{P}(\mathbb{C}^{(0')}) : \mathbb{C}^{(0')}$  in Phase  $n$  folgt schließlich aus obigen Betrachtungen nach weiteren Umformungen von (III.3.60)

$$\begin{aligned} &\bar{\mathbb{C}}^{\overline{HS}} \geq \bar{\mathbb{C}} \geq \bar{\mathbb{C}}^{\underline{HS}} \\ \bar{\mathbb{C}}^{\overline{HS}} &= \mathbb{C}^{(0)} : \left\{ \mathbb{I} - \left[ \sum_{\alpha=1}^{n-1} v_{\alpha} [(\mathbb{C}^{(0)} - \mathbb{C}^{\alpha})^{-1} : \mathbb{C}^{(0)} - \mathbb{S}^{(0)}]^{-1} + \mathbb{S}^{(0)} \right]^{-1} \right\} \\ \bar{\mathbb{C}}^{\underline{HS}} &= \mathbb{C}^{(0')} : \left\{ \mathbb{I} - \left[ \sum_{\alpha=1}^{n-1} v_{\alpha} [(\mathbb{C}^{(0')} - \mathbb{C}^{\alpha})^{-1} : \mathbb{C}^{(0')} - \mathbb{S}^{(0')}]^{-1} + \mathbb{S}^{(0')} \right]^{-1} \right\} \end{aligned} \quad (\text{III.3.62})$$

## 4. Nichtlineare analytische Homogenisierung

Nichtlineare analytische Homogenisierung wird hier im Kontext physikalisch nichtlinearer Verbundmaterialien bei kleinen Verzerrungen betrachtet. Nichtlineares Materialverhalten zeichnet sich durch einen nichtlinearen konstitutiven Zusammenhang zwischen Verzerrungen und Spannungen aus. Diese Nichtlinearität ist begründet in deformationsabhängigen Tangentenmoduli. Die primäre Aufgabe der analytischen Homogenisierung besteht darin, physikalische Nichtlinearitäten entsprechend [Abb. 27](#) zu linearisieren. Wie man der Abbildung entnehmen



**Abbildung 27:** Sekantenmodul  $E^s$  und Tangentenmodul  $E^t$  als Approximation nichtlinearen Materialverhaltens.  $W$  und  $W^*$  sind zueinander duale Potentialfunktionen.

kann, existieren hierzu zwei grundlegende Methoden: das Sekanten- und Inkrementenverfahren. Siehe in diesem Zusammenhang WILLIS [174], TALBOT & WILLIS [147, 148, 149], SUQUET [145], PONTE CASTAÑEDA & SUQUET [131] und darin enthaltene Referenzen. Durch Linearisierung wird das nichtlineare Randwertproblem auf ein lineares reduziert, welches für Standard-Homogenisierungsverfahren der linearen Theorie zugänglich ist. Ziel nachfolgender Subabschnitte ist eine Darstellung unterschiedlicher Ansätze von Sekanten- und Inkrementenverfahren und deren Anwendung zur Berechnung effektiver Parameter und Schranken. Hierzu wird angenommen, daß Materialparameter und Feldgrößen phasenweise konstant sind.

### 4.1. Sekantenverfahren

Neben dem in SUQUET [145] und PONTE CASTAÑEDA & SUQUET [131] beschriebenen klassischen variationsfreien Sekantenverfahren haben sich in der Literatur zwei weitere auf Variationsprinzipien gründende Ansätze durchgesetzt. Hinsichtlich Variationsformulierungen unterscheidet man zwischen auf dem  $\mathcal{EHS}$  basierenden, siehe beispielsweise WILLIS [174] und TALBOT & WILLIS [147, 148, 149], und auf einem linearen, heterogenen Vergleichsmedium basierenden, siehe beispielsweise PONTE CASTAÑEDA [129, 130] und PONTE CASTAÑEDA & SUQUET [131].

#### 4.1.1. Klassisches Sekantenverfahren

Beim klassischen Sekantenverfahren besteht kein Bezug zu einer Variationsformulierung. In einer  $n$ -phasigen Mikrostruktur werden Spannungen äquivalent zur linearen Theorie homogenisiert, wobei die Deformationsabhängigkeit der phasenspezifischen Moduli zu berücksichtigen ist. Das klassische Sekantenverfahren zur Berechnung effektiver Spannungen ist in [Box 3](#) auf-

**Box 3:** Klassisches Sekantenverfahren zur Berechnung effektiver Spannungen.

1.) Setze als Startwerte:

$$i = 0$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}_0^\alpha = \boldsymbol{\varepsilon}_0^\mathcal{M} = \mathbf{0} \quad , \quad 1 \leq \alpha < n$$

$$\mathbb{C}_0^\alpha = \mathbb{C}^\alpha(\boldsymbol{\varepsilon}_0^\alpha) \quad , \quad 1 \leq \alpha < n$$

$$\mathbb{C}_0^\mathcal{M} = \mathbb{C}^\mathcal{M}(\boldsymbol{\varepsilon}_0^\mathcal{M}) \quad , \quad \text{Matrix } \mathcal{M} \text{ ist Phase } n$$

2.) Für  $\mathcal{EHS}$  mit Matrixmoduli setze  $\mathbb{C}^E = \mathbb{C}_i^\mathcal{M}$ ,

bei effektiven Moduli berechne effektive Sekantenmoduli:

2.1.) Setze als Startwerte  $j = 0$  und  $\bar{\mathbb{C}}_0^s = \mathbb{C}_i^\mathcal{M}$

2.2.) Berechne Konzentrationstensoren  $\mathbb{A}_{j+1}^\alpha = \mathbb{A}^\alpha(\mathbb{C}_i^\alpha, \mathbb{C}_i^\mathcal{M}, \bar{\mathbb{C}}_j^s)$  für  $1 \leq \alpha < n$

2.3.) Berechne effektive Sekantenmoduli  $\bar{\mathbb{C}}_{j+1}^s = \bar{\mathbb{C}}(\mathbb{C}_i^\alpha, \mathbb{C}_i^\mathcal{M}, \mathbb{A}_{j+1}^\alpha)$

2.4.) Falls  $|\bar{\mathbb{C}}_{j+1}^s - \bar{\mathbb{C}}_j^s| < \text{tol}$  setze  $\mathbb{C}^E = \bar{\mathbb{C}}_{j+1}^s$ ,

ansonsten aktualisiere  $j := j + 1$  und gehe zu 2.2

3.) Berechne Konzentrationstensoren  $\mathbb{A}_{i+1}^\alpha = \mathbb{A}^\alpha(\mathbb{C}_i^\alpha, \mathbb{C}_i^\mathcal{M}, \mathbb{C}^E)$  für  $1 \leq \alpha < n$

4.) Berechne Verzerrungsfelder:

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{i+1}^\alpha = \mathbb{A}_{i+1}^\alpha : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \quad , \quad 1 \leq \alpha < n$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{i+1}^\mathcal{M} = \mathbb{A}_{i+1}^\mathcal{M} : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \quad , \quad \mathbb{A}_{i+1}^\mathcal{M} := (\mathbb{I} - \sum_{\beta=1}^{n-1} \nu_\beta \mathbb{A}_{i+1}^\beta) / \nu_\mathcal{M}$$

5.) Berechne phasenspezifische Sekantenmoduli:

$$\mathbb{C}_{i+1}^\alpha = \mathbb{C}^\alpha(\boldsymbol{\varepsilon}_{i+1}^\alpha) \quad , \quad 1 \leq \alpha < n$$

$$\mathbb{C}_{i+1}^\mathcal{M} = \mathbb{C}^\mathcal{M}(\boldsymbol{\varepsilon}_{i+1}^\mathcal{M})$$

6.) Falls  $|\sum_{\alpha=1}^n (\boldsymbol{\varepsilon}_{i+1}^\alpha - \boldsymbol{\varepsilon}_i^\alpha)| > \text{tol}$  aktualisiere  $i := i + 1$  und gehe zu 2

7.) Berechne effektive Spannungen:

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}} = \bar{\mathbb{C}}^s : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \quad \text{mit} \quad \bar{\mathbb{C}}^s = \sum_{\beta=1}^n \nu_\beta \mathbb{C}_{i+1}^\beta : \mathbb{A}_{i+1}^\beta$$

bereitet. Dort sind  $\bar{\mathbb{C}}$  effektive Moduli der linearen Homogenisierungstheorie und  $\mathbb{A}^\alpha$  zugehörige Konzentrationstensoren. Der Algorithmus in **Box 3** beinhaltet zwei wesentliche Schritte:

1.) In jeder Phase, einschließlich der mit  $n$  indizierten Matrixphase, sind bei gegebenem  $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$  Konzentrationstensoren und phasenspezifische Sekantenmoduli iterativ zu ermitteln:

$$\mathbb{A}^\alpha = \mathbb{A}^\alpha(\mathbb{C}^\alpha) \quad \rightarrow \quad \boldsymbol{\varepsilon}^\alpha = \mathbb{A}^\alpha : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \quad \rightarrow \quad \mathbb{C}^\alpha = \mathbb{C}^\alpha(\boldsymbol{\varepsilon}^\alpha) \quad , \quad 1 \leq \alpha \leq n$$

2.) Danach werden effektive Spannungen berechnet:

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}} = \bar{\mathbb{C}}^s : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \quad \text{mit} \quad \bar{\mathbb{C}}^s = \sum_{\beta=1}^n \nu_\beta \mathbb{C}^\beta : \mathbb{A}^\beta$$

Effektive Verzerrungen als Funktionen effektiver Spannungen werden analog ermittelt. Schranken für  $\bar{W}$  können nur einseitig gebildet werden. Bei einem bezüglich  $\boldsymbol{\varepsilon}$  schwächer als quadratisch wachsenden Potential  $W$  des heterogenen nichtlinearen Komposits erhält man obere, im Fall einer stärker als quadratischen Wachstumseigenschaft untere Schranken für das effektive Potential  $\bar{W}$ . Von den mit obigen Algorithmen erhaltenen Voigt-, Reuss- und Hashin-Shtrikman-Schranken sind daher entweder nur die oberen oder unteren Schranken maßgebend.

#### 4.1.2. Variationsprinzip basierend auf einem äquivalent homogenen Festkörper

Die Variationsfunktionale (III.2.38a,b) bilden die Ausgangsbasis zur Konstruktion effektiver Parameter und Schranken für das effektive Potential  $\overline{W}$  einer  $n$ -phasigen Mikrostruktur. Der einzige Unterschied zur linearen Theorie besteht in der Inhomogenität von Phasenmoduli  $\mathbb{C}^\alpha(\boldsymbol{\varepsilon}^\alpha)$  und -flexibilitäten  $\mathbb{D}^\alpha(\boldsymbol{\sigma}^\alpha)$ . Zur Berechnung effektiver Spannungen sind in (III.2.38a,b) Gleichheitszeichen zu setzen. Die zueinander dualen Variationsfunktionale liefern hier gleiche effektive Spannungswerte. Nichtlineare Schranken für  $\overline{W}$  sind generell einseitig. Bei einer bezüglich  $\boldsymbol{\varepsilon}$  schwächer als quadratisch wachsenden Funktion ( $W - W^E$ ) liefern (III.2.38a,b) obere Schranken für  $\overline{W}$ . Im Fall einer stärker als quadratischen Wachstumseigenschaft ist in (III.2.38a,b) das Ungleichheitszeichen umzukehren, womit man untere Schranken für  $\overline{W}$  erhält. Die zueinander dualen Funktionale (III.2.38a,b) ergeben identische Schranken. Von den nichtlinearen Voigt-, Reuss- und Hashin-Shtrikman-Schranken sind entweder nur die oberen oder unteren Schranken maßgebend. Zu beachten ist, daß man aus (III.2.38a,b) nur nichtlineare Schranken vom Hashin-Shtrikman-Typ extrahieren kann und eine generelle Konstruktion nichtlinearer Homogenisierungsmodelle nicht möglich ist. Dies ist generell begründet in der Schwierigkeit, für den  $\mathcal{EHP}$  a priori äquivalent homogene Materialparameter geeignet festzulegen.

#### 4.1.3. Variationsprinzip basierend auf einem heterogenen Vergleichsmedium

In den vorab diskutierten Variationsformulierungen vom Hashin-Shtrikman-Typ wird bezüglich Transformationsfeldvariablen optimiert. In PONTE CASTAÑEDA [129, 130], PONTE CASTAÑEDA & SUQUET [131], SUQUET [145] und entsprechenden Referenzen ist nachzulesen, daß nichtlineare Komposite von einem linearen, heterogenen Vergleichsmedium mit angepaßten Materialparametern realistischer approximiert werden. Hierin liegt der Anknüpfungspunkt für das von PONTE CASTAÑEDA [129, 130] entwickelte und u.a. in SUQUET [145] und PONTE CASTAÑEDA & SUQUET [131] für Komposite mit anisotropen Phasen verallgemeinerte Variationskonzept. Es sieht vor, das in jeder Phase  $\mathcal{J}_\alpha$ ,  $1 \leq \alpha \leq n$ , eines nichtlinearen  $n$ -phasigen Verbundmaterials gespeicherte Potential  $W(\boldsymbol{\varepsilon}^\alpha)$  durch die quadratische Potentialfunktion

$$W_0(\boldsymbol{\varepsilon}^\alpha) = \mathbb{C}_0^\alpha :: \mathbf{e}^\alpha \quad \text{mit} \quad \mathbf{e}^\alpha = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon}^\alpha \otimes \boldsymbol{\varepsilon}^\alpha \quad (\text{III.4.1})$$

eines linearen Vergleichsverbundkörpers und dem Potential  $V^\alpha$ , das den Unterschied zwischen  $W$  und  $W_0$  mißt, zu ersetzen. Für  $V^\alpha$  wird eine Darstellung gesucht, aus der sich positiv definite Sekantenmoduli  $\mathbb{C}_0^\alpha$  so ergeben, daß  $(W - W_0)$  optimal ist. Es wird angenommen, daß  $W(\boldsymbol{\varepsilon}^\alpha)$  bezüglich den Verzerrungen  $\boldsymbol{\varepsilon}^\alpha$  schwächer als quadratische Wachstumseigenschaften besitzt. Dieses Verhalten ist für inelastisches Material typisch. Mit dieser Charakteristik kann  $W(\boldsymbol{\varepsilon}^\alpha) = F^\alpha(\mathbf{e}^\alpha)$  durch eine bezüglich  $\mathbf{e}^\alpha$  konkave Funktion  $F^\alpha$  dargestellt werden mit den Eigenschaften  $F^\alpha(\mathbf{e}^\alpha \geq \mathbb{0}) \geq 0$ ,  $F^\alpha(\mathbf{e}^\alpha < \mathbb{0}) = -\infty$ ,  $F^\alpha(\mathbb{0}) = 0$  und  $\lim_{|\mathbf{e}^\alpha| \rightarrow \infty} F^\alpha(\mathbf{e}^\alpha) = +\infty$ .  $\mathbb{0}$  ist hier vierstufiger Nulltensor. Abschnitt 3.2 des Kapitels II folgend sind der konkave Pol  $F_*^\alpha$  und der konkave Bipol  $F^\alpha = F_{**}^\alpha$  von  $F^\alpha$  definiert als

$$\left. \begin{aligned} F_*^\alpha(\mathbb{C}_0^\alpha) &= \inf_{\mathbf{e}^\alpha} \{ \mathbb{C}_0^\alpha :: \mathbf{e}^\alpha - F^\alpha(\mathbf{e}^\alpha) \} \\ F^\alpha(\mathbf{e}^\alpha) &= \inf_{\mathbb{C}_0^\alpha > \mathbb{0}} \{ \mathbb{C}_0^\alpha :: \mathbf{e}^\alpha - F_*^\alpha(\mathbb{C}_0^\alpha) \} \end{aligned} \right\} \quad \forall 1 \leq \alpha \leq n \quad (\text{III.4.2})$$

Bei Annahme negativ definiter Phasenmoduli  $\mathbb{C}_0^\alpha$  nimmt die negative rechte Seite der Inf-Bedingung (III.4.2)<sub>1</sub> aufgrund der Wachstumseigenschaft  $\lim_{|\mathbf{e}^\alpha| \rightarrow \infty} F^\alpha(\mathbf{e}^\alpha) = +\infty$  für  $\mathbf{e}^\alpha \rightarrow +\infty$  den Grenzwert  $F_*^\alpha = -\infty$  an. Für  $\mathbf{e}^\alpha \rightarrow +\infty$  ist das Potential  $W(\boldsymbol{\varepsilon}^\alpha)$  nicht definiert. Konkavität

der Funktion  $F^\alpha$  ist daher notwendig, um positive Definitheit der Phasenmoduli

$$\mathbb{C}_0^\alpha = \partial_{\mathbf{e}^\alpha} F^\alpha(\mathbf{e}^\alpha) = \partial_{\boldsymbol{\varepsilon}^\alpha \boldsymbol{\varepsilon}^\alpha}^2 W(\boldsymbol{\varepsilon}^\alpha) > 0 \quad \forall 1 \leq \alpha \leq n \quad (\text{III.4.3})$$

zu garantieren. Aus Gleichung (III.4.2)<sub>2</sub> erhält man als Potential der Phase  $\alpha$

$$W(\boldsymbol{\varepsilon}^\alpha) = \inf_{\mathbb{C}_0^\alpha > 0} \{W_0(\boldsymbol{\varepsilon}^\alpha) + V^\alpha(\mathbb{C}_0^\alpha)\} \quad (\text{III.4.4})$$

mit dem Anteil (III.4.1) des linearen Vergleichsmaterials und mit

$$V^\alpha(\mathbb{C}_0^\alpha) \equiv -F_*^\alpha(\mathbb{C}_0^\alpha) \quad \forall 1 \leq \alpha \leq n \quad (\text{III.4.5})$$

Das effektive Potential

$$\begin{aligned} \bar{W}(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}) &= \inf_{\mathbf{u} \in \mathcal{U}(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}})} \langle W(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})) \rangle \\ &= \inf_{\mathbf{u} \in \mathcal{U}(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}})} \inf_{\substack{\mathbb{C}_0^\alpha > 0 \\ \alpha=1, \dots, n}} \{ \sum_{\beta=1}^n \nu_\beta [W_0(\boldsymbol{\varepsilon}^\beta(\mathbf{u})) - F_*^\beta(\mathbb{C}_0^\beta)] \} \end{aligned} \quad (\text{III.4.6})$$

wird aus (III.4.4) basierend auf dem Prinzip vom Minimum der potentiellen Energie gewonnen. Einführen von  $\bar{W}_0(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}) = \frac{1}{2} : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} : \bar{\mathbb{C}}_0 : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} := \inf_{\mathbf{u} \in \mathcal{U}(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}})} \langle W_0(\boldsymbol{\varepsilon}) \rangle$  in (III.4.6) als das dem linearen Vergleichskörper zugeordnete effektive Potential ergibt

$$\bar{W}(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}) = \inf_{\substack{\mathbb{C}_0^\alpha > 0 \\ \alpha=1, \dots, n}} \{ \bar{W}_0(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}) - \sum_{\beta=1}^n \nu_\beta F_*^\beta(\mathbb{C}_0^\beta) \} \quad (\text{III.4.7})$$

Variation von (III.4.6) und (III.4.7) bezüglich  $\mathbb{C}_0^\alpha$  führt auf die Optimalitätsbedingungen

$$\mathbf{e}^\alpha = \frac{\partial F_*^\alpha(\mathbb{C}_0^\alpha)}{\partial \mathbb{C}_0^\alpha} \quad \text{und} \quad \frac{1}{2} \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} : \frac{\partial \bar{\mathbb{C}}_0(\mathbb{C}_0^\alpha)}{\partial \mathbb{C}_0^\alpha} : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} = \nu_\alpha \frac{\partial F_*^\alpha(\mathbb{C}_0^\alpha)}{\partial \mathbb{C}_0^\alpha} \quad \forall 1 \leq \alpha \leq n \quad (\text{III.4.8})$$

aus denen man auf die Phasenverzerrungen

$$\mathbf{e}^\alpha = \frac{1}{2\nu_\alpha} \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} : \frac{\partial \bar{\mathbb{C}}_0}{\partial \mathbb{C}_0^\alpha} : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \quad \forall 1 \leq \alpha \leq n \quad (\text{III.4.9})$$

schließt. Materialparameter  $\bar{\mathbb{C}}_0$  sind durch effektive Moduli linearer Homogenisierungsverfahren zu ersetzen. SUQUET [145] und PONTE CASTAÑEDA & SUQUET [131] folgend kann das Sekantenverfahren in Box 3 modifiziert werden, indem man dort Phasenverzerrungen durch (III.4.9) und Phasenmoduli durch Sekantenmoduli (III.4.3) ersetzt. Konzentrationstensoren  $\mathbb{A}^\alpha$  sind überflüssig. Mit  $\bar{V}(\bar{\mathbb{C}}_0) = \sum_{\beta=1}^n \nu_\beta V^\beta(\mathbb{C}_0^\beta)$  sowie den komplementären Potentialen  $\bar{U} \equiv \bar{W}^* = \sum_{\beta=1}^n \nu_\beta U^\beta(\boldsymbol{\sigma}^\beta)$  und  $\bar{U}_0 \equiv \bar{W}_0^* = \sum_{\beta=1}^n \nu_\beta U_0^\beta(\boldsymbol{\sigma}^\beta) = \sum_{\beta=1}^n \nu_\beta \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma}^\beta : \mathbb{D}_0^\beta : \boldsymbol{\sigma}^\beta$  lässt sich eine zu (III.4.7) duale Variationsformulierung entwickeln. Startpunkt ist die Legendre-Fenchel-Transformation

$$\begin{aligned} \bar{U}(\bar{\boldsymbol{\sigma}}) &= \sup_{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}} \{ \bar{\boldsymbol{\sigma}} : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} - \bar{W}(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}) \} \\ &= \sup_{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}} \{ \bar{\boldsymbol{\sigma}} : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} - \inf_{\substack{\mathbb{C}_0^\alpha > 0 \\ \alpha=1, \dots, n}} \{ \bar{W}_0(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}) + \bar{V}(\bar{\mathbb{C}}_0) \} \} \\ &= \sup_{\substack{\mathbb{C}_0^\alpha > 0 \\ \alpha=1, \dots, n}} \{ \sup_{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}} \{ \bar{\boldsymbol{\sigma}} : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} - \bar{W}_0(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}) \} - \bar{V}(\bar{\mathbb{C}}_0) \} \\ &= \sup_{\substack{\mathbb{C}_0^\alpha > 0 \\ \alpha=1, \dots, n}} \{ \bar{U}_0(\bar{\boldsymbol{\sigma}}) - \bar{V}(\bar{\mathbb{C}}_0) \} \end{aligned} \quad (\text{III.4.10})$$

Aus der Struktur von Gleichung (III.4.10) geht hervor, daß  $G^{\alpha*}(\mathbb{D}_0^\alpha) := V^\alpha(\mathbb{C}_0^\alpha)$  und  $G^{\alpha**}(\mathfrak{s}^\alpha) = G^\alpha(\mathfrak{s}^\alpha) := U^\alpha(\boldsymbol{\sigma}^\alpha)$  mit Phasenspannungen  $\mathfrak{s}^\alpha = \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma}^\alpha \otimes \boldsymbol{\sigma}^\alpha$  zueinander duale konvexe Funktionen sind. Damit folgt aus (III.4.10) das zu (III.4.6) duale effektive komplementäre Potential

$$\bar{U}(\bar{\boldsymbol{\sigma}}) = \inf_{\substack{\boldsymbol{\sigma}^\alpha \in \mathcal{F}(\bar{\boldsymbol{\sigma}}) \\ \alpha=1,\dots,n}} \sup_{\substack{\mathbb{D}_0^\alpha > 0 \\ \alpha=1,\dots,n}} \{ \sum_{\beta=1}^n v_\beta [U_0(\boldsymbol{\sigma}^\beta) - G_*^\beta(\mathbb{D}_0^\beta)] \} \quad (\text{III.4.11})$$

Weitere Umformung ergeben dual zu (III.4.7)

$$\bar{U}(\bar{\boldsymbol{\sigma}}) = \sup_{\substack{\mathbb{D}_0^\alpha > 0 \\ \alpha=1,\dots,n}} \{ \bar{U}_0(\bar{\boldsymbol{\sigma}}) - \sum_{\beta=1}^n v_\beta G_*^\beta(\mathbb{D}_0^\beta) \} \quad (\text{III.4.12})$$

Als Gegenstücke zu (III.4.3) und (III.4.9) extrahiert man aus den letzten zwei Beziehungen

$$\mathbb{D}_0^\alpha = \partial_{\mathfrak{s}^\alpha} G^{\alpha*}(\mathfrak{s}^\alpha) \quad \text{und} \quad \mathfrak{s}^\alpha = \frac{1}{2v_\alpha} \bar{\boldsymbol{\sigma}} : \frac{\partial \bar{\mathbb{D}}_0(\mathbb{D}_0^\alpha)}{\partial \mathbb{D}_0^\alpha} : \bar{\boldsymbol{\sigma}} \quad \forall 1 \leq \alpha \leq n \quad (\text{III.4.13})$$

Man erhält ein modifiziertes Sekantenverfahren, wenn man Phasenspannungen durch  $\mathfrak{s}^\alpha$  und phasenspezifische Flexibilitäten durch Sekantenflexibilitäten (III.4.13)<sub>1</sub> ersetzt. Mit dem beschriebenen Variationsprinzip lassen sich beliebig nichtlineare Homogenisierungsmodelle konstruieren. Ihre Struktur gleicht der von linearen Standard-Homogenisierungsmodellen. Zu beachten ist, daß der Anwendungsbereich auf Materialmodelle beschränkt ist, in denen  $W(\boldsymbol{\varepsilon})$  schwächer als quadratische Wachstumseigenschaften bezüglich  $\boldsymbol{\varepsilon}$  besitzt. Das klassische Sekantenverfahren und das in WILLIS [174] und TALBOT & WILLIS [147, 149] favorisierte Variationsprinzip kennen eine solche Einschränkung nicht. Nach obigem Schema berechnete nichtlineare Schranken sind generell einseitig. TALBOT & WILLIS [150] ist es gelungen, durch Einführung eines nichtlinearen heterogenen Vergleichsmediums zweiseitige Schranken zu konstruieren.

## 4.2. Inkrementelle Verfahren

Inelastische Materialien besitzen kein Potential. Daher scheiden Sekantenverfahren hier aus. Bei einer Inkrementierung des Deformations- oder Spannungspfads kann die Existenz eines inkrementellen Potentials näherungsweise angenommen werden. Dies ist der Ansatzpunkt inkrementeller Verfahren. Man unterscheidet zwischen variationsfreien klassischen inkrementellen Verfahren und auf Variationsprinzipien basierenden Methoden. Es wird in diesem Abschnitt ein Konzept vorgestellt, welches auf der in Abschnitt 2.4 des Kapitels II behandelten inkrementellen Variationsformulierung für standard-dissipative Materialien gründet.

### 4.2.1. Klassisches inkrementelles Verfahren

Die algorithmische Struktur wird in SUQUET [145] und PONTE CASTAÑEDA & SUQUET [131] dargestellt. Der Unterschied zum Sekantenverfahren besteht darin, daß die makroskopisch treibende Variable  $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$  oder  $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$  mit Startwert  $\mathbf{0}$  inkrementell erhöht wird. Zur Berechnung effektiver Spannungsrate wird in jedem Inkrement ein Sekantenverfahren verwendet:

- 1.) In jeder Phase sind bei gegebener Verzerrungsrate  $\dot{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}}$  Konzentrationstensoren und phasenspezifische Tangentenmoduli iterativ zu ermitteln:

$$\mathbb{A}^\alpha = \mathbb{A}^\alpha(\mathbb{C}^\alpha) \quad \rightarrow \quad \boldsymbol{\varepsilon}^\alpha = \mathbb{A}^\alpha : \dot{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}} \quad \rightarrow \quad \mathbb{C}^\alpha = \mathbb{C}^\alpha(\boldsymbol{\varepsilon}^\alpha, \dot{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}}) \quad , \quad 1 \leq \alpha \leq n$$

- 2.) Danach werden die effektiven Spannungen berechnet:

$$\dot{\bar{\boldsymbol{\sigma}}} = \bar{\mathbb{C}}^t : \dot{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}} \quad \text{mit} \quad \bar{\mathbb{C}}^t = \sum_{\beta=1}^n v_\beta \mathbb{C}^\beta : \mathbb{A}^\beta$$



**Box 4:** Algorithmus zur Berechnung effektiver Spannungen in einem typischen Zeitinkrement  $[t_m, t_{m+1}]$  basierend auf einer inkrementellen Variationsformulierung.

- 1.) Setze als Startwerte:  $i = 0$  ,  $\{\boldsymbol{\varepsilon}_0^\alpha\}_{m+1} = \boldsymbol{\varepsilon}_m^\alpha$  ,  $\mathbb{C}_0^\alpha = \mathbb{C}^\alpha(\boldsymbol{\varepsilon}_m^\alpha)$  für  $1 \leq \alpha \leq n$
- 2.) Berechne phasenspezifische Konzentrationstensoren und Verzerrungen:  

$$\mathbb{A}_{i+1}^\alpha = \mathbb{A}^\alpha(\mathbb{C}_i^\alpha) \quad \rightarrow \quad \{\boldsymbol{\varepsilon}_{i+1}^\alpha\}_{m+1} = \boldsymbol{\varepsilon}_m^\alpha + \mathbb{A}_{i+1}^\alpha : \Delta \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \quad \text{für } 1 \leq \alpha \leq n$$
- 3.) Berechne phasenspezifische Tangentenmoduli basierend auf dem Algorithmus zur inkrementellen Variationsformulierung in **Box 1**:  

$$\mathbb{C}_{i+1}^\alpha = \mathbb{C}^\alpha(\{\boldsymbol{\varepsilon}_{i+1}^\alpha\}_{m+1}, \boldsymbol{\varepsilon}_m^\alpha) \quad \text{für } 1 \leq \alpha \leq n$$
- 4.) Falls  $|\sum_{\alpha=1}^n \{\boldsymbol{\varepsilon}_{i+1}^\alpha\}_{m+1} - \{\boldsymbol{\varepsilon}_i^\alpha\}_{m+1}| > \text{tol}$  aktualisiere  $i := i + 1$  und gehe zu 2, ansonsten setze  $\boldsymbol{\varepsilon}_{m+1}^\alpha = \{\boldsymbol{\varepsilon}_{i+1}^\alpha\}_{m+1}$
- 5.) Berechne effektive Spannungen:  

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}}_{m+1} = \bar{\boldsymbol{\sigma}}_m + \bar{\mathbb{C}}^t : \Delta \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \quad \text{mit} \quad \bar{\mathbb{C}}^t = \sum_{\beta=1}^n \nu_\beta \mathbb{C}_{i+1}^\beta : \mathbb{A}_{i+1}^\beta$$

Ein duales Schema zur Bestimmung effektiver Verzerrungen als Funktionen der makroskopischen Spannungen ergibt sich analog. DVORAK [45] verwendet das klassische inkrementelle Verfahren beispielsweise in der Plastizität faserverstärkter Metallmatrixkomposite. Für allgemein standard-dissipative Materialien läßt sich das klassische Inkrementenverfahren mit der inkrementellen Variationsformulierung aus Abschnitt 2.4 des Kapitels II verbinden. Die Idee ist, in jeder Phase  $\mathcal{J}_\alpha$  einer  $n$ -phasigen Mikrostruktur ein inkrementelles quasi-hyperelastisches Potential  $W$  zu definieren, das den Einsatz eines Sekantenverfahrens zur Berechnung effektiver Spannungen ermöglicht. Als Inkremente werden finite Zeitschritte  $[t_m, t_{m+1}] \in \mathcal{R}_+$  betrachtet, zu deren Beginn  $t_m$  alle Variablen  $\{\cdot\}_m$  gegeben sind. Der Algorithmus in **Box 4** hat die Struktur eines Sekantenverfahrens, bei dem die akkumulierten Phasenverzerrungen  $\boldsymbol{\varepsilon}_{m+1}^\alpha$  als quasi-elastische Variablen aufzufassen sind. Phasenverzerrungen und effektive Spannungen sind inkrementell aufzudatieren. Um aus **Box 4** ein duales Schema zur Berechnung effektiver Verzerrungen bei gegebenem makroskopischen Spannungszustand zu erhalten, ist Punkt 3 entsprechend zu modifizieren. Tangentenflexibilitäten  $\{\mathbb{D}_{i+1}^\alpha\}_{m+1} = (\{\mathbb{C}_{i+1}^\alpha\}_{m+1})^{-1}$  sind hier basierend auf dem Algorithmus **Box 1** zur inkrementellen Variationsformulierung mit Phasenverzerrungen  $\{\boldsymbol{\varepsilon}_{i+1}^\alpha\}_{m+1} = \{\mathbb{D}_i^\alpha\}_{m+1} : \{\boldsymbol{\sigma}_{i+1}^\alpha\}_{m+1}$  und  $\boldsymbol{\varepsilon}_m^\alpha$  als Eingabewerte zu berechnen.

#### 4.2.2. Verfahren basierend auf einer inkrementellen Variationsformulierung

Kernstück dieser Verfahren sind Extremalprinzipien, aus denen sich durch Variation nach effektiven Verzerrungen eindeutig effektive Spannungen ergeben. Variationsprinzipien ermöglichen eine direkte Kopplung von Mikro- und Makrovariablen. In der Literatur sind hierzu bislang nur sehr wenige analytische Ansätze zu finden. In SUQUET [145] und PONTE CASTAÑEDA & SUQUET [131] wird ein Variationsverfahren für elastoplastische Materialien beschrieben, deren inelastisches Verhalten durch ein von-Mises-Fließkriterium gekennzeichnet ist. Die Autoren setzen die Existenz eines effektiven Potentials voraus. Ferner charakterisieren sie das Materialverhalten des Komposits auf der Mikro- und Makroskala durch Differentialgleichungssätze mit gleicher Struktur. Im Hinblick auf ein tiefgründiges Verständnis von Wechselwirkungen zwischen den Skalen komplexer Verbundwerkstoffe besteht in der Entwicklung allgemeiner analytischer Variationsprinzipien noch ein erhöhter Forschungsbedarf.



## 5. Diskrete numerische Homogenisierung

Bei numerischen Mehrskalennalysen können räumliche Teilgebiete mit beispielsweise großen plastischen Verformungen beliebig genau aufgelöst und diskretisiert werden. Der Anwendungsbereich analytischer Homogenisierungsverfahren ist hier durch Annahme stückweise homogener Deformationen und Spannungen schon a priori eingeschränkt. Ferner können komplexe heterogene Strukturen homogenisiert werden, wohingegen analytischen Hilfsmitteln hier Grenzen gesetzt sind. Ziel der numerischen Mehrskalennalyse ist, geometrische und physikalische Heterogenitäten in das diskrete Randwertproblem eines mikroheterogenen Verbundmaterials einzubeziehen. Die Topologie eines Komposits kann bei verschiedenen Längenskalen besondere Merkmale aufweisen, welche das Materialverhalten einer übergeordneten Längenskala signifikant beeinflussen. Dies wurde bereits am Beispiel des dreiskaligen Werkstoffs in [Abb. 13](#) aufgezeigt. Im Hinblick auf eine erschöpfende realitätstreue Abbildung des wahren Materialverhaltens sind daher, charakteristische Teilbereiche ( $\mathcal{RVE}$ s) dieser Skalen aufzulösen und zu diskretisieren. Es wird angenommen, daß die im [Abschnitt 1.1](#) genannten Prinzipien der Ergodizität und Skalenseparation auf jeder Skala erfüllt sind. Aufgrund der Skalenseparation sind  $\mathcal{RVE}$ s der Mikrostruktur nur punktweise mit der jeweils nächstgrößeren Skala gekoppelt. Bei Finite Elementdiskretisierungen werden sie an Element-Gaußpunkte der darüberliegenden Skala geheftet. Räumliche Teilgebiete unterschiedlicher Längenskalen können unabhängig voneinander diskretisiert werden. Eine Finite Elementdiskretisierung, die in [GOSH, LEE & MOORTHY \[55\]](#) favorisierte Voronoi-Zellenmethode oder die in [MICHEL, MOULINEC & SUQUET \[100\]](#) und [MOULINEC & SUQUET \[119\]](#) vorgenommene schnelle Fouriertransformation stellen drei mögliche Diskretisierungsansätze dar. Eine Konsequenz der Skalenskopplung ist, daß die Mehrskalennalyse in einer Sequenz von Zweiskalennalysen durchgeführt werden kann. Demnach ist für eine numerische Mehrskalennalyse nur ein Zweiskalennalgorithmus nötig, der nachfolgend am Beispiel eines zweiskaligen Verbundwerkstoffs dargestellt wird. Bei derartigen Materialien unterscheidet man zwischen einer Mikro- und einer Makroskala. Die numerische Umsetzung des zugehörigen Mikro-Makro-Konzepts wird in [Abb. 14](#) visualisiert. Auf der Makroskala des Verbundkörpers sei das makroskopische Randwertproblem entsprechend [Abschnitt 1.4.1](#) definiert. In [Abb. 14](#) unterliegt das Verschiebungsfeld des  $\mathcal{RVE}$ s der im makroskopischen Punkt  $\bar{X} \in \bar{\mathcal{B}}$  der Makrostruktur  $\bar{\mathcal{B}} \subset \mathcal{R}^3$  auftretenden Deformation  $\bar{F}$ . In den Arbeiten [MIEHE, KOCH & BAYREUTHER \[109\]](#), [MIEHE \[104, 105\]](#) und [MIEHE, SCHOTTE & LAMBRECHT \[110\]](#) wird für den Mikro-Makro-Übergang ein Variationsfunktional mit der Struktur der Hill-Bedingung auf der Mikroskala postuliert, in dem die Makrovariable  $\bar{F}$  Eingang findet. Eine Auswertung des Variationsproblems ergibt das im [Abschnitt 1.4.2](#) definierte mikroskopische Randwertproblem. Als Lösung erhält man daraus die mikroskopischen Variablen  $\{F, P\}$ . Eine daran anschließende Sensitivitätsanalyse des Mikro-Makro-Variationsfunktionals bezüglich eines infinitesimalen Inkrements  $\Delta \bar{F}$  liefert effektive Spannungen  $\bar{P}$  und effektive Tangentensmoduli  $\bar{C}$ , die als kontinuumsmechanische Größen des materiellen Punktes  $\bar{X}$  im makroskopischen Randwertproblem eingehen. In [MIEHE, KOCH & BAYREUTHER \[109\]](#) wird als Mikro-Makro-Homogenitätsbedingung ein Variationsfunktional für nichtlinear elastische Verbundwerkstoffe formuliert. Das dort entwickelte Homogenisierungskonzept wird von [MIEHE \[104\]](#) und [MIEHE, SCHOTTE & LAMBRECHT \[110\]](#) für inelastische Komposite in ein inkrementelles Variationsproblem eingebettet. In [MIEHE \[105\]](#) wird a priori von einer diskreten Darstellung der Mikro-Makro-Homogenitätsbedingung ausgegangen, die in dieser Form für beliebige Materialmodelle zugänglich ist. Wesentliche Voraussetzungen für den Mikro-Makro-Übergang in diesen Arbeiten sind im [Abschnitt 1.4.3](#) genannt. Die Darstellungen zur deformationsgesteuerten Homoge-

nisierung in diesem Abschnitt folgen den Ausführungen in MIEHE [105] und MIEHE, KOCH [108]. Neu ist der Zugang einer spannungsgetriebenen Homogenisierung, bei der Spannungen  $\bar{\mathbf{P}}$  als treibende Makrovariablen in die hierfür modifizierte Mikro-Makro-Homogenitätsbedingung eingehen. Dieser Zugang ist notwendig, wenn auf der Makroskala diskrete Spannungsparameter als globale Elementfreiheitsgrade in den Finite Elementansätzen auftreten. Eine erschöpfende Beschreibung von Mikro-Makro-Übergängen erfordert somit die Bereitstellung von Algorithmen zur deformations- und spannungsgetriebenen Zweiskalenanalyse. Neu ist auch die Einbeziehung starrer Einschlüsse, die in obigen Arbeiten unberücksichtigt bleiben. In allen Formulierungen wird eine Darstellung in den arbeitskonjugierten Größen  $\{\bar{\mathbf{F}}, \bar{\mathbf{P}}\}$  bzw.  $\{\mathbf{F}, \mathbf{P}\}$  vorgenommen. Durch Linearisierung an der Referenzkonfiguration erhält man die bei kleinen Verzerrungen entsprechenden Darstellungen mit den Variablen  $\{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}, \bar{\boldsymbol{\sigma}}\}$  bzw.  $\{\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\sigma}\}$ . Diese werden gegebenenfalls angegeben. Die in diesem Abschnitt dargestellten Ansätze zur numerischen Homogenisierung sind für Verbundmaterialien mit allgemein standard-dissipativen Mikrostrukturen geeignet. Das konstitutive Verhalten standard-dissipativer Materialien ist gekennzeichnet durch die Existenz eines inkrementellen Potentials, das sich entsprechend Abschnitt 2.4 des Kapitels II als Komposition einer Freien Energie- und einer Dissipationsfunktion darstellen läßt. Die Klasse der normal-dissipativen Materialien umfaßt ein großes Spektrum von Materialmodellen der Elastizität, Viskoelastizität, Plastizität, Viskoplastizität und Schädigung.

## 5.1. Deformationsgetriebene Homogenisierung

Mit  $\bar{\mathbf{F}}$  als makroskopisch treibende Variable der Mikrostruktur  $\mathcal{B}$  wird die Mikro-Makro-Homogenitätsbedingung zunächst in einer allgemeinen Fassung kontinuierlich dargestellt und für drei kanonische Randbedingungen spezifiziert. Zugehörige Euler-Gleichungen werden analysiert. Im Hinblick auf eine algorithmische Konzeption von Skalenübergängen wird die Mikro-Makro-Homogenitätsbedingung anschließend basierend auf einer Finite Elementdiskretisierung von Verschiebungen und Deformationen als Lagrange-Variationsfunktional oder als Variationsfunktional mit Strafterm diskret formuliert und ausgewertet.

### 5.1.1. Kontinuierliche Mikro-Makro-Variationsformulierung

In der Mikrostruktur  $\mathcal{B} \subset \mathcal{R}^3$  wird in  $\mathbf{X} \in \mathcal{B}$  ein inkrementelles Potential  $W$  in einem finiten Zeitintervall  $t \in [t_n, t_{n+1}] \subset \mathcal{R}_+$  angenommen. Die Mikro-Makro-Homogenitätsbedingung

$$\bar{W}(\bar{\mathbf{F}}) = \inf_{\boldsymbol{\varphi} \in \mathcal{U}(\bar{\mathbf{F}})} \bar{w}(\boldsymbol{\varphi}) \quad \text{mit} \quad \bar{w}(\boldsymbol{\varphi}) = \frac{1}{|\mathcal{B}|} \int_{\mathcal{B}} W(\boldsymbol{\varphi}) dV \quad (\text{III.5.1})$$

definiert das zugehörige makroskopische inkrementelle Potential  $\bar{W}$  basierend auf dem Prinzip vom Minimum der potentiellen Energie. Hierzu ist das über dem  $\mathcal{R}^3$  homogenisierte Potential  $\bar{w}$  bezüglich der Mikroplazierung  $\boldsymbol{\varphi} \in \mathcal{U}(\bar{\mathbf{F}}) = \{\boldsymbol{\varphi} \in \mathcal{H}^1(\mathcal{B})^3 \mid \boldsymbol{\varphi} \text{ genügt (III.1.7)}\}$  bei gegebener makroskopischer Deformation  $\bar{\mathbf{F}}$  zu minimieren. Im Lösungspunkt  $\boldsymbol{\varphi}^*$  hat (III.5.1) die Struktur der Hill-Bedingung (III.1.22). Es wird angenommen, daß die inkrementellen Potentialfunktionen  $\bar{W}$  und  $W$  die in Abschnitt 1.4.3 genannten Eigenschaften erfüllen. In Box 5 wird das Minimierungsproblem (III.5.1) als Lagrange-Funktional und als Funktional mit Strafterm bezüglich den kanonischen Randbedingungen (III.1.34) spezifiziert. Die Lösung des Lagrange-Funktional ist gleichbedeutend mit einer Sattelpunktaufgabe. In diesem Zusammenhang sei auf Abschnitt 3.4 des Kapitels II verwiesen. Nachfolgend ist zu verifizieren, inwieweit die Mikro-Makro-Variationsformulierungen in Box 5 das in Abschnitt 1.4.2 definierte mikroskopische Randwertproblem und die in Abschnitt 1.2.2 defi-

nierten effektiven Spannungen wiedergeben. Hierbei ist insbesondere der in MIEHE [104] gefundene nichttriviale Zusammenhang zwischen homogenen Spannungsrandbedingungen und den unter (S) definierten Nebenbedingungen in Box 5 aufzuzeigen. Es wird zunächst das Lagrange-Funktional behandelt. Hier wird die Lagrange-Nebenbedingung in der allgemeinen Form  $|\mathcal{B}| \cdot \bar{c}(\varphi, \Lambda, \bar{F}) = \int_{\partial\mathcal{B}} C(\varphi, \Lambda, \bar{F}) dA$  mit Lagrange-Parameter  $\Lambda$  angenommen. Erste Variation der Mikro-Makro-Homogenitätsbedingung bezüglich den Variablen  $\{\varphi, \Lambda, \bar{F}\}$  ergibt unter Berücksichtigung des Gaußschen Integralsatzes

$$\begin{aligned} \delta\bar{W} = \delta\bar{F} : \bar{P} &\doteq \frac{1}{|\mathcal{B}|} \int_{\mathcal{B}} \delta F : W_{,F} dV \\ &- \frac{1}{|\mathcal{B}|} \int_{\partial\mathcal{B}} (\delta\varphi C_{,\varphi} + \delta\Lambda \cdot C_{,\Lambda} + \delta\bar{F} : C_{,\bar{F}}) dA \\ &= - \frac{1}{|\mathcal{B}|} \int_{\mathcal{B}} \delta\varphi \operatorname{DIV}[W_{,F}] dV + \frac{1}{|\mathcal{B}|} \int_{\partial\mathcal{B}} \delta\varphi (W_{,F} N - C_{,\varphi}) dA \\ &- \frac{1}{|\mathcal{B}|} \int_{\partial\mathcal{B}} \delta\Lambda \cdot C_{,\Lambda} dA - \delta\bar{F} : \frac{1}{|\mathcal{B}|} \int_{\partial\mathcal{B}} C_{,\bar{F}} dA \end{aligned} \quad (\text{III.5.2})$$

Bei beliebiger Variation  $\{\delta\varphi, \delta\Lambda, \delta\bar{F}\} \neq \{\mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{0}\}$  extrahiert man daraus die Feldgleichungen

$$\operatorname{DIV}[\mathbf{P}] = \mathbf{0} \text{ in } \mathcal{B} \quad , \quad \mathbf{P}N = C_{,\varphi} \text{ auf } \partial\mathcal{B} \quad , \quad C_{,\Lambda} = \mathbf{0} \text{ auf } \partial\mathcal{B} \quad (\text{III.5.3})$$

mit  $\mathbf{P} = W_{,F}$  und als effektive 1. P.-K.-Spannungen

$$\bar{P} = - \frac{1}{|\mathcal{B}|} \int_{\partial\mathcal{B}} C_{,\bar{F}} dA \quad (\text{III.5.4})$$

In Bezug auf lineare Verschiebungen (D), periodische Verschiebungen (P) und homogene Spannungen (S) auf dem Rand  $\partial\mathcal{B}$  der Mikrostruktur lassen sich die Gleichungen (III.5.3)<sub>2,3</sub> durch

$$\left. \begin{array}{lll} \text{(D)} & \varphi = \bar{F}X & \text{und } \mathbf{P}N = \Lambda \quad \text{auf } \partial\mathcal{B} \\ \text{(P)} & \llbracket \varphi \rrbracket = \bar{F} \llbracket X \rrbracket & \text{und } \mathbf{P}^+ N^+ = \Lambda = -\mathbf{P}^- N^- \quad \text{auf } \partial\mathcal{B}^+ \\ \text{(S)} & \bar{F} = \frac{1}{|\mathcal{B}|} \int_{\partial\mathcal{B}} \varphi \otimes N dA & \text{und } \mathbf{P}N = \Lambda \quad \text{auf } \partial\mathcal{B} \end{array} \right\} \quad (\text{III.5.5})$$

und (III.5.4) durch

$$\left. \begin{array}{l} \text{(D)} \quad \bar{P} = \frac{1}{|\mathcal{B}|} \int_{\partial\mathcal{B}} \Lambda \otimes X dA \\ \text{(P)} \quad \bar{P} = \frac{1}{|\mathcal{B}|} \int_{\partial\mathcal{B}^+} \Lambda \otimes \llbracket X \rrbracket dA \\ \text{(S)} \quad \bar{P} = \Lambda \otimes \frac{1}{|\mathcal{B}|} \int_{\partial\mathcal{B}} X dA \end{array} \right\} \quad (\text{III.5.6})$$

spezifizieren. Die Randbedingungen (III.5.5) und (III.1.34) des mikroskopischen Randwertproblems lassen sich eindeutig einander zuordnen. Ferner sind die makroskopischen Spannungen (III.5.6)<sub>1,2</sub> konsistent mit Definition (III.1.12). Aufgrund der Homogenität der Lagrange-Parameter  $\Lambda$  schließt man aus den Gleichungen (III.5.5)<sub>3</sub> und (III.5.6)<sub>3</sub> auf homogene Randspannungen. Das Variationsfunktional mit Strafterm wird nach analogem Schema analysiert. Hierzu wird der Strafterm in der allgemeinen Form  $|\mathcal{B}| \cdot \bar{p}(\varphi, \bar{F}) = \int_{\partial\mathcal{B}} \mathcal{P}(\varphi, \bar{F}) dA$  angenommen.

**Box 5:** Variationsformulierung für Mikro-Makro-Übergänge nach [105].

### Mikro-Makro-Homogenitätsbedingung als Lagrange-Funktional

$$\bar{W}(\bar{F}) = \inf_{\varphi \in \mathcal{H}^1(\mathcal{B})} \sup_{\Lambda \in \mathcal{H}^0(\mathcal{B})} \{\bar{w}(\varphi) - \bar{c}(\varphi, \Lambda, \bar{F})\}$$

beinhaltet energetische Minimierung des homogenisierten Spannungspotentials

$$\bar{w}(\varphi) = \frac{1}{|\mathcal{B}|} \int_{\mathcal{B}} W(\varphi; X) dV$$

in einem typischen Zeitschritt  $[t_n, t_{n+1}] \in \mathcal{R}_+$  unter Berücksichtigung linearer Verschiebungen (D), periodischer Verschiebungen (P) oder homogener Spannungen (S) auf dem Rand  $\partial\mathcal{B}$  der Mikrostruktur  $\mathcal{B}$ :

$$(D) \quad \bar{c}(\varphi, \Lambda, \bar{F}) = \frac{1}{|\mathcal{B}|} \int_{\partial\mathcal{B}} \Lambda \cdot (\varphi - \bar{F}X) dA$$

$$(P) \quad \bar{c}(\varphi, \Lambda, \bar{F}) = \frac{1}{|\mathcal{B}|} \int_{\partial\mathcal{B}^+} \Lambda \cdot (\llbracket \varphi \rrbracket - \bar{F} \llbracket X \rrbracket) dA$$

$$(S) \quad \bar{c}(\varphi, \Lambda, \bar{F}) = \frac{1}{|\mathcal{B}|} \int_{\partial\mathcal{B}} (\varphi - \bar{F}X) dA \cdot \Lambda$$

### Mikro-Makro-Homogenitätsbedingung als Variationsfunktional mit Strafterm

$$\bar{W}(\bar{F}) = \inf_{\varphi \in \mathcal{H}^1(\mathcal{B})} \{\bar{w}(\varphi) - \frac{1}{2} \eta \bar{p}(\varphi, \bar{F})\} \quad , \quad \eta \in \mathcal{R}_+$$

beinhaltet energetische Minimierung des homogenisierten Spannungspotentials

$$\bar{w}(\varphi) = \frac{1}{|\mathcal{B}|} \int_{\mathcal{B}} W(\varphi; X) dV$$

in einem typischen Zeitschritt  $[t_n, t_{n+1}] \in \mathcal{R}_+$  unter Berücksichtigung linearer Verschiebungen (D), periodischer Verschiebungen (P) oder homogener Spannungen (S) auf dem Rand  $\partial\mathcal{B}$  der Mikrostruktur  $\mathcal{B}$ :

$$(D) \quad \bar{p}(\varphi, \bar{F}) = \frac{1}{|\mathcal{B}|} \int_{\partial\mathcal{B}} |\varphi - \bar{F}X|^2 dA$$

$$(P) \quad \bar{p}(\varphi, \bar{F}) = \frac{1}{|\mathcal{B}|} \int_{\partial\mathcal{B}^+} \|\llbracket \varphi \rrbracket - \bar{F} \llbracket X \rrbracket\|^2 dA$$

$$(S) \quad \bar{p}(\varphi, \bar{F}) = \frac{1}{|\mathcal{B}|} \left| \int_{\partial\mathcal{B}} \varphi \otimes N dA - \bar{F} \right|^2$$

Erste Variation der Mikro-Makro-Homogenitätsbedingung bezüglich den Variablen  $\{\varphi, \bar{F}\}$  ergibt zusammen mit dem Gaußschen Integralsatz

$$\begin{aligned} \delta \bar{W} = \delta \bar{F} : \bar{P} &\doteq \frac{1}{|\mathcal{B}|} \int_{\mathcal{B}} \delta \mathbf{F} : W_{,F} dV - \frac{\eta}{2|\mathcal{B}|} \int_{\partial\mathcal{B}} (\delta \varphi \mathcal{P}_{,\varphi} + \delta \bar{F} : \mathcal{P}_{,\bar{F}}) dA \\ &= - \frac{1}{|\mathcal{B}|} \int_{\mathcal{B}} \delta \varphi \text{DIV}[W_{,F}] dV + \frac{1}{|\mathcal{B}|} \int_{\partial\mathcal{B}} \delta \varphi (W_{,F} N - \frac{1}{2} \eta \mathcal{P}_{,\varphi}) dA \\ &\quad - \delta \bar{F} : \frac{\eta}{2|\mathcal{B}|} \int_{\partial\mathcal{B}} \mathcal{P}_{,\bar{F}} dA \end{aligned} \quad (\text{III.5.7})$$

Bei beliebiger Variation  $\{\delta\boldsymbol{\varphi}, \delta\bar{\mathbf{F}}\} \neq \{\mathbf{0}, \mathbf{0}\}$  extrahiert man daraus die Feldgleichungen

$$\text{DIV}[\mathbf{P}] = \mathbf{0} \text{ in } \mathcal{B} \quad , \quad \mathbf{P}\mathbf{N} = \frac{1}{2} \eta \mathcal{P}_{,\varphi} \text{ auf } \partial\mathcal{B} \quad (\text{III.5.8})$$

mit  $\mathbf{P} = W_{,\mathbf{F}}$  und als effektive 1. P.-K.-Spannungen

$$\bar{\mathbf{P}} = -\frac{\eta}{2|\mathcal{B}|} \int_{\partial\mathcal{B}} \mathcal{P}_{,\bar{\mathbf{F}}} dA \quad (\text{III.5.9})$$

In Bezug auf lineare Verschiebungen (D), periodische Verschiebungen (P) und homogene Spannungen (S) auf dem Rand  $\partial\mathcal{B}$  der Mikrostruktur ergeben sich für (III.5.8)<sub>2</sub> die Darstellungen

$$\left. \begin{array}{l} \text{(D)} \quad \mathbf{P}\mathbf{N} = \eta(\boldsymbol{\varphi} - \bar{\mathbf{F}}\mathbf{X}) \quad \text{auf } \partial\mathcal{B} \\ \text{(P)} \quad \mathbf{P}^+\mathbf{N}^+ = \eta(\llbracket\boldsymbol{\varphi}\rrbracket - \bar{\mathbf{F}}\llbracket\mathbf{X}\rrbracket) = -\mathbf{P}^-\mathbf{N}^- \text{ auf } \partial\mathcal{B}^+ \\ \text{(S)} \quad \mathbf{P}\mathbf{N} = \eta\left(\frac{1}{|\mathcal{B}|} \int_{\partial\mathcal{B}} \boldsymbol{\varphi} \otimes \mathbf{N} dA - \bar{\mathbf{F}}\right)\mathbf{N} \text{ auf } \partial\mathcal{B} \end{array} \right\} \quad (\text{III.5.10})$$

und für (III.5.9)

$$\left. \begin{array}{l} \text{(D)} \quad \bar{\mathbf{P}} = \frac{1}{|\mathcal{B}|} \int_{\partial\mathcal{B}} \mathbf{P}\mathbf{N} \otimes \mathbf{X} dA \\ \text{(P)} \quad \bar{\mathbf{P}} = \frac{1}{|\mathcal{B}|} \int_{\partial\mathcal{B}^+} \mathbf{P}^+\mathbf{N}^+ \otimes \llbracket\mathbf{X}\rrbracket dA \\ \text{(S)} \quad \bar{\mathbf{P}} = \eta\left(\frac{1}{|\mathcal{B}|} \int_{\partial\mathcal{B}} \boldsymbol{\varphi} \otimes \mathbf{N} dA - \bar{\mathbf{F}}\right) \end{array} \right\} \quad (\text{III.5.11})$$

Die geometrischen Randbedingungen (III.1.34) sind für  $\bar{w}, \bar{p} < \infty$  im Grenzübergang  $\eta \rightarrow \infty$  der Mikro-Makro-Homogenitätsbedingung automatisch erfüllt. Ferner sind die Darstellungen (III.5.11)<sub>1,2</sub> und (III.1.12) effektiver Spannungen konsistent. Aus einem Koeffizientenvergleich von (III.5.10)<sub>3</sub> mit (III.5.11)<sub>3</sub> schließt man auf homogene Spannungen auf dem Rand der Mikrostruktur. Insgesamt ist so der Nachweis erbracht, daß die Variationsprinzipien in Box 5 das mikroskopische Randwertproblem und die effektive Spannungsantwort richtig abbilden.

### 5.1.2. Diskrete Variationsformulierung mit Lagrange-Nebenbedingung

Der Skalenübergang beinhaltet eine Gleichgewichtssiteration und die Berechnung effektiver Spannungen  $\bar{\mathbf{P}}$  und Tangentenmoduli  $\bar{\mathbb{C}}$  im Gleichgewichtszustand der Mikrostruktur. Ziel ist eine vollständig diskrete algorithmische Konzeption von Skalenübergängen. Die Mikro-Makro-Homogenitätsbedingung wird hierzu basierend auf einer Finite Elementdiskretisierung von feinskaligen Verschiebungen und Deformationen als Lagrange-Variationsfunktional formuliert und ausgewertet. Die Finite Elementdiskretisierung ist nach dem Vorbild von Abschnitt 2.5.2 des Kapitels II durchzuführen, wobei Tensor- durch Matrixnotation zu ersetzen ist. Komponenten von Tensoren zweiter Stufe mit einem Indexpaar sind einer Matrixkomponente mit nur einem Index gemäß  $(1, 1) \rightarrow 1$ ,  $(2, 2) \rightarrow 2$ ,  $(3, 3) \rightarrow 3$ ,  $(2, 3) \rightarrow 4$ ,  $(3, 2) \rightarrow 5$ ,  $(1, 3) \rightarrow 6$ ,  $(3, 1) \rightarrow 7$ ,  $(1, 2) \rightarrow 8$ ,  $(2, 1) \rightarrow 9$  zuzuordnen. Auf diese Weise erhält man beispielsweise die Vektoren  $[\mathbf{F}] := [F_{11}, F_{22}, F_{33}, F_{23}, F_{32}, F_{13}, F_{31}, F_{12}, F_{21}]^T$  und  $[\mathbf{P}] := [P_{11}, P_{22}, P_{33}, P_{23}, P_{32}, P_{13}, P_{31}, P_{12}, P_{21}]^T$  des Deformationsgradienten und der 1. P.-K.-Spannungen. Die Minimierungsaufgabe (III.5.1) wird in der diskreten Form

$$\bar{W}^h(\bar{\mathbf{F}}) = \inf_{\mathbf{d} \in \mathcal{W}(\bar{\mathbf{F}})} \bar{w}^h(\mathbf{d}) \quad \text{mit} \quad \bar{w}^h(\mathbf{d}) = \frac{1}{|\mathcal{B}|} \sum_{e=1}^{n_{ele}} \int_{\mathcal{B}^e} W^h(\mathbf{B}\mathbf{d}^e) dV \quad (\text{III.5.12})$$

**Box 6:** Diskrete Formulierung der Randbedingungen nach [105].

Auf dem Rand  $\partial\mathcal{B}$  der Mikrostruktur  $\mathcal{B}$  definierte lineare Verschiebungen (D), periodische Verschiebungen (P) oder homogene Spannungen (S)

$$(D) \quad \boldsymbol{\varphi} - \bar{\mathbf{F}}\mathbf{X} = \mathbf{0} \quad \text{auf } \partial\mathcal{B}$$

$$(P) \quad \llbracket \boldsymbol{\varphi} \rrbracket - \bar{\mathbf{F}}\llbracket \mathbf{X} \rrbracket = \mathbf{0} \quad \text{auf } \partial\mathcal{B}^+$$

$$(S) \quad \frac{1}{|\mathcal{B}|} \int_{\partial\mathcal{B}} \boldsymbol{\varphi} \otimes \mathbf{N} \, dA - \bar{\mathbf{F}} = \mathbf{0} \quad \text{auf } \partial\mathcal{B}$$

sind für  $N_b$  Randfreiheitsgrade  $\mathbf{d}_b \in \mathcal{R}^{N_b}$  in der Form

$$\mathbf{S}_1 \mathbf{d}_b - \mathbf{S}_2(\bar{\mathbf{F}} - [\mathbf{1}]) = \mathbf{0} \quad \text{auf } \partial\mathcal{B}$$

diskret darzustellen in Verbindung mit den Oberflächendiskretisierungen

$$(D) \quad \left. \begin{array}{l} \mathbf{S}_1 = \mathbf{I} \\ \mathbf{S}_2 = [\mathbf{D}_1, \dots, \mathbf{D}_{N_b/d}]^T \end{array} \right\} \mathbf{S}_1 \in \mathcal{R}^{N_b \times N_b}, \mathbf{S}_2 \in \mathcal{R}^{N_b \times d^2}$$

$$\mathbf{D}_i = \begin{bmatrix} X_1 & 0 & X_2 & 0 \\ 0 & X_2 & 0 & X_1 \end{bmatrix}^T \in \mathcal{R}^{d^2 \times d} \quad \text{mit globalen Koordinaten des Randknotens } i$$

$$(P) \quad \left. \begin{array}{l} \mathbf{S}_1 = \mathbf{P} \\ \mathbf{S}_2 = \mathbf{P}[\mathbf{D}_1, \dots, \mathbf{D}_{N_b}]^T \end{array} \right\} \mathbf{S}_1 \in \mathcal{R}^{N_b \times N_b}, \mathbf{S}_2 \in \mathcal{R}^{N_b \times d^2}$$

$$P_{ij} = \begin{cases} +1 & , \text{ für } i = j \\ -1 & , \text{ bei miteinander gekoppelten Randfreiheitsgraden } i \neq j \\ 0 & , \text{ ansonsten} \end{cases}$$

$$(S) \quad \left. \begin{array}{l} \mathbf{S}_1 = \mathbf{S} \\ \mathbf{S}_2 = \mathbf{I} \end{array} \right\} \mathbf{S}_1 \in \mathcal{R}^{d^2 \times N_b}, \mathbf{S}_2 \in \mathcal{R}^{d^2 \times d^2}$$

$\mathbf{S}$  wird in den Abschnitten D.1 und D.2 des Anhangs spezifiziert

mit dem Vektor  $\mathbf{d} = \mathbf{A}_{e=1}^{n_{ele}} \mathbf{d}^e \in \mathcal{R}^{d \cdot N}$  der assemblierten Knotenverschiebungen angenommen. Die Anzahl der diskreten Verschiebungsfreiheitsgrade  $d \cdot N$  ergibt sich aus der Dimension  $d$  des Modellproblems und der Anzahl der Knoten  $N$ . In Verbindung mit den drei kanonischen Randbedingungen (III.1.34) wird das Minimierungsproblem als diskrete Sattelpunktaufgabe

$$\bar{W}^h(\bar{\mathbf{F}}) = \inf_{\mathbf{d} \in \mathcal{R}^{d \cdot N}} \sup_{\boldsymbol{\lambda} \in \mathcal{R}^M} \{ \bar{w}^h(\mathbf{d}) - \boldsymbol{\lambda}^T [\mathbf{S}_1 \mathbf{d}_b - \mathbf{S}_2([\bar{\mathbf{F}}] - [\mathbf{1}])] \} \quad (\text{III.5.13})$$

reformuliert, wobei die diskrete Lagrange-Nebenbedingung gemäß Box 6 zu entwickeln ist.  $[\mathbf{1}]$  ist die Matrixdarstellung des zweistufigen Einheitstensors. Bei kleinen Verzerrungen ist  $[\bar{\mathbf{F}}] - [\mathbf{1}]$  durch die Matrixdarstellung des effektiven Verzerrungstensors  $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$  zu ersetzen. Der Vektor  $\boldsymbol{\lambda}$  der Lagrange-Parameter hat bei linearer und periodischer Verschiebung des Randes  $\partial\mathcal{B}$  die Dimension  $M = N_b$  der Randfreiheitsgrade und bei homogenen Randspannungen die Dimension  $M = d^2$ . Im Kontext homogener Randspannungen wählt man für Oberflächenelemente und Finite Elemente der Gebietsdiskretisierung Ansatzfunktionen gleicher Ordnung, um Regularitätsverluste klein zu halten. Zur iterativen Lösung obigen Sattelpunktproblems mit Newtonbasierten Verfahren ist das zu optimierende Funktional bezüglich den aktuell iterierten Varia-

blen  $\{\bar{\mathbf{d}}, \bar{\lambda}\}$  zu linearisieren. Man führt hierzu den Kraftvektor  $\mathbf{f} := |\mathcal{B}| \cdot \bar{\mathbf{w}}_{,d}^h \in \mathcal{R}^{d \cdot N}$  und die Tangentenmatrix  $\mathbf{K} := |\mathcal{B}| \cdot \bar{\mathbf{w}}_{,dd}^h \in \mathcal{R}^{(d \cdot N) \times (d \cdot N)}$

$$\mathbf{f} = \bigwedge_{e=1}^{n_{ele}} \int_{\mathcal{B}^e} \mathbf{B}^T \partial_d W^h(\mathbf{B}\bar{\mathbf{d}}^e) dV \quad \text{und} \quad \mathbf{K} = \bigwedge_{e=1}^{n_{ele}} \int_{\mathcal{B}^e} \mathbf{B}^T \partial_{dd}^2 W^h(\mathbf{B}\bar{\mathbf{d}}^e) \mathbf{B} dV \quad (\text{III.5.14})$$

als erste und zweite Ableitung von (III.5.12)<sub>2</sub> nach den Knotenparametern  $\mathbf{d}$  ein. Die Einträge der Matrizen (III.5.14) werden unter Berücksichtigung der Zerlegung von Knoten  $\mathbf{X}_a \in \mathcal{B}$  und  $\mathbf{X}_b \in \partial\mathcal{B}$  in Gebiets- und Randknoten sortiert, sodaß

$$\mathbf{f} = \begin{bmatrix} \mathbf{f}_a \\ \mathbf{f}_b \end{bmatrix} \quad \text{und} \quad \mathbf{K} = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{aa} & \mathbf{K}_{ab} \\ \mathbf{K}_{ba} & \mathbf{K}_{bb} \end{bmatrix} \quad (\text{III.5.15})$$

Im Gleichgewicht der Mikrostruktur muß die erste Variation von (III.5.13) bei vorgegebener makroskopischer Deformation  $\bar{\mathbf{F}}$  verschwinden

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{0} &= \mathbf{f}_a \\ \mathbf{0} &= \mathbf{f}_b - |\mathcal{B}| \cdot \mathbf{S}_1^T \lambda \\ \mathbf{0} &= \mathbf{S}_1 \mathbf{d}_b - \mathbf{S}_2([\bar{\mathbf{F}}] - [\mathbf{1}]) \end{aligned} \right\} \quad (\text{III.5.16})$$

Als Residuenvektor definiert man  $\mathbf{r} = [\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b, \mathbf{r}_\lambda]^T$  mit

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{r}_a &:= \mathbf{f}_a \\ \mathbf{r}_b &:= \mathbf{f}_b - |\mathcal{B}| \cdot \mathbf{S}_1^T \lambda \\ \mathbf{r}_\lambda &:= \mathbf{S}_1 \mathbf{d}_b - \mathbf{S}_2([\bar{\mathbf{F}}] - [\mathbf{1}]) \end{aligned} \right\} \quad (\text{III.5.17})$$

Die iterative Lösung von (III.5.16) erfolgt in einer Sequenz von Linearisierungen an der jeweils aktuell iterierten Stelle  $\{\bar{\mathbf{d}}_a, \bar{\mathbf{d}}_b, \bar{\lambda}\}$

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{0} &= \mathbf{r}_a + \mathbf{K}_{aa} \Delta \mathbf{d}_a + \mathbf{K}_{ab} \Delta \mathbf{d}_b \\ \mathbf{0} &= \mathbf{r}_b + \mathbf{K}_{ba} \Delta \mathbf{d}_a + \mathbf{K}_{bb} \Delta \mathbf{d}_b - |\mathcal{B}| \cdot \mathbf{S}_1^T \Delta \lambda \\ \mathbf{0} &= \mathbf{r}_\lambda + \mathbf{S}_1 \Delta \mathbf{d}_b \end{aligned} \right\} \quad (\text{III.5.18})$$

und hat eine inkrementelle Aufdatierung der Knotenparameter

$$\mathbf{d} = \bar{\mathbf{d}} + \Delta \mathbf{d} \quad \text{und} \quad \lambda = \bar{\lambda} + \Delta \lambda \quad (\text{III.5.19})$$

zum Ziel. Zur Berechnung der inkrementellen Knotenwerte sind die Gleichungen in (III.5.18) in der angegebenen Reihenfolge nach  $\{\Delta \mathbf{d}_a, \Delta \mathbf{d}_b, \Delta \lambda\}$  aufzulösen. Die Iteration wird abgebrochen, sobald die Euklidische Norm des Residuums  $|\mathbf{r}|$  eine gegebene kleine Toleranz  $\text{tol}$  unterschreitet. Die Gleichgewichtssiteration wird in den Schritten 1–6 der Box 7 in einer konsequent algorithmischen Vorgehensweise dargestellt. Zur Ermittlung effektiver Spannungen und Tangentenmoduli wird die Sensitivität von  $\bar{\mathbf{W}}^h$  bezüglich einer infinitesimal kleinen Störung  $\Delta \bar{\mathbf{F}}$  des Gleichgewichtszustands untersucht. Erste Variation von (III.5.13) bezüglich  $\bar{\mathbf{F}}$  liefert

$$\delta \bar{\mathbf{W}}^h = [\delta \bar{\mathbf{F}}]^T [\bar{\mathbf{P}}] \doteq [\delta \bar{\mathbf{F}}]^T \mathbf{S}_2^T \lambda \quad (\text{III.5.20})$$

Koeffizientenvergleich ergibt effektive 1. P.-K.-Spannungen

$$[\bar{\mathbf{P}}] = \bar{\mathbf{W}}_{,\bar{\mathbf{F}}}^h = \mathbf{S}_2^T \lambda \quad (\text{III.5.21})$$



**Box 7:** Algorithmus für deformationsgetriebene Mikro-Makro-Übergänge nach [105] basierend auf einem diskreten Lagrange-Funktional.

- 1.) Setze als Startwerte:  $\mathbf{d} = \mathbf{0}$ ,  $\lambda = 0$
- 2.) Bestimme Kraftvektor  $\mathbf{f} = |\mathcal{B}| \cdot \partial_d \bar{w}^h$  und Tangente  $\mathbf{K} = |\mathcal{B}| \cdot \partial_{dd}^2 \bar{w}^h$  der FE-diskretisierten Mikrostruktur  $\mathcal{B}$  unter Berücksichtigung der Zerlegung  $X_a \in \mathcal{B}$  und  $X_b \in \partial \mathcal{B}$ 

$$\mathbf{f} = \begin{bmatrix} \mathbf{f}_a \\ \mathbf{f}_b \end{bmatrix} \quad \text{und} \quad \mathbf{K} = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{aa} & \mathbf{K}_{ab} \\ \mathbf{K}_{ba} & \mathbf{K}_{bb} \end{bmatrix}$$
- 3.) Berechne Residuum  $\mathbf{r} = [\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b, \mathbf{r}_\lambda]^T$  mit
$$\begin{aligned} \mathbf{r}_a &= \mathbf{f}_a \\ \mathbf{r}_b &= \mathbf{f}_b - |\mathcal{B}| \cdot \mathbf{S}_1^T \lambda \\ \mathbf{r}_\lambda &= \mathbf{S}_1 \mathbf{d}_b - \mathbf{S}_2([\bar{\mathbf{F}}] - [\mathbf{1}]) \end{aligned}$$
- 4.) Berechne kondensierte Matrizen
$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{r}}_b &= \mathbf{r}_b - \mathbf{K}_{ba} \mathbf{K}_{aa}^{-1} \mathbf{r}_a & \tilde{\mathbf{K}}_{bb} &= \mathbf{K}_{bb} - \mathbf{K}_{ba} \mathbf{K}_{aa}^{-1} \mathbf{K}_{ab} \\ \tilde{\mathbf{r}}_\lambda &= \mathbf{r}_\lambda - \mathbf{S}_1 \tilde{\mathbf{K}}_{bb}^{-1} \tilde{\mathbf{r}}_b & \tilde{\mathbf{K}} &= \frac{1}{|\mathcal{B}|} (\mathbf{S}_1 \tilde{\mathbf{K}}_{bb}^{-1} \mathbf{S}_1^T)^{-1} \end{aligned}$$
- 5.) Berechne Inkremente
$$\begin{aligned} \Delta \mathbf{d}_a &= -\mathbf{K}_{aa}^{-1} (\mathbf{K}_{ab} \Delta \mathbf{d}_b + \mathbf{r}_a) \\ \Delta \mathbf{d}_b &= \tilde{\mathbf{K}}_{bb}^{-1} (|\mathcal{B}| \cdot \mathbf{S}_1^T \Delta \lambda - \tilde{\mathbf{r}}_b) \\ \Delta \lambda &= -\tilde{\mathbf{K}} \tilde{\mathbf{r}}_\lambda \end{aligned}$$

und aktualisiere Knotenparameter  $\mathbf{d} := \mathbf{d} + \Delta \mathbf{d}$  und  $\lambda := \lambda + \Delta \lambda$
- 6.) Falls  $|\mathbf{r}| > \text{tol}$  gehe zu 2
- 7.) Berechne effektive Spannungen und Tangentenmoduli
$$[\bar{\mathbf{P}}] = \mathbf{S}_2^T \lambda \quad \text{und} \quad [\bar{\mathbf{C}}] = \mathbf{S}_2^T \tilde{\mathbf{K}} \mathbf{S}_2$$

Effektive Tangentenmoduli in Matrixnotation  $[\bar{\mathbf{C}}]$  erhält man basierend auf der inkrementellen Beziehung  $\Delta(\delta \bar{W}^h) = [\delta \bar{\mathbf{F}}]^T [\bar{\mathbf{C}}] [\Delta \bar{\mathbf{F}}]$ , aus der sich die Abhängigkeiten

$$\left. \begin{aligned} \Delta \mathbf{d}_a &= -\mathbf{K}_{aa}^{-1} \mathbf{K}_{ab} \Delta \mathbf{d}_b \\ \Delta \mathbf{d}_b &= |\mathcal{B}| \cdot \tilde{\mathbf{K}}_{bb}^{-1} \mathbf{S}_1^T \Delta \lambda \\ \Delta \lambda &= \tilde{\mathbf{K}} \mathbf{S}_2 [\Delta \bar{\mathbf{F}}] \end{aligned} \right\} \quad (\text{III.5.22})$$

mit den kondensierten Matrizen  $\tilde{\mathbf{K}}_{bb} = \mathbf{K}_{bb} - \mathbf{K}_{ba} \mathbf{K}_{aa}^{-1} \mathbf{K}_{ab}$  und  $\tilde{\mathbf{K}} = \frac{1}{|\mathcal{B}|} (\mathbf{S}_1 \tilde{\mathbf{K}}_{bb}^{-1} \mathbf{S}_1^T)^{-1}$  sowie

$$[\bar{\mathbf{C}}] [\Delta \bar{\mathbf{F}}] = \mathbf{S}_2^T \Delta \lambda \quad (\text{III.5.23})$$

ableiten lassen. Zusammen mit (III.5.22)<sub>3</sub> ergibt sich aus der letzten Gleichung

$$[\bar{\mathbf{C}}] = [\partial_{\bar{\mathbf{F}}} \bar{\mathbf{P}}] = \mathbf{S}_2^T \tilde{\mathbf{K}} \mathbf{S}_2 \quad (\text{III.5.24})$$

Mit der Berechnung effektiver Spannungen (III.5.21) und Tangentenmoduli (III.5.24) ist der Mikro-Makro-Übergang durch Schritt 7 in Box 7 nun vollständig beschrieben.

### 5.1.3. Diskrete Variationsformulierung mit Strafterm

Der Skalenübergang wird analog zum vorangehenden Subabschnitt durchgeführt. Effektive Spannungen  $\bar{\mathbf{P}}$  und Tangentenmoduli  $\bar{\mathbf{C}}$  werden nach abgeschlossener Gleichgewichtsiteration berechnet. Die Mikro-Makro-Homogenitätsbedingung wird hierzu basierend auf einer Finite Elementdiskretisierung von feinskaligen Verschiebungen und Deformationen als Minimierungsproblem (III.5.12) mit Strafterm formuliert und ausgewertet. In Verbindung mit den drei kanonischen Randbedingungen (III.1.34) wird dieses Minimierungsproblem in der Form

$$\bar{W}^h(\bar{\mathbf{F}}) = \inf_{\mathbf{d} \in \mathcal{B}^{d,N}} \left\{ \bar{w}^h(\mathbf{d}) - \frac{\eta}{2|\mathcal{B}|} \left| \mathbf{S}_1 \mathbf{d}_b - \mathbf{S}_2([\bar{\mathbf{F}}] - [\mathbf{1}]) \right|^2 \right\} \quad (\text{III.5.25})$$

angenommen, wobei der diskrete Strafterm mit Hilfe von Box 6 zu entwickeln ist.  $[\mathbf{1}]$  ist die Matrixdarstellung des zweistufigen Einheitstensors. Bei kleinen Verzerrungen ist  $[\bar{\mathbf{F}}] - [\mathbf{1}]$  durch die Matrixdarstellung des effektiven Verzerrungstensors  $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$  zu ersetzen. Im Kontext homogener Randspannungen wählt man für Oberflächenelemente und Finite Elemente der Gebietsdiskretisierung Ansatzfunktionen gleicher Ordnung, um möglichst geringe Regularitätsverluste zu erhalten. Für den iterativen Lösungsprozeß mit Newton-basierten Verfahren ist das zu optimierende Funktional in (III.5.25) bezüglich den aktuell iterierten Knotenverschiebungen  $\bar{\mathbf{d}}$  zu linearisieren. Man führt hierzu den Kraftvektor (III.5.14)<sub>1</sub> und die Tangentenmatrix (III.5.14)<sub>2</sub> ein, deren Einträge durch die Zerlegung  $\mathbf{X}_a \in \mathcal{B}$  und  $\mathbf{X}_b \in \partial\mathcal{B}$  entsprechend (III.5.15) sortiert werden. Im Gleichgewicht der Mikrostruktur muß die erste Variation von (III.5.25) bei vorgegebener makroskopischer Deformation  $\bar{\mathbf{F}}$  verschwinden, sodaß

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{0} &= \mathbf{f}_a \\ \mathbf{0} &= \mathbf{f}_b - \eta \mathbf{S}_1^T [\mathbf{S}_1 \mathbf{d}_b - \mathbf{S}_2([\bar{\mathbf{F}}] - [\mathbf{1}])] \end{aligned} \right\} \quad (\text{III.5.26})$$

Als Residuenvektor definiert man  $\mathbf{r} = [\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b]^T$  mit

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{r}_a &:= \mathbf{f}_a \\ \mathbf{r}_b &:= \mathbf{f}_b - \eta \mathbf{S}_1^T [\mathbf{S}_1 \mathbf{d}_b - \mathbf{S}_2([\bar{\mathbf{F}}] - [\mathbf{1}])] \end{aligned} \right\} \quad (\text{III.5.27})$$

Die iterative Lösung von (III.5.26) erfolgt in einer Sequenz von Linearisierungen an der jeweils aktuell iterierten Stelle  $\{\bar{\mathbf{d}}_a, \bar{\mathbf{d}}_b\}$

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{0} &= \mathbf{r}_a + \mathbf{K}_{aa} \Delta \mathbf{d}_a + \mathbf{K}_{ab} \Delta \mathbf{d}_b \\ \mathbf{0} &= \mathbf{r}_b + \mathbf{K}_{ba} \Delta \mathbf{d}_a + (\mathbf{K}_{bb} - \eta \mathbf{S}_1^T \mathbf{S}_1) \Delta \mathbf{d}_b \end{aligned} \right\} \quad (\text{III.5.28})$$

und hat eine inkrementelle Aufdatierung der Knotenverschiebungen

$$\mathbf{d} = \bar{\mathbf{d}} + \Delta \mathbf{d} \quad (\text{III.5.29})$$

zum Ziel. Zur Berechnung der inkrementellen Knotenverschiebungen sind die Gleichungen in (III.5.28) in der angegebenen Reihenfolge nach  $\{\Delta \mathbf{d}_a, \Delta \mathbf{d}_b\}$  aufzulösen. Die Gleichgewichtsiteration wird in den Schritten 1–6 der Box 8 algorithmisch aufbereitet. Sie ist abgeschlossen, wenn die Euklidische Norm des Residuums  $|\mathbf{r}|$  eine gegebene kleine Toleranz  $\text{tol}$  unterschreitet. Eine Sensitivitätsanalyse von  $\bar{W}^h$  bezüglich einer infinitesimal kleinen Störung  $\Delta \bar{\mathbf{F}}$  des Gleichgewichtszustands liefert effektive Spannungen und Tangentenmoduli. Durch erste Variation von (III.5.25) bezüglich  $\bar{\mathbf{F}}$  erhält man den Zusammenhang

$$\delta \bar{W}^h = [\delta \bar{\mathbf{F}}]^T [\bar{\mathbf{P}}] \doteq [\delta \bar{\mathbf{F}}]^T \frac{\eta}{|\mathcal{B}|} \mathbf{S}_2^T [\mathbf{S}_1 \mathbf{d}_b - \mathbf{S}_2([\bar{\mathbf{F}}] - [\mathbf{1}])] \quad (\text{III.5.30})$$

**Box 8:** Algorithmus für deformationsgetriebene Mikro-Makro-Übergänge nach [105] basierend auf einer diskreten Variationsformulierung mit Strafterm.

1.) Setze als Startwerte:  $\mathbf{d} = \mathbf{0}$

2.) Bestimme Kraftvektor  $\mathbf{f} = |\mathcal{B}| \cdot \partial_a \bar{w}^h$  und Tangente  $\mathbf{K} = |\mathcal{B}| \cdot \partial_{aa}^2 \bar{w}^h$  der FE-diskretisierten Mikrostruktur  $\mathcal{B}$  unter Berücksichtigung der Zerlegung  $\mathbf{X}_a \in \mathcal{B}$  und  $\mathbf{X}_b \in \partial \mathcal{B}$

$$\mathbf{f} = \begin{bmatrix} \mathbf{f}_a \\ \mathbf{f}_b \end{bmatrix} \quad \text{und} \quad \mathbf{K} = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{aa} & \mathbf{K}_{ab} \\ \mathbf{K}_{ba} & \mathbf{K}_{bb} \end{bmatrix}$$

3.) Berechne Residuum  $\mathbf{r} = [\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b]^T$  mit

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_a &= \mathbf{f}_a \\ \mathbf{r}_b &= \mathbf{f}_b - \eta \mathbf{S}_1^T [\mathbf{S}_1 \mathbf{d}_b - \mathbf{S}_2([\bar{\mathbf{F}}] - [\mathbf{1}])] \end{aligned}$$

4.) Berechne kondensierte Matrizen

$$\tilde{\mathbf{r}}_b = \mathbf{r}_b - \mathbf{K}_{ba} \mathbf{K}_{aa}^{-1} \mathbf{r}_a \quad \tilde{\mathbf{K}}_{bb} = \mathbf{K}_{bb} - \eta \mathbf{S}_1^T \mathbf{S}_1 - \mathbf{K}_{ba} \mathbf{K}_{aa}^{-1} \mathbf{K}_{ab}$$

5.) Berechne Inkremente

$$\begin{aligned} \Delta \mathbf{d}_a &= -\mathbf{K}_{aa}^{-1} (\mathbf{K}_{ab} \Delta \mathbf{d}_b + \mathbf{r}_a) \\ \Delta \mathbf{d}_b &= -\tilde{\mathbf{K}}_{bb}^{-1} \tilde{\mathbf{r}}_b \end{aligned}$$

und aktualisiere Knotenparameter  $\mathbf{d} := \mathbf{d} + \Delta \mathbf{d}$

6.) Falls  $|\mathbf{r}| > \text{tol}$  gehe zu 2

7.) Berechne effektive Spannungen und Tangentenmoduli

$$\begin{aligned} [\bar{\mathbf{P}}] &= \eta \frac{1}{|\mathcal{B}|} \mathbf{S}_2^T [\mathbf{S}_1 \mathbf{d}_b - \mathbf{S}_2([\bar{\mathbf{F}}] - [\mathbf{1}])] \\ [\bar{\mathbf{C}}] &= -\eta \frac{1}{|\mathcal{B}|} (\eta \mathbf{S}_2^T \mathbf{S}_1 \tilde{\mathbf{K}}_{bb}^{-1} \mathbf{S}_1^T \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_2^T \mathbf{S}_2) \end{aligned}$$

aus dem man als effektive 1. P.-K.-Spannungen

$$[\bar{\mathbf{P}}] = \bar{w}_{,\bar{\mathbf{F}}}^h = \frac{\eta}{|\mathcal{B}|} \mathbf{S}_2^T [\mathbf{S}_1 \mathbf{d}_b - \mathbf{S}_2([\bar{\mathbf{F}}] - [\mathbf{1}])] \quad (\text{III.5.31})$$

extrahiert. Effektive Tangentenmoduli in Matrixnotation  $[\bar{\mathbf{C}}]$  erhält man basierend auf  $\Delta(\delta \bar{w}^h) = [\delta \bar{\mathbf{F}}]^T [\bar{\mathbf{C}}] [\Delta \bar{\mathbf{F}}]$ . Daraus ergeben sich die Abhängigkeiten

$$\left. \begin{aligned} \Delta \mathbf{d}_a &= -\mathbf{K}_{aa}^{-1} \mathbf{K}_{ab} \Delta \mathbf{d}_b \\ \Delta \mathbf{d}_b &= -\eta \tilde{\mathbf{K}}_{bb}^{-1} \mathbf{S}_1^T \mathbf{S}_2 [\Delta \bar{\mathbf{F}}] \end{aligned} \right\} \quad (\text{III.5.32})$$

mit der kondensierten Matrix  $\tilde{\mathbf{K}}_{bb} = \mathbf{K}_{bb} - \eta \mathbf{S}_1^T \mathbf{S}_1 - \mathbf{K}_{ba} \mathbf{K}_{aa}^{-1} \mathbf{K}_{ab}$  sowie

$$[\bar{\mathbf{C}}] [\Delta \bar{\mathbf{F}}] = \frac{\eta}{|\mathcal{B}|} \mathbf{S}_2^T (\mathbf{S}_1 \Delta \mathbf{d}_b - \mathbf{S}_2 [\Delta \bar{\mathbf{F}}]) \quad (\text{III.5.33})$$

Zusammen mit (III.5.32)<sub>2</sub> erhält man aus der letzten Gleichung

$$[\bar{\mathbf{C}}] = [\partial_{\bar{\mathbf{F}}} \bar{\mathbf{P}}] = -\frac{\eta}{|\mathcal{B}|} (\eta \mathbf{S}_2^T \mathbf{S}_1 \tilde{\mathbf{K}}_{bb}^{-1} \mathbf{S}_1^T \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_2^T \mathbf{S}_2) \quad (\text{III.5.34})$$

Effektive Spannungen (III.5.31) und Tangentenmoduli (III.5.34) schließen den in Box 8 dargestellten Mikro-Makro-Übergang in Schritt 7 ab.

## 5.2. Spannungsgetriebene Homogenisierung

Im Kontext einer mit  $\bar{\mathbf{P}}$  spannungsgetriebenen Homogenisierungsanalyse der Mikrostruktur erscheint die zugehörige Mikro-Makro-Homogenitätsbedingung gegenüber (III.5.1) nur geringfügig modifiziert. Ausgehend von einer allgemeinen Darstellung wird diese in Bezug auf die in Box 6 genannten diskreten Randbedingungen spezifiziert und als Lagrange-Variationsfunktional oder als Variationsfunktional mit Strafterm diskret formuliert und ausgewertet.

### 5.2.1. Kontinuierliche Mikro-Makro-Variationsformulierung

Als diskrete Mikro-Makro-Homogenitätsbedingung ist eine Darstellung anzustreben, die für eine standardmäßig verschiebungsgesteuerte Finite Elementmethode zugänglich ist. Es sei  $W$  ein an der Stelle  $X \in \mathcal{B}$  im finiten Zeitintervall  $t \in [t_n, t_{n+1}] \subset \mathcal{R}_+$  gespeichertes inkrementelles Potential. Als Mikro-Makro-Homogenitätsbedingung betrachtet man

$$\bar{W}^*(\bar{\mathbf{P}}) = \sup_{\bar{\mathbf{F}} \in \mathcal{GL}(3)} \{ \bar{\mathbf{P}} : \bar{\mathbf{F}} - \bar{W}(\bar{\mathbf{F}}) \} \quad (\text{III.5.35})$$

Sie definiert das duale effektive Potential  $\bar{W}^*$  als Legendre-Fenchel-Transformierte von (III.5.1). Gegenüber (III.5.1) ist zusätzlich bezüglich der makroskopischen Deformation  $\bar{\mathbf{F}}$  zu optimieren. Eine Analyse der ersten Variation von (III.5.35) ergibt, daß (III.5.1) und (III.5.35) im Gleichgewicht der Mikrostruktur identische Feldgleichungen und Randbedingungen erfüllen. Demzufolge ist zu erwarten, daß (III.5.35) das in Abschnitt 1.4.2 definierte mikroskopische Randwertproblem und die in Abschnitt 1.2.2 definierten effektiven Spannungen richtig wiedergibt. Als Lagrange-Funktional wird (III.5.35) wie in Abschnitt 5.1.1 mit einer Nebenbedingung der Form  $|\mathcal{B}| \cdot \bar{c}(\varphi, \Lambda, \bar{\mathbf{F}}) = \int_{\partial \mathcal{B}} C(\varphi, \Lambda, \bar{\mathbf{F}}) dA$  gekoppelt. Erste Variation bezüglich den Variablen  $\{\varphi, \Lambda, \bar{\mathbf{F}}, \bar{\mathbf{P}}\}$  ergibt unter Berücksichtigung des Gaußschen Integralsatzes

$$\begin{aligned} \delta \bar{W}^* &= \delta \bar{\mathbf{P}} : \bar{\mathbf{F}} \doteq \delta \bar{\mathbf{P}} : \bar{\mathbf{F}} + \delta \bar{\mathbf{F}} : \bar{\mathbf{P}} \\ &+ \frac{1}{|\mathcal{B}|} \int_{\mathcal{B}} \delta \varphi \operatorname{DIV}[W_{,F}] dV - \frac{1}{|\mathcal{B}|} \int_{\partial \mathcal{B}} \delta \varphi (W_{,F} \mathbf{N} - C_{,\varphi}) dA \\ &+ \frac{1}{|\mathcal{B}|} \int_{\partial \mathcal{B}} \delta \Lambda \cdot C_{,\Lambda} dA + \delta \bar{\mathbf{F}} : \frac{1}{|\mathcal{B}|} \int_{\partial \mathcal{B}} C_{,\bar{\mathbf{F}}} dA \end{aligned} \quad (\text{III.5.36})$$

Bei beliebiger Variation  $\{\delta \varphi, \delta \Lambda, \delta \bar{\mathbf{F}}, \delta \bar{\mathbf{P}}\} \neq \{\mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{0}\}$  extrahiert man daraus als Feldgleichungen (III.5.3) und als effektive 1. P.-K.-Spannungen (III.5.4). In Bezug auf die kanonischen Randbedingungen in Box 6 ergibt eine weitere Auswertung (III.5.5) und (III.5.6). Als Variationsfunktional mit Strafterm ist (III.5.35) analog zu Abschnitt 5.1.1 mit einem Strafterm der Form  $|\mathcal{B}| \cdot \bar{p}(\varphi, \bar{\mathbf{F}}) = \int_{\partial \mathcal{B}} \mathcal{P}(\varphi, \bar{\mathbf{F}}) dA$  zu verknüpfen. Erste Variation bezüglich den Variablen  $\{\varphi, \bar{\mathbf{F}}, \bar{\mathbf{P}}\}$  ergibt zusammen mit dem Gaußschen Integralsatz

$$\begin{aligned} \delta \bar{W}^* &= \delta \bar{\mathbf{P}} : \bar{\mathbf{F}} \doteq \delta \bar{\mathbf{P}} : \bar{\mathbf{F}} + \delta \bar{\mathbf{F}} : \bar{\mathbf{P}} + \frac{1}{|\mathcal{B}|} \int_{\mathcal{B}} \delta \varphi \operatorname{DIV}[W_{,F}] dV \\ &- \frac{1}{|\mathcal{B}|} \int_{\partial \mathcal{B}} \delta \varphi (W_{,F} \mathbf{N} - \frac{1}{2} \eta \mathcal{P}_{,\varphi}) dA + \delta \bar{\mathbf{F}} : \frac{\eta}{2|\mathcal{B}|} \int_{\partial \mathcal{B}} \mathcal{P}_{,\bar{\mathbf{F}}} dA \end{aligned} \quad (\text{III.5.37})$$

Bei beliebiger Variation  $\{\delta \varphi, \delta \bar{\mathbf{F}}, \delta \bar{\mathbf{P}}\} \neq \{\mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{0}\}$  extrahiert man daraus als Feldgleichungen (III.5.8) und als effektive 1. P.-K.-Spannungen (III.5.9). In Bezug auf die kanonischen Randbedingungen in Box 6 ergeben sich die Gleichungen (III.5.10) und (III.5.11). Insgesamt ist gezeigt, daß das duale Funktional (III.5.35) allen gewünschten Anforderungen genügt.

### 5.2.2. Diskrete Variationsformulierung mit Lagrange-Nebenbedingung

Die Funktionale (III.5.1) und (III.5.35) haben ähnliche Struktur. Gegenüber Abschnitt 5.1.2 werden daher nur wesentliche algorithmische Aspekte des diskreten Mikro-Makro-Übergangs angeführt. Die Mikro-Makro-Homogenitätsbedingung (III.5.35) wird in der diskreten Form

$$\bar{W}^{*h}(\bar{\mathbf{P}}) = \sup_{[\bar{\mathbf{F}}] \in \mathcal{R}^{d \times d}} \{[\bar{\mathbf{P}}]^T [\bar{\mathbf{F}}] - \inf_{\mathbf{d} \in \mathcal{W}(\bar{\mathbf{F}})} \bar{w}^h(\mathbf{d})\} \quad \text{mit} \quad \bar{w}^h(\mathbf{d}) = \frac{1}{|\mathcal{B}|} \sum_{e=1}^{n_{ele}} \int_{\mathcal{B}^e} W^h(\mathbf{B}\mathbf{d}^e) dV \quad (\text{III.5.38})$$

vorausgesetzt, die in Verbindung mit den drei kanonischen Randbedingungen (III.1.34) in der bewährten Darstellung

$$\bar{W}^{*h}(\bar{\mathbf{P}}) = \sup_{[\bar{\mathbf{F}}] \in \mathcal{R}^{d \times d}} \left\{ [\bar{\mathbf{P}}]^T [\bar{\mathbf{F}}] - \inf_{\mathbf{d} \in \mathcal{R}^{d \times N}} \sup_{\boldsymbol{\lambda} \in \mathcal{R}^M} \{ \bar{w}^h(\mathbf{d}) - \boldsymbol{\lambda}^T [\mathbf{S}_1 \mathbf{d}_b - \mathbf{S}_2([\bar{\mathbf{F}}] - [\mathbf{1}])] \} \right\} \quad (\text{III.5.39})$$

erscheint. Die diskrete Lagrange-Nebenbedingung ist gemäß Box 6 zu entwickeln. Zur iterativen Lösung mit Newton-basierten Verfahren ist das zu minimierende Funktional in (III.5.39) bezüglich den aktuell iterierten Variablen  $\{\bar{\mathbf{d}}, \bar{\boldsymbol{\lambda}}, \bar{\mathbf{F}}\}$  zu linearisieren. Man führt hierzu den Kraftvektor (III.5.14)<sub>1</sub> und die Tangentenmatrix (III.5.14)<sub>2</sub> ein. Im Gleichgewicht der Mikrostruktur muß die erste Variation von (III.5.39) bei vorgegebenen makroskopischen 1. P.-K.-Spannungen  $\bar{\mathbf{P}}$  verschwinden, sodaß unter Berücksichtigung der Zerlegung  $\mathbf{X}_a \in \mathcal{B}$  und  $\mathbf{X}_b \in \partial\mathcal{B}$

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{0} &= \mathbf{f}_a \\ \mathbf{0} &= \mathbf{f}_b - |\mathcal{B}| \cdot \mathbf{S}_1^T \boldsymbol{\lambda} \\ \mathbf{0} &= \mathbf{S}_1 \mathbf{d}_b - \mathbf{S}_2([\bar{\mathbf{F}}] - [\mathbf{1}]) \\ \mathbf{0} &= [\bar{\mathbf{P}}] - \mathbf{S}_2^T \boldsymbol{\lambda} \end{aligned} \right\} \quad (\text{III.5.40})$$

Als Residuenvektor definiert man  $\mathbf{r} = [\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b, \mathbf{r}_\lambda, \mathbf{r}_{\bar{\mathbf{F}}}]^T$  mit

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{r}_a &:= \mathbf{f}_a \\ \mathbf{r}_b &:= \mathbf{f}_b - |\mathcal{B}| \cdot \mathbf{S}_1^T \boldsymbol{\lambda} \\ \mathbf{r}_\lambda &:= \mathbf{S}_1 \mathbf{d}_b - \mathbf{S}_2([\bar{\mathbf{F}}] - [\mathbf{1}]) \\ \mathbf{r}_{\bar{\mathbf{F}}} &:= [\bar{\mathbf{P}}] - \mathbf{S}_2^T \boldsymbol{\lambda} \end{aligned} \right\} \quad (\text{III.5.41})$$

Die iterative Lösung von (III.5.40) erfolgt in einer Sequenz von Linearisierungen an der jeweils aktuell iterierten Stelle  $\{\bar{\mathbf{d}}_a, \bar{\mathbf{d}}_b, \bar{\boldsymbol{\lambda}}, \bar{\mathbf{F}}\}$

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{0} &= \mathbf{r}_a + \mathbf{K}_{aa} \Delta \mathbf{d}_a + \mathbf{K}_{ab} \Delta \mathbf{d}_b \\ \mathbf{0} &= \mathbf{r}_b + \mathbf{K}_{ba} \Delta \mathbf{d}_a + \mathbf{K}_{bb} \Delta \mathbf{d}_b - |\mathcal{B}| \cdot \mathbf{S}_1^T \Delta \boldsymbol{\lambda} \\ \mathbf{0} &= \mathbf{r}_\lambda + \mathbf{S}_1 \Delta \mathbf{d}_b - \mathbf{S}_2[\Delta \bar{\mathbf{F}}] \\ \mathbf{0} &= \mathbf{r}_{\bar{\mathbf{F}}} - \mathbf{S}_2^T \Delta \boldsymbol{\lambda} \end{aligned} \right\} \quad (\text{III.5.42})$$

und hat eine inkrementelle Aufdatierung der Knotenparameter und Deformationen

$$\mathbf{d} = \bar{\mathbf{d}} + \Delta \mathbf{d} \quad \text{und} \quad \boldsymbol{\lambda} = \bar{\boldsymbol{\lambda}} + \Delta \boldsymbol{\lambda} \quad \text{und} \quad \bar{\mathbf{F}} = \bar{\bar{\mathbf{F}}} + \Delta \bar{\mathbf{F}} \quad (\text{III.5.43})$$

zum Ziel. (III.5.40)–(III.5.42) sind für  $\Delta \bar{\mathbf{F}} = \mathbf{0}$  mit Ausnahme der jeweils letzten Gleichung identisch mit (III.5.16)–(III.5.18). Zur Berechnung der inkrementellen Knotenwerte sind die

**Box 9:** Algorithmus für spannungsgetriebene Mikro-Makro-Übergänge basierend auf einem diskreten dualen Lagrange-Funktional.

- 1.) Setze als Startwerte:  $\mathbf{d} = \mathbf{0}$ ,  $\boldsymbol{\lambda} = \mathbf{0}$ ,  $\bar{\mathbf{F}} = \mathbf{1}$
- 2.) Bestimme Kraftvektor  $\mathbf{f} = |\mathcal{B}| \cdot \partial_d \bar{w}^h$  und Tangente  $\mathbf{K} = |\mathcal{B}| \cdot \partial_{dd}^2 \bar{w}^h$  der FE-diskretisierten Mikrostruktur  $\mathcal{B}$  unter Berücksichtigung der Zerlegung  $\mathbf{X}_a \in \mathcal{B}$  und  $\mathbf{X}_b \in \partial\mathcal{B}$

$$\mathbf{f} = \begin{bmatrix} \mathbf{f}_a \\ \mathbf{f}_b \end{bmatrix} \quad \text{und} \quad \mathbf{K} = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{aa} & \mathbf{K}_{ab} \\ \mathbf{K}_{ba} & \mathbf{K}_{bb} \end{bmatrix}$$

- 3.) Berechne Residuum  $\mathbf{r} = [\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b, \mathbf{r}_\lambda, \mathbf{r}_{\bar{\mathbf{F}}}]^T$  mit

$$\mathbf{r}_a = \mathbf{f}_a$$

$$\mathbf{r}_b = \mathbf{f}_b - |\mathcal{B}| \cdot \mathbf{S}_1^T \boldsymbol{\lambda}$$

$$\mathbf{r}_\lambda = \mathbf{S}_1 \mathbf{d}_b - \mathbf{S}_2([\bar{\mathbf{F}}] - [\mathbf{1}])$$

$$\mathbf{r}_{\bar{\mathbf{F}}} = [\bar{\mathbf{P}}] - \mathbf{S}_2^T \boldsymbol{\lambda}$$

- 4.) Berechne kondensierte Matrizen

$$\tilde{\mathbf{r}}_b = \mathbf{r}_b - \mathbf{K}_{ba} \mathbf{K}_{aa}^{-1} \mathbf{r}_a \quad \tilde{\mathbf{K}}_{bb} = \mathbf{K}_{bb} - \mathbf{K}_{ba} \mathbf{K}_{aa}^{-1} \mathbf{K}_{ab}$$

$$\tilde{\mathbf{r}}_\lambda = \mathbf{r}_\lambda - \mathbf{S}_1 \tilde{\mathbf{K}}_{bb}^{-1} \tilde{\mathbf{r}}_b \quad \tilde{\mathbf{K}} = \frac{1}{|\mathcal{B}|} (\mathbf{S}_1 \tilde{\mathbf{K}}_{bb}^{-1} \mathbf{S}_1^T)^{-1}$$

$$\tilde{\mathbf{r}}_{\bar{\mathbf{F}}} = \mathbf{r}_{\bar{\mathbf{F}}} + \mathbf{S}_2^T \tilde{\mathbf{K}} \tilde{\mathbf{r}}_\lambda$$

und effektive Tangentenflexibilitäten  $[\bar{\mathbb{D}}] = (\mathbf{S}_2^T \tilde{\mathbf{K}} \mathbf{S}_2)^{-1}$

- 5.) Berechne Inkremente

$$\Delta \mathbf{d}_a = -\mathbf{K}_{aa}^{-1} (\mathbf{K}_{ab} \Delta \mathbf{d}_b + \mathbf{r}_a)$$

$$\Delta \mathbf{d}_b = \tilde{\mathbf{K}}_{bb}^{-1} (|\mathcal{B}| \cdot \mathbf{S}_1^T \Delta \boldsymbol{\lambda} - \tilde{\mathbf{r}}_b)$$

$$\Delta \boldsymbol{\lambda} = \tilde{\mathbf{K}} (\mathbf{S}_2 [\Delta \bar{\mathbf{F}}] - \tilde{\mathbf{r}}_\lambda)$$

$$[\Delta \bar{\mathbf{F}}] = [\bar{\mathbb{D}}] \tilde{\mathbf{r}}_{\bar{\mathbf{F}}}$$

und aktualisiere Knotenparameter  $\mathbf{d} := \mathbf{d} + \Delta \mathbf{d}$ ,  $\boldsymbol{\lambda} := \boldsymbol{\lambda} + \Delta \boldsymbol{\lambda}$  sowie den effektiven Deformationsgradienten  $\bar{\mathbf{F}} := \bar{\mathbf{F}} + \Delta \bar{\mathbf{F}}$

- 6.) Falls  $|\mathbf{r}| > \text{tol}$  gehe zu 2

Gleichungen in (III.5.42) in der angegebenen Reihenfolge nach  $\{\Delta \mathbf{d}_a, \Delta \mathbf{d}_b, \Delta \boldsymbol{\lambda}, \Delta \bar{\mathbf{F}}\}$  aufzulösen. Für  $\Delta \bar{\mathbf{F}}$  ergibt sich hierbei der konstitutive Zusammenhang  $[\Delta \bar{\mathbf{F}}] = [\bar{\mathbb{D}}][\Delta \bar{\mathbf{P}}]$  mit den zu (III.5.24) inversen effektiven Tangentenflexibilitäten  $\bar{\mathbb{D}} = \bar{\mathbb{C}}^{-1}$ . Die Iteration wird abgebrochen, sobald die Euklidische Norm des Residuums  $|\mathbf{r}|$  eine gegebene kleine Toleranz  $\text{tol}$  unterschreitet. Am Iterationsende liefert (III.5.41)<sub>4</sub> für  $\mathbf{r}_{\bar{\mathbf{F}}} = \mathbf{0}$  als effektive 1.-P.-K.-Spannungen (III.5.21). Das Iterationsverfahren wird in Box 9 algorithmisch aufgezeigt.

### 5.2.3. Diskrete Variationsformulierung mit Strafterm

Der diskrete Mikro-Makro-Übergang erfolgt nur geringfügig modifiziert gegenüber Abschnitt 5.1.3. In Verbindung mit den drei kanonischen Randbedingungen in Box 6 wird die Mikro-Makro-Homogenitätsbedingung in der diskreten Form

$$\bar{W}^{*h}(\bar{\mathbf{P}}) = \sup_{[\bar{\mathbf{F}}] \in \mathcal{B}^{d \times d}} \left\{ [\bar{\mathbf{P}}]^T [\bar{\mathbf{F}}] - \inf_{\mathbf{d} \in \mathcal{B}^{d \times N}} \left\{ \bar{w}^h(\mathbf{d}) - \frac{\eta}{2|\mathcal{B}|} \left| \mathbf{S}_1 \mathbf{d}_b - \mathbf{S}_2([\bar{\mathbf{F}}] - [\mathbf{1}]) \right|^2 \right\} \right\} \quad (\text{III.5.44})$$

**Box 10:** Algorithmus für spannungsgetriebene Mikro-Makro-Übergänge basierend auf einer diskreten dualen Variationsformulierung mit Strafterm.

- 1.) Setze als Startwerte:  $\mathbf{d} = \mathbf{0}$ ,  $\bar{\mathbf{F}} = \mathbf{1}$
- 2.) Bestimme Kraftvektor  $\mathbf{f} = |\mathcal{B}| \cdot \partial_a \bar{w}^h$  und Tangente  $\mathbf{K} = |\mathcal{B}| \cdot \partial_{aa}^2 \bar{w}^h$  der FE-diskretisierten Mikrostruktur  $\mathcal{B}$  unter Berücksichtigung der Zerlegung  $\mathbf{X}_a \in \mathcal{B}$  und  $\mathbf{X}_b \in \partial\mathcal{B}$ 

$$\mathbf{f} = \begin{bmatrix} \mathbf{f}_a \\ \mathbf{f}_b \end{bmatrix} \quad \text{und} \quad \mathbf{K} = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{aa} & \mathbf{K}_{ab} \\ \mathbf{K}_{ba} & \mathbf{K}_{bb} \end{bmatrix}$$
- 3.) Berechne Residuum  $\mathbf{r} = [\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b, \mathbf{r}_{\bar{\mathbf{F}}}]^T$  mit
$$\begin{aligned} \mathbf{r}_a &= \mathbf{f}_a \\ \mathbf{r}_b &= \mathbf{f}_b - \eta \mathbf{S}_1^T [\mathbf{S}_1 \mathbf{d}_b - \mathbf{S}_2([\bar{\mathbf{F}}] - [\mathbf{1}])] \\ \mathbf{r}_{\bar{\mathbf{F}}} &= [\bar{\mathbf{P}}] - \eta \frac{1}{|\mathcal{B}|} \mathbf{S}_2^T [\mathbf{S}_1 \mathbf{d}_b - \mathbf{S}_2([\bar{\mathbf{F}}] - [\mathbf{1}])] \end{aligned}$$
- 4.) Berechne kondensierte Matrizen
$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{r}}_b &= \mathbf{r}_b - \mathbf{K}_{ba} \mathbf{K}_{aa}^{-1} \mathbf{r}_a & \tilde{\mathbf{K}}_{bb} &= \mathbf{K}_{bb} - \eta \mathbf{S}_1^T \mathbf{S}_1 - \mathbf{K}_{ba} \mathbf{K}_{aa}^{-1} \mathbf{K}_{ab} \\ \tilde{\mathbf{r}}_{\bar{\mathbf{F}}} &= \mathbf{r}_{\bar{\mathbf{F}}} + \eta \frac{1}{|\mathcal{B}|} \mathbf{S}_2^T \mathbf{S}_1 \tilde{\mathbf{K}}_{bb}^{-1} \tilde{\mathbf{r}}_b \end{aligned}$$

und effektive Tangentenflexibilitäten  $[\bar{\mathbb{D}}] = -\frac{|\mathcal{B}|}{\eta} (\eta \mathbf{S}_2^T \mathbf{S}_1 \tilde{\mathbf{K}}_{bb}^{-1} \mathbf{S}_1^T \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_2^T \mathbf{S}_2)^{-1}$
- 5.) Berechne Inkremente
$$\begin{aligned} \Delta \mathbf{d}_a &= -\mathbf{K}_{aa}^{-1} (\mathbf{K}_{ab} \Delta \mathbf{d}_b + \mathbf{r}_a) \\ \Delta \mathbf{d}_b &= -\tilde{\mathbf{K}}_{bb}^{-1} (\eta \mathbf{S}_1^T \mathbf{S}_2 [\Delta \bar{\mathbf{F}}] + \tilde{\mathbf{r}}_b) \\ [\Delta \bar{\mathbf{F}}] &= [\bar{\mathbb{D}}] \tilde{\mathbf{r}}_{\bar{\mathbf{F}}} \end{aligned}$$

und aktualisiere Knotenparameter  $\mathbf{d} := \mathbf{d} + \Delta \mathbf{d}$  sowie den effektiven Deformationsgradienten  $\bar{\mathbf{F}} := \bar{\mathbf{F}} + \Delta \bar{\mathbf{F}}$
- 6.) Falls  $|\mathbf{r}| > \text{tol}$  gehe zu 2

angenommen, wobei der Strafterm mit Hilfe von [Box 6](#) zu entwickeln ist. Zur iterativen Lösung mit Newton-basierten Verfahren ist die rechte Seite von [\(III.5.44\)](#) bezüglich den aktuell iterierten Variablen  $\{\bar{\mathbf{d}}, \bar{\mathbf{F}}\}$  zu linearisieren. Man führt hierzu den Kraftvektor [\(III.5.14\)](#)<sub>1</sub> und die Tangentenmatrix [\(III.5.14\)](#)<sub>2</sub> ein. Im Gleichgewicht der Mikrostruktur muß die erste Variation von [\(III.5.44\)](#) bei vorgegebenen makroskopischen 1. P.-K.-Spannungen  $\bar{\mathbf{P}}$  verschwinden, sodaß unter Berücksichtigung der Zerlegung  $\mathbf{X}_a \in \mathcal{B}$  und  $\mathbf{X}_b \in \partial\mathcal{B}$

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{0} &= \mathbf{f}_a \\ \mathbf{0} &= \mathbf{f}_b - \eta \mathbf{S}_1^T [\mathbf{S}_1 \mathbf{d}_b - \mathbf{S}_2([\bar{\mathbf{F}}] - [\mathbf{1}])] \\ \mathbf{0} &= [\bar{\mathbf{P}}] - \eta \frac{1}{|\mathcal{B}|} \mathbf{S}_2^T [\mathbf{S}_1 \mathbf{d}_b - \mathbf{S}_2([\bar{\mathbf{F}}] - [\mathbf{1}])] \end{aligned} \right\} \quad (\text{III.5.45})$$

Als Residuenvektor definiert man  $\mathbf{r} = [\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b, \mathbf{r}_{\bar{\mathbf{F}}}]^T$  mit

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{r}_a &:= \mathbf{f}_a \\ \mathbf{r}_b &:= \mathbf{f}_b - \eta \mathbf{S}_1^T [\mathbf{S}_1 \mathbf{d}_b - \mathbf{S}_2([\bar{\mathbf{F}}] - [\mathbf{1}])] \\ \mathbf{r}_{\bar{\mathbf{F}}} &:= [\bar{\mathbf{P}}] - \eta \frac{1}{|\mathcal{B}|} \mathbf{S}_2^T [\mathbf{S}_1 \mathbf{d}_b - \mathbf{S}_2([\bar{\mathbf{F}}] - [\mathbf{1}])] \end{aligned} \right\} \quad (\text{III.5.46})$$



Die iterative Lösung von (III.5.45) erfolgt in einer Sequenz von Linearisierungen an der jeweils aktuell iterierten Stelle  $\{\bar{\mathbf{d}}_a, \bar{\mathbf{d}}_b, \bar{\mathbf{F}}\}$

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{0} &= \mathbf{r}_a + \mathbf{K}_{aa}\Delta\mathbf{d}_a + \mathbf{K}_{ab}\Delta\mathbf{d}_b \\ \mathbf{0} &= \mathbf{r}_b + \mathbf{K}_{ba}\Delta\mathbf{d}_a + (\mathbf{K}_{bb} - \eta\mathbf{S}_1^T\mathbf{S}_1)\Delta\mathbf{d}_b + \eta\mathbf{S}_1^T\mathbf{S}_2[\Delta\bar{\mathbf{F}}] \\ \mathbf{0} &= \mathbf{r}_{\bar{\mathbf{F}}} - \eta\frac{1}{|\mathcal{B}|}\mathbf{S}_2^T[\mathbf{S}_1\Delta\mathbf{d}_b - \mathbf{S}_2[\Delta\bar{\mathbf{F}}]] \end{aligned} \right\} \quad (\text{III.5.47})$$

und hat eine inkrementelle Aufdatierung der Knotenverschiebungen und Deformationen

$$\mathbf{d} = \bar{\mathbf{d}} + \Delta\mathbf{d} \quad \text{und} \quad \bar{\mathbf{F}} = \bar{\bar{\mathbf{F}}} + \Delta\bar{\mathbf{F}} \quad (\text{III.5.48})$$

zum Ziel. (III.5.45)–(III.5.47) sind für  $\Delta\bar{\mathbf{F}} = \mathbf{0}$  mit Ausnahme der jeweils letzten Gleichung identisch mit (III.5.26)–(III.5.28). Zur Berechnung der inkrementellen Knotenwerte sind die Gleichungen in (III.5.47) in der angegebenen Reihenfolge nach  $\{\Delta\mathbf{d}_a, \Delta\mathbf{d}_b, \Delta\bar{\mathbf{F}}\}$  aufzulösen. Analog zu Abschnitt 5.2.2 ergibt eine Auswertung von (III.5.47) den konstitutiven Zusammenhang  $[\Delta\bar{\mathbf{F}}] = [\bar{\mathbb{D}}][\Delta\bar{\mathbf{P}}]$  mit den zu (III.5.34) inversen effektiven Tangenflexibilitäten  $\bar{\mathbb{D}} = \bar{\mathbb{C}}^{-1}$ . Die Iteration wird terminiert, sobald die Euklidische Norm des Residuums  $|\mathbf{r}|$  kleiner ist als eine vorgegebene kleine Toleranz  $\text{tol}$ . Am Iterationsende liefert (III.5.46)<sub>3</sub> für  $\mathbf{r}_{\bar{\mathbf{F}}} = \mathbf{0}$  als effektive 1.-P.-K.-Spannungen (III.5.31). Details zum Iterationsablauf sind Box 10 zu entnehmen.

### 5.3. Variationsformulierung bei starren Einschlüssen

In diesem Abschnitt wird eine mögliche Vorgehensweise beschrieben, die eine Homogenisierung von Mikrostrukturen mit starren Einschlüssen gestattet. Die starren Einschlüsse  $\mathcal{I}$  werden hierbei aus der Mikrostruktur  $\mathcal{B}$  entsprechend Abb. 28 herausgelöst. Im Gegenzug müssen an den verbleibenden Lochrändern  $\partial\mathcal{I}$  geometrische Randbedingungen derart definiert werden, daß Verzerrungen  $\mathbf{E} = \frac{1}{2}(\mathbf{F}^T\mathbf{F} - \mathbf{G}) = \mathbf{0}$  im Einschlußbereich  $\mathcal{I}$  verschwinden und somit geometrische Kompatibilität zwischen starren Einschlüssen und Matrix gewährleistet ist. Die Mikro-Makro-Homogenitätsbedingung wird hierzu mit der Lagrange-Nebenbedingung

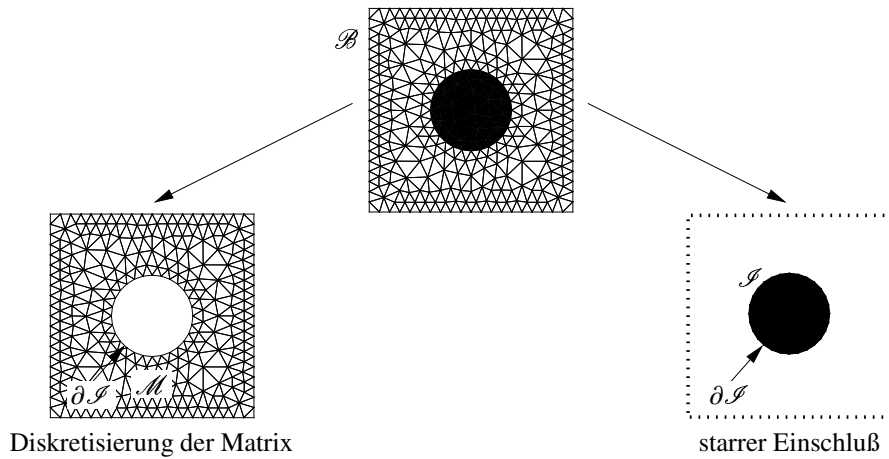
$$\bar{c}_s(\mathbf{F}, \lambda_s) = \frac{1}{|\mathcal{B}|} \int_{\partial\mathcal{I}} \lambda_s \cdot \mathbf{E}\mathbf{X} \, dA \quad (\text{III.5.49})$$

mit Lagrange-Parameter  $\lambda_s \in \mathcal{H}^1(\mathcal{B})^3$  oder mit dem Strafterm

$$\bar{p}_s(\mathbf{F}) = \frac{\eta}{2|\mathcal{B}|} \int_{\partial\mathcal{I}} |\mathbf{E}\mathbf{X}|^2 \, dA \quad , \quad \eta \in \mathcal{R}_+ \quad (\text{III.5.50})$$

verknüpft. Hier ist  $\mathbf{E} = \frac{1}{2}(\mathbf{F}^T\mathbf{F} - \mathbf{G})$  das in (II.1.20)<sub>1</sub> definierte Greensche Verzerrungsmaß. Es ist zu überprüfen, ob (III.5.49) die geforderte Eigenschaft  $\mathbf{E} = \mathbf{0}$  im Einschluß  $\mathcal{I}$  tatsächlich erfüllt. Mit  $2\hat{\lambda}_s\mathbf{N} := \lambda_s$  folgt aus (III.5.49) unter Beachtung des Gaußschen Integralsatzes

$$\begin{aligned} |\mathcal{B}| \cdot \bar{c}_s &= \int_{\partial\mathcal{I}} \hat{\lambda}_s : (\mathbf{F}^T\mathbf{F} - \mathbf{G})\mathbf{X} \otimes \mathbf{N} \, dA \\ &= \int_{\partial\mathcal{I}} \hat{\lambda}_s : \mathbf{F}^T\boldsymbol{\varphi} \otimes \mathbf{N} \, dA - \int_{\partial\mathcal{I}} \hat{\lambda}_s : \mathbf{X} \otimes \mathbf{N} \, dA \\ &= \int_{\mathcal{I}} \text{DIV}[\boldsymbol{\varphi} \cdot \mathbf{F}\hat{\lambda}_s] \, dV - \int_{\mathcal{I}} \text{DIV}[\mathbf{X} \cdot \hat{\lambda}_s] \, dV \end{aligned} \quad (\text{III.5.51})$$



**Abbildung 28:** Mikrostruktur mit starrem Einschluss. Homogenisierung der heterogenen Struktur  $\mathcal{B}$  erfolgt ohne starrem Einschluss  $\mathcal{I}$  in Verbindung mit Nebenbedingung  $\mathbf{E} = \mathbf{0}$  in  $\mathcal{I}$ .

Für den Kern des ersten Integrals in (III.5.51) erhält man mit Hilfe der Identität  $\partial_x \mathbf{F}^{-1} = \mathbf{0}$  den Ausdruck  $\text{DIV}[\boldsymbol{\varphi} \cdot \mathbf{F} \hat{\boldsymbol{\lambda}}_s] = \text{DIV}[\mathbf{F} \hat{\boldsymbol{\lambda}}_s] \cdot \boldsymbol{\varphi} + \hat{\boldsymbol{\lambda}}_s : \mathbf{F}^T \mathbf{F} = \mathbf{F} \text{DIV}[\hat{\boldsymbol{\lambda}}_s] \cdot \boldsymbol{\varphi} + \hat{\boldsymbol{\lambda}}_s : \mathbf{F}^T \mathbf{F}$ . Weitere Umformungen von Gleichung (III.5.51) ergeben damit

$$\begin{aligned}
 |\mathcal{B}| \cdot \bar{c}_s &= \int_{\mathcal{I}} (\mathbf{F} \text{DIV}[\hat{\boldsymbol{\lambda}}_s] \cdot \boldsymbol{\varphi} \, dV + \hat{\boldsymbol{\lambda}}_s : \mathbf{F}^T \mathbf{F}) \, dV - \int_{\mathcal{I}} (\text{DIV}[\hat{\boldsymbol{\lambda}}_s] \cdot \mathbf{X} + \hat{\boldsymbol{\lambda}}_s : \mathbf{G}) \, dV \\
 &= \int_{\mathcal{I}} (\text{DIV}[\hat{\boldsymbol{\lambda}}_s] \cdot \mathbf{F}^T \mathbf{F} \mathbf{X} + \hat{\boldsymbol{\lambda}}_s : (\mathbf{F}^T \mathbf{F} - \mathbf{G})) \, dV - \text{DIV}[\hat{\boldsymbol{\lambda}}_s] \cdot \mathbf{G} \mathbf{X} \, dV \\
 &= \int_{\mathcal{I}} (\text{DIV}[\hat{\boldsymbol{\lambda}}_s] \cdot (\mathbf{F}^T \mathbf{F} - \mathbf{G}) \mathbf{X} + \hat{\boldsymbol{\lambda}}_s : (\mathbf{F}^T \mathbf{F} - \mathbf{G})) \, dV \\
 &= \int_{\mathcal{I}} (\text{DIV}[\hat{\boldsymbol{\lambda}}_s] \otimes \mathbf{X} + \hat{\boldsymbol{\lambda}}_s) : (\mathbf{F}^T \mathbf{F} - \mathbf{G}) \, dV \\
 &= \int_{\mathcal{I}} (2 \text{DIV}[\hat{\boldsymbol{\lambda}}_s] \otimes \mathbf{X} + 2 \hat{\boldsymbol{\lambda}}_s) : \mathbf{E} \, dV \\
 &=: \int_{\mathcal{I}} \boldsymbol{\Xi}(\hat{\boldsymbol{\lambda}}_s) : \mathbf{E} \, dV \tag{III.5.52}
 \end{aligned}$$

Demnach muß in  $\mathcal{I}$  das Greensche Verzerrungsmaß  $\mathbf{E} = \frac{1}{2} (\mathbf{F}^T \mathbf{F} - \mathbf{G}) = \mathbf{0}$  sein, damit bei beliebiger Variation von  $\boldsymbol{\Xi} \sim \hat{\boldsymbol{\lambda}}_s \sim \boldsymbol{\lambda}_s$  die Nebenbedingung  $\bar{c}_s = 0$  erhalten wird. Bei kleinen Verzerrungen schreibt sich (III.5.49) als

$$\boxed{\bar{c}_s(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\lambda}_s) = \frac{1}{|\mathcal{B}|} \int_{\partial \mathcal{I}} \boldsymbol{\lambda}_s \cdot \boldsymbol{\varepsilon} \mathbf{x} \, dA} \tag{III.5.53}$$

und (III.5.50) als

$$\boxed{\bar{p}_s(\boldsymbol{\varepsilon}) = \frac{\eta}{2|\mathcal{B}|} \int_{\partial \mathcal{I}} |\boldsymbol{\varepsilon} \mathbf{x}|^2 \, dA \quad , \quad \eta \in \mathcal{R}_+} \tag{III.5.54}$$

Details zur Finite Elementdiskretisierung der Lagrange-Nebenbedingungen (III.5.49), (III.5.53) und der Strafterme (III.5.50), (III.5.54) sind im Abschnitt D.3 des Anhangs aufbereitet.

## 6. Modellbeispiele

In den ersten beiden Beispielen werden zwei kanonische Mikrostrukturen betrachtet, in denen analytische Ansätze zur Mehrskalbildung den entwickelten numerischen Verfahren gegenübergestellt werden. Die letzten beiden Beispiele werden einer rein numerischen Analyse unterzogen. Das Materialverhalten der untersuchten Mikrostrukturen wird durch die Stoffgesetze

**Box 11:** Den Modellproblemen zugrunde liegende Stoffgesetze.

1.) Linear elastische Freie Energiefunktion:

$$\psi(\boldsymbol{\varepsilon}) = \frac{1}{2} \kappa (\text{tr}[\boldsymbol{\varepsilon}])^2 + \mu \|\text{dev}[\boldsymbol{\varepsilon}]\|^2$$

2.) Nichtlinear elastische Freie Energiefunktion:

$$\psi(\boldsymbol{\varepsilon}) = \frac{1}{4} \kappa (\text{tr}[\boldsymbol{\varepsilon}])^4 + \mu \|\text{dev}[\boldsymbol{\varepsilon}]\|^2$$

3.) Geometrisch nichtlinear elastische Freie Energiefunktion:

$$\psi(\mathbf{F}) = \frac{\mu}{2} (\text{tr}[\mathbf{F}^T \mathbf{F}] - 3) + \frac{\mu}{\beta} ((\det[\mathbf{F}])^{-\beta} - 1) \quad \text{mit} \quad \beta = \frac{\kappa}{\mu} - \frac{2}{3}$$

4.) Freie Energiefunktion und kanonische von Mises Fließfunktion:

$$\text{Freie Energie:} \quad \psi(\boldsymbol{\varepsilon}^e, \alpha) = \psi_{\text{makro}}(\boldsymbol{\varepsilon}^e) + \psi_{\text{mikro}}(\alpha)$$

$$\psi_{\text{makro}}(\boldsymbol{\varepsilon}^e) = \frac{1}{2} \kappa (\text{tr}[\boldsymbol{\varepsilon}^e])^2 + \mu \|\text{dev}[\boldsymbol{\varepsilon}^e]\|^2$$

$$\psi_{\text{mikro}}(\alpha) = \frac{1}{2} h \alpha^2 + (y_\infty - y_0) [\alpha + (\exp(-\omega \alpha) - 1) / \omega]$$

$$\text{Fließfunktion:} \quad f(\boldsymbol{\sigma}, \beta) = \|\text{dev}[\boldsymbol{\sigma}]\| - \sqrt{2/3} \beta \quad \text{mit} \quad \beta = -\partial_\alpha \psi_{\text{mikro}}(\alpha)$$

in **Box 11** charakterisiert. Hier ist  $\boldsymbol{\varepsilon}$  der Verzerrungstensor,  $\boldsymbol{\varepsilon}^e = \boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^p$  ist der als Differenz zwischen totalen und plastisch akkumulierten Verzerrungen definierte elastische Verzerrungsanteil,  $\alpha$  ist die plastische Bogenlänge, und  $\mathbf{F}$  ist der Deformationsgradient. Kompressionsmodul  $\kappa$  und Schubmodul  $\mu$  sind elastische, Fließspannung  $y_0$ , Sättigungsspannung  $y_\infty$ , Verfestigungsexponent und -modul  $\omega$  und  $h$  sind inelastische Materialparameter. Ziel nachfolgender Homogenisierungsanalysen ist die Berechnung effektiver Spannungen. Mit FEM(D), FEM(S) und FEM(P) assoziierte effektive Spannungen werden mit den neu entwickelten numerischen Verfahren aus Abschnitt 5 in Verbindung mit linearen Randverschiebungen (D), periodischen Randverschiebungen (P) oder homogenen Randspannungen (S) als FEM-Lösungen ermittelt. Mit DDD, DDS, SK, DM, MT, V, R,  $\overline{\text{HS}}$  und  $\underline{\text{HS}}$  angeführte effektive Spannungen werden mit den analytischen Ansätzen (III.3.13), (III.3.16), (III.3.19), (III.3.28), (III.3.35), (III.3.57) und (III.3.62) des Dilute-Distribution-Modells, des selbstkonsistenten Modells, der Differentialmethode, des auf Mori und Tanaka basierenden Mehrphasen- oder Mehreinschlußmodells und der Schrankenformulierungen von Voigt, Reuss sowie Hashin und Shtrikman berechnet. Die hierzu nötigen Eshelbytensoren sind Tab. 18 und 19 zu entnehmen. Effektive Spannungen, deren zugehöriges Kürzel zusätzlich mit dem Attribut (P) versehen ist, werden basierend auf den Fourierreihenentwicklungen (B.30) und (B.31) des Eshelbytensors periodischer Mikrostrukturen bestimmt. Transformationen der Eshelbytensoren im Kontext eines verallgemeinerten ebenen Verzerrungszustands sind im Abschnitt C des Anhangs aufbereitet. Bei nichtlinearem Materialverhalten erfolgt die analytische Auswertung effektiver Spannungen basierend auf einer Kopplung der in Abschnitt 4.1.1 und 4.2.1 beschriebenen Verfahren.

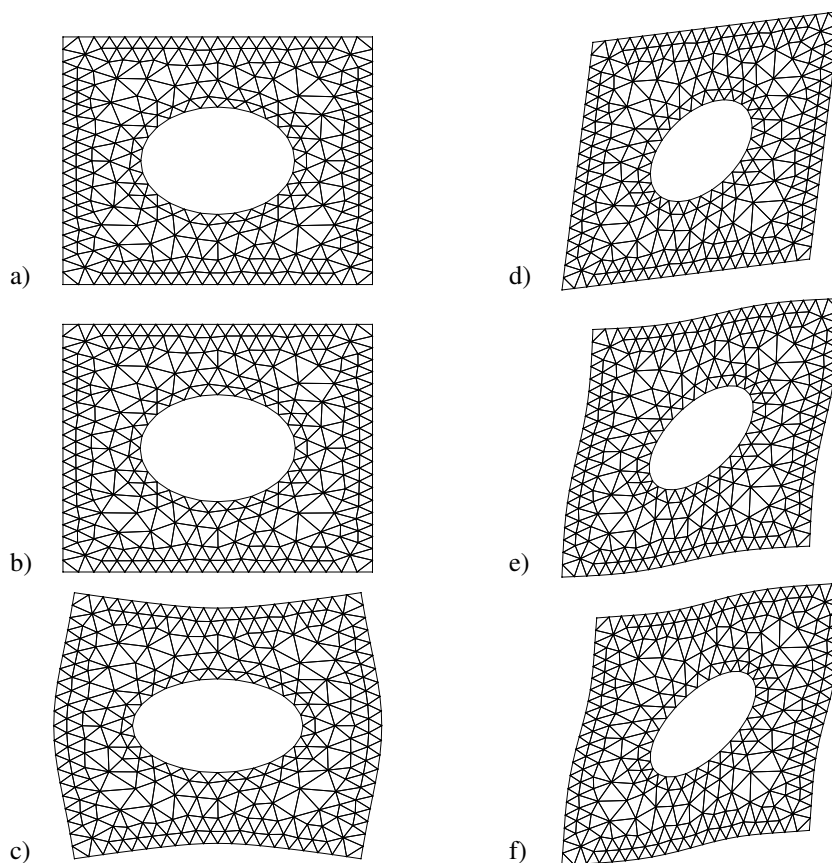
## 6.1. Mikrostruktur mit Loch

Als Mikrostruktur wird ein Matrixmaterial betrachtet, das von zufällig oder periodisch angeordneten faserförmigen Hohlräumen perforiert ist. Die Hohlräume sind uniaxial ausgerichtet. Effektive Spannungen werden innerhalb eines wohl definierten repräsentativen Teilbereichs der Mikrostruktur berechnet, zu dessen Geometrie und Topologie hier unterschiedliche Annahmen getroffen werden. Im Fall einer periodischen Mikrostruktur wird als Einheitszelle ein Teilbereich mit einem zentrierten Hohlraum betrachtet. Der Lochdurchmesser ist 0,4. Längs des Hohlraums ist die Einheitszelle unendlich ausgedehnt, quer dazu hat sie die Abmessungen  $1 \times 1$ . Die Einheitszelle ist hier gleichzeitig das  $\mathcal{RVE}$  der Mikrostruktur, welches mit Hilfe oben genannter, mit Attribut (P) gekennzeichneten Verfahren zu homogenisieren ist. Im Fall einer willkürlich homogenen Verteilung der Löcher wird in oben genannten analytischen Homogenisierungsansätzen ein unendliches  $\mathcal{RVE}$  betrachtet, in dem Hohlräume mit Volumenanteil  $v = 0,2^2 \cdot \pi \approx 0,1257$  plaziert sind. Bei numerischer Homogenisierung wird ein finites  $\mathcal{RVE}$  aus der Mikrostruktur extrahiert und diskretisiert, dessen Größe im Hinblick auf eine objektive effektive Spannungsantwort geeignet zu wählen ist. Mit dem Ziel, die reale effektive Spannungsantwort nach oben und unten entsprechend Abschnitt 1.4.4 einzugrenzen, wird hier als  $\mathcal{RVE}$  nur ein Teilbereich mit Topologie und Abmessungen der oben eingeführten Einheitszelle betrachtet. Das auf diese Weise festgelegte  $\mathcal{RVE}$  ist mittels effektiver Ersatzmodelle ohne Attribut (P) zu homogenisieren. In allen Berechnungsbeispielen sind auftretende Deformationen klein. Für elastische Berechnungen wird das jeweils betrachtete  $\mathcal{RVE}$  der Mikrostruktur mit 518 dreiknotigen Finite Elementen, für inelastische Berechnungen mit ebenso vielen gemischten  $T2P0$ -Elementen diskretisiert. Bei der Homogenisierungsanalyse wird es einem makroskopischen Zugmode  $[\bar{\varepsilon}_{11}; \bar{\varepsilon}_{22}; 2\bar{\varepsilon}_{12}] = [\bar{\varepsilon}; 0; 0]$  und einem makroskopischen Schubmode  $[\bar{\varepsilon}_{11}; \bar{\varepsilon}_{22}; 2\bar{\varepsilon}_{12}] = [0; 0; \bar{\gamma}]$  im verallgemeinerten ebenen Verzerrungszustand zugeführt. Die Ma-

### Box 12: Materialparametersatz des Modellproblems.

<b>Elastische Matrix:</b>	
Kompressionsmodul	$\kappa = 175,00$
Schubmodul	$\mu = 80,00$
<b>Inelastische Matrix:</b>	
Kompressionsmodul	$\kappa = 17,50$
Schubmodul	$\mu = 8,00$
Fließspannung	$y_0 = 0,40$
Sättigungsspannung	$y_\infty = 0,40$
Verfestigungsexponent	$\omega = 0,01$
Verfestigungsmodul	$h = 0,10$

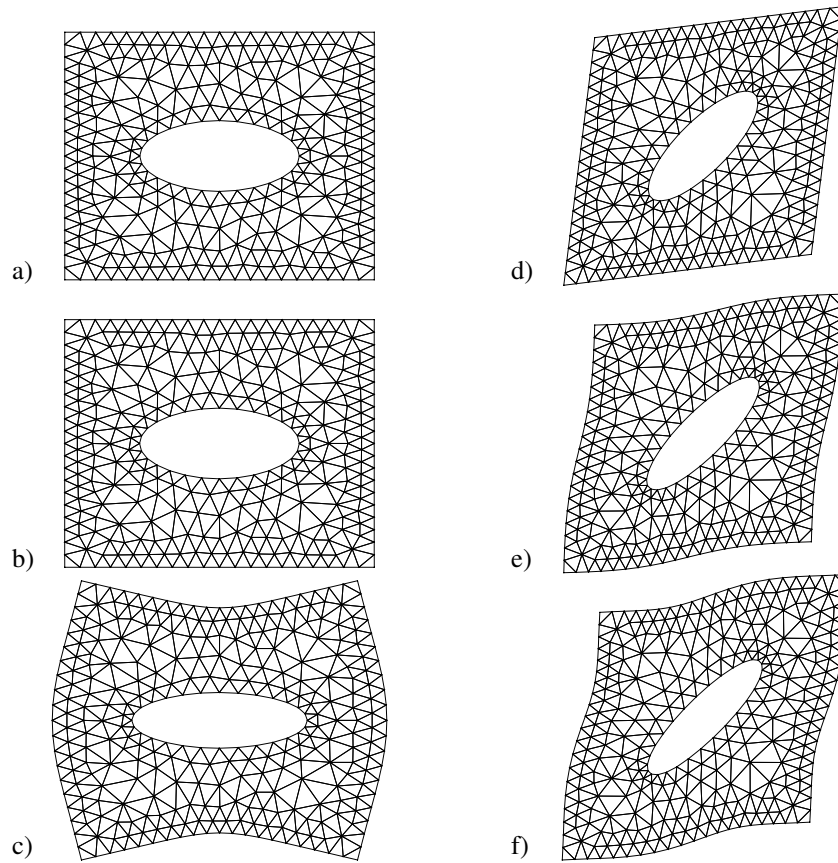
terialkennwerte in den hierfür zugrunde liegenden Stoffgesetzen 1, 2 und 4 von Box 11 sind in Box 12 aufgelistet. Im Fall rein elastischer Deformationen sind  $\bar{\varepsilon} = 0,05$  und  $\bar{\gamma} = 0,05$ , bei inelastischen Verzerrungen sind  $\bar{\varepsilon} = 0,1$  und  $\bar{\gamma} = 0,1$  vorgegebene Maximalwerte. In Abb. 29–31 sind die deformierten Konfigurationen der Mikrostruktur, in Tab. 1–3 die analytisch und numerisch berechneten effektiven Spannungen bei Annahme einer linear elastischen, einer nichtlinear elastischen und einer inelastischen Matrix dargestellt. Die analytisch ermittelten Spannungs-



**Abbildung 29:** Homogenisierungsanalyse an einer durch  $\bar{\epsilon}_{11} = 0,05$  und  $\bar{\epsilon}_{12} = \bar{\epsilon}_{21} = 0,025$  deformierten linear elastischen Mikrostruktur mit a,d) linearen und b,e) periodischen Randverschiebungen sowie c,f) homogenen Randspannungen. Deformationen sind 5-fach überhöht dargestellt.

**Tabelle 1:** Effektive Spannungen der linear elastischen Mikrostruktur mit Loch bei makroskopischer Verzerrung  $\bar{\epsilon}_{11} = 0,05$  bzw.  $\bar{\epsilon}_{12} = \bar{\epsilon}_{21} = 0,025$ .

	$\bar{\sigma}_{11}$	$\bar{\sigma}_{22}$	$\bar{\sigma}_{12} = \bar{\sigma}_{21}$		$\bar{\sigma}_{11}$	$\bar{\sigma}_{22}$	$\bar{\sigma}_{12} = \bar{\sigma}_{21}$
FEM(D)	9,91	3,78	0,00	FEM(D)	0,00	0,00	3,02
FEM(S)	9,26	4,25	0,00	FEM(S)	0,00	0,00	2,59
DDD	8,22	3,03	0,00	DDD	0,00	0,00	2,60
DDS	9,95	4,03	0,00	DDS	0,00	0,00	2,96
MT	9,55	3,84	0,00	MT	0,00	0,00	2,85
DM	9,12	3,64	0,00	DM	0,00	0,00	2,74
SK	8,45	3,34	0,00	SK	0,00	0,00	2,56
$\overline{HS}$	10,53	4,25	0,00	$\overline{HS}$	0,00	0,00	3,14
V	12,31	5,32	0,00	V	0,00	0,00	3,50
FEM(P)	9,84	3,77	0,00	FEM(P)	0,00	0,00	2,74
DDD(P)	8,44	2,82	0,00	DDD(P)	0,00	0,00	2,30
DDS(P)	10,08	3,91	0,00	DDS(P)	0,00	0,00	2,81
MT(P)	9,68	3,72	0,00	MT(P)	0,00	0,00	2,69
DM(P)	8,62	3,22	0,00	DM(P)	0,00	0,00	2,49
SK(P)	8,64	3,16	0,00	SK(P)	0,00	0,00	2,32

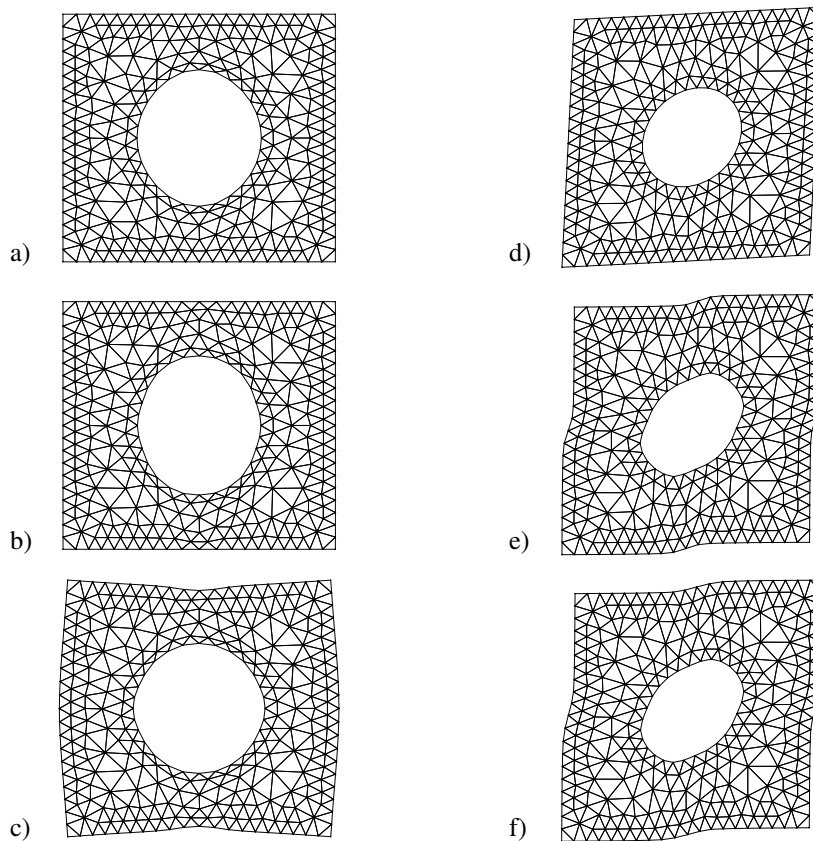


**Abbildung 30:** Homogenisierungsanalyse an einer durch  $\bar{\epsilon}_{11} = 0,05$  und  $\bar{\epsilon}_{12} = \bar{\epsilon}_{21} = 0,025$  deformierten nichtlinear elastischen Mikrostruktur mit a,d) linearen und b,e) periodischen Randverschiebungen sowie c,f) homogenen Randspannungen. Deformationen sind 5-fach überhöht dargestellt.

**Tabelle 2:** Effektive Spannungen der nichtlinear elastischen Mikrostruktur mit Loch bei makroskopischer Verzerrung  $\bar{\epsilon}_{11} = 0,05$  bzw.  $\bar{\epsilon}_{12} = \bar{\epsilon}_{21} = 0,025$ .

	$\bar{\sigma}_{11}$	$\bar{\sigma}_{22}$	$\bar{\sigma}_{12} = \bar{\sigma}_{21}$
FEM(D)	3,37	-1,04	0,00
FEM(S)	2,79	-0,47	0,00
DDD	1,26	1,05	0,00
DDS	3,22	-0,84	0,00
MT	3,06	-0,73	0,00
DM	2,89	-0,62	0,00
SK	2,65	-0,47	0,00
$\overline{\text{HS}}$	3,99	-1,91	0,00
V	4,72	-2,27	0,00
FEM(P)	3,36	-1,03	0,00
DDD(P)	1,86	0,45	0,00
DDS(P)	3,38	-1,00	0,00
MT(P)	3,23	-0,89	0,00
DM(P)	2,48	-0,28	0,00
SK(P)	2,85	-0,67	0,00

	$\bar{\sigma}_{11}$	$\bar{\sigma}_{22}$	$\bar{\sigma}_{12} = \bar{\sigma}_{21}$
FEM(D)	0,00	0,00	2,08
FEM(S)	0,00	0,00	1,70
DDD	0,00	0,00	-0,02
DDS	0,00	0,00	1,99
MT	0,00	0,00	1,86
DM	0,00	0,00	1,73
SK	0,00	0,00	1,53
$\overline{\text{HS}}$	0,00	0,00	2,94
V	0,00	0,00	3,50
FEM(P)	0,00	0,00	1,83
DDD(P)	0,00	0,00	-0,85
DDS(P)	0,00	0,00	1,81
MT(P)	0,00	0,00	1,68
DM(P)	0,00	0,00	1,15
SK(P)	0,00	0,00	1,31



**Abbildung 31:** Homogenisierungsanalyse an einer durch  $\bar{\epsilon}_{11} = 0,1$  und  $\bar{\epsilon}_{12} = \bar{\epsilon}_{21} = 0,05$  deformierten inelastischen Mikrostruktur mit a,d) linearen und b,e) periodischen Randverschiebungen sowie c,f) homogenen Randspannungen.

**Tabelle 3:** Effektive Spannungen der inelastischen Mikrostruktur mit Loch bei makroskopischer Verzerrung  $\bar{\epsilon}_{11} = 0,1$  bzw.  $\bar{\epsilon}_{12} = \bar{\epsilon}_{21} = 0,05$ .

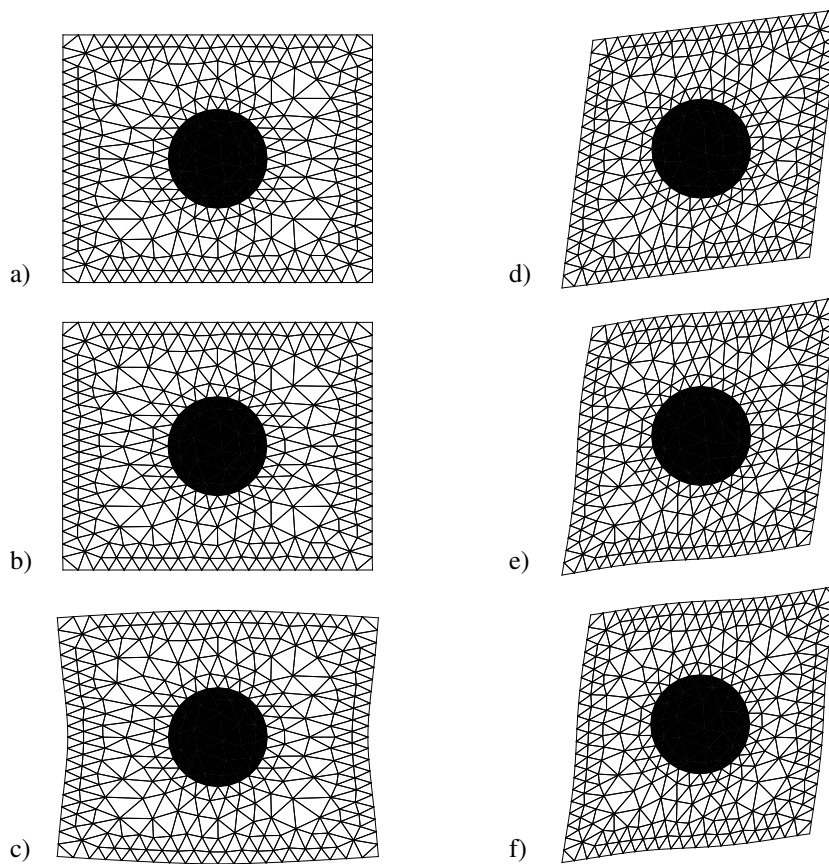
	$\bar{\sigma}_{11}$	$\bar{\sigma}_{22}$	$\bar{\sigma}_{12} = \bar{\sigma}_{21}$		$\bar{\sigma}_{11}$	$\bar{\sigma}_{22}$	$\bar{\sigma}_{12} = \bar{\sigma}_{21}$
FEM(D)	0,50	0,37	0,00	FEM(D)	0,00	0,00	0,19
FEM(S)	0,45	0,38	0,00	FEM(S)	0,00	0,00	0,14
DDD	2,42	1,81	0,00	DDD	0,00	0,00	0,10
DDS	1,60	0,60	0,00	DDS	0,00	0,00	0,12
MT	0,42	0,01	0,00	MT	0,00	0,00	0,10
DM	—	—	0,00	DM	0,00	0,00	0,11
SK	1,57	0,60	0,00	SK	0,00	0,00	0,10
HS	0,61	0,26	0,00	HS	0,00	0,00	0,10
V	1,77	1,41	0,00	V	0,00	0,00	0,10
FEM(P)	0,46	0,25	0,00	FEM(P)	0,00	0,00	0,14
DDD(P)	0,12	-0,28	0,00	DDD(P)	0,00	0,00	0,10
DDS(P)	1,26	0,82	0,00	DDS(P)	0,00	0,00	0,13
MT(P)	1,19	0,81	0,00	MT(P)	0,00	0,00	0,10
DM(P)	—	—	0,00	DM(P)	0,00	0,00	0,12
SK(P)	0,98	0,58	0,00	SK(P)	0,00	0,00	0,10



werte sind teilweise stark von den individuellen Modellannahmen der Homogenisierungsverfahren abhängig. So streuen beispielsweise die  $\bar{\sigma}_{11}$ -Werte der elastischen Mikrostrukturen mit statistisch homogen verteilten Hohlräumen zwischen 8,22 und 9,95 bzw. 1,26 und 3,22, mit periodischer Anordnung der Hohlräume zwischen 8,44 und 10,08 bzw. 1,86 und 3,38. Bei elastoplastischer Matrix erhält man für die analytische  $\bar{\sigma}_{11}$ -Spannung eine Toleranz von 2,00. Die Auswertung mit dem klassischen Inkrementenverfahren liefert für die Differentialmethode keine Lösung. Mit MT gekennzeichnete Spannungen grenzen als Walpole-Schranken die effektive Materialantwort schärfer ein wie Hashin-Shtrikman-Schranken. Letztere sind nur für Matrix-Einschluß-Verbundmaterialien mit homogen in der Matrix verteilten sphärischen Einschlüssen konzipiert, wohingegen die Walpole-Schranken die Fasergeometrie der Hohlräume berücksichtigen. Zu beachten ist, daß mit DDS markierte Spannungen die Walpole-Schranken in allen Beispielen verletzen. Lineare Randverschiebungen und homogene Randspannungen liefern entsprechend Abschnitt 1.4.4 eine obere und eine untere Schranke des inkrementellen effektiven Potentials. In Tab. 1–3 haben die hierzu numerisch ermittelten effektiven Zug- und Scherspannungen  $\bar{\sigma}_{11}$  und  $\bar{\sigma}_{12}$  in Zug- und Scherrichtung  $\bar{\epsilon}_{11}$  und  $\bar{\epsilon}_{12}$  einen ausgeprägten Schrankencharakter. Die mit FEM(P) assoziierten Lösungen liegen zwischen diesen Schranken. Der Schrankencharakter wird auch von den deformierten Konfigurationen der Mikrostruktur wiedergegeben. Bei linearen Randverschiebungen treten die kleinsten und bei homogenen Randspannungen die größten Verformungen auf. Periodische Randbedingungen induzieren ein dazwischenliegendes Materialverhalten. Zusammenfassend wird bereits am Beispiel der hier betrachteten kanonischen Mikrostruktur deutlich, daß der Anwendungsbereich analytischer Homogenisierungsverfahren insbesondere durch kleine Volumenfraktionen von Heterogenitäten im Matrixmaterial gekennzeichnet ist. Bei kleinen Volumenanteilen würden analytische Methoden annähernd gleiche effektive Spannungswerte liefern. Dieser Sachverhalt wird u.a. in NEMAT-NASSER & HORI [123] aufgezeigt. Der durch die FEM numerisch nach oben und unten beschränkte Wertebereich der effektiven Spannungen liegt weitgehend im Streubereich der analytischen Lösungen. Hieran wird deutlich, daß das vorgeschlagene Modell zur numerischen Homogenisierung die effektive Spannungsarbeit tendenziell und quantitativ richtig wiedergibt.

## 6.2. Mikrostruktur mit starrem Einschluß

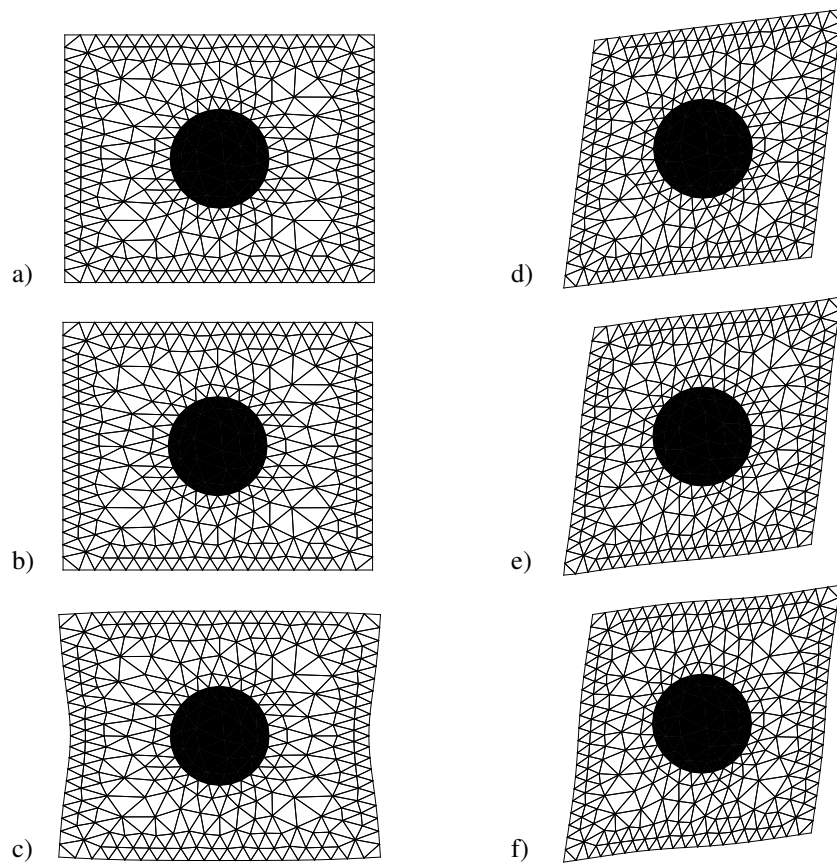
Betrachtet wird ein Matrixmaterial, in dem starre uniaxial ausgerichtete Einschlußfasern zufällig oder periodisch verteilt sind. Die Topologie der Mikrostruktur ist identisch mit der des vorangehenden Abschnitts. Demzufolge werden hier als  $\mathcal{RVE}$ s identische Teilbereiche der Mikrostruktur wie im vorangehenden Abschnitt definiert und homogenisiert. Anstelle des faserförmigen Hohlraums ist hier die starre Einschlußfaser anzunehmen. Diese wird bei der numerischen Homogenisierungsanalyse in Form einer Nebenbedingung gemäß Abschnitt 5.3 berücksichtigt. Auftretende Deformationen sind klein. Für elastische Berechnungen wird die Matrix des jeweils betrachteten  $\mathcal{RVE}$ s der Mikrostruktur mit 512 dreiknotigen Finite Elementen, für inelastische Berechnungen mit ebenso vielen gemischten  $T2P0$ -Elementen diskretisiert. Bei der Homogenisierungsanalyse wird das  $\mathcal{RVE}$  wie im vorangehenden Abschnitt belastet. Die Materialkennwerte der Matrix in den hierfür zugrunde liegenden Stoffgesetzen 1, 2 und 4 von Box 11 sind in Box 12 aufgelistet. In Abb. 32–34 sind die deformierten Konfigurationen der Mikrostruktur, in Tab. 4–6 die analytisch und numerisch berechneten effektiven Spannungen bei Annahme einer linear elastischen, einer nichtlinear elastischen und einer inelastischen Matrix dargestellt. Die Streuung analytisch berechneter effektiver Spannungswerte ist im Gegensatz zur perforierten Mikrostruktur des vorangehenden Abschnitts weniger von den individuel-



**Abbildung 32:** Homogenisierungsanalyse an einer durch  $\bar{\epsilon}_{11} = 0,05$  und  $\bar{\epsilon}_{12} = \bar{\epsilon}_{21} = 0,025$  deformierten linear elastischen Mikrostruktur mit a,d) linearen und b,e) periodischen Randverschiebungen sowie c,f) homogenen Randspannungen. Deformationen sind 5-fach überhöht dargestellt.

**Tabelle 4:** Effektive Spannungen der linear elastischen Mikrostruktur mit starrer Faser bei makroskopischer Verzerrung  $\bar{\epsilon}_{11} = 0,05$  bzw.  $\bar{\epsilon}_{12} = \bar{\epsilon}_{21} = 0,025$ .

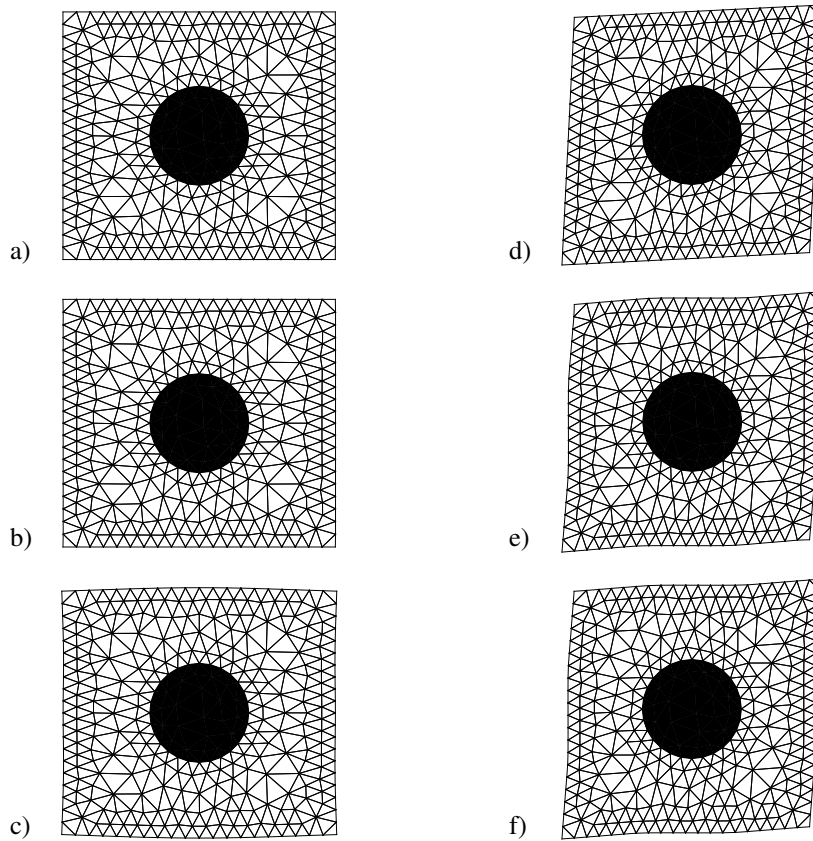
	$\bar{\sigma}_{11}$	$\bar{\sigma}_{22}$	$\bar{\sigma}_{12} = \bar{\sigma}_{21}$		$\bar{\sigma}_{11}$	$\bar{\sigma}_{22}$	$\bar{\sigma}_{12} = \bar{\sigma}_{21}$
FEM(D)	17,15	7,09	0,00	FEM(D)	0,00	0,00	4,98
FEM(S)	16,82	7,36	0,00	FEM(S)	0,00	0,00	4,75
DDD	16,64	7,07	0,00	DDD	0,00	0,00	4,78
DDS	17,20	7,26	0,00	DDS	0,00	0,00	4,97
MT	17,00	7,21	0,00	MT	0,00	0,00	4,90
DM	17,10	7,24	0,00	DM	0,00	0,00	4,93
SK	17,22	7,28	0,00	SK	0,00	0,00	4,97
<u>HS</u>	17,72	7,30	0,00	<u>HS</u>	0,00	0,00	5,21
R	16,11	6,96	0,00	R	0,00	0,00	4,57
FEM(P)	17,11	7,11	0,00	FEM(P)	0,00	0,00	4,80
DDD(P)	16,72	6,99	0,00	DDD(P)	0,00	0,00	4,71
DDS(P)	17,34	7,12	0,00	DDS(P)	0,00	0,00	4,87
MT(P)	17,10	7,12	0,00	MT(P)	0,00	0,00	4,82
DM(P)	16,97	7,12	0,00	DM(P)	0,00	0,00	4,83
SK(P)	17,35	7,16	0,00	SK(P)	0,00	0,00	4,87



**Abbildung 33:** Homogenisierungsanalyse an einer durch  $\bar{\epsilon}_{11} = 0,05$  und  $\bar{\epsilon}_{12} = \bar{\epsilon}_{21} = 0,025$  deformierten nichtlinear elastischen Mikrostruktur mit a,d) linearen und b,e) periodischen Randverschiebungen sowie c,f) homogenen Randspannungen. Deformationen sind 5-fach überhöht dargestellt.

**Tabelle 5:** Effektive Spannungen der nichtlinear elastischen Mikrostruktur mit starrer Faser bei makroskopischer Verzerrung  $\bar{\epsilon}_{11} = 0,05$  bzw.  $\bar{\epsilon}_{12} = \bar{\epsilon}_{21} = 0,025$ .

	$\bar{\sigma}_{11}$	$\bar{\sigma}_{22}$	$\bar{\sigma}_{12} = \bar{\sigma}_{21}$		$\bar{\sigma}_{11}$	$\bar{\sigma}_{22}$	$\bar{\sigma}_{12} = \bar{\sigma}_{21}$
FEM(D)	6,83	-2,54	0,00	FEM(D)	0,00	0,00	4,66
FEM(S)	6,72	-2,53	0,00	FEM(S)	0,00	0,00	4,63
DDD	6,68	-2,48	0,00	DDD	0,00	0,00	4,57
DDS	7,40	-1,95	0,00	DDS	0,00	0,00	4,67
MT	6,86	-2,46	0,00	MT	0,00	0,00	4,66
DM	6,92	-2,44	0,00	DM	0,00	0,00	4,68
SK	7,38	-1,97	0,00	SK	0,00	0,00	4,67
<u>HS</u>	7,48	-2,44	0,00	<u>HS</u>	0,00	0,00	4,96
R	6,20	-2,95	0,00	R	0,00	0,00	4,57
FEM(P)	6,81	-2,54	0,00	FEM(P)	0,00	0,00	4,64
DDD(P)	6,70	-2,49	0,00	DDD(P)	0,00	0,00	4,56
DDS(P)	7,43	-1,97	0,00	DDS(P)	0,00	0,00	4,65
MT(P)	6,88	-2,48	0,00	MT(P)	0,00	0,00	4,64
DM(P)	6,84	-2,46	0,00	DM(P)	0,00	0,00	4,63
SK(P)	7,40	-1,99	0,00	SK(P)	0,00	0,00	4,65



**Abbildung 34:** Homogenisierungsanalyse an einer durch  $\bar{\epsilon}_{11} = 0,1$  und  $\bar{\epsilon}_{12} = \bar{\epsilon}_{21} = 0,05$  deformierten inelastischen Mikrostruktur mit a,d) linearen und b,e) periodischen Randverschiebungen sowie c,f) homogenen Randspannungen.

**Tabelle 6:** Effektive Spannungen der inelastischen Mikrostruktur mit starrer Faser bei makroskopischer Verzerrung  $\bar{\epsilon}_{11} = 0,1$  bzw.  $\bar{\epsilon}_{12} = \bar{\epsilon}_{21} = 0,05$ .

	$\bar{\sigma}_{11}$	$\bar{\sigma}_{22}$	$\bar{\sigma}_{12} = \bar{\sigma}_{21}$		$\bar{\sigma}_{11}$	$\bar{\sigma}_{22}$	$\bar{\sigma}_{12} = \bar{\sigma}_{21}$
FEM(D)	2,29	1,89	0,00	FEM(D)	0,00	0,00	0,24
FEM(S)	2,28	1,89	0,00	FEM(S)	0,00	0,00	0,23
DDD	2,27	1,87	0,00	DDD	0,00	0,00	0,13
DDS	2,32	1,82	0,00	DDS	0,00	0,00	0,13
MT	2,31	1,90	0,00	MT	0,00	0,00	0,13
DM	2,32	1,90	0,00	DM	0,00	0,00	0,13
SK	2,32	1,88	0,00	SK	0,00	0,00	0,13
<u>HS</u>	2,35	1,88	0,00	<u>HS</u>	0,00	0,00	0,14
R	2,27	1,87	0,00	R	0,00	0,00	0,12
FEM(P)	2,29	1,89	0,00	FEM(P)	0,00	0,00	0,23
DDD(P)	2,34	1,85	0,00	DDD(P)	0,00	0,00	0,13
DDS(P)	2,42	1,88	0,00	DDS(P)	0,00	0,00	0,13
MT(P)	2,39	1,88	0,00	MT(P)	0,00	0,00	0,13
DM(P)	2,37	1,87	0,00	DM(P)	0,00	0,00	0,13
SK(P)	2,42	1,88	0,00	SK(P)	0,00	0,00	0,13

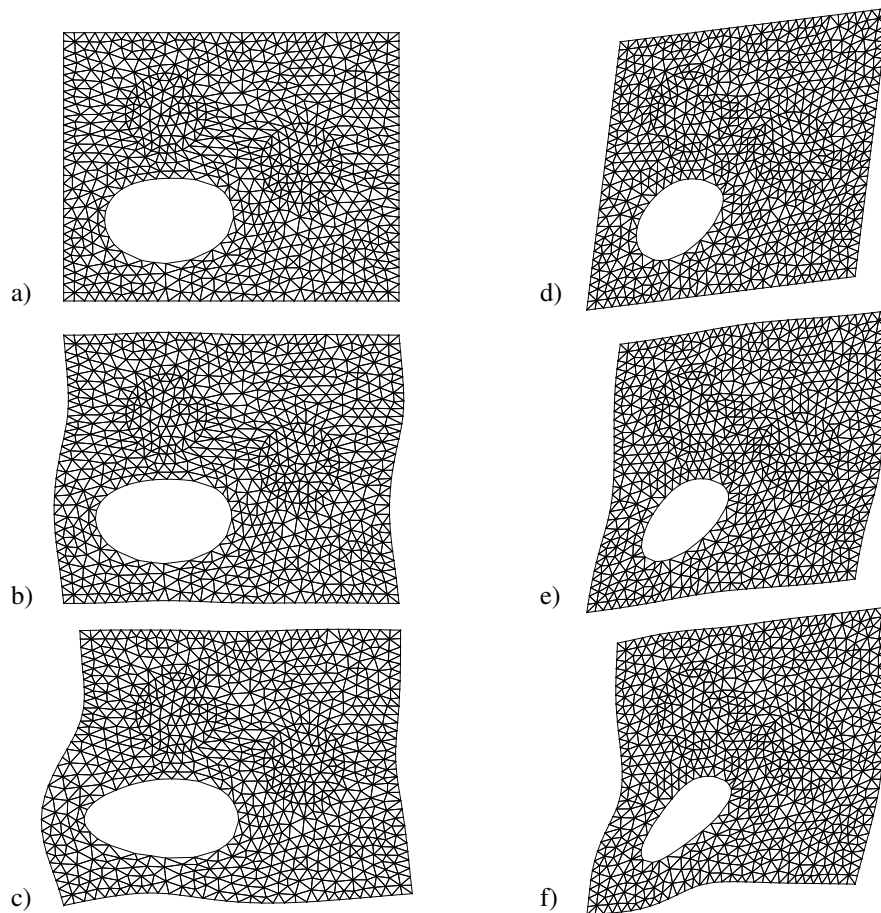
len Modellannahmen der Homogenisierungsverfahren abhängig. So streuen beispielsweise die  $\bar{\sigma}_{11}$ -Werte der linear elastischen Mikrostrukturen mit statistisch homogen verteilten Fasern nur zwischen 16,64 und 17,22 bzw. 6,68 und 7,40, mit periodischer Verteilung der Hohlräume zwischen 16,72 und 17,35 bzw. 6,70 und 7,43. Bei elastoplastischer Matrix erhält man für die analytische  $\bar{\sigma}_{11}$ -Spannung eine Toleranz von weniger als 0,1. Mit MT assoziierte Spannungen grenzen als Walpole-Schranken die effektive Spannungsantwort wie im vorangehenden Abschnitt physikalisch ein. Sie werden von den mit DDD markierten effektiven Spannungen in allen Beispielen verletzt. Die Hashin-Shtrikman-Schranken über- bzw. unterschätzen die effektive Spannungsantwort. Die numerischen Lösungen weisen dieselbe Charakteristik wie im vorangehenden Abschnitt auf. Lineare Randverschiebungen und homogene Randspannungen induzieren im  $\mathcal{RVE}$  eine steife und eine weiche effektive Materialantwort. Hierzu gehörige effektive Zug- und Scherspannungen  $\bar{\sigma}_{11}$  und  $\bar{\sigma}_{12}$  in Zug- und Scherrichtung  $\bar{\epsilon}_{11}$  und  $\bar{\epsilon}_{12}$  schranken bei numerischer Auswertung die mit FEM(P) assoziierten Lösungen nach oben und unten ein. Siehe in diesem Zusammenhang Tab. 4–6. Der Schrankencharakter wird auch von den deformierten Konfigurationen der Mikrostruktur wiedergegeben. Bei linearen Randverschiebungen treten die kleinsten und bei homogenen Randspannungen die größten Verformungen auf. Periodische Randbedingungen ergeben ein dazwischenliegendes Materialverhalten. Analytische und numerische Ergebnisse liegen sehr nah beieinander. Daraus schließt man, daß das vorgeschlagene Modell zur numerischen Homogenisierung die effektive Spannungsarbeit tendenziell und quantitativ richtig wiedergibt.

### 6.3. Mehrphasige Mikrostruktur

Im betrachteten  $\mathcal{RVE}$  der Mikrostruktur sind zwei elastische Einschlußfasern und ein faserförmiger Hohlraum in einem Matrixmaterial eingebettet. Die Heterogenitäten sind uniaxial ausgerichtet. Das  $\mathcal{RVE}$  hat quer zur Faserrichtung die Abmessungen  $1 \times 1$ . Der Durchmesser der kreisrunden Einschlußfasern und des kreisrunden Hohlräume mißt 0,3. Vom Zentrum des  $\mathcal{RVE}$ s aus gesehen ist der Hohlraum relativ um  $-0,2$  nach links und nach un-

#### Box 13: Materialparametersatz des Modellproblems.

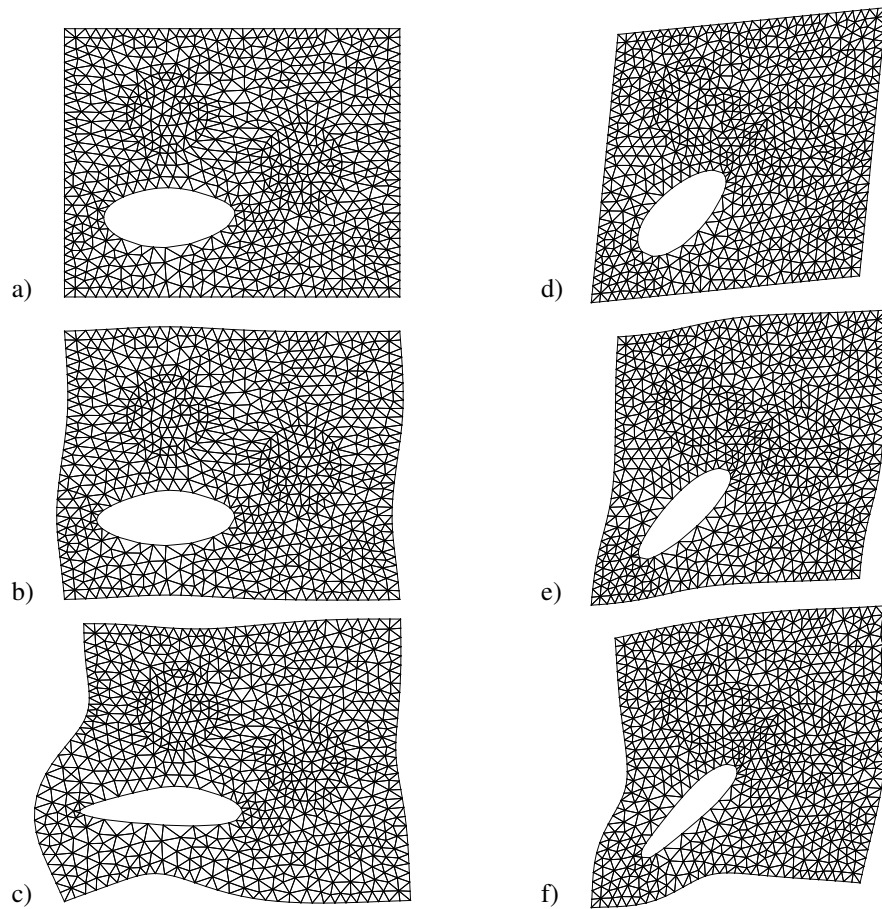
<b>Elastische Einschlüsse:</b>	
Kompressionsmodul	$\kappa = 1750,00$
Schubmodul	$\mu = 800,00$
<b>Elastische Matrix:</b>	
Kompressionsmodul	$\kappa = 17,50$
Schubmodul	$\mu = 8,00$
<b>Inelastische Matrix:</b>	
Kompressionsmodul	$\kappa = 17,50$
Schubmodul	$\mu = 8,00$
Fließspannung	$y_0 = 0,45$
Sättigungsspannung	$y_\infty = 0,45$
Verfestigungsexponent	$\omega = 0,01$
Verfestigungsmodul	$h = 0,10$



**Abbildung 35:** Homogenisierungsanalyse an einer durch  $\bar{\epsilon}_{11} = 0,05$  und  $\bar{\epsilon}_{12} = \bar{\epsilon}_{21} = 0,025$  deformierten linear elastischen Mikrostruktur mit a,d) linearen und b,e) periodischen Randverschiebungen sowie c,f) homogenen Randspannungen. Deformationen sind 5-fach überhöht dargestellt.

**Tabelle 7:** Effektive Spannungen in mehrphasiger Mikrostruktur bei makroskopischer Verzerrung  $\bar{\epsilon}_{11} = 0,05$  bzw.  $\bar{\epsilon}_{12} = \bar{\epsilon}_{21} = 0,025$ .

	$\bar{\sigma}_{11}$	$\bar{\sigma}_{22}$	$\bar{\sigma}_{12} = \bar{\sigma}_{21}$
FEM(D)	1,50	0,57	-0,05
FEM(P)	1,43	0,57	-0,03
FEM(S)	1,29	0,57	-0,03
FEM(D)	-0,05	-0,01	0,46
FEM(P)	-0,03	0,00	0,42
FEM(S)	-0,03	0,00	0,37

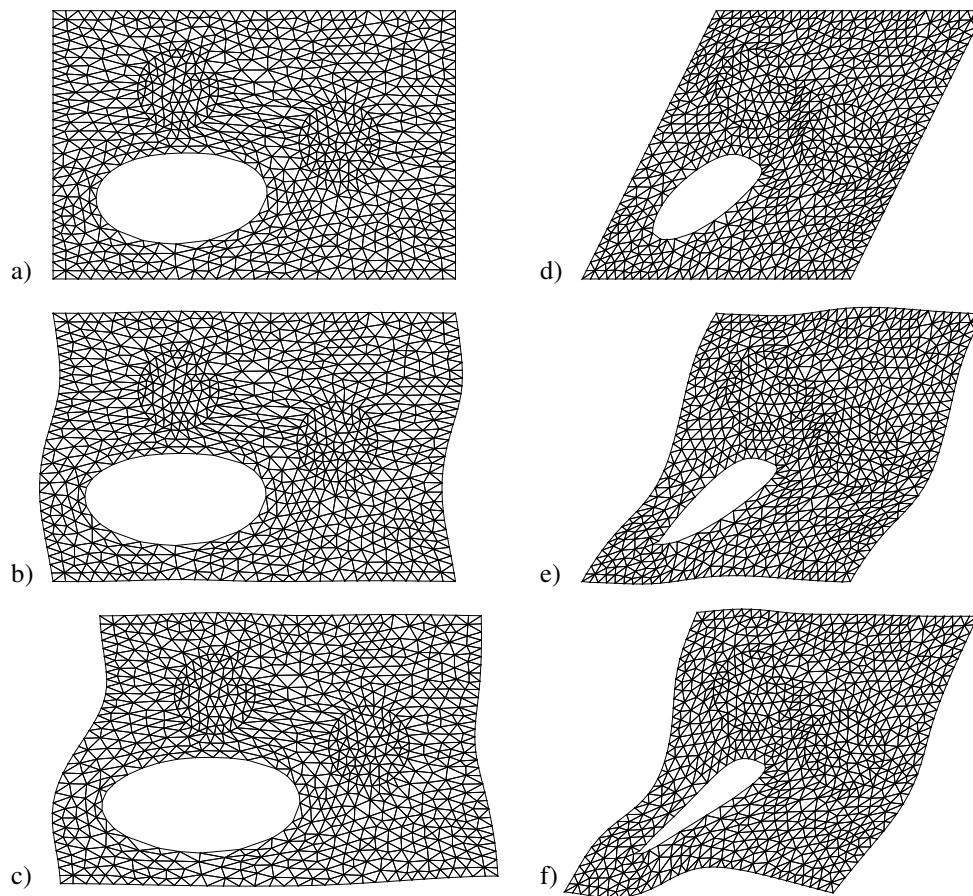


**Abbildung 36:** Homogenisierungsanalyse an einer durch  $\bar{\epsilon}_{11} = 0,05$  und  $\bar{\epsilon}_{12} = \bar{\epsilon}_{21} = 0,02$  deformierten nichtlinear elastischen Mikrostruktur mit a,d) linearen und b,e) periodischen Randverschiebungen sowie c,f) homogenen Randspannungen. Deformationen sind 5-fach überhöht dargestellt.

**Tabelle 8:** Effektive Spannungen in mehrphasiger Mikrostruktur bei makroskopischer Verzerrung  $\bar{\epsilon}_{11} = 0,05$  bzw.  $\bar{\epsilon}_{12} = \bar{\epsilon}_{21} = 0,02$ .

	$\bar{\sigma}_{11}$	$\bar{\sigma}_{22}$	$\bar{\sigma}_{12} = \bar{\sigma}_{21}$
FEM(D)	0,59	-0,14	-0,02
FEM(P)	0,57	-0,12	-0,02
FEM(S)	0,46	-0,06	-0,02
FEM(D)	-0,02	-0,01	0,28
FEM(P)	-0,01	-0,01	0,24
FEM(S)	-0,01	-0,01	0,21

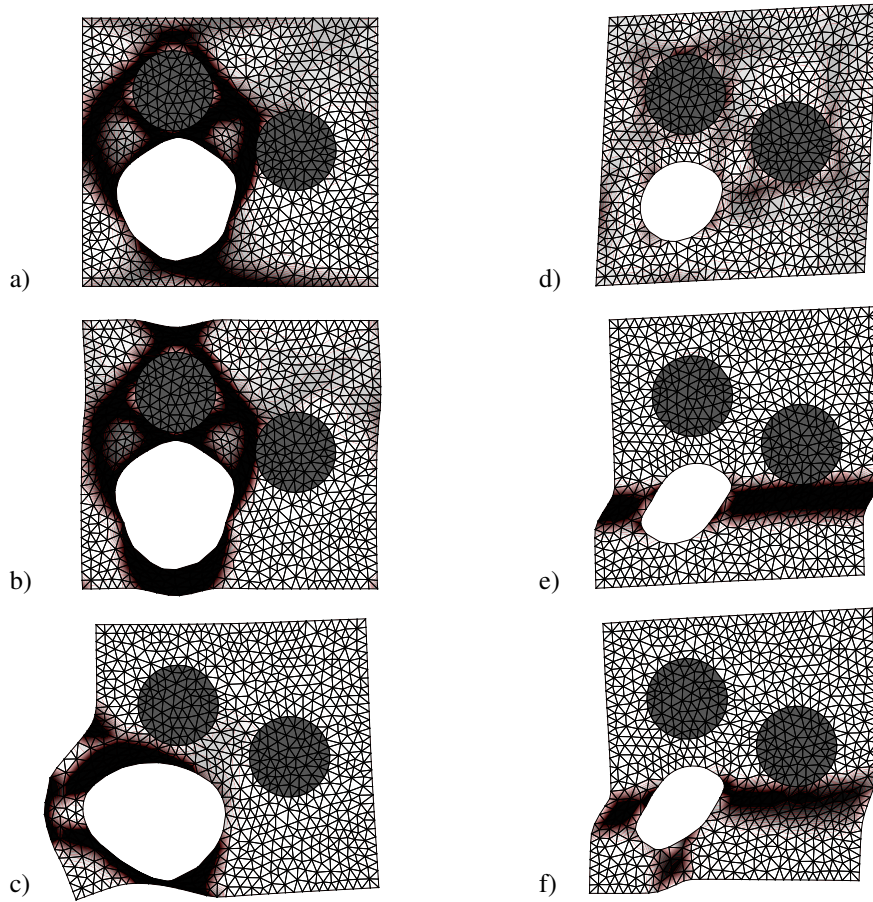




**Abbildung 37:** Homogenisierungsanalyse an einer durch  $\bar{F}_{11} = 0,5$  und  $\bar{F}_{12} = 0,5$  deformierten nichtlinear elastischen Mikrostruktur mit a,d) linearen und b,e) periodischen Randverschiebungen sowie c,f) homogenen Randspannungen.

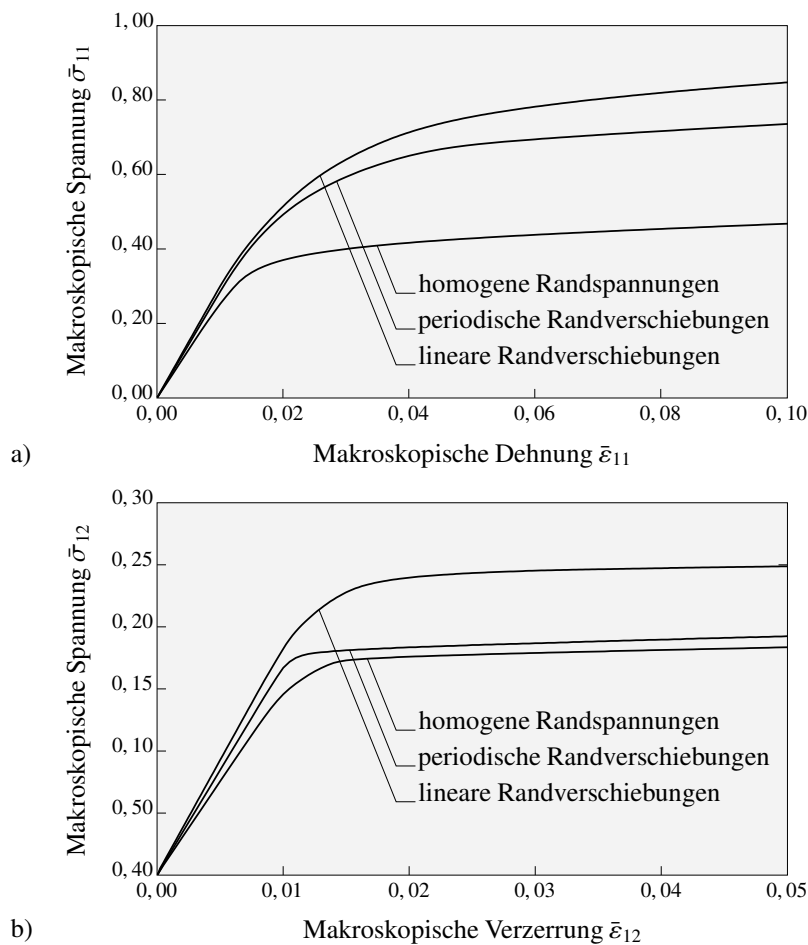
**Tabelle 9:** Effektive Spannungen in mehrphasiger Mikrostruktur bei makroskopischer Deformation  $\bar{F}_{11} = 0,5$  bzw.  $\bar{F}_{12} = 0,5$ .

	$\bar{P}_{11}$	$\bar{P}_{22}$	$\bar{P}_{12}$	$\bar{P}_{21}$
FEM(D)	9,60	3,17	-0,29	-0,19
FEM(P)	9,43	3,12	-0,17	-0,11
FEM(S)	9,05	3,06	-0,26	-0,17
FEM(D)	-1,08	-0,55	4,79	5,06
FEM(P)	-0,12	-0,52	4,22	4,24
FEM(S)	0,36	0,60	3,91	3,61



**Abbildung 38:** Homogenisierungsanalyse an einer durch  $\bar{\epsilon}_{11} = 0,1$  und  $\bar{\epsilon}_{12} = \bar{\epsilon}_{21} = 0,05$  deformierten inelastischen Mikrostruktur mit a,d) linearen und b,e) periodischen Randverschiebungen sowie c,f) homogenen Randspannungen. Über die deformierte Figur der Mikrostruktur ist die Verteilung der äquivalent plastischen Verzerrungen dargestellt.

ten, die eine Einschlussfaser um  $-0,2$  nach links und um  $0,2$  nach oben und die andere Einschlussfaser um  $0,2$  nach oben versetzt. Für elastische Berechnungen wird das betrachtete  $\mathcal{RVE}$  der Mikrostruktur mit 1501 sechsknotigen Finite Elementen, für inelastische Berechnungen mit ebenso vielen gemischten  $T2P0$ -Elementen diskretisiert. Bei kleinen Deformationen wird das  $\mathcal{RVE}$  einem makroskopischen Zugmode  $[\bar{\epsilon}_{11}; \bar{\epsilon}_{22}; 2\bar{\epsilon}_{12}] = [\bar{\epsilon}; 0; 0]$  und einem makroskopischen Schubmode  $[\bar{\epsilon}_{11}; \bar{\epsilon}_{22}; 2\bar{\epsilon}_{12}] = [0; 0; \bar{\gamma}]$  im ebenen Verzerrungszustand zugeführt mit  $\bar{\epsilon} = 0,05$  und  $\bar{\gamma} = 0,05$  im Kontext einer linear elastischen Matrix, mit  $\bar{\epsilon} = 0,05$  und  $\bar{\gamma} = 0,04$  im Kontext einer nichtlinear elastischen Matrix und mit  $\bar{\epsilon} = 0,1$  und  $\bar{\gamma} = 0,1$  im Kontext einer inelastischen Matrix. Bei finiten Deformationen wird es dem makroskopischen Zugmode  $[\bar{F}_{11}; \bar{F}_{22}; \bar{F}_{12}; \bar{F}_{21}] = [0, 5; 0; 0; 0]$  und dem makroskopischen Schubmode  $[\bar{F}_{11}; \bar{F}_{22}; \bar{F}_{12}; \bar{F}_{21}] = [0; 0; 0, 5; 0]$  im ebenen Verzerrungszustand unterzogen. Die Materialkennwerte in den zugrunde liegenden Stoffgesetzen von [Box 11](#) sind [Box 13](#) zu entnehmen. In [Abb. 35–38](#) sind die deformierten Konfigurationen der Mikrostruktur, in [Tab. 7–9](#) und [Abb. 39](#) die numerisch berechneten effektiven Spannungen visualisiert. Für lineare Randverschiebungen und homogene Randspannungen bilden effektive Zug- und Scherspannungen  $\bar{\sigma}_{11}$  und  $\bar{\sigma}_{12}$  bzw.  $\bar{P}_{11}$  und  $\bar{P}_{12}$  in Zug- und Scherrichtung  $\bar{\epsilon}_{11}$  und  $\bar{\epsilon}_{12}$  bzw.  $\bar{F}_{11}$  und  $\bar{F}_{12}$  obere und untere Schranken, zwischen denen die mit FEM(P) assoziierten Lösungen liegen. Abschnitt [1.4.4](#) folgend ergibt



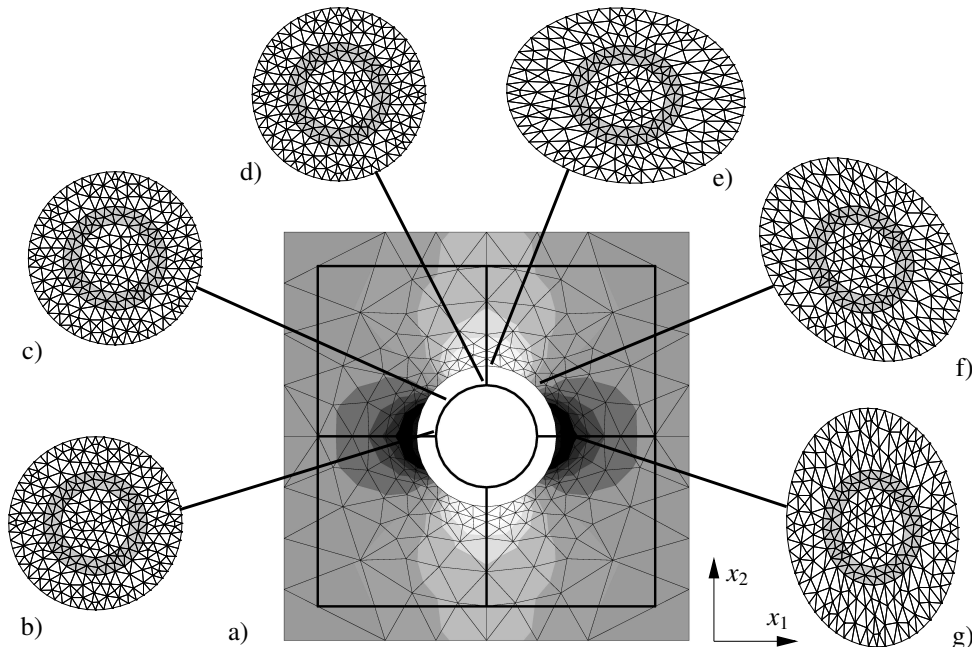
**Abbildung 39:** Makroskopische Spannungs-Verzerrungs-Beziehungen bei linearen Verschiebungen, homogenen Spannungen und periodischen Verschiebungen auf dem Rand der Mikrostruktur aus [Abb. 38](#) im a) Zugtest und im b) einfachen Schertest.

sich der Schrankencharakter für lineare Randverschiebungen und homogene Randspannungen auf natürliche Weise. Der Schrankencharakter wird auch von den deformierten Konfigurationen der Mikrostruktur wiedergegeben. Bei linearen Randverschiebungen treten die kleinsten, bei homogenen Randspannungen die größten Verformungen auf. Periodische Randbedingungen induzieren ein dazwischenliegendes Materialverhalten. Dies wird insbesondere an der Verteilung der äquivalent plastischen Verzerrungen in [Abb. 38d–f](#) deutlich. Die Materialantwort von steif nach weich infolge der unterschiedlichen Randbedingungen im  $\mathcal{RVE}$  ist dort durch zunehmende Ausbildung plastischer Zonen charakterisiert.

## 6.4. Mehrskalenanalyse

Der Mikro-Makro-Übergang erfolgt hier am Beispiel eines nichtlinear elastischen mikroheterogenen Verbundmaterials. Das Modellproblem ist aus MIEHE, KOCH & BAYREUTHER [109] entnommen. Die Makrostruktur des Komposits mit den Abmessungen  $1 \times 1$  ist in der Mitte von einem Loch mit Durchmesser 0,3 durchbrochen. Sie wird mit 100 dreiknotigen Finite Elementen diskretisiert und anschließend im ebenen Verzerrungszustand äquibiaxial um 20% seiner Seitenlänge gedehnt. Das konstitutive Materialverhalten der Makrostruktur wird in jedem Gaußpunkt von der dort jeweils angehängten transversal isotropen Mikrostruktur beschrieben, deren Materialverhalten von der nichtlinearen Energiefunktion in Punkt 2 der [Box 11](#) festgelegt

wird. Als Mikrostruktur wird ein kreisrunder Teilbereich eines Matrixmaterials betrachtet, in dem ein steifer zylindrischer Einschuß eingebettet ist. Das Verhältnis der Radien von  $\mathcal{RVE}$  zu Einschuß beträgt  $0,6/0,4$ . Die Materialkennwerte der Matrix sind  $\kappa = 17,5$ ,  $\mu = 8$  und die der Einschlüsse  $\kappa = 1750$ ,  $\mu = 800$ . Die Topologie der Mikrostruktur wird mit 500 dreiknotigen Finite Elementen aufgelöst. In [Abb. 40a](#) ist die deformierte Konfiguration der Makrostruktur und



**Abbildung 40:** Numerische Mikro-Makro-Simulation eines Kompressionstests an einem nichtlinear elastischen Komposit bei Annahme linearer Verschiebungen an den Rändern der angehängten Mikrostrukturen. a) Unverformte und deformierte Makrostruktur mit  $\bar{\sigma}_{11}$ -Spannungsverteilung. Von der Makrostruktur wurde aus Symmetriegründen nur ein Viertelbereich diskretisiert. Die ursprünglichen Umrißlinien sind dick eingezeichnet. b)–d) Jungfräuliche und e)–f) deformierte Mikrostrukturen, aufgelöst an jeweils drei verschiedenen Punkten in Lochnähe der Makrostruktur.

deren jungfräuliche Kontur dargestellt. In [Abb. 40b–d](#) werden in Lochnähe die undeformierten Mikrostrukturen an drei ausgewählten makroskopischen Punkten aufgelöst. Die transversal isotrope Topologie der Mikrostruktur hat unter makroskopisch äquibiaxialer Dehnung zur Folge, daß sich die aufgelösten  $\mathcal{RVE}$ s der [Abb. 40e–g](#) in Lochnähe in Richtung der Spannungstrajektorien gleichermaßen verformen. In diesem Beispiel liefern lineare Verschiebungen und homogene Spannungen auf dem Rand der  $\mathcal{RVE}$ s annähernd identische effektive Spannungsantwort. Dies dokumentieren u.a. die Maximalwerte der effektiven Spannungen in [Tab. 10](#). Das gewählte  $\mathcal{RVE}$  ist hier bei einer statistisch homogenen Verteilung der Einschlüsse groß genug, um annähernd objektive effektive Spannungsantwort zu induzieren.

**Tabelle 10:** Effektive Spannungen des zweiskaligen elastischen Komposits.

	Max $\bar{\sigma}_{11}$	Max $\bar{\sigma}_{22}$	Max $\bar{\sigma}_{12}$
FEM(D)	11,08	11,71	-4,77
FEM(S)	10,53	11,10	-4,53



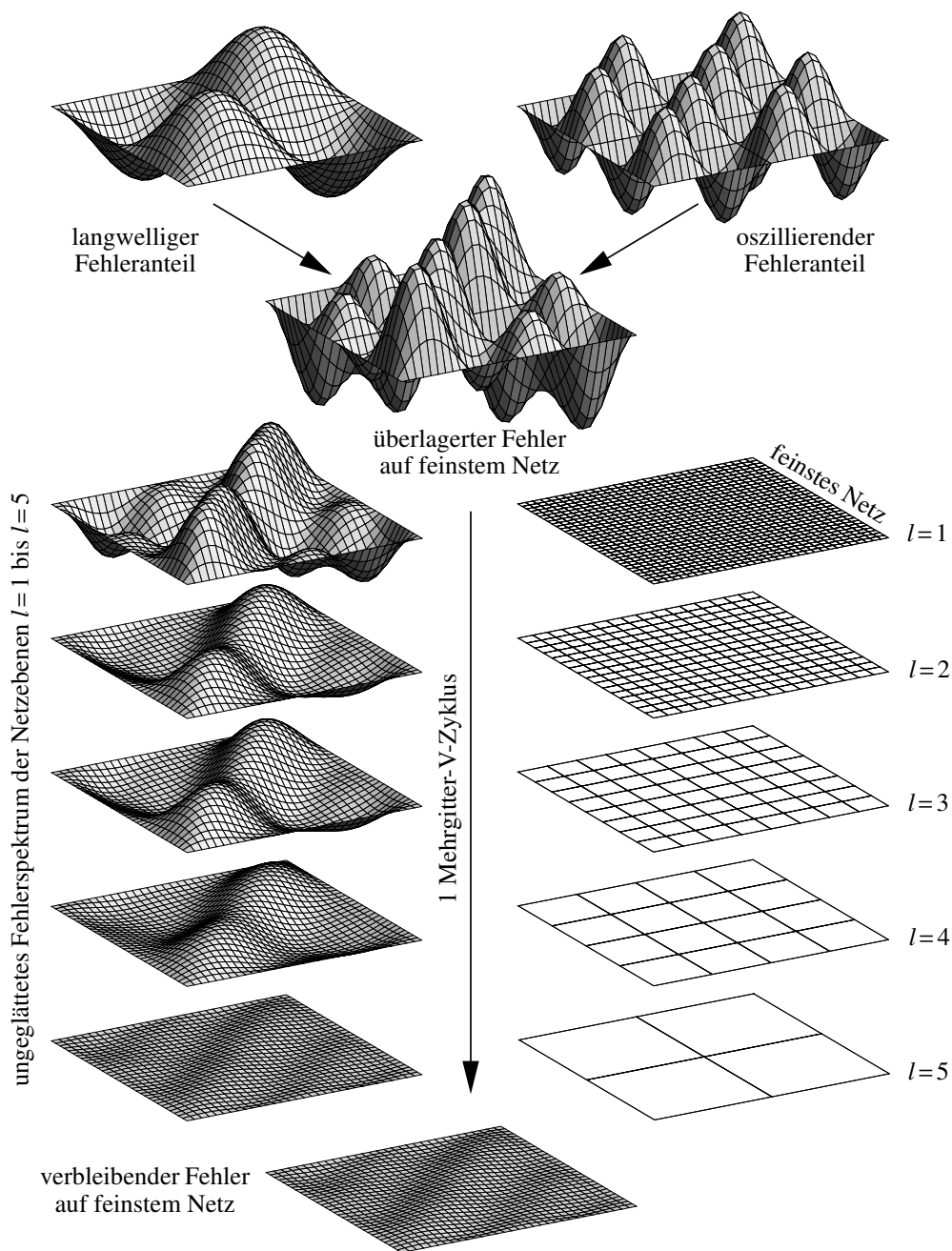
## IV

# Mehrgitterverfahren

Mehrgitterverfahren sind effiziente Methoden zur iterativen Lösung großer schwach besetzter Gleichungssysteme, wie sie bei Finite Elementdiskretisierungen komplexer Randwertprobleme in der Festkörpermechanik auftreten können. Die grundlegende Mehrgitteridee besteht darin, den Iterationsfehler der feinsten Diskretisierung auf größeren Gitterebenen aufzulösen und dort mit klassischen Iterationsverfahren zu eliminieren. Langwellige Fehleranteile einer feinen Diskretisierung sind in einem groben Gitterraster oszillierend. Beim Lösungsprozeß ist dieser Effekt ganz entscheidend, da klassische Iterationsverfahren, wie das Gauß-Seidel- oder Jacobi-Verfahren, vornehmlich oszillierende Fehleranteile glätten. Die frequenzfilternde Wirkung des Mehrgitters ist vergleichbar mit der in WITTUM [175] und WAGNER & WITTUM [162] favorisierten Frequenzfiltermethode. Die Glättungseigenschaft des Mehrgitters wird in Abb. 41 aufgezeigt. Auf Gitterebene  $l = 1$  wird der oszillierende Fehleranteil weitgehend eliminiert, wohingegen der langwellige erhalten bleibt. Letzterer wird erst im groben Raster der Ebenen  $l = 4, 5$  gelöscht. Grundlagen zur Mehrgitteridee und fundamentale Algorithmen sind in BASTIAN, HACKBUSCH & WITTUM [6], BRAESS [22], BRANDT [28, 29], BRIGGS, HENSON & McCORMICK [32], HAASE & LANGER [58], HACKBUSCH [59], HEMKER [72], TROTTENBERG, OOSTERLEE & SCHÜLLER [154], WAGNER [159], WESSELING [169] und in dort enthaltenen Referenzen zu finden. Für Anwendungen in der Festkörpermechanik siehe WIENERS [171] und WRIGGERS & BOERSMA [176].

Ein entscheidender Punkt für die Effizienz der fehlerglättenden Wirkung und damit für die Konvergenz des Mehrgitterverfahrens liegt in der Konstruktion geeigneter Transferoperatoren. Transferoperatoren können als geometrische oder algebraische Objekte elementar klassifiziert werden. Geometrische Transferoperatoren basieren auf einer geometrischen Vergrößerung eines regulären hierarchischen Gitters. Klassische Ansätze hierzu sind DENDY [40], DE ZEEUW [42] und darin enthaltenen Referenzen zu entnehmen. Einen generellen Zugang zur Lösung von Randwertproblemen bieten algebraische Verfahren, bei denen Transferoperatoren algebraisch auf Basis der Feingittermatrix konstruiert werden. Hier haben sich die von RUGE & STÜBEN [138] und VAŇEK, MANDEL & BREZINA [156, 157] entwickelten Ansätze als Standard-Verfahren durchgesetzt. In BRAESS [21] wird ein neueres algebraisches Modell für einfache Gebietsdiskretisierungen vorgestellt. Bei Modellproblemen mit oszillierenden Koeffizienten haben algebraisch gebildete Transferoperatoren in der Regel Schwierigkeiten, Wechselwirkungen zwischen physikalisch unterschiedlichen Teilbereichen zu erfassen. Dies ist begründet in der Weise, wie Gitterpunkte zu Aggregaten zusammengefaßt werden, in denen anschließend der Transfer lokal gebildet wird. Kopplungen zwischen Knoten mit stark unterschiedlichen Koeffizienten werden hier in der Regel vernachlässigt. Ein aktuelles Forschungsinteresse bei derartigen Problemstellungen besteht daher in der Kopplung des Gittertransfers mit Homogenisierungstechniken. Dies ist Gegenstand der Entwicklungen in diesem Kapitel. Der Grundgedanke ist, das Zweigitterverfahren als abstraktes Zweiskalenmodell aufzufassen. Der Gittertransfer vom Fein- zum Grobgitter wird in diesem Kontext als Homogenisierung und umgekehrt als Lokalisierung aufgefaßt. Die Transferoperatoren werden lokal auf geometrisch wohl definierten diskreten Teilgebieten generiert, die sich bei vorhandener Grobgitterhierarchie auf natürliche Weise aus der Struktur der Grobgitter ergeben. In diesen Teilbereichen wird lokal ein diskretes Mikro-Makro-Variationsfunktional postuliert, dessen Umsetzung die Lösung eines Randwertproblems erfordert. In Verbindung





**Abbildung 41:** Fehlerglättung in einem Mehrgitter-V-Zyklus am Beispiel einer aus einem langwelligem und einem oszillierenden Fehlermode bestehenden Fehlerverteilung auf dem feinsten Netz  $l=1$ . Optimale Glättung des oszillierenden Fehlerspektrums auf dem feinsten Netz. Effektive Glättung des langwelligem Fehlers erfolgt erst bei grober Netzauflösung auf den Netzebenen  $l=4$  und  $l=5$ .

mit (i) linearen oder (ii) periodischen Verschiebungen oder (iii) homogenen Spannungen als Randbedingungen liefert das Variationsfunktional schließlich einen Zusammenhang zwischen diskreten Grob- und Feingitterparametern, der zur Konstruktion der neuen Transferoperatoren fundamental ist. Die neuen Transferkonzepte werden im Detail beschrieben und hinsichtlich Effizienz und Anwendungsgrenzen im Rahmen einiger Modellbeispiele mit bekannten Transferstrategien, der Injektion, dem geometrischen Transfer, dem Schur-Komplement assoziierten, dem glättungsbasierten und dem algebraischen Transfer, verglichen.



# 1. Grundlagen und Eigenschaften des Mehrgitterverfahrens

In diesem Abschnitt werden zunächst algorithmische Grundstrukturen und elementare Eigenschaften des linearen Mehrgitterverfahrens behandelt. Sie werden zum Grundverständnis nachfolgender Abschnitte vorausgesetzt. Die Inhalte basieren auf der im Vorspann genannten Basisliteratur. Am Ende des Abschnitts wird ein für die anstehende Problemklasse geeigneter nicht-linearer Mehrgitteralgorithmus vorgestellt.

## 1.1. Algorithmische Struktur, Klassifizierung von Mehrgittermethoden

### 1.1.1. Algorithmische Struktur

Gegenstand dieses Abschnitts ist die algorithmische Durchdringung und Konzeption des linearen Mehrgitterverfahrens. Hierzu wird a priori eine Netzhierarchie  $l = 1, \dots, L$  angenommen mit feinstem Gitter  $l = 1$ , auf dem das Randwertproblem diskretisiert und gelöst wird. Die Mehrgitteridee wurde in den Anfängen auf Finite Differenzenmethoden angewandt, woraus sich die in der Finite Elementmethode unübliche Bezeichnung Gitter erklärt. Das auf dem feinsten Gitter infolge Linearisierung entstehende lineare Gleichungssystem

$$\mathbf{K}^l \mathbf{d}^l = \mathbf{f}^l \quad \text{mit } l = 1 \tag{IV.1.1}$$

stellt das Feingitterproblem dar. Man nennt allgemein  $\mathbf{K}^l \in \mathcal{R}^{n_l \times n_l}$  Gittermatrizen,  $\mathbf{d}^l \in \mathcal{R}^{n_l}$  und  $\mathbf{f}^l \in \mathcal{R}^{n_l}$  sind Lösungsvektoren und rechte Seiten der Gitterebenen  $1 \leq l \leq L$  mit  $n_l$  Unbekannten. Die iterative Lösung von (IV.1.1) mit dem Zweigitterverfahren lautet in Fixpunktform

$$\mathbf{d}^1 := \mathbf{d}^1 + \mathbf{Z} \mathbf{r}^1 \tag{IV.1.2}$$

worin  $\mathbf{r}^1 = \mathbf{f}^1 - \mathbf{K}^1 \mathbf{d}^1$  der Defekt des Feingitters und  $\mathbf{Z}$  der Zweigitteroperator ist. Der Lösungsvorgang mit dem Zweigitterverfahren läßt sich wie folgt algorithmisch gliedern: (i) Berechne den Defekt  $\mathbf{r}^1 = \mathbf{f}^1 - \mathbf{K}^1 \mathbf{d}^1$ , (ii) führe einen Zweigitterzyklus  $\Delta \mathbf{d}^1 := \mathbf{Z} \mathbf{r}^1$  durch und

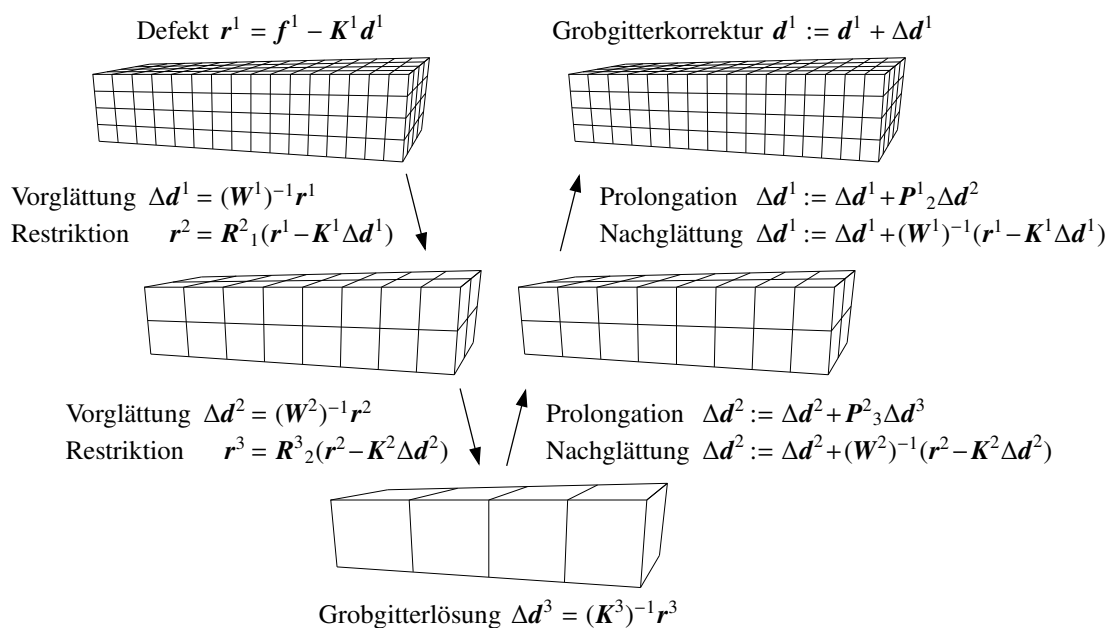


Abbildung 42: Ein V(1, 1)-Zyklus mit drei Gitterebenen.

(iii) aktualisiere den Feingittervektor  $\mathbf{d}^1 := \mathbf{d}^1 + \Delta\mathbf{d}^1$ . Der Zweigitterzyklus wiederum enthält eine (i) Vorglättung, (ii) Grobgitterkorrektur und (iii) Nachglättung des Feingittervektors  $\Delta\mathbf{d}^1$ . Aufgabe der Vorglättung ist, den oszillierenden Fehleranteil in  $\Delta\mathbf{d}^1$  auf dem Feingitter zu eliminieren. Die Vorglättung von  $\Delta\mathbf{d}^1$  erfolgt mit Startwert  $\Delta\mathbf{d}^1 = \mathbf{0}$  innerhalb von  $\nu_1$  Schritten

$$\Delta\mathbf{d}^1 := \Delta\mathbf{d}^1 + (\mathbf{W}_{\text{vor}}^1)^{-1} \mathbf{r}^1 \quad (\text{IV.1.3})$$

mit Iterationsmatrix  $\mathbf{W}_{\text{vor}}^1$ . Typische Glätter sind das gedämpfte Jacobi- und das Gauß-Seidel-Verfahren. Der langwellige Fehleranteil in  $\Delta\mathbf{d}^1$ , der bei Vorglättung weitgehend erhalten bleibt, wird in einer anschließenden Grobgitterkorrektur auf dem Grobgitter approximiert. Für den Gitterübergang von Variablen müssen Transferoperatoren bereitgestellt werden. Der Prolongationsoperator  $\mathbf{P}^1_2 \in \mathcal{R}^{n_1 \times n_2}$  und der Restriktionsoperator  $\mathbf{R}^2_1 \in \mathcal{R}^{n_2 \times n_1}$  definieren die Abbildungen zwischen dem Fein- und Grobgitteransatzraum  $\mathcal{S}^1$  und  $\mathcal{S}^2$  in der Form

$$\mathbf{P}^1_2 : \mathcal{S}^2 \rightarrow \mathcal{S}^1 \quad \text{und} \quad \mathbf{R}^2_1 : \mathcal{S}^1 \rightarrow \mathcal{S}^2 \quad (\text{IV.1.4})$$

Bei symmetrischer Matrix  $\mathbf{K}^1$  geht die Grobgitterkorrektur aus der Minimierung des quadratischen Defektpotentials  $\frac{1}{2} \mathbf{v}^T \mathbf{K}^1 \mathbf{v} - \mathbf{v}^T \mathbf{f}^1$  mit  $\mathbf{v} = \Delta\mathbf{d}^1 + \mathbf{P}^1_2 \Delta\mathbf{d}^2$  bezüglich der Grobgitterlösung  $\Delta\mathbf{d}^2$  hervor. Erste Variation des Potentials führt auf das Grobgittersystem

$$\mathbf{K}^2 \Delta\mathbf{d}^2 = \mathbf{r}^2 \quad (\text{IV.1.5})$$

der Form (IV.1.1), welches direkt gelöst wird. Hier sind  $\mathbf{K}^2 \in \mathcal{R}^{n_2 \times n_2}$  die Matrixdarstellung des Grobgitteroperators in der Galerkin-Darstellung  $\mathbf{K}^2 = \mathbf{R}^2_1 \mathbf{K}^1 \mathbf{P}^1_2$  und  $\mathbf{r}^2 \in \mathcal{R}^{n_2}$  der restringierte Defekt  $\mathbf{r}^2 = \mathbf{R}^2_1 (\mathbf{f}^1 - \mathbf{K}^1 \Delta\mathbf{d}^1)$ . Da  $\mathbf{K}^1$  und damit auch  $\mathbf{K}^2$  symmetrische Matrizen sind, muß  $\mathbf{R}^2_1 = (\mathbf{P}^1_2)^T$  sein. Die Transferoperatoren werden in diesem Kontext auch Galerkin-Operatoren

**Box 14:** Iterativer Lösungsalgorithmus  $\text{Iter}(\mathbf{d}^1, \mathbf{f}^1)$ .

Löse das Gleichungssystem  $\mathbf{K}^1 \mathbf{d}^1 = \mathbf{f}^1$  der feinsten Gitterebene  $l = 1$

**I) Standard-Mehrgitterverfahren**

$$\mathbf{d}^1 = \mathbf{0}$$

$$\mathbf{r}^1 = \mathbf{f}^1$$

$$\text{tol} = \theta \|\mathbf{r}^1\| \quad \dots \quad \text{Initialisierungen}$$

Falls  $\|\mathbf{r}^1\| \geq \text{tol}$  dann

$$\text{MG}(\Delta\mathbf{d}^1, \mathbf{r}^1) \quad \dots \quad \text{Mehrgitteriteration}$$

$$\mathbf{d}^1 := \mathbf{d}^1 + \Delta\mathbf{d}^1 \quad \dots \quad \text{Aktualisiere Lösungsvektor}$$

$$\mathbf{r}^1 := \mathbf{r}^1 - \mathbf{K}^1 \Delta\mathbf{d}^1 \quad \dots \quad \text{Residuum}$$

Ende

**II) CG-Konvergenzbeschleunigung**

$$\text{CG}(\mathbf{d}^1, \mathbf{f}^1) \quad \dots \quad \text{Mehrgitter-vorkonditioniertes CG-Verfahren}$$

**Box 15:** Standard-Mehrgitteralgorithmus  $\text{MG}(\mathbf{d}^l, \mathbf{r}^l)|_{l=1\dots L}$ .

Falls $l = L$ dann		
$\tilde{\mathbf{L}}\mathbf{c} = \mathbf{r}^L \Rightarrow \mathbf{c}$	...	Vorwärtseinsetzen ( $\mathbf{K}^L = \tilde{\mathbf{L}}\tilde{\mathbf{L}}^T$ )
$\tilde{\mathbf{L}}^T \mathbf{d}^L = \mathbf{c} \Rightarrow \mathbf{d}^L$	...	Rückwärtseinsetzen
sonst		
$\mathbf{d}^l = \mathbf{0}$	...	Initialisierung
$\nu_1$ -mal $\text{G}_{\text{vor}}(\mathbf{d}^l, \mathbf{r}^l)$	...	Vorglättung
$\mathbf{r}^{l+1} = \mathbf{R}^{l+1}_l(\mathbf{r}^l - \mathbf{K}^l \mathbf{d}^l)$	...	Restringierter Defekt
$\gamma$ -mal $\text{MG}(\mathbf{d}^{l+1}, \mathbf{r}^{l+1})$	...	Grobitterkorrektur
$\mathbf{d}^l := \mathbf{d}^l + \tau \mathbf{P}^l_{l+1} \mathbf{d}^{l+1}$	...	Aktualisierung
$\nu_2$ -mal $\text{G}_{\text{nach}}(\mathbf{d}^l, \mathbf{r}^l)$	...	Nachglättung
Ende		

genannt. Bei unsymmetrischen Gittermatrizen sind die Transferoperatoren nicht zueinander transponiert. Das Grobgitterproblem (IV.1.5) liefert mit

$$\Delta \mathbf{d}^1 := \Delta \mathbf{d}^1 + \mathbf{P}^1_2 \Delta \mathbf{d}^2 \quad (\text{IV.1.6})$$

eine Korrektur des Feingittervektors, der im Anschluß  $\nu_2$ -mal gemäß

$$\Delta \mathbf{d}^1 := \Delta \mathbf{d}^1 + (\mathbf{W}^1_{\text{nach}})^{-1} \mathbf{r}^1 \quad (\text{IV.1.7})$$

mit Iterationsmatrix  $\mathbf{W}^1_{\text{nach}}$  nachgeglättet wird. Der Zweigitteralgorithmus wird solange wiederholt, bis Konvergenz innerhalb einer gewünschten Toleranz erzielt wird. Das Grobgittersystem (IV.1.5) kann mit einem weiteren Zweigitterverfahren iterativ gelöst werden. Mit  $\mathbf{W}^l_{\text{vor}} = \mathbf{W}^l_{\text{nach}} = \mathbf{W}^l$  für  $l = 1, 2$  erhält man auf diese Weise die algorithmische Struktur des Dreigitterverfahrens in Abb. 42. Setzt man die geschachtelte Anordnung von Zweigitterverfahren weiter fort, erhält man als lineares Mehrgitterverfahren in Box 14 die rekursive Zweigitterstruktur der Box 15, bei der das Gleichungssystem der größten Gitterebene  $L$  direkt gelöst wird. Prolongationsoperator  $\mathbf{P}^l_{l+1} \in \mathcal{S}^{l \times (l+1)}$  und Restriktionsoperator  $\mathbf{R}^{l+1}_l \in \mathcal{S}^{(l+1) \times l}$  der Gitterebene  $1 \leq l < L$  definieren dort die Abbildungen

$$\mathbf{P}^l_{l+1} : \mathcal{S}^{l+1} \rightarrow \mathcal{S}^l \quad \text{und} \quad \mathbf{R}^{l+1}_l : \mathcal{S}^l \rightarrow \mathcal{S}^{l+1} \quad (\text{IV.1.8})$$

Grobitteroperator und restringierter Defekt der Gitterebene  $1 \leq l < L$  ergeben sich in vollständiger Analogie zum Zweigitterverfahren als

$$\mathbf{K}^{l+1} = \mathbf{R}^{l+1}_l \mathbf{K}^l \mathbf{P}^l_{l+1} \quad \text{und} \quad \mathbf{r}^{l+1} = \mathbf{R}^{l+1}_l (\mathbf{r}^l - \mathbf{K}^l \Delta \mathbf{d}^l) \quad (\text{IV.1.9})$$

Als Vorglättter wird in dieser Arbeit Block-Rückwärts-Gauß-Seidel

$$\text{G}_{\text{vor}}(\mathbf{d}^l, \mathbf{f}^l) : \quad \mathbf{d}_i^{l(m+1)} = (\mathbf{K}^l_{ii})^{-1} \left( \mathbf{r}_i^l - \sum_{j=1}^{i-1} \mathbf{K}^l_{ij} \mathbf{d}_j^{l(m)} - \sum_{j=i+1}^{N_l} \mathbf{K}^l_{ij} \mathbf{d}_j^{l(m+1)} \right) \quad (\text{IV.1.10})$$

**Box 16:** Mit Mehrgitter vorkonditioniertes CG-Verfahren  $\text{CG}(\mathbf{d}^1, \mathbf{r}^1)$ .

$\mathbf{d}^1 = \mathbf{g} = \mathbf{0}$	
$\text{tol} = \theta \ \mathbf{r}^1\ $	
$\xi_0 = 1$	... Initialisierungen
Falls $\ \mathbf{r}^1\  \geq \text{tol}$ dann	
$\text{MG}(\Delta \mathbf{d}^1, \mathbf{r}^1)$	... Mehrgitter-Vorkonditionierung
$\xi_1 = \mathbf{r}^{1T} \Delta \mathbf{d}^1$	
$\mathbf{g} := \Delta \mathbf{d}^1 + \mathbf{g} \xi_1 / \xi_0$	... CG-Richtung
$\xi_0 = \xi_1$	
$\mathbf{z} = \mathbf{K}^1 \mathbf{g}$	
$q = \xi_0 / (\mathbf{g}^T \mathbf{z})$	... Schrittweite
$\mathbf{d}^1 := \mathbf{d}^1 + q \mathbf{g}$	... Aktualisierung
$\mathbf{r}^1 := \mathbf{r}^1 - q \mathbf{z}$	... Residuum
Ende	

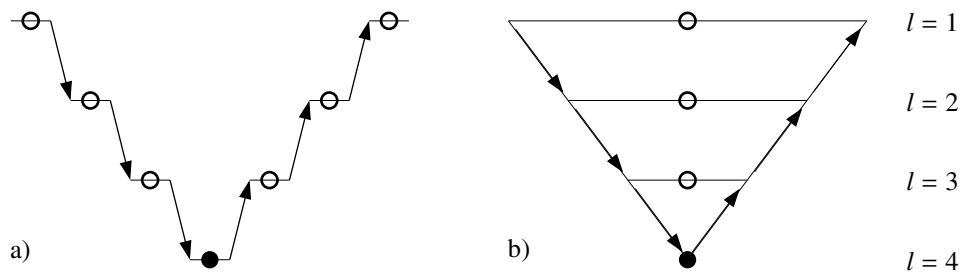
mit Knotenindex  $i = N_l, \dots, 1$  und als Nachglätter Block-Vorwärts-Gauß-Seidel

$$\mathbf{G}_{\text{nach}}(\mathbf{d}^l, \mathbf{f}^l) : \quad \mathbf{d}_i^{l(m+1)} = (\mathbf{K}_{ii}^l)^{-1} \left( \mathbf{r}_i^l - \sum_{j=1}^{i-1} \mathbf{K}_{ij}^l \mathbf{d}_j^{l(m+1)} - \sum_{j=i+1}^{N_l} \mathbf{K}_{ij}^l \mathbf{d}_j^{l(m)} \right) \quad (\text{IV.1.11})$$

mit Knotenindex  $i = 1, \dots, N_l$  verwendet.  $N_l$  ist die Anzahl von Gitterpunkten auf Gitterebene  $l$ . In [Box 15](#) kann mit dem Parameter  $\gamma$  die Zyklenform des Mehrgitterverfahrens und mit  $\tau$  die Schrittweite der Grobgitterkorrektur gesteuert werden. Für  $\gamma = 1$  erhält man einen sogenannten  $V$ -Zyklus, für  $\gamma = 2$  einen sogenannten  $W$ -Zyklus. Siehe in diesem Zusammenhang [Abschnitt 1.1.2](#). Für  $\tau$  wird in dieser Arbeit  $\tau = 1$  gewählt. In Kombination mit einer Krylov-Methode, wie beispielsweise dem CG-Verfahren, läßt sich die Mehrgitterkonvergenz erheblich steigern. In [Box 14](#) ist hierzu die CG-beschleunigte Variante von [Box 16](#) zu wählen. Der Mehrgitterzyklus agiert hier als Vorkonditionierer. Er liefert im  $k$ ten CG-Schritt die neue Relaxationsrichtung der Form  $\mathbf{g}_k = \Delta \mathbf{d}^1 + e \mathbf{g}_{k-1}$ , die zur alten Richtung  $\mathbf{g}_{k-1}$   $\mathbf{K}^1$ -konjugiert ist. Den Schrittweitenparameter  $q$  erhält man aus der Minimierung des quadratischen Defektpotentials  $\frac{1}{2} \mathbf{w}^T \mathbf{K}^1 \mathbf{w} - \mathbf{w}^T \mathbf{r}^1$  mit  $\mathbf{w} = \mathbf{d}^1 + q \mathbf{g}_k$  bezüglich  $q$ . Voraussetzung für eine effiziente Anwendung des CG-Verfahrens ist, daß der Mehrgitteroperator symmetrisch ist. Dies ist genau der Fall, wenn  $\mathbf{K}^l = (\mathbf{K}^l)^T$ , die Iterationsmatrizen  $\mathbf{W}_{\text{vor}}^l$  und  $\mathbf{W}_{\text{nach}}^l$  zueinander transponiert sind und Vor- und Nachglättung in gleich vielen Schritten  $\nu = \nu_1 = \nu_2$  erfolgt.

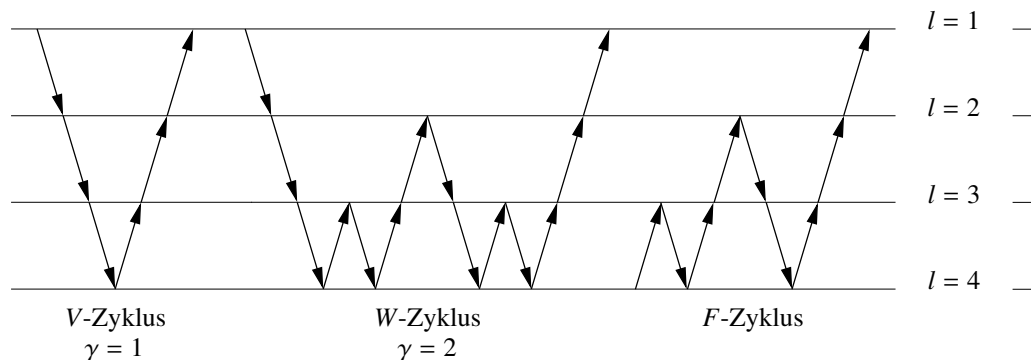
### 1.1.2. Klassifizierung von Mehrgittermethoden

BASTIAN, HACKBUSCH & WITTUM [6] folgend differenziert man zwischen einem multiplikativen und einem additiven Mehrgitterkonzept. Beide Konzepte werden in [Abb. 43](#) am Beispiel eines Viergitterverfahrens schematisiert. Beim multiplikativen Verfahren werden Glättung und Restriktion des Defekts von Gitterebene zu Gitterebene sequentiell ausgeführt. Beim additiven Verfahren wird der Defekt der feinsten Gitterebene zuerst auf alle Gitterebenen restringiert, danach wird auf allen Ebenen parallel geglättet. Die Prolongation der Grobgitterlösungen erfolgt



**Abbildung 43:** Mehrgitterkonzepte: a) Multiplikativer Zyklus, bei dem sequentiell geglättet (○) und restringiert ( $\searrow$ ) oder prolongiert ( $\nearrow$ ) wird. Exakte Grobgitterlösung erfolgt auf größtem Gitter (●). b) Additiver Zyklus, bei dem Glättung parallelisiert wird.

bei beiden Verfahren sequentiell. Das additive ist dem multiplikativen Verfahren auf seriellen Rechnern unterlegen, ist dafür aber für Parallelrechner hervorragend geeignet. Bei der additiven Methode ist das auf den Grobgittern diskret aufgelöste Fehlerspektrum des Feingitters zu dämpfen. Ohne Vorglättung erfolgt hier keine effektive Fehlerfrequenzfilterung wie beim multiplikativen Verfahren, weshalb auf den Grobgittern anstelle der klassischen Glätter i.a. ein CG-Verfahren eingesetzt wird. Mehrgitteralgorithmen lassen sich ferner nach der Zyklusform klassifizieren. In der Literatur sind der V- und W-Zyklus sowie hybride Formen davon weit verbreitet. Der F-Zyklus wird im Kontext einer adaptiven Mehrgitterstrategie, wie beispielsweise der Voll-Mehrgittermethode (FMG), verwendet. Die Bezeichnung der Zyklen mit V oder W ist geometrisch begründet. Abb. 44 gibt darüber Aufschluß. Die Pfeile zeigen die Reihenfolge an,



**Abbildung 44:** V-, W- und F-Zyklus am Beispiel eines Viergitterverfahrens.

wie Gitterebenen durchlaufen werden. In Pfeilrichtung liest sich der V-Zyklus wie ein V und der W-Zyklus erhält die Form des Buchstaben W. Das F in F-Zyklus hat seinen Ursprung in der englischen Bezeichnung Full-Multigrid-Methode für Voll-Mehrgittermethode. In einer adaptiven Mehrgitterstrategie startet der F-Zyklus auf dem größten Gitter und errechnet sich eine Startlösung für das nächstfeinere Gitter. Der mit dem W-Zyklus verbundene numerische Aufwand ist mit  $\gamma=2$  höher als beim V-Zyklus ( $\gamma=1$ ). Der W-Zyklus ist jedoch robuster und führt auf bessere Konvergenzraten als der V-Zyklus. In der Literatur ist für den V-Zyklus häufig die Notation  $V(m, n)$  gebräuchlich. Die Parameter in Klammern zeigen an, daß auf jeder Gitterebene  $m$ -mal vor- und  $n$ -mal nachgeglättet wird. Die Bezeichnung ist auch für den W- und F-Zyklus üblich. Für Konvergenzstudien kommt in dieser Arbeit ausschließlich ein multiplikatives Mehrgitterverfahren mit  $V(3, 3)$ -Zyklen zum Einsatz.

## 1.2. Algebraische Eigenschaften des Mehrgitterverfahrens

Für die Effizienz des Mehrgitterverfahrens ist entscheidend, daß der Iterationsfehler auf groben Gitterebenen möglichst genau approximiert wird. Zu beachten ist, daß das Gitter in Richtung des oszillierenden Fehlers nicht unnötig vergrößert, wohingegen der langwellige Fehler auch mit weniger Gitterpunkten aufgelöst werden kann. Falsche Gittervergrößerung kann beispielsweise dazu führen, daß der oszillierende Fehler nicht aufgelöst und vom Glätter nicht eliminiert werden kann. Die Kenntnis um die Fehlerverteilung bedingt die Definition eines algebraisch glatten Fehlers. Es werden typische Gittermatrizen betrachtet, bei denen mit Hilfe der Einträge auf die Verteilung des lang- und kurzwelligen Fehlers im Gitter geschlossen werden kann. Dies ist insbesondere bei algebraischen Mehrgittermethoden von Bedeutung, um starke Kopplungen zwischen Gitterpunkten zu erkennen. Im zweiten Subabschnitt wird ein algebraisches Maß für das Glättungsverhalten des Zweigitterverfahrens angegeben, in dem neben der Glättungseigenschaft des Glätters auch die Filtereigenschaft der Grobgitterkorrektur berücksichtigt wird. Im Folgenden sei  $\langle \cdot, \cdot \rangle$  das Euklidische Vektorprodukt und  $\| \cdot \| = \langle \cdot, \cdot \rangle^{1/2}$  die Euklidische Vektornorm. Speziell sei  $\| \mathbf{u}, \mathbf{v} \|_0^2 := \langle \mathbf{D}\mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle$ ,  $\| \mathbf{u}, \mathbf{v} \|_1^2 := \langle \mathbf{K}\mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle$  und  $\| \mathbf{u}, \mathbf{v} \|_2^2 := \langle \mathbf{D}^{-1}\mathbf{K}\mathbf{u}, \mathbf{K}\mathbf{v} \rangle$  mit Gittermatrix  $\mathbf{K}$  und Diagonalmatrix  $\mathbf{D} = \text{diag}(\mathbf{K})$ .  $\rho(\mathbf{K})$  ist Spektralradius von  $\mathbf{K}$ .

### 1.2.1. Algebraisch glatter Fehler und Knotenkopplungen

Ein algebraisch glatter Fehler  $\mathbf{e}$  läßt sich mit einem klassischen Iterationsverfahren der Form  $\mathbf{S} = \mathbf{I} - \mathbf{W}^{-1}\mathbf{K}$  mit Einheitsmatrix  $\mathbf{I}$  nur unwesentlich relaxieren, d.h.

$$\| \mathbf{S}\mathbf{e} \|_1 \approx \| \mathbf{e} \|_1 \quad (\text{IV.1.12})$$

Für die Energienorm des geglätteten Fehlers gilt

$$\| \mathbf{S}\mathbf{e} \|_1^2 = \| \mathbf{e} \|_1^2 - \langle (\mathbf{W} + \mathbf{W}^T - \mathbf{K})\mathbf{W}^{-1}\mathbf{K}\mathbf{e}, \mathbf{W}^{-1}\mathbf{K}\mathbf{e} \rangle \quad (\text{IV.1.13})$$

Das Skalarprodukt auf der rechten Seite läßt sich mit geeigneter Konstante  $\alpha > 0$  durch  $\alpha \| \mathbf{e} \|_2^2$  nach unten so einschränken, daß

$$\| \mathbf{S}\mathbf{e} \|_1^2 \leq \| \mathbf{e} \|_1^2 - \alpha \| \mathbf{e} \|_2^2 \quad (\text{IV.1.14})$$

Für einen algebraisch glatten Fehler  $\mathbf{e}$  schließt man aus einem Vergleich von (IV.1.14) mit (IV.1.12) unmittelbar auf  $\| \mathbf{e} \|_2 \ll \| \mathbf{e} \|_1$ . Für die erste Norm auf der rechten Seite der Ungleichung (IV.1.14) findet man die Abschätzung

$$\begin{aligned} \| \mathbf{e} \|_1^2 &= \langle \mathbf{K}\mathbf{e}, \mathbf{e} \rangle \\ &= \langle \mathbf{D}^{-\frac{1}{2}}\mathbf{K}\mathbf{e}, \mathbf{D}^{\frac{1}{2}}\mathbf{e} \rangle \\ &\leq \| \mathbf{D}^{-\frac{1}{2}}\mathbf{K}\mathbf{e} \| \| \mathbf{D}^{\frac{1}{2}}\mathbf{e} \| \\ &= \| \mathbf{e} \|_2 \| \mathbf{e} \|_0 \end{aligned} \quad (\text{IV.1.15})$$

Zusammen mit  $\| \mathbf{e} \|_2 \ll \| \mathbf{e} \|_1$  ergibt sich  $\| \mathbf{e} \|_1 \ll \| \mathbf{e} \|_0$ . In Indexnotation schreibt sich (IV.1.15) als

$$\begin{aligned} \| \mathbf{e} \|_1^2 &= \langle \mathbf{K}\mathbf{e}, \mathbf{e} \rangle \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} -K_{ij}(e_i - e_j)^2 + \frac{1}{2} \sum_{i,j} K_{ij}e_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{i,j} K_{ij}e_j^2 \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} -K_{ij}(e_i - e_j)^2 + \sum_i \left( \sum_j K_{ij} \right) e_i^2 \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} -K_{ij}(e_i - e_j)^2 + \sum_i s_i e_i^2 \ll \sum_i K_{ii} e_i^2 = \| \mathbf{e} \|_0^2 \end{aligned} \quad (\text{IV.1.16})$$

mit Zeilensumme  $s_i = \sum_j K_{ij}$ . Aus (IV.1.16) lassen sich für schwach diagonaldominante positiv definite symmetrische Gittermatrizen mit (i)  $M$ -Matrixeigenschaft, (ii) mit schwach positiven sowie (iii) mit großen negativen und positiven Nebendiagonaleinträgen Aussagen über die Fehlerverteilung im Gitter gewinnen, die Aufschluß über starke Knotenkopplungen geben. Als typische Vertreter können die Differenzenmatrizen

$$(i) \begin{bmatrix} -1/4 & -1 & -1/4 \\ -1 & 8 & -1 \\ -1/4 & -1 & -1/4 \end{bmatrix} \quad (ii) \begin{bmatrix} -1/4 & -1 & +1/4 \\ -1 & 4 & -1 \\ +1/4 & -1 & -1/4 \end{bmatrix} \quad (iii) \begin{bmatrix} & +1 & \\ -1 & 4 & -1 \\ & +1 & \end{bmatrix} \quad (IV.1.17)$$

in der angegebenen Reihenfolge den obigen Matrixtypen (i)–(iii) zugeordnet werden.

Im Fall (i) ist  $\mathbf{K}$  eine  $M$ -Matrix mit den Eigenschaften  $K_{ij} \leq 0$  für  $i \neq j$ . Bei schwacher Diagonaldominanz  $s_i \approx 0$  folgt aus (IV.1.16) durchschnittlich für jeden Knoten  $i$

$$\sum_{j \neq i} \frac{|K_{ij}|}{K_{ii}} \frac{(e_i - e_j)^2}{e_i^2} \ll 1 \quad (IV.1.18)$$

Demnach ist der Iterationsfehler bei großem Verhältnis  $|K_{ij}|/K_{ii}$  von Knoten  $i$  nach  $j$  nahezu konstant, d.h. algebraisch glatt. In diesem Fall nennt man Knoten  $i$  und  $j$  stark negativ gekoppelt.

Im Fall (ii) ist eine Zerlegung der Matrixeinträge in positive und negative Werte vorzunehmen. Es sei  $K_{ij}^- = K_{ij}$  für  $K_{ij} < 0$ , ansonsten  $K_{ij}^- = 0$ , und  $K_{ij}^+ = K_{ij}$  für  $K_{ij} > 0$ , ansonsten  $K_{ij}^+ = 0$ . Vernachlässigt man den Beitrag schwach positiver Nebendiagonalkomponenten  $K_{ij}^+$ , erhält man bei schwacher Diagonaldominanz  $s_i \approx 0$  aus (IV.1.16) für jeden Knoten  $i$  durchschnittlich

$$\sum_{j \neq i} \frac{|K_{ij}^-|}{K_{ii}} \frac{(e_i - e_j)^2}{e_i^2} \ll 1 \quad (IV.1.19)$$

Daraus schließt man wie in Fall (i), daß sich der Fehler von Knoten  $i$  nach  $j$  algebraisch glatt verhält, wenn  $|K_{ij}^-|/K_{ii}$  sehr groß ist. In diesem Fall sind Knoten  $i$  und  $j$  stark negativ gekoppelt.

Im Fall (iii) wird eine Zerlegung der Matrixeinträge in positive und negative Werte  $K_{ij}^+$  und  $K_{ij}^-$  entsprechend (ii) vorgenommen. Zusammen mit der Darstellung  $s_i = t_i + 2 \sum_{j \neq i} K_{ij}^+$ , wobei  $t_i = K_{ii} - \sum_{j \neq i} |K_{ij}|$ , kann (IV.1.16) so umgeformt werden, daß eine Auswertung unter Berücksichtigung der schwachen Diagonaldominanz  $t_i \approx 0$  am Knoten  $i$  im Mittel

$$\sum_{j \neq i} \frac{|K_{ij}^-|}{K_{ii}} \frac{(e_i - e_j)^2}{e_i^2} + \sum_{j \neq i} \frac{|K_{ij}^+|}{K_{ii}} \frac{(e_i + e_j)^2}{e_i^2} \ll 1 \quad (IV.1.20)$$

ergibt. Bei großem Verhältnis  $|K_{ij}^-|/K_{ii}$  ist der Iterationsfehler von Knoten  $i$  nach  $j$  algebraisch glatt. Zwischen  $i$  und  $j$  besteht hier eine stark negative Knotenkopplung. Bei großem Verhältnis  $|K_{ij}^+|/K_{ii}$  ist der Fehler  $e_i$  näherungsweise  $-e_j$ . Aufgrund der Oszillation des Fehlers von  $i$  nach  $j$  spricht man in diesem Fall von einer stark positiven Knotenkopplung.

Bei bestimmten Matrixtypen können keine negativen Knotenkopplungen gefiltert werden, die aber für das Auftreten eines algebraisch glatten Fehlers wesentliche Voraussetzungen sind. Der Einsatz von Mehrgitterlösern ist hier ineffizient. Typisches Beispiel sind stark diagonaldominante Matrizen, für die  $\delta K_{ii} \leq K_{ii} - \sum_{j \neq i} |K_{ij}|$  mit  $\delta > 0$  gilt. Daraus folgt  $\delta \langle \mathbf{D} \mathbf{e}, \mathbf{e} \rangle \leq \langle \mathbf{K} \mathbf{e}, \mathbf{e} \rangle$  bzw.  $\delta \langle \mathbf{D} \mathbf{e}, \mathbf{D}^{-1} \mathbf{K} \mathbf{e} \rangle \leq \langle \mathbf{K} \mathbf{e}, \mathbf{D}^{-1} \mathbf{K} \mathbf{e} \rangle$  oder äquivalent  $\delta \|\mathbf{e}\|_1^2 \leq \|\mathbf{e}\|_2^2$ . Die letzte Ungleichung ist für großes  $\delta \approx 1$  mit der Definition eines algebraisch glatten Fehlers  $\|\mathbf{e}\|_1 \gg \|\mathbf{e}\|_2$  unvereinbar.



### 1.2.2. Algebraisches Maß für das Glättungsverhalten des Zweigitterverfahrens

Als Glättungsmaß wird das Zweigitterkriterium von McCORMICK [98] eingeführt, das neben der Glättungseigenschaft von Vor- und Nachglättung die Filtereigenschaft der Grobgitterkorrektur berücksichtigt. Die Definition des Glättungsmaßes basiert auf Orthogonalzerlegungen des Feingitterraums in Unterräume mit gewissen Eigenschaften, durch die Vektoren mathematisch rigoros in algebraisch glatte und oszillierende Anteile zerlegt werden. Diese Orthogonalzerlegungen sind auch Gegenstand der Zweigitteranalyse im Abschnitt 1.4.1. Zur Vereinfachung der Notation werden Fein- und Grobgittervariablen mit  $f$  und  $C$  indiziert. Startpunkt ist die Matrixdarstellung des Zweigitteroperators

$$\mathbf{Z} = \mathbf{S}_2^{\nu_2} \mathbf{C} \mathbf{S}_1^{\nu_1} \quad , \quad \mathbf{C} = \mathbf{I}^f - \mathbf{P}_C^f (\mathbf{K}^C)^{-1} \mathbf{P}_C^f \mathbf{K}^f \quad (\text{IV.1.21})$$

von (IV.1.2) für die Fehlerfortpflanzung mit Grobgitterkorrekturoperator  $\mathbf{C} \in \mathcal{R}^{n_f \times n_f}$ . Die Tatsache, daß man den Feingitterfehler in einen langwelligen, auf  $\mathcal{S}^C$  darstellbaren Anteil und einen kurzwelligen, nur auf dem Feingitter bestehenden Anteil splitten kann, führt zu dem Schluß, daß man den Feingitterraum  $\mathcal{S}^f$  basierend auf den Abbildungen (IV.1.8) in zueinander orthogonale Unterräume  $\text{Bild}(\mathbf{P}_C^f)$  und  $\text{Kern}(\mathbf{R}_f^C \mathbf{K}^f)$  aufspalten kann.  $\text{Bild}(\mathbf{P}_C^f) \perp \text{Kern}(\mathbf{R}_f^C \mathbf{K}^f)$  hat zur Folge, daß das aus den Vektoren  $\mathbf{u}^f \in \text{Bild}(\mathbf{P}_C^f)$  und  $\mathbf{v}^f \in \text{Kern}(\mathbf{R}_f^C \mathbf{K}^f)$  gebildete Skalarprodukt  $\langle \mathbf{u}^f, \mathbf{v}^f \rangle = 0$  ergibt. Gleiches gilt für  $\langle \mathbf{u}^f, \mathbf{K}^f \mathbf{v}^f \rangle = 0$ , falls  $\mathbf{u}^f \in \text{Bild}(\mathbf{P}_C^f)$  und  $\mathbf{v}^f \in \text{Kern}(\mathbf{R}_f^C \mathbf{K}^f)$ . Man nennt  $\mathbf{u}^f$  und  $\mathbf{v}^f$  in diesem Fall  $\mathbf{K}^f$ -orthogonal und schreibt formal

$$\text{Bild}(\mathbf{P}_C^f) \perp_{\mathbf{K}^f} \text{Kern}(\mathbf{R}_f^C \mathbf{K}^f) \quad (\text{IV.1.22})$$

Beide Unterräume spalten den Feingitterraum

$$\mathcal{S}^f = \text{Bild}(\mathbf{P}_C^f) \oplus \text{Kern}(\mathbf{R}_f^C \mathbf{K}^f) \quad (\text{IV.1.23})$$

auf. Die Orthogonalitätseigenschaft (IV.1.22) ermöglicht die Zerlegung des Iterationsfehlers

$$\mathbf{e}^f = \mathbf{e}_B^f + \mathbf{e}_K^f \quad (\text{IV.1.24})$$

in einen langwelligen Anteil  $\mathbf{e}_B^f \in \text{Bild}(\mathbf{P}_C^f)$  und einen kurzwelligen Anteil  $\mathbf{e}_K^f \in \text{Kern}(\mathbf{R}_f^C \mathbf{K}^f)$  mit der Eigenschaft  $\mathbf{R}_f^C \mathbf{K}^f \mathbf{e}_K^f = \mathbf{0}$ . Setzt man als Variationsbedingungen

$$\mathbf{K}^C = \mathbf{R}_f^C \mathbf{K}^f \mathbf{P}_C^f \quad \text{und} \quad \mathbf{R}_f^C = (\mathbf{P}_C^f)^T \quad (\text{IV.1.25})$$

voraus und stellt  $\mathbf{e}_B^f = \mathbf{P}_C^f \mathbf{e}^C$  durch die Grobgitterlösung  $\mathbf{e}^C \in \mathcal{S}^C$  dar, ergibt Grobgitterkorrektur

$$\begin{aligned} \mathbf{C} \mathbf{e}^f &= \mathbf{C}(\mathbf{e}_B^f + \mathbf{e}_K^f) \\ &= \mathbf{e}_B^f + \mathbf{e}_K^f - \mathbf{P}_C^f (\mathbf{K}^C)^{-1} \mathbf{R}_f^C \mathbf{K}^f (\mathbf{e}_B^f + \mathbf{e}_K^f) \\ &= \mathbf{e}_B^f + \mathbf{e}_K^f - \mathbf{P}_C^f (\mathbf{K}^C)^{-1} \mathbf{R}_f^C \mathbf{K}^f (\mathbf{P}_C^f \mathbf{e}^C + \mathbf{e}_K^f) \\ &= \mathbf{e}_K^f \end{aligned} \quad (\text{IV.1.26})$$

Der Operator  $\mathbf{C}$  filtert langwellige Fehleranteile  $\mathbf{e}_B^f \in \text{Bild}(\mathbf{P}_C^f)$ , der dazu orthogonale Operator  $\mathbf{C}^\perp = \mathbf{I}^f - \mathbf{C} \perp \mathbf{C}$  hochfrequente Fehleranteile  $\mathbf{e}_K^f \in \text{Kern}(\mathbf{R}_f^C \mathbf{K}^f)$  aus  $\mathbf{e}^f$  heraus, d.h.

$$\mathbf{C}^\perp \mathbf{e}^f = \mathbf{e}_K^f \quad (\text{IV.1.27})$$

Die Operatoren  $C$  und  $C^\perp$  zerlegen demnach Vektoren mathematisch rigoros in zwei Anteile, die man den zueinander orthogonalen Unterräumen von  $\mathcal{S}^f$

$$\text{Bild}(P_C^f) = \text{Bild}(C^\perp) = \text{Kern}(C) \perp \text{Bild}(C) = \text{Kern}(C^\perp) = \text{Kern}(R_f^C K^f) \quad (\text{IV.1.28})$$

zuordnen kann. Von einem ideal vorgeglätteten Fehlervektor  $e^f := S^v e^f$  ist zu erwarten, daß anschließende Grobgitterkorrektur  $C e^f \approx \mathbf{0}$  liefert. Die Norm  $\rho^*(v) = \|CS^v\|$  stellt daher ein algebraisches Maß dar, das Glättungsverhalten des Zweigitterverfahrens festzustellen. Je kleiner  $\rho$ , desto effektiver die Glättung. Anstelle von  $C$  führt McCORMICK [98] den Projektionstensor

$$\Pi = I^f - P_C^f (R_f^C P_C^f)^{-1} R_f^C : \mathcal{S}^f \rightarrow \text{Kern}(R_f^C) \quad (\text{IV.1.29})$$

mit absolut gleichen Filtereigenschaften wie  $C$  ein und definiert als algebraisches Glättungsmaß

$$\rho(v) = \|\Pi S^v\| \quad (\text{IV.1.30})$$

### 1.3. Glättungsanalyse anhand eines Modellbeispiels

Die Glättungseigenschaft des Vor- und Nachglätters hat an der Mehrgitterkonvergenz entscheidenden Anteil. In diesem Abschnitt wird das Glättungsverhalten des Jakobi- und des lexikographischen Gauß-Seidel-Verfahrens am Beispiel eines eindimensionalen Modellproblems aufgezeigt. Hierzu werden sogenannte Glättungskennziffern basierend auf (i) der lokalen Fourier-Analyse von BRANDT [30] und (ii) der Glättungseigenschaft von HACKBUSCH [59] eingeführt. Als

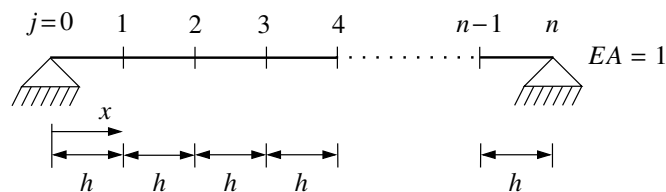


Abbildung 45: Homogener Balken mit Dirichlet-Randbedingungen  $d_0 = d_n = 0$ .

Modellbeispiel wird der homogene elastische Balken der Länge  $n \cdot h$  in Abb. 45 mit Dehnsteifigkeit  $EA = 1$  betrachtet, der einer bestimmten Beanspruchung unterworfen sei. Der Balken wird mit  $n - 1$  gleichgroßen zweiknotigen Verschiebungselementen diskretisiert. Hierbei entsteht das lineare Gleichungssystem

$$-d_{j-1} + 2d_j - d_{j+1} = hf_j \quad , \quad j = 1, \dots, n-1 \quad (\text{IV.1.31})$$

mit Knotenkräften  $f_j$ , das unter Berücksichtigung der Dirichlet-Randbedingungen  $d_0 = d_n = 0$  nach den diskreten Knotenverschiebungen  $d_j$  aufzulösen ist. Während des iterativen Lösungsprozesses mit dem gedämpften Jakobi- oder Gauß-Seidel-Verfahrens weicht  $\mathbf{d}$  von der exakten Lösung um den Fehlervektor  $\mathbf{e}$  ab, der sich wegen (IV.1.31) in der Form

$$-e_{j-1} + 2e_j - e_{j+1} = 0 \quad , \quad j = 1, \dots, n-1 \quad (\text{IV.1.32})$$

mit Dirichlet-Randbedingungen  $e_0 = e_n = 0$  darstellen läßt.

### 1.3.1. Glättungskennziffern

Das lineare Gleichungssystem (IV.1.31) der Form  $\mathbf{Kd} = \mathbf{f}$  mit positiv definiter Koeffizientenmatrix  $\mathbf{K} > \mathbf{0}$  soll entsprechend dem Fixpunktschema  $\mathbf{d}^{(m+1)} = \mathbf{Sd}^{(m)} + \mathbf{M}^{-1}\mathbf{f}$  iterativ gelöst werden. Die Iterationsmatrix  $\mathbf{S} = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{N}$  aus regulärer Matrix  $\mathbf{M}$  und Matrix  $\mathbf{N} = \mathbf{M} - \omega\mathbf{K}$  mit Dämpfungparameter  $0 \leq \omega$  ist normal. Nach  $\nu$  Schritten verbleibt vom Iterationsfehler

$$\mathbf{e} := \mathbf{S}^\nu \mathbf{e} \quad \text{mit} \quad \mathbf{S} = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{N} = \mathbf{I} - \omega\mathbf{M}^{-1}\mathbf{K} \quad (\text{IV.1.33})$$

Die Glättungsanalyse ist anhand der Struktur der Iterationsmatrix  $\mathbf{S}$  durchzuführen.

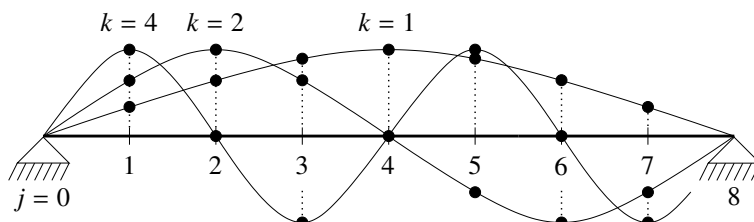
Bei der lokalen Fourier-Analyse wird der Balken in der Regel unendlich ausgedehnt idealisiert. Die Fouriermethode wird u.a. von BRANDT [30], KHALIL [82], TROTTENBERG, OOSTERLEE & SCHÜLLER [154] und WESSELING [168, 169] zur Glättungsanalyse iterativer Lösungsmethoden angewendet. Ausgangspunkt ist die Darstellung des Iterationsfehlers als Fourier-Transformierte

$$e_j = \sum_{k=0}^n c_k \psi_j(\theta_k) \quad , \quad j = 0, \dots, n \quad (\text{IV.1.34})$$

mit komplexen Fourier-Koeffizienten  $c_k$  und Fourier-Moden

$$\psi_j(\theta_k) = \exp[\iota j \theta_k] \quad \text{mit} \quad \theta_k = 2k\pi/n \quad \text{und} \quad \iota = \sqrt{-1} \quad (\text{IV.1.35})$$

als Eigenvektoren  $\psi_j$  der Iterationsmatrix  $\mathbf{S}$ . Die Darstellung (IV.1.34) ermöglicht die Zerlegung



**Abbildung 46:** Fourier-Moden  $\sin(jk\pi/8)$  des Fehlerspektrums für Wellenzahl  $0 < k < 8$ . Man klassifiziert den Fehleranteil mit  $0 \leq k < 4$  als niederfrequent, mit  $4 \leq k \leq 8$  als hochfrequent.

des Fehlerspektrums in niederfrequente Anteile mit  $0 \leq k < r$  und hochfrequente Komponenten mit  $r \leq k \leq n$ , wobei  $r = (n-1)/2$  für ungerades  $n$  und  $r = n/2$  für gerades  $n$ . Entsprechend dieser Gliederung führt man zwei Mengen

$$\left. \begin{aligned} \Theta_n &= \{k : 0 \leq k < r\} \\ \Theta_h &= \{k : r \leq k \leq n\} \end{aligned} \right\} \quad \mathcal{S}^f = \Theta_n \cup \Theta_h \quad (\text{IV.1.36})$$

für die Wellenzahl  $k$  ein. In Abb. 46 werden für  $n = 9$  beispielhaft unterschiedliche Fehlermoden kontinuierlich dargestellt. Ziel der lokalen Fourier-Analyse ist, die Abnahme des oszillierenden Fehlerspektrums innerhalb von  $\nu$  Glättungsschritten durch die dimensionslose Kennziffer

$$\rho_B(\nu) = \min_{\omega} \{ \max_{k \in \Theta_h} |\lambda_k(\mathbf{S})|^\nu \} \quad (\text{IV.1.37})$$

mit Hilfe der Eigenwerte  $\lambda_k = \lambda(\theta_k)$  von  $\mathbf{S}$  nach oben abzuschätzen und so eine Aussage über das Glättungsverhalten von  $\mathbf{S}$  zu gewinnen. Je kleiner  $\rho_B$ , desto besser die Glättungseigenschaft. Für  $\rho_B \geq 1$  ist  $\mathbf{S}$  nicht als Glätter einzustufen.

Die Glättungszahl von Hackbusch mißt die Abnahme des totalen Fehlers  $e$ . In den ersten Iterationsschritten kann man aus dem Übergang von einer anfänglich starken in eine abklingende Relaxation des Fehlers indirekt auf die Glättungseigenschaft der Iterationsmatrix  $S$  rückschließen. Der Ausgangsfehler  $e$  sollte durch Relaxation anfangs so stark reduziert werden, daß  $\|KS^\nu e\| \leq \|KS^0 e\|$  oder besser  $\|KS^\nu e\| \ll \|KS^0 e\|$ . Aus dieser Betrachtung motiviert sich die Glättungskennzahl von Hackbusch

$$\rho_H(\nu) = \|KS^\nu\|/\|K\| \quad (\text{IV.1.38})$$

die für kleines  $\nu$  umso kleiner wird, umso ausgeprägter die Glättungseigenschaft von  $S$  ist. Die Glättungszahl  $\rho_H$  läßt sich weiter spezifizieren. Es sei  $\lambda(\{\cdot\})$  ein Eigenwert der Matrix  $\{\cdot\}$ . Mit dieser Notation leitet man aus der Struktur des Glätters  $S$  die elementaren Ungleichungen  $0 \leq 1 - \omega|\lambda(M^{-1}K)| \leq |\lambda(S)| \leq 1$  und  $0 \leq |\lambda(M^{-1}K)| = |1 - \lambda(S)| \leq 1 + |\lambda(S)| \leq 2$  ab, deren Kombination  $0 \leq 1 - 2\omega \leq |\lambda(S)| \leq 1$  mit  $0 \leq \omega \leq \frac{1}{2}$  liefert. Bei symmetrischer Matrix  $M$  ergibt eine ähnliche Vorgehensweise die Abschätzungen  $-1 \leq 1 - 2\omega \leq \lambda(S) \leq 1$  und  $0 \leq \omega \leq 1$ . Mit  $\vartheta \leq x = |\lambda(S)| \leq 1$  und  $\vartheta = 1 - 2\omega$  folgt aus

$$\begin{aligned} \|KS^\nu\| &= \left\| \frac{1}{\omega}(M - N)(M^{-1}N)^\nu \right\| \\ &= \frac{1}{\omega} \|M(I - M^{-1}N)(M^{-1}N)^\nu\| \\ &\leq \frac{1}{\omega} \|M\| \|(I - M^{-1}N)(M^{-1}N)^\nu\| \\ &\leq \frac{1}{\omega} \|M\| (1 - x)x^\nu \\ &\leq \frac{1}{\omega} \|M\| \max\{\eta(\nu), (1 - \vartheta)\vartheta^\nu\} \end{aligned} \quad (\text{IV.1.39})$$

In (IV.1.39) wird beim Übergang von der vorletzten zur letzten Zeile das Maximum der Funktion  $f(x) = (1 - x)x^\nu$  an der Stelle  $x = 1/(1 + \nu) =: x_0$  ausgewertet. Für  $\eta(\nu) \equiv f(x_0)$  erhält man so  $\eta(\nu) = \nu^\nu/(1 + \nu)^{1+\nu}$ . Wegen  $\|K\| = \|KS^0\| = \frac{1}{\omega} \|M\| \max\{\eta(0), 1 - \vartheta\}$  ergibt sich für (IV.1.38) unter Einbeziehung von (IV.1.39) die kompakte Darstellung  $\rho_H(\nu) = \max\{\eta(\nu), \vartheta^\nu\}$ .

### 1.3.2. Glättungseigenschaft des gedämpften Jakobi-Verfahrens

Das gedämpfte Jakobi- oder auch JOR-Verfahren zählt zu den Gesamtschrittverfahren. Die zugehörige Iterationsmatrix  $S$  ist definiert durch

$$S = I - \omega D^{-1}K \quad (\text{IV.1.40})$$

mit positiv definiter Diagonalmatrix  $M = D = \text{diag}(K)$ .

Bei der lokalen Fourier-Analyse sind die Eigenwerte von  $S$  zu ermitteln, um (IV.1.37) auswerten zu können. Man nutzt hierzu die Spektraläquivalenz zwischen Iterationsmatrix  $S$  und Koeffizientenmatrix  $K$ , wonach zwischen den Eigenwerten  $\lambda(S)$  und  $\lambda(K)$  von  $S$  und  $K$  der Zusammenhang  $\lambda(S) = 1 - \frac{\omega}{2}\lambda(K)$  besteht. Die Eigenwerte  $\lambda(K)$  von  $K$  ergeben sich aus einer Eigenwertanalyse von  $Ke = \lambda_k(K)e$  oder

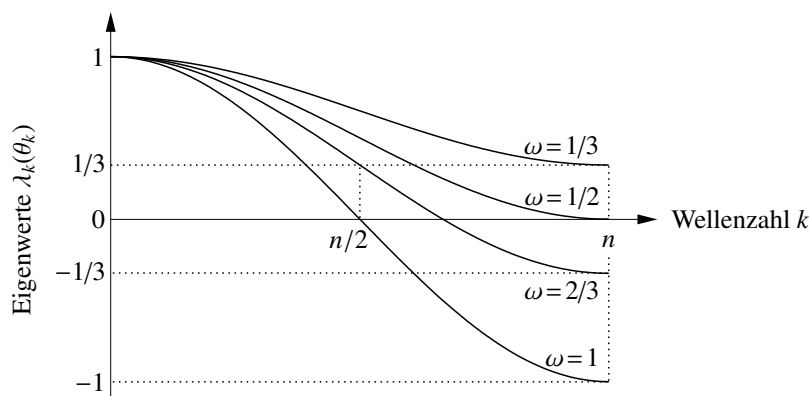
$$-c_k \exp[l(j - 1)\theta_k] + 2c_k \exp[lj\theta_k] - c_k \exp[l(j + 1)\theta_k] = \lambda_k(K) c_k \exp[lj\theta_k] \quad (\text{IV.1.41})$$

zu

$$\lambda_k(K) = 2 - \exp[lj\theta_k] - \exp[-lj\theta_k] = 2(1 - \cos \theta_k) = 4 \sin^2(\theta_k/2) \quad (\text{IV.1.42})$$

Als Eigenwerte von  $S$  erhält man daher

$$\lambda_k(S) = 1 - \omega(1 - \cos \theta_k) = 1 - 2\omega \sin^2(\theta_k/2) \quad (\text{IV.1.43})$$



**Abbildung 47:** Eigenwerte  $\lambda_k$  der Jakobi-Iterationsmatrix für  $\omega = 1/3, 1/2, 2/3, 1$  als Funktion der Wellenzahl  $0 \leq k \leq n$ . Sie repräsentieren die Fourier-Moden des Iterationsfehlers. Optimaler Dämpfungsparemeter ist  $\omega = 2/3$ , bei dem  $|\lambda_k| \leq 1/3$  im hochfrequenten Bereich  $n/2 \leq k \leq n$ .

Sie charakterisieren die Größe der nach einem Iterationsschritt verbleibenden Fehlerfrequenzen. In [Abb. 47](#) sind die Eigenwerte kontinuierlich als Funktionen der Wellenzahl  $k$  bei unterschiedlichen Annahmen für  $\omega$  dargestellt. In  $\mathcal{S}^f$  nehmen die Eigenwerte  $\lambda_k(\mathbf{S})$  monoton ab. [Abb. 47](#) ist zu entnehmen, daß der größte Eigenwert  $|\lambda_k(\mathbf{S})|$  bei diskreten Parametern  $k \in \Theta_h$  für  $\omega = 2/3$  den kleinsten Wert annimmt. Der Parameter  $\omega = 2/3$  folgt aus der Bedingung  $\lambda_{n/2}(\mathbf{S}) = -\lambda_n(\mathbf{S})$  und liefert als optimalen Glättungsfaktor

$$\rho_B = |\lambda_{n/2}(\mathbf{S}(\omega = 2/3))|^\nu = |\lambda_n(\mathbf{S}(\omega = 2/3))|^\nu = 1/3^\nu \quad (\text{IV.1.44})$$

Der oszillierende Fehler wird pro Iterationsschritt mindestens um den Faktor  $1/3$  verringert.

Bei der Auswertung der Glättungseigenschaft ([IV.1.38](#)) ist zu berücksichtigen, daß  $\mathbf{M} = \mathbf{D}$  symmetrisch und  $0 \leq \omega \leq 1$  ist. Den Ausführungen des vorangehenden Abschnitts [1.3.1](#) entnimmt man, daß  $\|\mathbf{KS}^\nu\| \leq \frac{1}{\omega} \|\mathbf{D}\| \max\{\eta(\nu), 2\omega|1 - 2\omega|^\nu\}$  ist und mit der Wahl  $\omega = 2/3$  schließlich

$$\rho_H = \max\{\eta(\nu), (1/3)^\nu\} \quad (\text{IV.1.45})$$

Für die ersten sechs Iterationsschritte sind die Glättungszahlen  $\rho_B$  und  $\rho_H$  in [Tabelle 11](#) angegeben. Das JOR-Verfahren erweist sich für das eindimensionale Beispiel als effektiver Glätter.

**Tabelle 11:** Glättungskennziffern  $\rho_B$  und  $\rho_H$ .

$\nu$	1	2	3	4	5	6
$\rho_B(\nu)$	0,333	0,111	0,037	0,012	0,004	0,001
$\rho_H(\nu)$	0,333	0,148	0,105	0,083	0,067	0,057

### 1.3.3. Glättungseigenschaft des lexikographischen Gauß-Seidel-Verfahrens

Das Gauß-Seidel-Verfahren ist ein Einzelschrittverfahren mit Iterationsmatrix

$$\mathbf{S} = \mathbf{I} - (\mathbf{D} - \mathbf{L})^{-1} \mathbf{K} \quad (\text{IV.1.46})$$

in der  $\mathbf{M} = \mathbf{D} - \mathbf{L}$  eine normale Matrix sei. Ferner sind  $\mathbf{D} = \text{diag}(\mathbf{K})$  und  $\mathbf{L}$  die untere Dreiecksmatrix von  $\mathbf{K}$ . Das Gauß-Seidel-Verfahren ist bekannt für seine lokal glättende Wirkung,

die hier am Beispiel des lexikographischen Gauß-Seidel-Verfahrens aufgezeigt wird. Aus dem Glättungsschema  $e^{(m+1)} = \mathbf{S}e^{(m)}$  folgt

$$2e_j^{(m+1)} - e_{j-1}^{(m+1)} = e_{j+1}^{(m)}, \quad j = 1, \dots, n-1 \quad (\text{IV.1.47})$$

Die neue Fehlerkomponente  $e_j^{(m+1)}$  an der Stelle  $x_j$  kann induktiv durch alte Fehlerkomponenten des Iterationsschritts  $m$  dargestellt werden:

$$\begin{aligned} e_j^{(m+1)} &= \frac{1}{2} e_{j-1}^{(m+1)} + \frac{1}{2} e_{j+1}^{(m)} \\ &= \frac{1}{4} e_{j-2}^{(m+1)} + \frac{1}{4} e_j^{(m)} + \frac{1}{2} e_{j+1}^{(m)} \\ &= \frac{1}{8} e_{j-3}^{(m+1)} + \frac{1}{8} e_{j-1}^{(m)} + \frac{1}{4} e_j^{(m)} + \frac{1}{2} e_{j+1}^{(m)} \\ &= \frac{1}{2^j} e_2^{(m)} + \frac{1}{2^{j-1}} e_3^{(m)} + \dots + \frac{1}{2} e_{j+1}^{(m)} \\ &= \sum_{i=1}^j \frac{1}{2^{j+1-i}} e_{i+1}^{(m)} \end{aligned} \quad (\text{IV.1.48})$$

Der Einfluß des Fehlervektors auf einen Knoten  $j$  klingt mit zunehmender Entfernung von  $j$  um  $2^j$  Potenzen rasch ab. Daraus schließt man, daß Oszillationen in  $e$  an benachbarten Knoten ausgemittelt und eliminiert werden, wohingegen glatte Fehleranteile nahezu erhalten bleiben.

Für die lokale Fourier-Analyse wird  $e$  in (IV.1.47) durch den Frequenzterm  $e_j = c_k \psi_j(\theta_k)$  ersetzt,

$$2c_k^{(m+1)} \exp[ij\theta_k] - c_k^{(m+1)} \exp[i(j-1)\theta_k] = c_k^{(m)} \exp[i(j+1)\theta_k], \quad k \in \mathcal{S}^f \quad (\text{IV.1.49})$$

Durch algebraische Umformungen erhält man daraus den Fehlerzuwachs  $c_k^{(m+1)} = \alpha c_k^{(m)}$  mit Vergrößerungsfaktor  $\alpha = \exp[i\theta_k]/(2 - \exp[-i\theta_k])$ . In Abb. 48 wird

$$|\alpha(\theta_k)| = (5 - 4 \cos \theta_k)^{-1/2} \quad (\text{IV.1.50})$$

kontinuierlich als Funktion der Wellenzahl  $k \in \mathcal{S}^f$  dargestellt. Die monoton abnehmende Funktion  $|\alpha|$  hat im Bereich  $\Theta_h$  ein Maximum für  $k = n/2$ , sodaß man mit  $\omega = 1$  aus (IV.1.37)

$$\rho_B = \max_{k \in \Theta_h} \{|\alpha(\theta_k)|^v\} = |\alpha(\pi/2)|^v = 5^{-v/2} \quad (\text{IV.1.51})$$

erhält. Hochfrequente Fehleranteile werden demnach in jedem Iterationsschritt mindestens um den Faktor  $5^{-1/2}$  verringert.

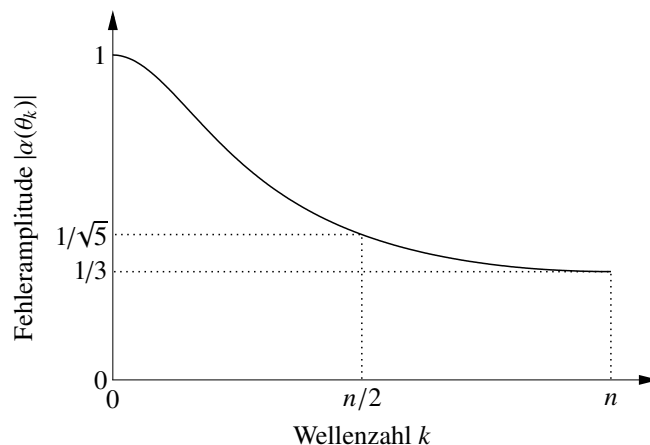


Abbildung 48: Betrag  $|\alpha(\theta_k)|$  der Fourier-Moden des Iterationsfehlers als Funktion der Wellenzahl.

Die Glättungseigenschaft von Hackbusch läßt sich für das lexikographische Gauß-Seidel-Verfahren weiter spezifizieren. Hierzu wird angenommen, daß  $\mathbf{D} = d\mathbf{I}$  mit  $d > 0$  und daß  $\lambda$  und  $\bar{\lambda}$  konjugiert komplexe Eigenwerte von  $\mathbf{L}$  und  $\mathbf{L}^T$  sind. Die Norm der normalen Dreiecksmatrix  $\mathbf{L}$  ist äquivalent mit der Spektralnorm  $\rho(\mathbf{L}) = \|\mathbf{L}\|$ . Sie läßt sich durch  $\rho(\mathbf{L}) \leq d/2$  nach oben einschränken. Da  $\mathbf{KS}^\nu$  ebenso normal ist, gilt

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{KS}^\nu) &= \|\mathbf{KS}^\nu\| = \|(\mathbf{D} - \mathbf{L} - \mathbf{L}^T)[(\mathbf{D} - \mathbf{L})^{-1}\mathbf{L}^T]^\nu\| \\ &= \max_{\lambda} \{(d - 2\operatorname{Re}\lambda) |\bar{\lambda}/(d - \lambda)|^\nu\} \\ &\leq \max_{|\lambda| \leq d/2} f(\lambda, \bar{\lambda}) \end{aligned} \quad (\text{IV.1.52})$$

mit  $f(\lambda, \bar{\lambda}) = (d - 2\operatorname{Re}\lambda) |\bar{\lambda}/(d - \lambda)|^\nu$ . Weitere Umformungen der oberen Schranke ergeben mit  $x = \operatorname{Re}\lambda \in [-y, y]$  und  $y = |\lambda| \in [0, d/2]$

$$\begin{aligned} g(x, y) &:= f(\lambda, \bar{\lambda}) = (d - 2x)y^\nu \{d^2 - 2xd + y^2\}^{-\nu/2} \\ &= (d - 2x) \{1 + (d^2 - 2xd)/y^2\}^{-\nu/2} \\ &\leq g(x, d/2) \end{aligned} \quad (\text{IV.1.53})$$

In den Definitionsbereichen von  $x$  und  $y$  wird  $g(x, d/2) = d(1 - 2x/d)(5 - 8x/d)^{-\nu/2}$  für  $\nu \leq 2$  an der Stelle  $x = -d/2$  und für  $\nu \geq 3$  an der Stelle  $x = d(2\nu - 5)/(4\nu - 8)$  maximal. Man erhält für diese Werte von  $x$  die Abschätzungen

$$\rho(\mathbf{KS}^\nu) = \|\mathbf{KS}^\nu\| \leq d \cdot \begin{cases} 2/3^\nu & \text{für } \nu = 1, 2 \\ \frac{1}{2} \sqrt{\eta(\nu - 2)\eta(\nu - 1)} & \text{für } \nu \geq 3 \end{cases} \quad (\text{IV.1.54})$$

mit  $\eta(\nu) = \nu^\nu/(\nu + 1)^{\nu+1}$ . In [Tabelle 12](#) sind die Werte der Glättungskennziffern  $\rho_B$  und  $\rho_H$  für die ersten sechs Iterationsschritte dargestellt. Das lexikographische Gauß-Seidel-Verfahren erweist sich für das eindimensionale Beispiel als effektiver Glätter.

**Tabelle 12:** Glättungskennziffern  $\rho_B$  und  $\rho_H$ .

$\nu$	1	2	3	4	5	6
$\rho_B(\nu)$	0,447	0,200	0,089	0,040	0,018	0,008
$\rho_H(\nu)$	0,333	0,111	0,048	0,031	0,023	0,019

## 1.4. Konvergenzverhalten des Mehrgitterverfahrens

In diesem Abschnitt wird das Konvergenzverhalten des Zwei- und Mehrgitterverfahrens rein formal untersucht. In Bezug auf Mehrgitterkonvergenzanalysen sei insbesondere auf BRAESS & HACKBUSCH [23], BRAMBLE, KWAK & PASCIAK [24], BRAMBLE, PASCIAK, WANG & XU [26, 25], BRAMBLE & XU [27], DOUGLAS & DOUGLAS [43], HACKBUSCH [59], HACKBUSCH & REUSKEN [60], NEUSS [124, 125], YSERENTANT [178] und darin referierte Autoren verwiesen.

### 1.4.1. Konvergenzverhalten des Zweigitterverfahrens

Zweigitterkonvergenz wird hier rein formal behandelt. Aus den vorangehenden Abschnitten werden hierzu die Zerlegungen (IV.1.22) und (IV.1.36) des Feingitterraums  $\mathcal{S}^f$  einbezogen,



die durch Achsenpaare in den Diagrammen von Abb. 49a–d dargestellt werden. Die Abweichung der Achsenpaare ist begründet im allgemein unterschiedlichen Filtervermögen von Glätter und Grobgitterkorrektur. Bei identischem Filterverhalten fallen Bild- und  $\Theta_N$ - sowie Kern- und  $\Theta_H$ -Achse zusammen. Ausgangspunkt der Zweigitteranalyse ist ein beliebiger Fehlervektor  $e^f \in \mathcal{S}^f$ , der als Punkt im Diagramm der Abb. 49a erscheint. Der Fehler wird entsprechend den Achsenrichtungen in seine Anteile aufgespalten.  $s$  und  $t$  sind die Projektionen auf die Bild- und Kern-Achse,  $\{s_N, t_N\}$  und  $\{s_H, t_H\}$  sind Projektionen auf die  $\Theta_N$ - und  $\Theta_H$ -Achse. Der Zweigitterzyklus beginnt mit einer Vorglättung, die im Idealfall das oszillierende Fehlerspektrum vollständig eliminiert. Im Diagramm der Abb. 49b hat der verbleibende Fehler nur eine Komponente entlang der  $\Theta_N$ -Achse. Das Diagramm zeigt auch die Projektionen des Fehlers auf die Bild- und Kern-Achse. Anschließende Grobgitterkorrektur projiziert den Fehler im Diagramm der Abb. 49c auf die Kern-Achse, da  $\text{Kern}(\mathbf{R}_f^C \mathbf{K}^f) \equiv \text{Bild}(C)$ . Dies geht einher mit einer starken Reduktion des niederfrequenten  $\Theta_N$ -Anteils, während gleichzeitig der hochfrequente  $\Theta_H$ -Anteil weitgehend erhalten bleibt. Nachglättung hat die gleiche Wirkung wie Vorglättung. Der Fehler  $e^f$  wird im Idealfall auf die  $\Theta_N$ -Achse projiziert. Hierbei wird der hochfrequente  $\Theta_H$ -Anteil des Fehlers vollständig ausgelöscht. Weitere Zweigitterzyklen verschieben den Fehler allmählich zum Ursprung der Achsensysteme hin. Dadurch ist die Konvergenz des Zweigitterverfahrens gewährleistet. Exakte Lösung nach einem  $V$ -Zyklus liegt vor, wenn Bild- und  $\Theta_N$ - sowie Kern- und  $\Theta_H$ -Achse übereinander liegen. Die Diagramme von Abb. 49e–h schematisieren den in der Energienorm gemessenen Kern- und Bild-Anteil des Fehlers, jeweils gesplittet in hoch- und niederfrequenten Anteil. Die Diagramme der Abb. 49e–h sind in dieser Reihenfolge denen der Abb. 49a–d zuzuordnen.

Die Konvergenz der Zweigittermethode hängt von der Kontraktionszahl  $\|\mathbf{Z}\|_2$  ab. Von HACKBUSCH [59] wird eine Zerlegung der Spektralnorm  $\|\mathbf{Z}\|_2$  des Zweigitteroperators

$$\mathbf{Z} = (\mathbf{K}^f \mathbf{S}^{v_2})((\mathbf{K}^f)^{-1} - \mathbf{P}_f^C (\mathbf{K}^C)^{-1} \mathbf{R}_f^C) (\mathbf{K}^f \mathbf{S}^{v_1}) \quad (\text{IV.1.55})$$

in der Form

$$\|\mathbf{Z}\|_2 \leq \|\mathbf{K}^f \mathbf{S}^{v_2}\| \|(\mathbf{K}^f)^{-1} - \mathbf{P}_f^C (\mathbf{K}^C)^{-1} \mathbf{R}_f^C\| \|\mathbf{K}^f \mathbf{S}^{v_1}\| \quad (\text{IV.1.56})$$

vorgeschlagen. Für den Konvergenznachweis genügt eine Abschätzung ohne Nachglättung:

$$\|\mathbf{Z}\|_2 \leq \|(\mathbf{K}^f)^{-1} - \mathbf{P}_f^C (\mathbf{K}^C)^{-1} \mathbf{R}_f^C\| \|\mathbf{K}^f \mathbf{S}^{v_1}\| < 1 \quad (\text{IV.1.57})$$

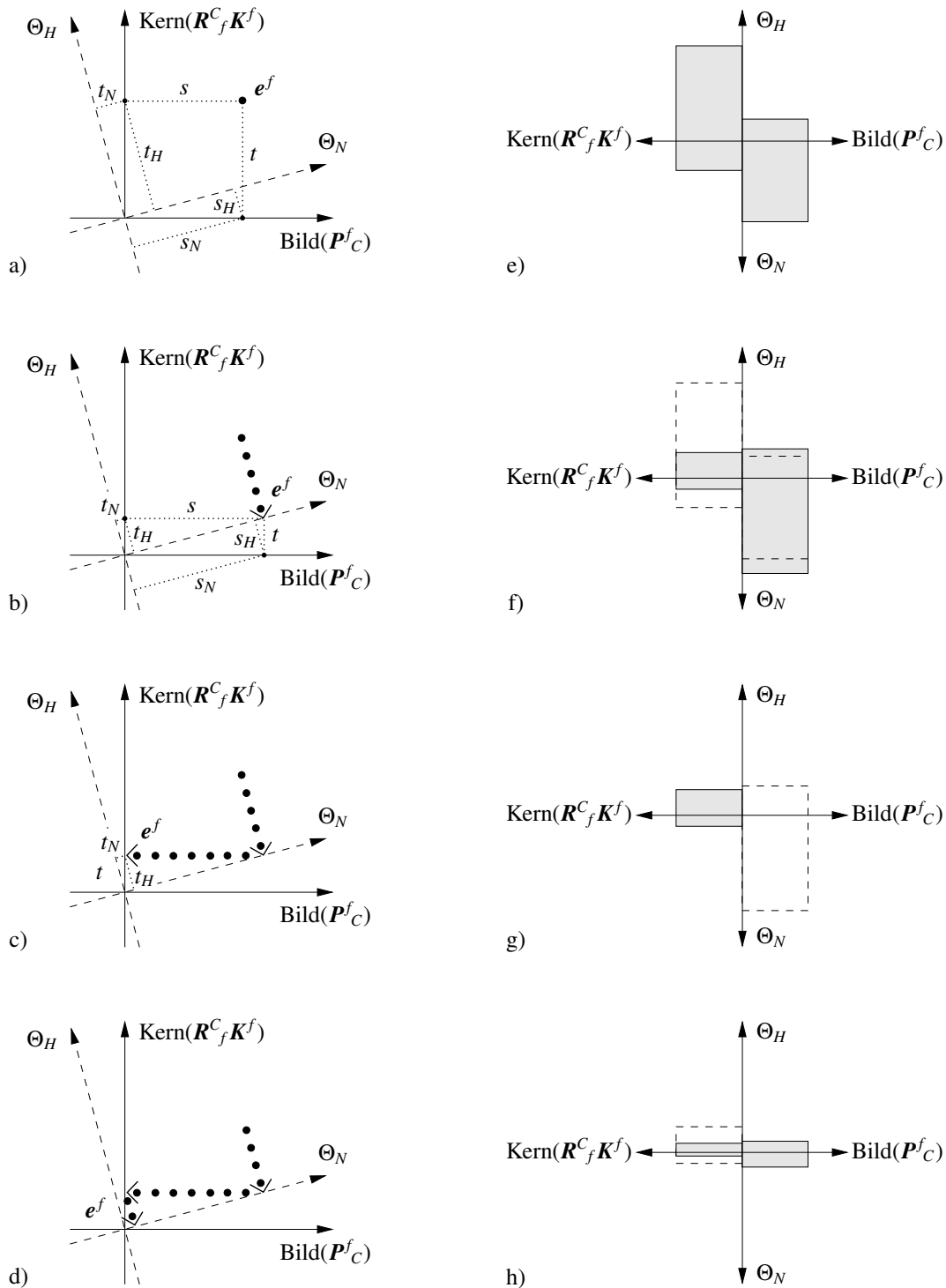
Diese von Hackbusch vorgenommene Normsplittung erlaubt eine separate Betrachtung zweier grundlegender Mehrgittereigenschaften. Die sogenannte Approximationseigenschaft erfaßt die Güte des durch den Grobgitteroperator  $\mathbf{K}^C$  approximierten Grobgitterproblems. Sie wird durch den ersten Normausdruck im mittleren Teil der Ungleichungskette von (IV.1.57) abgeschätzt. Der zweite Term ist die bereits in Abschnitt 1.3.1 verwandte Glättungseigenschaft. Eine zu (IV.1.57) alternative Darstellung basiert auf der Faktorisierung

$$\|\mathbf{Z}\|_2 \leq \|\mathbf{I}^f - \mathbf{P}_f^C (\mathbf{K}^C)^{-1} \mathbf{R}_f^C \mathbf{K}^f\| \|\mathbf{S}^{v_1}\| < 1 \quad (\text{IV.1.58})$$

die im Spezialfall  $\|\mathbf{f}^f\| = \|(\mathbf{K}^f)^{-1} \mathbf{f}^f\|$  und  $\|e^f\| = \|\mathbf{K}^f e^f\|$  bei beliebigem Vektor  $e^f \in \mathcal{S}^f$  identisch ist mit (IV.1.57). Aus

$$\|(\mathbf{K}^f)^{-1} - \mathbf{P}_f^C (\mathbf{K}^C)^{-1} \mathbf{R}_f^C\| \leq C h^{-\alpha} \quad \text{und} \quad \|\mathbf{K}^f \mathbf{S}^{v_1}\| \leq \eta(v) h^\alpha \quad (\text{IV.1.59})$$

mit gitterunabhängigen Konstanten  $\alpha \in \mathcal{R}$  und  $C \in \mathcal{R}_+$  geht ferner hervor, daß Mehrgitterkonvergenz unabhängig von der Gitterweite  $h$  des Feingitters, d.h. gitterunabhängig, ist.



**Abbildung 49:** Konvergenz des Zweigitterverfahrens. a–d) Fehlerreduktion in einem V-Zyklus. Der Fehler  $e^f$  wird durch Projektion auf die Bild- und Kern-Achse in Anteile  $s$  und  $t$  des Bildraums  $\text{Bild}(\mathbf{P}_C^f) \subset \mathcal{S}^f$  und Kernraums  $\text{Kern}(\mathbf{R}_f^C \mathbf{K}^f) \subset \mathcal{S}^f$  sowie durch Projektion auf die  $\Theta_N$ - und  $\Theta_H$ -Achse in nieder- und hochfrequente Anteile  $\{s_N, t_N\}$  und  $\{s_H, t_H\}$  aufgespalten. Fixpunkt der Zweigitteriteration ist der Achsenschnittpunkt. e–f) Schematische Darstellung der zu den Diagrammen in a–d gehörigen Fehlerenergienorm. Gestrichelte Linien zeigen die Änderung der Energie an. Konvergenz des Zweigitterverfahrens ist gleichbedeutend mit verschwindend kleiner Fehlerenergienorm.

### 1.4.2. Konvergenzverhalten des Mehrgitterverfahrens

Zweigitterkonvergenz ist i.a. nicht hinreichend für Mehrgitterkonvergenz. Das gilt insbesondere für den  $V$ -Zyklus, für den in [Box 15](#)  $\gamma = 1$  zu wählen ist. Im Fall  $\gamma \geq 2$ , der auch den  $W$ -Zyklus enthält, genügt der Nachweis der Zweigitterkonvergenz. Der Mehrgitterzyklus entsteht durch eine geschachtelte Anordnung von Zweigitterzyklen zur jeweils approximativen Lösung des Grobgittersystems. Es ist daher möglich, den Mehrgitterzyklus als rekursiven Zweigitterzyklus

$$\mathbf{Z}^l = \mathbf{S}^{\nu_2} (\mathbf{I}^l - \mathbf{P}_{l+1}^l (\tilde{\mathbf{K}}^{l+1})^{-1} \mathbf{R}^{l+1} \mathbf{K}^l) \mathbf{S}^{\nu_1} \quad , \quad 1 \leq l \leq L-1 \quad (\text{IV.1.60})$$

darzustellen. Auf dem größten Gitter  $L$  wird  $\mathbf{K}^L \mathbf{d}^L = \mathbf{r}^L$  mit  $\tilde{\mathbf{K}}^{L+1} \equiv \mathbf{K}^{L+1}$  direkt gelöst. Auf allen anderen Gitterebenen  $l < L$  wird die Defektgleichung  $\mathbf{K}^{l+1} \mathbf{d}^{l+1} = \mathbf{r}^{l+1}$  iterativ durch  $\gamma$  Mehrgitteroperationen mit  $\mathbf{d}^{l+1} := \mathbf{0}$  als Startwert gelöst. Der Fehler  $\mathbf{e}^{l+1(0)} = (\mathbf{K}^{l+1})^{-1} \mathbf{r}^{l+1} - \mathbf{d}^{l+1(0)}$  zu Beginn der Iteration reduziert sich nach  $\gamma$  Mehrgitterschritten der Form  $\mathbf{e}^{l+1(\gamma)} = (\mathbf{Z}^{l+1})^\gamma \mathbf{e}^{l+1(0)}$  auf  $\mathbf{e}^{l+1} = (\mathbf{K}^{l+1})^{-1} \mathbf{r}^{l+1} - \mathbf{d}^{l+1(\gamma)}$ . Im Detail ist

$$(\mathbf{K}^{l+1})^{-1} \mathbf{r}^{l+1} - \mathbf{d}^{l+1(\gamma)} = (\mathbf{Z}^{l+1})^\gamma (\mathbf{K}^{l+1})^{-1} \mathbf{r}^{l+1} \quad (\text{IV.1.61})$$

Daraus extrahiert man

$$\mathbf{d}^{l+1(\gamma)} = (\mathbf{I}^{l+1} - (\mathbf{Z}^{l+1})^\gamma) (\mathbf{K}^{l+1})^{-1} \mathbf{r}^{l+1} \quad (\text{IV.1.62})$$

Beim Mehrgitterzyklus ist  $(\tilde{\mathbf{K}}^{l+1})^{-1}$  auf den Gitterebenen  $l < L$  demnach durch den Ausdruck  $(\mathbf{I}^{l+1} - (\mathbf{Z}^{l+1})^\gamma) (\mathbf{K}^{l+1})^{-1}$  zu ersetzen. Man erhält auf diese Weise das rekursive Schema

$$\mathbf{Z}^l = \begin{cases} \mathbf{S}^{\nu_2} (\mathbf{I}^l - \mathbf{P}_{l+1}^l (\mathbf{K}^{l+1})^{-1} \mathbf{R}^{l+1} \mathbf{K}^l) \mathbf{S}^{\nu_1} & \text{für } l = L-1 \\ \mathbf{S}^{\nu_2} (\mathbf{I}^l - \mathbf{P}_{l+1}^l (\mathbf{I}^{l+1} - (\mathbf{Z}^{l+1})^\gamma) (\mathbf{K}^{l+1})^{-1} \mathbf{R}^{l+1} \mathbf{K}^l) \mathbf{S}^{\nu_1} & \text{für } 1 \leq l < L-1 \end{cases} \quad (\text{IV.1.63})$$

für den Mehrgitterzyklus. Im Hinblick auf eine Mehrgitterkonvergenzanalyse führt man in [\(IV.1.63\)](#)<sub>2</sub>  $\mathbf{Z} := \mathbf{S}^{\nu_2} (\mathbf{I}^l - \mathbf{P}_{l+1}^l (\mathbf{K}^{l+1})^{-1} \mathbf{R}^{l+1} \mathbf{K}^l) \mathbf{S}^{\nu_1}$  und  $\mathbf{X}_{l+1}^l := \mathbf{S}^{\nu_2} \mathbf{P}_{l+1}^l$  sowie  $\mathbf{Y}^{l+1}_l := (\mathbf{K}^{l+1})^{-1} \mathbf{R}^{l+1} \mathbf{K}^l \mathbf{S}^{\nu_1}$  ein, sodaß in kompakter Form

$$\begin{aligned} \mathbf{Z}^l &= \mathbf{S}^{\nu_2} (\mathbf{I}^l - \mathbf{P}_{l+1}^l (\mathbf{K}^{l+1})^{-1} \mathbf{R}^{l+1} \mathbf{K}^l) \mathbf{S}^{\nu_1} + \mathbf{S}^{\nu_2} \mathbf{P}_{l+1}^l (\mathbf{Z}^{l+1})^\gamma (\mathbf{K}^{l+1})^{-1} \mathbf{R}^{l+1} \mathbf{K}^l \mathbf{S}^{\nu_1} \\ &= \mathbf{Z} + \mathbf{X}_{l+1}^l (\mathbf{Z}^{l+1})^\gamma \mathbf{Y}^{l+1}_l \end{aligned} \quad (\text{IV.1.64})$$

Unter der Voraussetzung, daß  $\|\mathbf{Z}\| \leq \sigma^* < 1$ ,  $\|\mathbf{X}_{l+1}^l\| \|\mathbf{Y}^{l+1}_l\| \leq c$  und  $\|\mathbf{Z}^{l+1}\| \leq \eta_{l+1}$ , ist

$$\|\mathbf{Z}^l\| \leq \|\mathbf{Z}\| + \|\mathbf{X}_{l+1}^l\| \|(\mathbf{Z}^{l+1})^\gamma\| \|\mathbf{Y}^{l+1}_l\| \leq \begin{cases} \sigma^* & \text{für } l = L-1 \\ \sigma^* + c \eta_{l+1}^\gamma & \text{für } 1 \leq l < L-1 \end{cases} \quad (\text{IV.1.65})$$

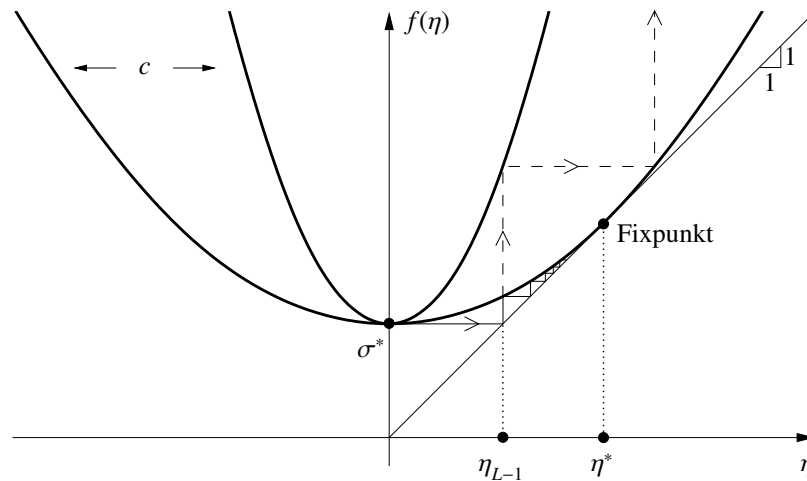
mit gitterunabhängiger Konstante  $c$ . Definiert man zudem als obere Schranke

$$\eta_l := \begin{cases} \sigma^* & \text{für } l = L-1 \\ \sigma^* + c \eta_{l+1}^\gamma & \text{für } 1 \leq l < L-1 \end{cases} \quad (\text{IV.1.66})$$

erhält man bei Konvergenz der Mehrgitteriteration als Fixpunktform der oberen Schranke  $\eta_l$

$$\eta^* = \begin{cases} \sigma^* & \text{für } l = L-1 \\ \sigma^* + c \eta^{*\gamma} & \text{für } 1 \leq l < L-1 \end{cases} \quad (\text{IV.1.67})$$

bei hinreichend kleinem  $\sigma^*$  und  $c$ . Aus [\(IV.1.67\)](#) lassen sich gitterunabhängige Konvergenzfaktorabschätzungen ableiten.

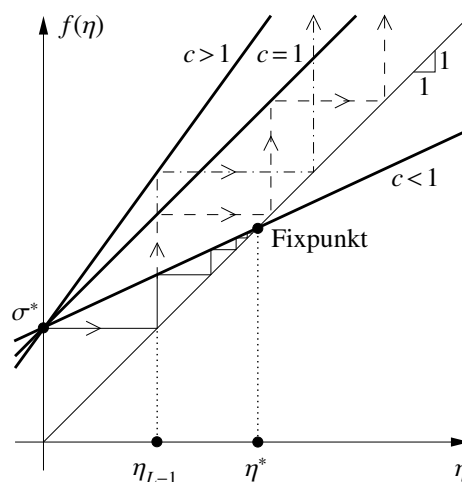


**Abbildung 50:** Für hinreichend kleines  $c$  bzw.  $\sigma^*$  konvergiert die Fixpunktiteration gegen  $\eta^*$ .

Im Fall  $\gamma = 2$  des  $W$ -Zyklus beschreibt (IV.1.67) die Parabelschar  $f(\eta) = c\eta^2 - \eta + \sigma^*$  mit Scharparameter  $c$ . In Abb. 50 werden für zwei mögliche Scharparameter Pfade der Fixpunktiteration als durchgezogene und gestrichelte Linien mit Startpunkt  $\eta = 0$  dargestellt. Für hinreichend kleines  $c$  konvergiert (IV.1.67) gegen den Fixpunkt  $\eta = \eta^* = (1 - \sqrt{1 - 4c\sigma^*})/2c$  unter der Bedingung  $4c\sigma^* \leq 1$ . Man erhält so die gitterunabhängige Abschätzung

$$\|Z^l\| \leq \eta^* = (1 - \sqrt{1 - 4c\sigma^*})/2c \leq 2\sigma^* \quad , \quad l \leq L - 1 \quad (\text{IV.1.68})$$

Die obere Schranke  $2\sigma^*$  ergibt sich aus der trivialen Beziehung  $1 - 4c\sigma^* \leq \sqrt{1 - 4c\sigma^*}$ . Aus der Ungleichungskette (IV.1.68) schließt man bei einer Zweigitterkonvergenzrate  $\sigma^*$  von weniger als  $1/2$  stets auf Konvergenz des  $W$ -Zyklus. Aus der Konvergenz des  $W$ -Zyklus folgt wiederum Mehrgitterkonvergenz für  $\gamma \geq 3$ . Zur Kontrolle ersetze man  $c$  in (IV.1.68) durch den Parameter  $c := c\eta^{\gamma-2}$ , der wegen  $\eta \leq 1$  bei zunehmendem  $\gamma$  kleiner wird. Für abnehmendes  $c$  wird die Konvergenzrate  $\eta^*$  kleiner und somit besser.



**Abbildung 51:** Die Fixpunktiteration konvergiert nur für  $c < 1$ , andernfalls existiert kein Fixpunkt.

Im Fall  $\gamma = 1$  des  $V$ -Zyklus beschreibt (IV.1.67) die Geradenschar  $f(\eta) = (c - 1)\eta + \sigma^*$  mit Scharparameter  $c$ . In Abb. 51 werden für drei mögliche Scharparameter Pfade der Fixpunkt-

iteration mit Startwert  $\eta = 0$  dargestellt. Für  $c < 1$  konvergiert (IV.1.67) gegen den Fixpunkt  $\eta = \eta^* = \sigma^*/(1 - c)$ , sodaß

$$\|\mathbf{Z}^l\| \leq \eta^* = \sigma^*/(1 - c) < 1 \quad , \quad l \leq L - 1 \quad (\text{IV.1.69})$$

Diese Abschätzung ist für den V-Zyklus in der Regel ungeeignet, da  $c$  meist größer als 1 und somit keine Fixpunktiteration möglich ist. Für gutartige Probleme mit kleinem  $\sigma^*$  ist V-Zyklus-Konvergenz allerdings gewährleistet.

## 1.5. Nichtlinearer Mehrgitteralgorithmus

Zur Lösung nichtlinearer Randwertprobleme kann die Mehrgitteridee direkt oder indirekt angewendet werden. Bei direkter Anwendung wird das nichtlineare Randwertproblem auf jeder Gitterebene vollständig diskretisiert und die Approximation des Lösungsvektors der dort sequentiell linearisierten Gleichungssysteme nichtlinear relaxiert. Nichtlineare Glättung erfolgt beispielsweise mit einem nichtlinearen Newton-Gauß-Seidel-Verfahren. Typischer Vertreter dieser Mehrgitterstrategie ist das nichtlineare Mehrgitterverfahren von HACKBUSCH [59], das als Spezialfall die sogenannte FAS-Methode von BRANDT [28] enthält. Die Schwierigkeit in der Anwendung einer direkten Mehrgittermethode besteht darin, die problemabhängigen homogenisierungs-basierten Transferoperatoren angemessen zu generieren und einzusetzen. Bei der Konstruktion solcher Transferoperatoren ist der heterogenen Feingitter- eine homogenisierte Grobgitterstruktur auf Basis der aktuell iterierten Feingitterlösung zuzuordnen. Diese Zuordnung ist nicht gewährleistet, wenn sich das Grobgittermatrixsystem infolge des nichtlinearen Charakters des vorliegenden Randwertproblems im Rahmen einer nichtlinearen Glättung ändert. Daher

### Box 17: Nichtlinearer Algorithmus des Newton-Mehrgitters.

#### Nichtlineare Newton-Schleife

Initialisierungen:  $m = 0$ ,  $\text{tol}_{nili} = \theta|\mathbf{R}_0|$ ,  $\mathbf{D}_m = \mathbf{0}$

1.) Bestimme linearisiertes Matrixsystem  $\mathbf{K}_m \Delta \mathbf{D}_m = \mathbf{R}_m$

2.) Falls  $|\mathbf{R}_m| < \text{tol}_{nili}$  Ende

3.) Falls  $m > 1$  setze  $\kappa_{nili} := |\mathbf{R}_m|/|\mathbf{R}_{m-1}| \Rightarrow |\mathbf{r}_{soll}| = \max(|\mathbf{R}_m| \kappa_{nili}^2, \text{tol}_{nili})$

#### Linearer Mehrgitterzyklus

Löse  $\mathbf{K}_m \Delta \mathbf{D}_m = \mathbf{R}_m$

Initialisierungen:  $i = 0$ ,  $\Delta \mathbf{D}_m = \mathbf{0}$ , lineares Residuum  $\mathbf{r}_0 = \mathbf{R}_m$

4.) Ein Mehrgitterzyklus mittels  $\text{Iter}(\Delta \mathbf{D}_m, \mathbf{R}_m)$  zur Berechnung von  $\Delta \mathbf{D}_m$

5.) Falls  $i \leq 1$  oder  $\kappa_{nili} > 1$  gehe zu 9.)

6.) Falls  $i > 1$  und zugleich  $|\mathbf{r}_0| \kappa_{lin} < |\mathbf{r}_{soll}|$  mit  $\kappa_{lin} := (|\mathbf{r}_i|/|\mathbf{r}_0|)^{\frac{i+1}{i}}$  gehe zu 9.)

7.) Berechne lineares Residuum  $\mathbf{r}_{i+1} = \mathbf{R}_m - \mathbf{K}_m \Delta \mathbf{D}_m$

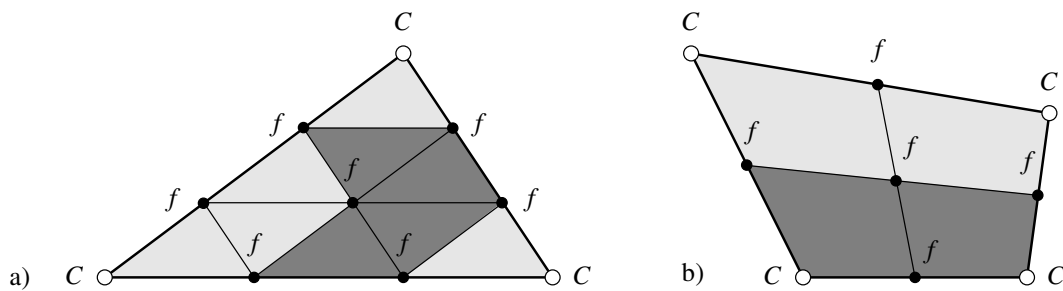
8.) Falls  $|\mathbf{r}_{i+1}| > |\mathbf{r}_{soll}|$  setze  $i = i + 1$  und gehe zu 4.)

9.) Setze  $m = m + 1$ ,  $\mathbf{D}_m := \mathbf{D}_m + \Delta \mathbf{D}_m$  und gehe zu 1.)

macht es keinen Sinn, homogenisierungsbasierte Transferoperatoren im Kontext einer direkten Mehrgitterstrategie einzusetzen. Obiges Problem entsteht nicht bei indirekter Anwendung der Mehrgitteridee mit der in [Box 17](#) aufgezeigten nichtlinearen Struktur. Hier erfolgt die Lösung der linearisierten Gleichungssysteme der feinsten Gitterebene innerhalb eines Newton-Schritts durch ein lineares Standard- oder einem CG-beschleunigten-Mehrgitterverfahren. Man nennt diese algorithmische Konstellation Newton-Mehrgitter. Der Algorithmus in [Box 17](#) ist in der Lage, quadratische Konvergenz der nichtlinearen Newton-Iteration mit niedrigem numerischen Aufwand und automatisierter Mehrgitterzyklensteuerung zu gewährleisten. Im Algorithmus von [Box 17](#) wird die lineare Mehrgitteriteration solange fortgesetzt, bis das lineare Residuum in Schritt 6 um den linearen Konvergenzfaktor  $\kappa_{lin}$  verkleinert ist, der dem Quadrat des geschätzten nichtlinearen Konvergenzfaktors  $\kappa_{nili}$  entspricht. Dadurch bringt der Algorithmus in [Box 17](#) insbesondere gegenüber direkten Lösern einen erheblichen Rechenzeitgewinn, da zu Beginn eines Newton-Schritts nur wenige lineare Zyklen durchzuführen sind. Eine große Genauigkeit ist anfangs nicht erforderlich, weil das Newton-Verfahren erst in der Nähe der Lösung quadratisch konvergiert. Da das Konvergenzverhalten der linearen Iteration in etwa gleichbleibend ist, liegt es nahe, in Schritt 6 zur Entscheidung zwischen einem linearen und einem nichtlinearen Schritt die zu erwartende Norm des linearen Residuums mit  $\kappa_{lin}$  zu extrapolieren.

## 2. Transferoperatoren für heterogene Strukturen

In diesem Abschnitt werden neue und aus der Literatur bekannte Transferoperatoren für geometrische Mehrgitterverfahren aufbereitet. Als weitläufig bekannte Transfertypen werden hier die Injektion, der geometrische Transfer, der mit Schur-Komplemente assoziierte, der glättungsbaasierte und der algebraische Transfer konzeptionell und algorithmisch durchdrungen. Das geometrische Mehrgitter setzt eine hierarchische Gitterstruktur mit konformen Ansatzräumen voraus. Der Gittertransfer von Fein- zu Grobgitterpunkten erfolgt hier typischerweise innerhalb von hierarchisch verfeinerten Finite Elementen, die im Folgenden als diskrete Teilbereiche  $\mathcal{B}^p$  bezeichnet werden. In [Abb. 52](#) sind zwei derartige diskrete Teilbereiche mit Fein- und Grobgitterpunkten  $f$  und  $C$  dargestellt. Die Transfermatrizen werden lokal in solchen Teilbereichen



**Abbildung 52:** Zweidimensionale diskrete Teilgebiete  $\mathcal{B}^p$ : a) Hierarchische Triangulierung und b) hierarchische Verfeinerung mit Viereckselementen. Grobgitterknoten  $C$  definieren das Vatelement, Feingitterknoten  $f$  die Kinder-elemente.

sukzessive aufgebaut. Der Gesamtaufwand zur Generierung der Transferoperatoren für das Gesamtsystem reduziert sich dadurch auf lokale Subprobleme mit der Dimension eines diskreten Teilgebiets  $\mathcal{B}^p$ . Zur Konstruktion des Transfers genügt es, zwei Gitterebenen mit Fein- und Grobgitteransatzraum  $\mathcal{S}^f$  und  $\mathcal{S}^C$  zu betrachten. In diesem Abschnitt werden Fein- und Grobgittervariablen entsprechend mit  $f$  und  $C$  indiziert.  $\bar{n}_f$  sei die Dimension des feinen Subproblems und  $\bar{n}_C$  die Dimension des zugehörigen groben Subproblems. In diesem Abschnitt seien  $\mathbf{d}^f \in \mathcal{R}^{\bar{n}_f}$  und  $\mathbf{d}^C \in \mathcal{R}^{\bar{n}_C}$  diskrete Fein- und Grobgitterparameter an Fein- und Grobgitterknoten von  $\mathcal{B}^p$ . Ferner seien  $\mathbf{P}_C^f \in \mathcal{R}^{\bar{n}_f \times \bar{n}_C}$  und  $\mathbf{R}_f^C \in \mathcal{R}^{\bar{n}_C \times \bar{n}_f}$  die in  $\mathcal{B}^p$  agierenden Komponenten der Transferoperatoren. Sie müssen dort  $\mathbf{P}_C^f \mathbf{I}^C = \mathbf{I}^f$  mit  $\mathbf{I}^f = [1, \dots, 1]^T \in \mathcal{R}^{\bar{n}_f}$  und  $\mathbf{I}^C = [1, \dots, 1]^T \in \mathcal{R}^{\bar{n}_C}$  als fundamentale Eigenschaft erfüllen, damit Starrkörperanteile im Lösungsvektor den iterativen Lösungsprozeß nicht beeinträchtigen. In diesem Fall gelten für die auf  $\mathcal{B}^p$  beschränkten Matrixdarstellungen des Fein- und Grobgitteroperators  $\mathbf{k}^f \in \mathcal{R}^{\bar{n}_f \times \bar{n}_f}$  und  $\mathbf{k}^C \in \mathcal{R}^{\bar{n}_C \times \bar{n}_C}$  und der lokalen Defekte  $\mathbf{r}^f \in \mathcal{R}^{\bar{n}_f}$  und  $\mathbf{r}^C \in \mathcal{R}^{\bar{n}_C}$ :

- 1.) Die Summe aller Einträge von  $\mathbf{r}^f$  und  $\mathbf{r}^C$  ist gleich:

$$\mathbf{I}^{C^T} \mathbf{r}^C = \mathbf{I}^{C^T} \mathbf{R}_f^C \mathbf{r}^f = (\mathbf{P}_C^f \mathbf{I}^C)^T \mathbf{r}^f = \mathbf{I}^{f^T} \mathbf{r}^f$$

- 2.) Die Summe aller Einträge von  $\mathbf{k}^f$  und  $\mathbf{k}^C$  ist gleich:

$$\mathbf{I}^{C^T} \mathbf{k}^C \mathbf{I}^C = \mathbf{I}^{C^T} \mathbf{R}_f^C \mathbf{k}^f \mathbf{P}_C^f \mathbf{I}^C = (\mathbf{P}_C^f \mathbf{I}^C)^T \mathbf{k}^f \mathbf{I}^f = \mathbf{I}^{f^T} \mathbf{k}^f \mathbf{I}^f$$

- 3.) Falls Reihensumme in  $\mathbf{k}^f$  null ergibt, so auch in  $\mathbf{k}^C$ :

$$\mathbf{k}^C \mathbf{I}^C = \mathbf{R}_f^C \mathbf{k}^f \mathbf{P}_C^f \mathbf{I}^C = \mathbf{R}_f^C (\mathbf{k}^f \mathbf{I}^f) = \mathbf{R}_f^C \mathbf{0}^f = \mathbf{0}^C$$

- 4.) Falls Spaltensumme in  $\mathbf{k}^f$  null ergibt, so auch in  $\mathbf{k}^C$ :

$$\mathbf{k}^{C^T} \mathbf{I}^C = (\mathbf{R}_f^C \mathbf{k}^f \mathbf{P}_C^f)^T \mathbf{I}^C = \mathbf{R}_f^C \mathbf{k}^{f^T} \mathbf{P}_C^f \mathbf{I}^C = \mathbf{R}_f^C (\mathbf{k}^{f^T} \mathbf{I}^f) = \mathbf{R}_f^C \mathbf{0}^f = \mathbf{0}^C$$

mit Nullvektoren  $\mathbf{0}^f = [0, \dots, 0]^T \in \mathcal{R}^{\bar{n}_f}$  und  $\mathbf{0}^C = [0, \dots, 0]^T \in \mathcal{R}^{\bar{n}_C}$  des Fein- und Grobgitters.



## 2.1. Alternative Transferkonzepte

Die hier behandelten, aus der Literatur bekannten Transferkonzepte beschränken sich ausschließlich auf hierarchische Finite Elementstrukturen mit konformen Ansatzräumen. Es wird angenommen, daß alle Gittermatrizen symmetrisch sind und daher stets  $\mathbf{R}^C_f = (\mathbf{P}^f_C)^T$  gilt.

### 2.1.1. Injektion

Die Injektion ist die denkbar primitivste Form des Gittertransfers. Injektion ist definiert durch

$$P^a_A = R^A_a = \begin{cases} 1 & \text{für gleiche Freiheitsgrade } a \text{ und } A \\ 0 & \text{ansonsten} \end{cases} \quad (\text{IV.2.1})$$

Die Indizes  $a$  und  $A$  stehen für Fein- und Grobgitterfreiheitsgrade. Bei der Injektion fließen keinerlei geometrische oder algebraische Eigenschaften der Gitter- oder Mikrostruktur ein. Die binäre Belegung der Transfermatrizen hat zur Folge, daß Injektion prinzipiell alle möglichen Transfers hinsichtlich ihrer Qualität bei Konvergenzstudien eingrenzen muß.

### 2.1.2. Geometrische Transferoperatoren

Der geometrische ist der wohl weitläufigste Gittertransfer in der Literatur. Die Finite Elementdiskretisierung von Verschiebungen auf dem feinen und groben Gitter sei durch  $u^f_a = \sum_i N^f_i(\mathbf{X}^f) d^f_{ia}$  und  $u^C_A = \sum_I N^C_I(\mathbf{X}^C) d^C_{IA}$  definiert mit Freiheitsgraden  $a$  und  $A$  an den Fein- und Grobgitterpunkten  $i$  und  $I$ . Bei Gitterhierarchien mit konformen Ansatzräumen kann die Grobgitterverschiebung  $u^C$  durch eine Linearkombination diskreter Knotenparameter  $\mathbf{d}^f$  des Feingitters in der Form  $u^C = \sum_i N^f_i(\mathbf{X}^f) \mathbf{d}^f_i$  dargestellt werden. Zusammen mit der Transferbedingung  $\mathbf{d}^C = \mathbf{R}^C_f \mathbf{d}^f$  gelangt man so zur kanonischen Beziehung

$$N^C_I(\mathbf{X}^C) = \sum_i \sum_{a,A} R^{IA}_{ia} \delta_{aA} N^f_i(\mathbf{X}^f) \quad (\text{IV.2.2})$$

mit Kronecker-Symbol  $\delta_{aA}$ . Weitere Konsequenz konformer Ansatzräume ist, daß Grobgitteransatzfunktionen  $N^C(\mathbf{X}^C)$  durch Linearkombinationen der Feingitteransatzfunktionen  $N^f(\mathbf{X}^f)$ ,

$$N^C_I(\mathbf{X}^C) = \sum_i N^C_I(\mathbf{X}^f_i) N^f_i(\mathbf{X}^f) \quad (\text{IV.2.3})$$

gebildet werden können. Mit (IV.2.2) und (IV.2.3) erhält man schließlich als Transferoperatoren

$$R^{IA}_{ia} = P^{ia}_{IA} = N^C_I(\mathbf{X}^f_i) \delta_{aA} \quad (\text{IV.2.4})$$

durch Auswerten der Grobgitteransatzfunktionen an den Feingitterknoten. Dieser Transfer ist einfach zu implementieren und erfordert einen geringen numerischen Aufwand. Zu beachten ist, daß die Heterogenität der Mikrostruktur keinen Einfluß auf den geometrischen Transfer hat.

### 2.1.3. Transferoperatoren basierend auf lokaler Schur-Komplementbildung

Der Gittertransfer basiert auf der Lösung lokaler Subprobleme, bei denen lokale Schur-Komplemente von Subsystemmatrizen  $\mathbf{k}^f \in \mathcal{H}^{\bar{n}_f \times \bar{n}_f}$  generiert werden. Die lokale Assemblierung von Subsystemmatrizen  $\mathbf{k}^f$  mit Moduli und Ansatzfunktionen erfüllt die notwendige Bedingung  $\mathbf{P}^f_C \mathbf{I}^C = \mathbf{I}^f$ . Auf der feinsten Gitterebene werden hierzu die bereits vorhandenen Moduli  $\mathbb{C} = W_{,\varepsilon\varepsilon}$  als partielle Ableitung des inkrementellen Potentials (II.2.48), auf groben Gitterebenen gemittelte Moduli  $\mathbb{C} := \frac{1}{|\mathcal{B}^p|} \int_{\mathcal{B}^p} \mathbb{C} dV$  einbezogen. Zu beachten ist, daß für jedes diskrete

Teilgebiet  $\mathcal{B}^p$  ein Materialtensor  $\mathbb{C}$  zu speichern ist, sobald mit mehr als zwei Gitterebenen gerechnet wird. Um die Konstruktion der Transferoperatoren übersichtlich darstellen zu können, werden Zeilen und Spalten in  $\mathbf{k}^f$  formal umsortiert. Steifigkeitswerte, assoziiert mit Feingitterpunkten  $f$ , werden zuerst, solche, assoziiert mit Grobgitterpunkten  $C$ , danach angeordnet. Auf diese Weise gelangt man zu der Blockform

$$\begin{bmatrix} \mathbf{k}^{ff} & \mathbf{k}^{fC} \\ \mathbf{k}^{Cf} & \mathbf{k}^{CC} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{d}^{f,f} \\ \mathbf{d}^{C,f} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{r}^{f,f} \\ \mathbf{r}^{C,f} \end{bmatrix} \quad (\text{IV.2.5})$$

des lokalen Feingitterproblems mit Knotenparameter  $\{\cdot\}^f = [\{\cdot\}^{f,f}, \{\cdot\}^{C,f}]^T$ .  $\{\cdot\}^{C,f} \in \mathcal{R}^{\bar{n}_C}$  bezieht sich auf Grobgitterkomponenten und  $\{\cdot\}^{f,f} \in \mathcal{R}^{\bar{n}_f - \bar{n}_C}$  auf reine Feingitterkomponenten. Eine statische Kondensation von  $\mathbf{d}^{f,f}$  in (IV.2.5) führt auf das reduzierte Gleichungssystem

$$\mathbf{k}^C \mathbf{d}^{C,f} = \mathbf{r}^C \quad (\text{IV.2.6})$$

mit dem lokalen Schur-Komplement  $\mathbf{k}^C \in \mathcal{R}^{\bar{n}_C \times \bar{n}_C}$  und dem Defekt  $\mathbf{r}^C \in \mathcal{R}^{\bar{n}_C}$ :

$$\mathbf{k}^C = \mathbf{k}^{CC} - \mathbf{k}^{Cf} (\mathbf{k}^{ff})^{-1} \mathbf{k}^{fC} \quad \text{und} \quad \mathbf{r}^C = \mathbf{r}^{C,f} - \mathbf{k}^{Cf} (\mathbf{k}^{ff})^{-1} \mathbf{r}^{f,f} \quad (\text{IV.2.7})$$

Das Gleichungssystem (IV.2.6) entspricht lokal dem Grobgitterproblem  $\mathbf{k}^C \mathbf{d}^C = \mathbf{r}^C$  mit Transferbedingung  $\mathbf{d}^C = \mathbf{d}^{C,f}$ . Ein kanonisches Konstruktionsschema für die Transferoperatoren geht davon aus,  $\mathbf{k}^f$  in (IV.2.5) als Einflußmatrix aufzufassen, die die Auswirkung von Einheitsverschiebungen  $\hat{\mathbf{d}}^{C,f} \in \mathcal{R}^{\bar{n}_C}$  an Grob- auf Feingitterknoten wiedergibt. Man erhält in Blockform

$$\begin{bmatrix} \mathbf{k}^{ff} & \mathbf{k}^{fC} \\ \mathbf{k}^{Cf} & \mathbf{k}^{CC} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{d}}^{f,f} \\ \hat{\mathbf{d}}^{C,f} \end{bmatrix} = \mathbf{0} \quad (\text{IV.2.8})$$

aus der man als Feingitterparameter  $\hat{\mathbf{d}}^{f,f} = -(\mathbf{k}^{ff})^{-1} \mathbf{k}^{fC} \hat{\mathbf{d}}^{C,f}$  extrahiert. Mit dieser Beziehung und der Transferbedingung  $\hat{\mathbf{d}}^f = \mathbf{P}_C^f \hat{\mathbf{d}}^C$  ergibt sich schließlich der Prolongationsoperator aus

$$\hat{\mathbf{d}}^f = \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{d}}^{f,f} \\ \hat{\mathbf{d}}^{C,f} \end{bmatrix} = \mathbf{P}_C^f \hat{\mathbf{d}}^C \quad \text{zu} \quad \mathbf{P}_C^f := \begin{bmatrix} -(\mathbf{k}^{ff})^{-1} \mathbf{k}^{fC} \\ \mathbf{I}^C \end{bmatrix} \quad (\text{IV.2.9})$$

mit Grobgittereinheitsmatrix  $\mathbf{I}^C \in \mathcal{R}^{\bar{n}_C \times \bar{n}_C}$ . Der Restriktionsoperator  $\mathbf{R}_f^C$  ist transponiert zu  $\mathbf{P}_C^f$ . Alternativ können die Transferoperatoren aus einer LDU-Faktorisierung von  $\mathbf{k}^f$  der Form

$$\mathbf{k}^f = \begin{bmatrix} \mathbf{I}^f & \mathbf{0} \\ \mathbf{k}^{Cf} (\mathbf{k}^{ff})^{-1} & \mathbf{I}^C \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{k}^{ff} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{k}^C \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{I}^f & (\mathbf{k}^{ff})^{-1} \mathbf{k}^{fC} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I}^C \end{bmatrix} \quad (\text{IV.2.10})$$

mit Fein- und Grobgittereinheitsmatrix  $\mathbf{I}^f \in \mathcal{R}^{\bar{n}_f \times \bar{n}_f}$  und  $\mathbf{I}^C$  gewonnen werden, indem man eine Gauß-Block-Elimination von (IV.2.5) bezüglich  $\mathbf{k}^{ff}$  vornimmt. Man erhält so die Galerkin-Darstellung  $\mathbf{k}^C = \mathbf{R}_f^C \mathbf{k}^f \mathbf{P}_C^f$  des Schur-Komplements

$$\mathbf{k}^C = \begin{bmatrix} -\mathbf{k}^{Cf} (\mathbf{k}^{ff})^{-1} & \mathbf{I}^C \end{bmatrix} \mathbf{k}^f \begin{bmatrix} -(\mathbf{k}^{ff})^{-1} \mathbf{k}^{fC} \\ \mathbf{I}^C \end{bmatrix} \quad (\text{IV.2.11})$$

aus der sich die Transferoperatoren identifizieren lassen.

### 2.1.4. Glättungsangepaßte Transferoperatoren

Die Glättungseigenschaft des Vor- und Nachglätters kann dazu ausgenutzt werden, um sogenannte glättungsangepaßte Transferoperatoren zu konstruieren. Diese Transferidee ist in der Arbeit RUST & STEIN [139] zu finden. In Analogie zum vorangehenden Subabschnitt assembliert man zunächst auf jedem diskreten Teilgebiet  $\mathcal{B}^p$  eine Subsystemmatrix  $\mathbf{k}^f \in \mathcal{R}^{\bar{n}_f \times \bar{n}_f}$ , die im Anschluß einer Eigenwertanalyse unterzogen wird. Der Feingitterfehler  $\mathbf{e}^f \in \mathcal{R}^{\bar{n}_f}$  wird als Linearkombination der  $\bar{n}_f$  Eigenvektoren  $\boldsymbol{\psi}_i$  der Matrix  $\mathbf{k}^f$  in der Form

$$\mathbf{e}^f = \sum_{i=1}^{\bar{n}_f} \boldsymbol{\psi}_i \alpha_i \quad (\text{IV.2.12})$$

angenommen. Geht man davon aus, daß die mit den  $(\bar{n}_f - \bar{n}_c)$  größten Eigenwerten von  $\mathbf{k}^f$  im Zusammenhang stehenden hochfrequenten Fehleranteile durch Relaxation geglättet werden, kann der verbleibende Fehler auf dem feinen Gitter durch

$$\mathbf{e}^f \approx \sum_{i=1}^{\bar{n}_c} \boldsymbol{\psi}_i \alpha_i =: \boldsymbol{\Psi} \boldsymbol{\alpha} \quad (\text{IV.2.13})$$

approximiert werden. Diese Annahme macht durchaus Sinn, wenn Gitter- und Glättungsoperator spektraläquivalent sind. Abschnitt 1.3.2 folgend ist dies beispielsweise bei einem gedämpften Jakobi-Verfahren als Glätter der Fall. Eine Zerlegung des Fehlers in Grob- und Feingitterkomponenten nach dem Vorbild des vorangehenden Subabschnitts ergibt

$$\mathbf{e}^f = \begin{bmatrix} \mathbf{e}^{f,f} \\ \mathbf{e}^{c,f} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\Psi}^{fC} \\ \boldsymbol{\Psi}^{CC} \end{bmatrix} \boldsymbol{\alpha} \quad (\text{IV.2.14})$$

Daraus folgt  $\boldsymbol{\alpha} = (\boldsymbol{\Psi}^{CC})^{-1} \mathbf{e}^{c,f}$ . Zusammen mit der Transferbedingung  $\mathbf{e}^C = \mathbf{e}^{c,f}$  erhält man schließlich den Prolongationsoperator aus

$$\mathbf{e}^f = \begin{bmatrix} \mathbf{e}^{f,f} \\ \mathbf{e}^{c,f} \end{bmatrix} = \mathbf{P}^{fC} \mathbf{e}^C \quad \text{zu} \quad \mathbf{P}^{fC} := \begin{bmatrix} \boldsymbol{\Psi}^{fC} (\boldsymbol{\Psi}^{CC})^{-1} \\ \mathbf{I}^C \end{bmatrix} \quad (\text{IV.2.15})$$

Der Restriktionsoperator  $\mathbf{R}_f^C$  ist transponiert zu  $\mathbf{P}^{fC}$ . In der Regel ist  $\boldsymbol{\Psi}^{CC}$  singular und im Fall heterogener Materialien sehr schlecht konditioniert. Inversion macht hier nur in Verbindung mit einer *QR*-Zerlegung von  $\boldsymbol{\Psi}^{CC}$  Sinn. Die generierten Grobgitteroperatoren sind häufig so schlecht konditioniert, daß Mehrgitterverfahren hier dennoch versagen können.

RUST & STEIN [139] stellen eine interessante Querverbindung zu den Transferoperatoren des vorangehenden Subabschnitts her. Es sei  $\boldsymbol{\Lambda}^f \in \mathcal{R}^{\bar{n}_f - \bar{n}_c}$  die Diagonalmatrix mit den  $\bar{n}_f - \bar{n}_c$  größten Eigenwerten und  $\boldsymbol{\Lambda}^C \in \mathcal{R}^{\bar{n}_c}$  die Diagonalmatrix mit den verbleibenden Eigenwerten von  $\mathbf{k}^f$ . Führt man eine Blockzerlegung von  $\boldsymbol{\Psi}$  durch, wie sie bereits für  $\mathbf{k}^f$  im letzten Subabschnitt vorgenommen wurde, erhält man mit  $\mathbf{k}^f = \boldsymbol{\Psi} \boldsymbol{\Lambda} \boldsymbol{\Psi}^T$  und der Orthogonalitätsbedingung  $\boldsymbol{\Psi}^T \boldsymbol{\Psi} = \mathbf{I}^f$

$$-(\mathbf{k}^{ff})^{-1} \mathbf{k}^{fC} = \boldsymbol{\Psi}^{fC} (\boldsymbol{\Psi}^{CC})^{-1} - \left( \boldsymbol{\Psi}^{fC} \boldsymbol{\Lambda}^C (\boldsymbol{\Psi}^{fC})^T + \boldsymbol{\Psi}^{ff} \boldsymbol{\Lambda}^f (\boldsymbol{\Psi}^{ff})^T \right)^{-1} \boldsymbol{\Psi}^{fC} \boldsymbol{\Lambda}^C (\boldsymbol{\Psi}^{CC})^{-1} \quad (\text{IV.2.16})$$

In der Regel sollte  $\boldsymbol{\Lambda}^C \ll \boldsymbol{\Lambda}^f$ . In diesem Fall ist der zweite Term in (IV.2.16) vernachlässigbar klein, und die Transferoperatoren in (IV.2.9) und (IV.2.15) sind nahezu identisch.

### 2.1.5. Algebraisch motivierte Transferoperatoren

In diesem Abschnitt wird eine mehrdimensionale Variante des algebraischen Transfers von RUGE & STÜBEN [138] beschrieben. Algebraische Transferoperatoren werden unabhängig von der Gittergeometrie generiert. Die groben Gitter sind nur Untermengen der Punkte des feinen Gitters und repräsentieren kein Gitter im geometrischen Sinn. Eine wesentliche Eigenschaft der algebraischen Mehrgittermethoden ist, daß Vergrößerung in Richtung sogenannter starker Verbindungen erfolgt, in der der Iterationsfehler nur unwesentlich oszilliert. Abschnitt 1.2.1 gibt darüber näher Aufschluß. Der geglättete Fehler  $e^f \in \mathcal{R}^{\tilde{n}_f}$  wird dort im Sinne von

$$S e^f \approx e^f \quad (\text{IV.2.17})$$

algebraisch glatt genannt. Algebraische Vergrößerung erfordert einen Selektierungsalgorithmus, wonach Punkte des Feingitters als Grob- und Feingitterpunkte klassifiziert werden. In diesem Kontext wird in RUGE & STÜBEN [138] das Konzept der stark gekoppelten Knoten und in VANĚK, MANDEL & BREZINA [156, 157] das Konzept der geglätteten Aggregation eingeführt. Im Folgenden wird von einem algebraischen Vergrößerungsmechanismus abgesehen. Zur Konstruktion der Transferoperatoren soll die vorgegebene Netzhierarchie genutzt werden. Im ersten Schritt wird eine Steifigkeitsmatrix  $k^f \in \mathcal{R}^{\tilde{n}_f \times \tilde{n}_f}$  aus den Komponenten der Gesamtsteifigkeitsmatrix  $K^f$  lokal in  $\mathcal{B}^p$  generiert. Im zweiten Schritt wird die Menge  $\mathcal{P}$  der Gitterpunkte im betrachteten Teilgebiet  $\mathcal{B}^p$  in die Untermenge  $\mathcal{C}$  der Grobgitterpunkte und in die Untermenge  $\mathcal{F}$  der Feingitterpunkte zerlegt. Ferner definiert man Untermengen  $\mathcal{N}_i^{\mathcal{C}} \subset \mathcal{P}$  und  $\mathcal{N}_i^{\mathcal{F}} \subset \mathcal{P}$  aus Grob- und Feingitterpunkten, die mit dem Feingitterknoten  $i$  stark gekoppelt sind. Ein Knoten  $j$  sei mit Knoten  $i \neq j$  stark gekoppelt, wenn die Frobeniusnorm  $\|k_{ij}^f\|$  ungleich null ist. Im dritten und letzten Schritt wird die Matrixdarstellung des Prolongationsoperators festgelegt. An Grobgitterpunkten gilt die Transferbedingung  $P^f_{\mathcal{C}} = 1$ . An den Rändern  $\partial\mathcal{B}^p$  werden Grobgitterfreiheitsgrade  $A$  an Feingitterfreiheitsgraden  $a$  linear und matrixgewichtet interpoliert mit

$$P^a_A = \frac{k_{aA}^f}{\sum_B k_{aB}^f} \quad (\text{IV.2.18})$$

Die verbleibenden Komponenten des Prolongationsoperators werden basierend auf (IV.2.17) berechnet. Der Glättungsoperator hat generell die Form  $S = I - WK^f$  mit regulärer Matrix  $W \in \mathcal{R}^{\tilde{n}_f \times \tilde{n}_f}$  und Einheitsmatrix  $I \in \mathcal{R}^{\tilde{n}_f \times \tilde{n}_f}$ . Diese Beziehung in (IV.2.17) eingesetzt ergibt lokal

$$\sum_{j \in \mathcal{P}} k_{ij}^f e_j^f \approx 0 \quad , \quad i \in \mathcal{F} \quad (\text{IV.2.19})$$

$k_{ij}^f$  sind Block-Diagonalmatrizen mit der Anzahl von Freiheitsgraden pro Knoten als Dimension. Der Fehler  $e^f = e^{f,f} + e^{C,f}$  ist in Parameter  $e^{C,f}$ , die an Grobgitterknoten definiert sind, und in Parameter  $e^{f,f}$ , die an Feingitterknoten definiert sind, aufzuspalten. Nimmt man als Gedankenexperiment an, daß (IV.2.19) exakt erfüllt und  $e_j$  mit  $J \in \mathcal{C}$  gegebene Grobgitterwerte sind, erhält man aus (IV.2.19) ein Block-Interpolationsschema bezüglich Feingitterknoten  $i$

$$k_{ii}^f e_i^{f,f} = - \sum_{J \in \mathcal{N}_i^{\mathcal{C}}} k_{iJ}^f e_J^{C,f} - \sum_{j \in \mathcal{N}_i^{\mathcal{F}}} k_{ij}^f e_j^{f,f} \quad , \quad i \in \mathcal{F} \quad (\text{IV.2.20})$$

Für  $e_j^{f,f}$  mit  $j \in \mathcal{N}_i^{\mathcal{F}}$  definiert man ein analoges Interpolationsschema, in dem aber der Einfluß

benachbarter Feingitterknoten mit Ausnahme von  $i$  vernachlässigt wird. Diese Vereinfachung ist nur gestattet in Verbindung mit einer Modifikation der Diagonalkomponenten  $k_{jj}^f$  in der Form

$$\tilde{k}_{jj}^f = - \sum_{K \in \mathcal{N}_i^c} k_{jK}^f - k_{ji}^f \tag{IV.2.21}$$

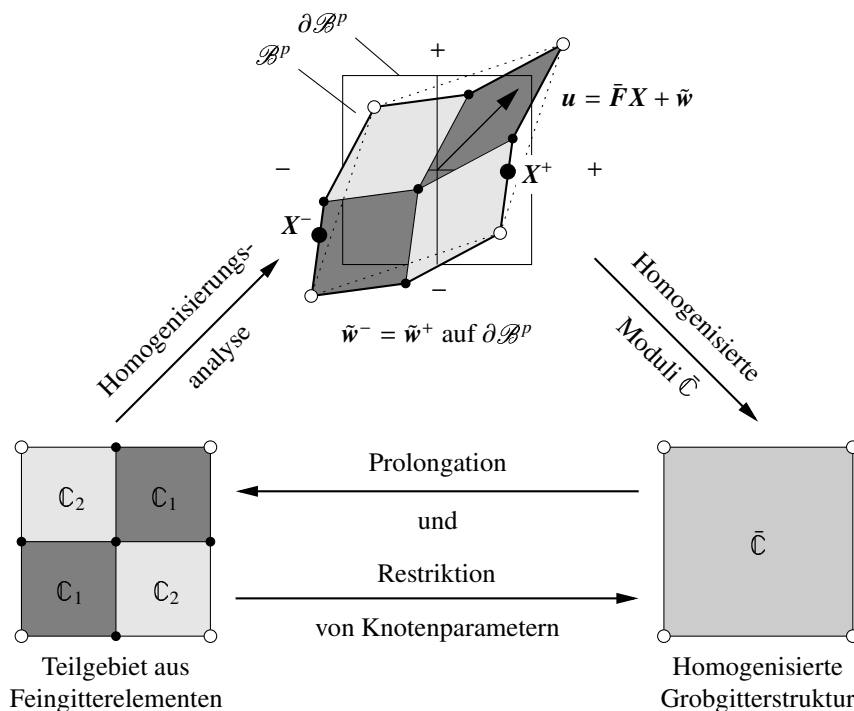
um störende Starrkörperanteile im Lösungsprozeß zu vermeiden. Der Ausdruck (IV.2.21) folgt aus der Bedingung  $\mathbf{K}^f \mathbf{I}^f = \mathbf{0}^f$ . Er ist äquivalent mit der Summe aus  $k_{jj}^f$  und den Matrixeinträgen der vernachlässigten Feingitterpunkte. Mit diesen Annahmen erhält man schließlich aus (IV.2.20) und der Transferbedingung  $\mathbf{e}_i^{f,f} = \mathbf{P}^i_J \mathbf{e}_J^{C,f}$  den Prolongationsoperator zu

$$\mathbf{P}^i_J = - \left( k_{ii}^f - \sum_{j \in \mathcal{N}_i^f} k_{ij}^f (\tilde{k}_{jj}^f)^{-1} k_{ji}^f \right)^{-1} \left( k_{iJ}^f - \sum_{j \in \mathcal{N}_i^f} k_{ij}^f (\tilde{k}_{jj}^f)^{-1} k_{jJ}^f \right) \tag{IV.2.22}$$

$\mathbf{R}_f^C$  ist transponiert zu  $\mathbf{P}_C^f$ . (IV.2.22) stimmt mit der Darstellung des Prolongationsoperators von Ruge und Stüben überein, wenn jedem Knoten nur ein Freiheitsgrad zugeordnet wird.

### 2.2. Neue Transferkonzepte basierend auf Homogenisierung

In diesem Abschnitt werden neue Transferoperatoren vorgestellt. Durch die Kombination von Mehrgitterverfahren mit Homogenisierungstechniken soll erreicht werden, den Einfluß der Heterogenität der Mikrostruktur auf den iterativen Lösungsprozeß zu berücksichtigen. Die Idee ist, die Zweigittermethode als abstraktes Zweiskalenmodell zu motivieren. In Abb. 53 wird der Gittertransfer als Skalenübergang zwischen der heterogenen Mikroskale und der homogenisierten



**Abbildung 53:** Motivation der neuen homogenisierungsbasierten Transferoperatoren. Der Gittertransfer wird mit einer Zweiskalenanalyse gekoppelt.

Makroskale interpretiert. Die erforderlichen Parameter zur stückweisen Konstruktion der Transferoperatoren werden aus einer Homogenisierungsanalyse gewonnen. Diese Assoziationen und Verknüpfungen sollen im Folgenden näher beleuchtet werden. Im ersten Schritt wird ein numerisches Homogenisierungskonzept als Ausgangspunkt für die Entwicklung problemangepaßter Transferoperatoren diskutiert. Im zweiten Schritt werden neue Transferoperatoren für hierarchische Gitterstrukturen mit konformen Ansatzräumen spezifiziert, gekoppelt mit (i) linearen und (ii) periodischen Randverschiebungen und mit (iii) homogenen Randspannungen auf dem Rand diskreter Teilbereiche. Hierbei werden Ergebnisse des ersten Schritts miteinbezogen und fundamentale numerische Aspekte angesprochen.

### 2.2.1. Diskretes Homogenisierungskonzept

Es wird hier ein hierarchisch verfeinertes Grobgitterelement als diskreter Teilbereich  $\mathcal{B}^p$  des Gesamtsystems betrachtet.  $\mathcal{B}^p$  sei diskrete Referenzkonfiguration. Die Forderung nach energetischer Konsistenz zwischen Fein- und Grobgitterstruktur in  $\mathcal{B}^p$  unter gleichen Anfangs- und Randbedingungen motiviert, den Gittertransfer von fein nach grob durch ein Mikro-Makro-Variationsprinzip der Form (III.5.12) zu definieren. Der makroskopisch treibende Deformationsgradient ist dort als Funktion der Grobgitterverschiebungen darzustellen, die zur Berechnung von Transferoperatoren als gegebene Größen vorauszusetzen sind. Bei der Newton-Mehrgittermethode wird das lineare Mehrgitterverfahren zur Lösung des linearisierten Randwertproblems herangezogen. Ziel der Homogenisierungsanalyse ist hier, die Sensitivität des linearisierten Materialverhaltens infolge eines Inkrements  $\Delta \bar{\mathbf{F}}$  auf diskrete Feingitterverschie-

#### Box 18: Diskrete Formulierung der Randbedingungen.

Auf dem Rand  $\partial \mathcal{B}^p$  der Mikrostruktur  $\mathcal{B}^p$  definierte lineare Verschiebungen (D), periodische Verschiebungen (P) oder homogene Spannungen (S)

$$(D) \quad \Delta \tilde{\mathbf{w}} = \mathbf{0} \quad \text{auf } \partial \mathcal{B}^p$$

$$(P) \quad \llbracket \Delta \tilde{\mathbf{w}} \rrbracket = \mathbf{0} \quad \text{auf } \partial \mathcal{B}^{p+}$$

$$(S) \quad \int_{\partial \mathcal{B}^p} \Delta \tilde{\mathbf{w}} \otimes \mathbf{N} \, dA = \mathbf{0} \quad \text{auf } \partial \mathcal{B}^p$$

sind für  $N_b$  Randfreiheitsgrade  $\Delta \tilde{\mathbf{d}}_b \in \mathcal{R}^{N_b}$  in der Form

$$\boldsymbol{\Sigma} \Delta \tilde{\mathbf{d}}_b = \mathbf{0} \quad \text{auf } \partial \mathcal{B}^p$$

diskret darzustellen in Verbindung mit den Oberflächendiskretisierungen

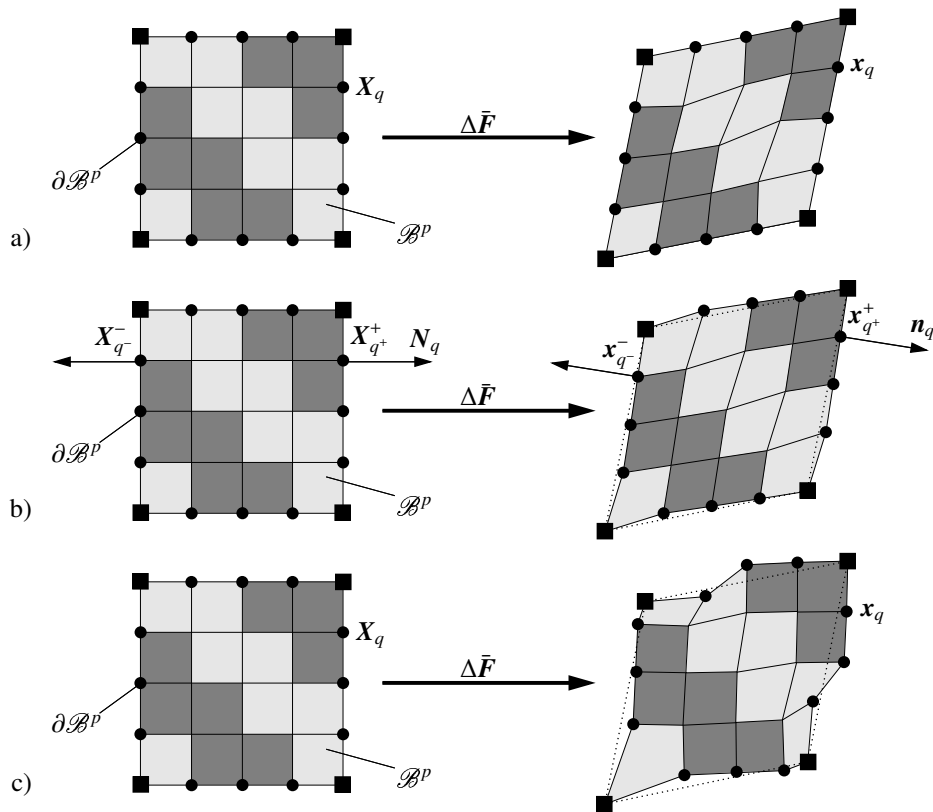
$$(D) \quad \boldsymbol{\Sigma} = \mathbf{I} \quad , \quad \boldsymbol{\Sigma} \in \mathcal{R}^{N_b \times N_b}$$

$$(P) \quad \boldsymbol{\Sigma} = \mathbf{P} \quad , \quad \boldsymbol{\Sigma} \in \mathcal{R}^{N_b \times N_b}$$

$$P_{ij} = \begin{cases} +1 & , \text{ für } i = j \\ -1 & , \text{ bei miteinander gekoppelten Randfreiheitsgraden } i \neq j \\ 0 & , \text{ ansonsten} \end{cases}$$

$$(S) \quad \boldsymbol{\Sigma} = \mathbf{S} \quad , \quad \boldsymbol{\Sigma} \in \mathcal{R}^{d^2 \times N_b} \quad \text{mit Dimension } d \text{ des Modellproblems}$$

$\mathbf{S}$  wird in den Abschnitten D.1 und D.2 des Anhangs spezifiziert



**Abbildung 54:** Homogenisierung eines diskreten heterogenen Teilbereichs  $\mathcal{B}^p \subset \mathcal{B}$  in Verbindung mit a) linearen oder b) periodischen Randverschiebungen oder c) homogenen Randspannungen an mit • gekennzeichneten Feingitterpunkten  $X_q \in \partial \mathcal{B}^p$ . Die hierzu erforderliche makroskopisch treibende Variable  $\Delta \bar{F}$  ergibt sich aus den Verschiebungen der Grobgitterpunkte ■.

bungen  $\Delta \mathbf{d}$  an der eingefrorenen Stelle  $\bar{\mathbf{d}}$  auszuwerten. In diesem Zusammenhang wird (III.5.12) als diskretes linearisiertes Funktional

$$\bar{W}^h(\Delta \bar{F}) = \inf_{\Delta \mathbf{d} \in \mathcal{U}(\Delta \bar{F})} \bar{w}^h(\Delta \mathbf{d}) \quad \text{mit} \quad \bar{w}^h(\Delta \mathbf{d}) = \frac{1}{|\mathcal{B}^p|} \sum_{e=1}^{\bar{n}_{ele}} \int_{\mathcal{B}_e^p} W^h(\mathbf{B}(\bar{\mathbf{d}}^e + \Delta \mathbf{d}^e)) dV \quad (\text{IV.2.23})$$

angenommen.  $\bar{n}_{ele}$  ist hierbei die Anzahl Finiter Elemente  $\mathcal{B}_e^p \subset \mathcal{B}^p$ , durch die  $\mathcal{B}^p$  approximiert wird. Die numerische Umsetzung des Transfers vereinfacht sich, wenn man die diskreten inkrementellen Knotenverschiebungen

$$\Delta \mathbf{d}_q = \Delta \bar{F} X_q + \tilde{\Delta \mathbf{d}}_q \quad , \quad q = 1, \dots, N \quad (\text{IV.2.24})$$

an allen  $N$  Gitterpunkten von  $\mathcal{B}^p$  in einen linearen Anteil und einen Fluktuationsanteil  $\tilde{\Delta \mathbf{d}}$  additiv zerlegt. Diese Zerlegung bewirkt auch, wie sich später noch zeigen wird, daß sich der neue Transfer als Erweiterung des geometrischen Transfers darstellen läßt. Die Homogenisierung ist in Verbindung mit (i) linearen Fluktuationsverschiebungen  $\Delta \tilde{\mathbf{w}} = \mathbf{0}$ , (ii) periodischen Fluktuationsverschiebungen  $[[\Delta \tilde{\mathbf{w}}]] = \mathbf{0}$  oder (iii) homogenen Randspannungen mit  $\int_{\partial \mathcal{B}^p} \Delta \tilde{\mathbf{w}} \otimes \mathbf{N} dA = \mathbf{0}$  auf  $\partial \mathcal{B}^p$  durchzuführen. Die Randbedingungen werden in Box 18 diskret formuliert. Sie sind an Feingitterrandpunkten von  $\partial \mathcal{B}^p$  diskret umzusetzen. In Abb. 54 führen sie auf unterschiedlich deformierte Konfigurationen des heterogenen diskreten Teilbereichs  $\mathcal{B}^p$ . Im Fall periodischer Randbedingungen sind diskrete Verschiebungsfluktuationen  $\Delta \tilde{\mathbf{d}}^- = \Delta \tilde{\mathbf{d}}^+$  an



Feingitterpunkten  $X_{q^-} \in \partial\mathcal{B}^p$  und  $X_{q^+} \in \partial\mathcal{B}^p$  von einander gegenüberliegenden Rändern miteinander zu koppeln. Das Variationsfunktional (IV.2.23) wird als Funktional mit Strafterm, der die Randbedingung enthält, unter Berücksichtigung der Zerlegung (IV.2.24) in der Form

$$\bar{W}^h(\Delta\bar{F}) = \inf_{\Delta\tilde{d} \in \mathcal{S}^f} \left\{ \bar{w}^h(\Delta\tilde{d}, \Delta\bar{F}) - \frac{\eta}{2|\mathcal{B}^p|} \Delta\tilde{d}_b^T \Sigma^T \Sigma \Delta\tilde{d}_b \right\} \quad (\text{IV.2.25})$$

spezifiziert. Im Hinblick auf eine Auswertung von (IV.2.25) sind die partiellen Ableitungen

$$\left. \begin{aligned} \bar{w}_{,\bar{F}\bar{F}}^h &= \frac{1}{|\mathcal{B}^p|} \mathbf{A}_{e=1}^{n_{ele}} \int_{\mathcal{B}^e} [\mathbb{C}] dV \\ \bar{w}_{,dd}^h &= \frac{1}{|\mathcal{B}^p|} \mathbf{A}_{e=1}^{n_{ele}} \int_{\mathcal{B}^e} \mathbf{B}^T [\mathbb{C}] \mathbf{B} dV \\ \bar{w}_{,d\bar{F}}^h &= \frac{1}{|\mathcal{B}^p|} \mathbf{A}_{e=1}^{n_{ele}} \int_{\mathcal{B}^e} \mathbf{B}^T [\mathbb{C}] dV = (\bar{w}_{,\bar{F}d}^h)^T \end{aligned} \right\} \quad (\text{IV.2.26})$$

mit Materialparameter

$$[\mathbb{C}] = \begin{cases} \partial_{\mathbf{F}\mathbf{F}}^2 W^h & \text{auf der feinsten Gitterebene} \\ [\bar{\mathbb{C}}] & \text{auf allen anderen Gitterebenen} \end{cases} \quad (\text{IV.2.27})$$

zu bilden. Hier sind  $[\bar{\mathbb{C}}]$  die aus einer Homogenisierungsanalyse gewonnenen effektiven Moduli. Die Variationsgleichung

$$\begin{aligned} (\delta\bar{W}^h) &= [\delta\Delta\bar{F}]^T [\bar{\mathbb{C}}] [\Delta\bar{F}] \doteq \Delta(\delta\bar{w}^h) = \delta\Delta\tilde{d}^T (\tilde{w}_{,dd} \Delta\tilde{d} + \bar{w}_{,d\bar{F}}^h [\Delta\bar{F}]) \\ &\quad + [\delta\Delta\bar{F}]^T (\bar{w}_{,\bar{F}d}^h \Delta\tilde{d} + \bar{w}_{,\bar{F}\bar{F}}^h [\Delta\bar{F}]) \end{aligned} \quad (\text{IV.2.28})$$

liefert den linearen Zusammenhang

$$\Delta\tilde{d} = -\tilde{w}_{,dd}^{-1} \bar{w}_{,d\bar{F}}^h [\Delta\bar{F}] \quad (\text{IV.2.29})$$

wo eine weitere Unterscheidung von Gitterpunkten in Gebietsknoten  $X_a \in \mathcal{B}^p \setminus \partial\mathcal{B}^p$  und Randknoten  $X_b \in \partial\mathcal{B}^p$

$$\tilde{w}_{,dd} = \begin{bmatrix} \bar{w}_{,d_a d_a}^h & \bar{w}_{,d_a d_b}^h \\ (\bar{w}_{,d_a d_b}^h)^T & \bar{w}_{,d_b d_b}^h - \frac{\eta}{|\mathcal{B}^p|} \Sigma^T \Sigma \end{bmatrix} \quad (\text{IV.2.30})$$

ergibt. Eine weitere Auswertung von (IV.2.28) führt auf  $[\bar{\mathbb{C}}][\Delta\bar{F}] = \bar{w}_{,\bar{F}\bar{F}}^h [\Delta\bar{F}] + \bar{w}_{,\bar{F}d}^h \Delta\tilde{d}$ . Durch Koeffizientenvergleich extrahiert man daraus zusammen mit (IV.2.29) als effektive Moduli

$$[\bar{\mathbb{C}}] = \bar{w}_{,\bar{F}\bar{F}}^h - \bar{w}_{,\bar{F}d}^h \tilde{w}_{,dd}^{-1} \bar{w}_{,d\bar{F}}^h \quad (\text{IV.2.31})$$

Die effektiven Materialparameter (IV.2.31) werden auf den Grobgittern benötigt, um dort nach gleichem Vorbild (IV.2.29) als fundamentale Beziehung zur Konstruktion des Gittertransfers zu erhalten. Im Kontext linearer bzw. periodischer Randverschiebungen auf  $\partial\mathcal{B}^p$  kann man durch statische Kondensation  $\Delta\tilde{d} = \mathbf{0}$  bzw. geometrische Kondensation  $[[\Delta\tilde{d}]] = \mathbf{0}$  von Randfreiheitsgraden erreichen, daß anstelle von (IV.2.30) eine reduzierte Matrix  $\bar{w}_{,dd}^h$  mit weniger numerischem Aufwand aufgebaut werden kann. Im homogenen Fall  $\mathbb{C} = \text{const.}$  in  $\mathcal{B}^p$  ist  $\Delta\tilde{d} = \mathbf{0}$ .

### 2.2.2. Transfer für hierarchische konforme Gitterstrukturen

Im Teilbereich  $\mathcal{B}^p$  sind Knoten in nichtüberlappende Mengen  $\mathcal{C}$  und  $\mathcal{F}$  aus Grob- und Feingitterpunkten entsprechend Abb. 52 zu zerlegen. Ziel ist, den Datentransfer in einem solchen Teilbereich von  $\mathcal{C}$ - zu  $\mathcal{F}$ -Knoten in kanonischer Form bereitzustellen. Das Prinzip der Skalenseparation setzt große Skalenerunterschiede voraus. Der Skalenerunterschied zwischen Fein- und Grobgitter ist sehr klein. Die Forderung nach Homogenität des Deformationszustands im Grobgitter muß daher aufgeweicht werden. Naheliegend ist, den linearen Verschiebungsanteil  $\Delta\bar{\mathbf{F}}\mathbf{X}_q$  mit dem Verschiebungsfeld des Grobgitters gleichzusetzen, der mit Verschiebungsfeldfluktuationen  $\Delta\tilde{\mathbf{w}}$  des Feingitters zu überlagern ist. Diese Annahmen motivieren die Zerlegung der inkrementellen diskreten Verschiebungen  $\mathbf{d}^f = \bar{\mathbf{d}}^f + \tilde{\mathbf{d}}^f$  in einen langwelligen Anteil  $\bar{\mathbf{d}}^f$  und einen oszillierenden Anteil  $\tilde{\mathbf{d}}^f$ . Es wird eine entsprechende Zerlegung des Prolongationsoperators

$$\mathbf{P}^f_{\mathcal{C}} = \bar{\mathbf{P}}^f_{\mathcal{C}} + \tilde{\mathbf{P}}^f_{\mathcal{C}} \quad (\text{IV.2.32})$$

vorgenommen, um die Parameter  $\bar{\mathbf{d}}^f$  und  $\tilde{\mathbf{d}}^f$  in der Form  $\mathbf{d}^f = \mathbf{P}^f_{\mathcal{C}}\mathbf{d}^C$ ,  $\bar{\mathbf{d}}^f = \bar{\mathbf{P}}^f_{\mathcal{C}}\mathbf{d}^C$  und  $\tilde{\mathbf{d}}^f = \tilde{\mathbf{P}}^f_{\mathcal{C}}\mathbf{d}^C$  zu identifizieren. Die mit  $\bar{\mathbf{d}}^f$  verbundene Interpolationsvorschrift ist definiert durch

$$\bar{\mathbf{d}}^f_{ia} = \sum_I \sum_A N_I^C(\mathbf{X}_i^f) \delta_{aA} d_{IA}^C \quad (\text{IV.2.33})$$

mit  $N_I^C(\mathbf{X}^f)$  als Ansatzfunktion des Grobgitteransatzraums bezüglich Knoten  $I$ . Es bezeichnen  $a$  Freiheitsgrade am Feingitterknoten  $i$  und  $A$  Freiheitsgrade am Grobgitterknoten  $I$ .  $\delta_{aA}$  ist das Kronecker-Symbol. Für die diskreten Knotenparameter des Fluktuationfelds ergibt sich aus (IV.2.29) die Interpolationsvorschrift

$$\tilde{\mathbf{d}}^f_{ia} = - \sum_j \sum_K (\tilde{\mathbf{w}}^{-1}_{,ad})_{(ia)j} (\bar{\mathbf{w}}^h_{,d\bar{\mathbf{F}}})_{jK} [\Delta\bar{\mathbf{F}}]_K =: \sum_K H_{(ia)K} [\Delta\bar{\mathbf{F}}]_K \quad (\text{IV.2.34})$$

Doppelindizes in runden Klammern beziehen sich entweder nur auf den Zeilen- oder Spaltenindex der Matrix. In Übereinstimmung mit den eingangs erwähnten Modifikationen wird die makroskopische Deformation  $\Delta\bar{\mathbf{F}}$  durch die diskreten Grobgitterverschiebungen parametrisiert:

$$[\Delta\bar{\mathbf{F}}]_K := \sum_I \sum_A \bar{\mathbf{B}}^C_{K(IA)} d_{IA}^C \quad (\text{IV.2.35})$$

$\bar{\mathbf{B}}^C_{K(IA)}(\mathbf{X}^C)$  sind Mittelwerte der  $\mathbf{B}$ -Matrizen des Grobgitteransatzraums über das Volumen des Teilgebiets  $\mathcal{B}^p$ . Mit (IV.2.33)–(IV.2.35) erhält man die benötigte Transferbedingung

$$\mathbf{d}^f_{ia} = \sum_I \sum_A N_I^C(\mathbf{X}_i^f) \delta_{aA} d_{IA}^C + \sum_I \sum_A \sum_K H_{(ia)K} \bar{\mathbf{B}}^C_{K(IA)} d_{IA}^C \quad (\text{IV.2.36})$$

Daraus extrahiert man den Prolongationsoperator in der geschlossenen Form

$$\mathbf{P}^{ia}_{IA} = N_I^C(\mathbf{X}_i^f) \delta_{aA} + \sum_K H_{(ia)K} \bar{\mathbf{B}}^C_{K(IA)} \quad (\text{IV.2.37})$$

Mit (IV.2.32) ergeben sich die Ausdrücke

$$\bar{\mathbf{P}}^{ia}_{IA} = N_I^C(\mathbf{X}_i^f) \delta_{aA} \quad \text{und} \quad \tilde{\mathbf{P}}^{ia}_{IA} = \sum_K H_{(ia)K} \bar{\mathbf{B}}^C_{K(IA)} \quad (\text{IV.2.38})$$

Hier ist  $\bar{\mathbf{P}}^f_{\mathcal{C}}$  der geometrische Prolongationsoperator (IV.2.4). Für den Restriktionsoperator gilt  $\mathbf{R}^C_f = (\mathbf{P}^f_{\mathcal{C}})^T$ . Zu beachten ist, daß zwischen restringiertem und dem mit effektiven Tangentemoduli generiertem Grobgitteroperator in der Regel eine Diskrepanz auftritt. Sonderfälle mit identischen Gitteroperatoren sind Gebietsdiskretisierungen mit linearen Ansatzräumen.

### 2.2.3. Transferoperatoren gekoppelt mit linearen Randverschiebungen

Die mit  $\Delta \vec{d} = \mathbf{0}$  auf  $\partial \mathcal{B}^p$  statisch kondensierte Steifigkeitsmatrix  $\mathbf{k}^f = \overline{\mathbf{w}}_{,d\bar{d}}^h$  wird aus Komponenten der Gesamtsteifigkeitsmatrix  $\mathbf{K}^f$  generiert. Die diskreten Verschiebungsfuktuationen können vollständig als Funktionen der Geometrie von  $\mathcal{B}^p$  und der Matrixeinträge von  $\mathbf{K}^f$  beschrieben werden, wenn man  $\overline{\mathbf{w}}_{,d\bar{F}}^h \mathbf{B}^C$  durch  $\mathbf{k}^f \mathbf{N}^C$  ersetzt. An den Rändern der diskreten Teilbereiche wird geometrisch interpoliert. Man definiert  $P^{ia}_{IA} := 1$  an Grobgitterpunkten  $\mathbf{X}_I^C = \mathbf{X}_i^f$ . Für alle anderen Knoten verwendet man ein Interpolationsschema der Form (IV.2.37). Der hier für den Fluktuationsanteil verantwortliche Summenterm ist entsprechend zu ersetzen. Als Transferoperatoren erhält man insgesamt

$$P^{ia}_{IA} = R^{IA}_{ia} := \begin{cases} 1 & , \mathbf{X}_I^C = \mathbf{X}_i^f \\ N_I^C(\mathbf{X}_i^f) \delta_{aA} & , i \in \partial \mathcal{B}^p \\ N_I^C(\mathbf{X}_i^f) \delta_{aA} - \sum_{j \in \mathcal{B}^p \setminus \partial \mathcal{B}^p} \sum_{k \in \partial \mathcal{B}^p} (\mathbf{k}^f)_{(ia)j}^{-1} \mathbf{k}_{jk}^f N_I^C(\mathbf{X}_k^f) \delta_{aA} & , \text{sonst} \end{cases} \quad (\text{IV.2.39})$$

Haben die diskreten Teilbereiche die Abmessung einer Einheitszelle der periodischen Mikrostruktur, reduziert sich (IV.2.39) auf der nächstgrößeren Gitterebene auf den geometrischen matrixunabhängigen Transfer (IV.2.4).

### 2.2.4. Transferoperatoren gekoppelt mit periodischen Randverschiebungen

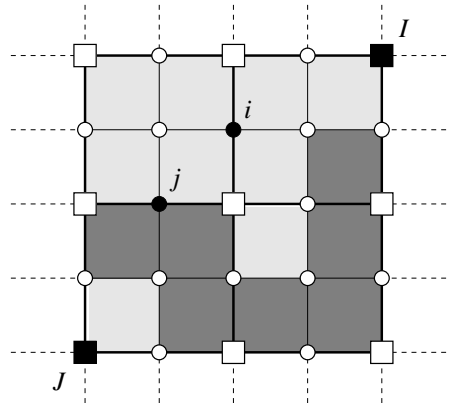
Die mit  $[[\Delta \vec{d}]] = \mathbf{0}$  auf  $\partial \mathcal{B}^p$  geometrisch kondensierte Steifigkeitsmatrix  $\mathbf{k}^f = \overline{\mathbf{w}}_{,d\bar{d}}^h$  und Matrix  $\overline{\mathbf{w}}_{,d\bar{F}}^h$  sind auf der feinsten Gitterebene mit Moduli  $\partial_{FF}^2 W^h$  zu assemblieren. Auf groben Gitterebenen sind sie mit effektiven Tangentenmoduli  $\bar{\mathbb{C}}$  der Form (IV.2.31) zu generieren, falls mehr als zwei Gitterebenen einbezogen werden. Hierzu ist auf den Grobgittern jeweils ein effektiver Materialtensor pro Element temporär vorzuhalten. Der Datentransfer von  $C$ - zu  $f$ -Knoten erfolgt basierend auf (IV.2.37). Mit  $f$ -Knoten auf Rändern  $\partial \mathcal{B}^* \subset \partial \mathcal{B}^p$ , die zwei angrenzende diskrete Teilbereiche voneinander trennen, muß speziell verfahren werden. Verschiebungsfuktuationen an solchen Knoten werden superponiert. Das führt dazu, daß die Summe von Einträgen in der mit einem Freiheitsgrad von  $\partial \mathcal{B}^*$  indizierten Zeile der Prolongationsmatrix den Wert 2 hat. Die Folge davon ist, daß die erforderliche Bedingung

$$P^f_C \mathbf{I}^C \stackrel{!}{=} \mathbf{I}^f \quad (\text{IV.2.40})$$

mit  $\mathbf{I}^C = [1, \dots, 1]^T \in \mathcal{R}^{n_C}$  und  $\mathbf{I}^f = [1, \dots, 1]^T \in \mathcal{R}^{n_f}$  nicht eingehalten wird und Starrkörperverschiebungen den iterativen Mehrgitterlösungsprozeß beeinträchtigen. Abhilfe schafft hier eine einfache Maßnahme, wonach die betreffenden Komponenten der Prolongationsmatrix gleichermaßen mit dem Faktor  $1/2$  zu wichten sind, sodaß (IV.2.40) erfüllt ist. Analog zum vorangehenden Subabschnitt definiert man  $P^{ia}_{IA} := 1$  an Grobgitterknoten  $\mathbf{X}_I^C = \mathbf{X}_i^f$ . Zusammenfassend ergibt sich folgendes algorithmisches Schema zur Konstruktion der Transferoperatoren:

$$P^{ia}_{IA} = R^{IA}_{ia} := \begin{cases} 1 & , \mathbf{X}_I^C = \mathbf{X}_i^f \\ \left\{ N_I^C(\mathbf{X}_i^f) \delta_{aA} + \sum_K H_{(ia)K} \bar{B}_{K(IA)}^C \right\} \frac{1}{2} + P^{ia}_{IA} & , i \in \partial \mathcal{B}^* \\ N_I^C(\mathbf{X}_i^f) \delta_{aA} + \sum_K H_{(ia)K} \bar{B}_{K(IA)}^C & , \text{sonst} \end{cases} \quad (\text{IV.2.41})$$

Es ist mit durch Nullen initialisierten Transfermatrizen zu starten. Vereinfachungen der Transferoperatoren ergeben sich analog wie im vorangehenden Subabschnitt. Numerische Simulationen belegen, daß der Anwendungsbereich der Transferoperatoren auf lineare Ansatzräume zu beschränken ist. Dies ist darin begründet, daß nur in diesem Spezialfall der in  $\mathcal{B}^p$  generierte Grobgitteroperator mit dem aus effektiven Moduli gebildeten Operator identisch ist. Zu beachten ist ferner, daß die Bandbreite der Gesamtsteifigkeitsmatrix in der Regel größer ist als bei Anwendung eines geometrischen Transfers. Die Ursache liegt in weitreichenden Kopplungen von Grobgitterknoten. So besteht z.B. zwischen den Knoten  $I$  und  $J$  in Abb. 55 allgemein der



**Abbildung 55:** Einfluß zweier nicht benachbarter Grobgitterpunkte  $I$  und  $J$ . Dargestellt ist ein diskreter Teilbereich mit vier Grobgitterelementen, in denen Transferoperatoren zwischen Grobgitterpunkten ( $\square$ ) und Feingitterpunkten ( $\circ$ ) lokal definiert sind. Aufgrund der Galerkin-Darstellung  $K_{IJ}^C = R^I K_{ij}^f P^j$  kann  $K_{IJ}^C \neq 0$  sein, was eine größere Matrixbandbreite von  $K^C$  zur Folge hat.

von Null abweichende Zusammenhang  $K_{IJ}^C = R^I K_{ij}^f P^j$  mit Elementsubmatrizen  $K_{ij}^f \neq 0$ . Die Bandbreite bleibt aber bei zunehmender Netzvergrößerung beschränkt. In numerischen Berechnungen zeigt sich, daß die Transferoperatoren bei linearen Ansatzräumen der Gitterebenen trotz größerer Bandbreite anderen Standard-Verfahren hinsichtlich Rechenzeiten überlegen sind.

### 2.2.5. Transferoperatoren gekoppelt mit homogenen Randspannungen

Subabschnitt 2.2.1 folgend müssen hierfür die lokalen Matrizen  $k^f = \bar{w}_{,dd}^h, \bar{w}_{,d\bar{F}}^h$  und  $\Sigma$  lokal aufgebaut werden. Bei den ersten beiden Matrizen verfährt man analog wie im vorangehenden Subabschnitt. Zu beachten ist hier, daß bei mehr als zwei Gitterebenen effektive Tangentmoduli  $\bar{C}$  der Form (IV.2.31) auf den Grobgittern elementweise zwischenspeichern sind. Homogene Spannungsrandbedingungen auf  $\partial\mathcal{B}^p$  werden im Strafterm von  $\bar{w}_{,dd}$  berücksichtigt. Durch geeignete Variation des Strafparameters  $\eta$  hat man die Möglichkeit, die für kleine Skalendifferenzen zwischen den Gitterebenen sehr starke Forderung nach Homogenität des makroskopischen Deformationszustands kontrolliert aufzuweichen. Numerische Rechnungen zeigen, daß dadurch bei Gebietstriangulierungen mit linearen Verschiebungselementen eine Verbesserung der Mehrgitterkonvergenz erzielt werden kann. Algorithmisch erhält man die Transferoperatoren nach gleichem Schema wie im letzten Subabschnitt:

$$P^{ia}_{IA} = R^{IA}_{ia} := \begin{cases} 1 & , X_I^C = X_i^f \\ \left\{ N_I^C(X_i^f) \delta_{aA} + \sum_K H_{(ia)K} \bar{B}_{K(IA)}^C \right\} \frac{1}{2} + P^{ia}_{IA} & , i \in \partial\mathcal{B}^* \\ N_I^C(X_i^f) \delta_{aA} + \sum_K H_{(ia)K} \bar{B}_{K(IA)}^C & , \text{sonst} \end{cases} \quad (\text{IV.2.42})$$

Vereinfachungen der Transferoperatoren sowie Vor- und Nachteile des Transferkonzepts sind dem vorangehenden Subabschnitt zu entnehmen.

### 2.2.6. Konsistenz zwischen Galerkin-Operator und effektivem Operator

Bei den neuen Transferoperatoren treten Konsistenzprobleme nur in Verbindung mit periodischen Randverschiebungen und homogenen Randspannungen auf. Hier ist  $\mathbf{k}^C = \mathbf{R}^C_f \mathbf{k}^f \mathbf{P}^f_C$  in  $\mathcal{B}^p$  in der Regel nicht identisch mit dem Operator

$$\bar{\mathbf{k}}_{ij}^C = \int_{\mathcal{B}^p} \sum_{k,l} B_{ki}^C [\bar{\mathbb{C}}_{kl}] B_{lj}^C dV \quad (\text{IV.2.43})$$

den man mit homogenisierten Moduli  $\mathbb{C} = \bar{\mathbb{C}}$  erhält. Mit der zu (IV.2.31) äquivalenten Darstellung effektiver Moduli

$$[\bar{\mathbb{C}}] = \frac{1}{|\mathcal{B}^p|} \int_{\mathcal{B}^p} (\mathbf{I} + \mathbf{B}^f \mathbf{H})^T [\mathbb{C}] (\mathbf{I} + \mathbf{B}^f \mathbf{H}) dV \quad (\text{IV.2.44})$$

und mit  $B_{I(KA)}^C = B_{i(Ka)}^f \bar{P}^{ia}_{IA}$  ergibt sich aus (IV.2.43) in vereinfachter Matrixnotation

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{k}}_{ij}^C &= \int_{\mathcal{B}^p} \sum_{k,l} \frac{1}{|\mathcal{B}^p|} \left[ \int_{\mathcal{B}^p} \sum_{s,t} \sum_{m,n} (\bar{P}_{mi} + H_{mk} B_{ki}^C) B_{sm}^f [\mathbb{C}]_{st} B_{tn}^f (\bar{P}_{nj} + H_{nl} B_{lj}^C) dV \right] dV \\ &= \frac{1}{|\mathcal{B}^p|} \sum_{m,n} \int_{\mathcal{B}^p} \sum_{k,l} (\bar{P}_{mi} + H_{mk} B_{ki}^C) (\bar{P}_{nj} + H_{nl} B_{lj}^C) dV \int_{\mathcal{B}^p} \sum_{s,t} B_{sm}^f [\mathbb{C}]_{st} B_{tn}^f dV \\ &= \frac{1}{|\mathcal{B}^p|} \sum_{m,n} \int_{\mathcal{B}^p} \sum_{k,l} (\bar{P}_{mi} + H_{mk} B_{ki}^C) (\bar{P}_{nj} + H_{nl} B_{lj}^C) dV k_{mn}^f \end{aligned} \quad (\text{IV.2.45})$$

Größen mit Index  $C$  werden über  $\mathcal{B}^C_p \equiv \mathcal{B}^p$ , mit Index  $f$  über  $\mathcal{B}^f_p \equiv \mathcal{B}^p$  integriert. Bei konstanten  $B^C$ -Matrizen reduzieren sich die Ausdrücke in runden Klammern auf die oben erhaltenen Transferoperatoren. Eine weitere Umformung der letzten Gleichung führt auf

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{k}}_{ij}^C &= \sum_{m,n} \bar{P}_{mi} k_{mn}^f \bar{P}_{nj} + \sum_{m,n} \sum_l \bar{P}_{mi} k_{mn}^f H_{nl} \bar{B}_{lj}^C \\ &+ \sum_{m,n} \sum_k H_{mk} \bar{B}_{ki}^C k_{mn}^f \bar{P}_{nj} + \sum_{m,n} \sum_{k,l} H_{mk} k_{mn}^f H_{nl} \int_{\mathcal{B}^C_p} B_{ki}^C B_{lj}^C dV \end{aligned} \quad (\text{IV.2.46})$$

Bei konstanten  $B^C$ -Matrizen im Fall linearer Ansatzräume kann man (IV.2.46) in die Galerkin-Darstellung  $\mathbf{k}^C = (\bar{\mathbf{R}}^C_f + \tilde{\mathbf{R}}^C_f) \mathbf{k}^f (\bar{\mathbf{P}}^f_C + \tilde{\mathbf{P}}^f_C)$  überführen. Andernfalls verbleibt eine Diskrepanz gegenüber dem homogenisierten Grobgitteroperator  $\bar{\mathbf{k}}^C$  in der Größenordnung

$$\Delta \bar{\mathbf{k}}_{ij}^C = \sum_{m,n} \sum_{k,l} H_{mk} k_{mn}^f H_{nl} \left( \int_{\mathcal{B}^C_p} B_{ki}^C B_{lj}^C dV - \bar{B}_{ki}^C \bar{B}_{lj}^C \right) \quad (\text{IV.2.47})$$

Die Diskrepanz verschwindet generell, wenn auf Grobgitterebene  $1 \leq l \leq L$  anstelle von  $\mathbf{H}$  in (IV.2.34) die gitterabhängige Matrix

$$\mathbf{H}^l = (\mathbf{k}^l)^{-1} \left[ \int_{\mathcal{B}^l_p} \mathbf{B}^{lT} [\mathbb{C}^l_a] dV - \bar{\mathbf{B}}^{lT} [\mathbb{C}^l_b] |\mathcal{B}^l_p| \right] \quad (\text{IV.2.48})$$

verwendet wird mit

$$\mathbf{k}^l = \int_{\mathcal{B}_p^l} \mathbf{B}^{lT} [\mathbb{C}_a^l] \mathbf{B}^l dV - \bar{\mathbf{B}}^{lT} [\mathbb{C}_b^l] \bar{\mathbf{B}}^l |\mathcal{B}_p^l| \quad (\text{IV.2.49})$$

und den Matrixdarstellungen der Materialtangente

$$[\mathbb{C}_a^l] = \begin{cases} [\mathbb{C}] & \text{für } l = 1 \\ \langle [\mathbb{C}] \rangle & \text{für } l = 2 \\ \langle [\mathbb{C}_a^{l-1}] \rangle - \langle [\mathbb{C}_b^{l-1}] \rangle & \text{für } l > 2 \end{cases} \quad (\text{IV.2.50})$$

sowie

$$[\mathbb{C}_b^l] = \begin{cases} \mathbf{0} & \text{für } l = 1 \\ \frac{1}{|\mathcal{B}_p^l|} \mathbf{H}^{l-1T} (\mathbf{k}^{l-1})^{-1} \mathbf{H}^{l-1} & \text{für } l > 1 \end{cases} \quad (\text{IV.2.51})$$

Hier entspricht  $\langle \{\cdot\} \rangle$  der Voigt-Grenze von  $\{\cdot\}$ .  $|\mathcal{B}_p^l|$  ist das Volumen des auf Gitterebene  $l$  betrachteten diskreten Teilbereichs  $\mathcal{B}^p$ . Bei dieser Variante müssen auf jeder Gitterebene  $1 \leq l \leq L$  anstelle einer effektiven Materialtangente nun zwei Tangente  $[\mathbb{C}_a^l]$  und  $[\mathbb{C}_b^l]$  pro Element vorgehalten werden. Zudem ist der Aufwand zur Generierung von  $\mathbf{H}$  und  $\mathbf{k}^l$  gestiegen. Numerische Berechnungen belegen, daß die neuen, mit linearen Verschiebungen auf  $\partial\mathcal{B}^p$  gekoppelten Transferoperatoren beim Zweigitterverfahren, bei dem bekanntlich keine effektiven Moduli notwendig sind, zumeist bessere Rechenzeiten und Konvergenzresultate liefern, falls höhere als lineare Ansatzräume verwendet werden. Der mit (IV.2.48)–(IV.2.51) verbundene Mehraufwand lohnt sich daher nicht.

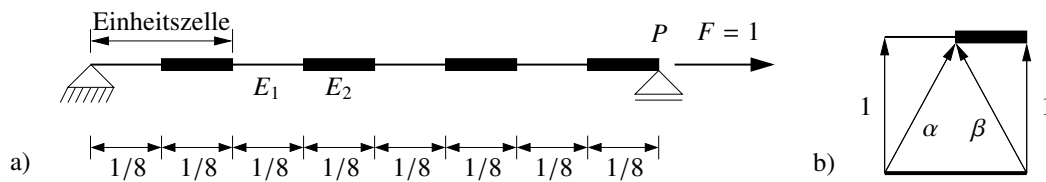
### 3. Numerische Modellbeispiele

Die Effizienz der neuen Transferoperatoren wird hier anhand repräsentativer heterogener Strukturen untersucht. Es werden zweiphasige Komposite mit elastischen und inelastischen Konstituierenden bei kleinen und finiten Deformationen betrachtet. Die verwendeten Stoffgesetze sind in [Box 11](#) zusammengefaßt. Aussagen über die Effizienz der neuen Transferoperatoren werden aus numerischen Konvergenzanalysen und den erforderlichen Rechenzeiten gewonnen. Das erste Beispiel ist eindimensional und dient als Einstieg. Im zweiten Beispiel werden unterschiedliche elastische Verbundstrukturen mit Loch von einem unstrukturierten Finite Elementnetz elementweise aufgelöst. Das Netz stellt die feinste Rasterung eines hierarchisch verfeinerten groben Startnetzes dar. Der Akzent liegt hier bewußt auf *unstrukturiert*, um die Leistung der neuen homogenisierungsbasierten Transferoperatoren auch bei anderen als regulären Diskretisierungen aufzuzeigen. Im dritten Beispiel werden Verbundmaterialien mit gleicher Heterogenität regulär diskretisiert und im Rahmen der Theorie kleiner Verzerrungen inelastisch verformt. Im vierten Beispiel wird eine periodische Verbundstruktur im Zugtest analysiert. Hier werden die neuen Transferoperatoren bei quadratischen Elementansatzräumen getestet. Begleitend zur Mehrgitterkonvergenzanalyse werden in den letzten drei Beispielrechnungen erforderliche Rechenzeiten für die Mehrgitteriteration und zur Generierung von Transfer- und Gittermatrizen dargestellt. Matrix-Vektor-Operationen erfolgen nur über Nichtnull-Einträge der Gittermatrizen. Dies gestattet, Effekte infolge einer größeren Bandbreite in Grobgittermatrizen zu erfassen und auszuwerten. Größere Bandbreiten können bei einem auf Schur-Komplementbildung beruhenden, glättungsbasierten oder einem homogenisierungsbasierten Transfer, gekoppelt mit periodischen Randverschiebungen oder homogenen Randspannungen, auftreten. In Diagrammen und Tabellen werden folgende Kürzel verwendet: *dis*, *per* und *stress* stehen für den homogenisierungsbasierten Transfer, assoziiert mit linearen, periodischen Randverschiebungen und homogenen Randspannungen. Bei eindimensionalen Modellproblemen ist der Transfer unabhängig von Randbedingungen und wird daher schlicht mit *hom* abgekürzt. *geom* bezeichnet den geometrischen, *schur* den auf einer lokalen Schur-Komplementbildung beruhenden, *smooth* den glättungsbasierten und *alg* den algebraischen Transfer. *inject* ist die Abkürzung für Injektion. Aus numerischen Modellrechnungen schließt man, daß der neue mit periodischen Randbedingungen und homogenen Randspannungen gekoppelte Transfer bei dreiknotigen Verschiebungselementen sehr effizient ist, sobald Anisotropieeffekte infolge der Heterogenität eine wesentliche Rolle spielen. Andernfalls ist eine Kopplung des neuen Transfers mit linearen Randverschiebungen vorzuziehen. In zahlreichen nichtlinearen numerischen Analysen hat sich im Rahmen der hier betrachteten Modellproblemklasse herausgestellt, daß es genügt, die Transferoperatoren nur einmalig am Anfang zu generieren. Eine Aktualisierung der Transferoperatoren nach jedem nichtlinearen Inkrement verbessert die Mehrgitterkonvergenz nur unerheblich.

#### 3.1. Heterogener Balken

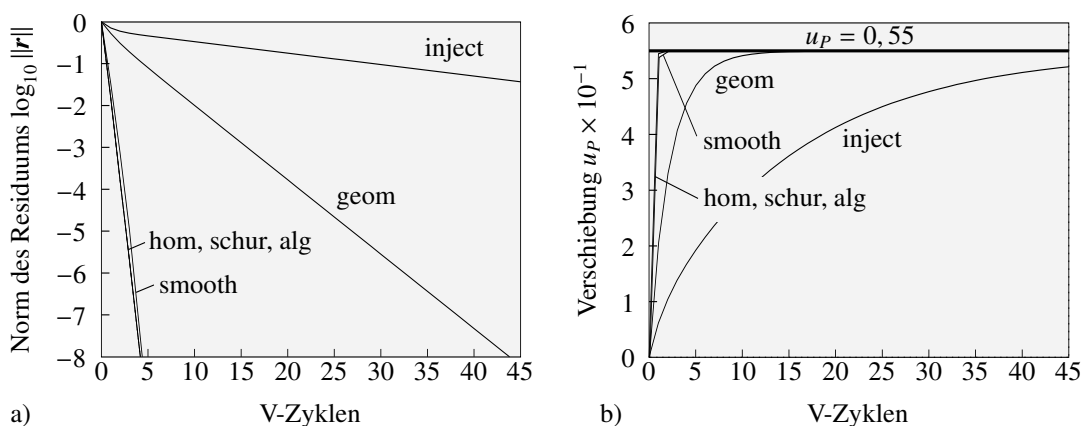
Der heterogene Balken in [Abb. 57a](#) wird mit der Last  $F = 1$  im Lastangriffspunkt  $P$  in Balkenlängsrichtung gezogen. Die periodisch heterogene Struktur des Balkens besteht aus Einheitszellen der Länge  $1/4$ . Jede Einheitszelle wird mit zwei Verschiebungselementen diskretisiert. Die heterogene Struktur stellt die feinste Gitterebene dar. Unterschiedliche Linienstärken in [Abb. 57a](#) kennzeichnen Bereiche unterschiedlicher Steifigkeit. Dicklinierte Bereiche sind mit Moduli  $E_1 = 10$ , dünnlinierte Bereiche mit Moduli  $E_2 = 1$  versehen. Die Balkenquerschnittsfläche ist durchweg konstant mit  $A = 1$  anzunehmen. Das Randwertproblem soll mit einem





**Abbildung 56:** a) Balken mit periodischer Mikrostruktur, der mit  $F = 1$  im Lastangriffspunkt  $P$  beansprucht wird. b) Prolongation innerhalb einer Einheitszelle.

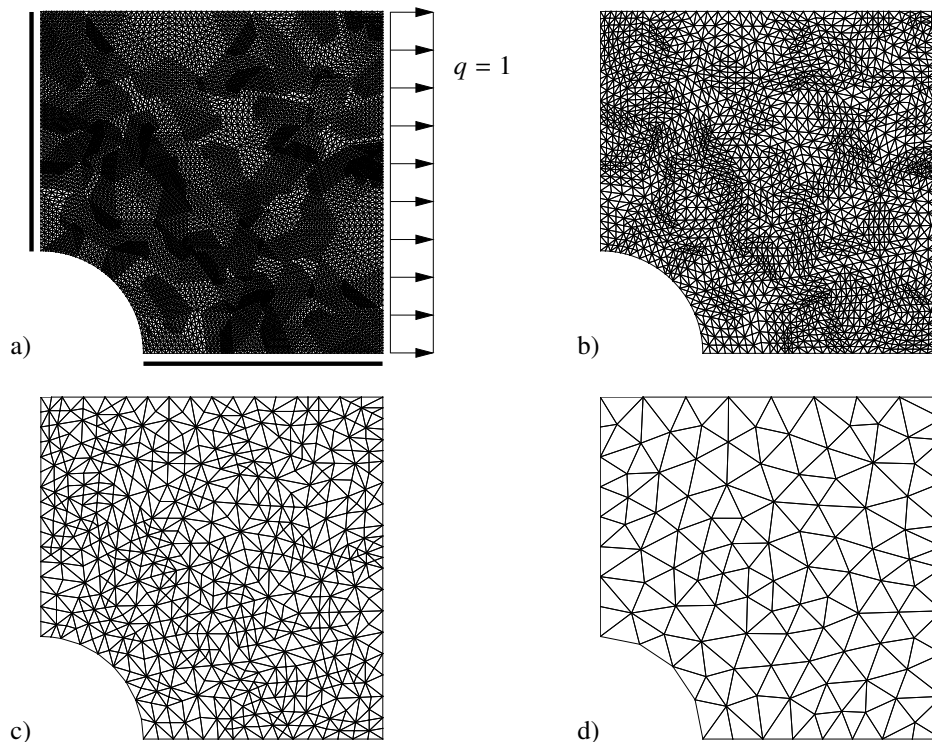
$V(3, 3)$ -Viergitterzyklus gelöst werden. Auf den Gitterebenen  $l = 1$  bis 3 wird jeweils mit dem lexikographischen Gauß-Seidel-Verfahren vor- und nachgeglättet, auf der größten Gitterebene  $l = 4$  wird direkt gelöst. Aufgrund der Periodizität genügt es, Transferoperatoren nur innerhalb einer Einheitszelle zu generieren. Abbildung 56b folgend sind hierzu die Parameter  $\alpha$  und  $\beta = 1 - \alpha$  zwischen der homogenisierten Gitterebene  $l = 2$  und der heterogenen Gitterebene  $l = 1$  zu berechnen. Bei Injektion ist  $\alpha = \beta = 0$ . Geometrischer Transfer ergibt die Werte  $\alpha = \beta = 0,5$ . Für den glättungsbasierten Transfer erhält man näherungsweise  $\alpha = 0,0512$  und  $\beta = 0,9488$ . Der homogenisierungsbasierte, der Schur-Komplement assoziierte und der algebraische Transfer liefern als Parameter  $\alpha = 1/11$  und  $\beta = 10/11$ . Zwischen den Gitterebenen  $l = 2, 3, 4$  erfolgt der Gittertransfer geometrisch mit  $\alpha = \beta = 1/2$ , wobei beim Gitterübergang jeweils zwei Feingitterelemente zu einem Grobgitterelement zusammengefaßt werden. Interessanterweise ist der mit dem effektiven Elastizitätsmodul  $\bar{E}$  generierte Operator  $\bar{k}^2$  identisch mit dem Galerkin-Operator  $k^2 = R^2_1 k^1 P^1_2$ . Den effektiven Elastizitätsmodul  $\bar{E}$  identifiziert man in einer Homogenisierungsanalyse als untere Reuss-Grenze mit  $\bar{E} = 2(1/E_1 + 1/E_2)^{-1} = 20/11$ . In Abbildung 57a wird das Konvergenzverhalten der Viergittermethode anhand oben erhaltener transferspezifischer Parameter  $\alpha$  und  $\beta$  dokumentiert. Mit dem algebraischen, Schur-Komplement assoziierten und dem homogenisierungsgekoppelten Transfer relaxiert der Viergitterzyklus die Norm des Residuums schon nach wenigen Iterationsschritten. Mit dem glättungsbasierten Transfer erzielt man nahezu gleiches Konvergenzverhalten. In Verbindung mit dem geometriebezogenen Transfer und der Injektion weist das Viergitterverfahren schlechtes Konvergenzverhalten auf. Injektion hat in Abb. 57a erwartungsgemäß oberen Schrankencharakter. In diesem Beispiel sind die neu entwickelten Transferoperatoren außerordentlich effektiv. Dies belegt auch die asymptotische Entwicklung der Verschiebung  $u_P$  in Abb. 57b. Mit dem neuen Transferkonzept konvergiert die Verschiebung rasch gegen die exakte Lösung  $u_P = 0,55$ .



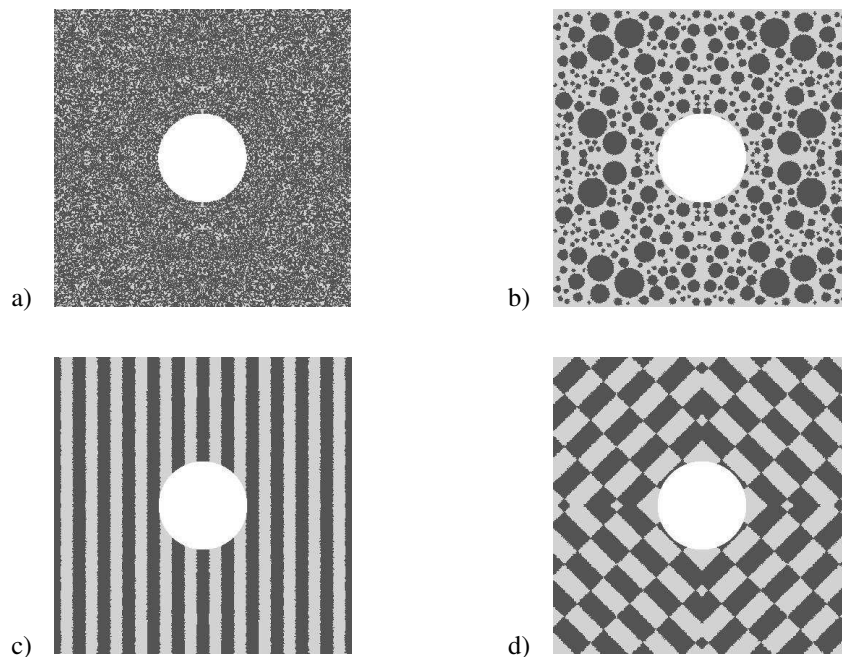
**Abbildung 57:** 1D-Konvergenzstudie: a) Euklidische Norm des Residuums und b) Verschiebung  $u_P$  von  $P$  in Abhängigkeit von der Anzahl der V-Zyklen.  $u_P = 0,55$  ist die exakte Lösung.

### 3.2. Elastische heterogene Struktur mit Loch

Numerische Simulationen belegen, daß die Mehrgitterkonvergenz bei Anwendung homogenisierungsbasierter Transferoperatoren entscheidend von der Verteilung der Heterogenitäten abhängt. Es ist daher naheliegend eine Analyse der Transferoperatoren an einem Verbundmaterial durchzuführen, in der bei gleichbleibender Geometrie und identischen Randbedingungen nur die Anordnung von Heterogenitäten variiert wird. In diesem Abschnitt wird speziell ein elastisches Verbundmaterial betrachtet, das im ebenen Verzerrungszustand beidseitig mit der homogenen Linienlast  $q = 1$  auseinander gezogen wird. Aufgrund der Netzsymmetrie wird entsprechend Abb. 58 nur ein Viertel des Festkörpers mit Seitenlängen 10 diskretisiert. Die linke und untere Berandung des quadratischen Teilkörpers ist jeweils in Querrichtung verschieblich gelagert. In Abb. 58a–d sind vier hierarchische Auflösungsstufen vom feinsten bis zum größten Netz dargestellt, die unter Berücksichtigung der Randbedingungen auf 22300, 5184, 1150 und 222 Unbekannte führen. Die Netze sind unstrukturiert und bestehen aus dreiknotigen Standard-Verschiebungselementen. Mit dem feinsten Netz wird die heterogene Struktur elementweise aufgelöst. In Abb. 59a–d werden vier typische heterogene Muster visualisiert: (i) zufällig verteilte Mikro-Heterogenitäten, (ii) zufällig verteilte Fasern, (iii) Lamine und (iv) Schachbrettmuster. Die Verteilung der Heterogenitäten erfolgt hier mit Hilfe spezieller Dichtefunktionen, die an den Elementschwerpunkten ausgewertet werden. Im Fall (i) wird mit einem Zufallszahlengenerator für jedes Element eine Zufallszahl ermittelt, die dem Element in einem festgelegten Wertebereich ein weiches oder steifes Material zuordnet. Im Fall (ii) werden nicht-überlappende runde Einschlüsse zufällig verteilt, deren Radien von 0, 1–1, 0 zufällig variieren. Finite Elemente, die von solchen runden Einschlüssen überdeckt werden, erhalten steife, alle anderen weiche Materialkennwerte. Im Fall (iii) und (iv) des Streifen- und Schachbrettmusters



**Abbildung 58:** Mehrgitterverfahren mit vier hierarchischen Gitterebenen. Diskretisierung erfolgt jeweils mit  $T1$ -Elementen. a) Feinste Gitterebene mit Randbedingungen. b–d) Grobgitterebenen.



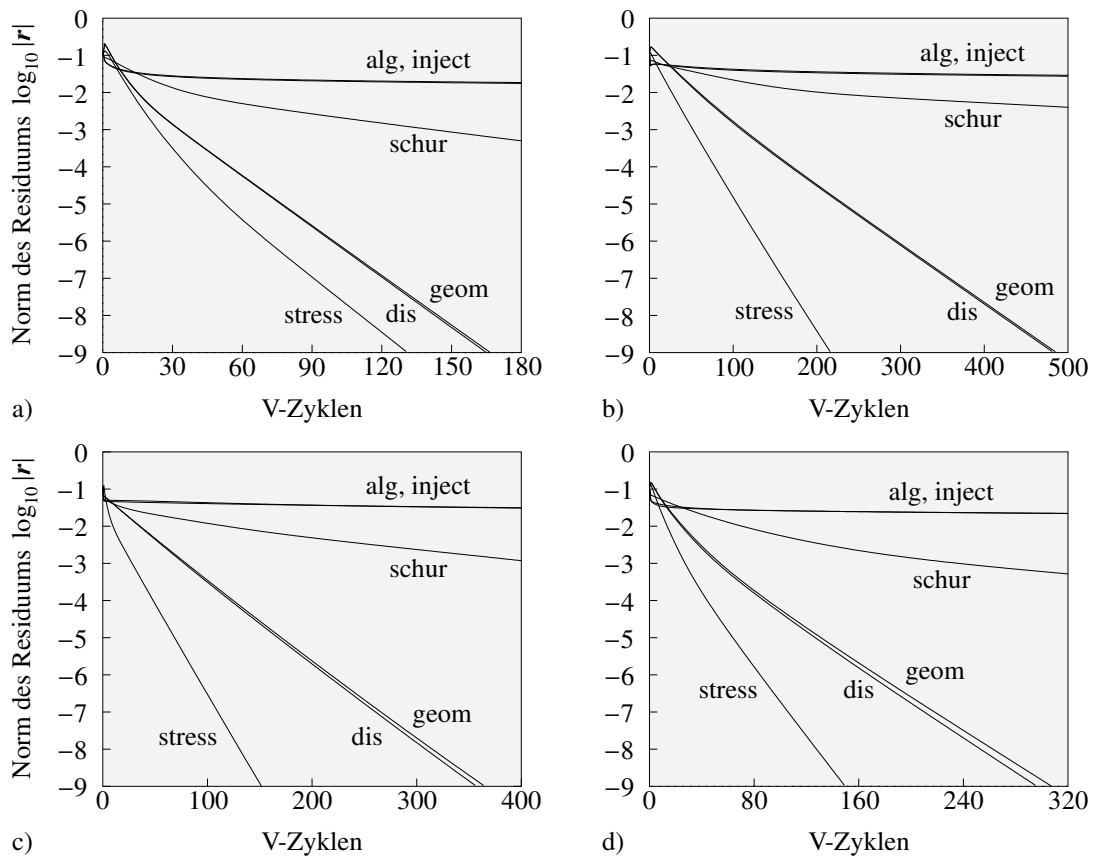
**Abbildung 59:** Als elastisches Modellproblem wird eine perforierte heterogene Struktur mit zufällig verteilten a) Heterogenitäten oder b) Fasern, mit c) Laminaten oder d) Schachbrettmuster betrachtet. Die FE-Diskretisierung erfolgt mit dreiknotigen Finite Elementen.

wird als Dichtefunktion eine Sinus-Funktion gewählt, die Finite Elementen für einen negativen Wert steifes Material zuordnet, andernfalls weiches Material. Bereiche mit steifem Material sind in [Abb. 59](#) dunkel, mit weichem Material hell eingefärbt. Die neuen Transferoperatoren werden im Rahmen linear und nichtlinear elastischer Stoffgesetze analysiert. Das Materialverhalten der einzelnen Phasen wird durch die elastischen Energiefunktionen unter Punkt 1–3 der [Box 11](#) beschrieben mit dem in [Box 19](#) angegebenen Materialparametersatz. Durch Linearisie-

**Box 19:** Materialparametersatz des elastischen Modellproblems.

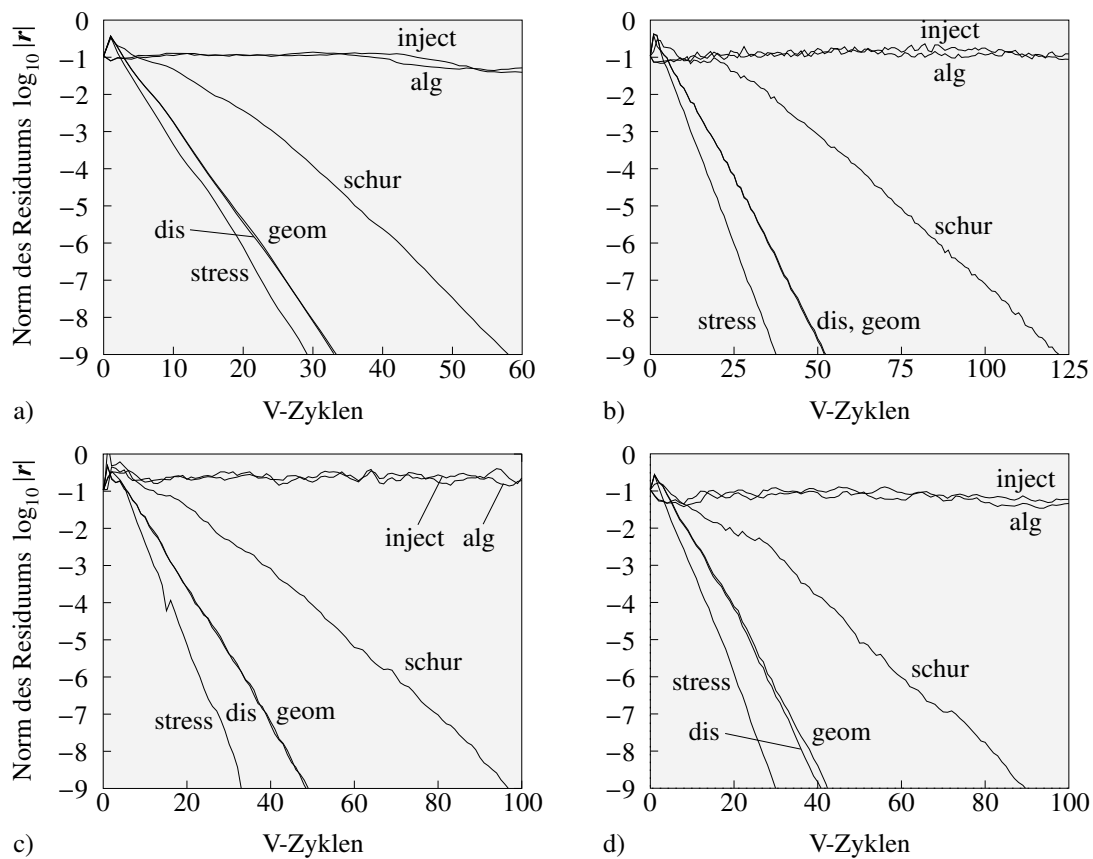
<b>Elastische Einschlüsse:</b>	
Kompressionsmodul	$\kappa = 175,00$
Schubmodul	$\mu = 80,00$
<b>Elastische Matrix:</b>	
Kompressionsmodul	$\kappa = 1,75$
Schubmodul	$\mu = 0,80$

rung entstehende lineare Gleichungssysteme auf dem feinsten Gitter werden mit dem durch Mehrgitter vorkonditionierten CG-Verfahren unter Punkt II von [Box 14](#) gelöst. Für die Toleranz des Residuums wird dort der Parameter  $\theta = 10^{-8}$  gewählt. Es wird ein  $V(3, 3)$ -Mehrgitterzyklus verwendet, bei dem auf jeder Gitterebene dreimal mit Block-Rückwärts-Gauß-Seidel vor- und dreimal mit Block-Vorwärts-Gauß-Seidel nachgeglättet wird. Im linear elastischen Fall wird derselbe Mehrgitterzyklus ohne CG-Beschleunigung getestet. Der entsprechende Algorithmus ist unter Punkt I der [Box 14](#) definiert. Im unbeschleunigten Kontext zeigen die Diagramme der [Abb. 60b–d](#), daß mit dem neuen Transfer, assoziiert mit homogenen Randspannungen, im



**Abbildung 60:** Konvergenzstudie ohne CG-Beschleunigung am Beispiel einer im Zugtest simulierten linear elastischen Mikrostruktur mit a) zufällig verteilten Heterogenitäten, b) zufällig verteilten Fasern, c) Laminaten oder d) Schachbrettmuster.

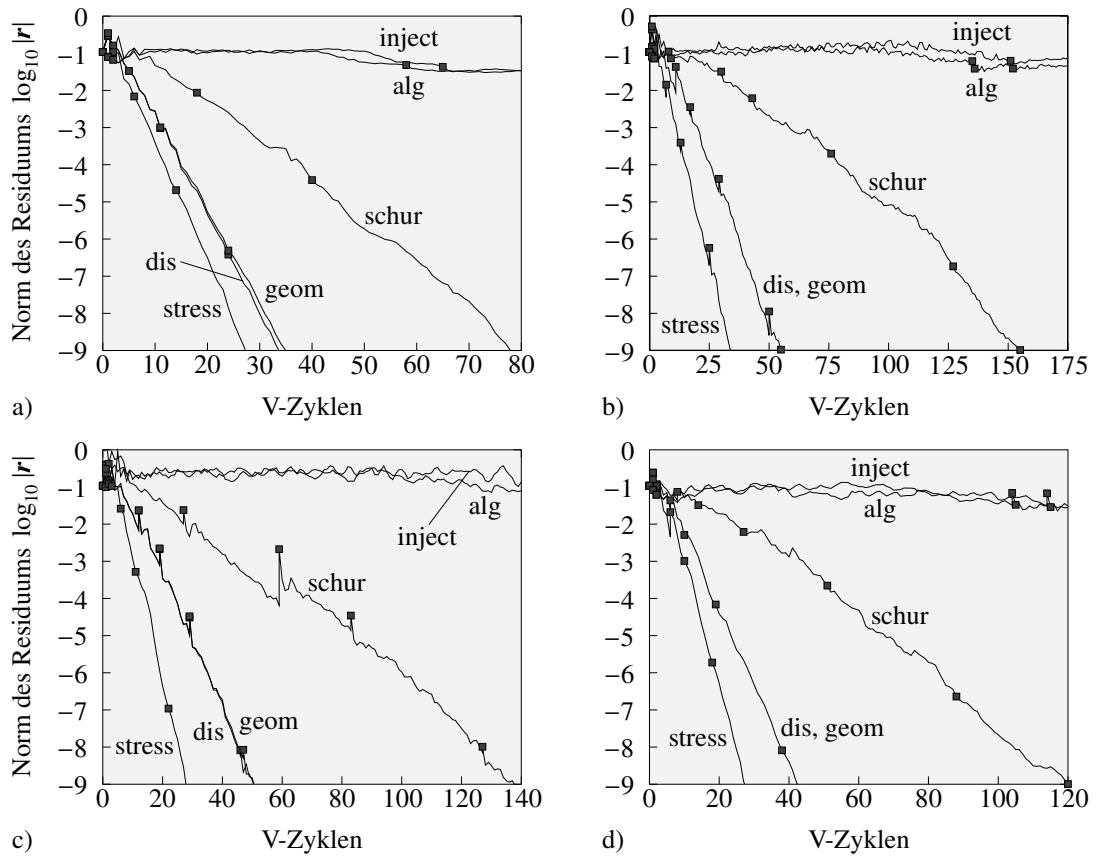
Kontrast zu allen anderen Verfahren ein signifikant gutes Konvergenzverhalten des Viergitterverfahrens erzielt werden kann. Im Diagramm der [Abb. 60a](#) liegen die Kurven von homogenisierungsbasierten und geometrischen Transferoperatoren sehr nahe beieinander. Anisotropieeffekte haben an der Effizienz der neu entwickelten Transfers entscheidenden Anteil. Eine stark inhomogene Verteilung von Steifigkeiten innerhalb eines diskreten Teilgebiets, in denen der Transfer lokal aufgebaut wird, wirkt sich spürbar auf die Homogenisierung und damit auf die Mehrgitterkonvergenz aus. Bei zufälliger Anordnung von Mikroheterogenitäten kommt Homogenisierung nicht zur Geltung, da oszillierende Materialparameter lokal ausgemittelt werden und die Struktur dadurch weitgehend homogen wirkt. In allen Diagrammen der [Abb. 60](#) zeigt sich, daß der Schur-Komplement bildende, der algebraische Transfer und die Injektion schwaches Konvergenzverhalten zur Folge haben. Die Charakteristik der einzelnen Transfers setzt sich bei CG-Beschleunigung in den Diagrammen von [Abb. 61](#) fort. Die zugehörigen relativen Gesamtrechnenzeiten in [Tabelle 13](#) folgen dieser Tendenz. In [Tabelle 13](#) ist zu beachten, daß der homogenisierungsbasierte Transfer, verbunden mit homogenen Randspannungen, und der Schur-Komplement assoziierte Transfer für Mehrgitteriteration und zur Generierung der Gitteroperatoren rechenzeitintensiv sind, da sie Grobgittermatrizen mit größerer Bandbreite bedingen. Das führt dazu, daß der erstgenannte Transfer bei zufällig verteilten Mikro-Heterogenitäten trotz hervorragender Konvergenzeigenschaften eine größere Gesamtrechnenzeit benötigt als Transfers *dis* und *geom*. Gesagtes gilt im Detail auch für nichtlinear elastische Simulationen, bei denen die in [Abb. 62–63](#) dokumentierte Mehrgitterkonvergenz und die zugehörigen Rechenzeiten in



**Abbildung 61:** Konvergenzstudie mit CG-Beschleunigung am Beispiel einer im Zugtest simulierten linear elastischen Mikrostruktur mit a) zufällig verteilten Heterogenitäten, b) zufällig verteilten Fasern, c) Laminaten oder d) Schachbrettmuster.

**Tabelle 13:** Verhältnis der Rechenzeiten in Bezug auf Transferkonzept *stress* am Beispiel linear elastischer Mikrostrukturen.

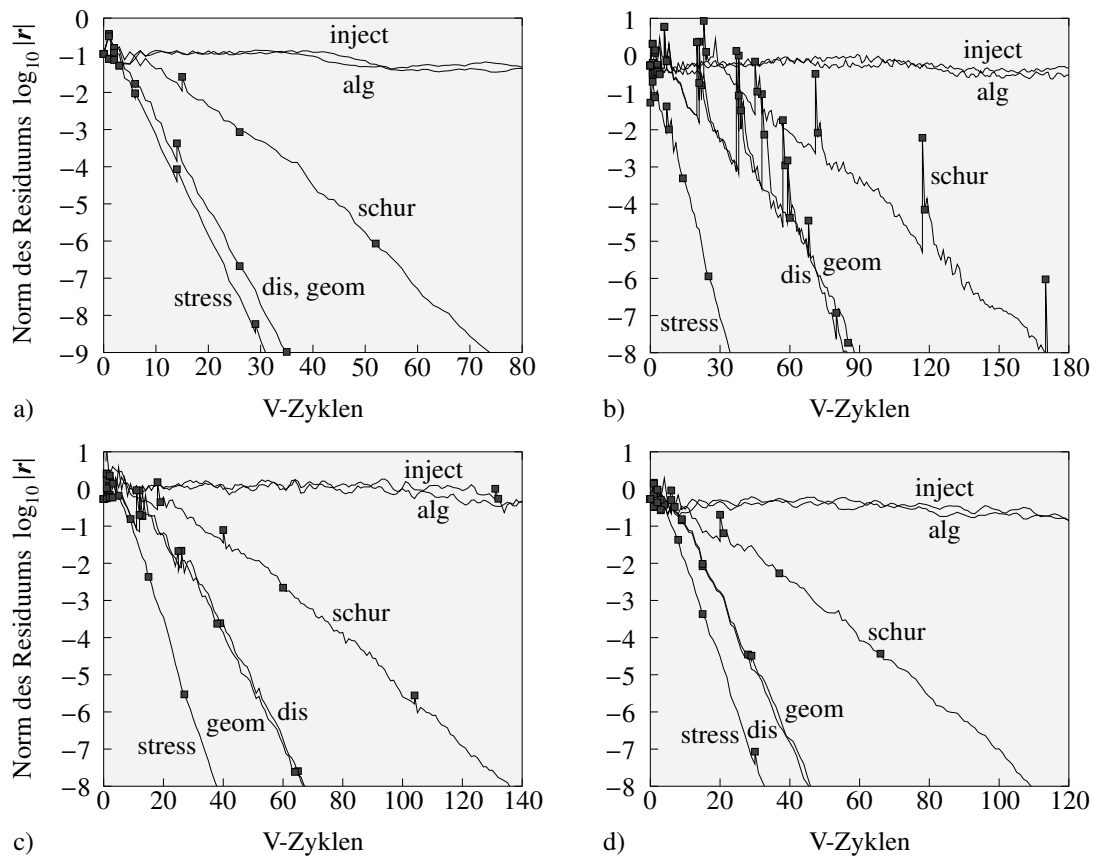
	Mehrgitter-iteration	Transfer-matrizen	Feingitter-matrix	Grobgitter-matrizen	Gesamt-rechenzeit
Mikrostruktur mit zufällig verteilten Heterogenitäten					
dis	0,92	0,19	1,00	0,80	0,86
geom	0,93	0,19	1,00	0,80	0,87
schur	1,82	0,70	1,00	0,93	1,70
Mikrostruktur mit zufällig verteilten Fasern					
dis	1,10	0,19	1,00	0,80	1,03
geom	1,15	0,19	1,00	0,80	1,08
schur	2,98	0,70	1,00	0,93	2,77
Mikrostruktur mit Laminaten					
dis	1,23	0,19	1,00	0,80	1,14
geom	1,23	0,19	1,00	0,80	1,14
schur	2,74	0,70	1,00	0,93	2,53
Mikrostruktur mit Schachbrettmuster					
dis	1,09	0,19	1,00	0,80	1,01
geom	1,15	0,19	1,00	0,80	1,07
schur	2,76	0,70	1,00	0,93	2,53



**Abbildung 62:** Konvergenzstudie am Beispiel einer im Zugtest bei kleinen elastischen Verformungen simulierten Mikrostruktur mit zufällig verteilten a) Heterogenitäten oder b) Fasern, mit c) Laminaten oder d) Schachbrettmuster. Schwarze Kästchen markieren das Ende eines Newton-Schritts.

**Tabelle 14:** Verhältnis der Rechenzeiten in Bezug auf Transferkonzept *stress* am Beispiel nichtlinear elastischer Mikrostrukturen bei kleinen Verzerrungen.

	Mehrgitter-iteration	Transfer-matrizen	Feingitter-matrix	Grobgitter-matrizen	Gesamt-rechenzeit
Mikrostruktur mit zufällig verteilten Heterogenitäten					
dis	1,01	0,19	1,00	0,87	0,94
geom	1,03	0,19	1,00	0,83	0,96
schur	2,68	0,70	1,00	0,87	2,13
Mikrostruktur mit zufällig verteilten Fasern					
dis	1,31	0,19	1,00	0,82	1,14
geom	1,35	0,19	1,11	0,82	1,17
schur	4,28	0,70	1,44	1,27	3,38
Mikrostruktur mit Laminaten					
dis	1,49	0,19	1,13	0,80	1,23
geom	1,49	0,19	1,13	0,80	1,23
schur	4,71	0,70	1,00	1,00	3,47
Mikrostruktur mit Schachbrettmuster					
dis	1,26	0,19	1,13	0,81	1,09
geom	1,28	0,19	1,63	0,81	1,11
schur	4,06	0,70	1,88	1,16	3,10



**Abbildung 63:** Konvergenzstudie am Beispiel einer im Zugtest bei finiten elastischen Deformationen simulierten Mikrostruktur mit zufällig verteilten a) Heterogenitäten oder b) Fasern, mit c) Laminaten oder d) Schachbrettmuster. Schwarze Kästchen markieren das Ende eines Newton-Schritts.

**Tabelle 15:** Verhältnis der Rechenzeiten in Bezug auf Transferkonzept *stress* am Beispiel elastischer Mikrostrukturen bei finiten Deformationen.

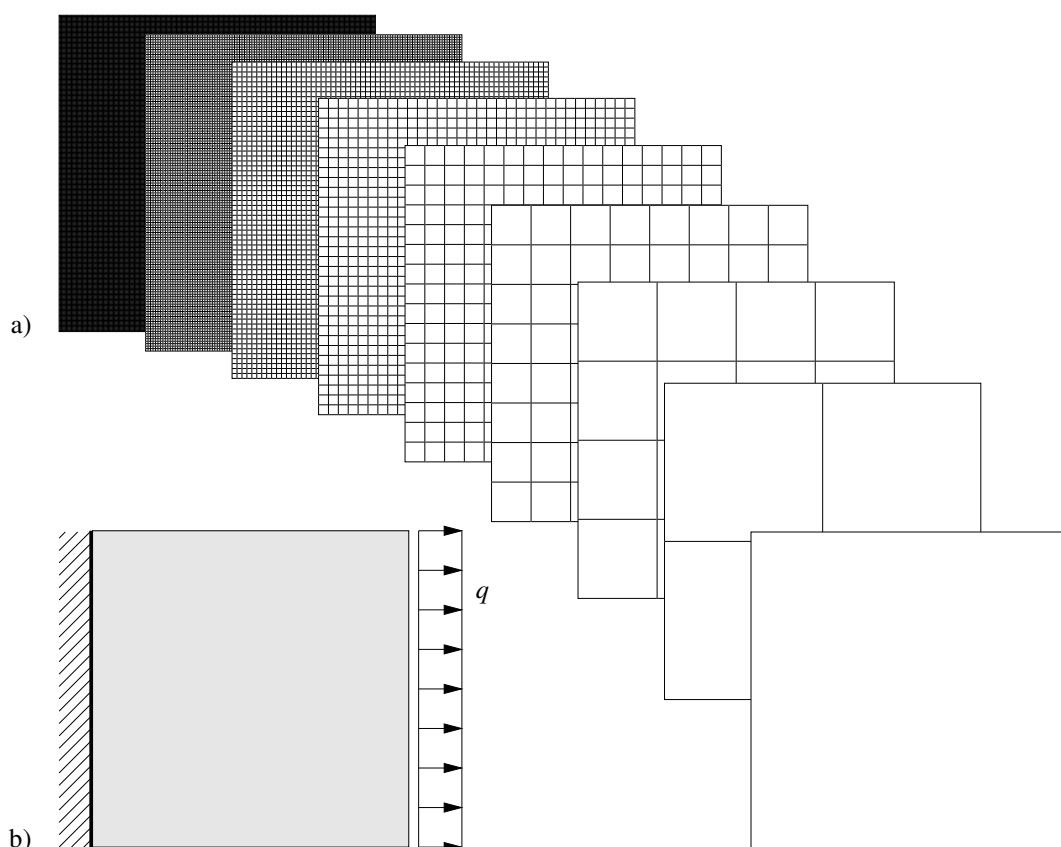
	Mehrgitter-iteration	Transfer-matrizen	Feingitter-matrix	Grobgitter-matrizen	Gesamt-rechenzeit
Mikrostruktur mit zufällig verteilten Heterogenitäten					
dis	0,94	0,19	0,75	1,00	0,86
geom	0,96	0,19	0,74	1,00	0,87
schur	2,28	0,70	0,87	1,17	1,85
Mikrostruktur mit zufällig verteilten Fasern					
dis	1,64	0,19	1,16	0,82	1,39
geom	1,57	0,19	1,21	0,90	1,36
schur	3,54	0,70	1,26	0,97	2,75
Mikrostruktur mit Laminaten					
dis	1,50	0,19	0,94	0,71	1,27
geom	1,50	0,19	0,97	0,71	1,27
schur	3,44	0,70	0,88	0,85	2,71
Mikrostruktur mit Schachbrettmuster					
dis	1,17	0,19	1,11	0,72	1,04
geom	1,17	0,19	1,00	0,72	1,03
schur	3,10	0,70	1,32	1,24	2,56



Tabelle 14–15 dieselbe Charakteristik wie im linear elastischen Kontext aufweisen. In den Diagrammen von Abb. 62–63 zeigen schwarze Kästchen an, daß ein Newton-Schritt zu Ende ist und eine neue Feingittermatrix assembliert wird. Die Anordnung der Symbole reflektiert das quadratische Abklingen des nichtlinearen Residuums. Fazit der numerischen Untersuchungen ist, daß die mit dem homogenisierungs-basierten Transfer *stress* erzielte Mehrgitterkonvergenz optimal ist, sobald Anisotropieeffekte eine Rolle spielen. Glättungsbasierte Transferoperatoren führen auf eine derart schlechte Konditionierung der Grobgittermatrizen, daß das Mehrgitterverfahren versagt. Aus den Konvergenzanalysen schließt man, daß die Transfers *schur*, *smooth*, *alg* und *inject* zur Simulation heterogener Verbundmaterialien ungeeignet sind.

### 3.3. Inelastische heterogene Struktur

Numerische Untersuchungen am Beispiel inelastischer Verbundstrukturen sind als Fortsetzung des vorangehenden Abschnitts anzusehen. Es wird hier ein Verbundmaterial mit denselben heterogenen Strukturen betrachtet. Geometrie und Randbedingungen sind Abb. 64b zu entnehmen. Der Versuchskörper mit den Abmessungen  $1 \times 1$  ist linksseitig eingespannt und wird im ebenen Verzerrungszustand rechtsseitig mit der homogenen Linienlast  $q$  gezogen. Die Diskretisierung erfolgt mit  $Q1P0$ -Elementen regulär. Vier im Quadrat angeordnete benachbarte Feingitterelemente bilden jeweils ein Grobgitterelement. Es wird eine Gitterhierarchie mit insgesamt 9 Net-



**Abbildung 64:** Mehrgitterverfahren mit neun hierarchischen Gitterebenen. a) Reguläre Diskretisierung der Gitterebenen mit  $Q1P0$ -Elementen. Grobgitterelemente werden jeweils durch vier weitere Feingitterelemente aufgelöst. b) Randbedingungen, definiert bezüglich der feinsten Diskretisierung.

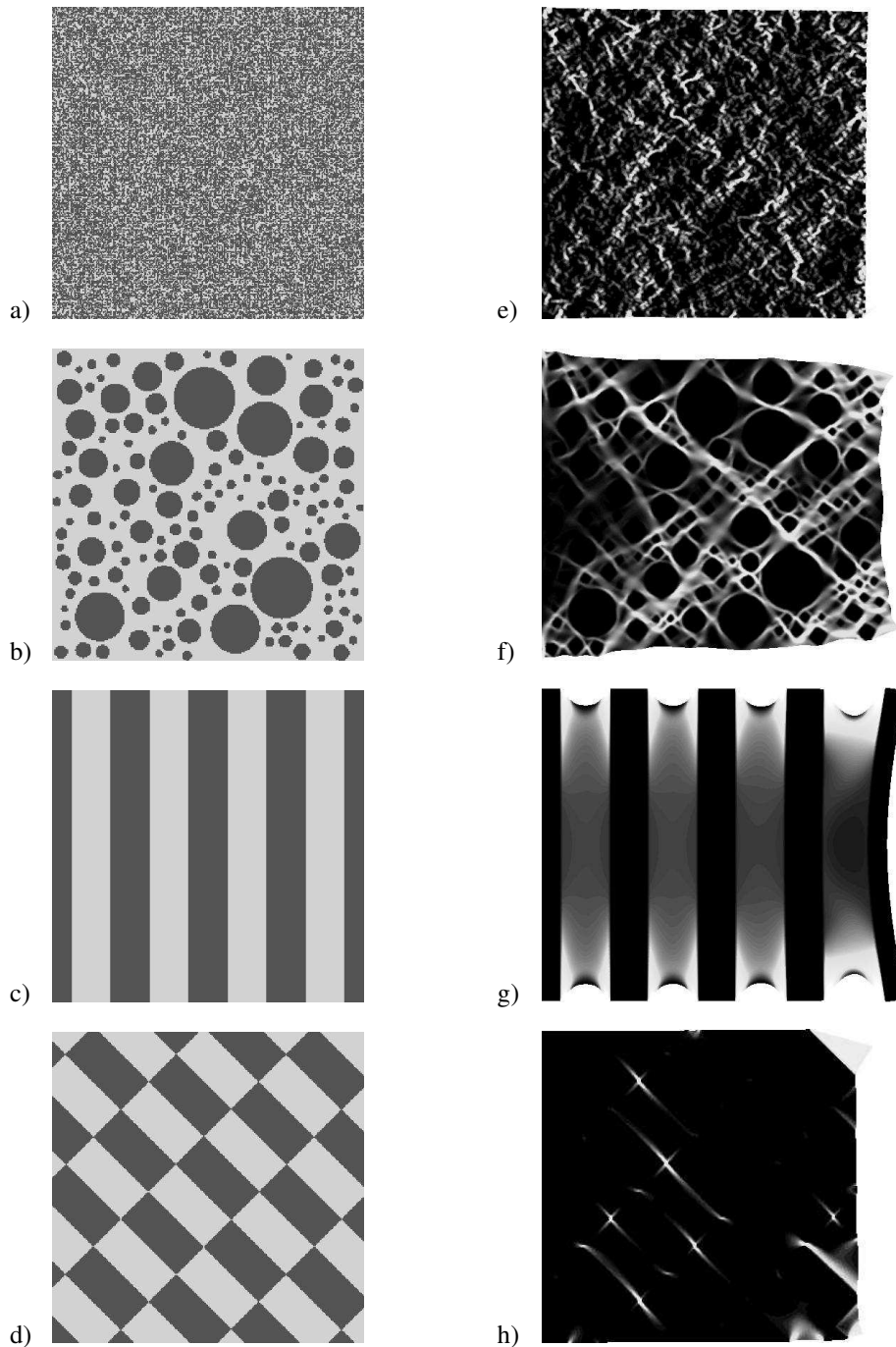
zen betrachtet. In [Abb. 64a](#) sind die neun hierarchischen Auflösungsstufen vom feinsten bis zum größten Netz dargestellt, die unter Berücksichtigung der Randbedingungen auf 131584, 33024, 8320, 2112, 544, 144, 40, 12 und 4 Unbekannte führen. Das feinste Netz löst die heterogene Struktur elementweise auf. In [Abb. 65a–d](#) werden die heterogenen Strukturen, in [Abb. 65e–h](#) die Verteilungen der äquivalent plastischen Verzerrungen in den deformierten Konfigurationen des jeweiligen Verbundkörpers visualisiert. In [Abb. 65a–d](#) ist steifes Material dunkel gefärbt, weiches Material ist hell. Die Verteilung der Heterogenitäten erfolgt analog zum vorangehenden Subabschnitt mit Hilfe spezieller Dichtefunktionen. Die neuen Transferoperatoren werden im Rahmen des inelastischen Stoffgesetzes vom von Mises-Typ in [Box 11](#) unter Punkt 4 analysiert. Die Materialkennwerte sind in [Box 20](#) angegeben. Infolge Finite Elementdiskretisie-

**Box 20:** Materialparametersatz des inelastischen Modellproblems.

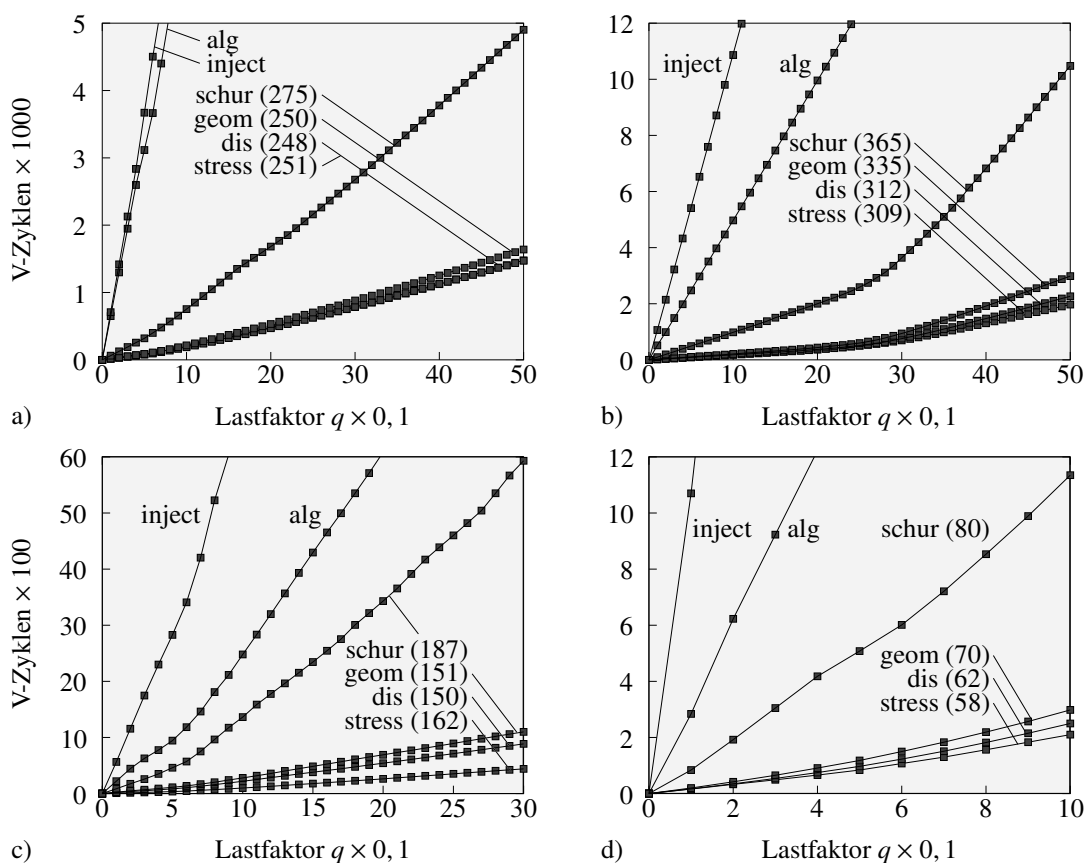
<b>Elastische Einschlüsse:</b>	
Kompressionsmodul	$\kappa = 1750,00$
Schubmodul	$\mu = 800,00$
<b>Elastische Matrix:</b>	
Kompressionsmodul	$\kappa = 17,50$
Schubmodul	$\mu = 8,00$
<b>Inelastische Matrix:</b>	
Kompressionsmodul	$\kappa = 17,50$
Schubmodul	$\mu = 8,00$
Fließspannung	$y_0 = 0,45$
Sättigungsspannung	$y_\infty = 0,45$
Verfestigungsexponent	$\omega = 0,01$
Verfestigungsmodul	$h = 1,00$

rung entstehende lineare Gleichungssysteme auf dem feinsten Gitter werden mit einem durch  $V(3, 3)$ -Mehrgitterzyklen vorkonditionierten CG-Verfahren gelöst. Der Algorithmus ist unter Punkt II der [Box 14](#) definiert. Für die Toleranz des Residuums wird dort der Parameter  $\theta = 10^{-5}$  gewählt. Beim Mehrgitterverfahren wird auf jeder Gitterebene dreimal mit Block-Rückwärts-Gauß-Seidel vor- und dreimal mit Block-Vorwärts-Gauß-Seidel nachgeglättet. Die Last  $q$  wird in allen Modellbeispielen einheitlich von Null bis zur Endlast inkrementell um 0, 1 erhöht. Für die Struktur in [Abb. 65a](#) und [b](#) wird als Endlast  $q = 5$ , für die in [Abb. 65c](#) als Endlast  $q = 3$  und für die in [Abb. 65d](#) als Endlast  $q = 1$  angesetzt. Das mit unterschiedlichen Transferoperatoren erzielte Konvergenzverhalten wird zusammen mit der insgesamt erforderlichen Anzahl nicht-linearer Newton-Schritte in [Abb. 66](#) dokumentiert. Schwarze Kästchen zeigen das Ende eines Zeitschritts an. Rechenzeiten werden in [Tabelle 16](#) aufgelistet. In den Diagrammen geht der homogenisierungs-basierte Transfer *stress*, gekoppelt mit homogenen Randspannungen, als optimalstes Transferkonzept hervor. Ihm folgt der mit linearen Randverschiebungen verbundene Transfer *dis*. Der bilineare Elementverschiebungsansatz kann in der Regel keinen homogenen Deformationszustand abbilden. Daher ist [\(IV.2.35\)](#) hier eine Approximation, die zur Folge hat, daß sich der Transfer *stress* von *dis* hinsichtlich Mehrgitterkonvergenz nicht eklatant unterscheidet. Das Problem der größeren Bandbreite in den Grobgittermatrizen beim Transfer *stress* führt schließlich dazu, daß Transfer *dis* hinsichtlich Gesamt-Rechenzeiten mindestens gleichwertig ist

mit Transfer *stress*. Zu beachten ist auch, daß bei bilinearen Ansatzfunktionen die Konsistenz zwischen Galerkin-Operator und dem aus effektiven Moduli gebildeten Operator nicht mehr gewährleistet ist und daher die Robustheit des Transfers *stress* generell nicht garantiert werden kann. Mit Schur-Komplement assoziierten und algebraischen Transferoperatoren sowie mit der Injektion wird entweder keine oder sehr schlechte Konvergenz erzielt. Mehrgitterverfahren mit glättungsbasierten Transferoperatoren scheitern gänzlich. Fazit der numerischen Simulationen



**Abbildung 65:** Als inelastisches Modellproblem wird eine heterogene Struktur mit zufällig verteilten a) Heterogenitäten oder b) Fasern, mit c) Laminaten oder d) Schachbrettmuster betrachtet. e–h) Zugehörige Verteilungen der äquivalent plastischen Verzerrungen (hellgrau).



**Abbildung 66:** Konvergenzstudie am Beispiel einer inelastischen Mikrostruktur mit zufälligen Heterogenitäten oder b) Fasern, mit c) Laminaten oder d) Schachbrettmuster. Zahlen in Klammern geben die Anzahl von Newton-Schritten an. Schwarze Kästchen markieren das Zeitschrittende.

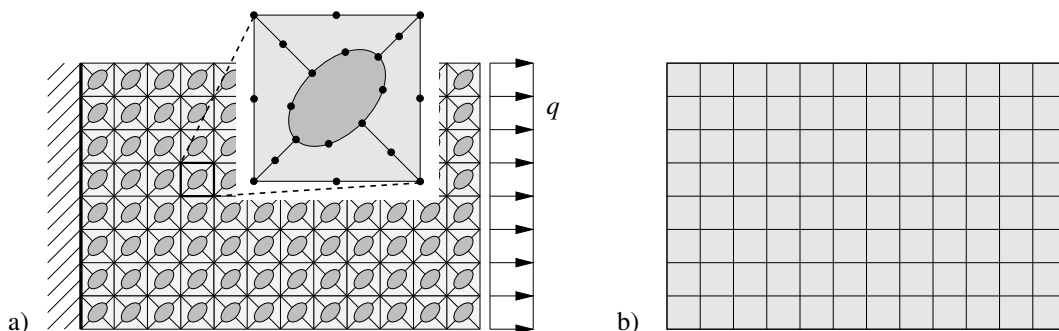
**Tabelle 16:** Verhältnis der Rechenzeiten in Bezug auf Transferkonzept *stress* am Beispiel inelastischer Mikrostrukturen.

	Mehrgitter-iteration	Transfer-matrizen	Feingitter-matrix	Grobgitter-matrizen	Gesamt-rechenzeit
Mikrostruktur mit zufällig verteilten Heterogenitäten					
dis	0,90	0,08	0,95	0,92	0,91
geom	1,06	0,07	1,05	1,00	1,04
schur	2,64	1,06	1,07	1,49	2,25
Mikrostruktur mit zufällig verteilten Fasern					
dis	1,03	0,08	1,07	0,81	0,95
geom	1,22	0,55	1,09	0,78	1,07
schur	4,19	1,05	1,35	1,44	3,19
Mikrostruktur mit Laminaten					
dis	1,34	0,61	0,89	0,66	1,03
geom	1,47	0,61	0,94	0,67	1,10
schur	6,50	0,92	1,12	1,22	4,02
Mikrostruktur mit Schachbrettmuster					
dis	0,71	0,07	0,84	0,55	0,64
geom	1,65	0,06	1,39	0,95	1,32
schur	4,28	0,57	1,05	1,10	2,77

ist, daß der homogenisierungsbasierte Transfer mit linearen Randverschiebungen bei bilinearen Ansatzräumen vor allen anderen Transferkonzepten vorzuziehen ist. Die homogenisierungsbasierten Transferoperatoren haben insgesamt ein deutlich besseres Konvergenzverhalten als Standard-Transfermethoden. Ferner erweisen sich die Transfers *schur*, *smooth*, *alg* und *inject* bei Simulationen heterogener Verbundmaterialien als vollkommen ungeeignet.

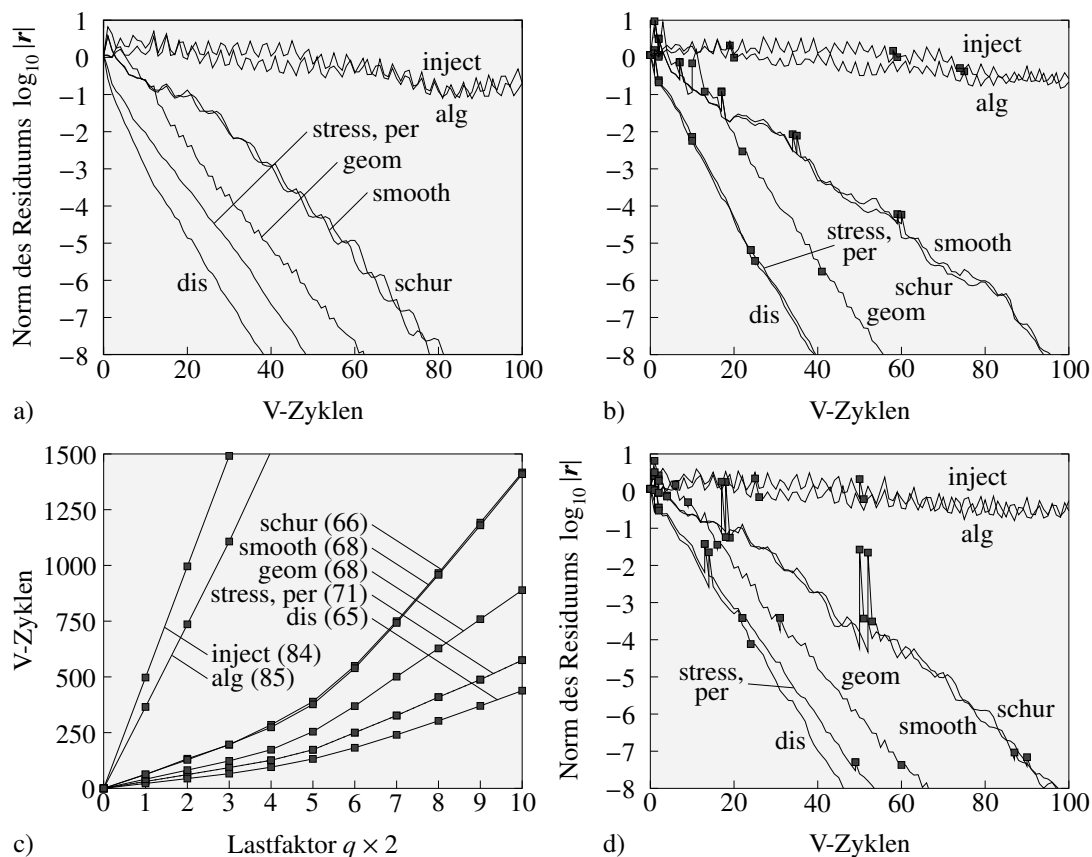
### 3.4. Periodische Struktur mit ellipsoiden Einschlüssen

Hier wird die periodische Mikrostruktur von [Abb. 67a](#) mit einem Zweigitterverfahren simuliert. Die periodische Struktur entsteht durch Aneinanderreihung von  $12 \times 8$  quadratischen Einheitszellen, die jeweils die Seitenlänge 1 haben. Zur Diskretisierung der Einschlussegeometrie werden achtknotige Verschiebungselemente der Serendipity-Klasse verwendet. In [Abb. 67a](#) ist die Diskretisierung der Einheitszelle vergrößert dargestellt. Schwarze Punkte sind Elementknoten. Die periodische Makrostruktur hat auf dem Feingitter eine Komplexität von insgesamt 2928 Unbekannten, auf dem zugehörigen Grobgitter in [Abb. 67b](#) eine Komplexität von 624 Unbekannten. Die Makrostruktur wird entsprechend [Abb. 67a](#) linksseitig eingespannt und im ebenen Verzerrungszustand rechtsseitig mit der homogenen Linienlast  $q$  gezogen. Numerische Analysen sollen die Robustheit der neuen Transferoperatoren bei Diskretisierungen mit Finite Elementansätzen höherer Ordnung hervorheben. Die in [Abb. 67a](#) dunkel schraffierten ellipsoi-



**Abbildung 67:** Zweigitterverfahren am Beispiel einer periodischen Struktur mit ellipsoiden Einschlüssen. a) Geometrie und Randbedingungen der heterogenen Feingitterstruktur. In der Vergrößerung der Einheitszelle ist die Diskretisierung mit fünf quadratischen Verschiebungselementen der Serendipity-Klasse dargestellt. Schwarze Punkte sind Elementknoten. b) Zugehöriges Grobgitter.

den Einschlüsse sind steif und verstärken das hell gefärbte weiche Matrixmaterial. Im Rahmen einer elastischen Modellproblemanalyse wird das Materialverhalten der einzelnen Phasen nacheinander durch die elastischen Energiefunktionen unter Punkt 1–3 der [Box 11](#) beschrieben mit dem in [Box 19](#) angegebenen Materialparametersatz. Im inelastischen Fall wird das inelastische Stoffgesetz vom von Mises-Typ in [Box 11](#) unter Punkt 4 verwendet mit den in [Box 20](#) angegebenen Materialkennwerten. Durch Linearisierung entstehende lineare Gleichungssysteme auf dem Feingitter werden mit einem durch  $V(3, 3)$ -Zweigitterzyklen vorkonditionierten CG-Verfahren gelöst. Der Algorithmus wird in Punkt II der [Box 14](#) aufgezeigt. Für die Toleranz des Residuums wird dort der Parameter  $\theta = 10^{-9}$  gewählt. Bei elastischen Berechnungen ist die Last  $q$  auf 5 zu setzen, bei inelastischen Deformationen wird  $q$  in 10 Schritten vom Nullzustand aus um jeweils 2 erhöht. Es wird auf jeder Gitterebene dreimal mit Block-Rückwärts-Gauß-Seidel vor- und dreimal mit Block-Vorwärts-Gauß-Seidel nachgeglättet. Das mit unter-



**Abbildung 68:** Konvergenzstudie am Beispiel einer im Zugtest simulierten periodischen Mikrostruktur bei kleinen a) linear und b) nichtlinear elastischen und c) inelastischen Verzerrungen sowie bei finiten d) elastischen Deformationen. Die eingeklammerten Zahlen geben die Anzahl von Newton-Schritten an. Schwarze Kästchen markieren das Ende eines Newton- oder Zeitschritts.

schiedlichen Transferoperatoren erzielte Konvergenzverhalten wird in [Abb. 68](#) dokumentiert. Erforderliche Rechenzeiten für Mehrgitteriteration und zur Generierung von Transferoperatoren und Gittermatrizen sind [Tab. 17](#) zu entnehmen. Mit linearen Randverschiebungen gekoppelte homogenisierungsbasierte Transferoperatoren sind demnach am effizientesten. Danach folgen diejenigen, gekoppelt mit periodischen Randbedingungen oder homogenen Randspannungen. Obwohl die Galerkin-Darstellung  $R_f^C K P_C^f$  mit steigender Ordnung des Finite Elementansatzes von dem mit homogenisierten Moduli generierten Grobgitteroperator zunehmend abweicht, sind die Transferkonzepte *stress* und *per* einem geometrischen, Schur-Komplement- und glättungsbasierten, einem algebraischen Transfer und der Injektion hinsichtlich Rechenzeit und Konvergenz deutlich überlegen. Die Injektion hat in [Abb. 68](#) oberen Schrankencharakter. Die Gesamtzeiten in [Tabelle 17](#) stimmen tendenziell mit dem Konvergenzverhalten der einzelnen Transfers sehr gut überein. Fazit ist, daß homogenisierungsbasierte Transferoperatoren allen anderen Standard-Verfahren überlegen sind. Bemerkenswert ist auch, daß sich die Transfers *stress* und *per* identisch verhalten. Die Transfers *schur*, *smooth*, *alg* und *inject* haben bei Simulationen heterogener periodischer Verbundmaterialien untergeordnete Bedeutung. Bei Ansatzräumen höherer Ordnung ist Transfer *dis* das maßgebende Transferkonzept.

**Tabelle 17:** Verhältnis der Rechenzeiten in Bezug auf Transferkonzept *dis* am Beispiel der periodischen Mikrostruktur.

	Mehrgitter-iteration	Transfer-matrizen	Feingitter-matrix	Grob-gitter-matrix	Gesamt-rechenzeit
Mikrostruktur mit linear elastischen Deformationen					
stress, per	1,28	5,00	1,00	1,00	1,31
geom	1,57	1,00	1,00	1,00	1,51
schur	2,10	3,00	1,00	1,00	2,01
smooth	2,06	22,00	1,00	1,00	2,23
alg	7,33	50,00	1,00	1,00	7,31
inject	9,30	1,00	1,00	1,00	8,41
Mikrostruktur mit nichtlinear elastischen kleinen Deformationen					
stress, per	0,97	5,00	1,00	1,00	1,02
geom	1,39	1,00	1,67	1,34	1,38
schur	2,42	3,00	1,67	1,54	2,11
smooth	2,56	22,00	1,67	1,60	2,40
alg	12,79	50,00	2,33	1,94	9,23
inject	17,73	1,00	2,33	2,00	11,89
Mikrostruktur mit inelastischen kleinen Deformationen					
stress, per	1,42	5,00	1,67	1,08	1,29
geom	2,13	1,00	1,19	1,06	1,67
schur	3,42	3,00	1,05	0,96	2,37
smooth	3,37	22,00	1,19	1,06	2,40
alg	14,73	50,00	1,90	1,30	9,03
inject	18,85	1,00	1,57	1,26	11,33
Mikrostruktur mit elastischen finiten Deformationen					
stress, per	1,08	5,00	1,00	1,11	1,12
geom	1,33	1,00	2,00	1,39	1,35
schur	1,98	3,00	3,00	1,68	1,90
smooth	1,98	22,00	3,00	1,68	2,06
alg	10,62	50,00	4,00	1,68	8,17
inject	16,74	1,00	4,00	1,68	11,94





# V

## Zusammenfassung und Ausblick

Die Forschungsziele und -ergebnisse dieser Arbeit lassen sich in die Aufbereitung und Formulierung linearer und nichtlinearer Mehrskalenmodelle und die Entwicklung problemabhängiger Mehrgitter-Transferoperatoren aufteilen. Beide Themenkomplexe sind stark miteinander gekoppelt und haben eine effiziente Beschreibung komplexer heterogener Strukturen zum Ziel.

Im Rahmen der Mehrskalenmodellierung wurden im ersten Arbeitsschritt wesentliche Grundelemente von Mikro-Makro-Übergängen aufbereitet. Hierzu gehören die Definition sinnvoller effektiver Variablen innerhalb eines statistisch homogenen  $\mathcal{RVE}$ s der Mikrostruktur, die Skalenkopplung und die Rahmenbedingungen für das mikroskopische und makroskopische Randwertproblem. Im Kontext finiter Deformationen erweisen sich der makroskopische Deformationsgradient und die makroskopischen 1. P.-K.-Spannungen als ideale duale Makrovariablen. Sie lassen sich allein durch Randdaten auf der Oberfläche des  $\mathcal{RVE}$ s festlegen. Eindeutigkeit der effektiven Variablen wird unter gewissen Anforderungen an das auf der Mikroskala definierte inkrementelle Spannungspotential gewährleistet. Zur Lösung des mikroskopischen Randwertproblems wurden aus der Hill-Bedingung drei kanonische Randbedingungen abgeleitet: lineare und periodische Randverschiebungen und homogene Randspannungen. Mit linearen Randverschiebungen und homogenen Randspannungen erhält man eine obere und untere Schranke für die effektive Spannungsantwort. Diese Schrankencharakteristik ermöglicht generelle Aussagen über Effizienz und Anwendungsgrenzen von Mehrskalenmodellen.

Als Mikro-Makro-Übergang wurden zwei Varianten analysiert: ein deformations- und ein spannungsgetriebener Skalenübergang. Unter diesem Aspekt wurden im zweiten Arbeitsschritt lineare analytische Homogenisierungsansätze und Schrankenformulierungen basierend auf dem Konzept vom äquivalent homogenen Körper, der Mean-Field-Theorie und den Hashin-Shtrikman-Variationsfunktionalen beschrieben. Die behandelten Modelle sind in der Praxis weit verbreitet. Aufgrund ihrer Bedeutung wurden sie in dieser Arbeit entsprechend detailliert ausgearbeitet. Die Differentialmethode für mehrphasige Verbundkörper sowie eine verallgemeinerte Reformulierung des Mehreinschluß- und Mehrphasenmodells basierend auf dem Konzept der Hintergrundverzerrungen und -spannungen sind hier als wesentliche Weiterentwicklungen zu werten. Bei nichtlinearen effektiven Ersatzmodellen werden die linearen Modelle in den nichtlinearen Rahmen eines Sekanten- oder Inkrementenverfahrens eingebettet. Neu ist hier die Anwendung eines inkrementellen Variationsverfahrens für allgemein standard-dissipative Materialien. Bei diesem Verfahren wird in jeder Phase der Mikrostruktur innerhalb eines typischen Zeitschritts ein inkrementelles quasi-hyperelastisches Potential bestimmt, das im anschließenden Homogenisierungsprozeß für den Einsatz eines Sekantenverfahrens Voraussetzung ist.

Im dritten Arbeitsschritt wurden neu entwickelte numerische Mehrskalenkonzepte im makroskopisch deformations- und spannungsgetriebenen Kontext algorithmisch aufbereitet. Ausgangspunkt bilden auf der Mikroskala diskret formulierte Variationsfunktionale mit der Struktur der Hill-Bedingung. Deren Umsetzung erfordert die Lösung eines zugeordneten Randwertproblems in Verbindung mit linearen oder periodischen Verschiebungen oder homogenen Spannungen auf dem Rand des  $\mathcal{RVE}$ s. Ein weiterer neuer Aspekt ist die Berücksichtigung starrer Einschlüsse. Die Mehrskalenbildung ist für strukturierte und unstrukturierte Finite Elementdiskretisierungen universell durchführbar und erlaubt eine geschlossene Berechnung effektiver

Variablen heterogener Mikrostrukturen. Im Gegensatz zu bestehenden lassen sich die neuen numerischen Ansätze auf eine große Materialklasse anwenden und eignen sich sogar zur Homogenisierung nichtperiodischer Strukturen. In den numerischen Beispielen wurden die neuen Konzepte und die analytischen Verfahren in zwei kanonischen Modellproblemen wertend verglichen. Dort belegen teilweise breite Streuungen analytisch erhaltener effektiver Spannungen und unphysikalische Resultate des Dilute-Distribution-Modells die große Bedeutung der numerischen Konzepte, die uneingeschränkt für beliebige Einschlußgeometrien anwendbar sind.

Neben der Berücksichtigung der Skalenabhängigkeit bei Materialmodellierungen ist die Skalenabhängigkeit auch bei Mehrgitterverfahren von Bedeutung. Diese wurde bei der Entwicklung iterativer Lösungsverfahren bislang kaum berücksichtigt. Da sich vom Standpunkt der Materialtheorie die Mehrgitterverfahren als abstrakte Mehrskalenmodelle auffassen lassen, liegt es nahe, die Entwicklung von Transferoperatoren mit den erarbeiteten Homogenisierungskonzepten zu verbinden. Diese Thematik nimmt einen weiteren wichtigen Platz in dieser Arbeit ein. Einführend wurden dort zunächst Grundalgorithmen und Eigenschaften des linearen Mehrgitters diskutiert, um ein Grundverständnis für Mehrgitterlöser aufzubauen. Im Hinblick auf physikalisch nichtlineare Materialklassen wurde ferner ein effizienter Newton-Mehrgitteralgorithmus vorgeschlagen, bei dem die quadratische Konvergenzeigenschaft der Newton-Iteration optimal ausgenutzt wird. Im Gegensatz zu nichtlinearen Mehrgitterverfahren können Fein- und Grobgitter in einer Newton-Mehrgittermethode als Mikro- und Makrostruktur im Sinne einer Zweiskalenanalyse einander eindeutig zugeordnet werden. In einem weiteren Schritt wurden die Injektion sowie geometrische, mit dem Schurkomplement assoziierte, glättungsbasierte, algebraische und die neuen homogenisierungsgekoppelten Transferoperatoren im Detail aufbereitet. Bestehende mit Homogenisierung einhergehende Ansätze haben den großen Nachteil, Transfer- und Grobgitteroperatoren nur für periodische, linear elastische Komposite bereitzustellen. Sie lassen sich nicht auf andere Materialklassen übertragen. Die in dieser Arbeit entwickelten problemabhängigen Transferoperatoren sind hingegen für allgemeine Mikrostrukturen mit strukturierter oder unstrukturierter Gebietsdiskretisierung für lineare und nichtlineare Problemstellungen geeignet. Ausgangspunkt für die Konstruktion der neuen Transferoperatoren bildet ein diskretes Homogenisierungsverfahren, in dem der als treibende Variable erforderliche effektive Deformationsgradient aus den Verschiebungen der Grobgitterpunkte bestimmt wird. Die Homogenisierungsanalyse liefert einen Zusammenhang zwischen diskreten Fein- und Grobgitterparametern, der zur Konstruktion der neuen Transferoperatoren fundamental ist. Im Rahmen repräsentativer Modellprobleme wurden Effizienz und Anwendungsgrenzen der neuen Transferstrategien gegenüber den anderen, aus der Literatur bekannten Verfahren in vergleichenden Konvergenzstudien bewertet. Es stellt sich heraus, daß die Mehrgitterkonvergenz erheblich gesteigert werden kann, wenn man die neuen Transferoperatoren im Kontext linearer Finite Elementdiskretisierungen mit periodischen Randverschiebungen oder homogenen Randspannungen und bei Finite Elementdiskretisierungen höherer Ordnung mit linearen Randverschiebungen koppelt.

Aufgrund der überzeugenden Ergebnisse ist eine 3-D-Erweiterung der entwickelten Transferkonzepte anzustreben. Basierend auf den Arbeiten BREZINA ET AL. [31] und WAGNER [160] ist ferner ein algebraisches Mehrgitterkonzept unter Einbeziehung von Homogenisierungstechniken auszuarbeiten. In diesen Arbeiten wird eine energieminimierende Verfahrensweise zur Konstruktion von Transferoperatoren und Grobgitter angestrebt, die mit den energieminimierenden Prinzipien der Mehrskalenmodellierung große Ähnlichkeit hat. Die Idee ist, in geometrisch zusammenhängenden Teilbereichen, die auf Basis der sogenannten Glättungseigenschaft gebildet werden, Transferoperatoren mit den neuen Homogenisierungstechniken zu erzeugen.

Zweiskalige Elementansätze werden in HUGHES [80] konzeptionell dargestellt und haben eine diskrete Beschreibung heterogener Materialien mit schwach ausgeprägter Skalenseparation zum Ziel. Bei der Auflösung von Lokalisierungszone haben derartige Elementformulierung zudem regularisierende Eigenschaften. Sie zeichnen sich durch zwei Ansatzräume aus, von denen einer die homogene Makroskala, der andere die heterogene Mikroskala repräsentiert. Auf der homogenen Makroskala wird ein sogenanntes Fernfeldproblem, auf der heterogenen Mikroskala ein sogenanntes Nahfeldproblem definiert. Der oszillierende Charakter der heterogenen Mikrostruktur wird nichtlokal erfaßt, entweder in Form überlagerter Bubble-Moden höherer Ordnung oder durch Einführen diskreter Substrukturen. Zweiskalige Elementansätze mit Hintergrundnetzen zur nichtlokalen Beschreibung des Nahfeldproblems sind für die Konstruktion von Mehrgitter-Transferoperatoren ideal geeignet. Die Idee ist, den Elementansatzraum als Grobgitterraum und die diskrete Substruktur als Feingitterraum aufzufassen. Die Untersuchung und Implementierung eines derartigen Transferkonzepts eröffnet einen interessanten alternativen Zugang zur bisher favorisierten Vorgehensweise.

Mögliche Weiterentwicklungen im Überblick:

- 1.) 3-D-Erweiterung der entwickelten Transferkonzepte.
- 2.) Entwicklung eines algebraischen Mehrgitterkonzepts.
- 3.) Zweiskalenanalyse mit zweiskaligen Finite Elementformulierungen.
- 4.) Alternative Transferoperatoren basierend auf zweiskaligen Elementformulierungen.



# VI

## Anhang

### A. Eshelbytensoren für unendliche Mikrostrukturen

In dem in Abschnitt 2.1 des Kapitels III eingeführten Einbettungsverfahren von Eshelby ist der Eshelbytensor eine zentrale Größe. Er beschreibt den Zusammenhang zwischen Fluktuations- und Transformationsverzerrungen innerhalb eines räumlichen Teilgebiets  $\mathcal{I}$  (Einschluß) des äquivalent homogenen Ersatzkörpers ( $\mathcal{EHS}$ ). Der  $\mathcal{EHS}$  wird unendlich angenommen und sei mit Moduli  $\mathbb{C}^E$  und Flexibilitäten  $\mathbb{D}^E$  ausgestattet. Das Einschluß-Matrix-Modell, bei dem ein ellipsoidförmiger Einschluß  $\mathcal{I}$  in eine Matrix  $\mathcal{M}$  eingebettet wird, ist die denkbar primitivste heterogene Struktur. ESHELBY [49] hat für den Fall, daß sowohl Matrix- als auch Einschlußphase eines solchen kanonischen Modells linear elastisch und isotrop sind und als Moduli und Flexibilitäten des zugehörigen  $\mathcal{EHS}$  die Parameter  $\mathbb{C}^E = \mathbb{C}^{\mathcal{M}}$  und  $\mathbb{D}^E = \mathbb{D}^{\mathcal{M}}$  der Matrixphase gewählt werden, explizite analytische Lösungen des Eshelbytensors angeben. Deren Herleitung ist wesentlicher Bestandteil nachfolgender Subabschnitte. MURA [121] und darin enthaltene Referenzen geben darüber im Detail Aufschluß. WALPOLE [163, 164, 165] und WILLIS [172, 173] haben Grundkonzepte und Lösungstechniken im Fall von transversal isotropen und allgemein anisotropen Kompositphasen entwickelt. Im letzten Subabschnitt A.3 wird ein Matrix-Einschluß-Modell betrachtet, bei dem dem zugehörigen  $\mathcal{EHS}$  Moduli  $\mathbb{C}^E = \bar{\mathbb{C}}$  und Flexibilitäten  $\mathbb{D}^E = \bar{\mathbb{D}}$  des a priori unbekanntes effektiven Materials zugeordnet werden.

#### A.1. Konzept der Greenschen Funktion

In der linearen Elastostatik wird der Gleichgewichtszustand einer Mikrostruktur  $\mathcal{B} = \mathcal{R}^3$  unter Berücksichtigung des Prinzips der Skalenseparation durch

$$\sigma_{ij,j}(\mathbf{x}) = 0 \quad \forall \mathbf{x} \in \mathcal{B} \quad (\text{A.1})$$

beschrieben. Dem Konzept vom äquivalent homogenen Körper folgend erhält man durch spontan im Einschluß  $\mathcal{I}$  des  $\mathcal{EHS}$  spannungsfrei definierte Transformationsverzerrungen  $\varepsilon^*$  oder verzerrungsfrei definierte Transformationsspannungen  $\sigma^*$  als Einschlußspannungen

$$\left. \begin{aligned} \sigma_{ij}(\mathbf{x}) &= \mathbb{C}_{ijkl}^E (\varepsilon_{kl}(\mathbf{x}) - \varepsilon_{kl}^*(\mathbf{x})) \\ &= \mathbb{C}_{ijkl}^E \varepsilon_{kl}(\mathbf{x}) + \sigma_{kl}^*(\mathbf{x}) \end{aligned} \right\} \quad (\text{A.2})$$

mit dem symmetrischen Anteil des linearen Verzerrungstensors  $\varepsilon_{kl} = \frac{1}{2}(u_{k,l} + u_{l,k})$ . Hier sind  $\varepsilon$  und  $\sigma$  die infolge von  $\varepsilon^*$  oder  $\sigma^*$  entstehenden Verzerrungs- und Spannungsfelder in  $\mathcal{B}$ . Einsetzen von (A.2) in (A.1) ergibt

$$\left. \begin{aligned} \sigma_{ij,j} = 0 &= \{\mathbb{C}_{ijkl}^E \varepsilon_{kl}(\mathbf{x})\}_{,j} + \{-\mathbb{C}_{ijkl}^E \varepsilon_{kl}^*(\mathbf{x})\}_{,j} \\ &= \{\mathbb{C}_{ijkl}^E \varepsilon_{kl}(\mathbf{x})\}_{,j} + \sigma_{ij,j}^*(\mathbf{x}) \end{aligned} \right\} \quad (\text{A.3})$$

Basierend auf dem Konzept der Greenschen Funktion werden Wechselwirkungen in linear elastischen isotropen Kontinua  $\mathcal{B} = \mathcal{R}^3$  zwischen einer Punktlast  $\mathbf{f}$  in  $\mathbf{y} \in \mathcal{B}$  und den Verschie-

bungen  $\mathbf{u}$  in  $\mathbf{x} = \mathbf{y} + \mathbf{r} \in \mathcal{B}$  auf kanonische Weise durch den Ansatz

$$u_i(\mathbf{x}) = G_{ij}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) f_j(\mathbf{y}) \quad (\text{A.4})$$

beschrieben. Mit der Greenschen Funktion

$$G_{ij}(\mathbf{r}) = \frac{1}{16\pi\mu(1-\nu)r} \left( (3-4\nu)\delta_{ij} + \frac{r_i r_j}{r^2} \right) \quad (\text{A.5})$$

können generell Lösungen von Randwertproblemen der Form  $\text{div}[\boldsymbol{\sigma}] + \mathbf{f} = \mathbf{0}$  mit  $|\mathbf{u}| \rightarrow \infty$  für  $r = |\mathbf{r}| \rightarrow \infty$  gefunden werden. In (A.5) sind  $\nu$  die Querkontraktionszahl,  $\mu$  der Schubmodul,  $\delta_{ij}$  das Kronecker-Symbol und  $r = |\mathbf{r}|$ . Die Greensche Funktion besitzt die Symmetrieeigenschaften  $G_{ij}(\mathbf{r}) = G_{ji}(\mathbf{r}) = G_{ij}(-\mathbf{r}) = G_{ji}(-\mathbf{r})$ . Sie erfüllt ferner die Wachstumseigenschaft  $\mathbf{G}(\mathbf{r}) \rightarrow \mathbf{0}$  für  $r = |\mathbf{r}| \rightarrow \infty$  und gewährleistet somit die Grenzwertbildung  $\mathbf{u} \rightarrow \mathbf{0}$  für  $r \rightarrow \infty$ . In Verbindung mit dem Superpositionsprinzip können mit (A.4) und (A.5) Lösungen allgemeiner linearer Randwertprobleme konstruiert werden. Dies wird für den vorliegenden Fall (A.3) gezeigt. In (A.3) können die Divergenzausdrücke  $-\text{div}[\mathbb{C}^E : \boldsymbol{\varepsilon}^*]$  bzw.  $\text{div}[\boldsymbol{\sigma}^*]$  als in  $\mathcal{I}$  verteilte Volumenlasten  $\mathbf{f}$  aufgefaßt werden. Sie induzieren in  $\mathcal{B}$  das Verschiebungsfeld

$$\overset{A}{u}_i(\mathbf{x}) = \int_{\mathcal{I}} G_{ik}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \sigma_{kl,l}^*(\mathbf{y}) dV(\mathbf{y}) \quad \forall \mathbf{x} \in \mathcal{B} \quad (\text{A.6})$$

Der Spannungszustand  $\boldsymbol{\sigma}^* = -\mathbb{C}^E : \boldsymbol{\varepsilon}^*$  im Einschlußgebiet  $\mathcal{I}$  wird durch Spannungskräfte  $\mathbf{t} = \boldsymbol{\sigma}^* \cdot \mathbf{n}$  an der Einschlußberandung  $\partial\mathcal{I}$  mit nach außen zeigendem Normaleneinheitsvektor  $\mathbf{n}$  hervorgerufen. In Eshelbys Einbettungsverfahren werden diese Spannungskräfte wieder entfernt. Dies führt dazu, daß aufgrund der Dehnungsbehinderung Spannungskräfte  $\mathbf{t} = -\boldsymbol{\sigma}^* \cdot \mathbf{n}$  am Einschlußrand auf das umgebende äquivalent homogene Material des  $\mathcal{E}\mathcal{H}\mathcal{S}$  wirken. In  $\mathcal{B}$  sind diese Spannungskräfte ursächlich für das Verschiebungsfeld

$$\overset{B}{u}_i(\mathbf{x}) = - \int_{\partial\mathcal{I}} G_{ik}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \sigma_{kl}^*(\mathbf{y}) n_l(\mathbf{y}) dV(\mathbf{y}) \quad \forall \mathbf{x} \in \mathcal{B} \quad (\text{A.7})$$

Durch Superposition von  $\overset{A}{\mathbf{u}}$  und  $\overset{B}{\mathbf{u}}$  erhält man schließlich den gesuchten Lösungsvektor

$$u_i(\mathbf{x}) = \int_{\mathcal{I}} G_{ik}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \sigma_{kl,l}^*(\mathbf{y}) dV(\mathbf{y}) - \int_{\partial\mathcal{I}} G_{ik}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \sigma_{kl}^*(\mathbf{y}) n_l(\mathbf{y}) dV(\mathbf{y}) \quad (\text{A.8})$$

von (A.1). Anwendung des Gaußschen Integralsatzes ergibt

$$\left. \begin{aligned} u_i(\mathbf{x}) &= - \int_{\mathcal{I}} G_{ik,l}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \mathbb{C}_{klmn}^E \varepsilon_{mn}^*(\mathbf{y}) dV(\mathbf{y}) \\ &= \int_{\mathcal{I}} G_{ik,l}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \sigma_{kl}^*(\mathbf{y}) dV(\mathbf{y}) \end{aligned} \right\} \quad (\text{A.9})$$

Die zweite Identität wurde mit Hilfe der konstitutiven Beziehung (III.2.8) gewonnen. In (A.9) ist die partielle Ableitung  $G_{ij,k} = \partial_{r_m} G_{ij} \partial_{y_k} r_m = -\partial_{r_k} G_{ij}$  zu bilden. Verzerrungen ergeben sich durch weitere partielle Ableitung von (A.9) nach  $x_j$  zu

$$\left. \begin{aligned} \varepsilon_{ij}(\mathbf{x}) &= \int_{\mathcal{I}} \Gamma_{ijkl}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \mathbb{C}_{klmn}^E \varepsilon_{mn}^*(\mathbf{y}) dV(\mathbf{y}) \\ &= - \int_{\mathcal{I}} \Gamma_{ijkl}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \sigma_{kl}^*(\mathbf{y}) dV(\mathbf{y}) \end{aligned} \right\} \quad (\text{A.10})$$



mit dem vierstufigen Tensor  $\mathbf{\Gamma}$

$$\Gamma_{ijkl}(\mathbf{r}) := -\frac{1}{4} [G_{ik,jl}(\mathbf{r}) + G_{jk,il}(\mathbf{r}) + G_{il,jk}(\mathbf{r}) + G_{jl,ik}(\mathbf{r})] \quad (\text{A.11})$$

Dieser Tensor ist selbstadjungiert und besitzt die Symmetrien

$$\Gamma_{ijkl}(\mathbf{r}) = \Gamma_{jikl}(\mathbf{r}) = \Gamma_{ijlk}(\mathbf{r}) = \Gamma_{klij}(\mathbf{r}) = \Gamma_{ijkl}(-\mathbf{r}) \quad (\text{A.12})$$

Mit (A.2) und (A.10) erhält man in  $\mathcal{B}$  den Spannungszustand

$$\left. \begin{aligned} \sigma_{ij}(\mathbf{x}) &= \mathbb{C}_{ijkl}^E \int_{\mathcal{G}} \Gamma_{klmn}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \mathbb{C}_{mnop}^E \varepsilon_{op}^*(\mathbf{y}) dV(\mathbf{y}) - \mathbb{C}_{ijkl}^E \varepsilon_{kl}^*(\mathbf{x}) \\ &= -\mathbb{C}_{ijkl}^E \int_{\mathcal{G}} \Gamma_{klmn}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \sigma_{mn}^*(\mathbf{y}) dV(\mathbf{y}) + \sigma_{ij}^*(\mathbf{x}) \end{aligned} \right\} \quad (\text{A.13})$$

Sind Einschluß und Matrix des heterogenen Ausgangsmaterials phasenweise homogen und werden im Einschlußgebiet des zugehörigen  $\mathcal{EHS}$  konstante Transformationsverzerrungen oder -spannungen eingeführt, ergeben sich in  $\mathcal{B}$  als Verschiebungsfeld

$$\left. \begin{aligned} u_i(\mathbf{x}) &= - \int_{\mathcal{G}} G_{ik,l}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) dV(\mathbf{y}) \mathbb{C}_{klmn}^E \varepsilon_{mn}^* \\ &= \int_{\mathcal{G}} G_{ik,l}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) dV(\mathbf{y}) \sigma_{kl}^* \end{aligned} \right\} \quad (\text{A.14})$$

als Verzerrungsfeld

$$\left. \begin{aligned} \varepsilon_{ij}(\mathbf{x}) &= \mathbb{P}_{ijkl}(\mathbf{x}) \mathbb{C}_{klmn}^E \varepsilon_{mn}^* \\ &= -\mathbb{P}_{ijkl}(\mathbf{x}) \sigma_{kl}^* \end{aligned} \right\} \quad (\text{A.15})$$

und als Spannungsfeld

$$\left. \begin{aligned} \sigma_{ij}(\mathbf{x}) &= (\mathbb{C}_{ijkl}^E \mathbb{P}_{klmn}(\mathbf{x}) - \mathbb{I}_{ijmn}) \mathbb{C}_{mnop}^E \varepsilon_{op}^* \\ &= -(\mathbb{C}_{ijkl}^E \mathbb{P}_{klmn}(\mathbf{x}) - \mathbb{I}_{ijmn}) \sigma_{mn}^* \end{aligned} \right\} \quad (\text{A.16})$$

mit dem vierstufigen Einheitstensor  $\mathbb{I}_{ijkl} = \frac{1}{2} (\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk})$  und dem Integraloperator

$$\mathbb{P}_{ijkl}(\mathbf{x}) := \int_{\mathcal{G}} \Gamma_{ijkl}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) dV(\mathbf{y}) \quad (\text{A.17})$$

## A.2. Eshelbytensor für ellipsoide Einschlüsse

In diesem Abschnitt wird der Eshelbytensor für spezielle Einschlußgeometrien geschlossen dargestellt. Einschluß- und Matrixmoduli des heterogenen Ausgangsmaterials seien phasenweise konstant. Im Einschlußgebiet des zugehörigen  $\mathcal{EHS}$  seien konstante Transformationsverzerrungen oder -spannungen definiert.

### A.2.1. Eshelbytensor und konjugierter Eshelbytensor

Eshelbytensor  $\mathbb{S}$  und konjugierter Eshelbytensor  $\mathbb{T}$  beschreiben die Wechselwirkungen (A.15)<sub>1</sub> und (A.16)<sub>2</sub> zwischen Transformationsfeldvariablen und aus ihnen resultierenden Spannungs- und Verzerrungsfeldern in  $\mathcal{B}$ . Sie sind definiert durch

$$\mathbb{S}_{ijkl}(\mathbf{x}) := \mathbb{P}_{ijmn}(\mathbf{x}) \mathbb{C}_{mnkl}^E \quad \text{und} \quad \mathbb{T}_{ijkl}(\mathbf{x}) := \mathbb{I}_{ijkl} - \mathbb{C}_{ijmn}^E \mathbb{P}_{mnkl}(\mathbf{x}) \quad (\text{A.18})$$

Zwischen  $\mathbb{S}$  und  $\mathbb{T}$  läßt sich aus beiden Gleichungen die Beziehung (III.2.19) extrahieren. Ist  $\mathbb{S}$  bekannt, so kann daraus  $\mathbb{T}$  gewonnen werden. Zur Berechnung des Integraloperators  $\mathbb{P}$  werden zwei Potentialfunktionen eingeführt

$$\psi(\mathbf{x}) = \int_{\mathcal{S}} r \, dV(\mathbf{y}) \quad \text{und} \quad \phi(\mathbf{x}) = \int_{\mathcal{S}} \frac{1}{r} \, dV(\mathbf{y}) \quad (\text{A.19})$$

$\phi$  charakterisiert ein Newtonsches Potential und  $\psi$  ein biharmonisches Potential in  $\mathcal{S}$ . Die Greensche Funktion (A.5) eingesetzt in (A.14)<sub>1</sub> ergibt mit den Darstellungen der Potentialfunktionen (A.19) und der Eigenschaft  $\psi_{,ii} = 2\phi$

$$u_i = \frac{-\varepsilon_{kl}^*}{8\pi(1-\nu)} \{ \psi_{,ikl} - 2\nu \delta_{kl} \phi_{,i} - 2(1-\nu)(\delta_{ik} \phi_{,l} + \delta_{il} \phi_{,k}) \} \quad (\text{A.20})$$

Durch partielle Ableitung nach  $x_j$  erhält man daraus das Verzerrungsfeld in  $\mathcal{B}$

$$\varepsilon_{ij} = - \frac{\psi_{,ijkl} - 2\nu \delta_{kl} \phi_{,ij} - (1-\nu)(\delta_{ik} \phi_{,jl} + \delta_{jk} \phi_{,il} + \delta_{il} \phi_{,jk} + \delta_{jl} \phi_{,ik})}{8\pi(1-\nu)} \varepsilon_{kl}^* \quad (\text{A.21})$$

unter Berücksichtigung der Symmetrien  $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}$  und  $\varepsilon_{ij}^* = \varepsilon_{ji}^*$ . Ein Koeffizientenvergleich mit (A.15)<sub>1</sub> ergibt unter Berücksichtigung von (A.18)<sub>1</sub> schließlich den vierstufigen Eshelbytensor

$$\mathbb{S}_{ijkl}(\mathbf{x}) = - \frac{\psi_{,ijkl} - 2\nu \delta_{kl} \phi_{,ij} - (1-\nu)(\delta_{ik} \phi_{,jl} + \delta_{jk} \phi_{,il} + \delta_{il} \phi_{,jk} + \delta_{jl} \phi_{,ik})}{8\pi(1-\nu)} \quad (\text{A.22})$$

Die partiellen Ableitungen  $\phi_{,ij}$  und  $\psi_{,ijkl}$  sind hier noch zu bestimmen.

### A.2.2. Homogene Verzerrungen und Spannungen im Einschuß

ESHELBY [49] hat gezeigt, daß Fluktuationsverzerrungen in einem ellipsoiden Einschuß homogen sind. In diesem Fall ist zu verifizieren, ob die partiellen Ableitungen  $\phi_{,ij}$  und  $\psi_{,ijkl}$  in (A.22) ortsunabhängig sind. Zur Auswertung der Volumenintegrale  $\psi_{,ijkl}$  und  $\phi_{,ij}$  wird als Parameterraum ein infinitesimaler Kegelausschnitt  $dV = \frac{1}{3} r_i n_i \, d\mathcal{S}$  des Einschußellipsoids  $\mathcal{S}$  betrachtet mit Rotationsachse  $\mathbf{l} = (r_1, r_2, r_3)^T / r$  und infinitesimaler Grundfläche  $d\mathcal{S} \in \partial\mathcal{S}$ . Es sei  $\mathbf{r} \in \mathcal{S}$  der durch  $\mathbf{x} \in \mathcal{S} \setminus \partial\mathcal{S}$  und  $\mathbf{y} \in \partial\mathcal{S}$  festgelegte Vektor und  $\mathbf{n}$  der nach außen weisende Normaleinheitsvektor auf  $d\mathcal{S}$ . Als normiertes Flächenelement wird

$$dA(\mathbf{l}) := dV(\mathbf{l})/r(\mathbf{l})^3 \quad (\text{A.23})$$

eingeführt, welches nur von den Winkelfunktionen  $\mathbf{l}$  abhängig ist. Die Halbachsen  $a_i$  des Einschußellipsoids seien koaxial zu den Koordinatenachsen ausgerichtet, sodaß die Oberfläche des Einschußellipsoids durch die Ellipsengleichung

$$X_1^2/a_1^2 + X_2^2/a_2^2 + X_3^2/a_3^2 = 1 \quad (\text{A.24})$$

mit  $X_i = x_i + r l_i$  beschrieben werden kann. Die Länge  $r = r(\mathbf{l})$  erhält man als positive Wurzel aus

$$(x_1 + r l_1)^2/a_1^2 + (x_2 + r l_2)^2/a_2^2 + (x_3 + r l_3)^2/a_3^2 = 1 \quad (\text{A.25})$$

zu

$$r = -f/g + \sqrt{f^2/g^2 + e/g} \quad (\text{A.26})$$

mit

$$\left. \begin{aligned} g &= l_1^2/a_1^2 + l_2^2/a_2^2 + l_3^2/a_3^2 \\ f &= l_1 x_1/a_1^2 + l_2 x_2/a_2^2 + l_3 x_3/a_3^2 \\ e &= 1 - x_1^2/a_1^2 - x_2^2/a_2^2 - x_3^2/a_3^2 \end{aligned} \right\} \quad (\text{A.27})$$

Partielle Ableitung von  $\phi$  und  $\psi_{,ij}$  nach der Ortsvariablen  $\mathbf{y}$  ergibt zusammen mit (A.23)

$$\phi_{,i} = - \int_{\mathcal{S}} \frac{r_i}{r^3} dV = - \int_{\mathcal{S}} l_i \frac{dV}{r^2} = - \int_{4\pi} l_i r dA(\mathbf{l}) \quad (\text{A.28})$$

$$\begin{aligned} \psi_{,ijk} &= - \int_{\mathcal{S}} \left( \delta_{ij} r_k + \delta_{ik} r_j + \delta_{jk} r_i - \frac{3}{r^2} r_i r_j r_k \right) \frac{dV}{r^3} \\ &= - \int_{4\pi} (\delta_{ij} l_k + \delta_{ik} l_j + \delta_{jk} l_i - 3 l_i l_j l_k) r dA(\mathbf{l}) \end{aligned} \quad (\text{A.29})$$

Der Wurzelterm in (A.26) hat bei der Auswertung der Volumenintegrale (A.28) und (A.29) keinen Einfluß. Winkelfunktionen  $l_i$  treten hier in ungerader Potenz auf, die bei Integration verschwinden. In den partiellen Ableitungen von (A.28) und (A.29) nach  $\mathbf{x}$

$$\phi_{,ij} = \int_{4\pi} \frac{l_i l_j}{a_j^2} \frac{dA(\mathbf{l})}{g} \quad (\text{A.30})$$

$$\psi_{,ijkl} = \int_{4\pi} (\delta_{ij} l_k l_l + \delta_{ik} l_j l_l + \delta_{jk} l_i l_l - 3 l_i l_j l_k l_l) \frac{1}{a_l^2} \frac{dA(\mathbf{l})}{g} \quad (\text{A.31})$$

ist daher nur der Anteil  $r := -f/g$  einzubeziehen. Die Ableitungen (A.30) und (A.31) sind ortsunabhängig. Der vierstufige Eshelbytensor (A.22) ist somit homogen in  $\mathcal{S}$ . Spannungen und Verzerrungen sind gleichförmig in  $\mathcal{S}$  und nur von der Form des Einschlußellipsoids abhängig.

### A.2.3. Eshelbytensor für ellipsoide Einschlüsse

Alle Einträge des Eshelbytensors, die Zug- mit Schermoden verknüpfen, wie  $\mathbb{S}_{1112}$  oder  $\mathbb{S}_{2311}$ , oder unterschiedliche Schermoden einander zuordnen, wie  $\mathbb{S}_{1223}$  oder  $\mathbb{S}_{1323}$ , müssen null sein. Dies ergibt sich automatisch aus den Darstellungen (A.30) und (A.31), wenn  $l_1$ ,  $l_2$  oder  $l_3$  in ungerader Potenz auftreten. Es erscheinen daher nur Integrale vom Typ  $\int l_1^{2i} l_2^{2j} l_3^{2k} dA(\mathbf{l})/g$ . ROUTH [137] gelang es, diese Integrale in Linienintegrale, sogenannte  $I$ -Integrale, zu überführen, parametrisiert in der Ellipsoidkoordinate  $\lambda$ ,

$$\left. \begin{aligned} I_i &= \int_{4\pi} \frac{l_i^2}{a_i^2} \frac{dA(\mathbf{l})}{g} = 2\pi a_1 a_2 a_3 \int_{\lambda} \frac{du}{(a_i^2 + u)\xi} \Big|_{\lambda=0}^{\infty} \\ I_{ij} = I_{ji} &= \frac{3}{\eta_{ij}} \int_{4\pi} \frac{l_i^2 l_j^2}{a_i^2 a_j^2} \frac{dA(\mathbf{l})}{g} = 2\pi a_1 a_2 a_3 \int_{\lambda} \frac{du}{(a_i^2 + u)(a_j^2 + u)\xi} \Big|_{\lambda=0}^{\infty} \end{aligned} \right\} \quad (\text{A.32})$$

für  $i, j = 1, 2, 3$  mit

$$\xi = \sqrt{(a_1^2 + u)(a_2^2 + u)(a_3^2 + u)} \quad \text{und} \quad \eta_{ij} = \begin{cases} 1 & , \text{ falls } i \neq j \\ 3 & , \text{ falls } i = j \end{cases} \quad (\text{A.33})$$

Die Variable  $\lambda$  ist null, falls  $\mathbf{x} \in \mathcal{S}$ . Für  $\mathbf{x} \in \mathcal{M}$  ist  $\lambda$  die größte positive Wurzel aus

$$x_1^2/(a_1^2 + \lambda) + x_2^2/(a_2^2 + \lambda) + x_3^2/(a_3^2 + \lambda) = 1 \quad (\text{A.34})$$

Führt man in (A.32)<sub>1</sub> die Substitutionen

$$\sin \varphi = \frac{\sqrt{a_1^2 - a_3^2}}{\sqrt{a_1^2 + u}} \quad \text{und} \quad \sin \vartheta = \frac{\sqrt{a_1^2 - a_3^2}}{\sqrt{a_1^2 + \lambda}} \Big|_{\lambda=0} \quad (\text{A.35})$$

durch, erhält man mit den Abkürzungen

$$k = \sqrt{\frac{a_1^2 - a_2^2}{a_1^2 - a_3^2}} \quad \text{und} \quad k' = \sqrt{1 - k^2} = \sqrt{\frac{a_2^2 - a_3^2}{a_1^2 - a_3^2}} \quad (\text{A.36})$$

und den elliptischen Integralen

$$F(k, \vartheta) = \int_0^{\vartheta} \frac{d\varphi}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \varphi}} \quad \text{und} \quad E(k, \vartheta) = \int_0^{\vartheta} \sqrt{1 - k^2 \sin^2 \varphi} d\varphi \quad (\text{A.37})$$

für  $a_1 > a_2 > a_3$  als  $I_i$ -Integrale

$$\left. \begin{aligned} I_1 &= \frac{4\pi a_1 a_2 a_3}{(a_1^2 - a_2^2)(a_1^2 - a_3^2)^{\frac{1}{2}}} (F(k, \vartheta) - E(k, \vartheta)) \\ I_2 &= \frac{4\pi a_1 a_2 a_3}{k^2 k'^2 (a_1^2 - a_3^2)^{\frac{3}{2}}} \left( E(k, \vartheta) - k'^2 F(k, \vartheta) - k^2 \frac{a_3 \sqrt{a_1^2 - a_3^2}}{a_1 a_2} \right) \\ I_3 &= \frac{4\pi a_1 a_2 a_3}{(a_2^2 - a_3^2)(a_1^2 - a_3^2)^{\frac{1}{2}}} \left( \frac{a_2 \sqrt{a_1^2 - a_3^2}}{a_1 a_3} - E(k, \vartheta) \right) \end{aligned} \right\} \quad (\text{A.38})$$

Die  $I$ -Integrale (A.32) sind nur für spezielle Halbachsenverhältnisse des Einschlußellipsoids geschlossen darstellbar. Es sind zwei der drei  $I_i$ -Integrale zu lösen, um daraus die verbleibenden Integrale in (A.32) berechnen zu können. Dies gelingt einerseits mit den Beziehungen

$$\left. \begin{aligned} I_1 + I_2 + I_3 &= 4\pi \\ \eta_{i1} I_{i1} + \eta_{i2} I_{i2} + \eta_{i3} I_{i3} &= 4\pi/a_i^2 \\ \eta_{i1} a_1^2 I_{i1} + \eta_{i2} a_2^2 I_{i2} + \eta_{i3} a_3^2 I_{i3} &= 3I_i \end{aligned} \right\} \quad (\text{A.39})$$

für  $i = 1, 2, 3$ , die man basierend auf (A.32), (A.27)<sub>1</sub> und  $l_1^2 + l_2^2 + l_3^2 = 1$  ableitet. Ferner erhält man durch eine Partialbruchzerlegung von  $(a_i^2 + u)^{-1}(a_j^2 + u)^{-1}$  in  $I_{ij}$

$$I_{ij} = I_{ji} = (I_j - I_i)/(a_i^2 - a_j^2) \quad \text{für } a_i \neq a_j \quad (\text{A.40})$$

Einsetzen von (A.30) und (A.31) in (A.22) ergibt mit den  $I$ -Integralen (A.32) und

$$J_{ij} := I_j - a_i^2 I_{ij} \quad (\text{A.41})$$

schließlich den Eshelbytensoren in der kanonischen Form

$$\mathbb{S}_{ijkl} = \frac{1}{8\pi(1-\nu)} \{ \delta_{ij} \delta_{kl} (2\nu I_i - J_{ik}) + (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{jk} \delta_{il}) [(1-\nu)(I_k + I_l) - J_{ij}] \} \quad (\text{A.42})$$

#### A.2.4. Eshelbytensoren für spezielle Einschlußgeometrien

Der Eshelbytensor (A.42) wird in diesem Abschnitt für zahlreiche Einschlußgeometrien spezifiziert. Betrachtet werden Einschlüsse als flache oder längliche Rotationsellipsoide, Kugeln, elliptische oder zylindrische Fasern, Plättchen oder Lamine. Zur Berechnung des Eshelbytensors (A.42) sind die  $I$ -Integrale (A.32) zu bestimmen. Die Komponenten des Eshelbytensors werden in Tabelle 18 zur Übersicht dargestellt.

**Rotationsellipsoide.** Dazu zählen flache Rotationsellipsoide mit Halbachsenverhältnissen

$$s = \frac{a_3}{a_1} = \frac{a_3}{a_2} < 1 \quad (\text{A.43})$$

und längliche Rotationsellipsoide mit Halbachsenverhältnissen

$$s = \frac{a_3}{a_1} = \frac{a_3}{a_2} > 1 \quad (\text{A.44})$$

Eine Auswertung der  $I_1$ -Integrale (A.32) ergibt

$$I_1 = I_2 = \frac{2\pi s (\arccos(s) - s \sqrt{1-s^2})}{(1-s^2)^{\frac{3}{2}}} \quad \text{für } s < 1 \quad (\text{A.45a})$$

$$I_1 = I_2 = \frac{2\pi s (s \sqrt{s^2-1} - \operatorname{arcosh}(s))}{(s^2-1)^{\frac{3}{2}}} \quad \text{für } s > 1 \quad (\text{A.45b})$$

Mit (A.39)<sub>1</sub>, (A.39)<sub>2</sub> und (A.40) erhält man ferner

$$I_3 = 4\pi - 2I_1 \quad (\text{A.45c})$$

$$I_{11} = I_{22} = I_{12} = I_{21} = \frac{3I_1 - 4\pi s^2}{4a_1^2(1-s^2)} \quad (\text{A.45d})$$

$$I_{33} = \frac{6I_1 s^2 + 4\pi(1-3s^2)}{3a_3^2(1-s^2)} \quad (\text{A.45e})$$

$$I_{13} = I_{31} = I_{23} = I_{32} = \frac{4\pi - 3I_1}{a_1^2(1-s^2)} \quad (\text{A.45f})$$

Diese Integrale in (A.42) eingesetzt ergeben die in Tabelle 18 dargestellten Komponenten des Eshelbytensors mit den Abkürzungen

$$I = \frac{I_1}{2\pi}, \quad Q = \frac{1}{8(1-\nu)}, \quad R = \frac{1-2\nu}{8(1-\nu)}, \quad T = \frac{2-3I}{16(1-\nu)(s^2-1)} \quad (\text{A.46})$$

**Kugeln.** Bei kugelförmigen Einschlüssen sind

$$a_1 = a_2 = a_3 \quad (\text{A.47})$$

Die  $I$ -Integrale ergeben sich direkt aus (A.32) zu

$$I_i = \frac{4\pi}{3} \quad \text{und} \quad I_{ij} = \frac{4\pi}{5a_1^2} \quad (\text{A.48})$$

für  $i, j = 1, 2, 3$ .

**Fasern.** Bei elliptischen Fasern betrachtet man das Halbachsenverhältnis

$$s = \frac{a_2}{a_1} \quad \text{und} \quad a_3 \rightarrow \infty \quad (\text{A.49})$$

Die  $I_i$ -Integrale werden basierend auf (A.38) durch Grenzwertbildung  $a_3 \rightarrow \infty$  ermittelt:

$$I_1 = \frac{4\pi s}{1+s} \quad (\text{A.50a})$$

$$I_2 = \frac{4\pi}{1+s} \quad (\text{A.50b})$$

$$I_3 = 0 \quad (\text{A.50c})$$

Mit (A.39)<sub>2</sub> und (A.40) erhält man für  $a_3 \rightarrow \infty$

$$I_{11} = \frac{4\pi s(2+s)}{3a_1^2(1+s)^2} \quad (\text{A.50d})$$

$$I_{22} = \frac{4\pi(1+2s)}{3a_2^2(1+s)^2} \quad (\text{A.50e})$$

$$I_{33} = 0 \quad (\text{A.50f})$$

$$I_{12} = I_{21} = \frac{4\pi}{a_1^2(1+s)^2} \quad (\text{A.50g})$$

Zu beachten ist, daß die Grenzwertbildung  $a_3 \rightarrow \infty$  erst nach den Substitutionen von

$$I_{13} = I_{31} = \frac{I_1}{a_3^2} \quad \text{und} \quad I_{23} = I_{32} = \frac{I_2}{a_3^2} \quad (\text{A.50h})$$

in (A.42) erfolgt. Die  $I$ -Integrale in (A.42) eingesetzt ergeben schließlich die in [Tabelle 18](#) eingetragenen Komponenten des Eshelbytensors mit den Abkürzungen

$$X = \frac{1}{2(1-\nu)(1+s)} \quad \text{und} \quad Y = 1 - 2\nu \quad (\text{A.51})$$

Bei runden Fasern hat man als Halbachsenverhältnis

$$s = \frac{a_2}{a_1} = 1 \quad \text{und} \quad a_3 \rightarrow \infty \quad (\text{A.52})$$

Für  $s = 1$  erhält man aus obigen Gleichungen

$$I_1 = I_2 = 2\pi \quad (\text{A.53a})$$

$$I_3 = 0 \quad (\text{A.53b})$$

$$I_{11} = I_{22} = I_{12} = I_{21} = \frac{\pi}{a_1^2} \quad (\text{A.53c})$$

$$I_{33} = 0 \quad (\text{A.53d})$$

und die zu berücksichtigenden Substitutionen

$$I_{13} = I_{31} = I_{23} = I_{32} = \frac{I_1}{a_3^2} \quad (\text{A.53e})$$

**Plättchen.** In plättchenförmigen Einschlüssen sind die Halbachsenverhältnisse

$$s = \frac{a_3}{a_1} = \frac{a_3}{a_2} \ll 1 \quad (\text{A.54})$$

Zur Berechnung der  $I$ -Integrale verwendet man die Darstellungen (A.45a)–(A.45f) flacher Rotationsellipsoide. Die arccos-Funktion wird durch den Ansatz

$$\arccos(s) = \frac{\pi}{2} - s - \frac{s^3}{6} - \dots \approx \frac{\pi}{2} \quad (\text{A.55})$$

angenähert. Damit und mit  $(a_3/a_1)^2 = (a_3/a_2)^2 \approx 0$  erhält man

$$I_1 = I_2 = \pi^2 s \quad (\text{A.56a})$$

$$I_3 = 2\pi(2 - \pi s) \quad (\text{A.56b})$$

$$I_{11} = I_{22} = I_{12} = I_{21} = \frac{3\pi^2 s}{4a_1^2} \quad (\text{A.56c})$$

$$I_{33} = \frac{4\pi}{3a_3^2} \quad (\text{A.56d})$$

$$I_{13} = I_{31} = I_{23} = I_{32} = \frac{4\pi - 3\pi^2 s}{a_1^2} \quad (\text{A.56e})$$

**Laminate.** Bei Laminaten ergeben sich die Halbachsenverhältnisse

$$s = \frac{a_3}{a_1} = \frac{a_3}{a_2} \rightarrow 0 \quad \text{für} \quad a_1 = a_2 \rightarrow \infty \quad (\text{A.57})$$

Zur Berechnung der  $I$ -Integrale verwendet man die Darstellungen (A.56a)–(A.56e) plättchenförmiger Einschlüsse. Man erhält so

$$I_1 = I_2 = 0 \quad (\text{A.58a})$$

$$I_3 = 4\pi \quad (\text{A.58b})$$

$$I_{11} = I_{22} = I_{12} = I_{21} = 0 \quad (\text{A.58c})$$

$$I_{33} = \frac{4\pi}{3a_3^2} \quad (\text{A.58d})$$

Zu beachten ist, daß die Grenzwertbildung  $a_1 = a_2 \rightarrow \infty$  erst nach den Substitutionen von

$$I_{13} = I_{31} = I_{23} = I_{32} = \frac{I_3}{a_1^2} \quad (\text{A.58e})$$

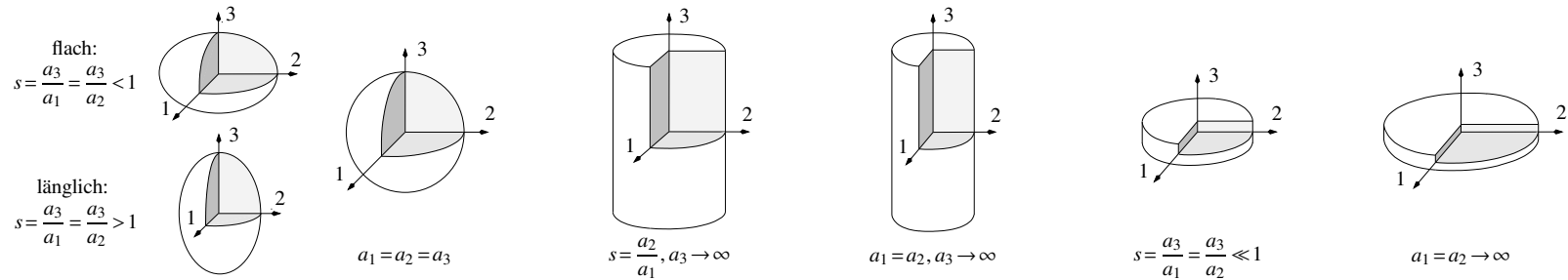
in (A.42) vorzunehmen ist.

### A.3. Effektive Eshelbytensoren

Effektive Eshelbytensoren  $\bar{\mathbb{S}}(\bar{\mathbb{C}})$  enthalten die a priori unbekanntenen Materialparameter der effektiven Struktur. Selbst wenn die einzelnen Phasen des Komposits isotrop sind, ist das effektive Kontinuum aufgrund der Geometrie und Verteilung der Heterogenitäten in der Regel anisotrop.



**Tabelle 18:**  
Eshelbytensoren



$S_{ijkl}$	Rotationsellipsoid	Kugel	Elliptische Faser	Runde Faser	Plättchen	Laminat
$S_{1111}$	$3Q + 2RI + 3T$	$\frac{7-5\nu}{15(1-\nu)}$	$X\left\{\frac{2s+s^2}{1+s} + Ys\right\}$	$\frac{5-4\nu}{8(1-\nu)}$	$\frac{(13-8\nu)\pi s}{32(1-\nu)}$	0
$S_{2222}$	$S_{1111}$	$S_{1111}$	$X\left\{\frac{1+2s}{1+s} + Y\right\}$	$S_{1111}$	$S_{1111}$	0
$S_{3333}$	$4Q + 4R(1-I) + 8Ts^2$	$S_{1111}$	0	0	$1 - \frac{(1-2\nu)\pi s}{4(1-\nu)}$	1
$S_{1122}$	$Q - 2RI + T$	$\frac{5\nu-1}{15(1-\nu)}$	$X\left\{\frac{s^2}{1+s} - Ys\right\}$	$\frac{4\nu-1}{8(1-\nu)}$	$\frac{(8\nu-1)\pi s}{32(1-\nu)}$	0
$S_{2211}$	$S_{1122}$	$S_{1122}$	$X\left\{\frac{1}{1+s} - Y\right\}$	$S_{1122}$	$S_{1122}$	0
$S_{1133}$	$-2RI - 4Ts^2$	$S_{1122}$	$2\nu s X$	$\frac{\nu}{2(1-\nu)}$	$\frac{(2\nu-1)\pi s}{8(1-\nu)}$	0
$S_{3311}$	$-4R(1-I) - 4T$	$S_{1122}$	0	0	$\frac{\nu}{1-\nu} - \frac{(4\nu+1)\pi s}{8(1-\nu)}$	$\frac{\nu}{1-\nu}$
$S_{2233}$	$S_{1133}$	$S_{1122}$	$2\nu X$	$S_{1133}$	$S_{1133}$	0
$S_{3322}$	$S_{3311}$	$S_{1122}$	0	0	$S_{3311}$	$S_{3311}$
$S_{2323} = S_{3223} = S_{2332} = S_{3232}$	$R(2-I) - 2T(1+s^2)$	$\frac{4-5\nu}{15(1-\nu)}$	$\frac{1}{2(1+s)}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{2} + \frac{(\nu-2)\pi s}{8(1-\nu)}$	$\frac{1}{2}$
$S_{1313} = S_{3113} = S_{1331} = S_{3131}$	$S_{2323}$	$S_{2323}$	$\frac{s}{2(1+s)}$	$\frac{1}{4}$	$S_{2323}$	$\frac{1}{2}$
$S_{1212} = S_{2112} = S_{1221} = S_{2121}$	$Q + 2RI + T$	$S_{2323}$	$\frac{X}{2}\left\{\frac{1+s^2}{1+s} + Y(1+s)\right\}$	$\frac{3-4\nu}{8(1-\nu)}$	$\frac{(7-8\nu)\pi s}{32(1-\nu)}$	0
alle anderen $S_{ijkl}$	0	0	0	0	0	0

Unter diesen Umständen sind die in [Tabelle 18](#) aufgelisteten Eshelbytensoren nicht mehr gültig. Für das selbstkonsistente Modell und die Differentialmethode der Homogenisierung ist ein effektiver Eshelbytensor notwendig, um effektive Tangentenmoduli und Spannungen berechnen zu können. Ziel dieses Abschnitts ist, Wechselwirkungen zwischen Fluktuations- und Transformationsverzerrungen im  $\mathcal{EHS}$  einer heterogenen Ausgangsstruktur mit einem einzelnen kugelförmigen, faserförmigen oder laminaten Einschuß mit Hilfe eines effektiven Eshelbytensors zu beschreiben. Der äquivalent homogene Körper  $\mathcal{B}$  sei hierbei linear elastisch und unendlich ausgedehnt angenommen sowie mit den a priori unbekanntenen effektiven Parametern  $\mathbb{C}^E = \bar{\mathbb{C}}$  versehen. Faserrichtung des faserverstärkten Komposits sei die  $x_3$ -Richtung. Das Laminat dehne sich in der  $x_1$ - $x_2$ -Ebene aus. Der effektive Elastizitätstensor einer Mikrostruktur mit kugelförmigem Einschuß ist isotrop und besitzt dieselbe Struktur wie die isotropen Elastizitätstensoren der einzelnen Phasen. Der effektive Parameter  $\bar{\nu}$  ersetzt dort die Querkontraktionszahl der Phase. Der zugehörige effektive Eshelbytensor  $\bar{\mathbb{S}}(\bar{\mathbb{C}})$  ergibt sich aus dem Eshelbytensor  $\mathbb{S}(\mathbb{C}^{\mathcal{M}})$ , indem man dort in gleicher Weise die Querkontraktionszahl  $\nu$  des Matrixmaterials durch  $\bar{\nu}$  ersetzt. Der effektive Elastizitätstensor einer Mikrostruktur mit Fasereinschuß oder Laminat ist transversal isotrop. Die Belegungen der Eshelbytensoren  $\bar{\mathbb{S}}(\bar{\mathbb{C}})$  und  $\mathbb{S}(\mathbb{C}^{\mathcal{M}})$  mit Nulleinträgen sind aufgrund der Einschußgeometrien identisch. Für materialunabhängige konstante Komponenten gilt  $\bar{\mathbb{S}}_{ijkl}(\bar{\mathbb{C}}) = \mathbb{S}_{ijkl}(\mathbb{C}^{\mathcal{M}})$ . Bei laminater Einschußgeometrie ergeben sich die verbleibenden Komponenten  $\bar{\mathbb{S}}_{3311} = \bar{\mathbb{S}}_{3322}$  basierend auf der Symmetriebedingung

$$\bar{\mathbb{C}}_{11ii}\bar{\mathbb{S}}_{ii33} = \bar{\mathbb{C}}_{33ii}\bar{\mathbb{S}}_{ii11} \quad (\text{A.59})$$

zu

$$\bar{\mathbb{S}}_{3311} = \bar{\mathbb{S}}_{3322} = \frac{\bar{\mathbb{C}}_{1133}}{\bar{\mathbb{C}}_{3333}} \quad (\text{A.60})$$

Bei faserförmiger Einschußgeometrie ergeben sich  $\bar{\mathbb{S}}_{1133} = \bar{\mathbb{S}}_{2233}$  in gleicher Weise. Zur Berechnung der verbleibenden Komponenten des effektiven Eshelbytensors genügt es, die isotrope  $x_1$ - $x_2$ -Ebene quer zur Faser zu betrachten. Der Elastizitätstensor besitzt hier die Struktur

$$\mathbb{C}_{ijkl} = \mu \left\{ \delta_{ij} \delta_{kl} \frac{3 - \kappa}{\kappa - 1} + \delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk} \right\} \quad (\text{A.61})$$

für  $i, j, k, l = 1, 2$  mit Materialparameter

$$\kappa = \begin{cases} 3 - 4\nu & \text{bei Isotropie} \\ 3 - 8\mu \left( \frac{\nu}{E} + \frac{\nu_3^2}{E_3} \right) & \text{bei transversaler Isotropie} \end{cases} \quad (\text{A.62})$$

Hier sind  $E$ ,  $E_3$  und  $\nu$ ,  $\nu_3$  und  $\mu$  die für Transversalisotropie typischen Ingenieurskonstanten.  $E$  bezeichnet den mit der  $x_1$ - $x_2$ -Ebene,  $E_3$  den mit der  $x_3$ -Richtung assoziierten Youngmodul,  $\nu$  die Querkontraktion in der  $x_1$ - $x_2$ -Ebene und  $\nu_3$  die Querkontraktion in  $x_3$ -Richtung. Der Schubmodul  $\mu$  ist definiert durch  $\mu = E/2(1 + \nu)$ . Für  $\kappa$  in [\(A.62\)](#) gilt äquivalent

$$\kappa = \frac{3 \mathbb{C}_{1111} - \mathbb{C}_{1122}}{\mathbb{C}_{1111} + \mathbb{C}_{1122}} \quad (\text{A.63})$$

Der effektive Elastizitätstensor hat in der  $x_1$ - $x_2$ -Ebene dieselbe isotrope Struktur wie die isotropen Elastizitätstensoren der einzelnen Phasen. Das hat zur Folge, daß auch die Eshelbytensoren  $\bar{\mathbb{S}}(\bar{\mathbb{C}})$  und  $\mathbb{S}(\mathbb{C}^{\mathcal{M}})$  in der  $x_1$ - $x_2$ -Ebene die gleiche Struktur besitzen. Im Detail ist

$$\bar{\mathbb{S}}_{ijkl} = \frac{1}{2(1 + \bar{\kappa})} \{ \delta_{ij} \delta_{kl} (2 - \bar{\kappa}) + (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) \bar{\kappa} \} \quad (\text{A.64})$$

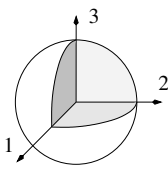
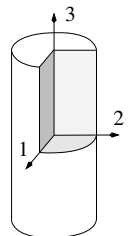
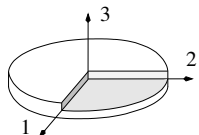
für  $i, j, k, l = 1, 2$  mit Materialparameter

$$\bar{k} = \left. \begin{array}{l} \left. \begin{array}{l} 3 - 4\bar{\nu} \\ 3 - 8\bar{\mu} \left( \frac{\bar{\nu}}{\bar{E}} + \frac{\bar{\nu}_3^2}{\bar{E}_3} \right) \end{array} \right\} \begin{array}{l} \text{bei isotroper effektiver Struktur} \\ \text{bei transversal isotroper effektiver Struktur} \end{array} \\ = \frac{3\bar{C}_{1111} - \bar{C}_{1122}}{\bar{C}_{1111} + \bar{C}_{1122}} \end{array} \right\} \quad (\text{A.65})$$

Hier sind  $\bar{E}$ ,  $\bar{E}_3$ ,  $\bar{\nu}$ ,  $\bar{\nu}_3$  und  $\bar{\mu}$  die effektiven Ingenieurskonstanten  $E$ ,  $E_3$ ,  $\nu$ ,  $\nu_3$  und  $\mu$ . Als effektiven konjugierten Eshelbytensor erhält man

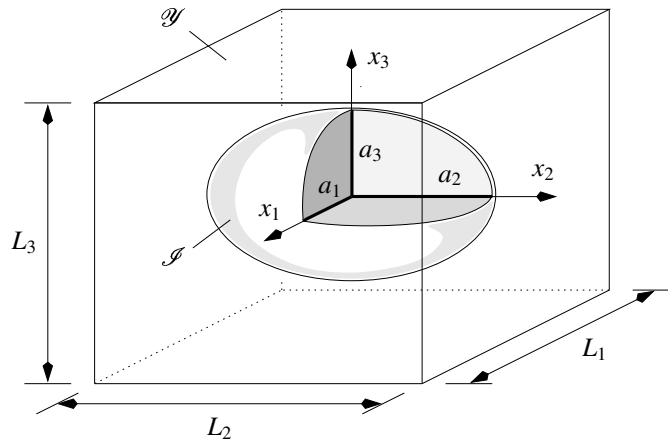
$$\bar{\mathbb{T}} = \mathbb{I} - \bar{\mathbb{C}} : \bar{\mathbb{S}} : \bar{\mathbb{D}} \quad (\text{A.66})$$

falls man in (III.2.19) Moduli und Flexibilitäten des  $\mathcal{EHS}$  durch effektive Moduli und Flexibilitäten ersetzt. In Tabelle 19 sind die effektiven Eshelbytensoren  $\bar{\mathbb{S}}$  der spezifizierten Einschlußgeometrien zur Übersicht dargestellt.

<b>Tabelle 19:</b> Effektive Eshelbytensoren			
	$a_1 = a_2 = a_3$	$a_1 = a_2, a_3 \rightarrow \infty$	$a_1 = a_2 \rightarrow \infty$
$\bar{\mathbb{S}}_{ijkl}$	Kugel	Runde Faser	Laminat
$\bar{\mathbb{S}}_{1111} = \bar{\mathbb{S}}_{2222}$	$\frac{7 - 5\bar{\nu}}{15(1 - \bar{\nu})}$	$\frac{5\bar{C}_{1111} + \bar{C}_{1122}}{8\bar{C}_{1111}}$	0
$\bar{\mathbb{S}}_{3333}$	$\bar{\mathbb{S}}_{1111}$	0	1
$\bar{\mathbb{S}}_{1122} = \bar{\mathbb{S}}_{2211}$	$\frac{5\bar{\nu} - 1}{15(1 - \bar{\nu})}$	$\frac{3\bar{C}_{1122} - \bar{C}_{1111}}{8\bar{C}_{1111}}$	0
$\bar{\mathbb{S}}_{1133} = \bar{\mathbb{S}}_{2233}$	$\bar{\mathbb{S}}_{1122}$	$\frac{\bar{C}_{1133}}{2\bar{C}_{1111}}$	0
$\bar{\mathbb{S}}_{3311} = \bar{\mathbb{S}}_{3322}$	$\bar{\mathbb{S}}_{1122}$	0	$\frac{\bar{C}_{1133}}{\bar{C}_{3333}}$
$\bar{\mathbb{S}}_{2323} = \bar{\mathbb{S}}_{3223} = \bar{\mathbb{S}}_{2332}$ $= \bar{\mathbb{S}}_{3232} = \bar{\mathbb{S}}_{1313}$ $= \bar{\mathbb{S}}_{3113} = \bar{\mathbb{S}}_{1331}$ $= \bar{\mathbb{S}}_{3131}$	$\frac{4 - 5\bar{\nu}}{15(1 - \bar{\nu})}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{2}$
$\bar{\mathbb{S}}_{1212} = \bar{\mathbb{S}}_{2112} = \bar{\mathbb{S}}_{1221}$ $= \bar{\mathbb{S}}_{2121}$	$\bar{\mathbb{S}}_{2323}$	$\frac{3\bar{C}_{1111} - \bar{C}_{1122}}{8\bar{C}_{1111}}$	0
alle anderen $\bar{\mathbb{S}}_{ijkl}$	0	0	0

## B. Eshelbytensoren für periodische Mikrostrukturen

In diesem Abschnitt wird ein kanonisches Modell zur Konstruktion von Eshelbytensoren für Verbundmaterialien mit periodischer Mikrostruktur aufbereitet. Zur Basisliteratur zählen hier BAKHVALOV & PANASENKO [3], NEMAT-NASSER & HORI [123] und darin enthaltene Referenzen. Es wird exemplarisch eine Einheitszelle  $\mathcal{Y}$  mit einem ellipsoiden Einschluß  $\mathcal{I}$  betrachtet. Topologie und Abmessungen der Einheitszelle sind Abb. 69 zu entnehmen. Der Einschluß sei



**Abbildung 69:** Einheitszelle  $\mathcal{Y}$  einer periodischen Mikrostruktur  $\mathcal{B}$  mit einem einzigen Einschluß.  $L_1$ ,  $L_2$  und  $L_3$  sind die Abmessungen der Einheitszelle,  $a_1$ ,  $a_2$  und  $a_3$  sind die Halbachsen des Einschlußellipsoids in  $x_1$ -,  $x_2$ - und  $x_3$ -Richtung des lokalen Bezugssystems.

in einer Matrix mit Moduli  $\mathbb{C}^E$  eingebettet. Im Einschluß der finit begrenzten Einheitszelle sind Fluktuationsspannungen und -verzerrungen inhomogen. Wechselwirkungen zwischen Transformations- und Fluktuationfeldvariablen sind hier ortsabhängig. Die Annahme phasenkonstanter Variablen ist im Allgemeinen unrealistisch, hat aber den Vorteil, daß Eshelbytensoren mit kleinstmöglichem analytischen Aufwand berechnet werden können. Feldvariablen sind nahezu phasenkonstant, wenn zwischen Einheitszelle und Einschluß ein deutlicher Größenunterschied besteht. Als  $\mathcal{EHS}$  wird nachfolgend ein Material mit Referenzmoduli  $\mathbb{C}^E$  gewählt.

### B.1. Fourierreihendarstellung von Verschiebungen und Verzerrungen

In periodischen Mikrostrukturen sind mechanische Eigenschaften der Einheitszelle  $\mathcal{Y}$  unter Translationen der Form  $m_i L_i \mathbf{e}_i$  in den  $x_i$ -Richtungen des lokalen Bezugssystems  $\{\mathbf{e}_i\}_{i \in \{1,2,3\}}$  für ganzzahlige Vielfache  $m_i$  mit  $i = 1, 2, 3$  invariant. Unter diesen Voraussetzungen erfüllt jede Feldvariable  $\Theta$  in  $\mathcal{Y}$  die Periodizitätseigenschaft

$$\Theta(\mathbf{x}) = \Theta(\mathbf{x} + \mathbf{d}) \quad \text{mit} \quad \mathbf{d} = (m_1 L_1, m_2 L_2, m_3 L_3)^T \quad (\text{B.1})$$

Feldvariablen und deren Ableitungen lassen sich mit dieser Eigenschaft als Fourierreihe

$$\left. \begin{aligned} \Theta(\mathbf{x}) &= \sum_{\xi} \mathcal{F}\Theta(\xi) \exp[i\xi \cdot \mathbf{x}] \\ \partial_x \Theta(\mathbf{x}) &= i \sum_{\xi} \mathcal{F}\Theta(\xi) \otimes \xi \exp[i\xi \cdot \mathbf{x}] \end{aligned} \right\} , \quad i = \sqrt{-1} \quad (\text{B.2})$$

mit den Fourier-Koeffizienten

$$\mathcal{F}\Theta(\xi) = \frac{1}{L_1 L_2 L_3} \int_{\mathcal{Y}} \Theta(\mathbf{x}) \exp[-i\xi \cdot \mathbf{x}] dV(\mathbf{x}) \quad (\text{B.3})$$

entwickeln. Daraus schließt man mit (B.1) auf die Bedingung  $\exp[\iota \boldsymbol{\xi} \cdot (\mathbf{x} + \mathbf{d})] = \exp[\iota \boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{x}]$ , aus der sich

$$\boldsymbol{\xi} = 2\pi(n_1/L_1, n_2/L_2, n_3/L_3)^T \quad (\text{B.4})$$

mit den ganzzahligen Parametern  $n_1, n_2$  und  $n_3$  ergibt. Basierend auf diesen grundlegenden Betrachtungen lassen sich Verschiebungen, Transformationsspannungen und -verzerrungen entsprechend Gleichung (B.2) spezifizieren. Diese Darstellungen werden genutzt, um ausgehend von der Gleichgewichtsbedingung (A.3) in der Form

$$\sigma_{ij,i}(\mathbf{x}) = \{ \mathbb{C}_{ijkl}^E \varepsilon_{kl}(\mathbf{x}) \}_{,i} + \tau_{ij,i}(\mathbf{x}) = 0 \quad (\text{B.5})$$

mit

$$\tau_{ij} = \begin{cases} \sigma_{ij}^* = -\mathbb{C}_{ijkl}^E \varepsilon_{kl}^* & \text{in } \mathcal{I} \\ 0 & \text{in } \mathcal{M} \end{cases} \quad (\text{B.6})$$

Eshelbytensoren zu identifizieren, die Wechselwirkungen zwischen Fluktuations- und Transformationsverzerrungen beschreiben. Der lineare Verzerrungstensor  $\varepsilon_{kl} = \frac{1}{2}(u_{k,l} + u_{l,k})$  ist hier der symmetrische Anteil des Verschiebungsgradienten. Verschiebungen und Transformationsfeldvariablen der Form (B.2) eingesetzt in (B.5) und (B.6) liefern als Gleichgewichtsbedingung

$$-\xi_i \mathbb{C}_{ijkl}^E \frac{1}{2} (\xi_l \mathcal{F}u_k(\mathbf{x}) + \xi_k \mathcal{F}u_l(\mathbf{x})) + \iota \xi_i \mathcal{F}\tau_{ij}(\mathbf{x}) = 0 \quad , \quad \mathbf{x} \in \mathcal{Y} \quad (\text{B.7})$$

Algebraische Umformungen ergeben als Lösung von (B.7)

$$\mathcal{F}u_i(\boldsymbol{\xi}) = \frac{\iota}{2} (\mathcal{F}G_{ij}(\boldsymbol{\xi}) \xi_k + \mathcal{F}G_{ik}(\boldsymbol{\xi}) \xi_j) \mathcal{F}\tau_{jk}(\boldsymbol{\xi}) \quad (\text{B.8})$$

mit den Fourier-Koeffizienten  $\mathcal{F}G$  der Greenschen Funktion. Sie sind definiert durch

$$\mathcal{F}G_{ij}(\boldsymbol{\xi}) = K_{ij}^{-1}(\boldsymbol{\xi}) = \frac{\text{cof}[K_{ij}(\boldsymbol{\xi})]}{\det[K_{ij}(\boldsymbol{\xi})]} \quad (\text{B.9})$$

als Inverse des Akustiktensors  $K_{ij}(\boldsymbol{\xi}) = \xi_s \mathbb{C}_{sijt}^E \xi_t$ , die sich aus Kofaktor  $\text{cof}[K_{ij}(\boldsymbol{\xi})]$  und Determinante  $\det[K_{ij}(\boldsymbol{\xi})]$  des Akustiktensors berechnen lassen. Als Fourier-Koeffizienten der Verzerrungen erhält man aus  $\boldsymbol{\varepsilon} = \text{sym}[\partial_x \mathbf{u}]$  und (B.2)<sub>2</sub>

$$\begin{aligned} \mathcal{F}\varepsilon_{ij}(\boldsymbol{\xi}) &= \frac{\iota}{2} (\xi_i \mathcal{F}u_j(\boldsymbol{\xi}) + \xi_j \mathcal{F}u_i(\boldsymbol{\xi})) \\ &= -\mathcal{F}\Gamma_{ijkl}(\boldsymbol{\xi}) \mathcal{F}\tau_{kl}(\boldsymbol{\xi}) \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

Hier ist  $\mathcal{F}\Gamma$  der vierstufige Integraloperator

$$\mathcal{F}\Gamma_{ijkl}(\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{4} (\mathcal{F}G_{ik}(\boldsymbol{\xi}) \xi_j \xi_l + \mathcal{F}G_{jk}(\boldsymbol{\xi}) \xi_i \xi_l + \mathcal{F}G_{il}(\boldsymbol{\xi}) \xi_j \xi_k + \mathcal{F}G_{jl}(\boldsymbol{\xi}) \xi_i \xi_k) \quad (\text{B.11})$$

Der Eshelbytensor wird in Abschnitt B.3 mit Hilfe der Fourier-Koeffizienten (B.10) gewonnen.

## B.2. Isotroper linear elastischer äquivalent homogener Körper

Wird als  $\mathcal{EHS}$  ein homogenes isotropes linear elastisches Material mit Moduli

$$\mathbb{C}_{ijkl}^E = \mu \left\{ \delta_{ij} \delta_{kl} \frac{2\nu}{1-2\nu} + \delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk} \right\} \quad (\text{B.12})$$

gewählt, können die Greenschen Operatoren (B.9), (B.11) und Verzerrungen (B.10) exakt quantifiziert werden. Für den Akustiktensor erhält man den Ausdruck

$$K_{ij} := \xi_i \mathbb{C}_{ijkl}^E \xi_l = \frac{\mu}{1-2\nu} \xi_i \xi_j + \mu \xi^2 \delta_{ij} \quad (\text{B.13})$$

mit dem Parameter

$$\xi^2 = \xi_i \xi_i = 4\pi^2 \left( \frac{n_1^2}{L_1^2} + \frac{n_2^2}{L_2^2} + \frac{n_3^2}{L_3^2} \right) \quad (\text{B.14})$$

Den Greenschen Operator (B.9) leitet man aus den Beziehungen

$$\mathcal{F}G_{ij}(\xi) = \alpha \xi_i \xi_j + \beta \delta_{ij} \quad \text{und} \quad K_{is}(\xi) \mathcal{F}G_{sj}(\xi) = \delta_{ij} \quad (\text{B.15})$$

ab. Daraus ergeben sich die Parameter  $1/\alpha = -2\xi^4\mu(1-\nu)$  und  $1/\beta = \xi^2\mu$  sowie

$$\mathcal{F}G_{ij} = \frac{1}{\xi^2\mu} \left( \delta_{ij} - \frac{\xi_i \xi_j}{2\xi^2(1-\nu)} \right) \quad (\text{B.16})$$

Diese Gleichung liefert in Verbindung mit (B.11) den vierstufigen Integraloperator

$$\mathcal{F}\mathbb{T}_{ijkl}(\xi) = \frac{1}{4\xi^2\mu} (\xi_i \xi_k \delta_{jl} + \xi_i \xi_l \delta_{jk} + \xi_j \xi_k \delta_{il} + \xi_j \xi_l \delta_{ik}) - \frac{\xi_i \xi_j \xi_k \xi_l}{2\xi^4\mu(1-\nu)} \quad (\text{B.17})$$

Die zwei letzten Beziehungen eingesetzt in (B.8) und (B.10) führen schließlich auf eine geschlossene Darstellung des Verschiebungs- und Verzerrungsfelds in  $\mathcal{Y}$ .

## B.3. Eshelbytensor und konjugierter Eshelbytensor

Nachfolgende Darstellungen vereinfachen sich bei Annahme homogen verteilter Transformationsfeldvariablen im Einschlußgebiet  $\mathcal{I}$  des  $\mathcal{EHS}$ . Diese kanonische Annahme basiert auf der Approximation  $\bar{\tau}^{\mathcal{I}} \approx \tau(\mathbf{x})$  mit  $\mathbf{x} \in \mathcal{I}$ , aus der mit (B.6) und (B.3) die Näherung

$$\mathcal{F}\tau_{ij}(\xi) \approx \frac{\bar{\tau}_{ij}^{\mathcal{I}}}{L_1 L_2 L_3} \int_{\mathcal{I}} \exp[-i\xi \cdot \mathbf{x}] dV(\mathbf{x}) \quad (\text{B.18})$$

folgt. Die Annahme (B.18) ist insbesondere bei ausgeprägtem Größenverhältnis  $|\mathcal{I}| \ll |\mathcal{Y}|$  zutreffend. Der Integralausdruck in (B.18) ist für ellipsoide Einschlußgeometrien geschlossen lösbar. Im Hinblick auf eine geeignete Parametrisierung des Integranden projiziert man hier die ellipsoide Einschlußgeometrie auf eine Referenzkugel mit Radius

$$R = \sqrt{(\xi_1 a_1 / \xi)^2 + (\xi_2 a_2 / \xi)^2 + (\xi_3 a_3 / \xi)^2} \quad (\text{B.19})$$

und führt in (B.18) Kugelkoordinaten  $(r, \phi, \theta)$  ein. Das Volumenelement  $dV$  wird hier als infinitesimaler Volumenausschnitt der Kugel mit Abstand  $r$  vom Kugelmittelpunkt betrachtet. Der

Parameter  $\phi$  sei in diesem Zusammenhang der Drehwinkel, um den die Projektion des Ortsvektors  $\mathbf{x}$  auf die zu  $\boldsymbol{\xi}$  senkrechte Ebene rotiert wird, und  $\theta$  sei der zwischen den Ortsvektoren  $\boldsymbol{\xi}$  und  $\mathbf{x}$  definierte Innenwinkel. Das Einschlußvolumen ist identisch mit dem Volumen  $4\pi R^3/3 \equiv |\mathcal{V}|$ , welches von der Referenzkugel eingenommen wird. Im Detail ist

$$\begin{aligned}
g^{\mathcal{V}}(\pm\boldsymbol{\xi}) &= \frac{1}{|\mathcal{V}|} \int_{\mathcal{V}} \exp[\pm i\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{x}] dV(\mathbf{x}) \\
&= \frac{1}{|\mathcal{V}|} \int_0^R dr \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta r^2 \sin\theta \exp[\pm i\xi r \cos\theta] \\
&= \frac{1}{|\mathcal{V}|} \int_0^R dr \int_0^{2\pi} d\phi \int_1^{-1} -d(\cos\theta) r^2 \exp[\pm i\xi r \cos\theta] \\
&= \frac{1}{|\mathcal{V}|} \frac{4\pi}{\xi} \int_0^R r \sin(\xi r) dr \\
&= \frac{3(\sin\eta - \eta \cos\eta)}{\eta^3}
\end{aligned} \tag{B.20}$$

mit Parameter  $\eta = \xi R$ . Definiert man zudem als Volumenverhältnis  $v_{\mathcal{V}} = |\mathcal{V}|/(L_1 L_2 L_3)$ , erhält man aus obigen Betrachtungen

$$\mathcal{F}\tau_{ij}(\boldsymbol{\xi}) = v_{\mathcal{V}} g^{\mathcal{V}}(-\boldsymbol{\xi}) \bar{\tau}_{ij}^{\mathcal{V}} \tag{B.21}$$

Mit dieser Beziehung können nun in einem weiteren Schritt Verschiebungen und Verzerrungen in  $\mathcal{V}$  berechnet werden. Als Verschiebungsfeld erhält man mit (B.8), (B.2) und (B.3) unter Berücksichtigung der Symmetriebedingung  $\bar{\tau}_{ij} = \bar{\tau}_{ji}$

$$u_i(\mathbf{x}) = \int_{\mathcal{V}} G_{i,j,k}(\mathbf{x}-\mathbf{y}) dV(\mathbf{y}) \bar{\tau}_{jk}^{\mathcal{V}} \tag{B.22}$$

Der Greensche Operator ist hier definiert als

$$G_{ij}(\mathbf{x}-\mathbf{y}) = \frac{1}{L_1 L_2 L_3} \sum_{\substack{n_p=-\infty \\ p=1,2,3}}^{\infty} \mathcal{F}G_{ij}(\boldsymbol{\xi}) \exp[i\boldsymbol{\xi} \cdot (\mathbf{x}-\mathbf{y})] \tag{B.23}$$

Zu beachten ist, daß Gleichung (B.22) identisch ist mit (A.14). Die Verzerrungen ergeben sich mit (B.10) und (B.3) zu

$$\varepsilon_{ij}(\mathbf{x}) = - \int_{\mathcal{V}} \Gamma_{ijkl}(\mathbf{x}-\mathbf{y}) dV(\mathbf{y}) \bar{\tau}_{kl}^{\mathcal{V}} \tag{B.24}$$

wobei sich der vierstufige Integraloperator

$$\begin{aligned}
\Gamma_{ijkl}(\mathbf{x}-\mathbf{y}) &= \frac{1}{L_1 L_2 L_3} \sum_{\substack{n_p=-\infty \\ p=1,2,3}}^{\infty} \mathcal{F}\Gamma_{ijkl}(\boldsymbol{\xi}) \exp[i\boldsymbol{\xi} \cdot (\mathbf{x}-\mathbf{y})] \\
&= -\frac{1}{4} (G_{ik,jl}(\mathbf{x}-\mathbf{y}) + G_{jk,il}(\mathbf{x}-\mathbf{y}) + G_{il,jk}(\mathbf{x}-\mathbf{y}) + G_{jl,ik}(\mathbf{x}-\mathbf{y}))
\end{aligned} \tag{B.25}$$

analog zu (A.11) darstellen läßt. Mit (B.24) und (B.6) gelangt man schließlich zur Beziehung

$$\varepsilon_{ij}(\mathbf{x}) = \mathbb{S}_{ijkl}(\mathbf{x}) \langle \varepsilon_{kl} \rangle_{\mathcal{J}}^* \quad , \quad \mathbf{x} \in \mathcal{Y} \quad (\text{B.26})$$

zwischen Fluktuationsverzerrungen  $\varepsilon$  und dem Volumenmittelwert  $\langle \varepsilon \rangle_{\mathcal{J}}^*$  in  $\mathcal{J}$ , aus der man den ortsabhängigen Eshelbytensor in der Form

$$\begin{aligned} \mathbb{S}_{ijkl}(\mathbf{x}) &= \mathbb{P}_{ijmn}(\mathbf{x}) \mathbb{C}_{mnkl}^E \\ \mathbb{P}_{ijkl}(\mathbf{x}) &= \int_{\mathcal{J}} \Gamma_{ijkl}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) dV(\mathbf{y}) \\ &= v_{\mathcal{J}} \sum_{\substack{n_p=-\infty \\ p=1,2,3}}^{\infty} \mathcal{F}\Gamma_{ijkl}(\xi) \exp[i\xi \cdot \mathbf{x}] g^{\mathcal{J}}(-\xi) \end{aligned} \quad (\text{B.27})$$

extrahiert. Hier sind  $\mathcal{F}\Gamma$  die durch Gleichungen (B.11) und (B.9) definierten Fourier-Koeffizienten. Mit (B.27) und (III.2.19) läßt sich der ortsabhängige konjugierte Eshelbytensor

$$\mathbb{T}(\mathbf{x}) = \mathbb{I} - \mathbb{C}^E : \mathbb{S}(\mathbf{x}) : \mathbb{D}^E \quad (\text{B.28})$$

berechnen. Hier ist  $\mathbb{I}_{ijkl} = \frac{1}{2}(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk})$  der vierstufige Einheitstensor. Da zur Homogenisierung nur Phasenmittelwerte der Fluktuationsverzerrungen erforderlich sind, ist es sinnvoll, eine Volumenmittelung von (B.26) über  $\mathcal{J}$  durchzuführen,

$$\bar{\varepsilon}_{ij}^{\mathcal{J}} = \bar{\mathbb{S}}_{ijkl} \langle \varepsilon_{kl} \rangle_{\mathcal{J}}^* \quad (\text{B.29})$$

mit dem volumengemittelten Eshelbytensor

$$\begin{aligned} \bar{\mathbb{S}}_{ijkl} &= \bar{\mathbb{P}}_{ijmn} \mathbb{C}_{mnkl}^E \\ \bar{\mathbb{P}}_{ijkl} &= \frac{1}{|\mathcal{J}|} \int_{\mathcal{J}} \mathbb{P}_{ijkl}(\mathbf{x}) dV(\mathbf{x}) \\ &= v_{\mathcal{J}} \sum_{\substack{n_p=-\infty \\ p=1,2,3}}^{\infty} \mathcal{F}\Gamma_{ijkl}(\xi) g^{\mathcal{J}}(\xi) g^{\mathcal{J}}(-\xi) \end{aligned} \quad (\text{B.30})$$

Auf ebensolche Weise läßt sich der volumengemittelte konjugierte Eshelbytensor

$$\bar{\mathbb{T}} = \mathbb{I} - \mathbb{C}^E : \bar{\mathbb{S}} : \mathbb{D}^E \quad (\text{B.31})$$

motivieren. Bei laminierte oder faserverstärkte Mikrostruktur wird die Einheitszelle in Laminatenebene bzw. Faserrichtung mit unendlicher Ausdehnung angenommen. Die Parameter  $\xi_i$  und  $a_i/L_i$  nehmen in diesen ausgezeichneten Richtungen die Grenzwerte 0 und 1/2 an, wodurch sich das dreidimensionale auf ein ein- oder zweidimensionales Randwertproblem reduziert. Im Hinblick auf Symmetrieeigenschaften der in diesem Abschnitt definierten Integraloperatoren schließt man aus (B.11) auf Selbstadjungiertheit von  $\Gamma$ , aus der wegen (B.27)<sub>2</sub> und (B.30)<sub>2</sub> auch Selbstadjungiertheit von  $\mathbb{P}$  und  $\bar{\mathbb{P}}$  folgt. In der Regel sind die Eshelbytensoren wegen  $\mathbb{S}_{ijkl} \neq \mathbb{S}_{klij}$  und  $\bar{\mathbb{S}}_{ijkl} \neq \bar{\mathbb{S}}_{klij}$  keine selbstadjungierten Operatoren.



## C. Eshelbytensoren im VEVZ und VESZ

Es bezeichne VEVZ den verallgemeinerten ebenen Verzerrungszustand und VESZ den verallgemeinerten ebenen Spannungszustand. Beim VEVZ bzw. VESZ geht man von einer rein zweidimensionalen Betrachtungsweise aus. Im Folgenden wird ein solcher Belastungszustand in der  $x_1$ - $x_2$ -Ebene betrachtet, der durch ein von der  $x_3$ -Ordinate unabhängiges Verschiebungs- bzw. Spannungsfeld der Form

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}(x_1, x_2) \quad \text{bzw.} \quad \boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}(x_1, x_2) \quad (\text{C.1})$$

charakterisiert wird. Die Annahme eines VEVZs oder VESZs trifft insbesondere bei einem unendlich ausgedehnten Körper zu. Im VEVZ wird  $\varepsilon_{3i} = \varepsilon_{i3} = 0$  und im VESZ wird  $\sigma_{3i} = \sigma_{i3} = 0$  für  $i = 1, 2, 3$  angenommen. Ziel dieses Abschnitts ist, den Eshelbytensor  $\mathbb{S}$  und sein Gegenstück  $\mathbb{T}$  im VEVZ und VESZ zu formulieren. Dazu wird ein homogenes isotropes Kontinuum mit Moduli  $\mathbb{C}^E$  und Flexibilitäten  $\mathbb{D}^E = (\mathbb{C}^E)^{-1}$  eingeführt, welches die heterogene reale Ausgangsstruktur eines Komposits entsprechend dem Konzept vom äquivalent homogenen Körper ersetzen soll. In dem heterogenen Komposit sei ein ellipsoider Einschluss eingebettet. Die entsprechenden Darstellungen von  $\mathbb{S}$  und  $\mathbb{T}$  werden in Matrixnotation erzielt, bei der man Tenorkomponenten mit einem Indexpaar einer Matrixkomponente mit nur einem Index gemäß  $(1, 1) \rightarrow 1, (2, 2) \rightarrow 2, (3, 3) \rightarrow 3, (2, 3) \rightarrow 4, (1, 3) \rightarrow 5, (1, 2) \rightarrow 6$  zuordnet.

### C.1. Eshelbytensor im VEVZ und VESZ

Eshelbytensoren werden hier in Matrixnotation als  $6 \times 6$ -Matrizen

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} & 0 & 0 & 0 \\ S_{21} & S_{22} & S_{32} & 0 & 0 & 0 \\ S_{31} & S_{32} & S_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & S_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & S_{66} \end{bmatrix} \quad (\text{C.2})$$

betrachtet mit  $S_{ij} = \mathbb{S}_{ijj}$  für  $i, j = 1, 2, 3$  sowie mit  $S_{44} = 2\mathbb{S}_{2323}$ ,  $S_{55} = 2\mathbb{S}_{1313}$  und  $S_{66} = 2\mathbb{S}_{1212}$ . Es sei  $\boldsymbol{\gamma} = [\varepsilon_{11}, \varepsilon_{22}, \varepsilon_{33}, 2\varepsilon_{23}, 2\varepsilon_{13}, 2\varepsilon_{12}]^T$  der Vektor mit den Verzerrungskomponenten und  $\boldsymbol{\gamma}^* = [\varepsilon_{11}^*, \varepsilon_{22}^*, \varepsilon_{33}^*, 2\varepsilon_{23}^*, 2\varepsilon_{13}^*, 2\varepsilon_{12}^*]^T$  der Vektor mit Transformationsverzerrungen. In Matrixnotation erhält man für  $\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbb{S} : \boldsymbol{\varepsilon}^*$

$$\left. \begin{aligned} \begin{bmatrix} \gamma_1 \\ \gamma_2 \\ \gamma_3 \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} \\ S_{21} & S_{22} & S_{23} \\ S_{31} & S_{32} & S_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \gamma_1^* \\ \gamma_2^* \\ \gamma_3^* \end{bmatrix} \\ \gamma_4 &= S_{44} \gamma_4^* \quad , \quad \gamma_5 = S_{55} \gamma_5^* \quad , \quad \gamma_6 = S_{66} \gamma_6^* \end{aligned} \right\} \quad (\text{C.3})$$

Im VEVZ ist  $\gamma_3 = \gamma_4 = \gamma_5 = 0$  und  $\gamma_4^* = \gamma_5^* = 0$ . Man definiert hier  $\gamma_3^* = \alpha \gamma_1^* + \beta \gamma_2^*$  als Linearkombination von  $\gamma_1^*$  und  $\gamma_2^*$  und reformuliert (C.3) als

$$\begin{bmatrix} \gamma_1 \\ \gamma_2 \\ 0 \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} \\ S_{21} & S_{22} & S_{23} \\ S_{31} & S_{32} & S_{33} \end{bmatrix}}_{\mathbf{J}} \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ \alpha & \beta \end{bmatrix}}_{\mathbf{V}} \begin{bmatrix} \gamma_1^* \\ \gamma_2^* \end{bmatrix} \quad (\text{C.4})$$

Die Konstanten  $\alpha$  und  $\beta$  ergeben sich für beliebige Verzerrungen  $\gamma_1^*$  und  $\gamma_2^*$  aus (C.4)<sub>3</sub> zu

$$\alpha = -S_{31}/S_{33} \quad \text{und} \quad \beta = -S_{32}/S_{33} \quad (\text{C.5})$$

Damit reduziert sich das Gleichungssystem (C.3) auf

$$\begin{bmatrix} \gamma_1 \\ \gamma_2 \\ \gamma_6 \end{bmatrix} = \left[ \begin{array}{c|c} \mathbf{UJV} & \begin{matrix} 0 \\ 0 \end{matrix} \\ \hline 0 & S_{66} \end{array} \right] \begin{bmatrix} \gamma_1^* \\ \gamma_2^* \\ \gamma_6^* \end{bmatrix} \quad (\text{C.6})$$

mit dem in die  $x_1$ - $x_2$ -Ebene projizierten Eshelbytensor des VEVZs

$$\mathbf{S}_{\text{VEVZ}} = \left[ \begin{array}{c|c} \mathbf{UJV} & \begin{matrix} 0 \\ 0 \end{matrix} \\ \hline 0 & S_{66} \end{array} \right] \quad (\text{C.7})$$

Darin ist

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{C.8})$$

Im VESZ sei  $\boldsymbol{\tau} = [\sigma_{11}, \sigma_{22}, 0, 0, 0, \sigma_{12}]^T$  der Vektor mit Spannungen sowie  $C_{ij}^E = C_{ijj}^E$  mit  $i, j = 1, 2, 3$  und  $C_{44}^E = C_{2323}^E$ ,  $C_{55}^E = C_{1313}^E$ ,  $C_{66}^E = C_{1212}^E$  die Matrixdarstellung des vierstufigen Tensors  $\mathbb{C}^E$ . In Matrixnotation erhält man damit für  $\boldsymbol{\sigma} = \mathbb{C}^E : (\mathbb{S} - \mathbb{1}) : \boldsymbol{\varepsilon}$

$$\begin{bmatrix} \tau_1 \\ \tau_2 \\ 0 \end{bmatrix} = \underbrace{\sum_{m=1}^3 \begin{bmatrix} C_{1m}^E S_{m1} - C_{11}^E & C_{1m}^E S_{m2} & C_{1m}^E S_{m3} \\ C_{2m}^E S_{m1} & C_{2m}^E S_{m2} - C_{22}^E & C_{2m}^E S_{m3} \\ C_{3m}^E S_{m1} & C_{3m}^E S_{m2} & C_{3m}^E S_{m3} - C_{33}^E \end{bmatrix}}_{\mathbf{K}} \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}}_{\mathbf{V}} \begin{bmatrix} \gamma_1^* \\ \gamma_2^* \end{bmatrix} \quad (\text{C.9})$$

Die Konstanten  $\alpha$  und  $\beta$  ergeben sich für beliebige Verzerrungen  $\gamma_1^*$  und  $\gamma_2^*$  aus (C.9)<sub>3</sub> zu

$$\left. \begin{aligned} -\alpha \Lambda &= C_{31}^E (S_{11} - 1) + C_{32}^E S_{21} + C_{33}^E S_{31} \\ -\beta \Lambda &= C_{31}^E S_{12} + C_{32}^E (S_{22} - 1) + C_{33}^E S_{32} \end{aligned} \right\} \quad (\text{C.10})$$

wobei

$$\Lambda = C_{31}^E S_{13} + C_{32}^E S_{23} + C_{33}^E (S_{33} - 1) \quad (\text{C.11})$$

Für  $\Lambda = 0$  ist  $\alpha = \beta = 0$  zu setzen. Aus  $\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbb{S} : \boldsymbol{\varepsilon}$  extrahiert man schließlich den in die  $x_1$ - $x_2$ -Ebene projizierten Eshelbytensor des VESZs

$$\mathbf{S}_{\text{VESZ}} = \left[ \begin{array}{c|c} \mathbf{UKV} & \begin{matrix} 0 \\ 0 \end{matrix} \\ \hline 0 & C_{66}^E (S_{66} - 1) \end{array} \right] \quad (\text{C.12})$$

## C.2. Konjugierter Eshelbytensor im VEVZ und VESZ

Konjugierte Eshelbytensoren werden hier in Matrixnotation als  $6 \times 6$ -Matrizen

$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} & T_{13} & 0 & 0 & 0 \\ T_{21} & T_{22} & T_{23} & 0 & 0 & 0 \\ T_{31} & T_{32} & T_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & T_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & T_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & T_{66} \end{bmatrix} \quad (\text{C.13})$$

betrachtet mit  $T_{ij} = \mathbb{T}_{ijj}$  für  $i, j = 1, 2, 3$  sowie mit  $T_{44} = 2\mathbb{T}_{2323}$ ,  $T_{55} = 2\mathbb{T}_{1313}$  und  $T_{66} = 2\mathbb{T}_{1212}$ . Es seien  $\boldsymbol{\tau} = [\sigma_{11}, \sigma_{22}, \sigma_{33}, \sigma_{23}, \sigma_{13}, \sigma_{12}]^T$  und  $\boldsymbol{\tau}^* = [\sigma_{11}^*, \sigma_{22}^*, \sigma_{33}^*, \sigma_{23}^*, \sigma_{13}^*, \sigma_{12}^*]^T$  Vektoren mit Spannungen und Transformationsspannungen. In Matrixnotation erhält man für  $\boldsymbol{\sigma} = \mathbb{T} : \boldsymbol{\sigma}^*$

$$\left. \begin{aligned} \begin{bmatrix} \tau_1 \\ \tau_2 \\ \tau_3 \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} & T_{13} \\ T_{21} & T_{22} & T_{23} \\ T_{31} & T_{32} & T_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tau_1^* \\ \tau_2^* \\ \tau_3^* \end{bmatrix} \\ \tau_4 &= T_{44} \tau_4^* \quad , \quad \tau_5 = T_{55} \tau_5^* \quad , \quad \tau_6 = T_{66} \tau_6^* \end{aligned} \right\} \quad (\text{C.14})$$

$D_{ij}^E = \mathbb{D}_{ijj}^E$  mit  $i, j = 1, 2, 3$  und  $D_{44}^E = 4\mathbb{D}_{2323}^E$ ,  $D_{55}^E = 4\mathbb{D}_{1313}^E$ ,  $D_{66}^E = 4\mathbb{D}_{1212}^E$  sei ferner die Matrixdarstellung des vierstufigen Tensors  $\mathbb{D}^E$ . Um entsprechende Darstellungen von  $\mathbb{S}$  und  $\mathbb{T}$  im VEVZ und VESZ zu gewinnen, nutzt man Analogien zum vorangehenden Abschnitt. Im VEVZ erhält man für  $\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbb{D}^E : (\mathbb{T} - \mathbb{I}) : \boldsymbol{\sigma}^*$  in Matrixnotation

$$\mathbf{T}_{\text{VEVZ}} = \left[ \begin{array}{c|c} \mathbf{ULV} & \begin{matrix} 0 \\ 0 \end{matrix} \\ \hline \begin{matrix} 0 & 0 \end{matrix} & D_{66}^E (T_{66} - 1) \end{array} \right] \quad (\text{C.15})$$

mit den Darstellungen (C.8),

$$L_{ij=1,2,3} = \sum_{m=1}^3 D_{im}^E (T_{mj} - \delta_{mj}) \quad \text{und} \quad \mathbf{V} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \alpha \\ 0 & 1 & \beta \end{bmatrix}^T \quad (\text{C.16})$$

Hier ist  $\delta_{mj}$  das Kronecker-Symbol. Die Konstanten  $\alpha$  und  $\beta$  ergeben sich in vollständiger Analogie zu (C.10) und (C.11) aus

$$\left. \begin{aligned} -\alpha \Lambda &= D_{31}^E (T_{11} - 1) + D_{32}^E T_{21} + D_{33}^E T_{31} \\ -\beta \Lambda &= D_{31}^E T_{12} + D_{32}^E (T_{22} - 1) + D_{33}^E T_{32} \end{aligned} \right\} \quad (\text{C.17})$$

wobei

$$\Lambda = D_{31}^E T_{13} + D_{32}^E T_{23} + D_{33}^E (T_{33} - 1) \quad (\text{C.18})$$

Für  $\Lambda = 0$  ist  $\alpha = \beta = 0$  zu wählen. Im VESZ erhält man ferner

$$\mathbf{T}_{\text{VESZ}} = \left[ \begin{array}{c|c} \mathbf{UMV} & \begin{matrix} 0 \\ 0 \end{matrix} \\ \hline \begin{matrix} 0 & 0 \end{matrix} & T_{66} \end{array} \right] \quad (\text{C.19})$$

mit den Matrixdarstellungen (C.8),

$$M_{ij=1,2,3} = T_{ij} \quad \text{und} \quad \mathbf{V} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & -T_{31}/T_{33} \\ 0 & 1 & -T_{32}/T_{33} \end{bmatrix}^T \quad (\text{C.20})$$

## D. Oberflächendiskretisierungen

### D.1. Oberflächendiskretisierung bei kleinen Verzerrungen

Im Rahmen zweidimensionaler Modellprobleme sei das Oberflächenintegral in (III.1.10) mittels Linienelemente zu diskretisieren. Der Rand  $\partial\mathcal{B} = \bigoplus_{e=1}^{n_{sele}} \partial\mathcal{B}^e$  wird hierzu gemäß Abb. 70 in  $n_{sele}$  Randelementgebiete  $\partial\mathcal{B}^e \subset \partial\mathcal{B}$  unterteilt. Für Verschiebungen und Verzerrungen werden

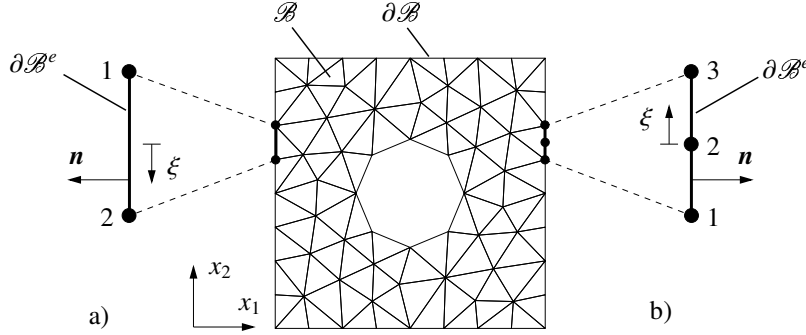


Abbildung 70: Oberflächendiskretisierung mit a) linearen oder b) quadratischen Linienelementen.

auf  $\partial\mathcal{B}^e$  die Diskretisierungsansätze

$$\mathbf{u}^h(\xi) = \sum_{I=1}^{n_s} N_I^s(\xi) \mathbf{d}^I \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{\varepsilon}^h(\xi) = \sum_{I=1}^{n_s} \mathbf{B}_I^s(\xi) \mathbf{d}^I \quad (\text{D.1})$$

gewählt mit in  $\xi \in [-1, +1]$  parametrisierten Oberflächenformfunktionen  $N_I^s$  und deren Ableitungen  $\mathbf{B}_I^s$ . Je nach Wahl linearer oder quadratischer Linienelemente ist (D.1)<sub>1</sub> als lineare Funktion von  $n_s = 2$  diskreten Knotenwerten ( $\mathbf{d}^1, \mathbf{d}^2$ ) der Knoten  $I = 1, 2$  mit Ortskoordinaten  $(\mathbf{x}^1, \mathbf{x}^2)$  oder als quadratische Funktion von  $n_s = 3$  diskreten Werten ( $\mathbf{d}^1, \mathbf{d}^2, \mathbf{d}^3$ ) der Knoten  $I = 1, 2, 3$  mit Ortskoordinaten  $(\mathbf{x}^1, \mathbf{x}^2, \mathbf{x}^3)$  anzusetzen. Basierend auf dem isoparametrischen Konzept  $\mathbf{x} = \sum_{I=1}^{n_s} N_I^s \mathbf{x}^I$  ergibt sich die nach außen weisende Normale  $\mathbf{n}$  zu

$$\mathbf{n}(\xi) = \frac{\mathbf{t}(\xi) \times \mathbf{e}_3}{|\mathbf{t}(\xi)|} \quad (\text{D.2})$$

mit Tangentenvektor  $\mathbf{t} = \sum_{I=1}^{n_s} N_{I,\xi}^s \mathbf{x}^I$  und Einheitsvektor  $\mathbf{e}_3 := [0, 0, 1]^T$ . Abb. 70 entsprechend ist für den lokalen Parameter  $\xi$  eine entgegen dem Uhrzeigersinn gerichtete Laufrichtung zu wählen, um die oben vorgegebene Orientierung der Normalenvektoren zu gewährleisten. Basierend auf der Definition eines infinitesimalen Oberflächenelements  $dA = J d\xi$  mit  $J = |\mathbf{t}|$  als Jakobideterminante gelangt man schließlich zu einer vollständig diskreten Darstellung des Oberflächenintegrals  $\mathbf{S}^e \mathbf{d}^e = \left[ \frac{1}{|\mathcal{B}^e|} \int_{\partial\mathcal{B}^e} \text{sym}[\mathbf{u}^h \otimes \mathbf{n}] dA \right]$  in der Matrixnotation

$$\mathbf{S}^e \mathbf{d}^e = \frac{1}{|\mathcal{B}^e|} \sum_{I=1}^{n_s} \int_{\partial\mathcal{B}^e} \mathbf{B}_I^s(\xi) J d\xi \mathbf{d}^I \quad \text{mit} \quad \mathbf{B}_I^s(\xi) := \begin{bmatrix} n_1(\xi) & 0 \\ 0 & n_2(\xi) \\ n_2(\xi) & n_1(\xi) \end{bmatrix} N_I^s(\xi) \quad (\text{D.3})$$

worin  $\mathbf{d}^e = [\mathbf{d}^1, \dots, \mathbf{d}^{n_s}]^T$  den Vektor mit Knotenparametern darstellt. Die Elementmatrix wird in nachfolgenden Subabschnitten spezifiziert. Aus den  $n_{sele}$  Elementmatrizen wird anschließend die Systemmatrix assembliert:

$$\mathbf{S} = \bigoplus_{e=1}^{n_{sele}} \mathbf{S}^e \quad (\text{D.4})$$

### D.1.1. Oberflächendiskretisierung mit linearen Elementen

Lineare Formfunktionen und ihre Ableitungen bezüglich  $\xi$  sind definiert durch

$$\left. \begin{aligned} N_1^s(\xi) &= \frac{1}{2}(1 - \xi) \Rightarrow \frac{\partial N_1^s(\xi)}{\partial \xi} = -\frac{1}{2} \\ N_2^s(\xi) &= \frac{1}{2}(1 + \xi) \Rightarrow \frac{\partial N_2^s(\xi)}{\partial \xi} = +\frac{1}{2} \end{aligned} \right\} \quad (\text{D.5})$$

Damit wird zuerst der Normalenvektor (D.2) berechnet, um danach aus (D.3) die Elementmatrix

$$\mathbf{S}^e = \frac{1}{2|\mathcal{B}|} \begin{bmatrix} d_1^1 & d_2^1 & d_1^2 & d_2^2 \\ \Delta y & 0 & \Delta y & 0 \\ 0 & -\Delta x & 0 & -\Delta x \\ -\Delta x & \Delta y & -\Delta x & \Delta y \end{bmatrix} \begin{matrix} \bar{\varepsilon}_{11} \\ \bar{\varepsilon}_{22} \\ 2\bar{\varepsilon}_{12} \end{matrix} \quad (\text{D.6})$$

zu erhalten mit den Abkürzungen

$$\Delta x = x_2^1 - x_1^1 \quad \text{und} \quad \Delta y = x_2^2 - x_1^2 \quad (\text{D.7})$$

In (D.6) sind die Spalten der Matrix  $\mathbf{S}^e$  mit den Knotenfreiheitsgraden zu assoziieren und die Zeilen mit den resultierenden Komponenten des effektiven Verzerrungstensors.

### D.1.2. Oberflächendiskretisierung mit quadratischen Elementen

Quadratische Formfunktionen und ihre Ableitungen bezüglich  $\xi$  sind definiert durch

$$\left. \begin{aligned} N_1^s(\xi) &= \frac{1}{2}\xi(\xi - 1) \Rightarrow \frac{\partial N_1^s(\xi)}{\partial \xi} = \xi - \frac{1}{2} \\ N_2^s(\xi) &= 1 - \xi^2 \Rightarrow \frac{\partial N_2^s(\xi)}{\partial \xi} = -2\xi \\ N_3^s(\xi) &= \frac{1}{2}\xi(\xi + 1) \Rightarrow \frac{\partial N_3^s(\xi)}{\partial \xi} = \xi + \frac{1}{2} \end{aligned} \right\} \quad (\text{D.8})$$

Damit wird zuerst der Normalenvektor (D.2) berechnet, um danach aus (D.3) die Elementmatrix

$$\mathbf{S}^e = \frac{1}{3|\mathcal{B}|} \begin{bmatrix} d_1^1 & d_2^1 & d_1^2 & d_2^2 & d_1^3 & d_2^3 \\ (d - c) & 0 & 4d & 0 & (c + d) & 0 \\ 0 & (a - b) & 0 & -4b & 0 & -(a + b) \\ (a - b) & (d - c) & -4b & 4d & -(a + b) & (c + d) \end{bmatrix} \begin{matrix} \bar{\varepsilon}_{11} \\ \bar{\varepsilon}_{22} \\ 2\bar{\varepsilon}_{12} \end{matrix} \quad (\text{D.9})$$

zu bilden mit den Abkürzungen

$$\left. \begin{aligned} a &= x_1^1 + x_1^3 - 2x_1^2, & b &= \frac{1}{2}(x_1^3 - x_1^1) \\ c &= x_2^1 + x_2^3 - 2x_2^2, & d &= \frac{1}{2}(x_2^3 - x_2^1) \end{aligned} \right\} \quad (\text{D.10})$$

In (D.9) sind die Spalten der Matrix  $\mathbf{S}^e$  mit den Knotenfreiheitsgraden zu assoziieren und die Zeilen mit den resultierenden Komponenten des effektiven Verzerrungstensors.

## D.2. Oberflächendiskretisierungen bei finiten Deformationen

Im Rahmen zweidimensionaler Modellprobleme sei das Oberflächenintegral in (III.1.7) mittels Linienelemente zu diskretisieren. Umformung mit  $\mathbf{u} = \boldsymbol{\varphi} - \mathbf{X}$  für  $\mathbf{X} \in \partial\mathcal{B}$  ergibt

$$\bar{\mathbf{F}} = \frac{1}{|\mathcal{B}|} \int_{\partial\mathcal{B}} \boldsymbol{\varphi} \otimes \mathbf{N} dA = \frac{1}{|\mathcal{B}|} \int_{\partial\mathcal{B}} \mathbf{u} \otimes \mathbf{N} dA + \mathbf{1} \quad (\text{D.11})$$

Hier ist das verbleibende Oberflächenintegral  $\frac{1}{|\mathcal{B}|} \int_{\partial\mathcal{B}} \mathbf{u} \otimes \mathbf{N} dA$  zu diskretisieren. Je nach Wahl linearer oder quadratischer Linienelemente ist dort (D.1)<sub>1</sub> linear als Funktion von  $n_s = 2$  diskreten Knotenwerten ( $\mathbf{d}^1, \mathbf{d}^2$ ) der Knoten  $I = 1, 2$  mit Ortskoordinaten ( $\mathbf{X}^1, \mathbf{X}^2$ ) oder quadratisch als Funktion von  $n_s = 3$  diskreten Werten ( $\mathbf{d}^1, \mathbf{d}^2, \mathbf{d}^3$ ) der Knoten  $I = 1, 2, 3$  mit Ortskoordinaten ( $\mathbf{X}^1, \mathbf{X}^2, \mathbf{X}^3$ ) anzusetzen. Basierend auf dem isoparametrischen Konzept  $\mathbf{X} = \sum_{I=1}^{n_s} N_I^s \mathbf{X}^I$  ergibt sich die nach außen weisende Normale  $\mathbf{N}$  auf  $\partial\mathcal{B}^e$  zu

$$\mathbf{N}(\xi) = \frac{\mathbf{T}(\xi) \times \mathbf{E}_3}{|\mathbf{T}(\xi)|} \quad (\text{D.12})$$

mit Tangentenvektor  $\mathbf{T} = \sum_{I=1}^{n_s} N_{I,\xi}^s \mathbf{X}^I$  und Einheitsvektor  $\mathbf{E}_3 := [0, 0, 1]^T$ . Für  $\xi$  wird wie im vorangehenden Abschnitt eine entgegen dem Uhrzeigersinn gerichtete Laufrichtung gewählt. Basierend auf der Definition eines infinitesimalen Oberflächenelements  $dA = J d\xi$  mit  $J = |\mathbf{T}|$  als Jakobideterminante gelangt man schließlich zu einer vollständig diskreten Darstellung des Oberflächenintegrals  $\mathbf{S}^e \mathbf{d}^e = [\frac{1}{|\mathcal{B}|} \int_{\partial\mathcal{B}^e} \text{sym}[\mathbf{u}^h \otimes \mathbf{N}] dA]$  in der Matrixnotation

$$\mathbf{S}^e \mathbf{d}^e = \frac{1}{|\mathcal{B}|} \sum_{I=1}^{n_s} \int_{\partial\mathcal{B}^e} \mathbf{B}_I^s(\xi) J d\xi \mathbf{d}^I \quad \text{mit} \quad \mathbf{B}_I^s(\xi) := \begin{bmatrix} N_1(\xi) & 0 \\ 0 & N_2(\xi) \\ N_2(\xi) & 0 \\ 0 & N_1(\xi) \end{bmatrix} N_I^s(\xi) \quad (\text{D.13})$$

worin  $\mathbf{d}^e = [\mathbf{d}^1, \dots, \mathbf{d}^{n_s}]^T$  den Vektor mit Knotenparametern darstellt. Die Elementmatrix wird in nachfolgenden Subabschnitten spezifiziert. Aus den  $n_{se}$  Elementmatrizen wird anschließend die Systemmatrix assembliert:

$$\mathbf{S} = \bigwedge_{e=1}^{n_{se}} \mathbf{S}^e \quad (\text{D.14})$$

### D.2.1. Oberflächendiskretisierung mit linearen Elementen

Basierend auf den Darstellungen in (D.5) wird zunächst der Normalenvektor (D.12) berechnet, um aus (D.13) schließlich die Elementmatrix

$$\mathbf{S}^e = \frac{1}{2|\mathcal{B}|} \begin{bmatrix} & d_1^1 & d_2^1 & d_1^2 & d_2^2 \\ \Delta Y & 0 & \Delta Y & 0 \\ 0 & -\Delta X & 0 & -\Delta X \\ -\Delta X & 0 & -\Delta X & 0 \\ 0 & \Delta Y & 0 & \Delta Y \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{\mathbf{F}}_{11} \\ \bar{\mathbf{F}}_{22} \\ \bar{\mathbf{F}}_{12} \\ \bar{\mathbf{F}}_{21} \end{bmatrix} \quad (\text{D.15})$$

zu erhalten mit den Abkürzungen

$$\Delta X = X_1^2 - X_1^1 \quad \text{und} \quad \Delta Y = X_2^2 - X_2^1 \quad (\text{D.16})$$

In (D.15) sind die Spalten der Matrix  $\mathbf{S}^e$  mit den Knotenfreiheitsgraden zu assoziieren und die Zeilen mit den resultierenden Komponenten des effektiven Deformationsgradienten.

### D.2.2. Oberflächendiskretisierung mit quadratischen Elementen

Basierend auf den Darstellungen in (D.8) wird zunächst der Normalenvektor (D.12) berechnet, um danach aus (D.13) die Elementmatrix

$$\mathbf{S}^e = \frac{1}{3|\mathcal{B}|} \begin{bmatrix} d_1^1 & d_2^1 & d_1^2 & d_2^2 & d_1^3 & d_2^3 \\ (d-c) & 0 & 4d & 0 & (c+d) & 0 \\ 0 & (a-b) & 0 & -4b & 0 & -(a+b) \\ (a-b) & 0 & -4b & 0 & -(a+b) & 0 \\ 0 & (d-c) & 0 & 4d & 0 & (c+d) \end{bmatrix} \begin{matrix} \bar{F}_{11} \\ \bar{F}_{22} \\ \bar{F}_{12} \\ \bar{F}_{21} \end{matrix} \quad (\text{D.17})$$

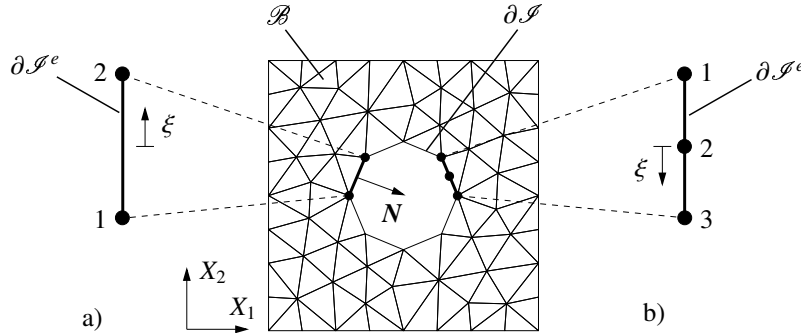
zu bilden mit den Abkürzungen

$$\left. \begin{aligned} a &= X_1^1 + X_1^3 - 2X_1^2, & b &= \frac{1}{2}(X_1^3 - X_1^1) \\ c &= X_2^1 + X_2^3 - 2X_2^2, & d &= \frac{1}{2}(X_2^3 - X_2^1) \end{aligned} \right\} \quad (\text{D.18})$$

In (D.17) sind die Spalten der Matrix  $\mathbf{S}^e$  mit den Knotenfreiheitsgraden zu assoziieren und die Zeilen mit den resultierenden Komponenten des effektiven Deformationsgradienten.

### D.3. Diskretisierung bei starren Einschlüssen

Es wird eine Mikrostruktur  $\mathcal{B}$  mit einem starren Einschluss  $\mathcal{I}$  betrachtet. Bei der Homogenisierung wird der Einschluss entfernt und die Mikro-Makro-Homogenitätsbedingung entweder mit einer Lagrange-Nebenbedingung (III.5.49) bzw. (III.5.53) oder einem Strafterm (III.5.50) bzw. (III.5.54) gekoppelt. In diesem Abschnitt wird die Diskretisierung der Nebenbedingungen



**Abbildung 71:** Nach dem Entfernen des starren Einschlusses  $\mathcal{I}$  aus der Mikrostruktur  $\mathcal{B}$  ist der verbleibende Lochrand  $\partial\mathcal{I}$  mit a) linearen oder b) quadratischen Linienelementen zu diskretisieren.

im Rahmen zweidimensionaler Modellprobleme mittels Finiter Linienelemente entsprechend Abb. 71 vorgenommen. Der Einschlussrand  $\partial\mathcal{I} = \bigoplus_{e=1}^{n_{sele}} \partial\mathcal{I}^e$  wird hierzu in  $n_{sele}$  Randelementgebiete  $\partial\mathcal{I}^e \subset \partial\mathcal{I}$  unterteilt. Für Lagrange-Parameter  $\lambda_s$ , Verschiebungen  $\mathbf{u}$  und den Deformationsgradienten  $\mathbf{F}$  werden auf Elementebene  $\partial\mathcal{B}^e$  die Diskretisierungsansätze

$$\left. \begin{aligned} \lambda_s^h(\xi) &= \sum_{I=1}^{n_s} N_I^s(\xi) \lambda^I \\ \mathbf{u}^h(\xi) &= \sum_{I=1}^{n_s} N_I^s(\xi) \mathbf{d}^I \\ \mathbf{F}^h(\xi) &= \sum_{I=1}^{n_s} \mathbf{B}_I^s(\xi) \mathbf{d}^I + [\mathbf{1}] \end{aligned} \right\} \quad (\text{D.19})$$

gewählt mit in  $\xi \in [-1, +1]$  parametrisierten linearen oder quadratischen Oberflächenformfunktionen (D.5) oder (D.8) und deren Ableitungen  $\mathbf{B}_I^s = N_{I,X}^s$ . [1] sei die Matrixdarstellung des zweistufigen Einheitstensors  $\mathbf{1}$ . Bei Linearisierungen sind gleiche Ansätze für Inkremente  $\{\Delta\lambda_s^h, \Delta\mathbf{u}^h, \Delta\mathbf{F}^h\}$  und Variationen  $\{\delta\lambda_s^h, \delta\mathbf{u}^h, \delta\mathbf{F}^h\}$  zu wählen. Je nach Wahl linearer oder quadratischer Linienelemente sind (D.19)<sub>1,2</sub> als lineare Funktionen von  $n_s = 2$  diskreten Knotenwerten  $(\lambda^1, \lambda^2)$  und  $(\mathbf{d}^1, \mathbf{d}^2)$  an den Knoten  $I = 1, 2$  mit Ortskoordinaten  $(\mathbf{X}^1, \mathbf{X}^2)$  oder als quadratische Funktionen von  $n_s = 3$  diskreten Werten  $(\lambda^1, \lambda^2, \lambda^3)$  und  $(\mathbf{d}^1, \mathbf{d}^2, \mathbf{d}^3)$  an den Knoten  $I = 1, 2, 3$  mit Ortskoordinaten  $(\mathbf{X}^1, \mathbf{X}^2, \mathbf{X}^3)$  anzusetzen. Ziel nachfolgender Ausführungen ist, für die Lagrange-Nebenbedingung und den Strafterm diskrete Darstellungen der Form

$$\bar{\mathbf{c}}_s^h = \frac{1}{|\mathcal{B}|} \lambda^T \mathbf{S} \mathbf{d} \quad \text{bzw.} \quad \bar{\mathbf{p}}_s^h = \frac{\eta}{2|\mathcal{B}|} \mathbf{d}^T \mathbf{S} \mathbf{d} \quad (\text{D.20})$$

zu erhalten, worin  $\lambda = \mathbf{A}_{e=1}^{n_{sele}} \lambda^e$  und  $\mathbf{d} = \mathbf{A}_{e=1}^{n_{sele}} \mathbf{d}^e$  Assemblierungen der Elementvektoren  $\lambda^e = [\lambda^1, \dots, \lambda^{n_s}]^T$  und  $\mathbf{d}^e = [\mathbf{d}^1, \dots, \mathbf{d}^{n_s}]^T$  sind. Mit (D.19) ergibt sich in Matrixnotation

$$[\mathbf{E}\mathbf{X}] = \sum_{I=1}^{n_s} \underbrace{(\hat{N}_{I,nili}^s + \hat{N}_{I,lin}^s)}_{\hat{N}_I^s} [d_1^I, d_2^I]^T \quad (\text{D.21})$$

mit dem geometrisch nichtlinearen Anteil

$$\left. \begin{aligned} (\hat{N}_{I,nili}^s)_{11} &= \frac{1}{2} N_{I,X_1}^s (N_{I,X_1}^s X_1^I + N_{I,X_2}^s X_2^I) d_1^I \\ (\hat{N}_{I,nili}^s)_{12} &= \frac{1}{2} N_{I,X_1}^s (N_{I,X_1}^s X_1^I + N_{I,X_2}^s X_2^I) d_2^I \\ (\hat{N}_{I,nili}^s)_{21} &= \frac{1}{2} N_{I,X_2}^s (N_{I,X_1}^s X_1^I + N_{I,X_2}^s X_2^I) d_1^I \\ (\hat{N}_{I,nili}^s)_{22} &= \frac{1}{2} N_{I,X_2}^s (N_{I,X_1}^s X_1^I + N_{I,X_2}^s X_2^I) d_2^I \end{aligned} \right\} \quad (\text{D.22})$$

und dem geometrisch linearen Anteil

$$\left. \begin{aligned} (\hat{N}_{I,lin}^s)_{11} &= \frac{1}{2} N_{I,X_2}^s X_2^I + N_{I,X_1}^s X_1^I \\ (\hat{N}_{I,lin}^s)_{12} &= \frac{1}{2} N_{I,X_1}^s X_2^I \\ (\hat{N}_{I,lin}^s)_{21} &= \frac{1}{2} N_{I,X_2}^s X_1^I \\ (\hat{N}_{I,lin}^s)_{22} &= \frac{1}{2} N_{I,X_1}^s X_1^I + N_{I,X_2}^s X_2^I \end{aligned} \right\} \quad (\text{D.23})$$

Bei kleinen Verzerrungen ist  $\hat{N}_{I,nili}^s = \mathbf{0}$  zu setzen. Zur Auswertung der Ableitungen  $\mathbf{B}_I^s = N_{I,X}^s = N_{I,\xi}^s (\mathbf{X}_{,\xi})^{-1}$  ist die Jakobimatrix  $\mathbf{X}_{,\xi} = \sum_{I=1}^{n_s} N_{I,\xi}^s \mathbf{X}^I$  zu berechnen. Zusammen mit der Definition eines infinitesimalen Oberflächenelements  $d\mathbf{A} = \mathbf{J} d\xi$  mit  $\mathbf{J} = |\mathbf{X}_{,\xi}|$  als Jakobideterminante gelangt man schließlich zu den vollständig diskreten Darstellungen (D.20), worin

$$\mathbf{S} = \mathbf{A}_{e=1}^{n_{sele}} \mathbf{S}^e \quad (\text{D.24})$$

die Assemblierung aus  $n_{sele}$  Elementmatrizen

$$[\mathbf{S}^e]_{IJ} = \int_{-1}^{+1} \begin{bmatrix} N_I^s(\xi) & 0 \\ 0 & N_I^s(\xi) \end{bmatrix} \hat{N}_J^s(\xi) \mathbf{J} d\xi \quad \text{bzw.} \quad [\mathbf{S}^e]_{IJ} = \int_{-1}^{+1} \hat{N}_I^s(\xi) \hat{N}_J^s(\xi) \mathbf{J} d\xi \quad (\text{D.25})$$

ist. (D.25)<sub>1</sub> ist der Lagrange-Nebenbedingung und (D.25)<sub>2</sub> dem Strafterm zuzuordnen.





## Literaturverzeichnis

- [1] ABOUDI J. [1991]: *Mechanics of composite materials – a unified micromechanical approach*. Elsevier Science Publisher B.V.
- [2] ALCOUFFE R.E., BRANDT A., DENDY J.E. und PAINTER J.W. [1981]: *The multigrid method for the diffusion equation with strongly discontinuous coefficients*. SIAM Journal of Scientific Statistical Computation, 2: 430–454.
- [3] BAKHVALOV N. und PANASENKO G. [1989]: *Homogenization: averaging processes in periodic media*. Mathematical problems in the mechanics of composite materials. Kluwer Academic Publishers.
- [4] BALL J.M. [1977]: *Convexity conditions and existence theorems in nonlinear elasticity*. Archive of Rational Mechanics and Analysis, 63: 337–403.
- [5] BANK R.E. und XU J. [1995]: *A hierarchical basis multigrid method for unstructured grids*. In: HACKBUSCH W. und WITTUM G. (Herausgeber): *Fast solvers for flow problems*, Band 49 der Reihe *Notes on Numerical Fluid Mechanics and Multidisciplinary Design*. Vieweg-Verlag.
- [6] BASTIAN P., HACKBUSCH W. und WITTUM G. [1998]: *Additive and multiplicative multi-grid – a comparison*. Computing, 60: 345–364.
- [7] BAYREUTHER C.G. und MIEHE C. [2003]: *Coupling of homogenization techniques with multigrid solvers for unstructured meshes*. In: PFEIFFER F. und WRIGGERS P. (Herausgeber): *Lecture Notes in Applied and Computational Mechanics*, Band 12, Seiten 67–72. Springer-Verlag.
- [8] BAYREUTHER C.G. und MIEHE C. [2003]: *Homogenisierungsbasierte Mehrgitter-Transferoperatoren für nichtlineare heterogene Materialien*. PAMM Proceedings in Applied Mathematics and Mechanics, 3: 248–249.
- [9] BAYREUTHER C.G. und MIEHE C. [2003]: *Mehrgitterlöser für heterogene Materialien mit einem homogenisierungsbasierten Transfer für unstrukturierte Netze*. PAMM Proceedings in Applied Mathematics and Mechanics, 2(1): 521–522.
- [10] BAYREUTHER C.G. und MIEHE C. [2004]: *Eine algebraische und geometrische Mehrgitterstrategie für heterogene Materialien mit homogenisierungsbasierten Transferoperatoren*. PAMM Proceedings in Applied Mathematics and Mechanics, 4: 300–301.
- [11] BAYREUTHER C.G., MIEHE C. und SCHRÖDER J. [1999]: *A non-dilute strain-based estimate for effective moduli of linear elastic materials with micro-inclusions*. Technischer Bericht 99–I–02, Institut für Mechanik (Bauwesen), Lehrstuhl I, Universität Stuttgart.
- [12] BAYREUTHER C.G., MIEHE C. und SCHRÖDER J. [2000]: *Aspects of homogenization techniques and multigrid solving*. In: SÄNDIG A.M., SCHIEHLEN W. und WENDLAND W.L. (Herausgeber): *Multifield Problems – state of the art*, Seiten 88–95. SFB404, Springer-Verlag.
- [13] BAYREUTHER C.G., MIEHE C. und SCHRÖDER J. [2001]: *Alternative Mehrgitter-Transferoperatoren für heterogene Strukturen*. ZAMM Zeitschrift für angewandte Mathematik und Mechanik, 81(Suppl. 2): S385–S386.
- [14] BENSOUSSAN A., LIONS J.L. und PAPANICOLAOU G. [1978]: *Asymptotic analysis for periodic structures*. In: LIONS J.L., PAPANICOLAOU G. und ROCKAFELLAR R.T. (Herausgeber): *Studies in mathematics and its applications*, Band 5. North-Holland Publishing Company.
- [15] BENVENISTE Y. [1987]: *A new approach to the application of Mori-Tanaka's theory in composite materials*. Mechanics of Materials, 6(2): 147–157.

- [16] BERAN M.J. [1968]: *Statistical continuum theories*. John Wiley & Sons.
- [17] BERAN M.J. und MOLYNEUX J. [1966]: *Use of classical variational principles to determine bounds for the effective bulk modulus in heterogeneous media*. Quarterly of Applied Mathematics, 24: 107–118.
- [18] BERRYMAN J.G., PRIDE S.R. und WANG H.F. [2002]: *A differential scheme for elastic properties of rocks with dry or saturated cracks*. Geophysical Journal International, 151: 597–611.
- [19] BIOT M.A. [1965]: *Mechanics of incremental deformations*. John Wiley & Sons.
- [20] BOUCHER S. [1974]: *On the effective moduli of isotropic two-phase elastic composites*. Journal of Composite Materials, 8: 82–89.
- [21] BRAESS D. [1995]: *Towards algebraic multigrid for elliptic problems of second order*. Computing, 55: 379–393.
- [22] BRAESS D. [1997]: *Finite Elemente*. Springer-Verlag.
- [23] BRAESS D. und HACKBUSCH W. [1983]: *A new convergence proof for the multigrid method including the V-cycle*. SIAM Journal on Numerical Analysis, 20: 967–975.
- [24] BRAMBLE J.H., KWAK D.Y. und PASCIAK J.E. [1994]: *Uniform convergence of multigrid V-cycle iterations for indefinite and nonsymmetric problems*. SIAM Journal on Numerical Analysis, 31: 1746–1763.
- [25] BRAMBLE J.H., PASCIAK J.E., WANG J. und XU J. [1991]: *Convergence estimates for multigrid algorithms without regularity assumptions*. Mathematics of Computation, 57: 23–45.
- [26] BRAMBLE J.H., PASCIAK J.E., WANG J. und XU J. [1991]: *Convergence estimates for product iterative methods with applications to domain decomposition*. Mathematics of Computation, 57: 1–21.
- [27] BRAMBLE J.H. und XU J. [1991]: *Some estimates for a weighted  $L^2$  projection*. Mathematics of Computation, 56: 463–476.
- [28] BRANDT A. [1977]: *Multi-level adaptive solutions to boundary-value problems*. Mathematics of Computation, 31: 333–390.
- [29] BRANDT A. [1982]: *Guide to multigrid development*. In: HACKBUSCH W. und TROTTENBERG U. (Herausgeber): *Multigrid Methods*, Band 960 der Reihe *Lecture notes in mathematics*. Springer-Verlag.
- [30] BRANDT A. [1989]: *Rigorous local mode analysis of multigrid*. In: MANDEL J. und McCORMICK S.F. (Herausgeber): *Preliminary Proceedings of the 4th Copper Mountain Conference on Multigrid Methods*, Band 1, Seiten 55–133. Computational Mathematics Group, University of Colorado.
- [31] BREZINA M., CLEARY A.J., FALGOUT R.D., HENSON V.E., JONES J.E., MANTEUFFEL T.A., McCORMICK S.F. und RUGE J.W. [1999]: *Algebraic multigrid based on element interpolation (AMGe)*. SIAM Journal on Scientific Computing, 22(5): 1570–1592.
- [32] BRIGGS W.L., HENSON V.E. und McCORMICK S.F. [2000]: *A multigrid tutorial*. SIAM Publications, 2. Auflage.
- [33] BUDIANSKY B. [1965]: *On the elastic moduli of some heterogeneous materials*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 13: 223–227.
- [34] CHRISTENSEN R.M. [1979]: *Mechanics of composite materials*. John Wiley & Sons.
- [35] CIARLET P.G. [1988]: *Mathematical elasticity*. Elsevier Science Publisher B.V.
- [36] CLEARY M.P., CHEN I.-W. und LEE S.-M. [1980]: *Self-consistent techniques of heterogeneous media*. Journal of Engineering Mechanics ASCE, 106: 861–887.

- [37] COLEMAN B.D. und GURTIN M.E. [1967]: *Thermodynamics with internal state variables*. The Journal of Chemical Physics, 47: 597–613.
- [38] DACOROGNA B. [1989]: *Direct methods in the calculus of variations*, Band 78 der Reihe *Applied mathematical sciences*. Springer-Verlag.
- [39] DEDERICHS P.H. und ZELLER R. [1973]: *Variational treatment of the elastic constants of disordered materials*. Zeitschrift für Physik, 259: 103–116.
- [40] DENDY J.E. [1982]: *Black box multigrid*. Journal of Computational Physics, 48: 366–386.
- [41] DEWEY J.M. [1947]: *The elastic constants of materials loaded with non-rigid fillers*. Journal of Applied Physics, 18: 587–581.
- [42] DE ZEEUW P.M. [1990]: *Matrix-dependent prolongations and restrictions in a black box multigrid solver*. Journal of computational and applied mathematics, 33: 1–27.
- [43] DOUGLAS C.C. und DOUGLAS J. [1993]: *A unified convergence theory for abstract multigrid or multilevel algorithms, serial and parallel*. SIAM Journal on Numerical Analysis, 30: 136–158.
- [44] DRUGAN W.J. und WILLIS J.R. [1996]: *A micromechanics-based nonlocal constitutive equation and estimates of representative volume element size for elastic composites*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 44: 497–524.
- [45] DVORAK G.J. [1991]: *Plasticity theories for fibrous composite materials*. In: EVERETT R.K. und ARSENAULT R.J. (Herausgeber): *Metal matrix composites: mechanisms and properties*, Seiten 1–77. Academic Press.
- [46] EINSTEIN A. [1922]: *Untersuchungen über die Theorie der Brownschen Bewegung*, Band 199 der Reihe *Ostwalds Klassiker der exakten Wissenschaften*. Akademische Verlagsgesellschaft.
- [47] EKELAND R. und TEMAM I. [1976]: *Convex analysis and variational problems*. In: LIONS J.L., PAPANICOLAOU G. und ROCKAFELLAR R.T. (Herausgeber): *Studies in mathematics and its applications*, Band 1. North-Holland Publishing Company.
- [48] ENGQUIST B. und LUO E. [1993]: *Multigrid methods for differential equations with highly oscillatory coefficients*. In: MELSON N.D., MANTEUFFEL T.A. und McCORMICK S.F. (Herausgeber): *Sixth copper mountain conference on multigrid methods*, Band CP 3224, Seiten 175–189.
- [49] ESHELBY J.D. [1957]: *The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion and related problems*. Proceedings of the Royal Society of London (Serie A), 241: 367–396.
- [50] FISH J. und BELSKY V. [1995]: *Multigrid method for periodic heterogeneous media. Part 1: convergence studies for one-dimensional case*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 126: 1–16.
- [51] FISH J. und BELSKY V. [1995]: *Multigrid method for periodic heterogeneous media. Part 2: multiscale modeling and quality control in multidimensional case*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 126: 17–38.
- [52] FRÖHLICH H. und SACK R. [1946]: *Theory of the rheological properties of dispersions*. Proceedings of the Royal Society of London (Serie A), 185: 415–430.
- [53] FUHRMANN J. [1995]: *A modular algebraic multilevel method*. Technischer Bericht Nr. 203, Weierstraß-Institut für Angewandte Analysis und Stochastik, Universität Berlin.
- [54] GERMAIN P. [1973]: *Cours de mécanique des milieux continus*. Masson et Cie.
- [55] GOSH S., LEE K. und MOORTHY S. [1996]: *Two-scale analysis of heterogeneous elastic-plastic materials with asymptotic homogenization and Voronoi cell finite element model*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 132: 63–116.

- [56] GUEDES J.M. und KIKUCHI N. [1990]: *Preprocessing and postprocessing for materials based on the homogenization method with adaptive finite element methods*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 83: 143–198.
- [57] GUSEV A.A. [1997]: *Representative volume element size for elastic composites: a numerical study*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 45: 1449–1459.
- [58] HAASE G. und LANGER U. [1998]: *Multigrid-Methoden*. Vorlesungsskript, Abteilung Numerische Mathematik und Optimierung, Institut für Analysis und Numerik, Johannes Kepler Universität Linz.
- [59] HACKBUSCH W. [1985]: *Multigrid methods and applications*. Springer-Verlag.
- [60] HACKBUSCH W. und REUSKEN A. [1989]: *On global multigrid convergence for nonlinear problems*. In: HACKBUSCH W. (Herausgeber): *Robust multi-grid methods*, Band 23 der Reihe *Notes on Numerical Fluid Mechanics*, Seiten 105–113. Vieweg-Verlag.
- [61] HACKBUSCH W. und SAUTER S. [1997]: *Composite finite elements for problems containing small geometric details. Part II: implementation and numerical results*. Computing and Visualization in Science, 1: 15–25.
- [62] HACKBUSCH W. und SAUTER S. [1997]: *Composite finite elements for the approximation of PDEs on domains with complicated micro-structures*. Numerische Mathematik, 75: 447–472.
- [63] HALPHEN B. und NGUYEN Q.S. [1975]: *Sur les matériaux standards généralisés*. Journal de Mécanique, 40: 39–63.
- [64] HALPIN J.C. und KORDAS J.L. [1976]: *The Halpin-Tsai equations: a review*. Journal of Polymer Engineering and Science, 16: 344–352.
- [65] HALPIN J.C. und TSAI S.W. [1969]: *Effects of environmental factors on composite materials*. Technischer Bericht AFML–TR–67–423, US Air Force Materials Laboratory.
- [66] HASHIN Z. [1962]: *The elastic moduli of heterogeneous materials*. ASME Journal of Applied Mechanics, 29: 143–150.
- [67] HASHIN Z. [1983]: *Analysis of composite materials – a survey*. ASME Journal of Applied Mechanics, 50: 481–505.
- [68] HASHIN Z. und ROSEN B.W. [1964]: *The elastic moduli of fiber-reinforced materials*. ASME Journal of Applied Mechanics, 31: 223–232.
- [69] HASHIN Z. und SHTRIKMAN S. [1962]: *On some variational principles in anisotropic and nonhomogeneous elasticity*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 10: 335–342.
- [70] HASHIN Z. und SHTRIKMAN S. [1962]: *A variational approach to the theory of the elastic behaviour of polycrystals*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 10: 343–352.
- [71] HASHIN Z. und SHTRIKMAN S. [1963]: *A variational approach to the theory of the elastic behaviour of multiphase materials*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 11: 127–140.
- [72] HEMKER P.W. [1981]: *Introduction to multigrid methods*. Nieuw Archief voor Wiskunde, 3: 71–101.
- [73] HERSHEY A.V. [1954]: *The elasticity of an isotropic aggregate of anisotropic cubic crystals*. ASME Journal of Applied Mechanics, 21: 236–240.
- [74] HILL R. [1963]: *Elastic properties of reinforced solids: some theoretical principles*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 11: 357–372.
- [75] HILL R. [1965]: *A Self-consistent mechanics of composite materials*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 13: 213–222.

- [76] HILL R. [1967]: *The essential structure of constitutive laws for metal composites and polycrystals*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 15: 79–95.
- [77] HILL R. [1972]: *On constitutive macro-variables for heterogeneous solids at finite strain*. Proceedings of the Royal Society of London (Serie A), 326: 131–147.
- [78] HOU T.Y. und WU X.-H. [1999]: *A multiscale finite element method for PDEs with oscillatory coefficients*. In: HACKBUSCH W. und WITTUM G. (Herausgeber): *Robust multi-grid methods*, Band 70 der Reihe *Notes on Numerical Fluid Mechanics*, Seiten 58–69. 13. GAMM-Seminar in Kiel, Deutschland, 24.–26. Januar 1997, Vieweg-Verlag.
- [79] HUET C. [1990]: *Application of variational concepts to size effects in elastic heterogeneous bodies*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 38: 813–841.
- [80] HUGHES T.J.R. [1995]: *Multiscale phenomena: green's functions, the Dirichlet-to-Neumann formulation, subgrid scale models, bubbles and the origins of stabilized methods*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 127: 387–401.
- [81] JEULIN D. und OSTOJA-STARZEWSKI M. [2001]: *Mechanics of random and multiscale microstructures*, Band 430 der Reihe *CISM Courses and Lectures*. Springer-Verlag.
- [82] KHALIL M. [1988]: *Local mode smoothing analysis of various incomplete factorization iterative schemes*. In: HACKBUSCH W. (Herausgeber): *Robust multi-grid methods*, Band 23 der Reihe *Notes on Numerical Fluid Mechanics*, Seiten 155–164. 4. GAMM-Seminar in Kiel, Deutschland, 22.–24. Januar 1988, Vieweg-Verlag.
- [83] KNAPEK R. [1998]: *Matrix-dependent multigrid homogenization for diffusion problems*. SIAM Journal on Scientific Computing, 20(2): 515–533.
- [84] KNEER G. [1965]: *Über die Berechnung der Elastizitätsmoduln vielkristalliner Aggregate mit Textur*. Physica Status Solidi, 9: 825–838.
- [85] KOCH A. [2003]: *Adaptive Finite-Elemente-Berechnungen der nichtlinearen Festkörpermechanik bei kleinen und großen Verzerrungen*. Doktorarbeit, Institut für Mechanik (Bauwesen), Lehrstuhl I, Universität Stuttgart. Berichtnr. I–10.
- [86] KORRINGA J., BROWN R.J.S., THOMPSON D.D. und RUNGE R.J. [1979]: *Self-consistent imbedding and the ellipsoidal model for porous rocks*. Journal of Geophysical Research, 84: 5591–5600.
- [87] KOUZNETSOVA V. [2002]: *Computational homogenization for the multi-scale analysis of multi-phase materials*. Doktorarbeit, Institute of Mechanics of Materials, TU Eindhoven.
- [88] KOUZNETSOVA V., BREKELMANS T.J.R. und BAAIJENS F.T.P. [2001]: *An approach to micro-macro modelling of heterogeneous materials*. Computational Mechanics, 27: 37–48.
- [89] KRAWIETZ A. [1986]: *Materialtheorie: Mathematische Beschreibung des phänomenologischen thermomechanischen Verhaltens*. Springer-Verlag.
- [90] KRÖNER E. [1958]: *Berechnung der elastischen Konstanten des Vielkristalls aus den Konstanten des Einkristalls*. Zeitschrift für Physik, 151: 504–518.
- [91] KRÖNER E. [1967]: *Elastic moduli of perfectly disordered composite materials*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 15: 319–329.
- [92] KRÖNER E. [1977]: *Bounds for effective elastic moduli of disordered materials*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 25: 137–155.
- [93] LAMBRECHT M. [2002]: *Theorie und Numerik von Materialinstabilitäten elastoplastischer Festkörper auf der Grundlage inkrementeller Variationsformulierungen*. Doktorarbeit, Institut für Mechanik (Bauwesen), Lehrstuhl I, Universität Stuttgart. Berichtnr. I–8.
- [94] LUBLINER I. [1990]: *Plasticity theory*. Macmillan Publishing Company.

- [95] MACKENZIE J.K. [1950]: *The elastic constants of a solid containing spherical holes*. Proceedings of the Physical Society (Serie B), 63: 2–11.
- [96] MALVERN L.E. [1969]: *Introduction to the mechanics of a continuous medium*. Prentice-Hall.
- [97] MARSDEN J.E. und HUGHES J.R.H. [1994]: *Mathematical foundations of elasticity*. Dover Publications Inc.
- [98] McCORMICK S.F. [1982]: *An algebraic interpretation of multigrid methods*. SIAM Journal on Numerical Analysis, 19: 548–560.
- [99] McLAUGHLIN R. [1977]: *A study of the differential scheme for composite materials*. International Journal of Engineering Science, 15: 237–244.
- [100] MICHEL J., MOULINEC H. und SUQUET P. [2000]: *A computational method based on augmented lagrangians and fast fourier transforms for composites with high contrast*. Computer Modeling in Engineering and Sciences, 1(2): 79–88.
- [101] MIEHE C. [1994]: *Aspects of the formulation and finite element implementation of large strain isotropic elasticity*. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 37: 1981–2004.
- [102] MIEHE C. [1997]: *A theoretical and computational model for isotropic elastoplastic stress analysis in shells at large strains*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 155: 193–233.
- [103] MIEHE C. [2002]: *Geometrische Methoden der nichtlinearen Kontinuumsmechanik und Kontinuumsthermodynamik*. Vorlesungsmitschrift, Institut für Mechanik (Bauwesen), Lehrstuhl I, Universität Stuttgart.
- [104] MIEHE C. [2002]: *Strain-driven homogenization of inelastic microstructures and composites based on an incremental variational formulation*. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 55: 1285–1322.
- [105] MIEHE C. [2003]: *Computational micro-to-macro transitions of discretized microstructures of heterogeneous materials at finite strains based on the minimization of averaged incremental energy*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 192: 559–591.
- [106] MIEHE C. und DETTMAR J. [2004]: *A framework for micro-macro transitions in periodic particle aggregates of granular materials*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 193: 225–256.
- [107] MIEHE C., GÖKTEPE S. und LULEI F. [2004]: *A micro-macro-approach to rubber-like materials. Part I: the non-affine micro-sphere model of rubber elasticity*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 52: 2617–2660.
- [108] MIEHE C. und KOCH A. [2002]: *Computational micro-to-macro transitions of discretized micro-structures undergoing small-strain deformations*. Archive of Applied Mechanics, 72: 300–317.
- [109] MIEHE C., KOCH A. und BAYREUTHER C.G. [2000]: *Strain-driven homogenization of nonlinear composites for different constraints on the displacement fluctuations*. Technischer Bericht 00–I–02, Institut für Mechanik (Bauwesen), Lehrstuhl I, Universität Stuttgart.
- [110] MIEHE C., SCHOTTE J. und LAMBRECHT M. [2002]: *Homogenization of inelastic solid materials at finite strains based on incremental minimization principles. Application to the texture analysis of polycrystals*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 50: 2123–2167.

- [111] MIEHE C., SCHRÖDER J. und BAYREUTHER C.G. [2002]: *On the homogenization analysis of composite materials based on discretized fluctuations on the micro-structure*. Acta Mechanica, 155: 1–16.
- [112] MIEHE C., SCHRÖDER J. und BECKER M. [2002]: *Computational homogenization analysis in finite elasticity: material instabilities on the micro- and macro-scales of periodic composites and their interaction*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 191: 4971–5005.
- [113] MIEHE C., SCHRÖDER J. und SCHOTTE J. [1999]: *Computational homogenization analysis in finite plasticity. Simulation of texture development in polycrystalline materials*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 171(3–4): 387–418.
- [114] MILTON G.W. [2002]: *The theory of composites*, Band 6 der Reihe *Cambridge monographs on applied and computational mathematics*. Cambridge University Press.
- [115] MOREAU J.J. [1974]: *On unilateral constraints, friction and plasticity*. In: CAPRIZ G. und STAMPACCHIA G. (Herausgeber): *New variational techniques in mathematical physics*, CISM Courses and Lectures. Springer-Verlag.
- [116] MOREAU J.J. [1976]: *Application of convex analysis to the treatment of elastoplastic systems*. In: GERMAIN P. und NAYROLES B. (Herausgeber): *Application of methods of functional analysis to problems in mechanics*. Springer-Verlag.
- [117] MORI T. und TANAKA K. [1973]: *Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions*. Acta Metallica, 21: 571–573.
- [118] MORREY C.B. [1952]: *Quasi-convexity and the lower semicontinuity of multiple integrals*. Pacific Journal of Mathematics, 2: 25–53.
- [119] MOULINEC H. und SUQUET P. [1994]: *A fast numerical method for computing the linear and nonlinear mechanical properties of composites*. Comptes Rendus de l'Academie des Sciences II, 318: 1417–1423.
- [120] MÜLLER S. [1987]: *Homogenization of nonconvex integral functionals and cellular elastic materials*. Archive of Rational Mechanics and Analysis, 99: 189–212.
- [121] MURA T. [1987]: *Micromechanics of defects in solids*, Band 3 der Reihe *Mechanics of elastic and inelastic solids*. Martinus Nijhoff, 2. Auflage.
- [122] NEMAT-NASSER S. [1998]: *Averaging theorems in finite deformation plasticity*. Mechanics of Materials, 31: 493–523.
- [123] NEMAT-NASSER S. und HORI M. [1999]: *Micromechanics: overall properties of heterogeneous materials*, Band 36 der Reihe *North-Holland series in applied mathematics and mechanics*. Elsevier Science Publisher B.V., 2. Auflage.
- [124] NEUSS N. [1995]: *Homogenisierung und Mehrgitter*. Doktorarbeit, Interdisziplinäres Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen, Universität Heidelberg. Berichtnr. N96/7.
- [125] NEUSS N. [1998]: *V-cycle convergence with unsymmetric smoothers and application to an anisotropic model problem*. SIAM Journal on Numerical Analysis, 35: 1201–1212.
- [126] NGUYEN Q.S. [2000]: *Stability and nonlinear solid mechanics*. John Wiley & Sons.
- [127] NORRIS A.N. [1985]: *A differential scheme for the effective moduli of composites*. Mechanics of Materials, 4(1): 1–16.
- [128] OGDEN R.W. [1997]: *Non-linear elastic deformations*. Dover Publications Inc.
- [129] PONTE CASTAÑEDA P. [1992]: *New variational principles in plasticity and their application to composite materials*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 40: 1757–1788.



- [130] PONTE CASTAÑEDA P. [1997]: *Nonlinear composite materials: effective constitutive behavior and microstructure evolution*. In: SUQUET P. (Herausgeber): *Continuum micromechanics*, Band 377 der Reihe *CISM Courses and Lectures*, Seiten 131–195. Springer-Verlag.
- [131] PONTE CASTAÑEDA P. und SUQUET P. [1998]: *Nonlinear Composites*. *Advances in Applied Mechanics*, 34: 171–303.
- [132] REUSKEN A. [1994]: *Multigrid with matrix-dependent transfer operators for convection diffusion problems*. In: HEMKER P. und WESSELING P. (Herausgeber): *Multigrid methods IV*, Band 116 der Reihe *International Series of Numerical Mathematics*, Seiten 269–280. Birkhäuser.
- [133] REUSS A. [1929]: *Berechnung der Fließgrenze von Mischkristallen aufgrund der Plastizitätsbedingung für Einkristalle*. *ZAMM Zeitschrift für angewandte Mathematik und Mechanik*, 9: 49–58.
- [134] ROCKAFELLAR R.T. [1970]: *Convex analysis*. Princeton University Press.
- [135] ROSCOE R. [1952]: *The viscosity of suspensions of rigid spheres*. *British Journal of Applied Physics*, 3: 267–269.
- [136] ROSCOE R. [1973]: *Isotropic composites with elastic or viscoelastic phases: general bounds for the moduli and solutions for spherical geometries*. *Rheologica Acta*, 12: 404–411.
- [137] ROUTH E.J. [1892]: *A treatise on analytical statics, with numerous examples*. Cambridge University Press. Band 2: 121 ff.
- [138] RUGE J.W. und STÜBEN K. [1987]: *Algebraic multigrid*. In: McCORMICK S.F. (Herausgeber): *Multigrid methods*. SIAM.
- [139] RUST W. und STEIN E. [1990]: *Smoothing-adapted transfer in the multi-grid solution of reduced integrated finite element systems*. *Mechanics Research Communications*, 17(4): 271–276.
- [140] SANCHEZ-PALENCIA E. und ZAOUÏ A. [1987]: *Homogenization techniques for composite media*, Band 272 der Reihe *Lecture notes in physics*. Springer-Verlag.
- [141] SCHRÖDER J. [2000]: *Homogenisierungsmethoden der nichtlinearen Kontinuumsmechanik unter Beachtung von Stabilitätsproblemen*. Habilitationsschrift, Institut für Mechanik (Bauwesen), Lehrstuhl I, Universität Stuttgart. Berichtnr. I–7.
- [142] SMITH J.C. [1974]: *Correction and extension of van der Poel's method for calculating the shear modulus of a particulate composite*. *Journal of Research of the National Bureau of Standards (Serie A)*, 78: 355–361.
- [143] SMIT R.J.M., BREKELMANS W.A.M. und MEIJER H.E.H. [1998]: *Prediction of the mechanical behavior of nonlinear heterogeneous systems by multi-level element modeling*. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 155: 181–192.
- [144] STOLZ C. [1986]: *General relationships between micro and macro scales for the nonlinear behavior of heterogeneous media*. In: GITTUS J. und ZARKA J. (Herausgeber): *Modelling small deformations of polycrystals*, Seiten 89–115. Elsevier Applied Science Publications LTD.
- [145] SUQUET P. [1997]: *Continuum micromechanics*. In: SUQUET P. (Herausgeber): *Continuum micromechanics*, Band 377 der Reihe *CISM Courses and Lectures*, Seiten 198–263. Springer-Verlag.
- [146] SWAN C.C. [1994]: *Techniques for stress- and strain-controlled homogenization of inelastic periodic composites*. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 117: 249–267.

- [147] TALBOT D.R.S. und WILLIS J.R. [1985]: *Variational principles for nonlinear inhomogeneous media*. IMA Journal of Applied Mathematics, 35: 39–54.
- [148] TALBOT D.R.S. und WILLIS J.R. [1987]: *Bounds and self-consistent estimates for the overall properties of nonlinear composites*. IMA Journal of Applied Mathematics, 39: 215–240.
- [149] TALBOT D.R.S. und WILLIS J.R. [1992]: *Some explicit bounds for the overall behaviour of nonlinear composites*. International Journal of Solids and Structures, 29: 1981–1987.
- [150] TALBOT D.R.S. und WILLIS J.R. [1995]: *Upper and lower bounds for the overall properties of a nonlinear elastic composite*. In: PARKER D.F. und ENGLAND A.H. (Herausgeber): *Anisotropy, inhomogeneity and nonlinearity in solid mechanics*, Seiten 409–414. Kluwer Academic Publishers.
- [151] TANAKA K. und MORI T. [1972]: *Note on volume integrals of the elastic field around an ellipsoidal inclusion*. Journal of Elasticity, 2: 199–200.
- [152] TERADA K. und KIKUCHI T. [2001]: *A class of general algorithms for multi-scale analyses of heterogeneous media*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 190: 5427–5464.
- [153] TORQUATO S. [1991]: *Random heterogeneous media: microstructures and improved bounds on effective properties*. Applied Mechanics Reviews, 44: 37–76.
- [154] TROTTEMBERG U., OOSTERLEE C. und SCHÜLLER A. [2001]: *Multigrid*. Academic Press. Mit Gastbeiträgen von Brandt A., Oswald P. und Stüben K.
- [155] TRUESDELL C. und NOLL W. [1965]: *The nonlinear field theories of mechanics*. In: FLÜGGE S. (Herausgeber): *Handbuch der Physik*, Band III/3. Springer-Verlag.
- [156] VANĚK P., MANDEL J. und BREZINA M. [1996]: *Algebraic multigrid based on smoothed aggregation for second and fourth order problems*. Computing, 56: 179–196.
- [157] VANĚK P., MANDEL J. und BREZINA M. [1996]: *Algebraic multigrid on unstructured meshes*. Technischer Bericht, Center for Computational Mathematics, University of Colorado at Denver.
- [158] VOIGT W. [1887]: *Über die Beziehung zwischen den beiden Elastizitätskonstanten isotroper Körper*. Annalen der Physik, 38: 573–587.
- [159] WAGNER C. [1998/99]: *Introduction to algebraic multigrid*. Vorlesungsmitschrift, Interdisziplinäres Zentrum für wissenschaftliches Rechnen, Universität Heidelberg.
- [160] WAGNER C. [2000]: *On the algebraic construction of multilevel transfer operators*. Computing, 65: 73–95.
- [161] WAGNER C., KINZELBACH W. und WITTUM G. [1997]: *Schur-complement multigrid - a robust method for groundwater flow and transport problems*. Numerische Mathematik, 75: 523–545.
- [162] WAGNER C. und WITTUM G. [1997]: *Adaptive filtering*. Numerische Mathematik, 78: 305–328.
- [163] WALPOLE L.J. [1966]: *On bounds for the overall elastic moduli of inhomogeneous systems – I*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 14: 151–162.
- [164] WALPOLE L.J. [1966]: *On bounds for the overall elastic moduli of inhomogeneous systems – II*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 14: 289–301.
- [165] WALPOLE L.J. [1981]: *Elastic behavior of composite materials: theoretical foundations*. Advances in Applied Mechanics, 21: 169–242.

- [166] WENG G.J. [1990]: *The theoretical connection between Mori-Tanaka's theory and the Hashin-Shtrikman-Walpole variational bounds*. International Journal of Engineering Science, 28(11): 1111–1120.
- [167] WESSELING P. [1982]: *A robust and efficient multigrid method*. In: HACKBUSCH W. und TROTTENBERG U. (Herausgeber): *Multigrid Methods*, Band 960 der Reihe *Lecture notes in mathematics*. Springer-Verlag.
- [168] WESSELING P. [1991]: *A survey of Fourier smoothing analysis results*. In: HACKBUSCH W. und TROTTENBERG U. (Herausgeber): *Multigrid methods III*, Band 98 der Reihe *International Series of Numerical Mathematics*, Seiten 105–127. Birkhäuser.
- [169] WESSELING P. [1992]: *An introduction to multigrid methods*. John Wiley & Sons.
- [170] WIDJAJAKUSUMA J. [2002]: *Quantitative prediction of effective material parameters of heterogeneous materials*. Doktorarbeit, Institut für Mechanik (Bauwesen), Lehrstuhl II, Universität Stuttgart. Berichtnr. II–8.
- [171] WIENERS C. [1999]: *Theorie und Numerik der Prandtl-Reuß-Plastizität*. Habilitationsschrift, Interdisziplinäres Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen, Universität Heidelberg.
- [172] WILLIS J.R. [1977]: *Bounds and self-consistent estimates for the overall properties of anisotropic composites*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 25: 185–202.
- [173] WILLIS J.R. [1981]: *Variational and related methods for the overall properties of composites*. Advances in Applied Mechanics, 21: 1–78.
- [174] WILLIS J.R. [1991]: *On methods for bounding the overall properties of nonlinear composites*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 39: 73–86.
- [175] WITTUM G. [1992]: *Filternde Zerlegungen: schnelle Löser für große Gleichungssysteme*. Teubner Skripten zur Numerik, Band 1. Habilitationsschrift.
- [176] WRIGGERS P und BOERSMA A. [1998]: *A parallel algebraic multigrid solver for problems in solid mechanics discretized by finite elements*. Computers and Structures, 69: 129–137.
- [177] WU T.T. [1966]: *The effect of inclusion shape on the elastic moduli of a two-phase material*. International Journal of Solids and Structures, 2: 2–8.
- [178] YSERENTANT H. [1993]: *Old and new convergence proofs for multigrid methods*. Acta Numerica, 2: 285–326.
- [179] ZAOUÏ A. [1997]: *Structural morphology and constitutive behaviour of microheterogeneous materials*. In: SUQUET P. (Herausgeber): *Continuum micromechanics*, Band 377 der Reihe *CISM Courses and Lectures*, Seiten 291–347. Springer-Verlag.
- [180] ZIEGLER H. [1963]: *Some extremum principles in irreversible thermodynamics with application to continuum mechanics*. In: SNEDDON I.N. und HILL R. (Herausgeber): *Progress in solid mechanics*, Band 4. North-Holland.
- [181] ZIEGLER H. und WEHRLI C. [1987]: *The derivation of constitutive relations from the free energy and the dissipation function*. In: WU T.Y. und HUTCHINSON J.W. (Herausgeber): *Advances in applied mechanics*, Band 25. Academic Press.

# Lebenslauf

Name: Claus Georg Bayreuther

Geburtsdatum, -ort: 9. April 1971, Neustadt an der Aisch in Mittelfranken

Eltern: Dipl.-Ing. Friedrich Bayreuther und Gerlinde Bayreuther, geb. Dennerlein

Familienstand: Verheiratet mit Susanne Bayreuther, geb. Fischer; drei Kinder

Schulausbildung: 09/1977 – 07/1981 Grundschule Ansbach-Eyb  
09/1981 – 07/1982 Hauptschule Ansbach-Eyb  
09/1982 – 07/1985 Platen-Gymnasium Ansbach  
09/1985 – 07/1988 Gymnasium Höchststadt an der Aisch  
09/1988 – 06/1991 Platen-Gymnasium Ansbach

Wehrdienst: 07/1991 – 06/1992 Neuburg an der Donau

Praktika: 05/1992 – 08/1992 Baufirma Moezer in Ansbach  
09/1993 – 10/1993 Baufirma Moezer in Ansbach

Studium: 10/1992 – 06/1997 Universität Stuttgart  
Studiengang: Bauingenieurwesen  
06/1997 Abschluß als Diplom-Ingenieur

Berufstätigkeit: 08/1997 – 07/1998 Wissenschaftlicher Mitarbeiter am  
Institut für Geotechnik, Universität Stuttgart  
08/1998 – 12/2004 Wissenschaftlicher Mitarbeiter am  
Lehrstuhl I des Instituts für Mechanik  
(Bauwesen), Universität Stuttgart  
seit 01/2005 Berechnungsingenieur bei der  
P+Z Engineering GmbH in München



## **In dieser Schriftenreihe bisher erschienene Berichte**

- I-1(1996) *Theoretische und algorithmische Konzepte zur phänomenologischen Beschreibung anisotropen Materialverhaltens*, J. Schröder, Dissertation, 1996.
- I-2(1996) *Zur Theorie und Numerik finiter elastoplastischer Deformationen von Schalenstrukturen*, B. Seifert, Dissertation, 1996.
- I-3(1996) *Zur Modellierung des künstlichen Infrarot-Dichroismus in Polymerfolien bei großen Verformungen*, J. Buhler, Dissertation, 1996.
- I-4(1998) *Verfahren zur Ermittlung der Erdbebenlasten mit Berücksichtigung des stochastischen Charakters des Bebens*, S. Zhang, Dissertation, 1998.
- I-5(1998) *Zur Beschreibung finiter Deformationen von Polymeren: Experimente, Modellbildung, Parameteridentifikation und Finite-Elemente-Formulierung*, J. Keck, Dissertation, 1998.
- I-6(1999) *Berechnungsverfahren instationär erregter Systeme in Frequenzbereich*, A. Jaworek, Dissertation, 1999.
- I-7(2000) *Homogenisierungsmethoden der nichtlinearen Kontinuumsmechanik unter Beachtung von Stabilitätsproblemen*, J. Schröder, Habilitation, 2000.
- I-8(2002) *Theorie und Numerik von Materialinstabilitäten elastoplastischer Festkörper auf der Grundlage inkrementeller Variationsformulierungen*, M. Lambrecht, Dissertation, 2002.
- I-9(2002) *Mikromechanisch motivierte Modelle zur Beschreibung finiter Deformationen gummiartiger Polymere: physikalische Modellbildung und numerische Simulation*, F. Lulei, Dissertation, 2002.
- I-10(2002) *Adaptive Finite-Elemente-Berechnungen der nichtlinearen Festkörpermechanik bei kleinen und großen Verzerrungen*, A. Koch, Dissertation, 2002.
- I-11(2003) *Theorie und Numerik der Parameteridentifikation von Materialmodellen der finiten Elastizität und Inelastizität auf der Grundlage optischer Feldmeßmethoden*, G. Scheday, Dissertation, 2003.
- I-12(2004) *Approaches to the Description of Anisotropic Material Behaviour at Finite Elastic and Plastic Deformations, Theory and Numerics*, N. Apel, Dissertation, 2004.
- I-13(2004) *Temperaturabhängige Beschreibung visko-plastischer Deformationen kurzglasfaserverstärkter Thermoplaste: Modellbildung, Numerik und Experimente*, S. Rieger, Dissertation, 2004.
- I-14(2005) *Zur Parameteridentifikation komplexer Materialmodelle auf der Basis realer und virtueller Testdaten*, A. Rieger, Dissertation, 2005.
- I-15(2005) *Viskoelastisches Verhalten von Elastomeren bei finiten Verzerrungen: Experimente, Modellierung und Simulationen*, H. Zecha, Dissertation, 2005.
- I-16(2005) *Mehrskalenmodelle in der Festkörpermechanik und Kopplung von Mehrgittermethoden mit Homogenisierungsverfahren*, C.G. Bayreuther, Dissertation, 2005.