UNIVERSITÄT BREMEN

# Zentrum für Technomathematik

Fachbereich 3 – Mathematik und Informatik

## Phasenumwandlungen und Umwandlungsplastizität bei Stählen im Konzept der Thermoelasto-Plastizität

**Michael Wolff** **Michael Böhm**

Report 02-05

**Berichte aus der Technomathematik**

**Report 02-05** **Juli 2002**

**Phasenumwandlungen und Umwandlungsplastizität bei Stählen im Konzept der Thermoelasto-Plastizität**

Michael Wolff, Michael Böhm

**Zusammenfassung:** *In der vorliegenden Arbeit werden Phasenumwandlungen und Umwandlungsplastizität (TRIP) beim Stahl im Rahmen der Kontinuumsmechanik modelliert. Das Ergebnis ist ein makroskopisches Modell, das die Kopplung von mechanische Größen (Verzerrungen, Spannungen), der Temperatur und den Phasenanteilen beschreibt. Ausgangspunkt ist ein geeignet verallgemeinertes Konzept einer spannungsfreien Zwischenkonfiguration, die in der hier betrachteten Situation durch die Umwandlungsplastizität hervorgerufen wird. Aus der Clausius-Duhem-Ungleichung werden Folgerungen für die postulierten Materialgesetze hergeleitet.*
*Das hier vorgeschlagene Modell gestattet die Einbindung unterschiedlicher Modelle für die Phasenumwandlungen wie auch für die Umwandlungsplastizität. Effekte der klassischen Plastizität bleiben in dieser Arbeit unberücksichtigt, lassen sich jedoch in das vorgestellte Konzept ohne prinzipielle Schwierigkeiten einbinden (Vgl. hierzu die Arbeit der Autoren [Wol02a]).*

*Diese Arbeit entstand im Rahmen des von der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) eingerichteten Sonderforschungsbereiches SFB 570 „Distortion Engineering“.*

*Die Autoren bedanken sich herzlich bei den Herren Prof. P. Haupt und Dr. D. Helm aus Kassel für die fruchtbaren Diskussionen zum Thema.*

**Summary:** *In this work we formulate a model the describing coupled phase change and transformation induced plasticity (TRIP) in steel. The essential feature of the model is an appropriately generalised concept of stress-free intermediate configuration generated by TRIP. By means of the Clausius-Duhem inequality we restrict the set of admissible material laws.*
*The model permits the use of various of the known models for phase transitions as well as of TRIP. We do not consider classical plasticity, although the present model can be adapted to allow for plastic deformations (cf. [Wol02a]).*

*This work has been supported by the Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) via SFB 570 „Distortion Engineering“.*

*The authors thank Prof. P. Haupt and Dr. D. Helm for several fruitful discussions on this subject.*

**Inhalt:**


## 1. Einführung

Die vorliegende Arbeit versteht sich sowohl als Beitrag zur Materialtheorie im Kontext der Rationalen Kontinuumsmechanik als auch als Versuch, wesentliche Seiten des Materialverhaltens von Stahl, wie Phasenumwandlungen und Umwandlungsplastizität in ein allgemeineres Modell der Thermoelasto-Plastizität einzufügen. Dabei orientieren wir uns an dem wesentlich von Coleman und Noll (Vgl. z.B. [Col63]) entwickelte Konzept der Rationalen Mechanik sowie an dem einer spannungsfreien Zwischenkonfiguration bei der Modellierung von plastischen, allgemeiner nichtelastischen Verformungen (Vgl. z.B. [Hau00]).
Stahl liegt i.a. als eine Mischung seiner Phasen (z.B. Austenit, Martensit, Perlit) vor, die sich durch ihre Mikrostruktur unterscheiden und unterschiedliche Materialparameter besitzen. Diese Phasen werden im hier verwendeten Modell als kontinuierlich verteilt angenommen, so daß der Stahl als eine koexistierende Mischung seiner Phasen (= Komponenten) erscheint, wobei Diffusionsvorgänge vernachlässigt werden. Bei thermomechanischen Prozessen sind daher die mechanischen Größen (Verzerrung, Spannung) nicht nur mit der Temperatur sondern auch mit den Phasenanteilen wechselseitig miteinander gekoppelt. Hinzu kommt als wesentliche Besonderheit im Materialverhalten die Umwandlungsplastizität. Während der Phasenumwandlungen

führen Spannungen, die wesentlich unter den Fließspannungen der beteiligten Phasen liegen, zu bleibenden Verformungen.
In dieser Arbeit werden die Effekte der klassischen Plastizität aus Platzgründen nicht berücksichtigt (Vgl. hierzu [Wol02a]). Wir nehmen an, daß während der ablaufenden Prozesse keine größere mechanische Energie eingetragen wird, wie etwa beim Walzen oder Schmieden. Für moderate Abschreckprozesse z.B. erscheint die Vernachlässigung der klassischen Plastizität gerechtfertigt.

Wir verweisen auf die sehr umfangreiche Literatur und die dort zitierten Quellen zum Material- und Umwandlungsverhalten von Stahl: [Den83, 97], [Leb85], [Ino85], [Wan85], [Sjö85], [Ino89], [Leb89a], [Leb89b], [Bes93], [Fis96, 99], [Hun99], [Obe99], [Ron00], [Ahr00, 02], [Pie00a, b], [Vog01].
Eine Zusammenstellung von verschiedenen Umwandlungsmodellen sowie Vergleichsrechnungen finden sich in den Arbeiten [Hun02], [Wol02c]. Diese bekannten Modelle der Phasenumwandlungen sind Spezialisierungen unseres allgemeineren kontinuumsmechanischen Ansatzes (Vgl. Kapitel 7 der vorliegenden Arbeit).
Für spezielle Anwendungen und Simulationen zu gekoppelten Problemen verweisen wir auf die Arbeiten [Höm96], [Fuh99], [Obe99], [Wol00], [Ron00], [Pie00a, b] sowie die dort zitierten Quellen.
Verschiedentlich ist es notwendig, weitere Kopplungen, z.B. mit elektromagnetischen Feldern, zu betrachten, wie etwa beim Induktionshärten oder Elektroschweißen. Auf diese Effekte wollen wir in der vorliegenden Arbeit nicht eingehen (vgl. [Höm97], [Fuh99], [Höm99a], [Höm99b]).
Im Anhang werden einige mathematische Begriffe und technische Definitionen erläutert, um den laufenden Text kompakter zu halten.

## 2. Thermoelasto-Plastizität mit Phasenumwandlungen - Vorbereitungen

Im Rahmen der rationalen Thermomechanik (z.B. [Col64], [Tru66], [Nol73], [Mül73], [Hau77, 98, 00], [Slu92], [Sil97]) wollen wir ein recht allgemeines Modell für das thermomechanische Verhalten von (Fest-) Körpern unter Berücksichtigung von Phasenumwandlungen (im Sinne von koexistierenden Mischungen ohne Diffusion) entwickeln. Sukzessive werden Spezialisierungen vorgenommen, wobei wir uns auf die Einbindung der schon erwähnten Umwandlungsplastizität konzentrieren.
Zuerst stellen wir bekannte, in der Folge von uns für die Entwicklung der Materialtheorie benötigte Begriffe bereit. Rein mathematische Definitionen und Erläuterungen finden sich im Anhang.
Für unsere Zwecke genügt die folgende Definition eines Körpers, in der dieser mit seiner Referenzkonfiguration identifiziert wird. Für allgemeinere Darstellungen sei auf z.B. auf [Sil97], [Hau00] verwiesen. Eine axiomatische Darstellung der Kontinuumsmechanik auf der Basis differenzierbarer Mannigfaltigkeiten findet sich in [Ber89], bezüglich eines alternativen Plastizitätsmodells, das ohne Zwischenkonfiguration auskommt sei auf [Ber92, 98, 99, 02] verwiesen. Eine darauf aufbauende entsprechende Erweiterung, die Phasenumwandlungen einschließt, wird in [Dac02] vorgestellt.
Für ein $T > 0$ sei $J := [0, T]$ ein (Zeit-) Intervall, welches im weiteren fixiert sei.

**Definition 2.1.** (Körper) Die Abschließung $\bar{\Omega}$ eines beschränkten Gebietes $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ ($n = 2$ oder $n = 3$) mit Lipschitz-stetigem Rand $\partial\Omega$ nennen wir Körper (in seiner Referenzkonfiguration).

**Definition 2.2.** (Bewegung, Deformationsgradient, Temperatur, Phasenvektor, thermokinetischer Prozeß mit Phasenumwandlungen) Sei $\bar{\Omega}$ ein Körper.

**(i)** Eine Abbildung $\chi : \bar{\Omega} \times J \to \mathbb{R}^n$ heißt Bewegung (oder auch Deformation) des Körpers $\bar{\Omega}$, falls

a) $\forall\, t \in J$ ist $\chi(\bullet, t) : \bar{\Omega} \to \chi(\bar{\Omega}, t)$ bijektiv;

b) $\chi \in C^1_{pw}(J; [C^1(\bar{\Omega})]^n)$,

c) $\forall\, t \in J$ besitzt die Jacobi-Matrix $\nabla\chi(\bullet, t) : \Omega \to \mathbb{R}^{n^2}$ eine positive Determinante. $\nabla\chi$ wird Deformationsgradient genannt und oft mit $F$ bezeichnet.

**(ii)** Eine Abbildung $\theta : \bar{\Omega} \times J \to \mathbb{R}$ heißt (absolute) Temperatur des Körpers $\bar{\Omega}$, falls

a) $\theta \in C^1_{pw}(J; C^1(\bar{\Omega}))$.

b) $\forall\, t \in J,\ \forall\, \xi \in \bar{\Omega} \quad : \quad \theta(\xi, t) > 0.$

**(iii)** Eine Abbildung $p : \bar{\Omega} \times J \to \mathbb{R}^m$ ($m \geq 2$) heißt Phasenvektor des Körpers $\bar{\Omega}$, falls

a) $p \in C^1_{pw}(J; [C^1(\bar{\Omega})]^m)$.

b) Für alle $(\xi, t) \in \bar{\Omega} \times J$ gelten die folgende Bilanz sowie die Nichtnegativitätsbedingungen:

(2.1) $$\sum_{i=1}^{m} p_i = 1,$$

(2.2) $$p_i \geq 0 \qquad \text{für } i = 1, ..., m.$$

**(iv)** Ein Tripel $(\chi, \theta, p)$ mit $\chi$ Bewegung, $\theta$ Temperatur und $p$ Phasenvektor des Körpers $\bar{\Omega}$ heißt thermokinetischer Prozeß mit Phasenumwandlungen auf $\bar{\Omega}\times J$. Sinngemäß verstehen wir einen thermokinetischen Prozeß auf $\bar{\Omega}\times J_1$ mit $J_1 \subset J$.

**Bemerkung 2.3.** Ein thermokinetischer Prozeß mit Phasenumwandlungen $(\chi, \theta, p)$ bestimmt eindeutig einen Prozeß $(F, \theta, p)$ mit $F = \nabla\chi$. Wird in der Folge von einem thermokinetischen Prozeß $(F, \theta, p)$ (mit $F$ aufgefaßt als Deformationsgradient) gesprochen, so wird dabei stets vorausgesetzt, daß eine Bewegung $\chi$ mit den Eigenschaften in Definition 2.2.(i) existiert, die eindeutig $F = \nabla\chi$ definiert.
Die Glattheitsvoraussetzungen an $\chi$, $\theta$ und $p$ wurden im Hinblick auf die aus der Clausius-Duhem-Ungleichung (2.15) zu ziehenden Schlußfolgerungen (Satz 4.4.) gewählt. Für die Bilanzgleichungen sind hingegen stärkere Glattheitsvoraussetzungen erforderlich (vgl. (2.9) – (2.15)).
Während bei allgemeinen Mischungen oft mit den Massenkonzentrationen gearbeitet wird, werden bei den Phasen des Stahls meist die Volumenkonzentrationen bevorzugt. Daher sprechen wir von Phasenanteilen. Ohne Probleme wäre natürlich auch eine Darlegung des Folgenden mit Massenkonzentrationen möglich.
Wir verwenden zur Beschreibung der Bewegung die Lagrange-Darstellung

(2.3) $$x = \chi(\xi, t) \qquad \xi \in \bar{\Omega}, \qquad t \in J.$$

In (2.3) ist $x$ die Eulersche, $\xi$ die Lagrangesche Koordinate. Wir listen einige allgemein bekannte, von der Bewegung abgeleitete Größen auf:

| | | | |
|---|---|---|---|
| (2.4) | $u(\xi, t) := \chi(\xi, t) - \xi$ | für $(\xi, t) \in \bar{\Omega} \times J$ | Verschiebung(svektor), |
| (2.5) | $F(\xi, t) := \nabla_\xi \chi(\xi, t)$ | | Deformationsgradient, |
| (2.6) | $C := F^T F, \qquad (B = F F^T)$ | | rechter (linker) Cauchy-Green-Tensor, |
| (2.7) | $E := \frac{1}{2}(\nabla u + \nabla u^T + \nabla u^T \nabla u) = \frac{1}{2}(F^T F - I)$ | | Greenscher Verzerrungstensor, |
| (2.8) | $E_L := \frac{1}{2}(\nabla u + \nabla u^T)$ | | linearisierter Greenscher Verzerrungstensor. |

Aus den Bilanzen für Impuls, Drehimpuls, Energie und Entropie werden die Bewegungs-, Wärmeleitungsgleichung und Entropieungleichung (Clausius-Duhem-Ungleichung) in der üblichen Weise gewonnen (vgl. z.B. [Hau00], [Wil98], [Sil97], [Mar83], [Nol73], [Tru66] und die dort zitierten Quellen). Außerdem fügen wir die Bilanzgleichungen für (spezielle) Mischungen hinzu. Wir unterstellen die nötige Glattheit. Ausgedrückt in Lagrange-Koordinaten lauten diese Beziehungen:

(2.9) $$\rho_0(\xi) \frac{d^2u}{dt^2}(\xi, t) - \operatorname{div}((I + \nabla u) S(\xi, t)) = f(\xi, t) \qquad \text{in } \Omega \times ]0, T[,$$

(2.10) $$S = S^T \qquad \text{in } \Omega \times ]0, T[,$$

(2.11) $$\rho_0(\xi) \frac{d}{dt} e(\xi, t) + \operatorname{div} q(\xi, t) = (I + \nabla u) S(\xi, t) \bullet\bullet \nabla \frac{du}{dt} + r(\xi, t) \qquad \text{in } \Omega \times ]0, T[,$$

(2.12) $$\frac{d}{dt} p_i(\xi, t) = \Phi_i(\xi, t) + \varphi_i(\xi, t) \qquad \text{in } \Omega \times ]0, T[,$$

(2.13) $$\sum_{i=1}^{m} \Phi_i = 0 \qquad \text{in } \Omega \times ]0, T[,$$

(2.14) $$\sum_{i=1}^{m} \varphi_i = 0 \qquad \text{in } \Omega \times ]0, T[,$$

(2.15) $$-\rho_0(\xi) \frac{d}{dt} \psi(\xi, t) - \rho_0(\xi)\, \eta(\xi, t) \frac{d}{dt} \theta(\xi, t) + (I + \nabla u) S(\xi, t) \bullet\bullet \nabla \frac{du}{dt} - \frac{1}{\theta} q \bullet \nabla\theta \geq 0 \qquad \text{in } \Omega \times ]0, T[.$$

Hierbei sind:
$\rho_0$ - Dichte im Referenzzustand, also für $t = 0$ (und somit für $\theta = \theta_0$), $S$ - zweiter Piola-Kirchhoff-Spannungs-Tensor, $f$ – Volumendichte der äußeren Kräfte, $r$ – Volumendichte der äußeren Wärmequellen (beide bezogen auf Referenzzustand $\Omega$), $e$ - Massendichte der inneren Energie, $q$ - Wärmestromdichtevektor (alles bezogen auf Lagrangesche Koordinaten), $I$ – Einheitstensor, $\Phi_i$ – (Volumen-) Produktionsdichte der i-ten Phase, $\varphi_i$ – äußere Volumenquelldichte der i-ten Phase, $\eta$ - Massendichte der Entropie, $\psi$ - spezifische freie innere Energie (:= Massendichte der Potentiellen Energie), dabei gilt – wie allgemein üblich - per definitionem der Zusammenhang

$\psi := e - \theta\,\eta.$

**Bemerkungen 2.4.** **(i)** Da wir hier nur Mischungen *ohne* Diffusion betrachten, wie bei der Modellierung von Phasenübergängen in Stahl allgemein üblich, erscheint die Entropieungleichung (auch Clausius-Duhem-Ungleichung genannt) in der Form (2.15) gerechtfertigt (vgl. z.B. [Hau00], [Mül73]). Im selben Ort und zur selben Zeit bekommen alle Phasen die gleiche Bewegung, Spannung, Temperatur, Energie-, Entropiedichten usw. zugeschrieben. In den Bilanzgleichungen für die Phasen (2.12) treten keine Ortsgradienten derselben auf, was mit der Nichtannahme einer Diffusion der Phasen konsistent ist.
**(ii)** In der Regel sind bei Mischungen die äußeren Quelldichten $\varphi_i$ gleich null. Aus theoretischen Gründen lassen wir von null verschiedene Quellen zu. Durch Wahl geeigneter Quellen in den Bilanzgleichungen (2.9), (2.11), (2.12) wird jeder thermokinetische Prozeß mit Phasenumwandlungen nach Definition 2.3. auch zu einem real möglichen. Diese Willkür wird bei der Auswertung der Clausius-Duhem-Ungleichung benötigt (vgl. z.B. [Hau77], [Sil97]).

In der Plastizität wird mit einem „endlichen Gedächtnis“ gearbeitet. Daher benötigen wir die Geschichte hier in der folgenden Form.
Für eine Funktion $v : J \to L$ $(L := \mathbb{R}, \mathbb{R}^n, \mathbb{R}^{n^2})$ definieren wir die Geschichte (total history [Coleman])
$v^t : [0, t] \to L$ der Funktion $v$ für $t \in [0, T]$ durch

(2.16) $\qquad v^t(s) := v(t - s) \qquad$ für $0 \le s \le t$

und die Vorgeschichte (difference history) $v_d^t : [0, t] \to L$ durch

(2.17) $\qquad v_d^t(s) := v^t(s) - v(t) \qquad$ für $0 \le s \le t.$

## 3. Thermoelasto-Plastizität mit Phasenumwandlungen – allgemeines Konzept

Wir gehen vom Plastizitätsmodell aus, das auf einer lokal spannungsfreien Zwischenkonfiguration (s. z.B. [Hau00]) basiert, und versuchen, die Phasenumwandlungen in dieses Modell zu integrieren. An dieser Stelle unterscheiden wir noch nicht zwischen (klassischer) Plastizität und Umwandlungsplastizität, beides kann sich hinter „inelastisch“ verbergen. In den Formeln (5.5) und (6.4) werden Spezialisierungen vorgenommen.
Für die folgenden Größen bringen wir zuerst die mathematische Formulierung und danach die thermomechanische Interpretation.

**Definition 3.1.** (Multiplikative Zerlegung des Deformationsgradienten, Zwischenkonfiguration) Seien $\chi$ eine Bewegung und $F = \nabla\chi$ zugehöriger Deformationsgradient eines Körpers $\bar{\Omega}$ gemäß Definition 2.2. sowie

(3.1) $\qquad F = \hat{F}_{te}\, F_{in}.$

eine multiplikative Zerlegung von $F$ in zwei stückweise stetig differenzierbare (bezüglich $t$) Faktoren. Dann definieren wir

(3.2) $\qquad C_{in} := F_{in}^T F_{in}, \qquad B_{in} := F_{in} F_{in}^T,$

(3.3) $\qquad E_{in} := \frac{1}{2}(F_{in}^T F_{in} - I),$

(3.4) $\qquad \hat{E} := F_{in}^{-T} E\, F_{in}^{-1} \qquad$ (E - Greenscher Verzerrungstensor gemäß (2.7)),

(3.5) $\qquad \hat{E}_{te} := \frac{1}{2}(\hat{F}_{te}^T \hat{F}_{te} - I),$

(3.6) $\qquad E_{te} := F_{in}^T \hat{E}_{te} F_{in}.$

Die Abbildung $(\xi, t) \to F_{in}(\xi, t)$ heißt Zwischenkonfiguration.

Die mechanische Interpretation und die verbale Bezeichnung der soeben eingeführten Größen erfolgen in Bemerkung 3.3.

**Folgerungen 3.2.** **(i)** Offenbar gilt

(3.7) $\qquad E = E_{te} + E_{in}.$

**(ii)** Eine Zerlegung (3.1) ist stets möglich, z.B. durch $\hat{F}_{te} := F$ und $F_{in} := I$. Ebenso ist klar, daß eine Zerlegung (3.1) nicht eindeutig sein kann. Denn neben (3.1) kann auch geschrieben werden

(3.8) $\qquad F = (\hat{F}_{te}\, Q^T)\,(Q F_{in}),$

wobei $Q : J \to SO(n)$ stückweise stetig differenzierbar ist.

Wie leicht ersichtlich, sind die Größen $C_{in}$, $E_{in}$, $E_{te}$ von einer solchen hinzugefügten Orthogonalmatrix unabhängig. Wird $F_{in}$ gemäß

(3.9) $F_{in} = R_{in}U_{in}$

in einen rotatorischen und einen Dehnungsanteil zerlegt – analog wie für $F$ selbst üblich, so bedeutet das Einfügen einer Orthogonalmatrix nach (3.8), daß $R_{in}$ durch $QR_{in}$ zu ersetzen ist. Es tritt also eine mögliche zusätzliche Rotation der Zwischenkonfiguration auf.
Wir kommen zur thermomechanischen Interpretation der soeben eingeführten, zunächst formalen Größen.

**Bemerkungen 3.3.** **(i)** Hinter der Zerlegung (3.1) steht das Konzept, die Bewegung eines Körpers aufzuteilen in eine plastische oder allgemeiner inelastische und in eine thermoelastische (vgl. [Tin73], [Slu92], [Mie93], [Hau00] und die dort zitierten Quellen). Daher wählen wir die Bezeichnungen der Indices „te" für thermoelastisch und „in" für inelastisch. Im allgemeinen wird die Zwischenkonfiguration als lokal spannungsfrei angenommen. Das führt dann dazu, daß i.a. $F_{in}$ nicht Gradient einer Bewegung ist, ebenso $\hat{F}_{te}$ (s. die folgenden Beispiele). Trotzdem wird oft vom elastischen (oder thermoelastischen) und plastischen (oder inelastischen) Deformationsgradienten gesprochen. Ebenso werden die Größen in (3.2), (3.3) und (3.6) als rechter bzw. linker inelastischer Cauchy-Green-Tensor, inelastischer bzw. thermoelastischer Greenscher Verzerrungstensor bezeichnet. Auf der Zwischenkonfiguration operierende Größen erhalten zur Kennzeichnung ein Dach.
**(ii)** Der zweite Piola-Kirchhoff-Spannungstensor $S$ läßt sich auf die Zwischenkonfiguration gemäß

(3.10) $\hat{S} = F_{in}\, S\, F_{in}^T$

umrechnen (s. z.B. [Hau00]). Diese Übergangsformel ist konsistent mit der in Folgerung 3.2. (ii) beschriebenen Möglichkeit, die Zwischenkonfiguration einer starren Bewegung zu unterwerfen. Wir würden dann

(3.11) $\hat{S}_{(neu)} = QF_{in}\, S\, F_{in}^T\, Q^T = Q\, \hat{S}_{(alt)}\, Q^T$

erhalten.
**(iii)** In der Modellierung des Materialverhaltens auf der Grundlage einer Zwischenkonfiguration wird angenommem, daß $\hat{S}$ eine Funktion von $\hat{F}_{te}$ ist, sowie der Temperatur und – wie es weiter unten geschehen wird – der Phasenanteile. Die Zwischenkonfiguration wird – bis auf starre Bewegungen – als Ergebnis der bisherigen Geschichte des thermokinetischen Prozesses angenommen. Dieser Zusammenhang ist also materialspezifisch.

Zur weiteren Diskussion des Konzeptes der Zwischenkonfiguration sei auf die Literatur (z.B. [Hau00], [Hau98], [Mie93], [Slu92]) sowie auf [Ber02] mit einer kritischen Sicht) verwiesen.

**Definition 3.4.** (Materialgesetze) Ein Körper $\bar{\Omega}$ heißt homogen thermoelastisch-plastisch mit Phasenumwandlungen ohne Diffusion, falls die Größen $E_{in}$, $\hat{S}$, $q$, $\psi$, $\eta$, $\gamma$ die folgenden Darstellungen besitzen

(3.12) $E_{in} = \tilde{E}_{in}(F_d^t, \theta_d^t, F, \theta, \nabla\theta, p, (F_{in})_d^t, F_{in})$,

(3.13) $\hat{S} = \tilde{\hat{S}}(\hat{F}_{te}, \theta, \nabla\theta, p, \det F_{in})$,

(3.14) $\psi = \tilde{\psi}(\hat{F}_{te}, \theta, \nabla\theta, p, \det F_{in})$,

(3.15) $\eta = \tilde{\eta}(\hat{F}_{te}, \theta, \nabla\theta, p, \det F_{in})$,

(3.16) $q = \tilde{q}(F_d^t, \theta_d^t, F, \theta, \nabla\theta, p)$,

(3.17) $\Phi = \tilde{\Phi}(F_d^t, \theta_d^t, F, \theta, \theta', \nabla\theta, p)$,

wobei die $\tilde{E}_{in}$, $\tilde{\hat{S}}$, $\tilde{\psi}$, $\tilde{\eta}$, $\tilde{q}$, $\tilde{\Phi}$ den Körper charakterisierende Funktionen sind. Zusätzlich seien $\tilde{E}_{in}$ und $\tilde{\hat{S}}$ symmetrische Tensorfunktionen.

**Bemerkungen 3.5.** **(i)** Es gelten neben den Beziehungen (3.12) – (3.17) die vorigen „kinematischen" Beziehungen, insbesondere (3.7) und (3.3). Zusammen mit (3.3) definiert (3.12) die Zwischenkonfiguration $F_{in}$ und somit $E_{in}$ und $\hat{F}_{te}$ implizit. Daher wollen wir voraussetzen, daß für einen gegebenen thermokinetischen Prozeß $(F, \theta, p)$ (vgl. Bem. 2.3.) eindeutig $F_{in}$ (und damit auch $E_{in}$ und $\hat{F}_{te}$) durch (3.9) und (3.3) bestimmt ist, bis auf die schon erwähnte mögliche orthogonale Transfomation gemäß (3.8). Die Definition (3.12) ist allgemeiner als z.B. $E_{in} = \tilde{E}_{in}(F_d^t, \theta_d^t, F, \theta, \nabla\theta, p)$, umfaßt aber konkrete Modelle, wie weiter unten sichtbar wird.
**(ii)** Durch die Beziehung (3.13) wird ausgedrückt, daß sich der Körper bezüglich der Zwischenkonfiguration thermoelastisch verhält. Die Abhängigkeit von $p$ läßt Umwandlungsspannungen zu.

Die Abhängigkeit von $\det F_{in}$ ist nötig, um auch den Fall einer nicht volumenerhaltenden Zwischenkonfiguration zu modellieren.
Aus (3.13) folgt auch, daß es i.a. keinen eindeutigen Zusammenhang zwischen Spannungen und (Gesamt-) Deformation gibt.
**(iii)** Wir lassen in (3.17) eine Abhängigkeit von $\theta'$ zu, da diese in verschiedenen Modellen für Phasenunwandlungen auftritt. Aufgrund der Äquipräsenzregel tritt in (3.17) der Gradient von $\theta$ auf. In den bekannten Phasenumwandlungsmodellen tritt eine solche Abhängigkeit nicht auf (s. Punkt 7).

Aus der Folgerung 3.2. (ii), der Bemerkung 3.3. (ii) sowie der Definition 3.4. ergeben sich folgende Invarianzeigenschaften für die Materialfunktionale, die Einschränkungen der Materialgesetze aus Definition 3.4. darstellen.

**Folgerungen 3.6.** Seien $Q \in C^1_{pw}([0, T]; SO(n))$ beliebig und $(F, \theta, p)$ ein beliebiger thermokinetischer Prozeß mit Phasenumwandlungen gemäß Definition 2.3. und Bemerkung 2.3. Dann gelten für die Materialfunktionale in Defintion 3.4.:

**(i)** $\tilde{E}_{in}(F^t_d, \theta^t_d, F, \theta, \nabla\theta, p, (F_{in})^t_d, F_{in}) = \tilde{E}_{in}(F^t_d, \theta^t_d, F, \theta, \nabla\theta, p, (QF_{in})^t_d, QF_{in})$,

**(ii)** $Q\,\hat{\tilde{S}}(F_{te}, \theta, \nabla\theta, p, \det F_{in})\,Q^T = \hat{\tilde{S}}(F_{te} Q^T, \theta, \nabla\theta, p, \det F_{in})$,

**(iii)** $\hat{\tilde{\psi}}(F_{te}, \theta, \nabla\theta, p, \det F_{in}) = \hat{\tilde{\psi}}(F_{te} Q^T, \theta, \nabla\theta, p, \det F_{in})$,

**(iv)** $\hat{\tilde{\eta}}(F_{te}, \theta, \nabla\theta, p, \det F_{in}) = \hat{\tilde{\eta}}(F_{te} Q^T, \theta, \nabla\theta, p, \det F_{in})$.

Weitere Einschränkungen an die Materialgesetze beinhaltet die folgende Annahme.

**Annahme 3.7.** (**Prinzip des endlichen Gedächtnisses**) Wir bezeichnen

$$D_t := L^2(]0, t[, \mathbb{R}^{n^2}) \times L^2(]0, t[, \mathbb{R}) \times \mathbb{R}^{n^2} \times \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \qquad \forall\, t \in ]0, T].$$

Die Funktionen in der Definition 3.4.

$$\hat{\tilde{S}} : \mathbb{R}^{n^2} \times \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}^{n^2}, \qquad \tilde{\eta} : \mathbb{R}^{n^2} \times \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R} \to \mathbb{R},$$

$$\tilde{q} : D_t \to \mathbb{R}^n, \qquad \tilde{\Phi} : L^2(]0, t[, \mathbb{R}^{n^2}) \times L^2(]0, t[, \mathbb{R}) \times \mathbb{R}^{n^2} \times \mathbb{R} \times \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^m$$

seien für alle $t \in ]0, T]$ stetig, die Funktionen

$$\tilde{\psi} : \mathbb{R}^{n^2} \times \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}, \quad \tilde{E}_{in} : D_t \times L^2(]0, t[, \mathbb{R}^{n^2}) \times \mathbb{R}^{n^2} \to \mathbb{R}^{n^2}$$

seien für alle $t \in ]0, T]$ stetig Fréchet-differenzierbar.

Die Wahl der $L^2$-Räume anstelle von Räumen stetiger Funktionen erklärt sich damit, daß bei der Berücksichtigung der Vorgeschichte eine Mittelung erfolgt, die durch die Norm in $L^2$ gut zu erfassen ist.

## 4. Konsequenzen aus der Clausius-Duhem-Ungleichung

Die Clausius-Duhem-Ungleichung soll für alle thermokinetischen Prozesse mit Phasenumwandlungen (vgl. Definition 2.2.) gelten. Das führt zu weiteren Einschränkungen in den Materialfunktionalen in der Definition 3.4. Hierbei beschreiten wir den von Coleman / Noll vorgeschlagenen Weg zur Auswertung der Entropie-Ungleichung (vgl. z.B. [Col64], [Nol73], [Hau77]). Das von Müller / Liu vorgeschlagene alternative Herangehen (s. [Mül73]) wird in dieser Arbeit nicht verfolgt.
Wir erhalten Resultate, die analog zu denen für Materialien ohne Phasen (d.h., Mischungskomponenten) sind. Zuerst treffen wir technische Vorbereitungen.

**Definition 4.1.** Seien $\bar{\Omega}$ ein Körper gemäß Definition 3.4., $(F, \theta, p)$ ein thermokinetischer Prozeß auf $\bar{\Omega} \times [0, t]$ und $\xi \in \Omega$ beliebig. Ein thermokinetischer Prozeß $(\bar{F}, \bar{\theta}, \bar{p})$ auf $\bar{\Omega} \times [0, t + s]$ mit $0 < s$ und $t + s < T$ heißt thermoelastische Fortsetzung bei eingefrorenen Phasenanteilen im Punkt $\xi \in \Omega$ des Prozesses $(F, \theta, p)$ von $\bar{\Omega} \times [0, t]$ auf $\bar{\Omega} \times [0, t + s]$, falls gelten

(4.1) $\bar{F}$, $\bar{\theta}$ auf $[t, t + s]$ stetig differenzierbar;

(4.2) $\forall\, 0 \le \tau \le t$ : $\bar{F}(\xi, \tau) = F(\xi, \tau)$, $\bar{\theta}(\xi, \tau) = \theta(\xi, \tau)$, $\bar{p}(\xi, \tau) = p(\xi, \tau)$,

(4.3) $\forall\, t \le \tau \le t + s$ : $\bar{F}_{in}(\xi, \tau) = F_{in}(\xi, t)$, $\bar{p}(\xi, \tau) = p(\xi, t)$;

Die folgende Annahme postuliert die Existenz einer Fortsetzung eines thermokinetischen Prozesses, die in einem frei gewähltem Punkt $\xi \in \Omega$ die Zwischenkonfiguration (zeitlich) nicht ändert. Außerdem sollen Fortsetzungen, die „in einem Punkt dicht" bei einer solchen liegen, die Zwischenkonfiguration ebenfalls nicht in diesem Punkt ändern. Diese Annahmen sind Materialannahmen, die zum Beweis der Konsequenzen aus der Clausius-Duhem-Ungleichung benötigt werden. In der Folge sei $0 < t < T$.

**Annahme 4.2.** Seien $\bar{\Omega}$ ein Körper gemäß Definition 3.4. und $(F, \theta, p)$ ein thermokinetischer Prozeß auf $\bar{\Omega} \times [0, t]$. Dann existiert eine thermoelastische Fortsetzung bei eingefrorenen Phasenanteilen $(\bar{F}, \bar{\theta}, \bar{p})$ des gegebenen Prozesses $(F, \theta, p)$ gemäß Definition 4.1. von $\bar{\Omega} \times [0, t]$ auf $\bar{\Omega} \times [0, t + s]$ in einem beliebigen $\xi \in \Omega$, wobei $0 < s$ und $t + s < T$. Außerdem existiert ein $0 < s'(\bar{F}, \bar{\theta}, \bar{p}, \xi) \le s$ und für alle $0 < \sigma \le s'$ existiert ein $\gamma = \gamma(\bar{F}, \bar{\theta}, \bar{p}, \xi. \sigma) > 0$, so daß folgende Aussage gilt:

Sei der thermokinetischer Prozeß $(G, \omega, \pi)$ auf $\bar{\Omega} \times [0, t + \sigma]$ mit $0 < \sigma \le s'$ eine Fortsetzung von $(F, \theta, p)$ von $[0, t]$ auf $[0, t + \sigma]$ mit

(4.4) $\qquad \forall\, \tau \in [t, t + \sigma] \qquad : \qquad \pi(\xi, \tau) = \bar{p}(\xi, \tau)\ (= p(\xi, t) = \text{const.!}),$

(4.5) $$\max_{t \le \tau \le t + \sigma} \{\, \|G(\xi, \tau) - \bar{F}(\xi, \tau)\| + |\omega(\xi, \tau) - \bar{\theta}(\xi, \tau)|\, \} \le \gamma,$$

( $\|\bullet\|$ sei die euklidische Norm in $\mathbb{R}^{n^2}$).

Dann ist $(G, \omega, \pi)$ ein thermokinetischer Prozeß $(G, \omega, \pi)$ auf $\bar{\Omega} \times [0, t + \sigma]$ mit:

(4.6) $\qquad \forall\, \tau \in [t, t + \sigma] \qquad : \qquad G_{in}(\xi, \tau) = G_{in}(\xi, t).$

**Bemerkungen 4.3.** (Kommentare zur Definition 4.1. und zur Annahme 4.2.)

**(i)** Ein Einfrieren der Phasenanteile in der thermoelastischen Fortsetzung erscheint sinnvoll, weil die Umwandlungsplastizität in den gängigen Modellen keine Fließgrenze hat (s. Punkt 6). Daher können schon kleine Änderungen in den Phasenanteilen die Zwischenkonfiguration verändern, was wir aus mathematischen Gründen bei obiger Fortsetzungsprozedur ausschließen wollen, um den Satz 4.4. zu beweisen. Wir haben daher die Idee einer thermoelastischen Fortsetzung von Ting [Tin73] erweitert.

**(ii)** Ein weiterer Vorteil der konstanten Fortsetzung von $p$ besteht darin, daß in (3.17) eine Abhängigkeit von $\theta'$ zugelassen werden kann, die zum einen bei Anwendungen auftritt (Vgl. Punkt 7) und zum anderen die Aussagen des Satzes 4.4. nicht gefährdet.

**(iii)** Aus mathematischen Gründen wird in der Definition 4.1. die Forderung (4.1) erhoben.

In [Tin73] werden die Folgerungen aus der Clausius-Duhem-Ungleichung für einen allgemeineren Materialansatz ohne Phasenumwandlungen hergeleitet. Wir wollen einen analogen Satz für unseren Materialansatz beweisen. Für Materialien mit nachlassendem Gedächtnis (ohne Phasenumwandlungen) wurde ein solcher Satz in [Col64] bewiesen, s.a. [Hau77], [Sil97].

**Satz 4.4.** (Verallgemeinerte Spannungs- und Entropie-Beziehungen) Sei $\bar{\Omega}$ ein Körper gemäß der Definition 3.4. und den Annahmen 3.7., 4.2. Dann gelten für jeden thermokinetischen Prozeß $(F, \theta, p)$ die nachfolgenden Beziehungen:

(4.7) $$\psi = \tilde{\psi}(\hat{F}_{te}, \theta, p, \det F_{in}),$$

(4.8) $$\hat{S} = \tilde{\hat{S}}(\hat{F}_{te}, \theta, p, \det F_{in}),$$

(4.9) $$\eta = \tilde{\eta}(\hat{F}_{te}, \theta, p, \det F_{in}),$$

(4.10) $$\tilde{\hat{S}}(\hat{F}_{te}, \theta, p, \det F_{in}) = \rho_0\, \hat{F}_{te}^{-1}\, \partial_{\hat{F}_{te}} \tilde{\psi}(\hat{F}_{te}, \theta, p, \det F_{in}),$$

(4.11) $$\tilde{\eta}(\hat{F}_{te}, \theta, p, \det F_{in}) = -\,\partial_\theta \tilde{\psi}(\hat{F}_{te}, \theta, p, \det F_{in}),$$

(4.12) $$\frac{1}{\theta}\, \tilde{q}(F_d^t, \theta_d^t, F, \theta, \nabla\theta, p) \bullet \nabla\theta \le 0$$

für alle $\xi \in \Omega$ und $t \in ]0, T[$. Außerdem gilt für jeden thermokinetischen Prozeß $(E, \theta, p)$ mit $\theta$ stetig differenzierbar bzgl. $t$ die reduzierte Disspationsungleichung

$$(4.13) \qquad S \bullet\bullet \frac{dE_{in}}{dt} - 2\,\Big(\frac{dF_{in}^{-1}}{dt} F_{in}\, S\Big) \bullet\bullet E_{in} - \rho_0 \frac{\partial\tilde{\psi}}{\partial p}(\tilde{\Phi} + \varphi) - \rho_0 \frac{\partial\psi}{\partial \det F_{in}} \frac{d}{dt}(\det F_{in}) - \frac{1}{\theta}\,\tilde{q} \bullet \nabla\theta \geq 0$$

in allen $\xi \in \Omega$ und allen den $t \in \,]0, T[$, in denen $(E, \theta, p)$ sowie $E_{in}$ differenzierbar ist.

Wir schicken dem Beweis dieses Satzes zwei technische Lemmata voraus. Das erste ist trivial.

**Lemma 4.5.** Es seien $b, t$ und $s$ beliebig gegeben mit $b$ und $s$ positiv.
Dann gelten für die Funktion

$$(4.14) \qquad h(\tau) := \frac{b}{s}\Big(1 - \exp\Big(\frac{(\tau - t)(\tau - t - s)}{b}\Big)\Big) \qquad \text{für } \tau \in [t, t + s]$$

die Eigenschaften

$$(4.15) \qquad h(t) = 0, \qquad h(t + s) = 0, \qquad h'(t) = 1, \qquad h'(t + s) = -1,$$

$$(4.16) \qquad |h(\tau)| \leq \frac{b}{s} \text{ für } \tau \in [t, t + s].$$

In der Folge seien $0 \leq t < T < \infty$, $0 < s$, $t + s < T$.

**Lemma 4.6.** Sei $\bar{\Omega}$ ein Körper gemäß Definition 3.4. Sei $(\bar{F}, \bar{\theta}, \bar{p})$, thermoelastische Fortsetzung eines gegebenen thermokinetischen Prozesses $(F, \theta, p)$ gemäß Annahme 4.2. von $\bar{\Omega} \times [0, t]$ auf $\bar{\Omega} \times [0, t + s]$ in einem beliebigen Punkt $\xi \in \Omega$. Dann existiert ein $0 < \sigma \leq s$, so daß folgende Aussage gilt:
Für jedes $0 < \sigma' \leq \sigma$, für jedes $\varepsilon > 0$, für beliebige $A \in \mathbb{R}^{n^2}$, $a \in \mathbb{R}^n$ und $\alpha \in \mathbb{R}$ existiert ein thermokinetischer Prozeß $(G, \omega, \pi)$ auf $\bar{\Omega} \times [0, t + \sigma']$, der Fortsetzung von $(F, \theta, p)$ auf $[t, t + \sigma']$ ist und folgende Eigenschaften besitzt:

$$(4.17) \qquad G(\xi, t + \sigma') = \bar{F}(\xi, t + \sigma'), \qquad \omega(\xi, t + \sigma') = \bar{\theta}(\xi, t + \sigma'), \qquad \nabla\omega(\xi, t + \sigma') = \nabla\bar{\theta}(\xi, t + \sigma'),$$

$$(4.18) \qquad \forall\, t \leq \tau \leq t + \sigma' \; : \qquad G_{in}(\xi, \tau) = F_{in}(\xi, t) \; (= \bar{F}_{in}(\xi, \tau)), \qquad \pi(\xi, \tau) = p(\xi, t) \; (= \bar{p}(\xi, \tau)),$$

$$(4.19) \qquad G'(\xi, t + \sigma') = A, \qquad \omega'(\xi, t + \sigma') = \alpha, \qquad \nabla\omega'(\xi, t + \sigma') = a,$$

$$(4.20) \qquad \| \bar{F}_d^{t + \sigma'}(\xi, \bullet) - G_d^{t + \sigma'}(\xi, \bullet) \| < \varepsilon,$$

$$(4.21) \qquad \| \bar{\theta}_d^{t + \sigma'}(\xi, \bullet) - \omega_d^{t + \sigma'}(\xi, \bullet) \| < \varepsilon,$$

($\|\bullet\|$ Norm in $L^2(0, T; \mathbb{R}^{n^2})$ bzw. in $L^2(0, T; \mathbb{R})$, ' – Ableitung nach der Zeit)

**Beweis:** Nach Annahme 4.2. existiert für $(\bar{F}, \bar{\theta}, \bar{p})$) und für jedes $\xi \in \Omega$ ein $0 < s'(\bar{F}, \bar{\theta}, \bar{p}, \xi) \leq s$ und für alle $0 < \sigma' \leq s'$ existiert ein $\gamma = \gamma(\bar{F}, \bar{\theta}, \bar{p}, \xi, \sigma') > 0$, so daß die dortigen Aussagen erfüllt sind. Seien nun $0 < \sigma' \leq s'$, $\varepsilon > 0$, $A \in \mathbb{R}^{n^2}$, $a \in \mathbb{R}^n$ und $\alpha \in \mathbb{R}$ beliebig gegeben. Für dieses $\sigma'$ (anstelle von $s$) und ein noch zu bestimmendes $b > 0$ konstruieren wir mit Hilfe der Funktion $h$ aus Lemma 4.4. eine Funktion $(G, \omega, \pi)$ in folgender Weise:

$$(4.22) \qquad (G(x, \tau), \omega(x, \tau), \pi(x, \tau)) := (F(x, \tau), \theta(x, \tau), p(x, \tau)) \qquad \text{auf } \bar{\Omega} \times [0, t],$$

$$(4.23) \qquad G(x, \tau) := \bar{F}(x, \tau) - h(\tau)\,(A - \bar{F}'(\xi, t + \sigma')) \qquad \text{auf } \bar{\Omega} \times [t, t + \sigma'],$$

$$(4.24) \qquad \omega(x, \tau) := \bar{\theta}(x, \tau) - h(\tau)\,(\alpha - \bar{\theta}'(\xi, t + \sigma')) + h(\tau)\,\big((a \mid x - \xi) + {}$$
$$- (\nabla\bar{\theta}'(\xi, t + \sigma') \mid x - \xi)\big)\,\zeta(\|x - \xi\|) \qquad \text{auf } \bar{\Omega} \times [t, t + \sigma'],$$

$$(4.25) \qquad \pi(x, \tau) := \bar{p}(x, t) \qquad \text{auf } \bar{\Omega} \times [t, t + \sigma'].$$

Dabei sind $(\bullet \mid \bullet)$ das Skalarprodukt in $\mathbb{R}^n$ und $\zeta : \mathbb{R}^+ \to [0, 1]$ eine glatte Schnittfunktion mit Träger in $\bar{B}_1(0) \subset \mathbb{R}^n$ und $\zeta = 1$ auf $\bar{B}_{\frac{1}{2}}(0)$. Es läßt sich zeigen, daß die so konstruierte Funktion $(G, \omega, \pi)$ den behaupteten Anforderungen genügt. Für die technischen Details verweisen wir auf [Wol02a].

**Beweis von Satz 4.4.:** Die tragende Säule des Beweises ist die Tatsache, daß aus

$$ab + c \geq 0 \qquad \text{für alle } b \in \mathbb{R}$$

die Aussagen

$$a = 0 \qquad \text{und} \qquad c \geq 0$$

folgen. Mit dieser Idee wird auch der entsprechende Satz in [Col64] bewiesen. Aufwendig sind die technischen Details, die in Abhängigkeit von den konkreten Ansätzen für die Materialfunktionale variieren.

Sei $(F, \theta, p)$ ein beliebiger thermokinetischer Prozeß auf $\bar\Omega \times [0, t]$ $(t\in ]0, T[)$. Für jedes $\xi\in\Omega$ existiert eine thermoelastische Fortsetzung (bei eingefrorenen Phasenanteilen) $(\bar F, \bar\theta, \bar p)$ auf $\bar\Omega \times [0, t + s]$ $(t < s < T)$ nach der Annahme 4.2. Nach Lemma 4.6. gibt es ein $0 < \sigma \leq s$, so daß für beliebig gegebene $0 < \sigma' \leq \sigma, \varepsilon > 0$, $A\in \mathbb{R}^{n^2}$, $a\in \mathbb{R}^n$, $\alpha\in \mathbb{R}$ eine Fortsetzung $(G, \omega, \pi)$ von $(F, \theta, p)$ auf $[t, t + \sigma']$ mit den in diesem Lemma behaupteten Eigenschaften existiert.
Dann gilt für $(G, \omega, \pi)$ im Punkt $(\xi, t + \sigma')$ die Clausius-Duhem-Ungleichung (2.15), wobei die Größen dort auf die Referenzkonfiguratin bezogen sind. Somit ist die Beziehung (3.10) zu verwenden, um zu $\hat S$ zu gelangen. Wir berechnen die (totale) Ableitung $\frac{d}{dt}\tilde\psi$ für die Argumente $(\hat G_{te}, \omega, \pi)$ im Punkt $(\xi, t + \sigma')$ bzw. im entsprechenden Punkt der Zwischenkonfiguration:

$$(4.26) \qquad \frac{d}{dt}\tilde\psi = \partial_{\hat F_{te}}\tilde\psi \bullet\bullet \frac{d}{dt}\hat G_{te} + \partial_\theta\tilde\psi\,\alpha + \partial_{\nabla\theta}\tilde\psi \bullet a = \partial_{\hat F_{te}}\tilde\psi \bullet\bullet A\, G_{in}^{-1} + \partial_\theta\tilde\psi\,\alpha + \partial_{\nabla\theta}\tilde\psi \bullet a =$$
$$= \partial_{\hat F_{te}}\tilde\psi\, G_{in}^{-T} \bullet\bullet A + \partial_\theta\tilde\psi\,\alpha + \partial_{\nabla\theta}\tilde\psi \bullet a$$

Dabei wird benutzt, daß auf $[t, t + \sigma']$ die Phasenanteile in $\xi$ konstant sind. Ebenso sind auf $[t, t + \sigma']$ die Zwischenkonfiguration in $\xi$ und ihre Determinante konstant.
Zusammenfassend erhalten wir aus der Clausius-Duhem-Ungleichung (2.15) unter Beachtung von (3.10), (4.31) sowie Definition 3.4. (die Argumente $\xi$ und $t + \sigma'$ werden unterdrückt)

$$(4.27) \quad \{ \hat G_{te}\, \tilde{\hat S}( \hat G_{te}, \omega, \nabla\omega, \pi, \det G_{in})\, G_{in}^{-T} - \rho_0\, \partial_{\hat F_{te}}\tilde\psi( \hat G_{te}, \omega, \nabla\omega, \pi, \det G_{in})\, G_{in}^{-T} \} \bullet\bullet A +$$
$$- \{ \rho_0 \partial_\theta\, \tilde\psi( \hat G_{te}, \omega, \nabla\omega, \pi, \det G_{in}) + \rho_0\, \tilde\eta( \hat G_{te}, \omega, \nabla\omega, \pi, \det G_{in}) \}\, \alpha +$$
$$- \rho_0\, \partial_{\nabla\theta}\, \tilde\psi( \hat G_{te}, \omega, \nabla\omega, \pi, \det G_{in}) \bullet a - \frac{1}{\omega}\, \tilde q( G_d^{t+\sigma'}, \omega_d^{t+\sigma'}, G, \omega, \nabla\omega, \pi) \bullet \nabla\omega \geq 0.$$

Aus den Eigenschaften (3.32) für $(G, \omega, \pi)$ folgt dann sofort (ebenfalls für die Argumente $\xi$ und $t + \sigma'$)

$$(4.28) \quad \{ \hat{\bar F}_{te}\, \tilde{\hat S}( \hat{\bar F}_{te}, \bar\theta, \nabla\bar\theta, \bar p, \det \bar F_{in})\, \bar F_{in}^{-T} - \rho_0\, \partial_{\hat F_{te}}\tilde\psi( \hat{\bar F}_{te}, \bar\theta, \nabla\bar\theta, \bar p, \det \bar F_{in})\, \bar F_{in}^{-T} \} \bullet\bullet A +$$
$$- \{ \rho_0 \partial_\theta\, \tilde\psi( \hat{\bar F}_{te}, \bar\theta, \nabla\bar\theta, \bar p, \det \bar F_{in}) + \rho_0\, \tilde\eta( \hat{\bar F}_{te}, \bar\theta, \nabla\bar\theta, \bar p, \det \bar F_{in}) \}\, \alpha +$$
$$- \rho_0\, \partial_{\nabla\theta}\, \tilde\psi( \hat{\bar F}_{te}, \bar\theta, \nabla\bar\theta, \bar p, \det \bar F_{in}) \bullet a - \frac{1}{\bar\theta}\, \tilde q( \bar F_d^{t+\sigma'}, \bar\theta_d^{t+\sigma'}, \bar F, \bar\theta, \nabla\bar\theta, \bar p) \bullet \nabla\bar\theta \; +$$
$$- \{ \frac{1}{\bar\theta}\, \tilde q( G_d^{t+\sigma'}, \omega_d^{t+\sigma'}, \bar F, \bar\theta, \nabla\bar\theta, \bar p) \bullet \nabla\bar\theta \; - \; \frac{1}{\bar\theta}\, \tilde q( \bar F_d^{t+\sigma'}, \bar\theta_d^{t+\sigma'}, \bar F, \bar\theta, \nabla\bar\theta, \bar p) \} \bullet \nabla\bar\theta \; \geq 0.$$

Die Ausdrücke vor $A$, $\alpha$ und $a$ sowie der letzte Term in der dritten Zeile von (4.28) hängen nicht von $A$, $\alpha$ und $a$ ab. Wegen der Stetigkeit von $\tilde q$ und der Eigenschaften (4.20), (4.21) läßt sich für gegebenes $\sigma'$, $A$, $\alpha$, $a$ der Ausdruck in der vierten Zeile von (4.28) dem Betrage nach kleiner als ein frei gewähltes $\delta > 0$ machen. Es muß nur das $\varepsilon$ in (4.20), (4.21) klein sein. Die Ungleichungen (4.24), (4.25) zeigen, daß das auf Kosten der Wahl des Parameters $b$ für die Hilfsfunktion $h$ aus (4.14) geschieht. Somit erhalten wir aus (4.28) die Behauptungen (4.7) – (4.12) für die Argumente $\xi$ und $t + \sigma'$. Die Stetigkeit von $(\bar E, \bar\theta, \bar p)$ sowie der Funktionen $\tilde{\hat S}$, $\partial_{\hat E_{te}}\tilde\psi$, $\partial_\theta\, \tilde\psi$, $\tilde\eta$ sichern den Grenzübergang für $\sigma' \to 0$ und wir erhalten (4.7) – (4.11). Weiter gelten, wie sich leicht nachprüfen läßt – unter Beachtung der Definition der Vorgeschichte und des Satzes von Lebesgue -

$$\bar F_d^{t+\sigma'} \to F_d^t, \qquad\qquad \bar\theta_d^{t+\sigma'} \to \theta_d^t \qquad\qquad \text{in der } L^2\text{-Norm für } \sigma' \to 0.$$

Somit folgt auch (4.12) wegen der Stetigkeit von $\tilde q$.
Zum Beweis der **reduzierten Dissipationsungleichung** (4.13):
Aus der Clausius-Duhem-Ungleichung (2.15) folgt (durch Umformen des Dissipationsterms)

$$(4.29) \qquad - \rho_0(\xi)\, \frac{d}{dt}\, \psi(\xi, t) - \rho_0(\xi)\, \eta(\xi, t)\, \frac{d}{dt}\, \theta(\xi, t) + S(\xi, t) \bullet\bullet \frac{d}{dt}\, E - \frac{1}{\theta}\, q \bullet \nabla\theta \geq 0.$$

Wir betrachten (4.29) in den $t$, in denen unter Beachtung der Glattheitsvoraussetzungen die Differentiationen nach $t$ ausführbar sind. Wegen (4.10), (4.11) folgt aus (4.29) dann

(4.30) $$- \hat{F}_{te}\, \hat{S} \bullet\bullet \frac{d}{dt} \hat{F}_{te} - \rho_0 \frac{\partial\tilde{\psi}}{\partial p} (\tilde{\Phi} + \varphi) - \rho_0 \frac{\partial \psi}{\partial \det F_{in}} \frac{d}{dt} (\det F_{in}) + S \bullet\bullet \frac{d}{dt} E - \frac{1}{\theta} q \bullet \nabla\theta \geq 0.$$

Ein Umrechnen der mit einem Dach versehenen Größen auf die entsprechenden ohne Dach und weitere Umformungen liefern (4.13).

Der Satz 4.4. gestattet eine Umformulierung der Wärmeleitungsgleichung (2.11).

**Folgerung 4.7.** (Vereinfachung der Wärmeleitungsgleichung) Unter den Voraussetzungen des Satzes 4.4. ist die Wärmeleitungsgleichung (2.11) äquivalent zu

(4.31) $$\rho_0 c_e \frac{d\theta}{dt} + \operatorname{div} q = \theta \frac{\partial S}{\partial \theta} \bullet\bullet \frac{dE_{te}}{dt} + S \bullet\bullet \frac{dE_{in}}{dt} + 2 \left(F_{in}^{-1} \frac{dF_{in}}{dt} \left( S - \theta \frac{\partial S}{\partial \theta} \right)\right) \bullet\bullet E_{te} +$$
$$+ \theta F S \frac{\partial F_{in}^{T}}{\partial \theta} \bullet\bullet \frac{d}{dt}\hat{F}_{te} - \rho_0 \frac{d}{dt}(\det F_{in}) - \rho_0 \frac{\partial e}{\partial p} (\tilde{\Phi} + \varphi) + r \qquad \text{in } \Omega\times]0, T[$$

mit $c_e := \frac{\partial e}{\partial \theta}$ (spezifische Wärme).

Eine weitere Vereinfachung ergibt sich durch Ausnutzen der Bedingung (2.3) für den Term der Dissipation infolge der Phasenumwandlungen. So können z.B. $p_m$ und $\tilde{\Phi}_m$ durch die restlichen Phasenanteile ausgedrückt werden. Mit

$$\hat{e}\,(p_1, ..., p_{m-1}) := e(p) \qquad \text{und} \qquad \tilde{\Phi}_m = - \sum_{i=1}^{m-1} \tilde{\Phi}_i$$

erhalten wir

(4.32) $$- \rho_0 \frac{\partial e}{\partial p} (\tilde{\Phi} + \varphi) = - \rho_0 \sum_{i=1}^{m-1} \frac{\partial \hat{e}}{\partial p_i} (\tilde{\Phi}_i + \varphi_i).$$

In Anlehnung und Verallgemeinerung (Vgl. z.B. [Höm96]) nennen wir die Größen

$$L_i := - \frac{\partial \hat{e}}{\partial p_i} = - \left( \frac{\partial e}{\partial p_i} - \frac{\partial e}{\partial p_m} \right) \qquad i = 1, ..., m - 1$$

latente Wärmen für die Umwandlung der m-ten in die i-te Phase.

**Vorläufige Zusammenfassung:** Ausgehend von den Bilanzgleichungen (2.9) – (2.14), den Materialgesetzen (3.12) – (3.17) sowie der Einschränkungen des Satzes 4.4. und der Folgerung 4.7. kommen wir zu den Grundgleichungen für die Thermoelasto-Plastizität mit Phasenumwandlungen:

(4.33) $$\rho_0 \frac{d^2 u}{dt^2} - \operatorname{div} ((I + \nabla u) S) = f \qquad \text{in } \Omega \times ]0, T[,$$

(4.34) $$\rho_0 c_e \frac{d\theta}{dt} + \operatorname{div} q = \theta \frac{\partial S}{\partial \theta} \bullet\bullet \frac{dE_{te}}{dt} + S \bullet\bullet \frac{dE_{in}}{dt} + 2 \left(F_{in}^{-1} \frac{dF_{in}}{dt} \left(S - \theta \frac{\partial S}{\partial \theta}\right)\right) \bullet\bullet E_{te} +$$
$$+ \theta F S \frac{\partial F_{in}^{T}}{\partial \theta} \bullet\bullet \frac{d}{dt}\hat{F}_{te} - \rho_0 \frac{\partial e}{\partial (\det F_{in})} \frac{d}{dt}(\det F_{in}) - \rho_0 \sum_{i=1}^{m-1} \frac{\partial \hat{e}}{\partial p_i} (\tilde{\Phi}_i + \varphi_i) + r \qquad \text{in } \Omega \times ]0, T[,$$

(4.35) $$\frac{d}{dt} p_i = \tilde{\Phi}_i + \varphi_i \qquad i = 1, ..., m - 1 \quad \text{in } \Omega \times ]0, T[,$$

(4.36) $$E_{in} = \tilde{E}_{in}(F_d^t, \theta_d^t, F, \theta, \nabla\theta, p, (F_{in})_d^t, F_{in}),$$

(4.37) $$\psi = \tilde{\psi}(\hat{F}_{te}, \theta, p, \det F_{in}),$$

(4.38) $$q = \tilde{q}(F_d^t, \theta_d^t, F, \theta, \nabla\theta, p),$$

(4.39) $$\Phi = \tilde{\Phi}(F_d^t, \theta_d^t, F, \theta, \theta', \nabla\theta, p),$$

(4.40) $$S = \rho_0 F_{in}^{-1}\, \partial_{\hat{E}_{te}} \tilde{\psi}(\hat{F}_{te}, \theta, p, \det F_{in})\, F_{in}^{-T},$$

(4.41) $$E_{in} := \frac{1}{2} (F_{in}^{T} F_{in} - I), \qquad E = E_{te} + E_{in}, \qquad E := \frac{1}{2} (\nabla u + \nabla u^T + \nabla u^T \nabla u), \ \hat{F}_{te} = F F_{in}^{-1}.$$

Die äußeren Quellen gelten als gegeben, Anfangs- und Randwerte für $u, \theta, p$ sind hinzuzufügen.

## 5. Weitere Spezialisierungen

Wir wollen jetzt die allgemeinen Ansätze in der Definition 3.4. und am Ende des vorherigen Kapitels weiter spezialisieren. Die experimentelle Erfahrung sagt, daß inelastische Umformungen (bei angenommener konstanter Temperatur und eingefrorenen Phasenanteilen) volumenerhaltend sind Wir setzen daher

(5.1) $$\det F_{in} = 1 \qquad \text{in } \Omega \times ]0, T[$$

voraus, was zu weiteren Vereinfachungen führt. Wir betonen an dieser Stelle nochmals, daß die Volumenänderungen infolge von Temperatur- und Phasenänderungen im thermoelastischen Anteil $\hat{F}_{te}$ erfaßt werden. Sei der Körper weiter isotrop (vgl. [Mül73], [Sil97], [Hau00]), es gelte also

(5.2) $$\hat{S} = 2\mu\, \hat{E}_{te} + \lambda(\mathrm{tr}\, \hat{E}_{te})\, I + \delta\, \hat{E}_{te}^2 - (\det \hat{F}_{te})\, \{\, 3K\alpha\, (\theta - \theta_0) + K\, \frac{\rho_0 - \rho}{\rho}\, \}\, (\, 2\, \hat{E}_{te} + I\, )^{-1}$$

Hierbei sind: $\mu$, $\lambda$ - Lamé-Koeffizienten, $\delta$ - Koeffizient beim nichtlinearen Term, K – Kompressionsmodul, $\alpha$ - linearer Wärmeausdehnungskoeffizient, $\rho_0$ – Dichte der Refernzkonfiguration, $\rho$ - aktuelle Dichte, bezogen auf Referenztemperatur $\theta_0$. Die Herleitung der Umwandlungsspannungen erfolgt in bekannter Weise (s. z.B. [Wol02a]). Wegen

$$\det \hat{F}_{te} = (\, \det (2\hat{E}_{te} + I))^{\frac{1}{2}}\ \ (= \det F\,) \qquad \text{und} \qquad \rho = \rho(p)$$

steht die Darstellung (5.2) nicht im Widerspruch zu (3.13).
Wir bemerken, daß die Beziehung (5.2) konsistent ist mit dem Transformationsverhalten der beteiligten Tensoren (beachte (3.10)), falls in die Zerlegung (3.1) eine Orthogonalmatrix gemäß Folgerung 3.2. (ii) eingefügt wird. Eine Umrechnung von (5.2) auf Größen bezüglich der Referenzkonfiguration ergibt unter Beachtung von (3.3), (3.4) und (3.5)

(5.3) $$S = 2\mu\, C_{in}^{-1}\, (E - E_{in})\, C_{in}^{-1} + \lambda\, \mathrm{tr}(F_{in}^{-T}\, (E - E_{in})\, F_{in}^{-1})\, C_{in}^{-1} + \delta\, C_{in}^{-1}\, [(E - E_p)\, C_{in}^{-1}]^{\,2} + $$
$$- (\det F)\, \{\, 3K\alpha\, (\theta - \theta_0) + K\, \frac{\rho_0 - \rho}{\rho}\, \}\, C^{-1}.$$

Die Größen $\mu$, $\lambda$, $\delta$, K und $\alpha$ hängen von $\theta$ und p ab. Sie werden oft nach der Mischungsregel aus den entsprechenden Größen für die einzelnen Phasen berechnet.
Wir spezialisieren jetzt die Beziehung (3.12), indem wir ansetzen, daß der inelastische Verzerrungstensor von der Geschichte der Spannung abhängt. In Experimenten tritt keine inelastische Deformation auf, wenn der Deviator des Cauchyschen Spannungstensors verschwindet. Über den bekannten Zusammenhang

(5.4) $$\tau = (\det F)^{-1}\, F\, S\, F^T.$$

setzen wir

(5.5) $$E_{in}(t) = \mathop{\mathfrak{F}}_{s=0}^{t} (\tau^*(s), \theta(s), p(s)),$$

mit $\tau^* := \tau - \frac{1}{3}\,\mathrm{tr}(\tau) I$ (:= Deviator von $\tau$). $\mathfrak{F}$ ist ein materialspezifisches Funktional, das im allgemeinen die Geschichten der aufgeführten Größen berücksichtigt, so könnte $\mathfrak{F}$ z.B. ein Intergral sein.

**Bemerkung 5.1.** Wird der Ausdruck (5.3) für S in (5.4), und danach in (5.5) eingesetzt, so entsteht ein Ausdruck der Form (3.12). Damit sind die obigen Darlegungen mathematisch konsistent.

Wir spezialisieren den Wärmestrom q gemäß dem bekannten Fourier-Ansatz zu

(5.6) $$q = - \kappa(\theta, p)\, \nabla\theta$$

mit $\kappa > 0$ (Wärmeleitfähigkeit). Das bisher Ausgeführte gilt in dieser Allgemeinheit sowohl für die klassische Plastizität als auch für die Umwandlungsplastizität (TRIP) oder andere bleibende Verformaungen. Die Unterschiede liegen in der konkreten Gestalt des Funktionals $\mathfrak{F}$ in (5.5). Ausschlaggebend für die Berücksichtigung plastischer Effekte – sowohl klassischer Art als auch aus der Umwandlungsplastizität herrührend – ist die Modellierung des Funktionals $\mathfrak{F}$ in der Gleichung (5.5). Im nächsten Punkt wollen wir hierauf näher eingehen, wobei wir hier nur die Umwandlungsplastizität betrachten. In [Wol02a] finden sich Ausführungen zur simultanen Modellierung von klassischer und Umwandlungsplastizität.

## 6. Umwandlungsplastizität

Zum Phänomen der Umwandlungsplastizität selbst verweisen wir auf die umfangreiche Literatur (z.B. [Vog], [Pie00a, b], [Obe99], [Fis96, 99], [Fis96], [Bes93], [Mit87], [Leb89a, b], [Den83, 97]), in der auch die historischen Entwicklungen aufgezeigt werden. Zuerst wurde die Umwandlungsplastizität für den einachsigen Zugversuch bei konstanter Belastung und einer Phasenumwandlung beobachtet und modelliert. In der Folge wurden der mehrdimensionale Fall unter nichtkonstanter Belastuung modelliert [Mit87], [Leb89a]. Bei der Bildung einer Phase (z.B. Martensit durch Abschrecken) wurde folgender Zusammenhang vorgeschlagen

(6.1) $$\frac{d}{dt}\, E_{L,TRIP} = \frac{3}{2}\, K\, \tau^*\, \Psi'(z)\, z'$$

wobei $E_{L,TRIP}$ ein durch die Umwandlunsplastizität hervorgerufener zusätzlicher linearisierter Verzerrungsstensors ist. Die Bezeichnung TRIP rührt her von „transfomation induced plastisity“. Weiter sind $\tau^*$ der Deviator des Cauchyschen Spannungstensors $\tau$, z die sich bildende Phase, K eine Materialkonstante und $\Psi$ eine monotone Funktion auf [0, 1] mit $\Psi(0) = 0$ und $\Psi(1) = 1$. Die Konstante K wird in [Fis96] angegeben zu

$$K = 4{,}2 \cdot 10^{-11} \frac{m\,s^2}{Kg}$$

für Stahl 42CrMo6 (vgl. auch [Bes94]), für die Funktion $\Psi$ werden von den Autoren verschiedene Varianten vorgeschlagen (s. [Fis96] mit einer Auflistung), so z.B.

(6.2) $\Psi(z) := z\,(1 - \ln(z))$ in [Leb89a] sowie
$\Psi(z) := z$ in [Tan85] und
$\Psi(z) := z(2 - z)$ in [Den83].

In [Leb89a] werden unter bestimmten Annahmen theoretische Begründungen für $\Psi$ und $K$ gegeben und $K$ durch andere Größen ausgedrückt. Fußend auf [Ino89] läßt sich der Ansatz (6.1) auf $m$ Phasen erweitern zu

$$\frac{d}{dt} E_{L,TRIP} = \frac{3}{2} \sum_{i=1}^{m} K_i\, \Psi_i'(p_i)\, p_i'\, H(p_i')\, \tau^* \tag{6.3}$$

mit phasenindividuellen $K_i$ und $\Psi_i$. Mit der Heaviside-Funktion berücksichtigen wir nur jeweils die Bildung einer Phase (und nicht deren Abnahme.) (Hier weichen wir von [Ino89] ab, ebenso wird dort statt $\tau^*$ die Differenz von $\tau^*$ mit dem Deviator des Eigenspannungstensors genommen.) Eine noch weitergehende Verallgemeinerung, die auch nicht durch Spannungen hervorgerufene Umwandlungsplastizität zuläßt, wird in [Fis99] vorgeschlagen. Diese und andere mögliche Verallgemeinerungen berühren nicht das hier vorgeschlagene Vorgehen, die Umwandlungsplastizität mit Hilfe der Zwischenkonfiguration ins allgemeine Modell der Thermoelastoplastizität mit Phasenumwandlungen einzubinden.
Für große Deformationen wird $E$ anstelle von $\varepsilon$ gewählt. Unter der Voraussetzung $E_{TRIP}(0) = 0$, (folgt aus Annahme des Modells) folgt aus (6.3) die Beziehung

$$E_{TRIP}(t) = \frac{3}{2} \sum_{i=1}^{m} K_i \int_0^t \Psi_i'(p_i)\, p_i'\, H(p_i')\, \tau^*\, ds. \tag{6.4}$$

Damit ist der von der Umwandlungsplastizität hervorgerufene Verzerrungstensor eine Spezialisierung von (5.5). Solange noch keine Effekte der „normalen" Plastizität mit Fließgrenze zu erwarten sind – was wir in dieser Arbeit ja annehmen wollten, können wir wie im Kapitel 3. den Deformationsgradienten $F$ multiplikativ zerlegen in

$$F = \hat{F}_{te}\, F_{TRIP}, \tag{6.5}$$

wobei die Zwischenkonfiguration jetzt von der Umwandlungsplastizität erzeugt wird. (Der Index „in" wird also durch „TRIP" ersetzt.) Wie Experimente zeigen, führt Umwandlungsplastizität nicht zur Volumenänderung. Wie vorher wird die mögliche Volumenänderung infolge Phasenumwandlungen in den thermoelastischen Teil integriert.
Wir erhalten somit die **Grundgleichungen der isotropen Umwandlungsplastizität** aus den Gleichungen (4.33) – (4.41), wobei (4.36) durch (6.4) zu ersetzen ist (mit den Indices „TRIP" anstelle von „in").

$$\rho_0 \frac{d^2u}{dt^2} - \operatorname{div}\,(I + \nabla u)S = f \qquad \text{in } \Omega \times ]0, T[, \tag{6.6}$$

$$\rho_0 c_e \frac{d}{dt}\theta - \operatorname{div}\,(\kappa\nabla\theta) = \theta \frac{\partial S}{\partial\theta} \bullet\bullet \frac{dE_{te}}{dt} + S \bullet\bullet \frac{dE_{TRIP}}{dt} + 2\,(F_{TRIP}^{-1} \frac{dF_{TRIP}}{dt} (S - \theta \frac{\partial S}{\partial\theta})) \bullet\bullet E_{te} +$$
$$+ \theta\, F\, S \frac{\partial F_{TRIP}^{T}}{\partial\theta} \bullet\bullet \frac{d}{dt}\hat{F}_{te} - \rho_0 \sum_{i=1}^{m-1} \frac{\partial\hat{e}}{\partial p_i} (\tilde{\Phi}_i + \varphi_i) + r \qquad \text{in } \Omega \times ]0, T[, \tag{6.7}$$

$$\frac{d}{dt} p_i = \tilde{\Phi}_i(E_d^t, E, \theta_d^t, \theta, \theta', \nabla\theta, p) + \varphi_i \qquad i = 1, ..., m-1, \text{ in } \Omega \times ]0, T[, \tag{6.8}$$

$$E_{TRIP}(t) = \frac{3}{2} \sum_{i=1}^{m} K_i \int_0^t \Psi_i'(p_i)\, p_i'\, H(p_i')\, \tau^*\, ds, \tag{6.9}$$

$$\det F_{TRIP} = 1 \qquad \text{in } \Omega \times ]0, T[, \tag{6.10}$$

$$S = 2\mu\, C_{TRIP}^{-1} (E - E_{in})\, C_{TRIP}^{-1} + \lambda\, \operatorname{tr}(F_{TRIP}^{-T} (E - E_{in})\, F_{TRIP}^{-1})\, C_{TRIP}^{-1} +$$
$$+ \delta\, C_{TRIP}^{-1} [(E - E_{in})\, C_{TRIP}^{-1}]^2 - (\det F)\, \{ 3K\alpha\, (\theta - \theta_0) + K \frac{\rho_0 - \rho}{\rho} \}\, C^{-1}, \tag{6.11}$$

sowie

$$E = \frac{1}{2} (\nabla u + \nabla u^T + \nabla u^T\, \nabla u), \qquad E_{TRIP} = \frac{1}{2} (F_{TRIP}^{T}\, F_{TRIP} - I), \tag{6.12}$$
$$E_{te} = E - E_{TRIP}, \qquad C_{TRIP} = 2\, E_{TRIP} + I, \qquad C = 2\, E + I.$$

Gesucht sind die Verschiebungen $u$, die Temperatur $\theta$, die Phasenanteile $p$, sowie das Tensorfeld $F_{TRIP}$.
Für $u$ und $\theta$ sind die üblichen Anfangs- und Randwerte, für den Phasenvektor $p$ der Anfangswert hinzuzufügen. Der Anfangswert für $F_{TRIP}$ ist identisch null und folgt aus dem Modell, da die Referenzkonfiguration ohne plastische Verformungen angenommen wird.

Gilt speziell $F_{TRIP}(t) = 0$ für alle Zeiten, so folgen aus den obigen Gleichungen (6.6) – (6.12) die Gleichungen der Thermoelastizität mit Phasenumwandlungen (vgl. [Wol00]).
In [Wol02b] wurden nach Linearisierungen und anderen Vereinfachungen des Systems (6.6) – (6.12) ein Modell zur Beschreibung eines Abschreckversuchs erhalten und Simulationen durchgeführt.

**7. Bemerkungen zu Modellen für Phasenumwandlungen**

Ein differenziertes Eingehen auf die verschiedenen vorhandenen Modelle für Phasenumwandlungen im Stahl ist an dieser Stelle nicht möglich. Wir verweisen exemplarisch auf [Leb84, 85], [Hou86], [Den83, 97], [Mit92, 02], [Lar95] sowie auf [Hun02] für einen Vergleich einiger Umwandlungsmodelle beim Abkühlen des Stahls 100Cr6 sowie auf eine ausführliche Zusammenstellung wichtiger Umwandlungsmodelle in [Wol02c].
Wir zeigen an einem Beispiel die Integration eines gängigen Umwandlungsmodell in das oben entwickelte allgemeine kontinuumsmechanische Konzept. Dazu wird die idealisierte Situation betrachtet, in der nur die beiden Phasen Austenit und Perlit auftreten. Deren Volumenanteile seien entsprechend mit $p_1$ und $p_2$ bezeichnet.
Für die Umwandlung von Austenit zu Perlit gilt bei konstanter Temperatur die Johnson-Mehl-Avrami-Gleichung

$$(7.1) \qquad p_2'(x,t) = (\overline{p}_2(\theta) - p_2(x,t))\,\frac{n_2(\theta)}{\tau_2(\theta)}\,[\,-\ln(1 - p_2(x,t)\,\overline{p}_2(\theta)^{-1})\,]^{1-\frac{1}{n_2(\theta)}} \qquad \text{in } \Omega\times]0,T[$$

Hierbei ist $\overline{p}_2(\theta)$ der von der Temperatur $\theta$ abhängige Gleichgewichtsanteil von Perlit, $n_2$ und $\tau_2$ sind temperaturabhängige Materialparameter mit $n_2(\theta) \geq 1$ (s. z.B. [Hun99]). Aus Gründen der Übersichtlichkeit wurden in (7.1) die Orts- und Zeit-Abhängigkeit unterdrückt.
Für nichtisotherme Abkühlvorgänge wurde in [Hun99] die Formel (1) erweitert zu

$$(7.2) \qquad p_2'(x,t) = (\overline{p}_2(\theta) - p_2(x,t))\,\frac{n_2(\theta)}{\tau_2(\theta)}\,[\,-\ln(1 - p_2(x,t)\,\overline{p}_2(\theta)^{-1})\,]^{1-\frac{1}{n_2(\theta)}}\; f_2(\theta,\theta').$$

Dabei hat $f_2$ (mit $f_2(\theta, 0) = 1$) eine Korrekturfunktion, da ohne $f_2$ (7.2) nur für konstantes $\theta$ gilt.
Die Gleichung (7.2) gilt, falls die Temperatur $\theta$ unterhalb der Austenit-Starttemperatur $\theta_a$ liegt, und falls der Gleichgewichtsanteil des Perlits noch nicht erreicht ist. Daher muß (7.2) erweitert werden zu

$$(7.3) \qquad p_2'(x,t) = \frac{n_2(\theta)}{\tau_2(\theta)}\,[\,-\ln(1 - p_2(x,t)\,\overline{p}_2(\theta)^{-1})\,]^{1-\frac{1}{n_2(\theta)}}\; f_2(\theta,\theta')\,\max\{\,\overline{p}_2(\theta) - p_2(x,t), 0\}\,H(\theta_a - \theta(t))$$

Die Terme mit dem Maximum und der Heaviside-Funktion übernehmen also eine Schalterfunktion.
Die Gleichung (7.3) ist nicht zur gleichzeitigen Beschreibung der Rückumwandlung von Perlit zu Austenit geeignet, falls $\theta$ die Start-Temperatur $\theta_a$ übertrifft.
Die Umwandlung von Perlit zu Austenit verläuft auf gleicher Grundlage wie die von Austenit zu Perlit - mit eigenen Materialparametern. Somit können wir für die Bildung von Austenit aus Perlit schreiben

$$(7.4) \qquad p_1'(x,t) = \frac{n_1(\theta)}{\tau_1(\theta)}\,[\,-\ln(1 - p_1(x,t)\,\overline{p}_1(\theta)^{-1})\,]^{1-\frac{1}{n_1(\theta)}}\; f_1(\theta,\theta')\,\max\{\,\overline{p}_1(\theta) - p_1(x,t), 0\}\,(1 - H(\theta_a - \theta(t))).$$

Aus (7.3) und (7.4) erhalten wir für das angenommene Zweiphasen-Modell (Austenit $\leftrightarrow$ Perlit) eine Beschreibung, die zu (4.35), (4.39) konsistent ist:

$$\begin{aligned}(7.5) \qquad p_1'(x,t) = {}& \frac{n_1(\theta)}{\tau_1(\theta)}\,[\,-\ln(1 - p_1(x,t)\,\overline{p}_1(\theta)^{-1})\,]^{1-\frac{1}{n_1(\theta)}}\; f_1(\theta,\theta')\,\max\{\,\overline{p}_1(\theta) - p_1(x,t), 0\}\,(1 - H(\theta_a - \theta(t))) + \\ & -\frac{n_2(\theta)}{\tau_2(\theta)}\,[\,-\ln(1 - p_2(x,t)\,\overline{p}_2(\theta)^{-1})\,]^{1-\frac{1}{n_2(\theta)}}\; f_2(\theta,\theta')\,\max\{\,\overline{p}_2(\theta) - p_2(x,t), 0\}\,H(\theta_a - \theta(t))\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}(7.6) \qquad p_2'(x,t) = {}& \frac{n_2(\theta)}{\tau_2(\theta)}\,[\,-\ln(1 - p_2(x,t)\,\overline{p}_2(\theta)^{-1})\,]^{1-\frac{1}{n_2(\theta)}}\; f_2(\theta,\theta')\,\max\{\,\overline{p}_2(\theta) - p_2(x,t), 0\}\,H(\theta_a - \theta(t)) + \\ & -\frac{n_1(\theta)}{\tau_1(\theta)}\,[\,-\ln(1 - p_1(x,t)\,\overline{p}_1(\theta)^{-1})\,]^{1-\frac{1}{n_1(\theta)}}\; f_1(\theta,\theta')\,\max\{\,\overline{p}_1(\theta) - p_1(x,t), 0\}\,(1 - H(\theta_a - \theta(t)))\end{aligned}$$

Die zugehörigen Anfangsbedingungen lauten

$$(7.7) \qquad p_1(0) = p_{01}, \qquad p_2(0) = p_{02},$$

wobei die Beziehungen (2.1) und (2.2), also

$$(7.8) \qquad p_{01} + p_{02} = 1, \qquad p_{01} \geq 0, \qquad p_{02} \geq 0.$$

gelten müssen. Aus (7.5) – (7.8) folgt die Bedingung (2.1) für den Phasenvektor $p = (p_1, p_2)$ zu beliebigen Zeitpunkten $t \geq 0$.
Die Gleichungen (7.5), (7.6) berücksichtigen nicht den oft vernachlässigten Einfluß der Spannungen auf die Phasentransfomationen, der bei größeren anliegenden Zug- oder Druckspannungen beträchtlich sein kann (Vgl. z.B. [Ahr00, 02] für experimentelle Untersuchungen sowie [Ino85] für Ansatz und Simulation). Eine derartige Abhängigkeit könnte dadurch modelliert werden, daß die Materialfunktionen in (7.5.), (7.6) auch von der Norm des Cauchyschen Spannungstensors abhängen.

## 8. Abschließende Bemerkungen

Ausgehend von einem makroskopischen Modell der Thermo-Elastoplastizität, das auf dem Konzept einer spannungsfreien Zwischenkonfiguration beruht, wurde ein Modell für thermo-elastisch-plastisches Materialverhalten mit Phasenumwandlungen entwickelt, um das komplexe Verhalten von Stahl zu modellieren. Dabei wird die Zwischenkonfiguration durch plastische Effekte generiert, in dieser Arbeit aus Gründen der Übersichtlichkeit allein durch die der Umwandlungsplastizität.

Aus der Clausius-Duhem-Ungleichung wurden Vereinfachungen der Materialgesetze erhalten. Nach weiteren Annahmen ergaben sich die Grundgleichungen für das Materialverhalten von Stahl unter Berücksichtigung von Phasenumwandlungen und isotroper Umwandlungsplastizität. Diese stellen ein gekoppeltes Rand-Anfangswert-Problem von gewöhnlichen und partiellen Differentialgleichungen zur Bestimmung der Felder der Verschiebungen, der Temperatur und der Phasenanteile dar.

Der modulare Aufbau des erhaltenen Modells gestattet die Einbindung von unterschiedlichen Ansätzen sowohl für die Phasenumwandlungen als auch für die Umwandlungsplastizität.

## Anhang: Mathematische Bezeichnungen

(1) Eine nichtleere, offene und zusammenhängende Menge $\Omega\subset\mathbb{R}^n$ heißt Gebiet. Lipschitz-Stetigkeit des Gebietes oder seines Randes $\partial\Omega$ bedeutet, daß der Rand lokal Graph einer Lipschitz-stetigen Funktion ist. In diesem Falle existiert in fast allen Randpunkten die äußere Normale und der Gaußsche Integralsatz gilt. Damit ist die Herleitung der Bilanzgleichungen der Kontinuumsmechanik (z.B. (2.9), (2.11)) für diese Körper gesichert.

(2) Sei $\Omega\subset\mathbb{R}^n$ ein beschränktes Gebiet. Mit $C(\bar{\Omega})$ bezeichnen wir die Menge der auf $\bar{\Omega}$ stetigen reellwertigen Funktionen, mit $C^1(\bar{\Omega})$ die Menge der in $\Omega$ stetig differenzierbaren Funktionen, deren erste partielle Ableitungen auf $\Omega$ gleichmäßig stetig (und damit auf $\bar{\Omega}$ stetig fortsetzbar) sind. Unter $[C(\bar{\Omega})]^m$ bzw. $[C^1(\bar{\Omega})]^m$ verstehen wir die (Vektor-) Funktionen von $\bar{\Omega}$ in $\mathbb{R}^m$ $(m = 1, 2, ...)$, deren Komponenten jeweils aus $C(\bar{\Omega})]$ bzw. $C^1(\bar{\Omega})]$ sind.

(3) Seien $[a, b]\subset\mathbb{R}$ ein abgeschlossenes Intervall und $V$ ein normierter Raum.

- Mit $C([a, b]; V)$ wird die Menge der auf $[a, b]$ stetigen Funktionen mit Werten in $V$ bezeichnet.
- Eine Funktion $f : [a, b] \to V$ heißt stückweise stetig auf $[a, b]$, falls eine endliche Zerlegung $a = x_0 < x_1 < ... < x_m = b$ von $[a, b]$ existiert, so daß $f$ auf jedes abgeschlossene Teilintervall $[x_{i-1}, x_i]$ $(i = 1, ..., m)$ stetig fortsetzbar ist.

Wir schreiben dann $f\in C_{pw}([a, b]; V)$.

- Eine Funktion $f : [a, b] \to V$ heißt stückweise stetig differenzierbar auf $[a, b]$, falls $f\in C([a, b]; V)$ und $f'\in C_{pw}([a, b]; V)$. Wir schreiben dann: $f\in C^1_{pw}([a, b]; V)$.

Mit $SO(n)$ sei die Menge der Orthogonalmatrizen über $\mathbb{R}^n$ mit positiver Determinante bezeichnet.

## Literatur


[Ahr00] Ahrens, U., Besserdich, G., Maier, H. J.: Spannungsabhängiges bainitisches und martensitisches Umwandlungsverhalten eines niedrig legierten Stahl, HTM 55, 329-338, 2000

[Ahr02] Ahrens, U., Besserdich, G., Maier, H. J.: Sind aufwändige Experimente zur Beschreibung der Phasenumwandlungen von Stählen noch zeitgemäß?, HTM 57, 99-105, 2002

[Ber89] Bertram, A.: Axiomatische Einführung in die Kontinuumsmechanik, BI-Wissenschaftsverlag, Mannheim, 1989

[Ber92] Bertram, A.: Description of Finite Inelastic Deformations, Proceedings of MECAMAT92 International Seminar of Multiaxial Plasticity, Sept. 1-4 1992 in Cachan, France. Eds.: Benallal, A., Billardon, R., Marquis, D., 821-835, 1992

[Ber98] Bertram, A.: An alternative approach to finite plasticity based on material isomorphisms, Intern. J. of Plasticity 52, 352-374, 1998

[Ber99] Bertram, A.: The Dissipation-Inequality of Rate-independent Thermoplasticity, Z. Angew. Math. Mech. 79, S195-S198, 1999

[Ber02] Bertram, A.: Finite thermoplasticity based on isomorphisms, Institut für Mechanik, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Preprint IFME 02/1, submitted to IJP, 2002

[Bes93] Besserdich, G.: Untersuchungen zur Eigenspannungs- und Verzugsbildung beim Abschrecken von Zylindern aus den Stählen 42CrMo4 und Ck45 unter Berücksichtigung der

Umwandlungsplastizität, Universität Karlsruhe, Dissertation, 1993

[Bes94] Besserdich, G., Scholtes, B., Müller, H., Macherauch, E.: Consequences of transformation plasticity on the development of residual stresses and distorsions during martensitic hardening of SAE 4140 steel cylinders, Steel Res. 65 (1) 41 –46, 1994

[Dac02] Dachkovski, S., Böhm, M.: A Note on Finite Thermoplasticity with Phase Changes, to appear: Berichte aus der Technomathematik, Universität Bremen, Germany, 2002

[Col63] Coleman, B. D., Noll, W.: The Thermodynamics of Elastic Materials with Heat Conduction and Viscosity, Arch. Rat. Mech. Ana. 13, pp. 167 – 178, 1963

[Col64] Coleman, B. D.: Thermodynamics of Materials with Memory, Arch. Rat. Mech. Ana. 17, pp. 1 – 46, 1964

[Dau90] Dautray, R., Lions, J.-L.: Mathematical Analysis and Numerical Methods for Science and Technology, Vol.1, Springer-Verlag, 1990

[Den83] Denis, S., Simon, A., Beck, G.: Analysis of the thermomechanical behaviour of steel during martensitic quenching and calculation of internal stresses, In Macherauch, E., Hauk, V., Herausgeber: Eigenspannungen, Entstehung – Messung – Bewertung, Int. Eigenspannungstagung Karlsruhe 1983, DGM Vortragsband, S. 211-238.

[Den97] Denis, S.: Considering Stress-Phase Transformation Interactions in the Calculation of Heat Treatment Residual Stresses, in Mechanics of Solids with Phase Changes, Editors: Berveilleir, M., Fischer, F. D., Springer Wien, New York, 1997

[Fis96] Fischer, F. D., Sun, Q. P., Tanaka, K.: Transformation-induced plasticity, (TRIP) Appl. Mech. Rev. 49, pp. 317 – 364, 1996

[Fis99] Fischer, F. D., Reisner, G., Werner, E., Tanaka, K., Cailletaud, G., Antretter, T.: A new view on transformation induced plasticity (TRIP) to be published in Int. J. Plasticity, 1999

[Fuh99] Fuhrmann, J., Hömberg, D.: Numerical simulation of the surface hardening of steel, International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow, Vol. 9 No 6, 1999, pp. 705-724, MCB University Press 0961-5539, 1999

[Hau77] Haupt, P.: Viskoelastizität und Plastizität. Springer-Verlag, 1977

[Hau98] Haupt, P.: Zur thermomechanischen Modellierung der Plastizität, ZAMM 78 (S2), 459-462, 1998

[Hau00] Haupt, P.: Continuum Mechanics and Theorie of Materials, Berlin, Heidelberg, Springer-Verlag, 2000

[Höm96] Hömberg, D.: A numerical simulation of the jominy end-quench test, Acta mater, Vol. 44, No 11, pp4375-4385, 1996

[Höm97] Hömberg, D., Sokolowski, J.: Optimal control of laser hardening, Preprint WIAS Berlin, Nr. 315, 1997

[Höm99a] Hömberg, D., Khludnev, A. M., Sokolowski, J.: On an equilibrium problem for a cracked body with electrothermoconductivity, Preprint WIAS Berlin, Nr. 476, 1999

[Höm99b] Hömberg, D., Sokolowski, J.: Optimal shape design of inductor coils for surface hardening, Preprint WIAS Berlin, Nr. 521, 1999

[Hou86] Hougardy, H. P., Yamazaki, K.: An imptoved calculation of the transformation of steel, steel research 57 (1986) 9, 466-471

[Hun99] Hunkel, M., Lübben, T., Hoffmann, F., Mayr, P.: Modellierung der bainitischen und perlitischen Umwandlung bei Stählen, HTM6, 1999

[Hun02] Hunkel, M., Schmidt, A., Wolff, M., Böhm, M.: Vergleich einiger Umwandlungsmodelle ...

[Ino85] Inoue, T., Wang, Z.: Coupling between stress, temperature, and metallic structures during processes involving phase transformations, Mat. Sci. Tech. 1 pp. 845 – 850, 1985

[Ino89] Inoue, T., Wang, Z., Miyao, K.: Quenching stress of carburized steel gear wheel, ICRS2 Beck, G., Denis, S., Simon, A.(eds) Elsevier Appl. Sci., London, New York, pp. 606 – 611, 1989

[Lar95] Larsson, S., Mangard, M.: Determination of phase transformation kinetics when tempering martensitic hardened low alloy steels, LiTH-IKP-Ex-1234, Institut of Technology, Department of

Mechanical Engineering, Linköping, Sweden, 1995

[Leb84] Leblond, J. B., Devaux, J.: A new kinetic model for anisothermal metallurgical transformations in steels including effect of austenite grain size, Acta Met. 32, pp. 137 – 146, 1984

[Leb85] Leblond, J. B., Mottet, G., Devaux, J., Devaux, J. C.: Mathematical models of anisothermal phase transformations in steels and predicted plastic behaviour, Mat. Sci. Tech. 1, pp. 815 – 822, 1985

[Leb89a] Leblond, J. B., Devaux, J., Devaux, J. C.: Mathematical modelling of transformation plasticity in steels. I: Case of ideal-plastic Phases, Int. J. Plasticity 5, pp. 551 – 572, 1989

[Leb89b] Leblond, J. B.: Mathematical modelling of transformation plasticity in steels. II: Coupling with strain hardening phenomena, Int. J. Plasticity 5, pp. 573 – 591, 1989

[Mar83] Marsden, J. E., Hughes, J. R.: Mathematical foundations of elasticity, Engelwood Cliffs, N. J.: Prentice-Hall, 1983

[Mie93] Miehe, C.: Kanonisch Modelle Multiplikativer Elasto-Plastizität. Thermodynamische Formulierung und numerische Implementation, Forschungs- und Seminarberichte aus dem Bereich Mechanik der Universität Hannover, Nr. F 93/1, 1993

[Mit87] Mitter, W.: Umwandlungsplastizität und ihre Berücksichtigung bei der Berechnung von Eigenspannungen, Materialkundlich-technische Reihe 7, Gebr. Borntraeger, Berlin, Stuttgart, 1987

[Mit92] Mittemeijer, E. J.: Review – Analysis of the kinetics of phase transformations, Journal of Materials science 27, 3977-3987, 1992

[Mit02] Mittemeijer, E. J., Sommer, F.: Solid state phase transformation kinetics: a modular transformation model, Z. für Metallkunde 93 (9002) 5, 352-361

[Mül73] Müller, I.: Thermodynamik – Grundlagen einer Materialtheorie, Bertelsmann Universitätsverlag, Düsseldorf, 1973

[Nol73] Noll, W.: Lectures on the foundations of continuum mechanics and thermodynamics, Arch, Rat. Mech. Ana. 52, pp. 62 – 92, 1973

[Obe99] Oberste-Brandenburg, C.: Ein Materialgesetz zur Beschreibung der Austenit-Martensit Phasentransformation unter Berücksichtigung der transformationsinduzierten Plastizität, Ruhr-Universität Bochum, Dissertation, 1999

[Pie00a] Pietzsch, R.: Simulation und Minimierung des Verzuges von Stahlprofilen bei der Abkühlung, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Dissertation, 2000

[Pie00b] Pietzsch, R.: Simulation des Abkühlverzuges von Stahlprofilen, Techniche Mechanik, Bd. 20, Heft 3, 265-274, 2000

[Ron00] Ronda, J., Oliver, G. J.: Consistent thermo-mechano-metallurgical model of welded steel with unified approach to derivation of phase evolution laws and transformation-induced plasticity, Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. 189 (2000) 361-417

[Sil97] Silhavý, M.: The Mechanics and Thermodynamics of Continuous Media, Springer-Verlag, 1997

[Sjö85] Sjöström, S.: Interactions and constitutive models for calculating quench stresses in steel, Mat. Sci. Tech. 1, pp. 823 – 829, 1985

[Slu92] Sluzalec, A.: Introduction to nonlinear thermomechanics – theory and finite element solution, Springer-Verlag, London, 1992

[Tan85] Tanaka, S., Sato, Y.: A mechanical view of transformation-induced plasticity, Ingenieur-Archiv 55 147-155, 1985

[Tin73] Ting, T. W.: Topics in the mathematical theory of plasticity, in Handbuch der Physik, VIa/3, Springer-Verlag, 1973

[Tru66] Truesdell, C. A.: The elements of continuum mechanics, Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, 1966

[Vog01] Vogelsang, H.: Parameteridentifikation für ein selbstkonsistentes Stoffmodell unter Berücksichtigung von Phasentransformationen, Mitteilungen aus dem Institut für Mechanik, Ruhr-Universität Bochum, Germany, 2001

[Wan85] Wang, Z., Inoue, T.: Viscoplastic constitutive relation incorporating phase transformation – applying to welding, Mat. Sci. Tech. 1 pp. 899 – 903, 1985

[Wil98] Wilmanski, K.: Thermomechanics of Continua, Springer-Verlag, 1998

[Wol00] Wolff, M., Böhm, M., Bänsch, E., Davis, D.: Modellierung der Abkühlung von Stahlbrammen unter Berücksichtigung von Phasenumwandlungen und mechanischen Deformationen, Berichte aus der Technomathematik, FB 3, Universität Bremen, Report 00-07, 2000

[Wol02a] Wolff, M., Böhm, M.: Zur Modellierung der Thermoelasto-Platizität mit Phasenumwandlungen bei Stählen sowie der Umwandlungsplastizität, Berichte aus der Technomathematik, FB 3, Universität Bremen, Report 02-01, 2002

[Wol02b] Wolff, M., Hunkel, M., Böhm, M.: Phasenumwandlungen im Stahl – Übersicht und Einordnung in die Kontinuumsmechanik, erscheint demnächst, 2002

[Wol02c] Wolff, M., Schmidt, A., Böhm, M.: Thermo-mechanical behaviour of steel including phase transitions and transformation-induced plasticity, Proceedins of the Annual GAMM Meeting 2002, to appear

**Anschrift der Autoren:**

Michael Wolff: Universität Bremen, FB 3 (Mathematik), Zentrum für Technomathematik
Postfach 330440, D-28334 Bremen, Tel. +49(0)421/218-7175, mwolff@math.uni-bremen.de

Michael Böhm: Universität Bremen, FB 3 (Mathematik), Zentrum für Technomathematik
Postfach 330440, D-28334 Bremen, Tel. +49(0)421/218-9491, mbohm@math.uni-bremen.de