

**UNIVERSITÄT  
BREMEN**

# **Zentrum für Technomathematik**

Fachbereich 3 – Mathematik und Informatik



## **Zur Modellierung der Thermoelasto-Plastizität mit Phasenumwandlungen bei Stählen sowie der Umwandlungsplastizität**

**Michael Wolff**

**Michael Böhm**

Report 02-01

**Berichte aus der Technomathematik**

**Report 02-01**

**Februar 2002**

# **Zur Modellierung der Thermoelasto-Plastizität mit Phasenumwandlungen bei Stählen sowie der Umwandlungsplastizität**

Michael Wolff, Michael Böhm <sup>1</sup>

## **Zusammenfassung:**

Ziel ist es, das mechanische und thermische Verhalten von Stahl unter Einbeziehung von Phasenumwandlungen im Rahmen der Kontinuumsmechanik zu modellieren. In ein allgemeines Modell der Thermoelasto-Plastizität, das auf der Annahme einer lokal spannungsfreien Zwischenkonfiguration beruht, sollen Phasenumwandlungen integriert werden. Aus der Clausius-Duhem-Ungleichung werden Folgerungen für die Materialgesetze hergeleitet.

Die Umwandlungsplastizität (TRIP), die von der herkömmlichen Plastizität verschieden ist, läßt sich ebenfalls über das Konzept der Zwischenkonfiguration modellieren.

Das vorgeschlagene Modell gestattet die Einbindung unterschiedlicher Modelle für die Phasenumwandlungen wie auch für die Umwandlungsplastizität.

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

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

## **Inhalt:**

1. Kopplung von mechanischem, thermischem und Umwandlungsverhalten
  2. Thermoelasto-Plastizität mit Phasenumwandlungen
    - 2.1. Vorbereitungen
    - 2.2. Allgemeines Konzept
    - 2.3. Konsequenzen aus der Clausius-Duhem-Ungleichung
    - 2.4. Isotropes Modell mit Volumenerhalt der Zwischenkonfiguration
    - 2.5. Klassische Plastizität
    - 2.6. Umwandlungsplastizität
    - 2.7. Umwandlungsplastizität und klassische Plastizität
  3. Zur Modellierung von Phasenumwandlungen im Stahl
- Ergänzung: Herleitung des Terms für die Umwandlungsspannungen

---

<sup>1</sup> Universität Bremen, FB 3 (Mathematik), Zentrum für Technomathematik, AG Math. Modellierung u. part. DG, Postfach 330440, D-28334 Bremen, Tel. +49(0)421/218-7175, Fax ...-9406, Sekr. ...-9405 mbohm@math.uni-bremen.de, mwolff@math.uni-bremen.de

## **1. Phänomenologische Beschreibung der Kopplung von mechanischem, thermischem und Umwandlungsverhalten**

Wie Experimente und theoretische Untersuchungen zeigen, sind die mechanischen Größen (Verzerrung, Spannung) mit der Temperatur und der Evolution der Phasen beim Stahl wechselseitig miteinander gekoppelt. Die chemische Zusammensetzung der Legierung, besonders der Kohlenstoffgehalt, und weitere Parameter wie z.B. Korngrößen beeinflussen zusätzlich die vorher genannten Größen. Durch Seigerung wird oft die chemische Zusammensetzung des Werkstückes während der Herstellung oder Bearbeitung inhomogen.

Wir verweisen auf die sehr umfangreiche Literatur zu diesem Problemkreis [Den83], [Leb85], [Ino85], [Wan85], [Sjö85], [Ino89], [Leb89a], [Leb89b], [Bes93], [Fis99], [Obe99], [Pie00a, b] und die dort zitierten Quellen.

Die Wechselwirkungen zwischen Temperatur, Phasenumwandlungen und mechanischem Verhalten in Stahl können wie folgt aufgelistet werden (vgl. z.B. [Leb85], [Sjö85]):

**(i)** Die Temperatur und ihre Geschichte beeinflussen die Phasentransformationen wesentlich (s. z.B. [Hun02]).

**(ii)** Die Phasentransformationen wirken auf die Temperatur zurück über die latenten Wärmen und die Phasenabhängigkeit der thermischen Größen (Spezifische Wärme und Wärmeleitfähigkeit).

**(iii)** Die Temperatur beeinflusst das mechanische Verhalten über die Wärmeausdehnung und die Temperaturabhängigkeit der mechanischen Größen (Elastizitätsmodul, Poisson-Zahl, Fließgrenze, ...).

**(iv)** Das mechanische Verhalten wirkt über die Dissipation auf die Temperatur zurück.

**(v)** Die Phasentransformationen wirken auf das mechanische Verhalten über Umwandlungsspannungen, Phasenabhängigkeit der mechanischen Größen und Umwandlungsplastizität ein.

**(vi)** Das mechanische Verhalten (Spannungen) beeinflusst die Phasenumwandlungen (s. z.B. [Ahr00]).

Generell treten alle Wechselwirkungen auf, jedoch hat ihr Einfluß bei den verschiedenen Prozessen (z.B. Abkühlen oder Walzen) unterschiedliches Gewicht.

Es ist somit von großem Interesse, zu untersuchen, welche Wechselwirkungen bei bestimmten Prozeßabläufen vernachlässigbar sind, um die Modelle nach Möglichkeit zu vereinfachen. Diese Frage ist nicht von der Mathematik allein zu entscheiden. Letztlich müssen sich die in Experimenten und Anwendungen gemessenen Daten durch die entwickelten Modelle in hinreichender Übereinstimmung vorausberechnen lassen.

Beispielsweise ist der in (iv) angesprochene mechanische Einfluß auf die Temperatur im Vergleich zu Wärmeleitung und Einfluß der latenten Wärmen gering, wenn nicht von außen in größerem Maße mechanische Energie - wie etwa beim Walzen - zugeführt wird.

Für spezielle Anwendungen und Simulationen zu gekoppelten Problemen verweisen wir auf die Arbeiten [Höm96], [Fuh99], [Obe99], [Pie00a, b], [Wol00] 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]).

## **2. Thermoelasto-Plastizität mit Phasenumwandlungen**

Im Rahmen der rationalen Thermomechanik (z.B. [Col64], [Tru66], [Nol73], [Mül73], [Hau77], [Slu92], [Sil97], [Hau00]) soll ein recht allgemeines Modell für das thermomechanische Verhalten von (Fest-) Körpern unter Berücksichtigung von Phasenumwandlungen (im Sinne von koexistierenden Mischungen ohne Diffusion) entwickelt werden. Sukzessive werden Spezialisierungen vorgenommen.

Unter der Annahme, daß der thermomechanische Prozeß so abläuft, daß zu keiner Zeit der thermoelastische Bereich des Materialverhaltens verlassen wird, scheint ein thermoelastisches Modell mit Berücksichtigung von Phasenumwandlungen gerechtfertigt. Auf dieser Grundlage wurden in [Wol00] ein Abschreckprozeß für eine Stahlbramme modelliert und Berechnungen für Temperatur, Phasenanteile und Verschiebungen durchgeführt.

Vielfach treten im realen Prozeßverlauf plastische Verformungen auf, wobei die plastischen Eigenschaften nicht nur von der Temperatur, sondern auch von den Phasen abhängen. Es werden also thermoelasto-plastische Modelle mit Berücksichtigung von Phasenumwandlungen benötigt.

Das physikalisch besondere Phänomen der Umwandlungsplastizität läßt sich vom mathematischen Standpunkt aus als zusätzliche Plastizität behandeln. Oder, falls die Fließgrenzen der einzelnen Phasen nicht erreicht werden, kann die Umwandlungsplastizität allein über die Zwischenkonfiguration modelliert werden.

## 2.1. Vorbereitungen

Es werden bekannte, in der Folge von uns benötigte Begriffe bereitgestellt.

**Definition 2.1.1.** Seien  $[a, b] \subset \mathbb{R}$  ein abgeschlossenes Intervall und  $V$  ein normierter Raum.

(i) Eine Funktion  $f : [a, b] \rightarrow V$  heißt stückweise stetig auf  $[a, b]$ , falls eine endliche Zerlegung  $a = x_0 < x_1 < \dots < x_m = b$  von  $[a, b]$  existiert, so daß  $f$  auf jedes abgeschlossene Teilintervall  $[x_{i-1}, x_i]$  ( $i = 1, \dots, m$ ) stetig fortsetzbar ist.

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

(ii) Eine Funktion  $f : [a, b] \rightarrow V$  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:  $f \in C_{pw}^1([a, b]; V)$

Für unsere Zwecke genügt die folgende Definition eines Körpers, in der dieser mit seiner Referenzkonfiguration identifiziert wird. Für allgemeinere Darstellungen sei z.B. auf [Sil97], [Wil98], [Hau00] verwiesen. Eine axiomatische Darstellung der Kontinuumsmechanik auf der Basis der Theorie differenzierbarer Mannigfaltigkeiten findet sich in [Ber89].

Für ein  $T > 0$  sei  $J := [0, T]$  ein (Zeit-) Intervall.

**Definition 2.1.2.** Die Abschließung  $\bar{\Omega}$  eines beschränkten Gebietes  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$  ( $n = 2$  oder  $n = 3$ ) (d.h., einer offenen und zusammenhängenden Menge) mit Lipschitz-stetigem Rand  $\partial\Omega$  nennen wir **Körper** (in seiner Referenzkonfiguration).

**Definition 2.1.3.** Sei  $\bar{\Omega}$  ein Körper.

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

- a)  $\forall t \in J$  ist  $\chi(\cdot, t) : \bar{\Omega} \rightarrow \chi(\bar{\Omega}, t)$  bijektiv;
- b)  $\chi \in C_{pw}^1(J; [C^1(\bar{\Omega})]^n)$ ,
- c)  $\forall t \in J$  besitzt die Jacobi-Matrix  $\nabla \chi(\cdot, t) : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}^{n^2}$  eine positive Determinante.

$\nabla \chi$  wird gewöhnlich **Deformationsgradient** genannt und mit  $F$  bezeichnet.

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

- a)  $\theta \in C_{pw}^1(J; C^1(\bar{\Omega}))$ .
- b)  $\forall t \in J, \forall \xi \in \bar{\Omega} : \theta(\xi, t) > 0$ .

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

- a)  $p \in C_{pw}^1(J; [C^1(\bar{\Omega})]^m)$ .
- b) Für alle  $(\xi, t) \in \bar{\Omega} \times J$  gelten die folgende Bilanz sowie die Nichtnegativitätsbedingungen:

$$(2.1.1) \quad \sum_{i=1}^m p_i = 1,$$

$$(2.1.2) \quad p_i \geq 0 \quad \text{für } i = 1, \dots, m.$$

(iv) Ein Tripel  $(\chi, \theta, p)$  mit  $\chi$  Bewegung,  $\theta$  Temperatur und  $p$  Phasenvektor des Körpers  $\bar{\Omega}$  heißt **thermokinertischer Prozeß mit Phasenumwandlungen** auf  $\bar{\Omega} \times J$ .

Sinngemäß verstehen wir einen thermokinertischen Prozeß auf  $\bar{\Omega} \times J_1$  mit  $J_1 \subset J$ .

**Bemerkung 2.1.4.** Ein thermokinertischer 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 2.1.3.(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 (2.1.16) zu ziehenden Schlußfolgerungen (Satz 2.3.3.) gewählt. Für die Bilanzgleichungen (2.1.10) – (2.1.16) sind hingegen stärkere Glattheitsvoraussetzungen erforderlich.

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

$$(2.1.3) \quad x = \chi(\xi, t) \quad \xi \in \bar{\Omega}, \quad t \in J.$$

Das Bild  $x$  des Körperpunktes  $\xi$  zum Zeitpunkt  $t$  wird Raumpunkt genannt.

Im Falle ihrer Existenz nennen wir die erste partielle Ableitung von  $\chi$  nach  $t$

Geschwindigkeit des (Körper)-Punktes  $\xi \in \bar{\Omega}$  und die zweite partielle Ableitung nach  $t$  Beschleunigung:

$$(2.1.4) \quad \dot{x}(\xi, t) := \frac{\partial}{\partial t} \chi(\xi, t), \quad \ddot{x}(\xi, t) := \frac{\partial^2}{\partial t^2} \chi(\xi, t).$$

In der üblichen Weise werden die folgenden Größen definiert (für  $(\xi, t) \in \bar{\Omega} \times J$ ):

$$(2.1.5) \quad u(\xi, t) := \chi(\xi, t) - \xi \quad \text{Verschiebung(svektor),}$$

$$(2.1.6) \quad F(\xi, t) := \nabla_{\xi} \chi(\xi, t) \quad \text{Deformationsgradient,}$$

$$(2.1.7) \quad C := F^T F, \quad (B = F F^T) \quad \text{rechter (linker) Cauchy-Green-Tensor,}$$

$$(2.1.8) \quad E := \frac{1}{2} (\nabla u + \nabla u^T + \nabla u^T \nabla u) = \frac{1}{2} (F^T F - I)$$

Greenscher Verzerrungstensor,

$$(2.1.9) \quad \varepsilon := \frac{1}{2} (\nabla u + \nabla u^T)$$

linearisierter (Greenscher) Verzerrungstensor.

Aus den Bilanzen für Impuls, Drehimpuls, Energie und Entropie werden die Bewegungs- und Wärmeleitungsgleichung sowie die Entropiegleichung (Clausius-Duhem-Ungleichung) in der üblichen Weise gewonnen (vgl. z.B. Haupt [Hau00], Wilmanski [Wil98], Silhavy [Sil97], Marsden / Hughes [Mar83], Noll [Nol73], Truesdell [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:

$$(2.1.10) \quad \rho_0(\xi) \frac{d^2 \mathbf{u}}{dt^2}(\xi, t) - \operatorname{div} ((\mathbf{I} + \nabla \mathbf{u}) \mathbf{S}(\xi, t)) = \mathbf{f}(\xi, t) \quad \text{in } \Omega \times ]0, T[,$$

$$(2.1.11) \quad \mathbf{S} = \mathbf{S}^T \quad \text{in } \Omega \times ]0, T[,$$

$$(2.1.12) \quad \rho_0(\xi) \frac{d}{dt} e(\xi, t) + \operatorname{div} \mathbf{q}(\xi, t) = (\mathbf{I} + \nabla \mathbf{u}) \mathbf{S}(\xi, t) \bullet \bullet \nabla \frac{du}{dt} + r(\xi, t) \\ \text{in } \Omega \times ]0, T[,$$

$$(2.1.13) \quad \frac{d}{dt} p_i(\xi, t) = \gamma_i(\xi, t) + \varphi_i(\xi, t) \quad \text{in } \Omega \times ]0, T[,$$

$$(2.1.14) \quad \sum_{i=1}^m \gamma_i(\xi, t) = 0 \quad \text{in } \Omega \times ]0, T[,$$

$$(2.1.15) \quad \sum_{i=1}^m \varphi_i(\xi, t) = 0 \quad \text{in } \Omega \times ]0, T[,$$

$$(2.1.16) \quad - \rho_0(\xi) \frac{d}{dt} \psi(\xi, t) - \rho_0(\xi) \eta(\xi, t) \frac{d}{dt} \theta(\xi, t) + (\mathbf{I} + \nabla \mathbf{u}) \mathbf{S}(\xi, t) \bullet \bullet \nabla \frac{du}{dt} - \frac{1}{\theta} \mathbf{q} \bullet \nabla \theta \geq 0 \\ \text{in } \Omega \times ]0, T[.$$

Hierbei sind:

$\rho_0$  - Dichte im Referenzzustand, also für  $t = 0$  (und somit für  $\theta = \theta_0$ ),  $\mathbf{S}$  - zweiter Piola-Kirchhoff-Spannungs-Tensor,  $\mathbf{f}$  - Volumendichte der äußeren Kräfte,  $r$  - Volumendichte der äußeren Wärmequellen (beide bezogen auf Referenzzustand  $\Omega$ ),  $e$  - Massendichte der inneren Energie,  $\mathbf{q}$  - Wärmestromdichtevektor (alles bezogen auf Lagrangesche Koordinaten),  $\mathbf{I}$  - Einheitstensor,  $\gamma_i$  - (Volumen-)Produktionsdichte der  $i$ -ten Phase,  $\varphi_i$  - äußere Volumenquellendichte 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 2.1.5. (i)** Da wir hier nur Mischungen *ohne* Diffusion betrachten, wie bei der Modellierung von Phasenübergängen in Stahl allgemein üblich, erscheint die

Entropieungleichung (Clausius-Duhem-Ungleichung) in der Form (2.1.16) 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 (2.1.13) 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 (2.1.10), (2.1.12), (2.1.13) wird jeder thermokinetische Prozeß mit Phasenumwandlungen nach Definition 2.1.3. auch zu einem real möglichen. Diese Willkür wird bei der Auswertung der Clausius-Duhem-Ungleichung benötigt (vgl. z.B. [Hau77], [Sil97]).

Verschiedentlich wird der Dissipationsterm in (2.1.12) in anderer Form gebraucht. Es lassen sich die folgenden Beziehungen leicht zeigen.

$$(2.1.17) \quad (I + \nabla u) S(\xi, t) \bullet \nabla \frac{du}{dt} = S(\xi, t) \bullet \frac{d}{dt} E = F S \bullet \frac{d}{dt} F$$

Die Gleichungen bzw. Ungleichungen (2.1.10) – (2.1.16) sowie (2.1.3), (2.1.4) gelten für alle Körper, die koexistierende Mischungen sind und bei denen keine Diffusion stattfindet.

In der Plastizität wird mit einem „endlichen Gedächtnis“ gearbeitet. Daher benötigen wir die Geschichte hier in der folgenden Form.

Für eine Funktion  $v : [0, T] \rightarrow L$  ( $L :=$  linearer Raum) definieren wir die Geschichte (total history [Coleman])  $v^t : [0, T] \rightarrow L$  der Funktion  $v$  für  $t \in [0, T]$  durch

$$(2.1.18) \quad v^t(s) := \begin{cases} v(t - s), & \text{für } 0 \leq s \leq t \\ v(0), & \text{für } t < s \leq T \end{cases}$$

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

$$(2.1.19) \quad v_d^t(s) := v^t(s) - v(t) \quad \text{für } 0 \leq s \leq T.$$

## 2.2. Allgemeines Konzept

Wir gehen von einem Plastizitätsmodell aus, das auf einer lokal spannungsfreien Zwischenkonfiguration (s. z.B. [Hau00]) basiert, und versuchen, die Phasenumwandlungen in dieses Modell zu integrieren.

Zuerst stellen wir die mathematischen Hilfsmittel bereit und geben danach die thermomechanische Interpretation.

**Definition 2.2.1.** Seien  $\chi$  eine Bewegung und  $F = \nabla \chi$  zugehöriger Deformationsgradient eines Körpers  $\bar{\Omega}$  gemäß Definition 2.1.3. sowie

$$(2.2.1) \quad F = \hat{F}_{te} F_{in}$$

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

$$(2.2.2) \quad C_{in} := F_{in}^T F_{in}, \quad B_{in} := F_{in} F_{in}^T,$$

$$(2.2.3) \quad E_{in} := \frac{1}{2} (F_{in}^T F_{in} - I),$$

$$(2.2.4) \quad \hat{E} := F_{in}^{-T} E F_{in}^{-1} \quad (E - \text{Greenscher Verzerrungstensor gemäß (2.1.8)}),$$

$$(2.2.5) \quad \hat{E}_{te} := \frac{1}{2} (\hat{F}_{te}^T \hat{F}_{te} - I),$$

$$(2.2.6) \quad E_{te} := F_{in}^T \hat{E}_{te} F_{in}$$

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

Die mechanische Interpretation und die verbale Bezeichnung der soeben eingeführten Größen erfolgen in der Bemerkung 2.2.3.

**Folgerungen 2.2.2. (i)** Offenbar gilt

$$(2.2.7) \quad E = E_{te} + E_{in}$$

**(ii)** Eine Zerlegung (2.2.1) ist stets möglich, z.B. durch  $\hat{F}_{te} := F$  und  $F_{in} := I$ .

Ebenso ist klar, daß eine Zerlegung (2.2.1) nicht eindeutig sein kann. Denn neben (2.2.1) kann auch geschrieben werden

$$(2.2.8) \quad F = (\hat{F}_{te} Q^T) (Q F_{in}),$$

wobei  $Q$  eine beliebige stückweise stetig differenzierbare Funktion in die Orthogonalmatrizen mit Determinante gleich eins ist.

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

Wird  $F_{in}$  gemäß

$$(2.2.9) \quad F_{in} = R_{in} U_{in}$$

in einen rotatorischen und Dehnungsanteil zerlegt – analog wie für  $F$  selbst üblich, so bedeutet das Einfügen einer Orthogonalmatrix nach (2.2.8), 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 2.2.3. (i)** Hinter der Zerlegung (2.2.1) 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 (2.2.2), (2.2.3) und (2.2.6) 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

$$(2.2.10) \quad \hat{S} = F_{in} S F_{in}^T$$

umrechnen (s. z.B. [Hau00]). Diese Übergangsformel ist konsistent mit der in Folgerung 2.2.2. (ii) beschriebenen Möglichkeit, die Zwischenkonfiguration einer starren Bewegung zu unterwerfen. Wir würden dann

$$(2.2.11) \quad \hat{S}_{(neu)} = Q F_{in} S F_{in}^T Q^T = Q \hat{S}_{(alt)} Q^T$$

erhalten.

**(iii)** In der Modellierung des Materialverhaltens auf der Grundlage einer Zwischenkonfiguration wird angenommen, 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.

An zwei Beispielen wollen wir die Problematik der spannungsfreien Zwischenkonfiguration etwas erläutern.

**Beispiele 2.2.4. (i)** Wir stellen uns einen homogenen spannungsfreien Stab aus isotropen elastischem Material vor, der in Längsrichtung gezogen und so einer homogenen Deformation unterworfen wird. Wir nehmen an, daß dabei die Fließgrenze ein wenig überschritten wird. Nach der Entlastung können wir in guter Näherung annehmen, daß der Stab in seiner neuen Konfiguration spannungsfrei ist. Das wäre dann die spannungsfreie Zwischenkonfiguration, die in diesem Falle auch Resultat einer wirklichen Bewegung ist. In gewissen Grenzen verhält sich der Stab bezüglich dieser Zwischenkonfiguration elastisch.

**(ii)** Wir stellen uns einen homogenen spannungsfreien Ring aus isotropen elastischem Material vor, der in Richtung eines Durchmessers so zusammengedrückt wird, daß die Fließgrenze überschritten wird. Entlasten wir nun den Ring von äußeren Spannungen, nimmt er eine neue Konfiguration an, die aber sicher nicht lokal spannungsfrei ist. Die spannungsfreie Zwischenkonfiguration entsteht, wenn wir gedanklich den Ring auch lokal entlasten. Dann würden sich die einzelnen Volumenelemente unabhängig voneinander entspannen. Der Körper würde an einer Stelle zerfallen und hätten an anderer Stelle sich überlappende Volumenelemente. Diese Zwischenkonfiguration kann nicht Resultat einer realen Bewegung sein. Ebensowenig ist in diesem Falle der elastische Anteil der Gesamtbewegung, der den Körper aus der Zwischenkonfiguration in die reale Konfiguration nach seiner Belastung bringt, eine reale Bewegung.

Bei Anwendungen ist das zweite Beispiel das typische.

Zur weiteren Diskussion des Konzeptes der Zwischenkonfiguration sei auf die Literatur (z.B. [Hau00], [Hau98], [Mie93], [Slu92]) sowie auf die Arbeiten [Ber92, 98, 99] für einen alternativen Zugang zur Plastizität verwiesen.

**Definition 2.2.5.** 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

$$(2.2.12) \quad E_{in} = \tilde{E}_{in}(F_d^t, \theta_d^t, F, \theta, \nabla\theta, p, (F_{in})_d^t, F_{in}),$$

$$(2.2.13) \quad \hat{S} = \tilde{\hat{S}}(\hat{F}_{te}, \theta, \nabla\theta, p, \det F_{in}),$$

$$(2.2.14) \quad \psi = \tilde{\psi}(\hat{F}_{te}, \theta, \nabla\theta, p, \det F_{in}),$$

$$(2.2.15) \quad \eta = \tilde{\eta}(\hat{F}_{te}, \theta, \nabla\theta, p, \det F_{in}),$$

$$(2.2.16) \quad q = \tilde{q}(F_d^t, \theta_d^t, F, \theta, \nabla\theta, p),$$

$$(2.2.17) \quad \gamma = \tilde{\gamma}(F_d^t, \theta_d^t, F, \theta, \theta', \nabla\theta, p),$$

wobei die  $\tilde{E}_{in}, \tilde{\hat{S}}, \tilde{\psi}, \tilde{\eta}, \tilde{q}, \tilde{\gamma}$  den Körper charakterisierende Funktionen sind.

Zusätzlich seien  $\tilde{E}_{in}$  und  $\tilde{\hat{S}}$  symmetrische Tensorfunktionen.

**Bemerkungen 2.2.6. (i)** Es gelten neben den Beziehungen (2.2.12) – (2.2.17) die vorigen „kinematischen“ Beziehungen, insbesondere (2.2.7) und (2.2.3).

Zusammen mit (2.2.3) definiert (2.2.12) 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. 2.1.4.) eindeutig  $F_{in}$  (und damit auch  $E_{in}$  und  $\hat{F}_{te}$ ) durch (2.2.9) und (2.2.3) bestimmt sind, bis auf die schon erwähnte mögliche orthogonale Transformation gemäß (2.2.8).

Die Definition (2.2.12) 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 (2.2.13) 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 (2.2.13) folgt auch, daß es i.a. keinen eindeutigen Zusammenhang zwischen Spannungen und (Gesamt-) Verzerrungen gibt.

(iii) Wir lassen in (2.2.17) eine Abhängigkeit von  $\theta'$  zu, da diese in verschiedenen Modellen für Phasenumwandlungen auftritt. Aufgrund der Äquipräsenzregel tritt in (2.2.17) der Gradient von  $\theta$  auf. In den bekannten Phasenumwandlungsmodellen tritt eine solche Abhängigkeit nicht auf (s. Punkt 3.).

Aus der Folgerung 2.2.2. (ii), der Bemerkung 2.2.3. (ii) sowie der Definition 2.2.5. ergeben sich folgende Invarianzeigenschaften für die Materialfunktionale.

Wir bezeichnen  $O^+ := \{ A \in \mathbb{R}^{n^2} : A \text{ orthogonal, } \det A = 1 \}$ .

**Folgerungen 2.2.7.** Seien  $Q \in C_{pw}^1([0, T]; O^+)$  beliebig und  $(F, \theta, p)$  ein beliebiger thermokinetischer Prozeß mit Phasenumwandlungen gemäß Definition 2.1.3. und Bemerkung 2.1.4. Dann gelten für die Materialfunktionale in Definition 2.2.5.:

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

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

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

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

**Annahme 2.2.8. (Prinzip des endlichen Gedächtnisses)** Wir bezeichnen

$$D := L^2(]0, T[, \mathbb{R}^{n^2}) \times L^2(]0, T[, \mathbb{R}) \times \mathbb{R}^{n^2} \times \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m.$$

Die Funktionen in der Definition 2.2.5.

$$\tilde{S} : \mathbb{R}^{n^2} \times \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^{n^2}, \quad \tilde{\eta} : \mathbb{R}^{n^2} \times \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R},$$

$$\tilde{q} : D \rightarrow \mathbb{R}^n, \quad \tilde{\gamma} : L^2(]0, T[, \mathbb{R}^{n^2}) \times L^2(]0, T[, \mathbb{R}) \times \mathbb{R}^{n^2} \times \mathbb{R} \times \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$$

werden als stetig, die Funktionen

$$\tilde{\Psi} : \mathbb{R}^{n^2} \times \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, \quad \tilde{E}_{in} : D \times L^2(]0, T[, \mathbb{R}^{n^2}) \times \mathbb{R}^{n^2} \rightarrow \mathbb{R}^{n^2}$$

als stetig Fréchet-differenzierbar angenommen.

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

Die Clausius-Duhem-Ungleichung soll für alle thermodynamischen Prozesse mit Phasenumwandlungen (vgl. Definition 2.1.3.) gelten. Das führt zu Einschränkungen in den Materialfunktionalen in der Definition 2.2.5. 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 sind. Zuerst treffen wir technische Vorbereitungen.

Die folgenden Annahmen postulieren die Existenz von Fortsetzungen eines thermodynamischen Prozesses, die in einem frei gewähltem Punkt  $\xi \in \Omega$  die Zwischenkonfiguration (zeitlich) nicht ändern. 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 2.3.1.** Sei  $\bar{\Omega}$  ein Körper gemäß Definition 2.2.5. Seien  $(F, \theta, p)$  ein thermodynamischer Prozeß auf  $\bar{\Omega} \times [0, t]$  und  $\xi \in \Omega$  beliebig.

Dann existieren ein  $s = s(F, \theta, p, \xi) > 0$  mit  $t + s < T$  und ein thermodynamischer Prozeß  $(\bar{F}, \bar{\theta}, \bar{p})$  auf  $\bar{\Omega} \times [0, t + s]$  mit folgenden Eigenschaften

$$(2.3.1) \quad \bar{F}, \bar{\theta} \text{ auf } [t, t + s] \text{ stetig differenzierbar;}$$

$$(2.3.2) \quad \forall 0 \leq \tau \leq t : \quad \bar{F}(\xi, \tau) = F(\xi, \tau), \quad \bar{\theta}(\xi, \tau) = \theta(\xi, \tau), \quad \bar{p}(\xi, \tau) = p(\xi, \tau),$$

$$(2.3.3) \quad \forall t \leq \tau \leq t + s : \quad \bar{F}_{in}(\xi, \tau) = F_{in}(\xi, t), \quad \bar{p}(\xi, \tau) = p(\xi, t).$$

Wir nennen den thermodynamischen Prozeß  $(\bar{F}, \bar{\theta}, \bar{p})$  aus Annahme 2.3.1. eine thermoelastische Fortsetzung (bei eingefrorenen Phasenanteilen) im Punkt  $\xi \in \Omega$  des Prozesses  $(F, \theta, p)$  von  $\bar{\Omega} \times [0, t]$  auf  $\bar{\Omega} \times [0, t + s]$ .

Ein Einfrieren der Phasenanteile erscheint auch deshalb sinnvoll, weil die Umwandlungsplastizität in den gängigen Modellen keine Fließgrenze hat (s. Kapitel 2.7.). Daher können schon kleine Änderungen in den Phasenanteilen die Zwischenkonfiguration verändern, was wir aus mathematischen Gründen bei obiger Fortsetzungsprozedur ausschließen wollen, um den Satz 2.3.3. zu beweisen. Ein Vorteil der konstanten Fortsetzung von  $p$  besteht auch darin, daß in (2.2.17) eine Abhängigkeit von  $\theta'$  zugelassen werden kann, die die Aussagen dieses Satzes nicht beeinflußt.

**Annahme 2.3.2.** Seien  $\bar{\Omega}$  ein Körper gemäß Definition 2.2.5. 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 Annahme 2.3.1. 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  $0 < s'(\bar{F}, \bar{\theta}, \bar{p}, \xi) \leq s$  und für alle  $0 < \sigma \leq s'$  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  $0 < \sigma \leq s'$  eine Fortsetzung von  $(F, \theta, p)$  von  $[0, t]$  auf  $[0, t + \sigma]$  mit

$$(2.3.4) \quad \forall \tau \in [t, t + \sigma] \quad : \quad \pi(\xi, \tau) = \bar{p}(\xi, \tau) (= p(\xi, t) = \text{const.}),$$

$$(2.3.5) \quad \max_{t \leq \tau \leq t + \sigma} \{ \|G(\xi, \tau) - \bar{F}(\xi, \tau)\| + |\omega(\xi, \tau) - \bar{\theta}(\xi, \tau)| \} \leq \gamma,$$

( $\|\cdot\|$  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:

$$(2.3.6) \quad \forall \tau \in [t, t + \sigma] \quad : \quad G_{in}(\xi, \tau) = G_{in}(\xi, t).$$

Der Kern der Annahmen 2.3.1, 2.3.2. sowie des Materialgesetzes (2.2.13) findet sich in ähnlicher Weise auch in den Arbeiten [Ber92, 98, 99], („isomorphic elastic range“), in denen die Plastizität alternativ modelliert wird.

In [Tin73] werden die Folgerungen aus der Clausius-Duhem-Ungleichung für einen etwas 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 [Col66] bewiesen, s.a. [Hau77], [Sil97].

**Satz 2.3.3. (Verallgemeinerung der Sätze von Coleman, Ting)** Sei  $\bar{\Omega}$  ein Körper gemäß der Definition 2.2.5. und den Annahmen 2.2.8., 2.3.1., 2.3.2. Dann gelten für jeden thermokinetischen Prozeß  $(F, \theta, p)$  die nachfolgenden Beziehungen:

$$(2.3.7) \quad \psi = \hat{\tilde{\psi}}(\hat{F}_{te}, \theta, p, \det F_{in}),$$

$$(2.3.8) \quad \hat{S} = \hat{\tilde{S}}(\hat{F}_{te}, \theta, p, \det F_{in}),$$

$$(2.3.9) \quad \eta = \hat{\tilde{\eta}}(\hat{F}_{te}, \theta, p, \det F_{in}),$$

$$(2.3.10) \quad \hat{\tilde{S}}(\hat{F}_{te}, \theta, p, \det F_{in}) = \rho_0 \hat{F}_{te}^{-1} \partial_{\hat{F}_{te}} \hat{\tilde{\psi}}(\hat{F}_{te}, \theta, p, \det F_{in}),$$

$$(2.3.11) \quad \hat{\tilde{\eta}}(\hat{F}_{te}, \theta, p) = - \partial_{\theta} \hat{\tilde{\psi}}(\hat{F}_{te}, \theta, p),$$

$$(2.3.12) \quad \frac{1}{\theta} \tilde{q}(F_d^t, \theta_d^t, F, \theta, \nabla \theta, p) \cdot \nabla \theta \leq 0$$

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 Dissipationsungleichung

$$(2.3.13) \quad S \cdot \frac{dE_{in}}{dt} - 2 \left( \frac{dF_{in}^{-1}}{dt} F_{in} S \right) \cdot E_{in} - \rho_0 \frac{\partial \psi}{\partial p} \tilde{\gamma} + \\ - \rho_0 \frac{\partial \psi}{\partial \det F_{in}} \frac{d}{dt} (\det F_{in}) - \frac{1}{\theta} \tilde{q} \cdot \nabla \theta \geq 0$$

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

Dem Beweis dieses Satzes seien zwei Lemmata vorangestellt. Das erste ist trivial.

**Lemma 2.3.4.** Es seien  $b, t$  und  $s$  beliebig gegeben mit  $b$  und  $s$  positiv.

Dann gelten für die Funktion

$$(2.3.14) \quad f(\tau) := \frac{b}{s} \left( 1 - \exp\left(-\frac{(\tau-t)(\tau-t-s)}{b}\right) \right) \quad \text{für } \tau \in [t, t+s]$$

die Eigenschaften

$$(2.3.15) \quad f(t) = 0, \quad f(t+s) = 0, \quad f'(t) = 1, \quad f'(t+s) = -1,$$

$$(2.3.16) \quad |f(\tau)| \leq \frac{b}{s} \quad \text{für } \tau \in [t, t+s].$$

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

**Lemma 2.3.5.** Sei  $\bar{\Omega}$  ein Körper gemäß Definition 2.2.5.

Sei  $(\bar{F}, \bar{\theta}, \bar{p})$  thermoelastische Fortsetzung eines gegebenen thermokinetischen Prozesses  $(F, \theta, p)$  gemäß Annahme 2.3.1. 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:

$$(2.3.17) \quad G(\xi, t+\sigma') = \bar{F}(\xi, t+\sigma'), \quad \omega(\xi, t+\sigma') = \bar{\theta}(\xi, t+\sigma'),$$

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

$$(2.3.18) \quad \forall t \leq \tau \leq t+\sigma' \quad : \quad G_{in}(\xi, \tau) = F_{in}(\xi, t) (= \bar{F}_{in}(\xi, \tau)),$$

$$\pi(\xi, \tau) = p(\xi, t) (= \bar{p}(\xi, \tau)),$$

$$(2.3.19) \quad G'(\xi, t+\sigma') = A, \quad \omega'(\xi, t+\sigma') = \alpha, \quad \nabla \omega'(\xi, t+\sigma') = a,$$

$$(2.3.20) \quad \| \bar{F}_d^{t+\sigma'}(\xi, \cdot) - G_d^{t+\sigma'}(\xi, \cdot) \| < \varepsilon,$$

$$(2.3.21) \quad \| \bar{\theta}_d^{t+\sigma'}(\xi, \cdot) - \omega_d^{t+\sigma'}(\xi, \cdot) \| < \varepsilon,$$

( $\|\cdot\|$  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 2.3.2. 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  $f$  aus Lemma 2.3.4. eine Funktion  $(G, \omega, \pi)$  in folgender Weise:

$$(2.3.22) \quad (G(x, \tau), \omega(x, \tau), \pi(x, \tau)) := (F(x, \tau), \theta(x, \tau), p(x, \tau)) \quad \text{auf } \bar{\Omega} \times [0, t],$$

$$(2.3.23) \quad G(x, \tau) := \bar{F}(x, \tau) - f(\tau) (A - \bar{F}'(\xi, t + \sigma')) \quad \text{auf } \bar{\Omega} \times [t, t + \sigma'],$$

$$(2.3.24) \quad \omega(x, \tau) := \bar{\theta}(x, \tau) - f(\tau) (\alpha - \bar{\theta}'(\xi, t + \sigma')) + \\ - f(\tau) ( (a \mid x - \xi) - (\nabla \bar{\theta}'(\xi, t + \sigma') \mid x - \xi) ) \varphi(\|x - \xi\|) \quad \text{auf } \bar{\Omega} \times [t, t + \sigma'],$$

$$(2.3.25) \quad \pi(x, \tau) := \bar{p}(x, t) \quad \text{auf } \bar{\Omega} \times [t, t + \sigma'].$$

Dabei sind  $(\bullet \mid \bullet)$  das Skalarprodukt in  $\mathbb{R}^n$  und  $\varphi : \mathbb{R}^+ \rightarrow [0, 1]$  eine glatte Schnittfunktion mit Träger in  $\bar{B}_1(0) \subset \mathbb{R}^n$  und  $\varphi = 1$  auf  $\bar{B}_{\frac{1}{2}}(0)$ .

Wir zeigen, daß die so konstruierte Funktion  $(G, \omega, \pi)$  den behaupteten Anforderungen genügt.

Wir setzen die Funktion  $f$  gemäß (2.3.14) über  $t + \sigma'$  hinaus auf eine kleine Umgebung stetig differenzierbar fort. Dann existieren in  $t + \sigma'$  die Ableitungen in (2.3.19). Die Eigenschaften (2.3.15) dieser Funktion  $f$  sichern die Erfüllung von (2.3.17), (2.3.19). Klar ist auch, daß  $(G, \omega, \pi)$  eine Fortsetzung von  $(F, \theta, p)$  ist.

Ist der zweite Summand von  $G$  in (2.3.23) „klein“, so ist die Beziehung  $\det G > 0$  erfüllbar, da  $\det \bar{F} > 0$ .

Auf  $[t, t + \sigma']$  ist der zweite Teil der Fortsetzung  $G$  örtlich konstant, somit ist dieser Teil Gradient einer Bewegung nach Definition 2.1.3.

Wegen (2.3.16) ist für

$$(2.3.26) \quad 0 < b \leq \frac{\gamma \sigma'}{2} \min \{ \|A - \bar{F}'(\xi, t + \sigma')\|^{-1}, |\alpha - \bar{\theta}'(\xi, t + \sigma')|^{-1} \}$$

die Abschätzung (2.3.5) erfüllt, und nach der Annahmen 2.3.2. gilt für  $(G, \omega, \pi)$  die Aussage (2.3.18).

(Falls  $A = \bar{F}'(\xi, t + \sigma')$  oder  $\alpha = \bar{\theta}'(\xi, t + \sigma')$ , so ist (2.3.5) ebenso gültig.)

Unter Beachtung von (2.1.18), (2.1.19) und (2.3.23) folgt

$$(2.3.27) \quad G_d^{t+\sigma'}(\xi, \tau) = \bar{F}_d^{t+\sigma'}(\xi, \tau) + \begin{cases} -f(t+\sigma'-\tau) (A - \bar{F}'(\xi, t+\sigma')) & \text{für } 0 \leq \tau \leq \sigma' \\ 0 & \text{für } \sigma' \leq \tau \leq T \end{cases} .$$

Somit gilt nach (2.3.16)

$$(2.3.28) \quad \|\bar{F}_d^{t+\sigma'}(\xi, \cdot) - G_d^{t+\sigma'}(\xi, \cdot)\|_{L^2(0, T; \mathbb{R}^{n^2})} \leq \|A - \bar{F}'(\xi, t+\sigma')\|_{\mathbb{R}^{n^2}} \left\{ \int_t^{t+\sigma'} |f(\tau)|^2 d\tau \right\}^{\frac{1}{2}} \leq \\ \leq \frac{b}{\sqrt{\sigma'}} \|A - \bar{F}'(\xi, t+\sigma')\|_{\mathbb{R}^{n^2}} .$$

Also gilt für

$$(2.3.29) \quad 0 < b \leq \varepsilon \sqrt{\sigma'} \|A - \bar{F}'(\xi, t+\sigma')\|^{-1}$$

die Behauptung (2.3.20). Analog folgt aus

$$(2.3.30) \quad 0 < b \leq \varepsilon \sqrt{\sigma'} \|\alpha - \bar{\theta}'(\xi, t+\sigma')\|^{-1}$$

die Abschätzung (2.3.21). Somit können wir  $b$  kleiner als das Minimum der rechten Seiten in (2.3.26), (2.3.29), (2.3.30) wählen.

**Beweis von Satz 2.3.3.:** Beweisidee: Die tragende Säule des Beweises ist die einfache Tatsache, daß aus

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

die Aussagen

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

folgen. Mit dieser Idee wird auch der entsprechende ursprüngliche 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 2.3.1.

Nach Lemma 2.3.5. 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 (2.1.16), wobei die Größen dort auf die Referenzkonfiguratin bezogen sind. Somit ist

die Beziehung (2.2.10) 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.

$$(2.3.31) \quad \begin{aligned} \frac{d}{dt}\tilde{\Psi} &= \partial_{\hat{F}_{te}}^{\wedge} \tilde{\Psi} \bullet \bullet \frac{d}{dt} \hat{G}_{te} + \partial_{\theta} \tilde{\Psi} \alpha + \partial_{\nabla\theta} \tilde{\Psi} \bullet a = \\ &= \partial_{\hat{F}_{te}}^{\wedge} \tilde{\Psi} \bullet \bullet A G_{in}^{-1} + \partial_{\theta} \tilde{\Psi} \alpha + \partial_{\nabla\theta} \tilde{\Psi} \bullet a = \\ &= \partial_{\hat{F}_{te}}^{\wedge} \tilde{\Psi} G_{in}^{-T} \bullet \bullet A + \partial_{\theta} \tilde{\Psi} \alpha + \partial_{\nabla\theta} \tilde{\Psi} \bullet a \end{aligned}$$

wobei benutzt wird, 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 (2.1.16) unter Beachtung von (2.1.17), (2.2.10), (2.3.31) sowie Definition 2.2.5. (die Argumente  $\xi$  und  $t + \sigma'$  werden unterdrückt)

$$(2.3.32) \quad \begin{aligned} &\{ \hat{G}_{te}^{\wedge} \tilde{\hat{S}}(\hat{G}_{te}^{\wedge}, \omega, \nabla\omega, \pi, \det G_{in}) G_{in}^{-T} - \rho_0 \partial_{\hat{F}_{te}}^{\wedge} \tilde{\Psi}(\hat{G}_{te}^{\wedge}, \omega, \nabla\omega, \pi, \det G_{in}) G_{in}^{-T} \} \bullet \bullet A + \\ &- \{ \rho_0 \partial_{\theta} \tilde{\Psi}(\hat{G}_{te}^{\wedge}, \omega, \nabla\omega, \pi, \det G_{in}) + \rho_0 \tilde{\eta}(\hat{G}_{te}^{\wedge}, \omega, \nabla\omega, \pi, \det G_{in}) \} \alpha + \\ &- \rho_0 \partial_{\nabla\theta} \tilde{\Psi}(\hat{G}_{te}^{\wedge}, \omega, \nabla\omega, \pi, \det G_{in}) \bullet a - \frac{1}{\omega} \tilde{q}(\hat{G}_d^{t+\sigma'}, \omega_d^{t+\sigma'}, G, \omega, \nabla\omega, \pi) \bullet \nabla\omega \geq 0. \end{aligned}$$

Aus den Eigenschaften (2.2.32) für  $(G, \omega, \pi)$  folgt dann sofort – ebenfalls für die Argumente  $\xi$  und  $t + \sigma'$  -

$$(2.3.33) \quad \begin{aligned} &\{ \hat{F}_{te}^{\wedge} \tilde{\hat{S}}(\hat{F}_{te}^{\wedge}, \bar{\theta}, \nabla\bar{\theta}, \bar{p}, \det \bar{F}_{in}) \bar{F}_{in}^{-T} - \rho_0 \partial_{\hat{F}_{te}}^{\wedge} \tilde{\Psi}(\hat{F}_{te}^{\wedge}, \bar{\theta}, \nabla\bar{\theta}, \bar{p}, \det \bar{F}_{in}) \bar{F}_{in}^{-T} \} \bullet \bullet A + \\ &- \{ \rho_0 \partial_{\theta} \tilde{\Psi}(\hat{F}_{te}^{\wedge}, \bar{\theta}, \nabla\bar{\theta}, \bar{p}, \det \bar{F}_{in}) + \rho_0 \tilde{\eta}(\hat{F}_{te}^{\wedge}, \bar{\theta}, \nabla\bar{\theta}, \bar{p}, \det \bar{F}_{in}) \} \alpha + \\ &- \rho_0 \partial_{\nabla\theta} \tilde{\Psi}(\hat{F}_{te}^{\wedge}, \bar{\theta}, \nabla\bar{\theta}, \bar{p}, \det \bar{F}_{in}) \bullet a - \frac{1}{\bar{\theta}} \tilde{q}(\bar{F}_d^{t+\sigma'}, \bar{\theta}_d^{t+\sigma'}, \bar{F}, \bar{\theta}, \nabla\bar{\theta}, \bar{p}) \bullet \nabla\bar{\theta} + \\ &- \{ \frac{1}{\bar{\theta}} \tilde{q}(\hat{G}_d^{t+\sigma'}, \omega_d^{t+\sigma'}, \bar{F}, \bar{\theta}, \nabla\bar{\theta}, \bar{p}) \bullet \nabla\bar{\theta} - \frac{1}{\bar{\theta}} \tilde{q}(\bar{F}_d^{t+\sigma'}, \bar{\theta}_d^{t+\sigma'}, \bar{F}, \bar{\theta}, \nabla\bar{\theta}, \bar{p}) \} \bullet \nabla\bar{\theta} \geq 0. \end{aligned}$$

Die Ausdrücke vor  $A$ ,  $\alpha$  und  $a$  sowie der letzte Term in der dritten Zeile von (2.3.33) hängen nicht von  $A$ ,  $\alpha$  und  $a$  ab.

Wegen der Stetigkeit von  $\tilde{q}$  und der Eigenschaften (2.3.20), (2.3.21) läßt sich für gegebenes  $\sigma'$ ,  $A$ ,  $\alpha$ ,  $a$  der Ausdruck in der vierten Zeile von (2.3.33) dem Betrage nach kleiner als ein frei gewähltes  $\delta > 0$  machen. Es muß nur das  $\varepsilon$  in (2.3.20),

(2.3.21) klein sein. Die Ungleichungen (2.3.29), (2.3.30) zeigen, daß das auf Kosten der Wahl des Parameters  $b$  für die Hilfsfunktion  $f$  aus (2.3.14) geschieht.

Somit erhalten wir aus (2.3.33) die Behauptungen (2.3.7) – (2.3.12) für die Argumente  $\xi$  und  $t + \sigma'$ .

Die Stetigkeit von  $(\bar{E}, \bar{\theta}, \bar{p})$  sowie der Funktionen  $\hat{S}, \hat{\partial}_{E_{te}} \tilde{\psi}, \partial_{\theta} \tilde{\psi}, \tilde{\eta}$  sichern den Grenzübergang für  $\sigma' \rightarrow 0$  und wir erhalten (2.3.7) – (2.3.11). Weiter gelten, wie sich leicht nachprüfen läßt,

$$\bar{F}_d^{t+\sigma'} \rightarrow F_d^t, \quad \bar{\theta}_d^{t+\sigma'} \rightarrow \theta_d^t \quad \text{in der } L^2\text{-Norm für } \sigma' \rightarrow 0.$$

Somit folgt auch (2.3.12) wegen der Stetigkeit von  $\tilde{q}$ .

Zum Beweis der reduzierten Dissipationsungleichung (2.3.13):

Die Clausius-Duhem-Ungleichung (2.1.16) lautet unter Beachtung von (2.1.17):

$$(2.3.34) \quad -\rho_0(\xi) \frac{d}{dt} \psi(\xi, t) - \rho_0(\xi) \eta(\xi, t) \frac{d}{dt} \theta(\xi, t) - \rho_0 \frac{\partial \psi}{\partial \det F_{in}} \frac{d}{dt} (\det F_{in}) + \\ + S(\xi, t) \bullet \bullet \frac{d}{dt} E - \frac{1}{\theta} q \bullet \nabla \theta \geq 0.$$

Unter Beachtung von

$$\frac{d}{dt} (F_d^t(\bullet)) = (F_d^t)'(\bullet) \quad \text{in } L^2(0, T; \mathbb{R}^{n^2})$$

für  $E$  stückweise differenzierbar und nach den Glattheitsvoraussetzungen sind  $E_{in}$

und damit auch  $F_{in}$  und  $\hat{F}_{te}$  in denjenigen  $t$  stetig differenzierbar, in denen es  $(F, \theta, p)$  ist. Wegen (2.3.10), (2.3.11) folgt aus (2.3.34)

$$(2.3.35) \quad -\hat{F}_{te} \hat{S} \bullet \bullet \frac{d}{dt} \hat{F}_{te} - \rho_0 \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\psi} \tilde{\gamma} - \rho_0 \frac{\partial \psi}{\partial \det F_{in}} \frac{d}{dt} (\det F_{in}) + \\ + S \bullet \bullet \frac{d}{dt} E - \frac{1}{\theta} q \bullet \nabla \theta \geq 0.$$

Ein Umrechnen von  $\hat{S}$  auf die Referenzkonfiguration und weitere Umformungen liefern (2.3.13).

Der Satz 2.3.3. gestattet eine Umformulierung der Wärmeleitungsgleichung (2.1.12).

**Folgerung 2.3.6.** Unter den Voraussetzungen des Satzes 2.3.3. ist die Wärmeleitungsgleichung (2.1.12) äquivalent zu

$$(2.3.36) \quad \rho_0 c_e \frac{d\theta}{dt} + \operatorname{div} q = \theta \frac{\partial S}{\partial \theta} \bullet \bullet \frac{dE_{te}}{dt} + S \bullet \bullet \frac{dE_{in}}{dt} + 2 \left( F_{in}^{-1} \frac{dF_{in}}{dt} \left( S - \theta \frac{\partial S}{\partial \theta} \right) \right) \bullet \bullet E_{te} + \\ + \theta F S \frac{\partial F_{in}^T}{\partial \theta} \bullet \bullet \frac{d \hat{F}_{te}}{dt} - \rho_0 \frac{d}{dt} (\det F_{in}) - \rho_0 \frac{\partial e}{\partial p} \tilde{p} + r \quad \text{in } \Omega \times ]0, T[$$

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

Die Terme auf der rechten Seite von (2.3.36) (außer  $r$ ) lassen sich interpretieren als: thermoelastische Dissipation, inelastische Dissipation, elastisch-inelastische Dissipation (zweimal), Dissipation infolge der Volumenänderung der Zwischenkonfiguration, Dissipation der Phasenumwandlungen.

Eine weitere Vereinfachung ergibt sich durch Ausnutzen der Bedingung (2.1.3) für den Term der Dissipation infolge der Phasenumwandlungen. So können z.B.  $\rho_m$  und  $\tilde{\gamma}_m$  durch die restlichen Phasenanteile ausgedrückt werden. Mit

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

erhalten wir

$$(2.3.37) \quad - \rho_0 \frac{\partial e}{\partial p} \tilde{\gamma} = - \rho_0 \sum_{i=1}^{m-1} \frac{\partial \hat{e}}{\partial p_i} \tilde{\gamma}_i.$$

Dann werden die Größen

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

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

Das Bisherige resümierend kommen wir zu den Grundgleichungen für die Thermoelasto-Plastizität mit Phasenumwandlungen:

$$(2.3.38) \quad \rho_0 \frac{d^2 u}{dt^2} - \operatorname{div} ((I + \nabla u) S) = f \quad \text{in } \Omega \times ]0, T[,$$

$$(2.3.39) \quad \rho_0 c_e \frac{d\theta}{dt} + \operatorname{div} q = \theta \frac{\partial S}{\partial \theta} \bullet \bullet \frac{dE_{te}}{dt} + S \bullet \bullet \frac{dE_{in}}{dt} + 2 \left( F_{in}^{-1} \frac{dF_{in}}{dt} \left( S - \theta \frac{\partial S}{\partial \theta} \right) \right) \bullet \bullet E_{te} + \\ + \theta F S \frac{\partial F_{in}^T}{\partial \theta} \bullet \bullet \frac{d \hat{F}_{te}}{dt} - \rho_0 \frac{\partial e}{\partial (\det F_{in})} \frac{d}{dt} (\det F_{in}) - \rho_0 \sum_{i=1}^{m-1} \frac{\partial \hat{e}}{\partial p_i} \tilde{\gamma}_i + r \\ \text{in } \Omega \times ]0, T[,$$

$$(2.3.40) \quad \frac{d}{dt} p_i = \gamma_i + \varphi_i \quad i = 1, \dots, m-1 \quad \text{in } \Omega \times ]0, T[,$$

$$(2.3.41) \quad E_{in} = \tilde{E}_{in}(F_d^t, \theta_d^t, F, \theta, \nabla\theta, p, (F_{in})_d^t, F_{in}),$$

$$(2.3.42) \quad \psi = \hat{\tilde{\psi}}(\hat{F}_{te}, \theta, p, \det F_{in}),$$

$$(2.3.43) \quad q = \tilde{q}(F_d^t, \theta_d^t, F, \theta, \nabla\theta, p),$$

$$(2.3.44) \quad \gamma = \tilde{\gamma}(F_d^t, \theta_d^t, F, \theta, \theta', \nabla\theta, p),$$

$$(2.3.45) \quad S = \rho_0 F_{in}^{-1} \partial_{\hat{E}_{te}} \hat{\tilde{\psi}}(\hat{F}_{te}, \theta, p, \det F_{in}) F_{in}^{-T},$$

$$(2.3.46) \quad E_{in} := \frac{1}{2} (F_{in}^T F_{in} - I), \quad E = E_{te} + E_{in}, \quad E := \frac{1}{2} (\nabla u + \nabla u^T + \nabla u^T \nabla u), \quad \hat{F}_{te} = F F_{in}^{-1}.$$

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

## 2.4. Isotropes Modell mit Volumenerhalt der Zwischenkonfiguration

Wir wollen jetzt die allgemeinen Ansätze in der Definition 2.2.5. und am Ende des vorherigen Kapitels weiter spezialisieren.

Wir setzen voraus, daß die Zwischenkonfiguration volumenerhaltend ist und stützen uns dabei auf die experimentelle Erfahrung, daß inelastische Umformungen (bei angenommener konstanter Temperatur und eingefrorenen Phasenanteilen) volumenerhaltend sind. Diesen Sachverhalt drücken wir wie folgt aus

$$(2.4.1) \quad \det F_{in} = 1 \quad \text{in } \Omega \times ]0, T[$$

Sei der Körper weiter isotrop (vgl. [Mül73], [Sil97], [Hau00]), es gelte also

$$(2.4.2) \quad \hat{S} = 2\mu \hat{E}_{te} + \lambda(\text{tr } \hat{E}_{te}) I + \delta \hat{E}_{te}^2 - (\det \hat{F}_{te}) \left\{ 3K\alpha (\theta - \theta_0) + K \frac{\rho_0 - \rho}{\rho} \right\} (2 \hat{E}_{te} + I)^{-1}$$

Die Herleitung der thermischen und Umwandlungsspannungen (die letzten beiden Terme in (2.4.2)) findet sich in der Ergänzung am Ende der Arbeit. Unter  $\rho$  wird die aktuelle Dichte, bezogen auf die Referenztemperatur  $\theta_0$  verstanden.

Wegen

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

steht die Darstellung (2.4.2) nicht im Widerspruch zu (2.2.13).

Wir bemerken, daß die Beziehung (2.4.2) konsistent ist mit dem Transformationsverhalten der beteiligten Tensoren (beachte (2.2.10)), falls in die Zerlegung (2.2.1) eine Orthogonalmatrix gemäß Folgerung 2.2.2. (ii) eingefügt wird.

Eine Umrechnung von (2.4.2) auf Größen bezüglich der Referenzkonfiguration ergibt unter Beachtung von (2.2.3), (2.2.4) und (2.2.5)

$$(2.4.3) \quad \mathbf{S} = 2\mu \mathbf{C}_{in}^{-1} (\mathbf{E} - \mathbf{E}_{in}) \mathbf{C}_{in}^{-1} + \lambda \operatorname{tr}(\mathbf{F}_{in}^{-T} (\mathbf{E} - \mathbf{E}_{in}) \mathbf{F}_{in}^{-1}) \mathbf{C}_{in}^{-1} + \delta \mathbf{C}_{in}^{-1} [(\mathbf{E} - \mathbf{E}_p) \mathbf{C}_{in}^{-1}]^2 + \\ - (\det F) \left\{ 3K\alpha (\theta - \theta_0) + K \frac{\rho_0 - \rho}{\rho} \right\} \mathbf{C}^{-1}.$$

Die Lamé-Koeffizienten  $\mu$  und  $\lambda$  sowie  $\delta$ ,  $K$  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 (2.2.12), indem wir ansetzen, daß der inelastische Verzerrungstensor von der Geschichte der Spannung abhängt. In Experimenten tritt keine plastische Deformation auf, wenn der Deviator des Cauchyschen Spannungstensors verschwindet. Über den bekannten Zusammenhang

$$(2.4.4) \quad \boldsymbol{\tau} = (\det F)^{-1} \mathbf{F} \mathbf{S} \mathbf{F}^T.$$

setzen wir

$$(2.4.5) \quad \mathbf{E}_{in}(t) = \mathfrak{F} \left( \boldsymbol{\tau}^*(s), \theta(s), p(s) \right),$$

mit  $\boldsymbol{\tau}^* := \boldsymbol{\tau} - \frac{1}{3} \operatorname{tr}(\boldsymbol{\tau}) \mathbf{I}$ .  $\mathfrak{F}$  ist ein materialspezifisches Funktional.

**Bemerkung 2.4.1.** Wird der Ausdruck (2.4.3) für  $\mathbf{S}$  in (2.4.4), und danach in (2.4.5) eingesetzt, so entsteht ein Ausdruck der Form (2.2.12).

Wir spezialisieren den Wärmestrom  $\mathbf{q}$  gemäß dem bekannten Fourier-Ansatz zu

$$(2.4.6) \quad \mathbf{q} = -\kappa(\theta, p) \nabla \theta$$

mit  $\kappa > 0$  (Wärmeleitfähigkeit).

Das bisher Ausgeführte gilt in dieser Allgemeinheit sowohl für die übliche Plastizität als auch für die sogenannte Umwandlungsplastizität (TRIP). Die Unterschiede liegen in der konkreten Gestalt des Funktionals  $\mathfrak{F}$  in (2.4.5) (s. weiter unten).

Als Schlußfolgerungen aus den obigen Annahmen wollen wir die Grundgleichungen für die **isotrope Thermo-Elasto-Plastizität mit Phasenumwandlungen** (für den Fall  $\det F_{in} = 1$ ) hinschreiben:

$$(2.4.7) \quad \rho_0 \frac{d^2 \mathbf{u}}{dt^2} - \operatorname{div} (\mathbf{I} + \nabla \mathbf{u}) \mathbf{S} = \mathbf{f} \quad \text{in } \Omega \times ]0, T[,$$

$$(2.4.8) \quad \rho_0 c_e \frac{d}{dt} \theta - \operatorname{div} (\kappa \nabla \theta) = \theta \frac{\partial S}{\partial \theta} \bullet \bullet \frac{dE_{te}}{dt} + S \bullet \bullet \frac{dE_{in}}{dt} + 2 (F_{in}^{-1} \frac{dF_{in}}{dt} (S - \theta \frac{\partial S}{\partial \theta})) \bullet \bullet E_{te} + \\ + \theta F S \frac{\partial F_{in}^T}{\partial \theta} \bullet \bullet \frac{d \hat{F}_{te}}{dt} - \rho_0 \sum_{i=1}^{m-1} \frac{\partial \hat{e}}{\partial p_i} \tilde{\gamma}_i + r \quad \text{in } \Omega \times ]0, T[,$$

$$(2.4.9) \quad \frac{d}{dt} p_i = \tilde{\gamma}_i (E_d^t, E, \theta_d^t, \theta, \theta', \nabla \theta, p) + \varphi_i \quad i = 1, \dots, m-1, \text{ in } \Omega \times ]0, T[,$$

$$(2.4.10) \quad E_{in}(t) = \int_{s=0}^t (\tau^*(s), \theta(s), p(s)),$$

$$(2.4.11) \quad \det F_{in} = 1 \quad \text{in } \Omega \times ]0, T[,$$

$$(2.4.12) \quad S = 2\mu C_{in}^{-1} (E - E_{in}) C_{in}^{-1} + \lambda \operatorname{tr}(F_{in}^{-T} (E - E_{in}) F_{in}^{-1}) C_{in}^{-1} + \delta C_{in}^{-1} [(E - E_{in}) C_{in}^{-1}]^2 + \\ - (\det F) \{ 3K\alpha (\theta - \theta_0) + K \frac{\rho_0 - \rho}{\rho} \} C^{-1},$$

sowie

$$(2.4.13) \quad E = \frac{1}{2} (\nabla u + \nabla u^T + \nabla u^T \nabla u), \quad E_{in} = \frac{1}{2} (F_{in}^T F_{in} - I), \\ E_{te} = E - E_{in}, \quad C_{in} = 2 E_{in} + I, \quad C = 2 E + I.$$

Gesucht sind die Verschiebungen  $u$ , die Temperatur  $\theta$ , die Phasenanteile  $p$ , sowie das Tensorfeld  $F_{in}$ .

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

Gilt speziell  $F_{in}(t) = 0$  für alle Zeiten, so folgen aus den obigen Gleichungen (2.4.7) – (2.4.13) die Gleichungen der Thermoelastizität mit Phasenumwandlungen (vgl. [Wol00]).

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 (2.4.10). In den nächsten Punkten wollen wir hierauf näher eingehen.

## 2.5. Klassische Plastizität

Viele Modelle der Plastizität beinhalten eine Fließgrenze. In Verallgemeinerung der Situation ohne Phasenumwandlungen nehmen wir an, es gebe eine positive Zahl

$\tau_0 = \tau_0(\theta, \rho)$ , genannt Fließgrenze, sowie eine nichtnegative Tensorfunktion  $f$  („Fließfunktion“). Dann soll z.B. gelten:

Plastische Deformation findet nur statt, falls

$$(2.5.1) \quad f(\tau^*) \geq \tau_0(\theta, \rho)$$

( $\tau^*$  - Deviator des Cauchyschen Spannungstensors).

Als Funktion  $f$  kann z.B. die van-Mises-Funktion

$$(2.5.2) \quad f(\tau^*) := (\tau^* \cdot \tau^*)^{\frac{1}{2}}$$

gewählt werden. Im allgemeinen enthält  $f$  eine Norm auf dem Raum der Deviatoren. Experimente zeigen, daß für plastische Effekte die Abweichung der Spannung von einem isotropen Zustand - bezogen auf die aktuelle Konfiguration - maßgebend ist.

Daher wird der Cauchysche Spannungstensor  $\tau$  verwendet.

Eine isotrop anliegende Spannung (d.h. ein Druck) bewirkt keine plastische Bewegung, weshalb der Deviator des Spannungstensors Verwendung findet.

Experimente zeigen, daß die plastische Bewegung volumenerhaltend ist. Somit bleibt die Beziehung (2.4.11) bestehen.

Wir berücksichtigen den Zusammenhang der Spannungstensoren:

$$(2.5.3) \quad \tau = (\det F)^{-1} F S F^T.$$

Die Annahmen (2.5.1) - (2.5.3) ergeben zusammengefaßt

$$(2.5.4) \quad E_{in}(t) = \int_{s=0}^t (\tau^*(s) (1 - H(\tau_0(\theta(s), \rho(s)) - f(\tau^*(s))))), \theta(s), \rho(s) ).$$

Unter Beachtung von (2.5.3) ist das ein Funktional in der Form (2.4.5) (mit  $H$  gleich Heavyside-Funktion) und wir erhalten die Gleichungen (2.4.7) – (2.4.12) mit spezialisiertem Funktional  $\mathfrak{F}$ , das entsprechend des konkreten Plastizitätsmodells weiter zu charakterisieren ist.

Außerdem können weitere Größen (z.B. zur Beschreibung von Verfestigungen) nebst zugehörigen Evolutionsgleichungen in das Modell integriert werden (Vgl. z.B. [Hau00]). In diesem Fall ist das System (2.4.7) – (2.4.13) durch entsprechende Gleichungen für diese Größen zu ergänzen.

## 2.6. Umwandlungsplastizität

Experimente zeigen, daß während der Phasenumwandlungen eine andauernde, plastische Verformung auftreten kann, die mit der „klassischen“ Plastizität nicht zu erfassen ist. Diese Umwandlungsplastizität tritt bereits bei Spannungen auf, die

wesentlich unterhalb der Fließgrenzen der beteiligten Phasen liegen. Wir verweisen auf die umfangreiche Literatur (z.B. [Pie00a, b], [Obe99], [Fis99], [Fis96], [Bes93], [Mit87], [Leb89a], [Leb89b], [Den83]), 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 Belastung modelliert [Mit87], [Leb89a]. Bei der Bildung einer Phase (z.B. Martensit durch Abschrecken) wurde folgender Zusammenhang vorgeschlagen

$$(2.6.1) \quad \frac{d}{dt} \varepsilon_{\text{TRIP}} = \frac{3}{2} K \tau^* \Phi'(z) z'$$

wobei  $\varepsilon_{\text{TRIP}}$  ein durch die Umwandlungsplastizität hervorgerufener zusätzlicher linearisierter Verzerrungstensors ist. Die Bezeichnung TRIP steht für „transformation induced plasticity“. Weiter sind  $\tau^*$  der Deviator des Cauchyschen Spannungstensors  $\tau$ ,  $z$  die sich bildende Phase,  $K$  eine Materialkonstante und  $\Phi$  eine monotone Funktion auf  $[0, 1]$  mit  $\Phi(0) = 0$  und  $\Phi(1) = 1$ . Die Konstante  $K$  wird in [Fis96] angegeben zu

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

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

$$(2.6.2) \quad \begin{array}{lll} \Phi(z) := z(1 - \ln(z)) & \text{in [Leb89a]} & \text{sowie} \\ \Phi(z) := z & \text{in [Tan85]} & \text{und} \\ \Phi(z) := z(2 - z) & \text{in [Den83]}. & \end{array}$$

In [Leb89a] werden unter bestimmten Annahmen theoretische Begründungen für  $\Phi$  und  $K$  gegeben und  $K$  durch andere Größen ausgedrückt.

Fußend auf [Ino89] läßt sich der Ansatz (2.6.1) auf  $m$  Phasen erweitern zu

$$(2.6.3) \quad \frac{d}{dt} \varepsilon_{\text{TRIP}} = \frac{3}{2} \sum_{i=1}^m K_i \Phi_i'(p_i) p_i' H(p_i') \tau^*$$

mit phasenindividuellen  $K_i$  und  $\Phi_i$ . 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  $E_{\text{TRIP}}(0) = 0$ , (folgt aus Annahme des Modells) folgt aus (2.6.3) die Beziehung

$$(2.6.4) \quad E_{\text{TRIP}}(t) = \frac{3}{2} \sum_{i=1}^m K_i \int_0^t \Phi_i'(p_i) p_i' H(p_i') \tau^* ds.$$

Damit ist der von der Umwandlungsplastizität hervorgerufene Verzerrungstensor eine Spezialisierung von (2.4.5). Solange noch keine Effekte der „normalen“ Plastizität mit Fließgrenze zu erwarten sind, können wir wie im Kapitel 2.2. den Deformationsgradienten  $F$  multiplikativ zerlegen in

$$(2.6.5) \quad F = \overset{\wedge}{F}_{te} F_{\text{TRIP}},$$

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 (2.4.7) – (2.4.13), wobei (2.4.10) durch (2.6.4) zu ersetzen ist (mit Indices „TRIP“ anstelle von „in“).

## 2.7. Umwandlungsplastizität und klassische Plastizität

Die Modellierung von klassischer und Umwandlungsplastizität gestaltet sich aufwendiger, besonders in der geometrisch nichtlinearen Theorie.

Möglich wäre es, die Zwischenkonfiguration durch beide Arten der Plastizität zu definieren. Das eigentliche Problem besteht dann darin, die Gestalt des Funktionals  $\mathfrak{F}$  in (2.4.5) bzw. (2.4.10) anzugeben. Eine bloße Addition der entsprechenden Funktionale in (2.5.4) und (2.6.4) ist bei großen Deformationen nicht korrekt und nur bei der oft üblichen Linearisierung akzeptabel.

Der Ausweg besteht darin, eine Zerlegung von  $F$  in drei Faktoren vorzunehmen und zwei Zwischenkonfigurationen zu betrachten.

**Definition 2.7.1.** Seien  $\chi$  eine Bewegung und  $F = \nabla\chi$  zugehöriger Deformationsgradient eines Körpers  $\bar{\Omega}$  gemäß Definition 2.1.3. sowie

$$(2.7.1) \quad F = \hat{F}_{te} \hat{F}_{pl} \hat{F}_{TRIP}$$

eine multiplikative Zerlegung von  $F$  in drei stückweise stetig differenzierbare (bezüglich  $t$ ) Faktoren mit positiver Determinante. Dann definieren wir

$$(2.7.2) \quad E_{TRIP} := \frac{1}{2} (F_{TRIP}^T F_{TRIP} - I),$$

$$(2.7.3) \quad \hat{E}_{pl} := \frac{1}{2} (\hat{F}_{pl}^T \hat{F}_{pl} - I),$$

$$(2.7.4) \quad E_{pl} := F_{TRIP}^T \hat{E}_{pl} F_{TRIP},$$

$$(2.7.5) \quad \hat{E}_{te} := \frac{1}{2} (\hat{F}_{te}^T \hat{F}_{te} - I),$$

$$(2.7.6) \quad E_{te} := F_{TRIP}^T \hat{E}_{te} F_{TRIP},$$

$$(2.7.7) \quad \hat{E}_{te} := \hat{F}_{pl}^T \hat{E}_{te} \hat{F}_{pl},$$

$$(2.7.8) \quad \hat{E} := F_{TRIP}^{-T} E F_{TRIP}^{-1}, \quad (E - \text{Greenscher Verzerrungstensor gemäß (2.1.8)}),$$

$$(2.7.9) \quad \hat{E} := \hat{F}_{pl}^{-T} \hat{E} \hat{F}_{pl}^{-1},$$

Die Abbildung  $(\xi, t) \rightarrow F_{TRIP}(\xi, t)$  heißt erste Zwischenkonfiguration, hervorgerufen durch die Umwandlungsplastizität.

Die Abbildung  $(\xi, t) \rightarrow \hat{F}_{pl} F_{TRIP}(\xi, t)$  heißt zweite Zwischenkonfiguration, hervorgerufen durch die Umwandlungsplastizität und die (klassische) Plastizität.

In obiger Definition beziehen sich Größen ohne Dach auf die Referenzkonfiguration, Größen mit einem Dach ( $\hat{\phantom{x}}$ ) auf die erste und Größen mit zwei Dächern auf die zweite Zwischenkonfiguration.

**Bemerkung 2.7.2.** Es wäre auch möglich, anstatt der Zerlegung (2.7.1) die Zerlegung

$$(2.7.10) \quad F = \hat{F}_{te} \hat{F}_{TRIP} \hat{F}_{pl}$$

zu wählen und die nachfolgenden Formeln sinngemäß zu verändern. Eine Bevorzugung einer Variante könnte durch spezielle Überlegungen bei konkreten Anwendungen nahegelegt werden.

**Bemerkungen 2.7.3. (i)** Offenbar gilt

$$(2.7.11) \quad E = E_{te} + E_{pl} + E_{TRIP}.$$

**(ii)** Wie bereits im Fall einer Zwischenkonfiguration ist auch die Zerlegung (2.7.1) nicht eindeutig. Denn neben (2.7.1) kann auch geschrieben werden

$$(2.7.12) \quad F = (\hat{F}_{te} R^T) (R \hat{F}_{pl} Q^T) (Q F_{TRIP}),$$

wobei  $R$  und  $Q$  beliebige stückweise stetig differenzierbare Funktionen in die Orthogonalmatrizen mit Determinante gleich eins sind. Es ist leicht nachzurechnen, daß die auf die Referenzkonfiguration bezogenen Verzerrungstensoren  $E$ ,  $E_{te}$ ,  $E_{pl}$  und  $E_{TRIP}$  bezüglich derartiger starrer Drehungen der Zwischenkonfigurationen invariant sind. Die auf die erste Zwischenkonfiguration bezogenen

Verzerrungstensoren  $\hat{E}_{te}$  und  $\hat{E}_{pl}$  transformieren sich gemäß

$$(2.7.13) \quad \hat{E}^{(neu)} = Q \hat{E}^{(alt)} Q^T.$$

Für den auf die zweite Zwischenkonfiguration bezogenen Verzerrungstensor  $\hat{\hat{E}}_{te}$  gilt

$$(2.7.14) \quad \hat{\hat{E}}_{te}^{(neu)} = R \hat{E}_{te}^{(alt)} R^T.$$

**(iii)** Für die zweiten Piola-Kirchhoff-Tensoren gelten die Zusammenhänge

$$(2.7.15) \quad \hat{S} = F_{TRIP} S F_{TRIP}^T,$$

$$(2.7.16) \quad \hat{\hat{S}} = F_{pl} \hat{S} F_{pl}^T.$$

Es wäre möglich, die Körperdefinition 2.2.5. auf den Fall zweier Zwischenkonfigurationen zu erweitern und wie im Punkt 2.3. die Clausius-Duhem-Ungleichung auszuwerten. Wir wollen diesen recht aufwendigen Weg hier nicht gehen, sondern zeigen, daß es speziellere Annahmen erlauben, den jetzigen Fall in das bisherige Konzept gut zu integrieren.

Wir nehmen an, daß plastische und umwandlungsplastische Deformationen volumenerhaltend sind. Die Volumenänderung infolge von Phasenumwandlungen wird wie im Punkt 2.2. in die thermoelastische Bewegung mit hineingnommen.

Bezüglich der zweiten Zwischenkonfiguration soll sich der Körper thermoelastisch verhalten, wobei Umwandlungsspannungen miteinbezogen werden (Vgl. (2.4.2)).

Wir formulieren also.

**Annahmen 2.7.4.** Es werden folgende Materialannahmen getroffen:

$$(2.7.17) \quad \det F_{\text{TRIP}} = 1, \quad \det \hat{F}_{\text{pl}} = 1.$$

$$(2.7.18) \quad E_{\text{TRIP}} = \underset{s=0}{\mathfrak{F}}_1^t(\tau^*, \theta, p),$$

$$(2.7.19) \quad \hat{E}_{\text{pl}} = \underset{s=0}{\mathfrak{F}}_2^t(\tau^*, \theta, p),$$

$$(2.7.20) \quad \hat{S} = \sigma(\hat{E}_{\text{te}}, \theta, p).$$

Dabei seien  $\mathfrak{F}_1$  und  $\mathfrak{F}_2$  Funktionale in der Art (2.6.4) bzw. (2.5.4),  $\tau^*$  sei der Deviator des Cauchyschen Spannungstensors. Weiter sei  $\sigma$  eine Funktion ihrer Argumente, im einfacheren Fall sei  $\sigma$  isotrop.

Aus (2.7.19) und (2.7.4) folgt leicht

$$(2.7.21) \quad E_{\text{pl}} := F_{\text{TRIP}}^T \hat{E}_{\text{pl}} F_{\text{TRIP}}.$$

Hieraus ist ersichtlich, daß eine Addition der rechts in (2.7.18), (2.7.19) stehenden Funktionale zu einem gemeinsamen, das dann in (2.4.5) eingefügt werden soll, nicht korrekt ist. Es ist aber möglich, folgende Größen zu definieren

$$(2.7.22) \quad E_{\text{in}} := E_{\text{TRIP}} + E_{\text{pl}} = \mathfrak{F}_1 + F_{\text{TRIP}}^T \mathfrak{F}_2 F_{\text{TRIP}},$$

$$(2.7.23) \quad F_{\text{in}} := \hat{F}_{\text{pl}} F_{\text{TRIP}}.$$

Jetzt sind wir in der Situation der Punkte 2.2. bis 2.4. Andererseits ist zu sehen, daß bei der Annahme kleiner umwandlungsplastischer Deformationen eine einfache Addition von (2.7.18), (2.7.19) möglich ist. In diesem Fall erscheint die Zerlegung (2.7.1) vorteilhafter als die in (2.7.10).

Das Bisherige resümierend, können wir das System der gekoppelten Gleichungen für die isotrope Thermoelasto-Plastizität mit Phasenumwandlungen und Umwandlungsplastizität angeben.

$$(2.7.24) \quad \rho_0 \frac{d^2 \mathbf{u}}{dt^2} - \operatorname{div} (\mathbf{I} + \nabla \mathbf{u}) \mathbf{S} = \mathbf{f} \quad \text{in } \Omega \times ]0, T[,$$

$$(2.7.25) \quad \rho_0 c_e \frac{d\theta}{dt} - \operatorname{div} (\kappa \nabla \theta) = \theta \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \theta} \bullet \bullet \frac{d\mathbf{E}_{te}}{dt} + \mathbf{S} \bullet \bullet \frac{d\mathbf{E}_{in}}{dt} + 2 \left( \mathbf{F}_{in}^{-1} \frac{d\mathbf{F}_{in}}{dt} (\mathbf{S} - \theta \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \theta}) \bullet \bullet \mathbf{E}_{te} + \right. \\ \left. + \theta \mathbf{F} \mathbf{S} \frac{\partial \mathbf{F}_{in}^T}{\partial \theta} \bullet \bullet \frac{d\hat{\mathbf{F}}_{te}}{dt} - \rho_0 \sum_{i=1}^{m-1} \frac{\partial \hat{\mathbf{e}}}{\partial p_i} \tilde{\gamma}_i + r \right) \quad \text{in } \Omega \times ]0, T[,$$

$$(2.7.26) \quad \frac{d}{dt} p_i = \tilde{\gamma}_i (\mathbf{E}_d^t, \mathbf{E}, \theta_d^t, \theta, \theta^t, \nabla \theta, p) + \varphi_i \quad i = 1, \dots, m-1, \quad \text{in } \Omega \times ]0, T[,$$

$$(2.7.27) \quad \mathbf{E}_{in} = \mathfrak{E}_1 + \mathbf{F}_{TRIP}^T \mathfrak{E}_2 \mathbf{F}_{TRIP},$$

$$(2.7.28) \quad \det \mathbf{F}_{TRIP} = 1, \quad \det \hat{\mathbf{F}}_{pl} = 1. \quad \text{in } \Omega \times ]0, T[,$$

$$(2.7.29) \quad \mathbf{S} = 2\mu \mathbf{C}_{in}^{-1} (\mathbf{E} - \mathbf{E}_{TRIP} - \mathbf{E}_{pl}) \mathbf{C}_{in}^{-1} + \lambda \operatorname{tr}(\mathbf{F}_{in}^{-T} (\mathbf{E} - \mathbf{E}_{TRIP} - \mathbf{E}_{pl}) \mathbf{F}_{in}^{-1}) \mathbf{C}_{in}^{-1} + \\ + \delta \mathbf{C}_{in}^{-1} [(\mathbf{E} - \mathbf{E}_{TRIP} - \mathbf{E}_{pl}) \mathbf{C}_{in}^{-1}]^2 - (\det \mathbf{F}) \{ 3K\alpha (\theta - \theta_0) + K \frac{\rho_0 - \rho}{\rho} \} \mathbf{C}^{-1}.$$

Außerdem gelten die oben aufgeführten bzw. sich ergebenden Beziehungen zwischen den beteiligten Tensoren

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T + \nabla \mathbf{u}^T \nabla \mathbf{u}), \quad \mathbf{E}_{TRIP} := \frac{1}{2} (\mathbf{F}_{TRIP}^T \mathbf{F}_{TRIP} - \mathbf{I}), \\ \mathbf{E}_{pl} := \frac{1}{2} \mathbf{F}_{TRIP}^T (\hat{\mathbf{F}}_{pl}^T \hat{\mathbf{F}}_{pl} - \mathbf{I}) \mathbf{F}_{TRIP}, \quad \mathbf{F}_{in} = \hat{\mathbf{F}}_{pl} \mathbf{F}_{TRIP}, \quad \hat{\mathbf{F}}_{te} = \mathbf{F}_{TRIP}^{-1} \hat{\mathbf{F}}_{pl}^{-1} \\ \mathbf{E}_{te} = \mathbf{E} - \mathbf{E}_{pl} - \mathbf{E}_{TRIP}, \quad \mathbf{C}_{in} = 2 \mathbf{E}_{in} + \mathbf{I}, \quad \mathbf{C} = 2 \mathbf{E} + \mathbf{I}.$$

Gesucht sind die Verschiebungen  $\mathbf{u}$ , die Temperatur  $\theta$ , die Phasenanteile  $p$ , sowie, falls von Interesse, die Tensorfelder  $\hat{\mathbf{F}}_{pl}$  und  $\mathbf{F}_{TRIP}$ .

Für  $\mathbf{u}$  und  $\theta$  sind die üblichen Anfangs- und Randwerte, für den Phasenvektor  $p$  der Anfangswert hinzuzufügen. Die Anfangswerte für  $\hat{\mathbf{F}}_{pl}$  und  $\mathbf{F}_{TRIP}$  sind identisch null und folgen aus dem Modell, da die Referenzkonfiguration ohne plastische und umwandlungsplastische Verformungen angenommen wird.

### 3. Zur Modellierung von Phasenumwandlungen im Stahl

Ein differenziertes Eingehen auf die verschiedenen vorhandenen Modelle für Phasenumwandlungen im Stahl würde den Rahmen dieser Arbeit sprengen.

Wir können hier nur kurz die Problematik im Zusammenhang mit der allgemeinen Kontinuumsmechanik beleuchten. Es gibt unterschiedliche Modelle, die teilweise für spezielle Situationen entwickelt wurden, so z.B. Modelle für isotherme und spezielle nichtisotherme Umwandlungen. Für eine ausführliche Zusammenstellung wichtiger Umwandlungsmodelle verweisen wir auf [Hun02].

Im Kontext der allgemeinen Kontinuumsmechanik kommen strenggenommen nur Modelle in Betracht, die eine beliebige Temperaturführung gestatten, da infolge der oben beschriebenen Wechselwirkungen apriori nicht von einem isothermen oder anderen speziellen Temperaturverlauf ausgegangen werden kann.

Für spezielle Aufgaben wie etwa die Simulation von Abschreckprozessen werden natürlich mit Erfolg Modelle verwendet, die sich ohne weitere Ergänzungen bzw. Modifikationen nicht in die allgemeine Kontinuumsmechanik integrieren lassen (Vgl. z.B. die Arbeiten [Höm96], [Fuh99]).

Wir betrachten die idealisierte Situation, in der nur die beiden Phasen Austenit und Perlit auftreten.

Für die Umwandlung von Austenit zu Perlit gilt bei konstanter Temperatur die Johnson-Mehl-Avrami-Gleichung

$$(3.1) \quad p'(x, t) = (\bar{p}(\theta) - p(x, t)) \frac{n(\theta)}{\tau(\theta)} \left[ -\ln(1 - p(x, t) \bar{p}(\theta)^{-1}) \right]^{1 - \frac{1}{n(\theta)}} \quad \text{in } \Omega \times ]0, T[$$

Hierbei ist  $p$  der Volumenanteil von Perlit,  $\bar{p}(\theta)$  der von der Temperatur  $\theta$  abhängige Gleichgewichtsanteil,  $n$  und  $\tau$  sind temperaturabhängige Materialparameter (s. z.B. [Hun99]).

Die Temperatur  $\theta$  selbst hängt i.a. von Ort und Zeit ab, aus Gründen der Übersichtlichkeit wurde diese Abhängigkeit in (3.1) nicht mitgeschrieben, ebenso die Ortsabhängigkeit von  $p$ .

Für nichtisotherme Abkühlvorgänge wurde in [Hun99] die Formel (3.1) erweitert zu

$$(3.2) \quad p'(t) = (\bar{p}(\theta) - p(t)) \frac{n(\theta)}{\tau(\theta)} \left[ -\ln(1 - p(t) \bar{p}(\theta)^{-1}) \right]^{1 - \frac{1}{n(\theta)}} f(\theta, \theta').$$

Die Funktion  $f$  hat eine Korrekturfunktion, da ohne  $f$  diese Gleichung nur für die Umwandlung bei konstantem  $\theta$  gilt. Diese Funktion muß experimentell bestimmt werden, es soll gelten  $f(\theta, 0) = 1$ .

Bei Verwendung der Formel (3.2) wird verabredungsgemäß davon ausgegangen, daß die Temperatur  $\theta$  unterhalb der Austenit-Starttemperatur  $\theta_a$  liegt, und daß der

Gleichgewichtsanteil des Perlits noch nicht erreicht ist. Die Formel (3.2) muß also erweitert werden zu

$$(3.3) \quad p'(t) = \frac{n(\theta)}{\tau(\theta)} \left[ -\ln(1 - p(t) \bar{p}(\theta)^{-1}) \right]^{1 - \frac{1}{n(\theta)}} f(\theta, \theta') \cdot$$

$$\cdot \max \{ \bar{p}(\theta(t)) - p(t), 0 \} H(\theta_a - \theta(t))$$

Die Terme mit dem Maximum und der Heaviside-Funktion übernehmen also eine Schalterfunktion.

Die Gleichung (3.3) ist trotz ihrer Länge noch nicht zur gleichzeitigen Beschreibung der Rückumwandlung von Perlit zu Austenit geeignet, falls die Temperatur  $\theta_a$  übertrifft. Diese Umwandlung kann modelliert werden, indem wir zur rechten Seite in (3.3) den folgenden Ausdruck addieren.

$$(3.4) \quad - p(t) f_1(\theta(t), p(t)) (1 - H(\theta_a - \theta(t)))$$

Hierbei wird berücksichtigt, daß sich Austenit aus dem vorhanden Perlit bildet, falls die Temperatur hinreichend hoch ist. Für  $f_1$  wird oft angesetzt

$$(3.5) \quad f_1 = \frac{n_1(\theta)}{\tau_1(\theta)} \left[ -\ln(1 - p(t)) \right]^{1 - \frac{1}{n_1(\theta)}} f_2(\theta, \theta'),$$

da die Umwandlung von Perlit zu Austenit auf gleicher Grundlage wie die von Austenit zu Perlit abläuft. Die Materialparameter sind nur verschieden. Abschließend erhalten wir für unser angenommenes Zweiphasen-Modell (Austenit  $\leftrightarrow$  Perlit):

$$(3.6) \quad p'(t) = \frac{n(\theta)}{\tau(\theta)} \left[ -\ln(1 - p(t) \bar{p}(\theta)^{-1}) \right]^{1 - \frac{1}{n(\theta)}} f(\theta, \theta') \cdot$$

$$\cdot \max \{ \bar{p}(\theta(t)) - p(t), 0 \} H(\theta_a - \theta(t)) +$$

$$- p(t) \frac{n_1(\theta)}{\tau_1(\theta)} \left[ -\ln(1 - p(x, t)) \right]^{1 - \frac{1}{n_1(\theta)}} f_2(\theta, \theta') (1 - H(\theta_a - \theta(t)))$$

$$(3.7) \quad a'(t) = - \frac{n(\theta)}{\tau(\theta)} \left[ -\ln(1 - p(t) \bar{p}(\theta)^{-1}) \right]^{1 - \frac{1}{n(\theta)}} f(\theta, \theta') \cdot$$

$$\cdot \max \{ \bar{p}(\theta(t)) - p(t), 0 \} H(\theta_a - \theta(t)) +$$

$$+ p(t) \frac{n_1(\theta)}{\tau_1(\theta)} \left[ -\ln(1 - p(t)) \right]^{1 - \frac{1}{n_1(\theta)}} f_2(\theta, \theta') (1 - H(\theta_a - \theta(t)))$$

Diese beiden Gleichungen sind eine Spezialisierung von (2.1.13), sie berücksichtigen noch nicht den oft vernachlässigten Einfluß der Spannungen auf die Phasentransformationen, der bei größeren anliegenden Zug- oder Druckspannungen beträchtlich sein kann (Vgl. z.B. [Ahr00] für experimentelle Untersuchungen sowie

[Ino85] für Ansatz und Simulation). Eine derartige Korrektur könnte durch Faktoren vorgenommen werden, die von einer Norm des Cauchyschen Spannungstensors abhängen und für verschwindende Spannungen gleich eins sind. Hier gibt es offenbar noch größeren Forschungsbedarf.

Anstelle der Johnson-Mehl-Avrami-Gleichung (3.1) wäre es auch möglich, Umwandlungsmodelle als Ausgangspunkt zu nehmen, die die Geschichte der Temperatur (Vgl. z.B. [Mit92], [Lar95]) berücksichtigen

$$(3.8) \quad p'(t) = (1 - p(t)) 3 \int_0^t f(\theta(s)) (t - s)^2 ds$$

oder mit linearen Differentialgleichungen auskommen, wie von Leblond / Devaux [Leb84] vorgeschlagen. Im Falle von zwei Phasen (Austenit zu Perlit, nur Perlit notiert) lautet es

$$(3.9) \quad p'(t) = \frac{\bar{p}(\theta(t)) - p(t)}{\tau(\theta(t))}.$$

Dabei ist  $\bar{p}(\theta)$  der (Gleichgewichts-)Anteil des Perlits, der sich nach unendlich langer Zeit bei der konstanten Temperatur  $\theta$  einstellen würde.  $\tau$  ist ein temperaturabhängiger Materialparameter.

### **Ergänzung: Herleitung des Terms für die Umwandlungsspannungen**

Bei der Thermoelastizität einer koexistierenden Mischung rufen Dichteänderungen selbst bei homogener Temperatur Spannungen hervor. Daher müssen die klassischen Duhamel-Neumann-Beziehungen der linearen Thermoelastizität (vgl. z.B. [Dau90])

$$(E.1) \quad \varepsilon_{ij} = \frac{1+\nu}{E} \tau_{ij} - \frac{\nu}{E} \text{tr}(\tau) \delta_{ij} + \alpha (\theta - \theta_0) \delta_{ij}$$

durch den Anteil der Umwandlungsspannungen ergänzt werden ( $\varepsilon$  := linearisierter Verzerrungstensor,  $\tau$  := (Cauchyscher) Spannungstensor). Wir betrachten den Fall von drei Raumdimensionen.

Seien  $\rho_0$  die Dichte der Referenzkonfiguration und  $\rho$  die aktuelle Dichte der Mischung bezogen auf die Referenztemperatur (setzt sich nach Mischungsregel aus den Dichten der Phasen und deren Anteilen zusammen). Dann gilt für die relative Volumenänderung

$$(E.2) \quad \frac{V_1 - V_0}{V_0} = \frac{\rho_0 - \rho}{\rho}.$$

Daraus folgt für lokale Deformationen die entsprechende relative Längenänderung

$$(E.3) \quad \frac{l_1 - l_0}{l_0} = \frac{1}{3} \frac{\rho_0 - \rho}{\rho},$$

so daß zu (E.1) der Term  $\frac{1}{3} \frac{\rho_0 - \rho}{\rho} \delta_{ij}$  zu ergänzen ist.

Durch anschließendes Auflösen der Gleichung nach  $\tau$  erhalten wir

$$(E.4) \quad \tau = \lambda(\text{tr } \varepsilon)I + 2\mu \varepsilon - 3K\alpha(\theta) (\theta - \theta_0)I - K \frac{\rho_0 - \rho}{\rho} I$$

Die letzten beiden Terme in (E.4) fügen wir auch nichtlinearen Modellen hinzu, wobei wir sie gemäß des Zusammenhangs zwischen Cauchy- und 2. Piola-Kirchhoff-Tensor

$$(E.5) \quad S = (\det F) F^{-1} \tau F^{-T}$$

umrechnen.

#### Literatur:

- [Ahr00] Ahrens, U., Besserdich, G., Maier, H. J.: Spannungsabhängiges bainitisches und martensitisches Umwandlungsverhalten eines niedrig legierten Stahl, HTM 55, 329-338, 2000
- [Ber89] Bertram, A.: Axiomatische Einführung in die Kontinuumsmechanik, BI-Wissenschaftsverlag, Mannheim, 1989
- [Ber92] Bertram, A.: Description of finite inelastic deformations, in: Proceedings of MECAMAT92, Cachan, pp. 821 – 835, 1992
- [Ber98] Bertram, A.: An alternative approach to finite plasticity based on material isomorphisms, Int. J. of Plasticity 52, pp. 353 – 374, 1998
- [Ber99] Bertram, A.: The dissipation-inequality of rate-independent thermoplasticity, ZAMM 79 S1, pp. S195 – S 198, 1999
- [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 distortions during martensitic hardening of SAE 4140 steel cylinders, Steel Res. 65 (1) 41 – 46, 1994
- [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.
- [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
- [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. et al.: Phasenumwandlungen im Stahl – Übersicht über vorhandene Modelle, erscheint demnächst, 2002
- [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
- [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*, *Technische Mechanik*, Bd. 20, Heft 3, 265-274, 2000
- [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
- [Sok67] Sokolnikoff, I. S.: *Tensor analysis: Theory and applications to geometry and mechanics of continua*, New York, Wiley, 1967
- [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
- [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

<http://www.math.uni-bremen.de/zetem/berichte.html>

- Vertrieb durch den Autor -

**Reports****Stand: 18. März 2002**

- 98-01. Peter Benner, Heike Faßbender:  
*An Implicitly Restarted Symplectic Lanczos Method for the Symplectic Eigenvalue Problem*, Juli 1998.
- 98-02. Heike Faßbender:  
*Sliding Window Schemes for Discrete Least-Squares Approximation by Trigonometric Polynomials*, Juli 1998.
- 98-03. Peter Benner, Maribel Castillo, Enrique S. Quintana Ortí:  
*Parallel Partial Stabilizing Algorithms for Large Linear Control Systems*, Juli 1998.
- 98-04. Peter Benner:  
*Computational Methods for Linear-Quadratic Optimization*, August 1998.
- 98-05. Peter Benner, Ralph Byers, Enrique S. Quintana Ortí, Gregorio Quintana Ortí:  
*Solving Algebraic Riccati Equations on Parallel Computers Using Newton's Method with Exact Line Search*, August 1998.
- 98-06. Lars Grüne, Fabian Wirth:  
*On the rate of convergence of infinite horizon discounted optimal value functions*, November 1998.
- 98-07. Peter Benner, Volker Mehrmann, Hongguo Xu:  
*A Note on the Numerical Solution of Complex Hamiltonian and Skew-Hamiltonian Eigenvalue Problems*, November 1998.
- 98-08. Eberhard Bänsch, Burkhard Höhn:  
*Numerical simulation of a silicon floating zone with a free capillary surface*, Dezember 1998.
- 99-01. Heike Faßbender:  
*The Parameterized SR Algorithm for Symplectic (Butterfly) Matrices*, Februar 1999.
- 99-02. Heike Faßbender:  
*Error Analysis of the symplectic Lanczos Method for the symplectic Eigenvalue Problem*, März 1999.
- 99-03. Eberhard Bänsch, Alfred Schmidt:  
*Simulation of dendritic crystal growth with thermal convection*, März 1999.
- 99-04. Eberhard Bänsch:  
*Finite element discretization of the Navier-Stokes equations with a free capillary surface*, März 1999.
- 99-05. Peter Benner:  
*Mathematik in der Berufspraxis*, Juli 1999.
- 99-06. Andrew D.B. Paice, Fabian R. Wirth:  
*Robustness of nonlinear systems and their domains of attraction*, August 1999.

- 99-07. Peter Benner, Enrique S. Quintana Ortí, Gregorio Quintana Ortí:  
*Balanced Truncation Model Reduction of Large-Scale Dense Systems on Parallel Computers*, September 1999.
- 99-08. Ronald Stöver:  
*Collocation methods for solving linear differential-algebraic boundary value problems*, September 1999.
- 99-09. Huseyin Akcay:  
*Modelling with Orthonormal Basis Functions*, September 1999.
- 99-10. Heike Faßbender, D. Steven Mackey, Niloufer Mackey:  
*Hamilton and Jacobi come full circle: Jacobi algorithms for structured Hamiltonian eigenproblems*, Oktober 1999.
- 99-11. Peter Benner, Vincente Hernández, Antonio Pastor:  
*On the Kleinman Iteration for Nonstabilizable System*, Oktober 1999.
- 99-12. Peter Benner, Heike Faßbender:  
*A Hybrid Method for the Numerical Solution of Discrete-Time Algebraic Riccati Equations*, November 1999.
- 99-13. Peter Benner, Enrique S. Quintana Ortí, Gregorio Quintana Ortí:  
*Numerical Solution of Schur Stable Linear Matrix Equations on Multicomputers*, November 1999.
- 99-14. Eberhard Bänsch, Karol Mikula:  
*Adaptivity in 3D Image Processing*, Dezember 1999.
- 00-01. Peter Benner, Volker Mehrmann, Hongguo Xu:  
*Perturbation Analysis for the Eigenvalue Problem of a Formal Product of Matrices*, Januar 2000.
- 00-02. Ziping Huang:  
*Finite Element Method for Mixed Problems with Penalty*, Januar 2000.
- 00-03. Gianfrancesco Martinico:  
*Recursive mesh refinement in 3D*, Februar 2000.
- 00-04. Eberhard Bänsch, Christoph Egbers, Oliver Meincke, Nicoleta Scurtu:  
*Taylor-Couette System with Asymmetric Boundary Conditions*, Februar 2000.
- 00-05. Peter Benner:  
*Symplectic Balancing of Hamiltonian Matrices*, Februar 2000.
- 00-06. Fabio Camilli, Lars Grüne, Fabian Wirth:  
*A regularization of Zubov's equation for robust domains of attraction*, März 2000.
- 00-07. Michael Wolff, Eberhard Bänsch, Michael Böhm, Dominic Davis:  
*Modellierung der Abkühlung von Stahlbrammen*, März 2000.
- 00-08. Stephan Dahlke, Peter Maaß, Gerd Teschke:  
*Interpolating Scaling Functions with Duals*, April 2000.
- 00-09. Jochen Behrens, Fabian Wirth:  
*A globalization procedure for locally stabilizing controllers*, Mai 2000.
- 00-10. Peter Maaß, Gerd Teschke, Werner Willmann, Günter Wollmann:  
*Detection and Classification of Material Attributes -- A Practical Application of Wavelet Analysis*, Mai 2000.
- 00-11. Stefan Boschert, Alfred Schmidt, Kunibert G. Siebert, Eberhard Bänsch, Klaus-Werner Benz, Gerhard Dziuk, Thomas Kaiser:  
*Simulation of Industrial Crystal Growth by the Vertical Bridgman Method*, Mai 2000.

- 00-12. Volker Lehmann, Gerd Teschke:  
*Wavelet Based Methods for Improved Wind Profiler Signal Processing*, Mai 2000.
- 00-13. Stephan Dahlke, Peter Maaß:  
*A Note on Interpolating Scaling Functions*, August 2000.
- 00-14. Ronny Ramlau, Rolf Clackdoyle, Frédéric Noo, Girish Bal:  
*Accurate Attenuation Correction in SPECT Imaging using Optimization of Bilinear Functions and Assuming an Unknown Spatially-Varying Attenuation Distribution*, September 2000.
- 00-15. Peter Kunkel, Ronald Stöver:  
*Symmetric collocation methods for linear differential-algebraic boundary value problems*, September 2000.
- 00-16. Fabian Wirth:  
*The generalized spectral radius and extremal norms*, Oktober 2000.
- 00-17. Frank Stenger, Ahmad Reza Naghsh-Nilchi, Jenny Niebsch, Ronny Ramlau:  
*A unified approach to the approximate solution of PDE*, November 2000.
- 00-18. Peter Benner, Enrique S. Quintana-Ortí, Gregorio Quintana-Ortí:  
*Parallel algorithms for model reduction of discrete-time systems*, Dezember 2000.
- 00-19. Ronny Ramlau:  
*A steepest descent algorithm for the global minimization of Tikhonov-Phillips functional*, Dezember 2000.
- 01-01. Torsten Köhler, Peter Maaß, Peter Wust, Martin Seebass:  
*Efficient methods in hyperthermia treatment planning*, Januar 2001.
- 01-02. Peter Benner, Ralph Byers, Rafael Mayo, Enrique S. Quintana-Ortí, Vicente Hernández:  
*Parallel Algorithms for LQ Optimal Control of Discrete-Time Periodic Linear Systems*, Februar 2001.
- 01-03. Peter Benner, Enrique S. Quintana-Ortí, Gregorio Quintana-Ortí:  
*Efficient Numerical Algorithms for Balanced Stochastic Truncation*, März 2001.
- 01-04. Peter Benner, Maribel Castillo, Enrique S. Quintana-Ortí:  
*Partial Stabilization of Large-Scale Discrete-Time Linear Control Systems*, März 2001.
- 01-05. Stephan Dahlke:  
*Besov Regularity for Edge Singularities in Polyhedral Domains*, Mai 2001.
- 01-06. Fabian Wirth:  
*A linearization principle for robustness with respect to time-varying perturbations*, Mai 2001.
- 01-07. Stephan Dahlke, Wolfgang Dahmen, Karsten Urban:  
*Adaptive Wavelet Methods for Saddle Point Problems - Optimal Convergence Rates*, Juli 2001.
- 01-08. Ronny Ramlau:  
*Morozov's Discrepancy Principle for Tikhonov regularization of nonlinear operators*, Juli 2001.
- 01-09. Michael Wolff:  
*Einführung des Drucks für die instationären Stokes-Gleichungen mittels der Methode von Kaplan*, Juli 2001.
- 01-10. Stephan Dahlke, Peter Maaß, Gerd Teschke:  
*Reconstruction of Reflectivity Desities by Wavelet Transforms*, August 2001.

- 01-11. Stephan Dahlke:  
*Besov Regularity for the Neumann Problem*, August 2001.
- 01-12. Bernard Haasdonk, Mario Ohlberger, Martin Rumpf, Alfred Schmidt, Kunibert G. Siebert:  
*h-p-Multiresolution Visualization of Adaptive Finite Element Simulations*,  
Oktober 2001.
- 01-13. Stephan Dahlke, Gabriele Steidl, Gerd Teschke:  
*Coorbit Spaces and Banach Frames on Homogeneous Spaces with  
Applications to Analyzing Functions on Spheres*, August 2001.
- 02-01. Michael Wolff, Michael Böhm:  
*Zur Modellierung der Thermoelasto-Plastizität mit Phasenumwandlungen bei  
Stählen sowie der Umwandlungsplastizität*, Februar 2002.