

Modellierung der texturinduzierten plastischen Anisotropie auf verschiedenen Skalen

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades

Doktoringenieur

(Dr.-Ing.)

von Dipl.-Ing. Gerrit Risy

geb. am 21.02.1978 in Magdeburg

genehmigt durch die Fakultät für Maschinenbau

der Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg

Gutachter: Prof. Dr.-Ing. Albrecht Bertram

Prof. Dr.-Ing. Thomas Böhlke

Prof. Dr.-Ing. Arnold Krawietz

Promotionskolloquium am 02.02.2007

Zusammenfassung

Der numerische Aufwand einer Simulation des makroskopischen, mechanischen Verhaltens von Metallen bei großen Deformationen unter Verwendung einer detaillierten Beschreibung der Mikrostruktur ist sehr hoch. Aus diesem Grund werden häufig Finite-Elemente-Berechnungen durchgeführt, in denen in den Gauß-Punkten der finiten Elemente Homogenisierungen basierend auf der Taylor-Annahme der homogenen Deformation erfolgen. Die drei in dieser Arbeit vorgestellten Modelle basieren ebenfalls auf dieser Annahme. Während zwei Modelle auf der Mesoskala definiert sind, nutzt das dritte zusätzlich ein elastisches Gesetz, eine Fließregel und eine Verfestigungsregel auf der Makroskala. Der Einfluss der Textur wird im letzten Falle durch einen Texturkoeffizienten vierter Stufe im elastischen Gesetz und der quadratischen Fließregel berücksichtigt. Die Entwicklung des Texturkoeffizienten wird durch ein starr-viskoplastisches Taylor-Modell berechnet, das auch die Grundlage für ein kontinuierliches Polykristallmodell bildet. Es unterscheidet sich in der Berechnung der makroskopischen Spannungen vom klassischen Taylor-Ansatz. Durch die Verwendung von Mises-Fisher Verteilungsfunktionen zur Approximation der OVF erfolgt die Berechnung der Spannungen durch eine Integration über $SO(3)$. Somit kann die Nachbarschaft einer festen Kristallorientierung mit in die Berechnung der effektiven Größen einbezogen werden. Zur Verifikation dieses kontinuierlichen Modells wird zusätzlich ein klassisches elastisch-viskoplastisches Taylor-Modell eingeführt. Alle Modelle werden zur Simulation der R -Wert- und Fließspannungsverteilungen in gewalzten Blechen sowie zur Simulation des Tiefziehprozesses genutzt.

Danksagung

Diese Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehrstuhl für Festigkeitslehre des Institutes für Mechanik der Otto-von-Guericke-Universität in Magdeburg.

Mein besonderer Dank gilt meinen Betreuern Herrn Prof. Bertram und Herrn Prof. Böhlke. Herrn Prof. Bertram danke ich für die Kommentare und Anregungen bei der Erstellung dieser Arbeit sowie für die Möglichkeit meine Forschungstätigkeit am Lehrstuhl durchführen zu können. Herrn Prof. Böhlke möchte ich für seine kritischen Anmerkungen und seine jederzeit guten Hinweise bei Erstellung der Arbeit danken. In diesem Zusammenhang blicke ich auch auf die vielen fruchtbaren Diskussionen zurück.

Herrn Prof. Krawietz danke ich für seine Bereitschaft als Gutachter der Arbeit zu fungieren.

Außerdem möchte ich mich bei allen Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern des Institutes für die sehr angenehme Atmosphäre herzlich bedanken.

Nicht vergessen möchte ich die Unterstützung, die ich jederzeit durch meine Eltern und meinen Bruder erhalten habe.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Konstitutive Gleichungen auf der Mesoebene	7
2.1	Kinematische Größen	7
2.2	Elastisch-viskoplastisches Modell	10
2.2.1	Elastisches Gesetz	10
2.2.2	Gleitsysteme	14
2.2.3	Fließregel	17
2.3	Viskoplastisches Modell	18
2.3.1	Elastisches Gesetz	18
2.3.2	Fließregel	19
2.4	Verfestigung	21
2.5	Materialparameter	22
3	Texturbeschreibung mittels der Orientierungsverteilungsfunktion der Kristallite (OVF)	25
3.1	Berechnung von Kristallorientierungen	25
3.2	Die Orientierungsverteilungsfunktion	26
3.3	Approximation der OVF mittels zentraler Verteilungsfunktionen .	29
3.3.1	Anwendung auf Standardlagen	32
3.3.2	Texturkomponenten eines gewalzten Aluminiumbleches . .	32

3.4	Identifikation von Texturkomponenten mittels Optimierung	34
3.4.1	Lösung des Optimierungsproblems	38
3.4.2	Komponentenanpassung für Standarddeformationen	40
3.5	Approximation der OVF mit tensoriellen Texturkoeffizienten . . .	45
4	Bestimmung des Materialverhaltens des Polykristalls	49
4.1	Homogenisierungsmethoden	49
4.1.1	Effektive elastische Polykristalleigenschaften	50
4.1.2	Effektive (visko-)plastische Polykristalleigenschaften	52
4.2	Homogenisierung des elastisch-viskoplastischen Modells	57
4.3	Homogenisierung des viskoplastischen Modells	58
4.4	Quasiphänomenologische Modellierung (Zweiskalenmodell)	64
4.4.1	Elastisches Gesetz	64
4.4.2	Fließregel	66
4.4.3	Verfestigung	68
4.4.4	Materialparameter	68
4.5	Phänomenologische Fließkriterien	69
4.5.1	Überblick zu phänomenologischen Fließkriterien	69
4.5.2	Das Fließkriterium von Hill (1948)	74
4.5.3	Texturabhängiges Fließkriterium	82
5	Numerische Implementierung	89
5.1	Zeitintegration	89
5.1.1	Elastisch-viskoplastisches Einkristallmodell	89
5.1.2	Viskoplastisches Einkristallmodell	93
5.1.3	Zweiskalenmodell	96
5.2	Finite-Elemente-Implementation	97
5.2.1	Integrale Form des Gleichgewichtes	97

5.2.2	Ortsdiskretisierung	98
5.2.3	Algorithmisch konsistente Linearisierung	99
6	Simulation der plastischen Anisotropie	103
6.1	Fließspannungen und R -Werte	104
6.1.1	Blech mit vier Texturkomponenten	104
6.1.2	Blech mit Textur aus Simulation der ebenen Kompression	107
6.2	Tiefziehsimulation	110
6.2.1	Sensitivität der Zipfelhöhe	113
6.2.2	Würfelftextur	116
6.2.3	Blech mit vier Texturkomponenten	119
6.2.4	Blech mit Textur aus Simulation der ebenen Kompression	120
6.2.5	Einfluss eines isotropen Volumenanteils im DT-Modell auf die Zipfelbildung	122
7	Zusammenfassung und Ausblick	125
A	Euklidische Invarianzen der Materialgesetze	127
B	Materialien mit isomorphen elastischen Bereichen	129
C	Jacobi-Matrix des Newton-Verfahrens zur Lösung der Differen- tialgleichungen des elastisch-viskoplastischen Einkristallmodells	131
D	Algorithmisch konsistente Tangente des elastisch- viskoplastischen Einkristallmodells	135
E	Algorithmisch konsistente Tangente des (starr-)viskoplastischen Einkristallmodells	137
Literatur		141

Abbildungsverzeichnis	157
Tabellenverzeichnis	161

Notation

a, b, c, \dots	Skalare, Indizes, Konstanten
$\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}, \dots$	Vektoren
$\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}, \dots$	Tensoren zweiter Stufe
$\mathbb{A}, \mathbb{B}, \mathbb{C}, \dots$	Tensoren vierter Stufe
$\mathbb{A}_{\langle n \rangle}, \mathbb{B}_{\langle n \rangle}, \mathbb{C}_{\langle n \rangle}, \dots$	Tensoren n-ter Stufe
$\{\mathbf{e}_i\}$	orthonormierte Vektorbasis
a_i, A_{ij}, A_{ijkl}	Komponenten von \mathbf{a} , \mathbf{A} und \mathbb{A} bzgl. $\{\mathbf{e}_i\}$
$\mathbf{C} = \mathbf{a} \otimes \mathbf{b}, \mathbb{C} = \mathbf{A} \otimes \mathbf{B}, \dots$	dyadisches Produkt zwischen Vektoren, Tensoren zweiter Stufe, ...
$c = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b}, c = a_i b_i$	skalares Produkt zwischen Vektoren
$c = \mathbf{A} \cdot \mathbf{B}, c = A_{ij} B_{ij}$	skalares Produkt zwischen Tensoren
$\mathbf{C} = \mathbf{A}\mathbf{B}, C_{ij} = A_{ik} B_{kj}$	einfache Überschiebung zweier Tensoren zweiter Stufe
$\mathbf{C} = \mathbb{A}[\mathbf{B}], C_{ij} = A_{ijkl} B_{kl}$	doppelte Überschiebung eines Tensors vierter Stufe mit einem Tensor zweiter Stufe
$\mathbb{C} = \mathbb{A}\mathbb{B}, C_{ijkl} = A_{ijmn} B_{mnkl}$	doppelte Überschiebung zweier Tensoren vierter Stufe
$\mathbf{A} \star \mathbb{B} = B_{ijkl} (\mathbf{A}\mathbf{e}_i) \otimes (\mathbf{A}\mathbf{e}_j) \otimes (\mathbf{A}\mathbf{e}_k) \otimes (\mathbf{A}\mathbf{e}_l)$	Rayleigh-Produkt
\mathbf{A}', \mathbb{A}'	Irreduzible Tensoren (spurfrei und vollsymmetrisch)
\mathbf{A}°	Kugelanteil des Tensors \mathbf{A}
$\det(\mathbf{A})$	Determinante von \mathbf{A}

$\text{grad}(\mathbf{A})$	Gradient von \mathbf{A} bzgl. der Momentanplatzierung
$\text{Grad}(\mathbf{A})$	Gradient von \mathbf{A} bzgl. der Bezugsplatzierung
$\text{sym}(\mathbf{A})$	symmetrischer Anteil von \mathbf{A}
$\text{skw}(\mathbf{A})$	schiefsymmetrischer Anteil von \mathbf{A}
$\text{sp}(\mathbf{A})$	Spur des Tensors \mathbf{A}
$\exp(\mathbf{A})$	Exponentialfunktion des Tensors \mathbf{A}
$\ \mathbf{A}\ = \sqrt{\mathbf{A} \cdot \mathbf{A}}$	Frobenius-Norm von \mathbf{A}
$\tilde{(\cdot)}$	Größe ist bzgl. der ungestörten Bezugsplatzierung definiert
$(\cdot)_E$	Größe ist bzgl. der Momentanplatzierung definiert
$\bar{(\cdot)}$	Größe ist bzgl. der Makroskala definiert
\mathfrak{R}	Menge der reellen Zahlen
\mathfrak{R}^+	Menge der positiven reellen Zahlen
\mathfrak{E}	Euklidischer Punktraum
Lin	Menge der Tensoren zweiter Stufe
Sym	Menge der symmetrischen Tensoren zweiter Stufe
Psym	Menge der symmetrisch positiv definiten Tensoren zweiter Stufe
Inv	Menge der invertierbaren Tensoren zweiter Stufe
Inv^+	Menge der invertierbaren Tensoren zweiter Stufe mit positiver Determinante
$\text{SO}(3)$	Menge der orthogonalen Tensoren zweiter Stufe mit positiver Determinante

Symbolverzeichnis

\mathcal{B}	Materieller Körper	Unterkapitel 2.1
\mathbf{H}	Verschiebungsgradient	(2.6)
\mathbf{F}	Deformationsgradient	(2.8)
\mathbf{E}^G	Green'scher Verzerrungstensor	(2.9) ₁
\mathbf{E}^A	Almansi'scher Verzerrungstensor	(2.10) ₁
\mathbf{C}	rechter Cauchy-Green Tensor	(2.9) ₂
\mathbf{B}	linker Cauchy-Green Tensor	(2.10) ₂
\mathbf{T}^{2PK}	2. Piola-Kirchhoff'scher Spannungstensor	(2.14), (2.15)
$\boldsymbol{\tau}$	Kirchhoff'scher Spannungstensor	(2.15), (2.16)
\mathbf{T}	Cauchy'scher Spannungstensor	(2.16)
\mathbf{P}	Plastische Transformation	(2.17)
$\tilde{\mathbf{C}}$	Konstante Steifigkeitstetrad	(2.19)
$\{\mathbf{e}_i\}$	orthonormierte Probenbasis	Unterkapitel 2.2
$\{\tilde{\mathbf{g}}_i\}$	orthonormierte Kristallgitterbasis	Unterkapitel 2.3
$\{\tilde{\mathbf{G}}_i\}$	orthonormierte Voigt'sche Kristallgitterbasis für symmetrische Tensoren 2. Stufe	(2.21)
$\tilde{\mathbf{F}}$	Elastischer Anteil des Deformationsgradienten	(2.31)
$\tilde{\mathbf{d}}_\alpha$	Gleitrichtung	Tabelle 2.1
$\tilde{\mathbf{n}}_\alpha$	Gleitebenennormale	Tabelle 2.1
τ_α	Schmid-Spannung	(2.37), (2.38), (2.44)
τ_α^C	kritische Schmid-Spannung	(2.37), (2.38)
$\dot{\gamma}_\alpha$	Scherrate	(2.37), (2.38)
$\dot{\gamma}_0$	Referenzscherrate	(2.37), (2.38)
m	Dehnratensensitivitätsparameter	(2.37), (2.38)
$\tilde{\mathbf{T}}$	Mandel'scher Spannungstensor	(2.41)
$\tilde{\mathbf{M}}_\alpha$	Schmid-Tensoren	Unterkapitel 2.2.3

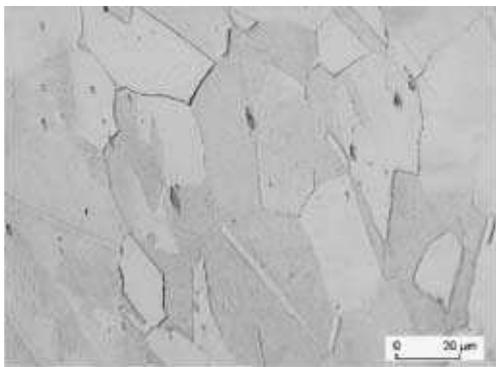
\mathbf{L}	Geschwindigkeitsgradient	(2.46)
\mathbf{D}	symmetrischer Anteil von \mathbf{L}	(2.52)
\mathbf{W}	schiefsymmetrischer Anteil von \mathbf{L}	(2.53)
\mathbf{Q}	Kristallorientierung	(2.51), (3.1)
J	Determinante des Deformationsgradienten	(2.48)
K	Kompressionsmodul	(2.49)
ϕ_1, Φ, ϕ_2	Eulerwinkel	(3.2)
$f(\mathbf{Q})$	Orientierungsverteilungsfunktion (OVF)	(3.4)
$\omega(\mathbf{Q}, \mathbf{Q}_\alpha)$	Orientierungsabstand	(3.23)
S_α	Streubreite einer Mises-Fisher-Verteilung	(3.24)
b_α	Halbwertsbreite einer Mises-Fisher-Verteilung	Unterkapitel 3.3
$N(S_\alpha)$	Normierungskonstante	(3.25)
$\mathbb{V}'_{\langle \alpha_i \rangle}$	tensorielle Fourierkoeffizienten	(3.42)
$\mathbb{T}'_{\langle \alpha_i \rangle}$	Referenztensoren	(3.42)
\mathbb{A}'	Texturkoeffizient vierter Stufe	(3.53)
\mathbf{T}^{1PK}	1. Piola-Kirchhoff'scher Spannungstensor	(4.6)
σ_F	Fließspannungsvariable	(4.52)
η	Parameter der den Einfluss der Anisotropie auf die Fließregel steuert	(4.52)
v	momentanes Volumen	(4.6)
V	Referenzvolumen	(4.8)
ν_i	Volumenfraktion	(4.10)
$h(\mathbf{Q}, \tau^C)$	Verteilungsfunktion	(4.12)
\mathbf{J}	Jacobimatrix des Newton-Verfahrens	(5.6)
$\{\mathbf{B}_i\}$	orthonormierte Basis für symmetrische spurfreie Tensoren 2. Stufe	(5.18)
\mathbb{K}	Algorithmisch konsistente Tangente für ABAQUS	(5.48)
R	R -Wert	(4.71)
\mathbb{H}	von Mises'scher/Hill'scher Tensor	(4.64), (4.67)

\mathbf{I}	Identitätstensor zweiter Stufe	(2.7)
\mathbb{I}	Identitätstensor vierter Stufe	(3.52)
\mathbb{I}^S	Identitätstensor vierter Stufe für symmetrische Tensoren zweiter Stufe	(2.27)
\mathbb{P}_i^C	kubische Projektoren	(2.27)
\mathbb{P}_i^I	isotrope Projektoren	(4.49)

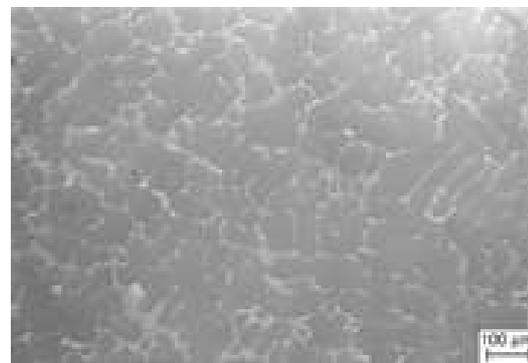
Kapitel 1

Einleitung

Die mechanischen Eigenschaften polykristalliner Werkstoffe wie z.B. die von Metallen sind stark von der vorliegenden Mikrostruktur und deren Entwicklung während des Deformationsprozesses abhängig (Abbildung 1.1). Hier sind in erster Linie die Form, Größe und Orientierung der Körner, die Interaktion zwischen den Körnern und der Einfluss der Korngrenzen von Bedeutung.



(a) Kupfer-Polykristall



(b) NiAl-Polykristall

Abbildung 1.1: Mikrostrukturen von einphasigem Kupfer (Estrin et al., 2002) und zweiphasigem NiAl (Schaberger et al., 2000)

Der numerische Aufwand einer Simulation des makroskopischen, mechanischen Verhaltens von Metallen bei großen Deformationen unter Verwendung einer derartigen, detaillierten Beschreibung der Mikrostruktur ist sehr hoch. Diese Tatsache wird sich mit fortlaufender Zeit ändern, da von einer enormen Leistungssteigerung der Rechentechnik in den nächsten Jahrzehnten auszugehen ist. So werden

heutzutage in der Regel nur kleine Ausschnitte des Polykristalls mit Hilfe der Finite-Elemente-Methode modelliert, um das lokale mechanische Verhalten zu untersuchen (siehe z.B. Teodosiu et al., 1993; Harder, 1997; Sachtleber et al., 2002; Anand, 2004; Zhang et al., 2005). Die Betrachtung größerer Ausschnitte des Polykristalls erfordert die Annahme von Vereinfachungen bezüglich der Einbeziehung der Mikrostruktur. Vernachlässigt man die Interaktionen zwischen den Körnern, kann auf die Modellierung der Korngröße, der Kornform und der Korngrenzen verzichtet werden. Der Grund für diese Vereinfachung ist, dass die Verteilung der Kornorientierungen in der Regel eine größere Bedeutung für das makroskopische Verhalten besitzt. Daraus kann man folgern, dass die kristallographische Textur des Metalls im Wesentlichen dessen effektive Eigenschaften bestimmt.

Eine qualitativ ausreichende Beschreibung der Texturentwicklung in kubisch-flächenzentrierten Metallen mit einer hohen Stapelfehlerenergie ist durch die Nutzung von Taylor-Modellen (Taylor, 1938) möglich. Diese Modelle basieren auf einer homogenen Deformation von Kristallitverbunden, die lokal z.B. in den Gauß-Punkten eines Finite-Elemente-Modells implementiert werden. Mathur und Dawson (1989) verwenden z.B. das Taylor-Modell im Gauß-Punkt in einer FE-Simulation des Walzprozesses. Kalidindi et al. (1992) nutzen die Taylor-Annahme der homogenen Deformation im Gauß-Punkt zur Simulation des Schmiedeprozesses. Miehe und Schotte (2004) nutzen einen derartigen Ansatz zur Simulation der Zipfelbildung beim Tiefziehprozess von Aluminium. Der Nachteil dieses Ansatzes ist der immer noch zu hohe Rechenaufwand, da für eine ausreichende Beschreibung der Textur eine große Anzahl von Kristalliten pro Gauß-Punkt notwendig ist.

In der Arbeit von Schulze (2006) wird deshalb für eine gegebene Anfangstextur eine minimale Anzahl von Kristalliten ermittelt, die eine ausreichende Texturapproximation sicherstellt. Im Vergleich zu den vorher genannten Arbeiten kann diese Anzahl deutlich reduziert werden. Die ermittelten Kristallorientierungen werden für die Simulation des Tiefziehprozesses von Stahlblechen genutzt. Ein anderer Vorschlag geht auf Raabe et al. (2001) zurück, indem die Texturkomponenten eines Bleches, die mit Hilfe von Mises-Fisher-Verteilungen durch eine mittlere Orientierung und eine Halbwertsbreite beschrieben werden können, durch eine Anzahl einzelner Kristallite approximiert werden. Diese Kristallite werden im FE-Modell über die Dicke des vernetzten Bleches „statistisch“ verteilt. Der Vorteil

dieser Methode ist die relativ geringe Anzahl an Einkristallen, die für die Simulation des Tiefziehprozesses benötigt wird. Damit folgt eine im Vergleich zu anderen Polykristallmodellen geringe Rechenzeit. Der Nachteil dieses Modells ist eine starke Überschätzung der plastischen Anisotropie in einem lokalen Bereich des FE-Modells.

In dieser Arbeit wird ebenfalls ein Modell eingeführt, das eine Approximation der Orientierungsverteilungsfunktion der Kristallite (OVF) durch Mises-Fisher-Verteilungsfunktionen verwendet. Dieses Modell zeigt eine besondere Eignung für Texturen, die durch wenige Texturkomponenten beschrieben werden können. Die Anwendung der kontinuierlichen Approximation der OVF hat im Vergleich zu einem herkömmlichen diskreten Ansatz eine starke Reduktion der Parameteranzahl zur Folge. Im Gegensatz zum Modell von Raabe et al. (2001) wird die kontinuierliche Approximation der OVF auch zur Berechnung der effektiven mechanischen Eigenschaften verwendet und damit der Vorteil der geringen Parameterzahl zur Beschreibung der OVF ausgenutzt. Da auf eine Streuung der Orientierungen über die Blechdicke im Vergleich zum Modell von Raabe et al. (2001) verzichtet werden kann, ist eine Überschätzung der Anisotropie allein auf die Verwendung der Taylor-Hypothese zurückzuführen. Zur Simulation der plastischen Anisotropie werden in dieser Arbeit die R -Wert- und Fließspannungsverteilungen sowie die Zipfelbildung an texturierten Aluminiumblechen untersucht. Hierfür werden das Modell basierend auf den Mises-Fisher-Verteilungen und ein klassischer diskreter Ansatz in das Finite-Elemente-Programm ABAQUS implementiert.

Beide Modelle beruhen auf mesoskopischen Materialgleichungen, in denen das einkristalline plastische Verformungsverhalten durch Abgleitprozesse auf kristallographischen Ebenen bestimmt wird. Materialmodelle auf der mikroskopischen Ebene beschreiben hingegen Aggregate von Versetzungen und deren Entwicklung während des Deformationsprozesses. Die Identifikation einzelner Versetzungen kann durch die Modellierung von Atomverbänden geschehen. Hierzu werden quantenmechanische und molekulardynamische Untersuchungsmethoden auf der Nanoebene angewendet. Ein Überblick der mechanischen Theorien, die auf den unterschiedlichen Skalen eingesetzt werden, wird in der Arbeit von Ghoniem et al. (2003) gegeben. Hierbei wird insbesondere auf die Nano- und Mikroebene eingegangen. Ein Überblick für die Größenordnungen der einzelnen Skalen kann z.B. der Arbeit von Simons (2004) entnommen werden.

Da die in dieser Arbeit genutzten Modelle eine Verringerung des Rechenaufwandes bei gleichzeitig brauchbarer Qualität der numerischen Ergebnisse für die makroskopischen Materialeigenschaften zur Folge haben sollen, wird zusätzlich ein quasiphänomenologisches Materialmodell eingeführt. In diesem Modell wird ein Texturkoeffizient 4. Stufe zur Beschreibung der OVF genutzt. Dieser wird mit Hilfe eines starr-viskoplastischen Taylor-Modells berechnet. Er wird ferner als innere Variable in einem makroskopischen elastischen Gesetz und einer makroskopischen Fließregel verwendet. Wegen der Definition der konstitutiven Gleichungen auf zwei unterschiedlichen Skalen sollen im Weiteren die Bezeichnungen Zweiskalenansatz oder Zweiskalenmodell genutzt werden.

Die Arbeit gliedert sich folgendermaßen. In *Kapitel 2* werden zwei Einkristallmaterialmodelle diskutiert. Die jeweiligen konstitutiven Gleichungen werden im Kontext großer plastischer Deformationen für den kubisch-flächenzentrierten Symmetriefall eingeführt. Beide Modelle erfüllen das Prinzip der materiellen Objektivität (PMO) und das Prinzip der Invarianz gegen überlagerte Starrkörpermodifikationen (PISM). Die Materialgesetze sind elastisch-viskoplastisch bzw. starr-viskoplastisch formuliert. Das elastisch-viskoplastische Modell besitzt den Vorteil, dass es auch zur Simulation des Rückfederungsprozesses von Blechen verwendet werden kann. Das starr-viskoplastische Modell erlaubt hingegen eine schnellere Berechnung von Deformationstexturen des Polykristalls.

Kapitel 3 befasst sich mit unterschiedlichen Formen zur Approximation der Orientierungsverteilung der Kristallite. Ein Ansatz beruht auf der Nutzung von Verteilungsfunktionen auf $SO(3)$ zur Beschreibung der OVF. In dieser Arbeit werden Mises-Fisher Verteilungsfunktionen verwendet. Es werden Beispiele für die Texturapproximation unter Nutzung dieser Funktionen diskutiert. Zusätzlich werden die Texturkomponenten einer Referenztextur mittels Optimierung identifiziert. Neben dem Ansatz zur Approximation der OVF basierend auf Verteilungsfunktionen wird weiterhin eine Approximation durch Texturkoeffizienten diskutiert.

In *Kapitel 4* wird die Bestimmung der effektiven mechanischen Eigenschaften des Polykristalls diskutiert. Hierzu wird zunächst auf die Homogenisierung des Einkristallmaterialverhaltens zur Bestimmung des makroskopischen Materialverhaltens eingegangen. Dabei wird nach einer Diskussion der bestehenden Ansätze die Homogenisierung des elastisch-viskoplastischen Modells und des viskoplasti-

schen Modells beschrieben. Beide Modelle verwenden die Annahme einer homogenen Deformation des Polykristalls. Der Vorteil des viskoplastischen Modells ist die Berücksichtigung der Halbwertsbreiten der Mises-Fisher-Verteilungen bei der Berechnung der polykristallinen Spannung. Damit besitzt die Umgebung einer mittleren Orientierung einen Einfluss in der Spannungsberechnung. Neben den beiden Taylor-Modellen wird in diesem Kapitel das oben erwähnte Zweiskalenmodell betrachtet.

Kapitel 5 gibt einen Überblick über die numerische Lösung der gewöhnlichen Differentialgleichungen der eingeführten Materialmodelle. Ferner wird die Implementierung der Modelle in das Finite-Elemente-Programm ABAQUS beschrieben.

In *Kapitel 6* werden die in ABAQUS implementierten Modelle zunächst zur Simulation von R -Wert- und Fließspannungsverteilungen in der Blechebene vortexurierter Bleche genutzt. Es erfolgt ein Vergleich der Ergebnisse untereinander sowie der Vergleich mit experimentell bestimmten Werten. Neben der R -Wert- und Fließspannungsverteilung charakterisiert die Zipfelbildung beim Tiefziehen von Blechen die plastische Anisotropie. Auch diese wird mit der Hilfe von ABAQUS simuliert. Für den Fall des homogenisierten viskoplastischen Modells und des Zweiskalenmodells kann dabei eine gute Übereinstimmung mit dem Experiment erzielt werden. Für das elastisch-viskoplastische Taylor-Modell wird eine Modifikation vorgeschlagen, die auch für dieses Modell eine bessere Voraussage des Zipfelprofils ermöglicht.

Kapitel 2

Konstitutive Gleichungen auf der Mesoebene

2.1 Kinematische Größen

Es wird angenommen, dass ein Körper \mathcal{B} aus einer unendlichen Anzahl von Partikeln oder Körperpunkten X besteht. Eine Platzierung des Körpers \mathcal{B} ist eine Abbildung $\boldsymbol{\kappa} : \mathcal{B} \rightarrow \mathfrak{E}$, die die Partikel von \mathcal{B} im Euklidischen Punktraum \mathfrak{E} platziert. Somit kann der Ort eines Körperpunktes durch die Abbildung

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{\kappa}(X) \tag{2.1}$$

ausgedrückt werden. Eine Bewegung des Körpers ist eine Folge von Platzierungen, die der Körper in einem Zeitintervall $0 \leq t \leq t_e$ einnimmt. Das bedeutet, dass der Ort des Partikels auch von der Zeit $t \in \mathfrak{R}^+$ abhängt

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{\kappa}(X, t). \tag{2.2}$$

Zur weiteren Betrachtung ist es vorteilhaft, eine Bezugsplatzierung des Körpers zu wählen. So zum Beispiel die Platzierung zum Zeitpunkt $t = 0$

$$\boldsymbol{X} = \boldsymbol{\kappa}(X, t = 0). \tag{2.3}$$

Durch Inversion von Gleichung (2.3) und dem Einsetzen in Gleichung (2.2) erhält man

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{\kappa}(\boldsymbol{\kappa}^{-1}(\boldsymbol{X}, t = 0), t). \tag{2.4}$$

\boldsymbol{x} und \boldsymbol{X} können als Ortsvektoren bezüglich einer raumfesten, orthonormierten Basis $\{\boldsymbol{e}_i\}$ und dem Koordinatenursprung O identifiziert werden. \boldsymbol{x} ist der Ortsvektor eines Körperpunktes in der momentanen Platzierung \mathcal{B}_E und \boldsymbol{X} der Ortsvektor eines Körperpunktes in der Bezugsplatzierung \mathcal{B}_0 . Größen, die auf die Bezugsplatzierung bezogen sind, heißen Lagrange'sche Größen. Größen, die auf die momentane Platzierung bezogen sind, heißen Euler'sche Größen. Aus der Differenz der Ortsvektoren lässt sich die Verschiebung eines Körperpunktes berechnen

$$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{X}, t) = \boldsymbol{x}(\boldsymbol{X}, t) - \boldsymbol{X} \quad (2.5)$$

(siehe Abbildung 2.1).

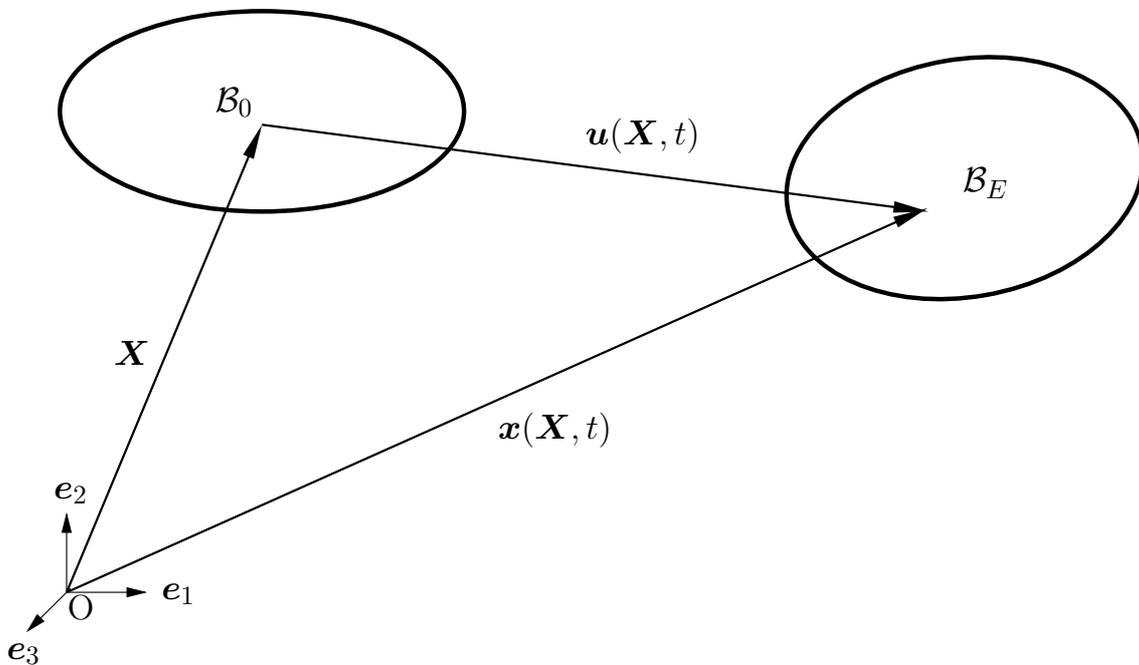


Abbildung 2.1: Verschiebung eines Punktes bei der Bewegung des Körpers \mathcal{B}

Zur Beschreibung des Deformationsverhaltens werden im Kontext großer Deformationen in der Regel der Verschiebungsgradient \boldsymbol{H} und der Deformationsgradient \boldsymbol{F} verwendet. Der Verschiebungsgradient ist definiert durch

$$\boldsymbol{H} = \text{Grad}(\boldsymbol{u}(\boldsymbol{X}, t)) = \frac{\partial \boldsymbol{u}(\boldsymbol{X}, t)}{\partial \boldsymbol{X}} \quad (2.6)$$

und somit

$$\boldsymbol{H} = \text{Grad}(\boldsymbol{x}(\boldsymbol{X}, t)) - \boldsymbol{I}. \quad (2.7)$$

Der Tensor \mathbf{I} ist die Identität zweiter Stufe und der Tensor $\text{Grad}(\mathbf{x}(\mathbf{X}, t))$ ist der Deformationsgradient

$$\mathbf{F} = \frac{\partial \mathbf{x}(\mathbf{X}, t)}{\partial \mathbf{X}}. \quad (2.8)$$

Nach der Einführung der Verschiebungs- und Deformationsmaße ist es notwendig, Verzerrungstensoren zu definieren. In dieser Arbeit werden der Green'sche Verzerrungstensor

$$\mathbf{E}^G = \frac{1}{2}(\mathbf{C} - \mathbf{I}), \quad \mathbf{C} = \mathbf{F}^T \mathbf{F} \quad (2.9)$$

sowie der Almansi'sche Verzerrungstensor

$$\mathbf{E}^A = \frac{1}{2}(\mathbf{I} - (\mathbf{B})^{-1}), \quad \mathbf{B} = \mathbf{F} \mathbf{F}^T \quad (2.10)$$

verwendet. \mathbf{C} ist der rechte und \mathbf{B} ist der linke Cauchy-Green-Tensor. Der Green'sche Verzerrungstensor \mathbf{E}^G ist auf die Bezugsplatzierung \mathcal{B}_0 bezogen, während der Almansi'sche Verzerrungstensor \mathbf{E}^A auf die momentane Platzierung \mathcal{B}_E bezogen ist. Sie können durch \mathbf{F} ineinander überführt werden

$$\mathbf{E}^G = \mathbf{F}^T \mathbf{E}^A \mathbf{F}. \quad (2.11)$$

Transformiert man Größen aus der Bezugsplatzierung in die Momentanplatzierung, spricht man von „push forward“. Eine Transformation in die entgegengesetzte Richtung wird als „pull back“ bezeichnet. Formuliert man den Green'schen Verzerrungstensor \mathbf{E}^G nicht in Abhängigkeit des Deformationsgradienten \mathbf{F} , sondern in Abhängigkeit des Verschiebungsgradienten \mathbf{H} , so wird der nichtlineare Charakter dieses Verzerrungsmaßes in den Verschiebungen erkennbar

$$\mathbf{E}^G = \frac{1}{2}(\mathbf{H} + \mathbf{H}^T + \mathbf{H}^T \mathbf{H}). \quad (2.12)$$

Vernachlässigt man in Gleichung (2.12) den Term zweiter Ordnung, so erhält man den infinitesimalen Verzerrungstensor

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2}(\mathbf{H} + \mathbf{H}^T), \quad (2.13)$$

der in der Theorie kleiner Verzerrungen und kleiner Rotationen angewendet wird. Dies ist in dieser Arbeit nicht der Fall, da große plastische Verzerrungen und beliebige Rotationen betrachtet werden. Nur die elastischen Verzerrungen werden als infinitesimal vorausgesetzt, was für Metalle eine vertretbare Annahme ist.

2.2 Elastisch-viskoplastisches Modell

2.2.1 Elastisches Gesetz

Zur Formulierung des elastischen Gesetzes wird angenommen, dass der 2. Piola-Kirchhoff'sche Spannungstensor \mathbf{T}^{2PK} durch den rechten Cauchy-Green Tensor \mathbf{C}

$$\mathbf{T}^{2PK} = \mathbf{h}(\mathbf{C}) \quad (2.14)$$

determiniert wird. Diese reduzierte Form des elastischen Gesetzes erfüllt das Prinzip der materiellen Objektivität (PMO) und das Prinzip der Invarianz gegen überlagerte Starrkörpermodifikationen (PISM) (Bertram, 2005). Eine kurze Diskussion dieser Prinzipien ist in Anhang A zu finden. Der 2. Piola-Kirchhoff'sche Spannungstensor wird bezogen auf den Kirchhoff'schen Spannungstensor $\boldsymbol{\tau}$ durch

$$\mathbf{T}^{2PK} = \mathbf{F}^{-1} \boldsymbol{\tau} \mathbf{F}^{-T} \quad (2.15)$$

definiert. Der Kirchhoff'sche Spannungstensor $\boldsymbol{\tau}$ kann aus dem Cauchy'schen Spannungstensor \mathbf{T} bestimmt werden

$$\boldsymbol{\tau} = \det(\mathbf{F}) \mathbf{T}. \quad (2.16)$$

Führt man nach dem Isomorphiekonzept für elastisch-plastische Materialien (Bertram, 1992) die plastische Transformation $\mathbf{P} \in Inv^+$ ein, kann für das elastische Gesetz in Gleichung (2.14) immer ein konstantes Referenzgesetz gefunden werden

$$\mathbf{T}^{2PK} = \mathbf{P} \tilde{\mathbf{h}}(\mathbf{P}^T \mathbf{C} \mathbf{P}) \mathbf{P}^T. \quad (2.17)$$

Obwohl in dieser Arbeit ein elastisch-viskoplastisches Materialgesetz verwendet wird, das im Gegensatz zu elastisch-plastischen Materialien keinen elastischen Bereich besitzt, soll dennoch die Idee des konstanten Referenzgesetzes für den elastisch-viskoplastischen Materialfall übernommen werden. Eine kurze Diskussion des Isomorphiekonzeptes von Bertram (1992) ist in Anhang B zu finden. Im Falle von Metallen kann dieses Konzept genutzt werden, da die elastischen Eigenschaften bei großen plastischen Deformationen auf Einkristallebene näherungsweise konstant sind. Da Metalle einen kleinen elastischen Bereich besitzen,

ist es möglich einen physikalisch linearen Zusammenhang für das elastische Gesetz zu wählen

$$\mathbf{T}^{2PK} = \det(\mathbf{P})^{-1} \mathbf{P} \tilde{\mathbb{C}} \left[\frac{1}{2} (\mathbf{P}^T \mathbf{C} \mathbf{P} - \mathbf{I}) \right] \mathbf{P}^T. \quad (2.18)$$

$\tilde{\mathbb{C}}$ beschreibt die während des Deformationsprozesses konstante Referenzsteifigkeitstetrade. Sie ist auf die ungestörte Bezugsplatzierung $\tilde{\mathcal{B}}$ bezogen und ist deshalb mit einer Tilde gekennzeichnet. Dies gilt auch für alle ebenfalls mit einer Tilde gekennzeichneten Größen. Die ungestörte Bezugsplatzierung $\tilde{\mathcal{B}}$ (Truesdell und Noll, 1965) ist dadurch charakterisiert, dass zugeordnete Symmetrietransformationen Elemente von $SO(3)$ sind. Die Steifigkeitstetrade $\tilde{\mathbb{C}}$ ergibt sich für die kubische Kristallsymmetrie in einer zur Voigt-Basis (Voigt, 1910) leicht modifizierten Basis als

$$\tilde{\mathbb{C}} = \begin{bmatrix} \tilde{C}_{1111} & \tilde{C}_{1122} & \tilde{C}_{1122} & 0 & 0 & 0 \\ & \tilde{C}_{1111} & \tilde{C}_{1122} & 0 & 0 & 0 \\ & & \tilde{C}_{1111} & 0 & 0 & 0 \\ & & & 2\tilde{C}_{2323} & 0 & 0 \\ \text{sym.} & & & & 2\tilde{C}_{2323} & 0 \\ & & & & & 2\tilde{C}_{2323} \end{bmatrix} \tilde{\mathbf{G}}_\alpha \otimes \tilde{\mathbf{G}}_\beta. \quad (2.19)$$

Die Steifigkeitstetrade $\tilde{\mathbb{C}}$ besitzt für den kubisch-anisotropen Fall drei unabhängige Konstanten \tilde{C}_{1111} , \tilde{C}_{1122} und \tilde{C}_{2323} . Die Tensoren $\tilde{\mathbf{G}}_i$ bilden eine kristallographische Basis in einem 6-dimensionalen Vektorraum. Sie kann für Tensoren vierter Stufe genutzt werden, die die linke und die rechte Subsymmetrie aufweisen

$$\tilde{C}_{ijkl} = \tilde{C}_{jikl}, \quad \tilde{C}_{ijkl} = \tilde{C}_{ijlk}. \quad (2.20)$$

Die Basistensoren $\tilde{\mathbf{G}}_i$ werden aus den orthonormierten Vektoren der Kristallgitterbasis $\tilde{\mathbf{g}}_i$ bestimmt

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{G}}_1 &= \tilde{\mathbf{g}}_1 \otimes \tilde{\mathbf{g}}_1, & \tilde{\mathbf{G}}_4 &= \frac{\sqrt{2}}{2} (\tilde{\mathbf{g}}_2 \otimes \tilde{\mathbf{g}}_3 + \tilde{\mathbf{g}}_3 \otimes \tilde{\mathbf{g}}_2), \\ \tilde{\mathbf{G}}_2 &= \tilde{\mathbf{g}}_2 \otimes \tilde{\mathbf{g}}_2, & \tilde{\mathbf{G}}_5 &= \frac{\sqrt{2}}{2} (\tilde{\mathbf{g}}_1 \otimes \tilde{\mathbf{g}}_3 + \tilde{\mathbf{g}}_3 \otimes \tilde{\mathbf{g}}_1), \\ \tilde{\mathbf{G}}_3 &= \tilde{\mathbf{g}}_3 \otimes \tilde{\mathbf{g}}_3, & \tilde{\mathbf{G}}_6 &= \frac{\sqrt{2}}{2} (\tilde{\mathbf{g}}_1 \otimes \tilde{\mathbf{g}}_2 + \tilde{\mathbf{g}}_2 \otimes \tilde{\mathbf{g}}_1). \end{aligned} \quad (2.21)$$

Diese modifizierte Voigt-Basis wurde unter anderem von Federov (1968) und Cowin (1989) verwendet. Sie besitzt den Vorteil, dass die Invarianten, Eigenwerte und Eigentensoren direkt aus der Komponentenmatrix von $\tilde{\mathbb{C}}$ bestimmt werden können. Bei der häufig genutzten ursprünglichen Variante von Voigt (1910) ist dies nicht möglich. Die originale Voigt'sche Variante ist z.B. im FE-Programm ABAQUS (ABAQUS/Standard, 2005) implementiert, das in dieser Arbeit verwendet wird.

Die kristallographischen Basisvektoren des Kristallgitters \mathbf{g}_i der Bezugsplatzierung \mathcal{B}_0 und die kristallographischen Basisvektoren \mathbf{g}_{Ei} der Momentanplatzierung \mathcal{B}_E können mit Hilfe der plastischen Transformation bzw. zusätzlich mit Hilfe des Deformationsgradienten aus den Basisvektoren $\tilde{\mathbf{g}}_i$ der ungestörten Bezugsplatzierung $\tilde{\mathcal{B}}$ bestimmt werden

$$\mathbf{g}_i = \mathbf{P}\tilde{\mathbf{g}}_i \quad (2.22)$$

bzw.

$$\mathbf{g}_{Ei} = \mathbf{F}\mathbf{P}\tilde{\mathbf{g}}_i. \quad (2.23)$$

Die Vektoren \mathbf{g}_i und \mathbf{g}_{Ei} bilden die Basisvektoren für die Steifigkeitstetraden \mathbb{C} bzw. \mathbb{C}_E , die durch die folgenden Transformationen aus der Tetrade der ungestörten Bezugsplatzierung $\tilde{\mathbb{C}}$ bestimmt werden können

$$\mathbb{C} = \mathbf{P} \star \tilde{\mathbb{C}} = \tilde{C}_{ijkl}(\mathbf{P}\tilde{\mathbf{g}}_i) \otimes (\mathbf{P}\tilde{\mathbf{g}}_j) \otimes (\mathbf{P}\tilde{\mathbf{g}}_k) \otimes (\mathbf{P}\tilde{\mathbf{g}}_l), \quad (2.24)$$

$$\mathbb{C}_E = \tilde{\mathbf{F}} \star \tilde{\mathbb{C}} = \tilde{C}_{ijkl}(\mathbf{F}\mathbf{P}\tilde{\mathbf{g}}_i) \otimes (\mathbf{F}\mathbf{P}\tilde{\mathbf{g}}_j) \otimes (\mathbf{F}\mathbf{P}\tilde{\mathbf{g}}_k) \otimes (\mathbf{F}\mathbf{P}\tilde{\mathbf{g}}_l). \quad (2.25)$$

Der in den Gleichungen (2.24) und (2.25) enthaltene Operator \star ist das Rayleigh-Produkt. Durch die Anwendung der Projektionsmethode (Halmos, 1958; Rychlewski und Zhang, 1989; Bertram und Olschewski, 1991; Rychlewski, 1995) kann eine andere Darstellungsform der Steifigkeitstetrade $\tilde{\mathbb{C}}$ erzeugt werden. Für den Fall kubischer Kristallsymmetrie ergibt sich

$$\tilde{\mathbb{C}} = \sum_{i=1}^3 \lambda_i \mathbb{P}_i^C. \quad (2.26)$$

Die drei kubischen Projektoren \mathbb{P}_i^C sind

$$\begin{aligned}\mathbb{P}_1^C &= \frac{1}{3}\mathbf{I} \otimes \mathbf{I}, \\ \mathbb{P}_2^C &= \mathbb{D} - \mathbb{P}_1^C, \\ \mathbb{P}_3^C &= \mathbb{I}^S - \mathbb{P}_2^C - \mathbb{P}_1^C.\end{aligned}\tag{2.27}$$

\mathbb{I}^S ist der Identitätstensor vierter Stufe für symmetrische Tensoren zweiter Stufe. Der anisotrope Anteil \mathbb{D} wird aus den Gittervektoren $\tilde{\mathbf{g}}_i$ bestimmt

$$\mathbb{D} = \sum_{j=1}^3 \tilde{\mathbf{g}}_j \otimes \tilde{\mathbf{g}}_j \otimes \tilde{\mathbf{g}}_j \otimes \tilde{\mathbf{g}}_j.\tag{2.28}$$

Die Projektoren \mathbb{P}_i^C erfüllen die Eigenschaften der Idempotenz, der Bi-Orthogonalität und der Vollständigkeit

$$\begin{aligned}\mathbb{P}_i^C \mathbb{P}_i^C &= \mathbb{P}_i^C, \\ \mathbb{P}_i^C \mathbb{P}_j^C &= \mathbb{O} \quad \forall i \neq j, \\ \sum_{i=1}^3 \mathbb{P}_i^C &= \mathbb{I}^S.\end{aligned}\tag{2.29}$$

Die Eigenwerte λ_i können aus den Komponenten von $\tilde{\mathbb{C}}$ bezogen auf die orthonormierten Gittervektoren $\{\tilde{\mathbf{g}}_i\}$ berechnet werden

$$\begin{aligned}\lambda_1 &= \tilde{C}_{1111} + 2\tilde{C}_{1122}, \\ \lambda_2 &= \tilde{C}_{1111} - \tilde{C}_{1122}, \\ \lambda_3 &= 2\tilde{C}_{1212}.\end{aligned}\tag{2.30}$$

Das Produkt aus Deformationsgradient \mathbf{F} und plastischer Transformation \mathbf{P} aus den Gleichungen (2.23) und (2.25) wird in der Folge als

$$\tilde{\mathbf{F}} = \mathbf{F}\mathbf{P}\tag{2.31}$$

bezeichnet. Im Sinne einer multiplikativen Zerlegung des Deformationsgradienten in einen elastischen Teil \mathbf{F}_e und einen plastischen Teil \mathbf{F}_p (siehe z.B. Mandel, 1974)

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_e \mathbf{F}_p, \quad (2.32)$$

entspricht $\tilde{\mathbf{F}}$ dem elastischen Teil \mathbf{F}_e , während \mathbf{P} dem inversen Tensor des plastischen Teils \mathbf{F}_p zugeordnet werden kann

$$\mathbf{F}_p = \mathbf{P}^{-1}. \quad (2.33)$$

Gleichung (2.32) kann aus dem Isomorphiekonzept abgeleitet werden (siehe hierzu auch Böhlke, 2001). Anschaulich wird dies, wenn man das elastische Gesetz aus Gleichung (2.18), das aus dem Isomorphiekonzept hergeleitet wurde, auf Größen bezieht, die in der ungestörten Platzierung definiert sind

$$\det(\mathbf{P})\mathbf{P}^{-1}\mathbf{T}^{2PK}\mathbf{P}^{-T} = \tilde{\mathbb{C}}\left[\frac{1}{2}((\mathbf{F}\mathbf{P})^T\mathbf{F}\mathbf{P} - \mathbf{I})\right]. \quad (2.34)$$

Nutzt man nun noch die Beziehungen $\tilde{\mathbf{T}}^{2PK} = \det(\mathbf{P})\mathbf{P}^{-1}\mathbf{T}^{2PK}\mathbf{P}^{-T}$ und $\tilde{\mathbf{C}} = \tilde{\mathbf{F}}^T\tilde{\mathbf{F}}$, so ergibt sich folgende Form des elastischen Gesetzes

$$\tilde{\mathbf{T}}^{2PK} = \tilde{\mathbb{C}}\left[\frac{1}{2}(\tilde{\mathbf{C}} - \mathbf{I})\right] \quad (2.35)$$

oder

$$\tilde{\mathbf{T}}^{2PK} = \tilde{\mathbb{C}}[\tilde{\mathbf{E}}^G], \quad (2.36)$$

wobei $\tilde{\mathbf{E}}^G$ der Green'sche Verzerrungstensor in der ungestörten Platzierung ist. Das elastische Gesetz in Gleichung (2.36) wird als anisotrope Variante des St. Venant-Kirchhoff Gesetzes bezeichnet.

2.2.2 Gleitsysteme

Für die plastische Deformation der Einkristalle wird angenommen, dass diese durch Abgleitprozesse auf kristallographischen Ebenen entsteht. Ein Gleitsystem besteht aus Gleitebene und Gleitrichtung. Die Aktivierung eines Gleitsystems α hat im viskoplastischen Fall eine Gleitung mit der Scherrate $\dot{\gamma}_\alpha$ zur Folge. Die zur

Bestimmung der Scherraten $\dot{\gamma}_\alpha$ verwendeten Ansätze unterscheiden sich bezüglich der Aktivierung der Gleitsysteme. Eine Möglichkeit besteht in der Nutzung eines Überspannungsansatzes

$$\dot{\gamma}_\alpha = \dot{\gamma}_0 \operatorname{sgn}(\tau_\alpha - \tau_\alpha^B) \left\langle \frac{|\tau_\alpha - \tau_\alpha^B| - \tau_\alpha^C}{\tau_\alpha^D} \right\rangle^m \quad (2.37)$$

(Méric und Cailletaud, 1992; Méric et al., 1994; Forest, 1996) mit den Variablen für die kritische Schmid-Spannung τ_α^C , die Rückspannung τ_α^B , die Bezugsspannung τ_α^D und dem Dehnratensensitivitätsparameter m . In einem derartigen Ansatz erfolgt die Aktivierung eines Gleitsystems, wenn die Schmid-Spannung τ_α einen kritischen Wert überschreitet. Im Gegensatz dazu kann in dem Ansatz

$$\dot{\gamma}_\alpha = \dot{\gamma}_0 \operatorname{sgn}(\tau_\alpha) \left| \frac{\tau_\alpha}{\tau_\alpha^C} \right|^m \quad (2.38)$$

(Hutchinson, 1976) die Aktivierung ab dem Zeitpunkt erfolgen, zu dem in einem Gleitsystem eine von Null verschiedene Schmid-Spannung τ_α vorhanden ist. Da der Parameter m im Raumtemperaturbereich in der Regel größer als 80 gewählt wird, steigt die Scherrate aber erst bei Werten knapp unterhalb τ_α^C deutlich an.

Die Modellierung der Gleitsysteme im kubischen Fall erfordert die Unterscheidung zwischen dem raumzentrierten Gittertyp (k.-r.-z.) und dem flächenzentrierten Gittertyp (k.-f.-z.). Der kubisch-primitive Gittertyp wird nicht betrachtet, da er im Sinne der Kristallplastizität keine Rolle spielt. Die Einheitszellen des k.-f.-z. und des k.-r.-z. Gittertyps sind in Abbildung 2.2 dargestellt.

Die k.-f.-z. Einheitszelle besitzt im Vergleich zur k.-r.-z. Einheitszelle eine höhere Packungsdichte. Daher ergeben sich erstens unterschiedliche Gleitsysteme für beide Varianten und zweitens, resultierend aus der dichteren Packung und einer damit verbundenen höheren Stabilität, weniger aktivierbare Gleitsysteme im k.-f.-z. Fall. In einkristallinem Aluminium, das vom k.-f.-z. Typ ist, gibt es im Raumtemperaturbereich vier unabhängige Gleitebenen mit je drei Gleitrichtungen. Diese bilden die 12 oktaedrischen Gleitsysteme. Die Gleitrichtungen werden durch den Richtungsvektor $\tilde{\mathbf{d}}_\alpha$ und die Gleitebenen durch den Normalenvektor $\tilde{\mathbf{n}}^\alpha$ definiert (Tabelle 2.1). Häufig wird die kompakte Schreibweise $\langle 110 \rangle \{111\}$ verwendet, wobei die eckigen Klammern die kristallographisch äquivalenten Gleitrichtungen und die geschweiften Klammern die kristallographisch äquivalenten Normalen

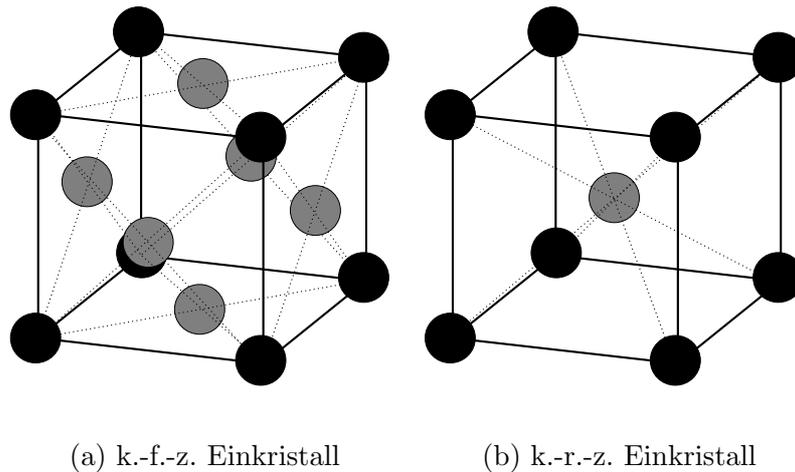


Abbildung 2.2: Kubische Einkristalle für den k.f.-z. und k.-r.-z. Gittertyp

α	1	2	3	4	5	6
$\sqrt{3}\tilde{n}^\alpha$	[1,1,1]	[1,1,1]	[1,1,1]	[-1,1,1]	[-1,1,1]	[-1,1,1]
$\sqrt{2}\tilde{d}_\alpha$	[1,0,-1]	[-1,1,0]	[0,-1,1]	[0,1,-1]	[-1,-1,0]	[1,0,1]
α	7	8	9	10	11	12
$\sqrt{3}\tilde{n}^\alpha$	[-1,-1,1]	[-1,-1,1]	[-1,-1,1]	[1,-1,1]	[1,-1,1]	[1,-1,1]
$\sqrt{2}\tilde{d}_\alpha$	[-1,0,-1]	[1,-1,0]	[0,1,1]	[0,-1,-1]	[1,1,0]	[-1,0,1]

Tabelle 2.1: Gleitsysteme für einkristallines Aluminium

der Gleitebenen enthalten. Somit beschreibt z.B. die geschweifte Klammer $\{111\}$ die Normalenrichtungen $[1, 1, 1]$, $[-1, 1, 1]$, $[-1, -1, 1]$ und $[1, -1, 1]$ (Vergleiche Tabelle 2.1).

Wie oben erwähnt, gibt es im k.-r.-z. Fall in der Regel eine höhere Anzahl aktivierbarer Gleitsysteme. Beim α -Eisen sind z.B. im Temperaturbereich unterhalb der Raumtemperatur die zwölf $\langle 111 \rangle \{110\}$ Gleitsysteme aktivierbar (Vergleiche Tabelle 2.2). Im Raumtemperaturbereich sind zusätzlich die zwölf $\langle 111 \rangle \{112\}$ Gleitsysteme aktivierbar. Der Raumtemperaturbereich entspricht beim Eisen dem Bereich der Knietemperatur. Unterhalb dieses Temperaturbereiches nimmt die kritische Schmid-Spannung zur Aktivierung der Gleitsysteme deutlich zu. Deshalb sind unterhalb dieser Temperatur nur zwölf Gleitsysteme aktivierbar. Bei sehr reinem Eisen kann sich die Knietemperatur in einen tieferen Temperaturbereich verschieben. In einem derartigen Fall besteht die Möglichkeit, dass bei Raumtem-

$\vartheta < \vartheta_{Raum}$	$\langle 111 \rangle \{110\}$
$\vartheta = \vartheta_{Raum}$	$\langle 111 \rangle \{110\}$ $\langle 111 \rangle \{112\}$
$\vartheta > \vartheta_{Raum}$	$\langle 111 \rangle \{110\}$ $\langle 111 \rangle \{112\}$ $\langle 111 \rangle \{123\}$

Tabelle 2.2: Gleitsysteme für einkristallines α -Eisen in Abhängigkeit der Temperatur ϑ

peratur zusätzlich die 24 $\langle 111 \rangle \{123\}$ Gleitsysteme aktivierbar sind. Im Normalfall werden diese allerdings erst oberhalb der Raumtemperatur aktiviert. In dieser Arbeit werden Berechnungen für polykristallines Aluminium durchgeführt. Deshalb werden bei der Modellierung nur die zwölf oktaedrischen Gleitsysteme $\langle 110 \rangle \{111\}$ berücksichtigt.

2.2.3 Fließregel

Zur Beschreibung des Fließvorgangs benötigt man eine Fließregel. Dazu wird hier ein Ansatz für die zeitliche Änderung der plastischen Transformation \mathbf{P} eingeführt

$$\mathbf{P}^{-1} \dot{\mathbf{P}} = -\tilde{\mathbf{k}}(\tilde{\mathbf{T}}', \tau_\alpha^C). \quad (2.39)$$

Ersetzt man \mathbf{P} durch \mathbf{F}_p erhält man eine Entwicklungsgleichung für \mathbf{F}_p

$$\dot{\mathbf{F}}_p \mathbf{F}_p^{-1} = \tilde{\mathbf{k}}(\tilde{\mathbf{T}}', \tau_\alpha^C). \quad (2.40)$$

Die Funktion $\tilde{\mathbf{k}}(\tilde{\mathbf{T}}', \tau_\alpha^C)$ hängt von der kritischen Schubspannung τ_α^C des jeweiligen Gleitsystems und vom Mandel'schen Spannungstensor

$$\tilde{\mathbf{T}} = \tilde{\mathbf{F}}^\top \boldsymbol{\tau} \tilde{\mathbf{F}}^{-\top} \quad (2.41)$$

ab. Bei Aluminium kann bei Raumtemperatur von einer näherungsweise isotropen Verfestigung ausgegangen werden (Kocks und Mecking, 2003), d.h. es gilt:

$\tau_\alpha^C = \tau^C$. Da sich Aluminium im Raumtemperaturbereich geschwindigkeitsabhängig verhält, wird für die Funktion $\tilde{\mathbf{k}}(\tilde{\mathbf{T}}', \tau^C)$ der viskoplastische Ansatz

$$\tilde{\mathbf{k}}(\tilde{\mathbf{T}}', \tau^C) = \sum_{\alpha=1}^N \dot{\gamma}_\alpha(\tilde{\mathbf{T}}', \tau^C) \tilde{\mathbf{M}}_\alpha, \quad (2.42)$$

$$\dot{\gamma}_\alpha = \dot{\gamma}_0 \operatorname{sgn}(\tau_\alpha) \left| \frac{\tau_\alpha}{\tau^C} \right|^m \quad (2.43)$$

gewählt. Die in das jeweilige Gleitsystem α induzierte Schmid-Spannung wird aus der Mandel-Spannung berechnet

$$\tau_\alpha = \tilde{\mathbf{T}}' \cdot \tilde{\mathbf{M}}_\alpha. \quad (2.44)$$

Die Schmid-Tensoren $\tilde{\mathbf{M}}_\alpha = \tilde{\mathbf{d}}_\alpha \otimes \tilde{\mathbf{n}}^\alpha$ sind Rang-Eins-Tensoren, die durch die Gleitrichtungen $\tilde{\mathbf{d}}_\alpha$ und Gleitebenennormalen $\tilde{\mathbf{n}}^\alpha$ definiert sind. Der Parameter m spezifiziert die Dehnratensensitivität. Er ist im Allgemeinen temperaturabhängig. Durch Umformung von Gleichung (2.39) kann die Fließregel für $\tilde{\mathbf{F}}$ formuliert werden

$$\dot{\tilde{\mathbf{F}}} \tilde{\mathbf{F}}^{-1} = \mathbf{L} - \tilde{\mathbf{F}} \tilde{\mathbf{k}}(\tilde{\mathbf{T}}', \tau^C) \tilde{\mathbf{F}}^{-1}. \quad (2.45)$$

Der Tensor \mathbf{L} ist der Gradient des Geschwindigkeitsfeldes \mathbf{v} , der durch den Deformationsgradienten und dessen zeitlicher Änderung ausgedrückt werden kann

$$\mathbf{L} = \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{x}} = \dot{\mathbf{F}} \mathbf{F}^{-1}. \quad (2.46)$$

2.3 Viskoplastisches Modell

2.3.1 Elastisches Gesetz

Zur Formulierung des Materialmodells wird die Annahme getroffen, dass die Gestaltänderungen (Distorsionen) von rein viskoplastischer Gestalt sind. Für die auftretenden elastischen Verformungen wird angenommen, dass diese eine Volumenänderung (Dilatation) zur Folge haben. Beide Arten der Deformation sind voneinander unabhängig. Angemerkt werden soll, dass das Modell starr-viskoplastisch genannt wird, obwohl Volumenänderungen durch elastisch induzierte Spannungen hervorgerufen werden. Zur Formulierung des elastischen Gesetzes wird zunächst

der Kirchhoff'sche Spannungstensor additiv in einen Kugelanteil $\boldsymbol{\tau}^\circ$ und einen deviatorischen Anteil $\boldsymbol{\tau}'$ zerlegt

$$\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\tau}^\circ + \boldsymbol{\tau}'. \quad (2.47)$$

Der deviatorische Anteil der Spannungen $\boldsymbol{\tau}'$ folgt aus den Distorsionen des Kristallgitters. Er ist der dynamische Anteil von $\boldsymbol{\tau}$ (siehe z.B. Šilhavý, 1997). Der sphärische Anteil der Spannungen $\boldsymbol{\tau}^\circ$ folgt aus den Dilatationen des Kristallgitters. Er ist der Gleichgewichtsanteil von $\boldsymbol{\tau}$ (Šilhavý, 1997) und kann aus der Verzerrungsenergiedichte $W(J)$ bestimmt werden

$$\boldsymbol{\tau}^\circ = J \frac{\partial W(J)}{\partial J} \mathbf{I}, \quad (2.48)$$

da im vorliegenden Fall die Verzerrungsenergiedichte nur von der Determinante J des Deformationsgradienten \mathbf{F} abhängt. Mit dem Ansatz

$$W(J) = \frac{K}{4} (J^2 - 2 \ln(J) - 1) \quad (2.49)$$

(Ogden, 1972; Simo und Miehe, 1992) für die Verzerrungsenergiedichte $W(J)$ ergibt sich der Kugelanteil der Kirchhoff-Spannung

$$\boldsymbol{\tau}^\circ = \frac{K}{2} (J^2 - 1) \mathbf{I}. \quad (2.50)$$

K ist der Kompressionsmodul.

2.3.2 Fließregel

Für die Distorsionen des Kristallgitters wird angenommen, dass diese von inelastischen Deformationen in den Gleitsystemen stammen. Für die Scherraten wird angenommen, dass diese nur von der Schmid-Spannung des jeweiligen Gleitsystems und damit auch nur vom deviatorischen Anteil des Spannungstensors abhängen. Somit folgen die Gleichungen

$$\begin{aligned} \mathbf{0} &= \mathbf{D}' - \mathbf{Q} \operatorname{sym}(\tilde{\mathbf{k}}(\mathbf{Q}^\top \boldsymbol{\tau}' \mathbf{Q}, \tau^C)) \mathbf{Q}^\top, \\ \dot{\mathbf{Q}} \mathbf{Q}^{-1} &= \mathbf{W} - \mathbf{Q} \operatorname{skw}(\tilde{\mathbf{k}}(\mathbf{Q}^\top \boldsymbol{\tau}' \mathbf{Q}, \tau^C)) \mathbf{Q}^\top \end{aligned} \quad (2.51)$$

(siehe z.B. Hutchinson, 1976). Die Gleichungen (2.51)_{1,2} können ebenfalls aus der elastisch-viskoplastischen Fließregel in Gleichung (2.45) hergeleitet werden. Hierbei entspricht der Tensor \mathbf{Q} dem orthogonalen Anteil $\tilde{\mathbf{R}}$ von $\tilde{\mathbf{F}}$. Der Tensor \mathbf{D}' entspricht dem deviatorisch symmetrischen Anteil des Geschwindigkeitsgradienten \mathbf{L}

$$\mathbf{D}' = \text{sym}(\mathbf{L}') = \frac{1}{2}(\mathbf{L}' + \mathbf{L}'^\top). \quad (2.52)$$

Der Tensor \mathbf{W} ist der antisymmetrische Anteil des Geschwindigkeitsgradienten \mathbf{L}

$$\mathbf{W} = \text{skw}(\mathbf{L}) = \frac{1}{2}(\mathbf{L} - \mathbf{L}^\top). \quad (2.53)$$

Der Tensor \mathbf{Q} beschreibt die Kristallorientierung und wird so eingeführt, dass er die Probenbasis \mathbf{e}_i zu einem Zeitpunkt $t \geq 0$ auf die Gittervektoren \mathbf{g}_i abbildet: $\mathbf{g}_i(t) = \mathbf{Q}(t)\mathbf{e}_i$. Wenn $\mathbf{g}_i(t)$ bekannt ist, kann der orthogonale Tensor \mathbf{Q} durch $\mathbf{Q} = \mathbf{g}_i(t) \otimes \mathbf{e}_i$ berechnet werden. Sind der symmetrische Anteil des Geschwindigkeitsgradienten \mathbf{D}' und die Kristallorientierung \mathbf{Q} gegeben, so stellt Gleichung (2.51)₁ eine implizite Gleichung zur Bestimmung des Spannungsdeviators $\boldsymbol{\tau}'$ dar. Für die gegebenen Tensoren $\boldsymbol{\tau}'$ und \mathbf{W} ist Gleichung (2.51)₂ eine Entwicklungsgleichung für die Kristallorientierung \mathbf{Q} . Der Tensor $\dot{\mathbf{Q}}\mathbf{Q}^{-1}$ ist der Euler'sche Gitterspin, der direkt aus Gleichung (2.51)₂ bestimmt werden kann. Die Funktion $\tilde{\mathbf{k}}$ ist durch die Gleichungen (2.41)-(2.44) definiert, wobei $\tilde{\mathbf{F}}$ in diesem Fall dem Tensor \mathbf{Q} entspricht. Im starr-viskoplastischen Fall impliziert Gleichung (2.42) die Existenz eines Spannungspotentials Ψ^τ für den symmetrischen Anteil des Geschwindigkeitsgradienten \mathbf{D}'

$$\mathbf{D}' = \frac{\partial \Psi^\tau(\mathbf{Q}^\top \boldsymbol{\tau}' \mathbf{Q}, \tau^C)}{\partial \boldsymbol{\tau}'}, \quad (2.54)$$

$$\Psi^\tau(\mathbf{Q}^\top \boldsymbol{\tau}' \mathbf{Q}, \tau^C) = \frac{1}{m+1} \sum_{\alpha=1}^N \dot{\gamma}_0 \tau^C \left| \frac{\mathbf{Q}^\top \boldsymbol{\tau}' \mathbf{Q} \cdot \tilde{\mathbf{M}}_\alpha}{\tau^C} \right|^{m+1}.$$

Da Ψ^τ konvex ist, besteht ein umkehrbar eindeutiger Zusammenhang zwischen $\boldsymbol{\tau}'$ und \mathbf{D}' . Neben dem Spannungspotential existiert ein Dehnratenpotential Ψ^D , für das gilt:

$$\boldsymbol{\tau}' = \frac{\partial \Psi^D(\mathbf{Q}^\top \mathbf{D}' \mathbf{Q}, \tau^C)}{\partial \mathbf{D}'}. \quad (2.55)$$

Das Potential Ψ^D kann durch eine Legendre-Fenchel Transformation aus Ψ^τ berechnet werden. Es gilt ferner, dass der symmetrische Anteil des Geschwindigkeitsgradienten \mathbf{D}' positiv homogen vom Grade m im Kirchhoff'schen Spannungstensor $\boldsymbol{\tau}'$ ist. In umgekehrter Weise ist der Spannungstensor homogen vom Grad $1/m$ im symmetrischen Anteil des Geschwindigkeitsgradienten.

2.4 Verfestigung

Zur Formulierung des Verfestigungsgesetzes soll, wie bereits erwähnt, angenommen werden, dass die kritischen Schubspannungen in allen Gleitsystemen des Aluminiumeinkristalls gleich sind $\tau_\alpha^C = \tau^C$ (Kocks und Mecking, 2003). Zwischen der kritischen Schubspannung und der im Kristallgitter akkumulierten mittleren Versetzungsdichte ρ wird der Zusammenhang

$$\tau^C(\rho) = \alpha b G \sqrt{\rho} \quad (2.56)$$

eingeführt (Kocks und Mecking, 2003). G ist der Schubmodul und b der Betrag des Burgers-Vektors. Der Proportionalitätsfaktor α ist schwach temperatur- und dehnratenabhängig und wird als Konstante angesehen. Der Anteil der freien Energie, der die latent gespeicherte Energie berücksichtigt, wird mit

$$\tilde{W}_X(\rho) = \frac{1}{2} G b^2 \rho \quad (2.57)$$

angesetzt (Morris, 2001). Die zeitliche Änderung der mittleren Versetzungsdichte ρ in den Verfestigungsbereichen II und III kann durch die Gleichung

$$\dot{\rho}(\tilde{\mathbf{T}}, \rho) = \left(\frac{2}{bD} + \frac{\sqrt{\rho}}{\beta b} - \kappa \left| \frac{\dot{\gamma}(\tilde{\mathbf{T}}, \rho)}{\dot{\gamma}_0^*} \right|^{-\frac{1}{n}} \rho \right) \dot{\gamma}(\tilde{\mathbf{T}}, \rho), \quad (2.58)$$

$$\dot{\gamma}(\tilde{\mathbf{T}}, \rho) = \sum_{\alpha=1}^N \left| \dot{\gamma}_\alpha(\tilde{\mathbf{T}}, \tau^C(\rho)) \right|$$

(siehe z.B. Kocks, 1976; Estrin und Mecking, 1984) über einen großen Temperatur- und Dehnratenbereich beschrieben werden. Der erste Term in der Klammer von Gleichung (2.58)₁ ermöglicht die Beschreibung des Einflusses der Korngröße D auf die Verfestigung. Dieser Effekt wird im Folgenden vernachlässigt. Der zweite Term

in Gleichung (2.58)₁ beschreibt die statistische Speicherung von Versetzungen (Verfestigungsbereich II), die nach geometrischen Regeln und nahezu temperatur- und dehnratenunabhängig erfolgt. Der dritte Term in Gleichung (2.58)₁ beschreibt die dynamische Erholung (Verfestigungsbereich III), die temperatur- und dehnratenabhängig ist. Transformiert man die Differentialgleichung für die Versetzungsdichten, unter Vernachlässigung des Einflusses der Korngröße, in eine Differentialgleichung für die kritische Schubspannung, so erhält man

$$\begin{aligned} \dot{\tau}^C(\tilde{\mathbf{T}}, \tau^C) &= \Theta_0 \left(1 - \frac{\tau^C}{\tau_V^C(\tilde{\mathbf{T}}, \tau^C)} \right) \dot{\gamma}(\tilde{\mathbf{T}}, \tau^C), \\ \tau_V^C(\tilde{\mathbf{T}}, \tau^C) &= \tau_{V0}^C \left| \frac{\dot{\gamma}(\tilde{\mathbf{T}}, \tau^C)}{\dot{\gamma}_0^*} \right|^{\frac{1}{n}}, \end{aligned} \tag{2.59}$$

wobei gilt: $\Theta_0 = \alpha G / (2\beta)$ und $\tau_{V0}^C = \alpha G / (\kappa\beta)$. Der Anfangswert der kritischen Schubspannung wird im Folgenden mit τ_0^C bezeichnet.

2.5 Materialparameter

Die Materialparameter von Aluminium für den Raumtemperaturbereich wurden aus experimentellen Daten bestimmt, die der Literatur entnommen sind. Sie sind in Tabelle 2.3 gegeben. Die elastischen Konstanten stammen von Brandes und Brook (1998). Der Norton-Exponent m und der Verfestigungsmodul θ_0 wurden von Les et al. (1999) bestimmt. Die restlichen Verfestigungsparameter wurden unter Nutzung experimenteller Daten von Mecking (2001) berechnet. Die Materialparameter der Fließregel des starr-viskoplastischen Modells entsprechen den Parametern des elastisch-viskoplastischen Modells. Da im starr-viskoplastischen Modell die elastischen Distorsionen vernachlässigt werden, ist es möglich, nur eine elastische Konstante zu spezifizieren. In dieser Arbeit wird der Kompressionsmodul verwendet. Dieser ist in einem kristallinen Material generell von der Zugrichtung \mathbf{d} im Zugversuch abhängig

$$K(\mathbf{d}) = \frac{1}{3} \mathbf{I} \cdot \tilde{\mathbb{C}} [\mathbf{d} \otimes \mathbf{d}] \tag{2.60}$$

(siehe z.B. He und Curnier, 1994; Böhlke, 2001). Für kubische Einkristalle oder Aggregate von kubischen Einkristallen liegt eine Richtungsunabhängigkeit vor. Der Kompressionsmodul kann somit aus den elastischen Einkristallkonstanten berechnet werden

$$K = \frac{1}{3}(\tilde{C}_{1111} + 2\tilde{C}_{1122}) = 77.3 \text{ GPa.} \quad (2.61)$$

Elastisches Gesetz	\tilde{C}_{1111}	[GPa]	108
	\tilde{C}_{1122}	[GPa]	62
	\tilde{C}_{1112}	[GPa]	28.3
Fließregel	$\dot{\gamma}_0$	[s ⁻¹]	$9 \cdot 10^{-3}$
	m	[-]	133
	$\tilde{\mathbf{M}}_\alpha$	[-]	{111}⟨110⟩
Verfestigungsregel	Θ_0	[MPa]	37.5
	τ_{V0}^C	[MPa]	51.5
	n	[-]	22.5
	$\dot{\gamma}_0^*$	[s ⁻¹]	10^7
	τ_0^C	[MPa]	15

Tabelle 2.3: Materialparameter für Aluminium bei Raumtemperatur

Kapitel 3

Texturbeschreibung mittels der Orientierungsverteilungsfunktion der Kristallite (OVF)

3.1 Berechnung von Kristallorientierungen

Die Orientierung eines Einkristalls kann durch einen orthogonalen Tensor $\mathbf{Q} \in SO(3)$ definiert werden. Dieser Tensor bildet die orthonormale Probenbasis \mathbf{e}_i in die orthonormale Gitterbasis des Kristalls \mathbf{g}_i ab

$$\mathbf{Q} = \mathbf{g}_i \otimes \mathbf{e}_i. \quad (3.1)$$

Für die weiteren Betrachtungen ist es notwendig, eine Parametrisierung der Kristallorientierung \mathbf{Q} vorzunehmen. Häufig wird die Parametrisierung durch Eulerwinkel in der Form von Bunge (1993) gewählt

$$Q_{ij} = \begin{bmatrix} \cos \phi_1 \cos \phi_2 - \sin \phi_1 \cos \Phi \sin \phi_2 & \sin \phi_1 \cos \phi_2 + \cos \phi_1 \cos \Phi \sin \phi_2 & \sin \Phi \sin \phi_2 \\ -\cos \phi_1 \sin \phi_2 - \sin \phi_1 \cos \Phi \cos \phi_2 & -\sin \phi_1 \sin \phi_2 + \cos \phi_1 \cos \Phi \cos \phi_2 & \sin \Phi \cos \phi_2 \\ \sin \phi_1 \sin \Phi & -\cos \phi_1 \sin \Phi & \cos \Phi \end{bmatrix}. \quad (3.2)$$

In dieser Parametrisierung bewirkt der Winkel ϕ_1 eine Rotation um die z -Achse des Probensystems, gefolgt von einer Rotation mit dem Winkel Φ um die sich einstellende x -Achse und schließlich gefolgt von einer Rotation mit dem Winkel ϕ_2 um die sich einstellende z -Achse. Ein Nachteil dieser Beschreibung ist die Nichteindeutigkeit der Eulerwinkelbestimmung aus der Komponentenmatrix von

\mathbf{Q} für den Winkel $\Phi = 0$. In diesem Fall sind die Winkel ϕ_1 und ϕ_2 nicht unterscheidbar. Verändert man diese Parametrisierung durch eine geänderte Wahl der Drehachsen (siehe z.B. Roe, 1965), treten ebenfalls Nichteindeutigkeiten bei der Eulerwinkelbestimmung auf. Deshalb wird oft auf andere Parametrisierungen für \mathbf{Q} zurückgegriffen. Eine Möglichkeit ist die Parametrisierung von \mathbf{Q} durch eine Drehung mit dem Winkel ϑ um eine normierte Drehachse \mathbf{n}

$$\mathbf{Q} = \exp(\vartheta \boldsymbol{\varepsilon}_{\langle 3 \rangle}[\mathbf{n}]) = \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} + \cos \vartheta (\mathbf{I} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) - \sin \vartheta \boldsymbol{\varepsilon}_{\langle 3 \rangle}[\mathbf{n}] \quad (3.3)$$

(siehe z.B. Böhlke, 2001). Hierbei entspricht $\boldsymbol{\varepsilon}_{\langle 3 \rangle}$ dem Permutationstensor dritter Stufe. Eine andere Form der Parametrisierung ist die Anwendung von Quaternionen (siehe z.B. Becker und Panchanadeeswaran, 1989). Die in der Werkstoffmechanik und in der Kontinuumsmechanik am weitesten verbreitete ist aber die Nutzung von Eulerwinkeln. Aus diesem Grund wird in dieser Arbeit ausschließlich die in Gleichung (3.2) benutzte Parametrisierung von \mathbf{Q} angewendet.

3.2 Die Orientierungsverteilungsfunktion

Die Orientierungsverteilungsfunktion der Kristallite eignet sich zur quantitativen Analyse kristallographischer Texturen. Mit Hilfe der OVF können andere Größen wie z.B. Richtungsverteilungen (Polfiguren) berechnet werden und es können Aussagen über die Anisotropie der Materialeigenschaften des Polykristalls getroffen werden. Die OVF $f(\mathbf{Q})$ ist definiert durch

$$\frac{dV}{V}(\mathbf{Q}) = f(\mathbf{Q}) d\mathbf{Q}. \quad (3.4)$$

Sie ist eine Ein-Punkt-Korrelationsfunktion, die jeder Volumenfraktion eine Orientierung zuordnet. Neben der OVF werden auch Zwei-Punkt-Korrelationsfunktionen oder Korrelationsfunktionen höherer Ordnung angewendet (Adams et al., 1987; Etingof und Adams, 1993; Beran et al., 1996), in denen zusätzlich die morphologische Textur berücksichtigt wird. Die Bestimmung und Auswertung dieser Funktionen ist aber mit einem hohen numerischen Aufwand verbunden. Die OVF besitzt die Eigenschaft der Nichtnegativität

$$f(\mathbf{Q}) \geq 0 \quad \forall \mathbf{Q} \in SO(3), \quad (3.5)$$

und muss die Normierungsbedingung

$$\int_{SO(3)} f(\mathbf{Q}) dQ = 1 \quad (3.6)$$

erfüllen. Das Volumenelement dQ kann unter der Nutzung der in Gleichung (3.2) eingeführten Parametrisierung für \mathbf{Q} durch Eulerwinkel beschrieben werden

$$dQ = \frac{\sin(\Phi)}{8\pi^2} d\phi_1 d\Phi d\phi_2 \quad (3.7)$$

(Bunge, 1993). Die Integration einer Funktion $\psi(\mathbf{X})$ über das Referenzvolumen V bekommt nach der Anwendung der Gleichungen (3.4) und (3.7) die Form

$$\int_{SO(3)} f(\mathbf{Q})\psi(\mathbf{Q}) dQ = \frac{1}{8\pi^2} \int_0^{\phi_1^o} \int_0^{\Phi^o} \int_0^{\phi_2^o} f(\phi_1, \Phi, \phi_2)\psi(\phi_1, \Phi, \phi_2) \sin(\Phi) d\phi_1 d\Phi d\phi_2. \quad (3.8)$$

Die Integration erfolgt somit über $SO(3)$. Die oberen Grenzen der Eulerwinkel sind durch

$$\phi_1^o = 2\pi, \quad \Phi^o = \pi, \quad \phi_2^o = 2\pi \quad (3.9)$$

gegeben. Für die Integration aber auch für die Darstellung der OVF ist es sinnvoll, Kristall- und Probensymmetrie, die aus der Deformationsprozessgeschichte resultieren (Zheng und Fu, 2001b), zu berücksichtigen. Die Kristallsymmetrie impliziert die Bedingung

$$f(\mathbf{Q}) = f(\mathbf{QH}^C) \quad \forall \mathbf{H}^C \in S^C \subseteq SO(3) \quad (3.10)$$

(siehe Böhlke, 2005). S^C ist die Symmetriegruppe des Kristalls, die in diesem Fall der kubischen Symmetriegruppe entspricht. Die Probensymmetrie impliziert die Bedingung

$$f(\mathbf{Q}) = f(\mathbf{H}^S \mathbf{Q}) \quad \forall \mathbf{H}^S \in S^S \subseteq SO(3), \quad (3.11)$$

wobei S^S die Symmetriegruppe der Probe ist. In dieser Arbeit liegt meistens eine orthotrope Probensymmetrie vor, da in erster Linie gewalzte Bleche untersucht werden. Diese weisen bei hohen Umformgraden in ihrer Mittelebene mit guter Näherung eine orthotrope Probensymmetrie auf. Durch die Annahme der kubischen Kristallsymmetrie ergeben sich die oberen Grenzen der Eulerwinkel

$$\phi_1^o = 2\pi, \quad \Phi^o = \frac{\pi}{2}, \quad \phi_2^o = \frac{\pi}{2}. \quad (3.12)$$

Wird zusätzlich die orthotrope Probensymmetrie gefordert, so ergeben sich die Grenzen

$$\phi_1^o = \frac{\pi}{2}, \quad \Phi^o = \frac{\pi}{2}, \quad \phi_2^o = \frac{\pi}{2}. \quad (3.13)$$

Damit wird der Ausschnitt des zu berücksichtigenden Eulerraumes deutlich reduziert und damit die Rechenzeit für die numerische Auswertung der Integration über $SO(3)$ verringert. Eine Verbesserung der numerischen Ergebnisse kann durch die Variablensubstitution $\Phi = \arccos(\xi)$ erreicht werden. Hierdurch wird eine homogene Metrik eingeführt, die eine Entzerrung des diskretisierten Eulerraumes bewirkt. Die Integration einer Funktion über $SO(3)$ bekommt bei der Annahme kubischer Kristall- und orthotroper Probensymmetrie somit die Form

$$\int_{SO(3)} f(\mathbf{Q})\psi(\mathbf{Q}) dQ = \frac{4}{\pi^2} \int_0^{\phi_1^o} \int_{\xi^u}^{\xi^o} \int_0^{\phi_2^o} f(\phi_1, \Phi(\xi), \phi_2)\psi(\phi_1, \Phi(\xi), \phi_2) d\phi_1 d\xi d\phi_2. \quad (3.14)$$

Die Integrationsgrenzen für ξ sind im Fall kubischer Kristallsymmetrie

$$\xi^u = 0, \quad \xi^o = 1 \quad (3.15)$$

und im allgemeinen Fall

$$\xi^u = -1, \quad \xi^o = 1. \quad (3.16)$$

Numerische Integration. Zur numerischen Integration wurden in dieser Arbeit ein Gauß-Quadraturverfahren und ein adaptives multidimensionales Integrationsverfahren für vektorwertige Integrale (Berntsen und Espelid, 1991a,b) verwendet. Die Anwendung einer Gauß-Quadratur erfordert eine Variablensubstitution, die eine Transformation der Integrationsgrenzen auf das Einheitsintervall $[-1, 1]$ ermöglicht. Bei kubischer Kristallsymmetrie ergibt sich

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{+1} \int_0^{\frac{\pi}{2}} f(\phi_1, \Phi(\xi), \phi_2)\psi(\phi_1, \Phi(\xi), \phi_2) d\phi_1 d\xi d\phi_2 \\ &= \frac{1}{8} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} f(\varsigma, \chi, \iota)\psi(\varsigma, \chi, \iota) d\varsigma d\chi d\iota. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Die Zusammenhänge zwischen den Integrationsvariablen sind

$$\phi_1 = \pi(\varsigma + 1) \quad (3.18)$$

$$\xi = \frac{1}{2}(\chi + 1) \quad (3.19)$$

$$\phi_2 = \frac{\pi}{4}(\iota + 1). \quad (3.20)$$

Durch die Anwendung der Gauß-Quadratur kann das Integral in Gleichung (3.17) durch

$$\begin{aligned} & \frac{1}{8} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} f(\varsigma, \chi, \iota) \psi(\varsigma, \chi, \iota) \, d\varsigma \, d\chi \, d\iota \\ &= \frac{1}{8} \sum_{i=1}^L \sum_{j=1}^M \sum_{k=1}^N w_i w_j w_k f(\varsigma_i, \chi_j, \iota_k) \psi(\varsigma_i, \chi_j, \iota_k) \end{aligned} \quad (3.21)$$

approximiert werden. Die Gewichtsfunktionen w_i , w_j und w_k sowie die Stützstellen ς_i , χ_j und ι_k werden in dieser Arbeit nach der Gauß-Legendre-Quadratur 1. Art bestimmt. Die Parameter L , M und N entsprechen der Anzahl der Stützstellen in der jeweiligen Koordinatenrichtung.

Das Verfahren von Berntsen und Espelid (1991a,b) verwendet im Gegensatz zum beschriebenen Gauß-Verfahren kein konstantes Gitter, da an den Stellen des Integrationsgebietes an denen der Integrationsfehler einen vorgeschriebenen Wert überschreitet, eine Netzverfeinerung vorgenommen wird. Dieses adaptive Verfahren bietet außerdem die Wahlmöglichkeit verschiedener Quadraturen in Abhängigkeit der Dimension des verwendeten Raumes.

3.3 Approximation der OVF mittels zentraler Verteilungsfunktionen

Kristallographische Texturen können oft durch Texturkomponenten und Fasern beschrieben werden (Wasserman und Grewen, 1962; Bunge, 1993; Kocks et al., 1998). Eine Texturkomponente ist eine Kristallorientierung für die die OVF ein

(lokales) Maximum in der elementaren Region zeigt. In der Nachbarschaft fällt die OVF isotrop oder anisotrop ab. Texturkomponenten lassen sich mit Hilfe der OVF unter der Verwendung zentraler Verteilungsfunktionen auf $SO(3)$ darstellen. In einem solchen Fall besitzt die OVF eine geschlossene, analytische Form. Eine häufig verwendete Zentralverteilung ist die Mises-Fisher-Verteilung (Eschner (1993, 1995))

$$f_\alpha(\mathbf{Q}_\alpha, \mathbf{Q}, S_\alpha) = N(S_\alpha) \exp(S_\alpha \cos \omega(\mathbf{Q}, \mathbf{Q}_\alpha)). \quad (3.22)$$

\mathbf{Q}_α ist die mittlere Orientierung der Texturkomponente α , die den Erwartungswert von \mathbf{Q} angibt. Der Abstand $\omega(\mathbf{Q}, \mathbf{Q}_\alpha)$ zwischen beiden Orientierungen wird mit

$$\omega(\mathbf{Q}, \mathbf{Q}_\alpha) = \arccos\left(\frac{1}{2}(\text{tr}(\mathbf{Q}\mathbf{Q}_\alpha^{-1}) - 1)\right) \quad (3.23)$$

eingeführt (Bunge, 1993). Sind \mathbf{Q} und \mathbf{Q}_α identisch, besitzt die OVF $f_\alpha(\mathbf{Q}_\alpha, \mathbf{Q}, S_\alpha)$ ein Maximum, da für den Abstand $\omega(\mathbf{Q}, \mathbf{Q}_\alpha) = 0$ gilt. Der Abfall der OVF um dieses Maximum wird durch die Höhe der Streubreite S_α bestimmt. Zwischen der Streubreite S_α und der Halbwertsbreite b_α der Zentralverteilung besteht der Zusammenhang

$$S_\alpha = \frac{\ln 2}{2 \sin^2(b_\alpha/4)}. \quad (3.24)$$

Die Halbwertsbreite der Zentralverteilung gibt die Breite der Verteilung auf der Höhe des halben Maximalwertes im Orientierungsraum an. Die Streuung S_α und die Halbwertsbreite b_α können aus Experimenten bestimmt werden. Der Normierungsfaktor $N(S_\alpha)$ hängt von der Streubreite S_α und den modifizierten Besselfunktionen $I_0(S_\alpha)$ und $I_1(S_\alpha)$ ab

$$N(S_\alpha) = \frac{1}{I_0(S_\alpha) - I_1(S_\alpha)}. \quad (3.25)$$

Die Berechnung der modifizierten Besselfunktionen erfolgt aus der integralen Beziehung

$$I_n(S_\alpha) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \exp(S_\alpha \cos t) \cos(nt) dt. \quad (3.26)$$

Die Mises-Fisher-Verteilung besitzt die maximale Entropie aller Orientierungsverteilungen auf $SO(3)$ mit dem Erwartungswert \mathbf{Q}_α von \mathbf{Q} . Die Entropie einer OVF kann durch

$$E = - \int_{SO(3)} f(\mathbf{Q}) \ln(f(\mathbf{Q})) d\mathbf{Q} \in (-\infty, 0] \quad (3.27)$$

berechnet werden (siehe z.B. Schaeben, 1994). Diese Definition basiert auf der Einführung der Entropie im Bereich der Informationstheorie (Shannon, 1948).

Die Mises-Fisher-Verteilung wurde durch von Mises im zwei-dimensionalen Fall und durch Fisher im drei-dimensionalen Fall eingeführt (Mardia und Jupp, 2000). Matthies (1980) war der Erste, der die Mises-Fisher-Verteilung in der Texturanalyse anwendete. Er bezeichnete sie als Normalverteilung im Orientierungsraum (siehe auch Matthies et al., 1988). Diese Interpretation als Normalverteilung wurde durch Schaeben (1992, 1994) kritisiert. Einen Überblick über zentrale und nichtzentrale Verteilungsfunktionen auf $SO(3)$ findet man in der Arbeit von Mardia und Jupp (2000). In der Arbeit von Eschner (1993, 1995) wurden nichtzentrale Verteilungsfunktionen zur Beschreibung experimenteller Texturen genutzt.

Berücksichtigt man die Kristallsymmetrie für die OVF (siehe Gleichung (3.10)), so erhält man die folgende Beziehung für die Mises-Fisher-Verteilung in Gleichung (3.22)

$$f_\alpha(\mathbf{Q}_\alpha, \mathbf{Q}, S_\alpha) = \frac{1}{24} \sum_{\beta=1}^{24} N(S_\alpha) \exp(S_\alpha \cos(\omega(\mathbf{Q}, \mathbf{Q}_\alpha \mathbf{H}_\beta^C))), \quad (3.28)$$

wobei $\mathbf{H}_\beta^C \in SO(3)$ die 24 Elemente der kubischen Kristallsymmetrieklasse beinhaltet (siehe z.B. Hansen et al., 1978). Bei der Betrachtung von N_C Texturkomponenten mit Volumenanteil ν_α ist es möglich, die einzelnen Komponenten additiv zu überlagern und zusätzlich einen isotropen Anteil f_{iso} zu berücksichtigen

$$f = \nu_\alpha \sum_{\alpha=1}^{N_C} f_\alpha(\mathbf{Q}_\alpha, \mathbf{Q}, S_\alpha) + f_{iso}. \quad (3.29)$$

Der isotrope Anteil f_{iso} kann als die isotrope Volumenfraktion ν_{iso} identifiziert werden.

3.3.1 Anwendung auf Standardlagen

Typische Texturkomponenten sind die Würfellage und die Goss-Lage. Beschreibt man beide durch Eulerwinkel, so ergibt sich für die Würfellage das Winkeltripel

$$\phi_1 = 0, \quad \Phi = 0, \quad \phi_2 = 0, \quad (3.30)$$

sowie für die Goss-Lage das Winkeltripel

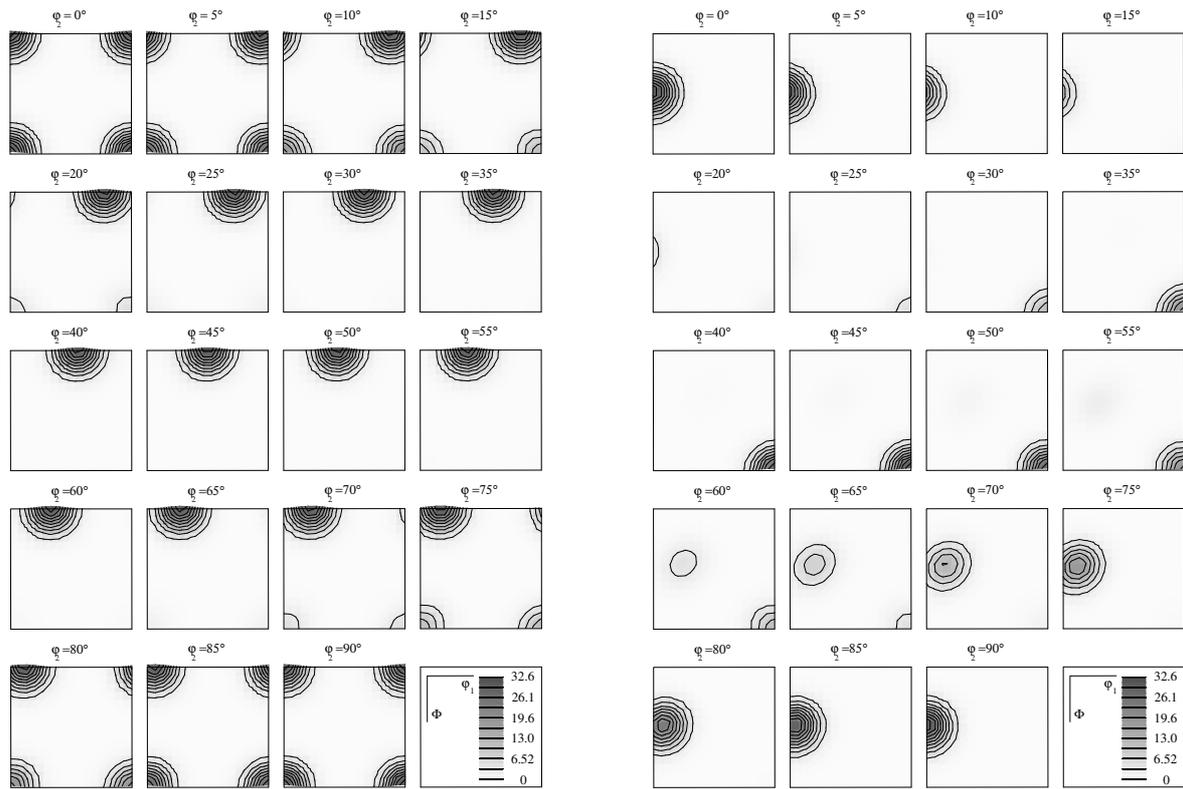
$$\phi_1 = 0, \quad \Phi = \frac{\pi}{4}, \quad \phi_2 = 0. \quad (3.31)$$

Betrachtet man den Begriff Texturkomponente im Sinne von Verteilungsfunktionen auf $SO(3)$, so besteht eine Texturkomponente aus einer mittleren Orientierung, die durch Gleichung (3.30) oder durch Gleichung (3.31) definiert wird, und einer Streuung um diese Orientierung. Im Falle der Mises-Fisher-Verteilung wird die Streuung durch die Halbwertsbreite oder durch die Streubreite bestimmt.

In den Abbildungen 3.1 (a),(b) sind die Orientierungsverteilungsfunktionen für Mises-Fisher-Verteilungen der Würfellage bzw. der Goss-Lage mit einer Halbwertsbreite von jeweils $b = 25^\circ$ dargestellt. Da für beide Lagen die Kristall- und Probensymmetrie zusammenfallen und es sich um eine kubische Kristallsymmetrie handelt, kann eine Reduktion des Eulerraumes nach Gleichung (3.13) vorgenommen werden. Die Darstellung der OVF basiert auf $\phi_2 = 5^\circ$ Schnitten durch den Eulerraum. In jedem dieser Schnitte werden die Winkel ϕ_1 und Φ zwischen 0° und 90° aufgetragen. In beiden OVF's (Abbildungen 3.1 (a),(b)) ist der rotations-symmetrische Abfall der Mises-Fisher-Verteilungen um die jeweiligen mittleren Orientierungen erkennbar. Die Höhe der Maxima und die Breite der Verteilungen können durch eine Variation der Halbwertsbreite verändert werden. Eine Erhöhung der Halbwertsbreite hat somit eine stärkere Einbeziehung der Nachbarschaft der mittleren Orientierungen zur Folge. Die Untersuchung von Standardlagen mit zentralen Verteilungsfunktionen unter Nutzung verschiedener Streuungen wurde von Matthies et al. (1987) durchgeführt.

3.3.2 Texturkomponenten eines gewalzten Aluminiumbleches

In der Arbeit von Lege et al. (1989) wurde ein gewalztes 2008-T4 Aluminiumblech bezüglich der Textur und der mechanischen Eigenschaften (u.a. Fließspannungen,



(a) Würfellage

(b) Goss-Lage

 Abbildung 3.1: OVF-Schnitte der Würfellage und der Goss-Lage für Mises-Fisher-Verteilungen mit $b = 25^\circ$ ($0 \leq \phi_1 \leq 90^\circ$, $0 \leq \Phi \leq 90^\circ$, $0 \leq \phi_2 \leq 90^\circ$)

i	b_i	ν_i	φ_1^i	Φ^i	φ_2^i
1	20.18°	0.248	1.5532	1.5532	6.2656
2	19.15°	0.298	0.2564	1.4347	5.7036
3	22.05°	0.153	0.4664	1.5334	6.0412
4	11.72°	0.038	1.5549	1.5523	5.9513
isotrop		0.263			

Tabelle 3.1: Haupttexturkomponenten eines 2008-T4 Bleches (Lege et al., 1989) charakterisiert durch Volumenfraktionen, Halbwertsbreiten und Eulerwinkel unter Berücksichtigung orthotroper Probensymmetrie

R -Werte, Tiefziehprofile) analysiert. Aus der Texturmessung wurden zusätzlich die Haupttexturkomponenten bestimmt. Diese wurden durch mittlere Orientierungen und Streuungen für Quasi-Gauß-Verteilungen charakterisiert. In Tabelle

3.1 sind diese Komponenten in Form von Mises-Fisher-Verteilungen angegeben. Die dazugehörigen $\{100\}$ -Polfiguren der einzelnen Komponenten, der überlagerten Komponenten und des Experimentes sind in Abbildung 3.2 dargestellt.

Komponente eins in Abbildung 3.2 ist die typische Texturkomponente der Würfellage, für die bereits die OVF-Schnitte in Abbildung 3.1 (a) berechnet wurden. Komponente vier ist eine leicht um die Walzrichtung gedrehte Würfellage. Erwähnenswert für dieses Beispiel ist, dass unter Berücksichtigung orthotroper Proben-symmetrie bereits vier einzelne Komponenten ausreichen, um eine experimentelle Textur zu beschreiben. Diese Texturkomponenten werden später für Untersuchungen bezüglich der plastischen Anisotropie dieses Aluminiumbleches genutzt.

3.4 Identifikation von Texturkomponenten mittels Optimierung

Im letzten Abschnitt wurden kristallographische Texturen unter der Nutzung von Mises-Fisher-Verteilungsfunktionen beschrieben. Die Bestimmung der Parameter dieser Verteilungsfunktionen erfordert die Identifikation der mittleren Orientierung, der Halbwertsbreite und des Volumenanteils jeder Texturkomponente. Eine Approximation der OVF durch diskrete Kristallverteilungen erfordert zwar nicht die Identifikation der Halbwertsbreiten, dafür wird aber eine höhere Anzahl von Orientierungen benötigt, um eine hinreichende Anpassung an eine gegebene Textur zu erreichen.

Die Methode der Diskretisierung einer Referenztextur oder einer Referenz-OVF ist die älteste Methode, die in der Literatur Verwendung findet. Das Ziel dieser Methode ist die Bestimmung eines Satzes von Orientierungen und Volumenfraktionen, der in der Lage ist, eine OVF quantitativ zu approximieren. Das Problem besteht darin, die Anzahl der benötigten Orientierungen zur Beschreibung der Textur auf ein Minimum zu beschränken. Bei dieser Methode erfolgt eine Umrechnung der Intensitäten der OVF in zugehörige Volumenfraktionen. Dieser Prozess geschieht meist auf einem vorgegebenen Raster im Orientierungsraum, für dessen Parametrisierung in der Regel Eulerwinkel gewählt werden. Die CUT-Methode ist in diesem Zusammenhang die wohl einfachste Methode. Bei der Anwendung dieser Methode werden Orientierungen herausgefiltert, deren Volumenfraktionen unter

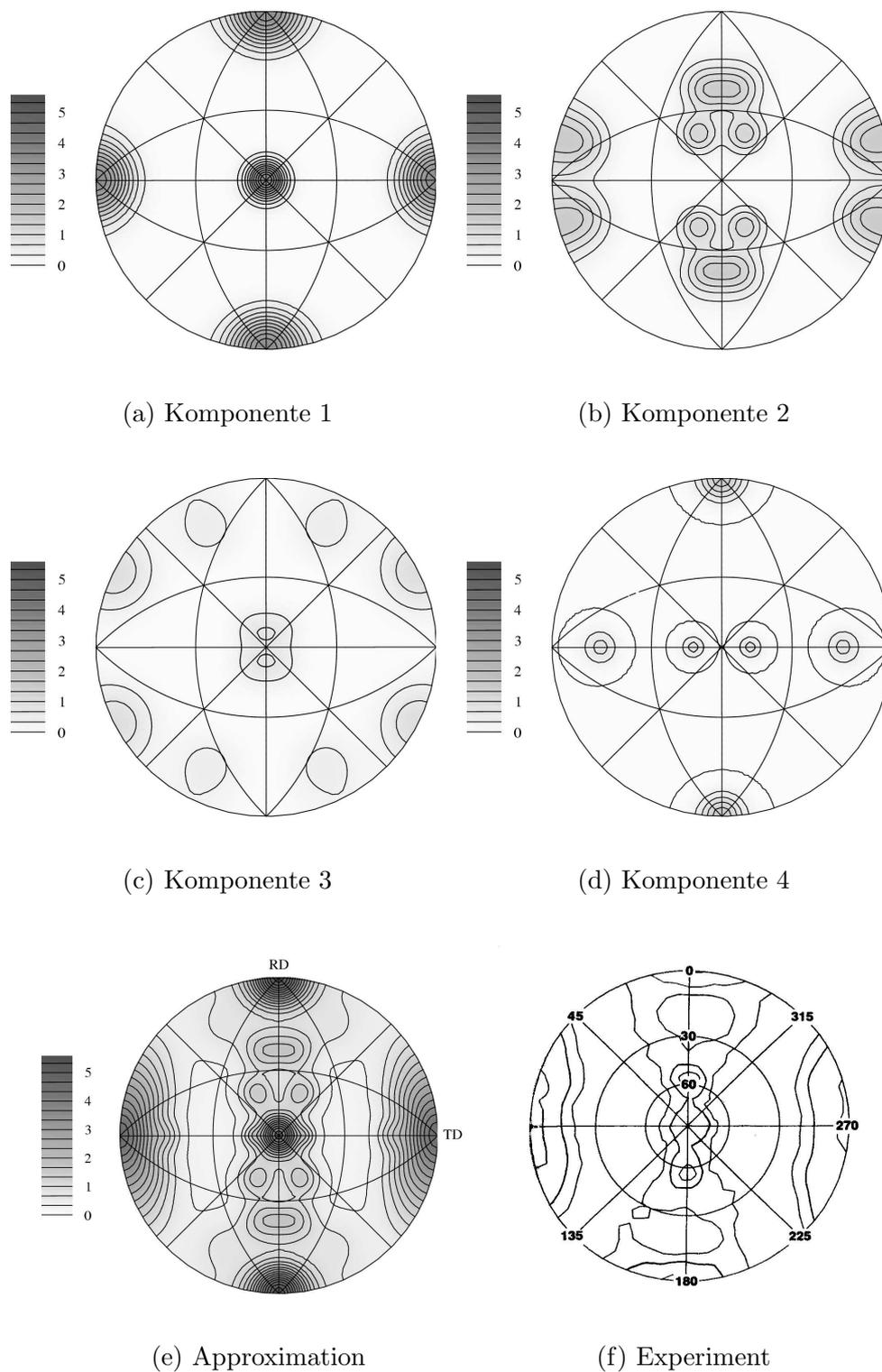


Abbildung 3.2: Vergleich der experimentellen $\{100\}$ -Polfigur eines texturierten Aluminiumbleches (Lege et al., 1989) und deren Approximation durch Texturkomponenten

einem festgesetzten Grenzwert liegen. Sie wurde von Toth und Van Houtte (1992) kritisiert und mit zwei ambitionierteren Verfahren verglichen. Ein Verfahren beruht auf einer statistischen Methode (STAT), das andere auf der Definition eines minimalen Abstandes zwischen zwei benachbarten Orientierungen (LOD). Im STAT-Verfahren wird für jede Orientierung dieselbe Volumenfraktion verwendet. Es wird eine kumulative Funktion für die OVF eingeführt, die durch Integration über eine Anzahl von n Boxen im Orientierungsraum berechnet wird. Jede dieser Boxen besitzt eine Orientierung, die mit der Hilfe eines Selektors bestimmt wird. Dieser Selektor wird unter Nutzung einer Zufallsverteilung ermittelt. Ein ähnlicher Ansatz wird in der Arbeit von Kocks (1991) angewendet. Die LOD-Methode nutzt im Gegensatz zum STAT-Verfahren keine konstanten Volumenfraktionen für die einzelnen Orientierungen. Es wird zunächst eine Referenzorientierung ausgewählt. Dann wird der Orientierungsraum auf einem vorgegebenen Raster abgetastet. Es werden alle Orientierungen, die unter einem bestimmten Winkel zur Referenzorientierung liegen, zur selbigen hinzugefügt. Damit vergrößert sich die zugehörige Volumenfraktion der Referenzorientierung. Dieser Vorgang wird solange wiederholt, bis ein Satz mit einer gewünschten Anzahl von Orientierungen übrigbleibt. Diese Methode wurde später in einer abgewandelten Form zur Bestimmung von Volumenfraktionen für Texturkomponenten von kubischen Metallen verwendet (Cho et al., 2004). In der Arbeit von Toth und Van Houtte (1992) wird gezeigt, dass die eingeführten STAT- und LOD-Verfahren der bis dato verbreiteten CUT-Methode überlegen sind. Dies wurde unter anderem für die Texturapproximation und für die Bestimmung der plastischen Anisotropie mit Hilfe der durch die unterschiedlichen Verfahren berechneten Orientierungssätze gezeigt. Bei der Texturapproximation erwies sich ferner, dass das LOD-Verfahren die Details der Textur besser wiedergibt. Im Gegensatz dazu konnte das STAT-Verfahren die Umgebung der Maxima der OVF besser auflösen.

Die zweite Gruppe von Verfahren basiert auf kontinuierlichen Verteilungsfunktionen zur Approximation der Referenz-Textur. Im Sinne der Identifikation von Texturkomponenten wurde die Methode z. B. von Nikolayev et al. (1992) angewendet. Nikolayev et al. (1992) approximieren die OVF mit Quasi-Gaußverteilungen, die die Einbeziehung von Streubreiten um die mittleren Orientierungen der Texturkomponenten zulassen. Aus der OVF werden Polverteilungen (Modellpolfiguren) bestimmt. Die Bestimmung der mittleren Orientierungen der Texturkomponenten

erfolgt aus dem Datensatz der experimentellen Polfiguren (Referenzpolfiguren). Die Orientierungen werden im nachfolgenden Optimierungsprozess konstant gehalten. Eine Abschätzung der Volumenanteile und der Streubreiten der Komponenten erfolgt aus den experimentellen Daten. Durch den Vergleich von Referenzpolfigur und Modellpolfigur wird ein Optimierungsproblem definiert. Die Lösung des Optimierungsproblems ergibt angepasste Parameter für die Volumenfraktionen und die Halbwertsbreiten. Eine ähnliche Methode wird von Helming (1996) genutzt. Er verwendet im Gegensatz zu Nikolayev et al. Mises-Fisher-Verteilungen zur Approximation der OVF. Außerdem erfolgt die Ermittlung der mittleren Orientierungen der Texturkomponenten interaktiv am Computerbildschirm. Danach werden sie an die Maxima der Polfiguren angepasst. Im Optimierungsprozess werden auch hier die Volumenanteile und die Halbwertsbreiten als variabel betrachtet. In der Arbeit von Cai und Lee (1994) erfolgt die Bestimmung der mittleren Orientierungen direkt aus den Maxima der OVF. Als Variablen im Optimierungsprozess werden ebenfalls die Streubreiten und die Volumenanteile der Komponenten betrachtet. Eine ähnliche Strategie wird von Tarasiuk et al. (2004) verfolgt, wobei zusätzlich ein genetischer Algorithmus im Optimierungsprozess angewendet wird. Dieser wird mit Standardmethoden zur Lösung von Optimierungsproblemen verglichen. In der Arbeit von Böhlke et al. (2006a) wird die Zielfunktion durch ein Abstandsmaß zwischen einer Referenz-OVF und einer für die Optimierung variablen OVF definiert. Im Optimierungsprozess werden die Volumenanteile der Komponenten angepasst. Die Streubreiten und die mittleren Orientierungen der Mises-Fisher-Verteilungen sind während der Optimierung konstant. Sie müssen vor Beginn des Optimierungsprozesses festgelegt werden. Dazu wird der Orientierungsraum mit einem Raster versehen, wodurch n mittlere Orientierungen ausgewählt werden. Die Halbwertsbreiten sind in den durchgeführten Berechnungen für alle Komponenten gleich. Zur Lösung wird das Optimierungsproblem in ein quadratisches Programmierungsproblem überführt.

Eine Identifikation der Parameter eines Modells, das speziell für Fasertexturen geeignet ist, wurde von Delannay et al. (2000) durchgeführt. In der Arbeit von Eschner (1995) wurde neben zentralen Verteilungsfunktionen zur Komponentenbestimmung auch ein elliptischer Ansatz verwendet, der sich ebenfalls für Fasertexturen eignet.

In dieser Arbeit soll ebenfalls eine Identifikation von Texturkomponenten durch-

geführt werden. Im Gegensatz zu dem in diesem Kontext vorgestellten Verfahren werden beliebige Startwerte für die Orientierungen verwendet. Die Streubreiten und die Volumenanteile sind im Optimierungsprozeß konstant. Aus diesem Grund werden mehrere Berechnungen mit unterschiedlichen Volumenanteilen und Streubreiten durchgeführt.

3.4.1 Lösung des Optimierungsproblems

Zur Definition des Optimierungsproblems werden eine Referenz-OVF und eine Modell-OVF definiert. Die Referenz-OVF $f_{\text{ref}}(\mathbf{Q})$ wird für eine Verteilung von Orientierungen berechnet, die z.B. das Resultat eines Deformationsprozesses sein kann. Die Modell-OVF $f(\mathbf{Q})$ besteht aus einer festen Anzahl von N_C Komponenten. Das heißt, sie besitzt eine feste Anzahl mittlerer Orientierungen, Halbwertsbreiten und Volumenanteile. Es stellt sich die Frage, wie man Modell-OVF und Referenz-OVF miteinander vergleichen kann. Hierzu wird der Abstand

$$\delta = \int_{SO(3)} (f_{\text{ref}}(\mathbf{Q}) - f(\mathbf{Q}))^2 dQ \quad (3.32)$$

definiert. Er entspricht dem Texturindex der Differenz von Referenz-OVF und Modell-OVF. Durch Minimierung des Abstandes

$$\delta(\mathbf{x}) \rightarrow \min \quad (3.33)$$

kann eine Modell-OVF ermittelt werden, die der Referenz-OVF in guter Näherung entspricht. Der Vektor \mathbf{x} in Gleichung (3.33) ist ein Vektor der Dimension $5N_C$, in dem die die Orientierung der Komponenten parametrisierenden Eulerwinkel sowie die zugeordneten Halbwertsbreiten und Volumenanteile

$$\mathbf{x} = [\varphi_1^1, \Phi^1, \varphi_2^1, b^1, \nu^1; \dots; \varphi_1^{N_C}, \Phi^{N_C}, \varphi_2^{N_C}, b^{N_C}, \nu^{N_C}] \quad (3.34)$$

gespeichert sind. Es wird angenommen, dass die Eulerwinkel während der Optimierung variabel sind. Es wird ferner angenommen, dass die Halbwertsbreiten b_i und die Volumenanteile ν_i während der Optimierung konstant sind. Hierdurch entsteht der Vorteil, dass für die Volumenanteile und Halbwertsbreiten keine Nebenbedingungen formuliert werden müssen. Eine Einschränkung der Eulerwinkel

im Optimierungsprozess muss ebenfalls nicht erfolgen, da der Eulerraum periodisch ist. Damit ist das Optimierungsproblem nicht restringiert.

Die Zielfunktion des definierten Optimierungsproblems besitzt mehrere lokale Minima, von Interesse ist aber das globale Minimum. Aus diesem Grund muss ein globales Optimierungsverfahren verwendet werden. Hierzu wurde das Verfahren von Boender et al. (1982) gewählt, das durch Csendes (Fortran 77 Code (siehe z.B. Csendes et al., 1986)) modifiziert wurde. Es handelt sich um ein stochastisches Verfahren, das auf der Bildung von Clustern zur Isolation des globalen Minimums beruht. Zur Bestimmung des lokalen Extremums wird ein Quasi-Newton-Verfahren verwendet. Im Allgemeinen kann der Vektor \mathbf{x}_{k+1} im Schritt $k+1$ aus dem Schritt k bestimmt werden

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha \mathbf{p}_k, \quad (3.35)$$

wobei α die Schrittweite und \mathbf{p}_k die Suchrichtung ist. Die Methode der Suchrichtungsbestimmung kennzeichnet das lokale Optimierungsverfahren. Im Falle des Newton-Verfahrens führt man eine Taylorreihenentwicklung der Zielfunktion durch

$$\delta(\mathbf{x}_k + \mathbf{p}_k) = \delta(\mathbf{x}_k) + \nabla \delta(\mathbf{x}_k) \cdot \mathbf{p}_k + \frac{1}{2} \mathbf{p}_k \cdot \nabla^2 \delta(\mathbf{x}_k) \mathbf{p}_k, \quad (3.36)$$

wobei nur Terme bis zur quadratischen Ordnung berücksichtigt werden. ∇ ist der Nabla-Operator. Die Lösung erfolgt dann für das quadratische Ersatzproblem

$$\chi(\mathbf{p}_k) := \nabla \delta(\mathbf{x}_k) \cdot \mathbf{p}_k + \frac{1}{2} \mathbf{p}_k \cdot \nabla^2 \delta(\mathbf{x}_k) \mathbf{p}_k. \quad (3.37)$$

Durch Ableitung und Forderung der Stationarität folgt

$$\frac{\partial \chi(\mathbf{p}_k)}{\partial \mathbf{p}_k} = \nabla \delta(\mathbf{x}_k) + \nabla^2 \delta(\mathbf{x}_k) \mathbf{p}_k = 0. \quad (3.38)$$

Durch Umformung ergibt sich die Suchrichtung

$$\mathbf{p}_k = -[\nabla^2 \delta(\mathbf{x}_k)]^{-1} \nabla \delta(\mathbf{x}_k). \quad (3.39)$$

Die Matrix $\nabla^2 \delta(\mathbf{x}_k)$ wird als Hesse-Matrix \mathbf{H}_k bezeichnet. Im Falle des Quasi-Newton-Verfahrens wird diese Matrix im Schritt $k+1$ durch Aufdatierung aus dem Schritt k bestimmt

$$\mathbf{H}_{k+1} = \mathbf{H}_k + \mathbf{U}. \quad (3.40)$$

Die Matrix \mathbf{U} ist die Aufdatierungsmatrix. Sie muss so bestimmt werden, dass die positive Definitheit der Hesse-Matrix garantiert wird. Im verwendeten Programm wird \mathbf{U} nach dem Verfahren von Davidon/Fletscher/Powell (DFP) (Großmann und Terno (1993), Gill et al. (1981)), das auch Verfahren der variablen Metrik genannt wird, bestimmt. Der Vorteil des Quasi-Newton-Verfahrens liegt in dessen überlinearer Konvergenz bei hinreichend guten Startwerten. Im Vergleich zu anderen Verfahren für die lokale Suche erwies sich das Quasi-Newton-Verfahren als das schnellste. Die Forderung der doppelten stetigen Differenzierbarkeit der Zielfunktion wird durch die kontinuierliche Approximation der OVF mit Hilfe der Mises-Fisher-Verteilung sichergestellt. Für die im Algorithmus benötigten Zufallsstartwerte werden Zufallszahlen aus einer Gleichverteilung gewählt. Zur Generierung der Zufallszahlen wird das Verfahren der multiplikativen kongruenten Methode verwendet (LAPACK F77 Routine).

3.4.2 Komponentenanpassung für Standarddeformationen

Im folgenden Kapitel wird mit Hilfe der in Kapitel 3.4.1 definierten Optimierungsmethode eine gegebene Anzahl von Komponenten an Referenztexturen von Standarddeformationen (Elongation/Ebene Kompression/Einfache Scherung) angepasst. Die Referenztexturen wurden mit Hilfe von Taylor-Simulationen bestimmt. Die Berechnung der Referenz-OVF's erfolgte durch Überlagerung von 1000 gleichgewichteten Mises-Fisher-Verteilungen mit einer Halbwertsbreite von jeweils $b_i = 15^\circ$. Bei der Anpassung der Komponenten kann gezeigt werden, dass für eine gegebene Referenztextur bereits wenige Komponenten zur ausreichenden Beschreibung der Textur genügen.

Geht man zunächst davon aus, dass neben den Orientierungen der Komponenten zusätzlich die Halbwertsbreite b_i und der Volumenanteil v_i einer Komponente i variiert werden, damit eine optimale Anpassung an eine gegebene Referenz-OVF erfolgt, so wird jeweils für unterschiedliche feste Werte von Halbwertsbreite und Volumenanteil die Minimierung der Funktion δ durchgeführt. Dadurch erhält man für eine gegebene Anzahl von Komponenten die optimale Anpassung an die Referenztextur. Die $\{100\}$ -Polfiguren in den Abbildungen 3.3 (a)-(d) zeigen, dass für die ebene Kompression und die einfache Scherung bereits 4 Komponenten für eine qualitativ gute Beschreibung der gegebenen Textur ausreichend sind. Anders ver-

Ebene Kompression ($\delta = 0.963$)					
i	b_i	v_i	φ_1^i	ϕ^i	φ_2^i
1	17.8	0.25	1.1740	0.5070	-0.4942
2	17.8	0.25	-1.3009	-0.4910	0.5855
3	17.9	0.27	1.2762	-0.4931	-0.5678
4	18.5	0.23	-1.1476	0.5120	0.4743
Einfache Scherung ($\delta = 0.924$)					
i	b_i	v_i	φ_1^i	ϕ^i	φ_2^i
1	27.9	0.25	6.2176	0.7889	2.4463
2	17.8	0.19	-0.5897	0.7743	-0.0264
3	23.1	0.28	1.5987	0.7878	-0.0204
4	26.2	0.28	5.37658	0.9805	0.5181
Elongation ($\delta = 0.631$)					
i	b_i	v_i	φ_1^i	ϕ^i	φ_2^i
1	16.1	0.13	3.8662	1.0557	1.9422
2	16.2	0.13	0.7699	0.9824	1.8625
3	16.2	0.12	4.8804	0.6248	0.5784
4	22.8	0.12	3.1363	0.6992	1.5728
5	21.7	0.12	-0.0416	0.0542	1.6152
6	16.2	0.13	3.7586	1.6294	0.8273
7	16.3	0.12	1.8807	0.6495	0.4008
8	16.0	0.13	4.0468	0.8234	1.6399

Tabelle 3.2: Angepasste Komponenten für die ebene Kompression, die einfache Scherung und die Elongation

hält es sich bei Fasertexturen, wie z.B. der des Zugversuches. In diesem Fall sind 8 Komponenten für eine ausreichende Beschreibung der Textur notwendig. Das ist

Taylor-Simulation

Komponentenanpassung

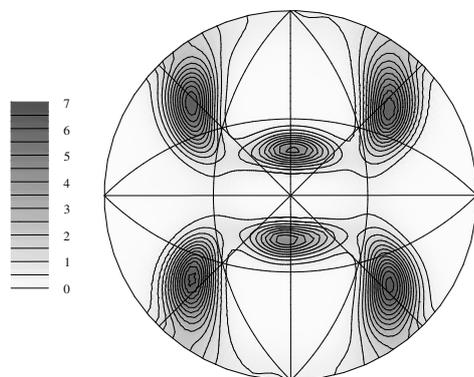
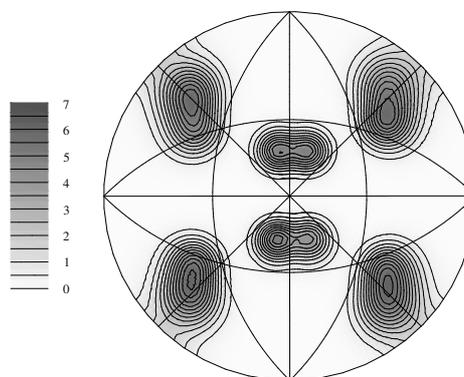
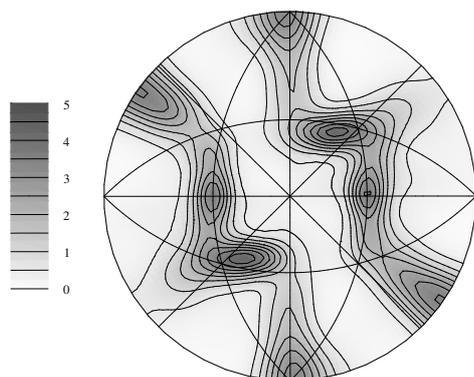
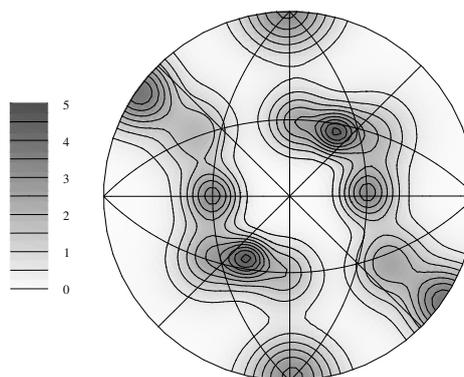
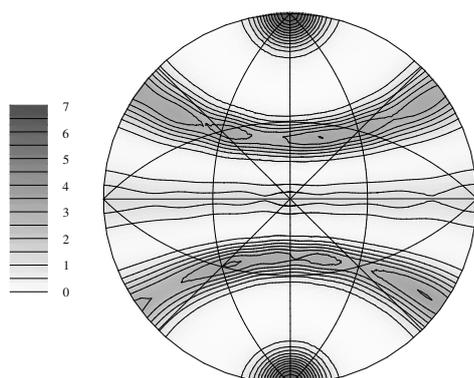
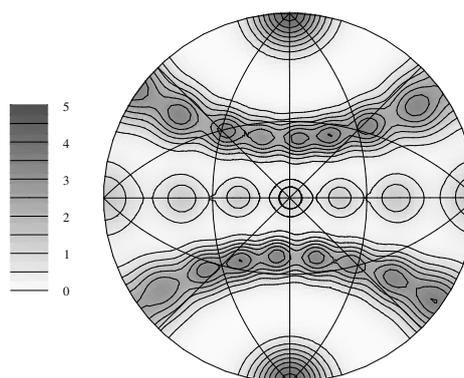
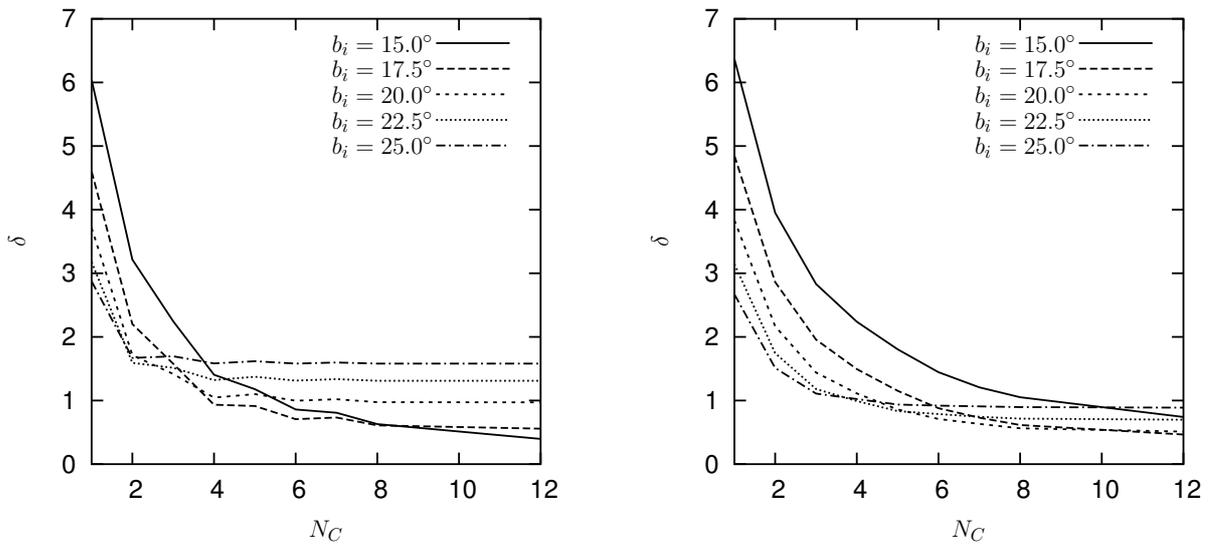
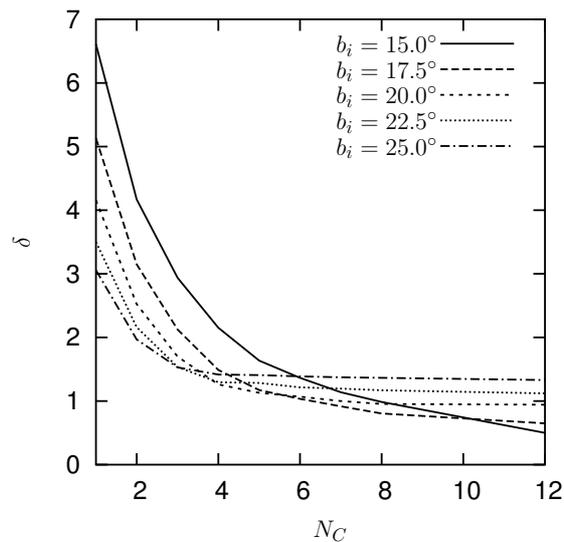
(a) Ebene Kompression ($N=1000$)(b) Ebene Kompression ($N_C=4$)(c) Einfache Scherung ($N=1000$)(d) Einfache Scherung ($N_C=4$)(e) Elongation ($N=1000$)(f) Elongation ($N_C=8$)

Abbildung 3.3: Vergleich der $\{100\}$ -Polfiguren für Taylor-Simulationen an Kupfer mit 1000 Einkristallen und für Anpassung mit Texturkomponenten



(a) Ebene Kompression

(b) Einfache Scherung



(c) Elongation

Abbildung 3.4: Vergleich der Entwicklung des Approximationsfehlers δ mit steigender Komponentenzahl bei der Anpassung an die Referenztexturen in den Abbildungen 3.3 (a,c,e) bei gleichen Volumenanteilen der Texturkomponenten

aber immer noch eine sehr geringe Anzahl. Die einzelnen Komponenten, charakterisiert durch ihre mittleren Orientierungen, Halbwertsbreiten und Volumenanteile, sind in Tabelle 3.2 aufgelistet.

In den Abbildungen 3.4 (a)-(c) ist die Entwicklung des Approximationsfehlers δ

zwischen Referenz-OVF und Modell-OVF über die Anzahl der Texturkomponenten N_C bei gleichen Volumenanteilen v_i und für unterschiedliche Halbwertsbreiten b_i dargestellt. Die Halbwertsbreiten variieren zwischen $15^\circ \leq b_i \leq 25^\circ$. Verwendet man nur eine Komponente zur Approximation der Referenz-Textur, so ist die Anpassung mit der größten Halbwertsbreite ($b = 25^\circ$) am besten, die mit der kleinsten Halbwertsbreite ($b = 15^\circ$) am schlechtesten. Dies gilt für die Deformationen der ebenen Kompression (Abbildung 3.4 (a)), der einfachen Scherung (Abbildung 3.4 (b)) und der Elongation (Abbildung 3.4 (c)). Der Grund dafür ist, dass eine Komponente mit einer kleinen Streubreite eine viel zu scharfe Textur erzeugt, die sich in einem kleinen Abschnitt des Orientierungsraumes befindet. Eine Anpassung an eine breit gestreute Textur ist demzufolge nur schlecht möglich. Die Texturschärfe einer OVF fällt mit zunehmender Streubreite ab. Das bedeutet, dass eine Komponente mit einer größeren Streubreite auch eine bessere Anpassung liefert.

Dieser Trend ändert sich aber mit steigender Komponentenanzahl N_C . Bei der ebenen Kompression (Abbildung 3.4 (a)) wird für eine Halbwertsbreite von $b = 25^\circ$ schon ab $N_C = 2$ Komponenten ein konstanter Wert für den Abstand δ erreicht. Für $b = 22.5^\circ$ und $b = 20^\circ$ geschieht dies bei $N_C = 4$. Das Niveau des δ Wertes sinkt dabei bei fallenden Werten für die Halbwertsbreiten. Bei größeren Werten für N_C führen nur noch die Halbwertsbreiten $b = 17.5^\circ$ und $b = 15^\circ$ zu einer Verbesserung der Anpassung, da in diesen Fällen der δ Wert weiter abfällt. Die beste Approximation liefert bei der ebenen Kompression die Streubreite $b = 15^\circ$ bei einer Komponentenanzahl von $N_C = 12$. Bei einer Anzahl von $N_C = 1000$ wird für diesen Fall der Approximationsfehler $\delta = 0$ erreicht, da die Referenz-Textur mit 1000 Komponenten unter Verwendung einer Halbwertsbreite von $b = 15^\circ$ erzeugt wurde. Bei der einfachen Scherung in Abbildung 3.4 (b) dauert der Abfall auf ein konstantes Niveau für δ länger als bei der ebenen Kompression. Außerdem sind für $N_C = 12$ Komponenten nur die Kurven für $b = 25^\circ$ und $b = 22.5^\circ$ abgesättigt. Die besten Anpassungen an die Referenz-Textur werden bei $N_C = 12$ im Gegensatz zur ebenen Kompression für $b = 17.5^\circ$ und $b = 20^\circ$ erreicht. Der Grund ist die komplexere Textur und die geringere Texturschärfe der Referenz-Textur bei der einfachen Scherung. Die Kurvenverläufe des δ Wertes für die Elongation (Abbildung 3.4 (c)) verhalten sich ähnlich wie die der ebenen Kompression.

3.5 Approximation der OVF mit tensoriellen Texturkoeffizienten

Eine weitere Möglichkeit zur Approximation der OVF ist die Verwendung von tensoriellen Reihenentwicklungen. Adams et al. (1992) und Guidi et al. (1992) nutzten die tensorielle Fourierreihe für den Fall kubischer Kristallsymmetrie. Zheng und Fu (2001a,b) verallgemeinerten die Anwendung der Fourierreihe zur Approximation der OVF auf beliebige Kristall- und Probensymmetrien. Bunge (1965) und Roe (1965) nutzten generalisierte harmonische Funktionen zur Approximation der OVF. Im Gegensatz zu den Koeffizienten der tensoriellen Fourierreihe sind die Koeffizienten der generalisierten harmonischen Funktionen keine Tensoren. In den Arbeiten von Böhlke (2005, 2006) erfolgt die Anwendung der Fourierreihe im Zusammenhang mit der Methode der maximalen Entropie in der Texturanalyse. Im Falle der kubischen Symmetrie ergibt sich der folgende Zusammenhang

$$f(\mathbf{Q}) = 1 + \sum_{i=1}^{\infty} f_{\alpha_i} = 1 + f_4 + f_6 + f_8 + f_9 + f_{10} + f_{12_1} + f_{12_2} + \dots \quad (3.41)$$

(Böhlke, 2005). Die Reihenterme f_{α_i} bestehen aus

$$f_{\alpha_i}(\mathbf{Q}) = \mathbb{V}'_{\langle\alpha_i\rangle} \cdot \mathbb{F}'_{\langle\alpha_i\rangle}(\mathbf{Q}), \quad \mathbb{F}'_{\langle\alpha_i\rangle}(\mathbf{Q}) = \mathbf{Q} \star \mathbb{T}'_{\langle\alpha_i\rangle} \quad (3.42)$$

mit

$$\{\alpha_i\} = \{4, 6, 8, 9, 10, 12_1, 12_2, 13, 14, \dots\}. \quad (3.43)$$

Die tensoriellen Fourierkoeffizienten $\mathbb{V}'_{\langle\alpha_i\rangle}$ werden im Weiteren auch als Texturkoeffizienten bezeichnet. Die Referenzensoren $\mathbb{T}'_{\langle\alpha_i\rangle}$ unterliegen der Normierungsbedingung

$$\|\mathbb{T}'_{\langle\alpha_i\rangle}\| = 1. \quad (3.44)$$

Die Tensoren $\mathbb{V}'_{\langle\alpha_i\rangle}$ und $\mathbb{T}'_{\langle\alpha_i\rangle}$ verfügen über die Eigenschaften der kompletten Symmetrie und der Spurfreiheit. Tensoren, die diese beiden Eigenschaften besitzen, werden auch als irreduzibel bezeichnet. So gelten für $\mathbb{T}'_{\langle 4 \rangle}$ z.B. die Bedingungen

$$T'_{ijkl} = T'_{jikl} = T'_{klij} = T'_{kjil} = \dots, \quad T'_{iikl} = 0. \quad (3.45)$$

Eine weitere wichtige Eigenschaft der Referenzensoren ist die Abbildung der Kristallsymmetrie

$$f(\mathbf{Q}) = f(\mathbf{QH}^C) \quad \Rightarrow \quad \mathbb{T}'_{\langle\alpha_i\rangle} = \mathbf{H}^C \star \mathbb{T}'_{\langle\alpha_i\rangle} \quad (3.46)$$

$\forall \mathbf{H}^C \in S^C$. Die tensoriellen Fourierkoeffizienten geben hingegen die Probensymmetrie wieder

$$f(\mathbf{Q}) = f(\mathbf{H}^S \mathbf{Q}) \quad \Rightarrow \quad \mathbb{V}'_{\langle \alpha_i \rangle} = \mathbf{H}^S \star \mathbb{V}'_{\langle \alpha_i \rangle} \quad (3.47)$$

$\forall \mathbf{H}^S \in S^S$. Die Berechnung der Fourierkoeffizienten erfolgt durch den Zusammenhang

$$\mathbb{V}'_{\langle \alpha_i \rangle} = (2\alpha_i + 1) \int_{SO(3)} f(\mathbf{Q}) \mathbf{Q} \star \mathbb{T}'_{\langle \alpha_i \rangle} d\mathbf{Q} \quad (3.48)$$

(Böhlke, 2005). Für einen Satz von N_C diskreten Orientierungen und dazugehörigen Volumenfraktionen $\{\mathbf{Q}_\alpha, \nu_\alpha\}$ kann die Berechnungsformel

$$\mathbb{V}'_{\langle \alpha_i \rangle} = (2\alpha_i + 1) \sum_{\alpha=1}^{N_C} \nu_\alpha \mathbf{Q}_\alpha \star \mathbb{T}'_{\langle \alpha_i \rangle} \quad (3.49)$$

abgeleitet werden. In der Arbeit von Böhlke (2001) wird gezeigt, dass es ausreichend ist, einen Texturkoeffizienten vierter Ordnung zu berücksichtigen, um die Voigt-Schranke und die Reuss-Schranke der Verzerrungsenergie von linear elastischen Materialien zu berechnen. Außerdem wurde in Böhlke (2001) eine quadratische Fließbedingung basierend auf einem Texturkoeffizienten vierter Stufe für kubische Polykristalle eingeführt. In dieser Arbeit soll ebenfalls nur ein Koeffizient vierter Stufe genutzt werden. Für den Fall der kubischen Kristallsymmetrie ergibt sich der Referenztensor vierter Stufe

$$\mathbb{T}'_{\langle 4 \rangle} = \frac{\sqrt{30}}{30} (5\mathbb{D} - \mathbf{I} \otimes \mathbf{I} - 2\mathbb{I}), \quad (3.50)$$

wobei gilt

$$\mathbb{D} = \sum_{i=1}^3 \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_i. \quad (3.51)$$

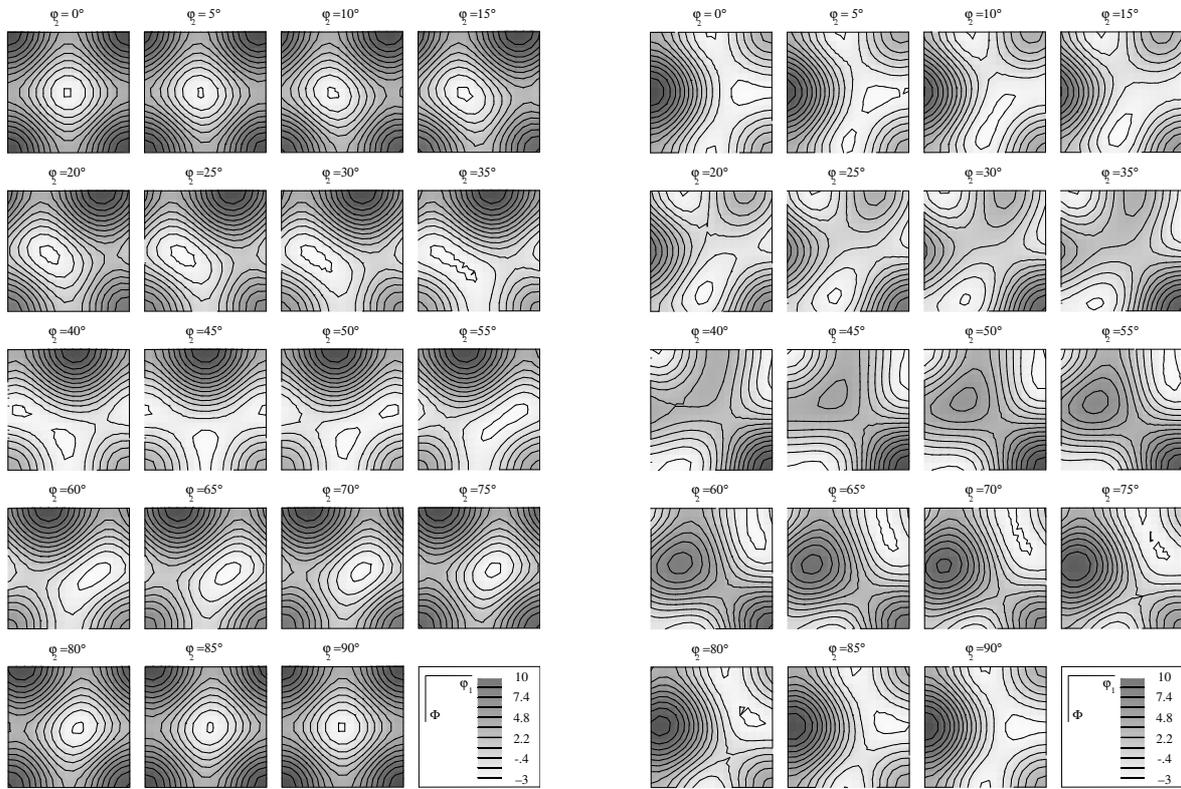
Durch das Einsetzen der Beziehungen (3.50) und (3.51) in Gleichung (3.48) ergibt sich der Fourierkoeffizient 4. Stufe

$$\mathbb{V}'_{\langle 4 \rangle} = \frac{3\sqrt{30}}{10} \left(5 \int_{SO(3)} f(\mathbf{Q}) \mathbf{Q} \star \mathbb{D} d\mathbf{Q} - \mathbf{I} \otimes \mathbf{I} - 2\mathbb{I} \right). \quad (3.52)$$

In Böhlke (2001) wurde ein Texturkoeffizient vierter Stufe \mathbb{A}' eingeführt. Er ist zu $\mathbb{V}'_{\langle 4 \rangle}$ in folgender Weise korreliert

$$\mathbb{A}' = -\frac{1}{9} \mathbb{V}'_{\langle 4 \rangle}. \quad (3.53)$$

Dieser Texturkoeffizient \mathbb{A}' wird in dieser Arbeit für alle weiteren Betrachtungen verwendet.



(a) Würfellage

(b) Goss-Lage

Abbildung 3.5: OVF-Darstellungen für die Würfellage und die Goss-Lage bestimmt aus dem in Gleichung (3.53) definierten Texturkoeffizienten vierter Stufe \mathbb{A}' ($0 \leq \phi_1 \leq 90^\circ$, $0 \leq \Phi \leq 90^\circ$, $0 \leq \phi_2 \leq 90^\circ$)

In Abschnitt 3.3.1 wurden die Schnitte für die OVF's der Würfellage und der Goss-Lage unter Verwendung der eingeführten Mises-Fisher-Verteilungen mit Halbwertsbreiten der Komponenten von jeweils $b_i = 25^\circ$ berechnet. Dieselben Berechnungen wurden ebenfalls mit Hilfe des in Gleichung (3.53) definierten Texturkoeffizienten vierter Stufe durchgeführt. Die Ergebnisse sind in Abbildung 3.5 (a) für die Würfellage und in Abbildung 3.5 (b) für die Goss-Lage dargestellt. Im Vergleich zu den Ergebnissen der Berechnungen unter Nutzung der Mises-Fisher-Verteilungen in den Abbildungen 3.1 (a), (b) sind die Maximalwerte der OVF in Abbildung 3.5 deutlich geringer. Außerdem ist die Streuung um die Maxima in den Abbildungen 3.5 (a), (b) viel stärker. Um die Maximalwerte der OVF für

die Berechnungen basierend auf den Mises-Fisher-Verteilungen zu senken, ist es möglich die Halbwertsbreiten b_i der Komponenten zu erhöhen. Damit wird die Textur ebenfalls weicher, wie es bei den Berechnungsergebnissen basierend auf dem Texturkoeffizienten \mathbb{A}' der Fall ist. Bemerkenswert ist, dass im letzteren Fall auch negative Werte für die OVF auftreten. Das bedeutet, dass die Nichtnegativitätsbedingung für die OVF verletzt wird. Im Gegensatz dazu sind die Werte für die OVF, die mit Hilfe der Mises-Fisher-Verteilungen bestimmt werden, immer positiv, was ein Vorteil gegenüber der tensoriellen Fourierreihenentwicklung ist.

Kapitel 4

Bestimmung des Materialverhaltens des Polykristalls

4.1 Homogenisierungsmethoden

Das Ziel eines Homogenisierungsverfahrens ist die Bestimmung des makroskopischen Materialverhaltens aus den konstitutiven Gleichungen der Mesoskala oder Mikroskala unter Einbeziehung mikrostruktureller Informationen. Das in dieser Arbeit betrachtete polykristalline Aluminium besteht aus einer Anzahl Körner. Jedes Korn besitzt eine Kristallorientierung und wird durch seine Form und Größe spezifiziert. Das mechanische Verhalten eines Kornverbundes ist außerdem vom Interaktionsverhalten der Körner an den Korngrenzen abhängig. Die konstitutiven Gleichungen auf der Mesoskala sind durch Gleitprozesse auf kristallographischen Ebenen charakterisiert. Das Homogenisierungsverfahren ist im Weiteren vor allem durch die Anzahl der implementierten mikrostrukturellen Informationen gekennzeichnet. Außerdem muss bei der Auswahl des Verfahrens berücksichtigt werden, ob das makroskopisch elastische oder das makroskopisch (visko-)plastische Verhalten des Polykristalls von Interesse ist. Zusätzlich muss der numerische Aufwand des Verfahrens in Betracht gezogen werden. Denn mit wachsender Anzahl mikrostruktureller Details im Homogenisierungsschema steigt auch dessen numerischer Aufwand. Unter diesen Gesichtspunkten werden im Folgenden Verfahren zur Ermittlung der effektiven elastischen und der effektiven (visko-)plastischen Polykristalleigenschaften diskutiert.

4.1.1 Effektive elastische Polykristalleigenschaften

Die Bestimmung der elastischen Konstanten des Polykristalls kann näherungsweise durch sehr einfache Annahmen aus denen des Einkristalls erfolgen. Eine mögliche Annahme ist die der homogenen Deformation des Polykristalls (Voigt, 1910). Ein derartiger Ansatz erfüllt die kinematischen Kompatibilitätsbedingungen zwischen den Körnern. Die Gleichgewichtsbedingungen sind hingegen verletzt. Die effektive Steifigkeitstetrade kann durch Annahme des Zusammenfallens der Momentan- und Bezugsplatzierung aus dem Orientierungsmittelwert der Einkristallsteifigkeiten

$$\mathbb{C}^V = \int_{SO(3)} f(\mathbf{Q})\mathbb{C}(\mathbf{Q})dQ \quad (4.1)$$

berechnet werden. Eine analoge Betrachtung erfolgt, wenn anstatt einer homogenen Deformation eine homogene Spannung im Polykristall angenommen wird (Reuss, 1929). Diese Annahme sichert die Erfüllung der Gleichgewichtsbedingungen zwischen den Körnern auf triviale Art und Weise. Die kinematischen Kompatibilitätsbedingungen sind hingegen verletzt. Die elastischen Eigenschaften des Polykristalls können aus dem Orientierungsmittelwert der einkristallinen Nachgiebigkeitstetraden

$$\mathbb{S}^R = \int_{SO(3)} f(\mathbf{Q})\mathbb{S}(\mathbf{Q})dQ \quad (4.2)$$

bestimmt werden. Die Annahme der homogenen Deformation nach Voigt (1910) und der homogenen Spannung nach Reuss (1929) führt zu elementaren Schranken für die elastische Energie des Polykristalls (Hill, 1952; Nemat-Nasser und Hori, 1993). Eine Verbesserung dieser Schranken ermöglichen geometrische Mittelwerte der Einkristallsteifigkeiten

$$\mathbb{C}^A = \exp \left(\int_{SO(3)} f(\mathbf{Q}) \ln(\mathbb{C}(\mathbf{Q}))dQ \right) \quad (4.3)$$

oder der Einkristallnachgiebigkeiten

$$\mathbb{S}^A = \exp \left(\int_{SO(3)} f(\mathbf{Q}) \ln(\mathbb{S}(\mathbf{Q}))dQ \right) \quad (4.4)$$

(Matthies und Humbert, 1995; Böhlke, 2001). Beide geometrischen Mittelwerte sowie das Voigt- und das Reuss-Mittel nutzen lediglich die Information der OVF. Im Gegensatz dazu ermöglichen selbstkonsistente Ansätze zusätzlich die Berücksichtigung der Korninteraktion. Sie basieren auf der Lösung des Einschlussproblems eines elastischen Ellipsoids in einer unendlichen, elastischen Matrix (Eshelby, 1957). Diese Lösung wurde unter anderem durch Kröner (1958) genutzt, um die elastischen Konstanten eines Polykristalls mit isotroper Verteilung der Kristallorientierungen und der Kornformen aus den Einkristallkonstanten zu bestimmen. Die isotrope Verteilung der Kornformen erlaubt die Annahme eines kugelförmigen Kornes in der infiniten Matrix, das die effektiven Eigenschaften des Polykristalls besitzt. Ein ähnlicher Ansatz wurde von Hershey (1954) angewendet. Basierend auf der Eshelby-Lösung formulieren Hashin und Shtrikman (1962) ein Variationsproblem für die elastische Energie von k.-f.-z. Polykristallen. Durch die Lösung des Variationsproblems bestimmen Hashin und Shtrikman (1962) Schranken für den effektiven Schubmodul bei einer isotropen Verteilung der Kristallite. Diese Schranken führen zu einer Verbesserung der entsprechenden Voigt- und Reuss-Schranken.

Morris (1969) berechnet die elastischen Konstanten eines orthotropen Polykristalls unter Verwendung der OVF durch Mittelung über den Orientierungsraum $SO(3)$. Die OVF approximiert Morris (1969) durch generalisierte harmonische Funktionen. Bunge (1974) ermittelt die elastischen Konstanten ebenfalls für den texturierten Fall am Beispiel kubischer Polykristalle mit orthotroper Probensymmetrie. Er berücksichtigt die Interaktionen der Körner und verwendet somit eine Näherung zweiter Ordnung. Die berechneten Verteilungen des Elastizitätsmoduls in der Blechebene für ein Kupfer- und ein Stahlblech sind zu den entsprechenden Voigt- und Reuss-Mittelwerten etwas verbessert und liegen näher an den experimentellen Ergebnissen. Beran et al. (1996) berechnen die elastischen Eigenschaften des kubischen Polykristalls unter der Annahme orthotroper Probensymmetrie ebenfalls auf der Basis einer Näherung zweiter Ordnung. So werden zunächst experimentell aus der Mikrostruktur des Polykristalls die OVF, die eine Korrelationsfunktion erster Ordnung ist, und eine Korrelationsfunktion zweiter Ordnung bestimmt. Aus den Korrelationsfunktionen werden durch Mittelung über den Orientierungsraum $SO(3)$ die effektiven elastischen Konstanten ermittelt. Außerdem werden Annahmen zur Berücksichtigung einer Korrelationsfunktion dritter Ordnung aufgestellt.

Neben dem Aufwand zur experimentellen Bestimmung der Korrelationsfunktionen höherer Ordnung steigt auch der Aufwand der numerischen Bestimmung der entsprechenden Mittelwerte.

Eine weitere Berechnungsmöglichkeit der effektiven elastischen Eigenschaften des Polykristalls ist die Nutzung repräsentativer Volumenelemente (RVE) in Verbindung mit der Finite-Elemente-Methode. Diese Methode erlaubt eine direkte Modellierung der Kornform, der Korngrenzen und der Interaktionen zwischen den Körnern. In der Arbeit von Kumar (1992) wird dies für verschiedene polykristalline Materialien umgesetzt. Für die Verteilung der Körner im Ort und die Beschreibung der Kornform wird ein Poisson-Voronoi-Mosaik erzeugt. In der Arbeit von Kumar und Kurtz (1994) wird zusätzlich der effektive thermische Ausdehnungskoeffizient von verschiedenen polykristallinen Materialien berechnet. In der Arbeit von Kanit et al. (2003) erfolgt eine Bestimmung der minimalen Größe eines repräsentativen Volumenelements im Sinne der Homogenisierung der effektiven elastischen Eigenschaften unter Annahme eines Poisson-Voronoi-Mosaiks zur Modellierung der Mikrostruktur.

4.1.2 Effektive (visko-)plastische Polykristalleigenschaften

Zur Homogenisierung des elastischen Materialverhaltens wurden durch die Annahme einer homogenen Deformation (Voigt, 1910) oder einer homogenen Spannung (Reuss, 1929) des Polykristalls Näherungslösungen für die makroskopischen elastischen Konstanten abgeleitet. Beide Ideen können auf die Homogenisierung des effektiven (visko-)plastischen Materialverhaltens übertragen werden. Taylor (1938) nutzt die Annahme der homogenen Deformation des Polykristalls zur Bestimmung der makroskopischen Fließspannung im starr-plastischen Materialfall. Lin (1957) erweitert die Bestimmung auf elastisch-plastische Polykristalle. Sachs (1928) nutzt die Annahme der homogenen Spannung im Polykristall zur Ermittlung der makroskopischen Fließspannung. Durch die Annahme der homogenen Deformation erfüllen das Taylor- und das Taylor-Lin-Modell die kinematischen Kompatibilitätsbedingungen, nicht aber das Gleichgewicht zwischen den Körnern. Das Sachs-Modell erfüllt hingegen die Gleichgewichtsbedingungen, nicht aber die Kompatibilitätsbedingungen. Diese Eigenschaften der Modelle entsprechen denen des Voigt- bzw. des Reuss-Modells der elastischen Homogenisierung.

Ein Vorteil des Taylor-Modells gegenüber dem Sachs-Modell ist die generelle Möglichkeit des Mehrfachgleitens in den Einkristallen. Im Sachs-Modell wird Einfachgleiten angenommen. Aktiviert wird das Gleitsystem, das die günstigste Lage in Bezug auf die Belastungsrichtung besitzt. Nur in Fällen, in denen keines der Gleitsysteme durch seine Lage begünstigt wird, kann es im Sachs-Modell zum Mehrfachgleiten kommen, da es dann keinen Einfachgleitbereich gibt. Dies führt normalerweise zu einer besseren Vorhersage der Texturentwicklung in k.-f.-z. Polykristallen mit hoher Stapelfehlerenergie bei Anwendung des Taylor-Modells. Das Sachs-Modell kann hingegen die Entwicklung von Texturen in Messing besser vorhersagen. Beide Modelle vernachlässigen die Interaktionen der Körner.

Wie bereits im elastischen Fall können auch im (visko-)plastischen Fall selbstkonsistente Modelle verwendet werden, um die Interaktion der Körner zu berücksichtigen. Kröner (1961) und Budiansky und Wu (1962) nutzen diese Art der Homogenisierung, um das elastisch-plastische Verhalten von Polykristallen zu bestimmen. Das Problem wurde durch einen kugelförmigen, elastisch-plastischen Einkristall in einer isotropen, elastischen Matrix für kleine Verformungen formuliert. Dadurch sind die erzielten Fließspannungen des Modells immer noch weit von den experimentellen Ergebnissen entfernt, da das Modell ein zu steifes Verhalten besitzt (Hutchinson, 1970). Die Ergebnisse entsprechen weitestgehend den Ergebnissen des Taylor-Modells (Zaoui, 1996).

Eine Verbesserung wird durch das Modell von Hill (1965) erzielt. Hier ist ein elastisch-plastischer Einkristall in eine elastisch-plastische Matrix eingebunden. Die Materialgleichungen sind inkrementell für kleine Verformungen definiert. Hutchinson (1970) vergleicht das Modell von Kröner (1961) und Budiansky und Wu (1962) mit dem Modell von Hill (1965) bezüglich der Voraussage der Fließspannung im Zugversuch von k.-f.-z. Polykristallen. Dabei stellt sich heraus, dass die Fließspannungen, die durch das Modell von Hill (1965) berechnet werden, näher an den experimentellen Ergebnissen liegen.

Hutchinson (1976) wendet das Modell von Hill (1965) für den starrviskoplastischen Fall an. Er simuliert das Kriechverhalten von k.-f.-z. Polykristallen und vergleicht dabei den selbstkonsistenten Ansatz mit dem Taylor-Ansatz für die effektiven Spannungen im Zugversuch. Dabei zeigt sich, dass beide Modelle zu ähnlichen Ergebnissen bei der Annahme einer Dehnrateninsensitivität führen.

Hutchinson (1976) zeigt, dass es für den starr-viskoplastischen Materialfall möglich ist, makroskopische Potentiale für die Spannung und die Dehnrates zu formulieren. Für diese Potentiale können mit Hilfe der Taylor- oder der Sachs-Annahme elementare Schranken des viskoplastischen Verformungsverhaltens berechnet werden.

Ein selbstkonsistenter Ansatz für große Deformationen wird durch Molinari et al. (1987) eingeführt. Er wendet ein Modell für starr-viskoplastische k.-r.-z. und k.-f.-z. Polykristalle an. Er nutzt ebenfalls die Annahme kugelförmiger Körner in einem isotropen Medium. Die berechneten Texturen für die ebene Kompression, den Zugversuch und den Kompressionsversuch entsprechen im Wesentlichen denen des Taylor-Modells. Lebensohn und Tomé (1993) führen dies auf das isotrope Matrixverhalten im Modell von Molinari et al. (1987) zurück.

Lebensohn und Tomé (1993) nutzen ebenfalls das Modell von Molinari et al. (1987) allerdings in Verbindung mit einem anisotropen Matrixverhalten. Dadurch ist eine bessere Berücksichtigung der Korninteraktionen möglich. Sie wenden das Modell für Textursimulationen von hexagonalem Zirkonium an. Hier zeigt sich der selbstkonsistente Ansatz dem Taylor-Ansatz überlegen, da hier auch Effekte wie die Zwillingsbildung von Bedeutung sind. Für Textursimulationen von k.-f.-z. Polykristallen verwendet Harren (1991a,b) ein elastisch-plastisches selbstkonsistentes Modell, das auf dem Modell von Hill (1965) basiert. Die Ergebnisse unterschieden sich wie beim Modell von Molinari et al. (1987) nur geringfügig von denen des Taylor-Ansatzes.

Eine andere Möglichkeit im Sinne der selbstkonsistenten Ansätze zeigen Nebozhyn et al. (2001). Sie benutzen eine Formulierung, die ursprünglich auf Ponte Castaneda (1991) für die Verwendung in Kompositen zurückgeht. In Nebozhyn et al. (2001) wird ein Variationsproblem formuliert, das eine Erweiterung des Modells von Hashin und Shtrikman (1962) auf viskoplastische Polykristalle darstellt.

Es wird mit Modellen basierend auf den Ansätzen von Hill (1965) und Molinari et al. (1987) und zusätzlich mit dem Taylor- und Sachs-Modell verglichen. Es werden k.-f.-z. und ionische Polykristalle mit einer isotropen Kornverteilung verwendet. Ein Vergleich findet für die Fließspannungsverläufe bei unterschiedlichen Dehnratesensitivitäten statt. Hierbei zeigt sich, dass das Modell von Hill (1965) für dehnratesensitives Verhalten der k.-f.-z. Polykristalle ähnliche Ergebnisse wie das Taylor-Modell erzielt. Das Modell von Molinari et al. (1987) konvergiert

in diesem Fall gegen das Sachs-Modell. Die Ergebnisse des eingeführten Variationsansatzes erzielen die beste Übereinstimmung mit dem Experiment. Besonders gut stellt sich der Variationsansatz bei den ionischen Polykristallen dar, da hier der Effekt der Kornform wichtiger als im k.-f.-z. Fall ist.

Aus dem Vergleich der Taylor-Modelle mit den beschriebenen selbstkonsistenten Modellen zeigt sich der Vorteil der letztgenannten erst dann deutlich, wenn Effekte wie die Zwillingsbildung oder die Kornform der Kristallite eine Bedeutung für das Polykristallverhalten besitzen. Die Einbeziehung der Korninteraktionen unter Berücksichtigung einer anisotropen Kornformverteilung gelingt am besten im Modell nach Nebozhyn et al. (2001). Dieses Modell ist allerdings im Vergleich zum Taylor-Modell rechentechnisch wesentlich aufwendiger.

Um die Voraussagen des klassischen Taylor-Modells zu verbessern, wurden relaxierte Taylor-Modelle vorgestellt (Honnaf und Mecking, 1978; Mecking, 1981; Van Houtte, 1987, 1988). In diesen Modellen werden im Gegensatz zum klassischen Taylor-Modell nicht alle Komponenten des Deformationsgradienten vorgeschrieben, sondern z.B. eine oder mehrere Scherkomponenten als Unbekannte eingeführt. Allerdings sind die hieraus resultierenden Schubspannungen identisch Null und damit für die Berechnung bekannt. Man spricht in diesem Zusammenhang auch von Modellen mit gemischten Randbedingungen.

Die so eingeführten Modelle sagen eine bessere Texturentwicklung in k.-r.-z. und k.-f.-z. Polykristallen voraus. Diese Voraussage ist allerdings von der Art des Deformationsprozesses abhängig. So sind die relaxierten Modelle in der Regel nur für die ebene Kompression geeignet, wo bei sehr großen Deformationen flache und gestreckte Körner entstehen. Eine Eignung für beliebige Deformationsmoden ist deshalb nicht gegeben (Van Houtte et al., 2005), wodurch das Anwendungsgebiet des klassischen Taylor-Modells größer ist als das Anwendungsgebiet für dessen relaxierte Varianten. Neben relaxierten Taylor-Modellen wurden auch relaxierte Sachs-Modelle eingeführt (Leffers, 1968).

Das Lamel-Modell (Van Houtte, 1999; Van Houtte et al., 2002; Li und Van Houtte, 2002) basiert ebenfalls auf einem relaxierten Taylor-Modell. Es betrachtet allerdings zwei Kristallite in einem Verbund. Hiermit soll die Korninteraktion berücksichtigt werden. Auch dieses Modell ist auf den Fall der ebenen Kompression beschränkt.

Das GIA-Modell (Crumbach et al., 2001) betrachtet insgesamt acht Einkristalle. Es nimmt aber weiterhin eine homogene Deformation im Korn an. Diese wird im Alamel-Modell (Van Houtte et al., 2005) nicht mehr angenommen. Es können deshalb bessere Voraussagen zur Texturteilung getroffen werden. In der Arbeit von Van Houtte et al. (2005) wurde dies allerdings nur für den Fall der ebenen Kompression gezeigt. Weitere Untersuchungen müssten folgen.

Eine andere Variante das (visko-)plastische Verhalten des Polykristalls zu untersuchen, ist die Nutzung der Finite-Elemente-Methode. Diese Methode bietet den Vorteil, das Polykristallverhalten auf verschiedenen Skalen simulieren zu können. Die erste Möglichkeit besteht in der Simulation des lokalen Deformationsverhaltens. Hierzu modelliert man nur einen lokalen Bereich des Polykristalls. Dabei kann die Mikrostruktur mit der Geometrie der Korngrenzen berücksichtigt werden (siehe z.B. Teodosiu et al., 1993; Harder, 1997; Sachtleber et al., 2002; Anand, 2004; Zhang et al., 2005).

Im Sinne der Homogenisierung ist diese Methode nur schlecht anwendbar, da ein repräsentativer Bereich mit vollständiger Mikrostruktur zu einem hohen numerischen Aufwand führt. Deshalb müssen für die Betrachtung eines repräsentativen Ausschnittes weitere Annahmen getroffen werden. 1.) Auf die Modellierung der Korngrenzen und der Kornform wird verzichtet. 2.) Ein Korn wird durch eine geringere Anzahl von n finiten Elementen vernetzt. Häufig wird $n = 1$ gewählt. 3.) Als Modellvolumen wird ein Einheitswürfel oder ein Quadrat im 2-d Fall betrachtet. Diese Definition des repräsentativen Volumenelements (RVE) geht auf Bishop und Hill (1951) zurück. 4.) Die Verwendung periodischer Randbedingungen für das RVE führt gegenüber homogenen Randbedingungen zu verbesserten Berechnungsergebnissen. Trotzdem werden meistens homogene Randbedingungen verwendet, da diese leichter zu implementieren sind.

Berechnungen für Textursimulationen kubischer Polykristalle unter diesen vereinfachten Annahmen wurden unter anderem durch Kalidindi et al. (1992), Bronkhorst et al. (1992), Dawson et al. (1994), Miehe et al. (1999) und Anand (2004) durchgeführt. Die dabei erzielten Texturen zeigen in der Regel eine Verbesserung gegenüber dem Taylor-Modell. In der Arbeit von Miehe et al. (1999) werden neben homogenen Randbedingungen auch periodische Randbedingungen verwendet.

Interessiert man sich für das makroskopische Verhalten einer gesamten Struktur

unter großen plastischen Deformationen, so ist auch die zuletzt genannte Methode rechentechnisch zu aufwendig. Deshalb implementiert man in jedem Gauß-Punkt des Finite-Elemente-Modells eine bestimmte Anzahl von Einkristallen. Als Folge muss eine Homogenisierung im Gauß-Punkt durchgeführt werden.

Mathur und Dawson (1989) verwenden z.B. das Taylor-Modell im Gauß-Punkt in einer FE-Simulation des Walzprozesses. Kalidindi et al. (1992) nutzen die Taylor-Annahme der homogenen Deformation im Gauß-Punkt zur Simulation des Schmiedeprozesses. Miede und Schotte (2004) und Raabe und Roters (2004) nutzen die Taylor-Annahme im Gauß-Punkt zur Simulation der Zipfelbildung beim Tiefziehprozess von Aluminium bzw. Stahl. Neben der Taylor-Annahme im Gauß-Punkt wird auch der selbstkonsistente Ansatz genutzt. Tomé et al. (2001) wenden diesen Ansatz im Gauß-Punkt zur Simulation eines Biegeversuches für polykristallines Zirkonium an. Signorelli et al. (2005) nutzen ebenfalls ein selbstkonsistentes Modell im Gauß-Punkt zur Simulation des ECAE-Versuches für Aluminium.

Da auch in dieser Arbeit das makroskopische Verhalten des polykristallinen Materials anhand von R -Werten, Fließspannungen und der Zipfelbildung untersucht werden soll, wird im Gauß-Punkt des Finite-Elemente-Modells die Taylor-Annahme verwendet. Der Grund liegt in dem Kompromiss zwischen der akzeptablen Beschreibung der Texturentwicklung in Aluminium und dem vertretbaren numerischen Aufwand.

4.2 Homogenisierung des elastisch-viskoplastischen Modells

In diesem Unterkapitel werden die Annahmen und Gleichungen für die Homogenisierung des elastisch-viskoplastischen Materialmodells angegeben, dessen konstitutive Gleichungen in Kapitel 2.2 beschrieben wurden. Dazu wird zunächst eine homogene Deformation des Polykristalls angenommen

$$\mathbf{F} = \bar{\mathbf{F}}. \quad (4.5)$$

Der Deformationsgradient \mathbf{F} ist also in jedem Punkt des Polykristalls gleich dem makroskopischen Deformationsgradienten $\bar{\mathbf{F}}$. Dies entspricht der bereits vorge-

stellten Voigt- bzw. Taylor-Annahme zur Verformung des Aggregates aus Einkristallen. Zur Bestimmung der effektiven Spannung geht man zunächst vom Prinzip der Äquivalenz der Spannungsarbeiten auf der Mikro- und der Makroskala aus (Hill, 1963), was zu einer Äquivalenz der zugehörigen inneren Leistungen führt

$$V\bar{\mathbf{T}}^{1PK} \cdot \dot{\mathbf{F}} = \int_V \mathbf{T}^{1PK} \cdot \dot{\mathbf{F}} dV. \quad (4.6)$$

Unter der Annahme homogener oder periodischer Randbedingungen und der Voraussetzung des statischen Gleichgewichtes folgt für die Mittelung des Spannungstensors

$$\bar{\mathbf{T}}^{1PK} = \frac{1}{V} \int_V \mathbf{T}^{1PK} dV \quad (4.7)$$

(Bertram, 2005). Diese Aussage kann analog für den makroskopischen Cauchy'schen Spannungstensor $\bar{\mathbf{T}}$ gefolgert werden

$$\bar{\mathbf{T}} = \frac{1}{v} \int_v \mathbf{T} dv, \quad (4.8)$$

der allerdings über das momentane Volumen gemittelt wird. Der im Weiteren benutzte makroskopische Kirchhoff'sche Spannungstensor $\bar{\boldsymbol{\tau}}$ ergibt sich als

$$\bar{\boldsymbol{\tau}} = \frac{1}{V} \int_V \boldsymbol{\tau} dV. \quad (4.9)$$

Für eine feste Anzahl M von Orientierungen β mit zugehörigen Volumenanteilen ν_β ergibt sich die makroskopische Spannung $\bar{\boldsymbol{\tau}}$ aus den Spannungen der Kristallite $\boldsymbol{\tau}_\beta$, die im Einkristall als homogen angenommen werden,

$$\bar{\boldsymbol{\tau}} = \sum_{\beta=1}^M \nu_\beta \boldsymbol{\tau}_\beta. \quad (4.10)$$

4.3 Homogenisierung des viskoplastischen Modells

Die Annahmen und Gleichungen der Homogenisierung in diesem Unterkapitel basieren auf dem (starr-)viskoplastischen Einkristallmaterialmodell aus Kapitel 2.3. Der Berechnung der makroskopischen Spannung liegt eine Approximation der

OVF durch zentrale Verteilungsfunktionen zu Grunde, die in Kapitel 3 eingeführt wurde. Diese Form der Homogenisierung wurde in den Arbeiten von Böhlke et al. (2005a,b, 2006b) angewendet. Dabei muss berücksichtigt werden, dass sich die Kristallite nicht nur durch eine unterschiedliche Orientierung, sondern auch durch einen unterschiedlichen Verfestigungszustand voneinander unterscheiden.

Homogenisierung der Spannungen. Das Spannungsfeld im Polykristall kann für einen vorgegebenen Deformationsprozess berechnet werden, wenn die Felder J , \mathbf{D}' , \mathbf{Q} und τ^C bekannt sind. Wie im Fall des elastisch-viskoplastischen Modells wird auch hier die (Voigt-)Taylor-Annahme der homogenen Deformation des Polykristalls getroffen. Hieraus folgen die Beziehungen

$$\bar{J} = J, \quad \bar{\mathbf{D}}' = \mathbf{D}'. \quad (4.11)$$

Bei dieser Art der Verformung entstehen makroskopische Anisotropien durch inhomogene Verteilungen der Kristallite $\mathbf{Q} \in SO(3)$ und der Verfestigungsvariablen $\tau^C \in \mathfrak{R}^+$. Der Zustand des Polykristalls zu einem festen Zeitpunkt t ist damit durch eine Verteilungsfunktion $h(\mathbf{Q}, \tau^C)$ gekennzeichnet

$$\frac{dV}{V}(\mathbf{Q}, \tau^C) = h(\mathbf{Q}, \tau^C) dQ d\tau^C, \quad (4.12)$$

die die Volumenfraktion spezifiziert, die die Kristallorientierung \mathbf{Q} und die kritische Schmid-Spannung τ^C besitzt. Die Verteilungsfunktion $h(\mathbf{Q}, \tau^C)$ hat wie die OVF $f(\mathbf{Q})$ die Eigenschaft der Nichtnegativität

$$h(\mathbf{Q}, \tau^C) \geq 0 \quad \forall \mathbf{Q} \in SO(3), \tau^C \in \mathfrak{R}^+ \quad (4.13)$$

und sie ist in der Form

$$\int_{\mathcal{H}} h(\mathbf{Q}, \tau^C) dQ d\tau^C = 1 \quad (4.14)$$

normiert, wobei $\mathcal{H} = \mathfrak{R}^+ \times SO(3)$. Die OVF $f(\mathbf{Q})$ kann aus der Verteilungsfunktion $h(\mathbf{Q}, \tau^C)$ durch Integration über \mathfrak{R}^+ berechnet werden

$$f(\mathbf{Q}) = \int_{\mathfrak{R}^+} h(\mathbf{Q}, \tau^C) d\tau^C. \quad (4.15)$$

Basierend auf der Taylor-Annahme und unter Nutzung der Verteilungsfunktion $h(\mathbf{Q}, \tau^C)$ kann man die makroskopische Kirchhoff-Spannung

$$\bar{\boldsymbol{\tau}} = \frac{1}{V} \int_V (\boldsymbol{\tau}^\circ + \boldsymbol{\tau}') dV = \bar{\boldsymbol{\tau}}^\circ + \bar{\boldsymbol{\tau}}' \quad (4.16)$$

bestimmen. Hierbei ist $\bar{\boldsymbol{\tau}}^\circ$ der Kugelanteil

$$\bar{\boldsymbol{\tau}}^\circ = \bar{J} \frac{\partial W(\bar{J})}{\partial \bar{J}} \mathbf{I} = \frac{K}{2} (J^2 - 1) \mathbf{I} \quad (4.17)$$

und $\bar{\boldsymbol{\tau}}'$ der deviatorische Anteil der Spannung $\bar{\boldsymbol{\tau}}$

$$\bar{\boldsymbol{\tau}}' = \int_{\mathcal{H}} h(\mathbf{Q}, \tau^C) \boldsymbol{\tau}'(\bar{\mathbf{D}}', \mathbf{Q}, \tau^C) dQ d\tau^C. \quad (4.18)$$

Bei Vorliegen eines homogenen Verfestigungszustandes im Polykristall, d.h. $h(\mathbf{Q}, \tau^C) \sim f(\mathbf{Q}) \delta_{\tau^C}$, kann Gleichung (4.18) auch vereinfacht durch einen Orientierungsmittelwert des Spannungstensors bestimmt werden

$$\bar{\boldsymbol{\tau}}' = \int_{SO(3)} f(\mathbf{Q}) \boldsymbol{\tau}'(\bar{\mathbf{D}}', \mathbf{Q}, \tau^C) dQ. \quad (4.19)$$

δ ist die Dirac-Distribution.

Berücksichtigung von Texturkomponenten. Die Homogenisierung des viskoplastischen Materialmodells soll speziell für den Fall von Texturkomponenten erfolgen. Diese wurden bereits in Kapitel 3.3 eingeführt und mit Hilfe von Mises-Fisher-Verteilungsfunktionen beschrieben. Die mathematischen Zusammenhänge für die OVF wurden angegeben. Dies soll nun für die Verteilungsfunktion $h(\mathbf{Q}, \tau^C)$ verallgemeinert und zur Berechnung der makroskopischen Spannung genutzt werden. Dazu wird zunächst die Verteilungsfunktion $h(\mathbf{Q}, \tau^C)$ in einen isotropen Anteil h^I und einen anisotropen Anteil h^A zerlegt. Die zugehörigen Volumenfraktionen sind ν^I bzw. ν^A . Der anisotrope Anteil wird durch eine Überlagerung von N_c zentralen Verteilungsfunktionen $g(\mathbf{Q}, \mathbf{Q}_\alpha, b_\alpha)$ mit den zentralen Orientierungen \mathbf{Q}_α und den Volumenfraktionen ν_α^A ($\alpha = 1, \dots, N_c$) modelliert. Der Verfestigungszustand der Komponenten wird als homogen angenommen und kann durch die Schmid-Spannung τ_α^C ausgedrückt werden. Eine zusätzliche Annahme ist die Abhängigkeit des isotropen Anteils vom arithmetischen Mittelwert der Schmid-Spannung

$$\bar{\tau}^C = \sum_{\alpha=1}^{N_c} \nu_\alpha^A \tau_\alpha^C. \quad (4.20)$$

Mit den obigen Annahmen ergibt sich

$$h(\mathbf{Q}, \tau^C) = \nu^I h^I(\bar{\tau}^C) + \nu^A h^A(\mathbf{Q}, \mathbf{Q}_1, \dots, \mathbf{Q}_N, b_1, \dots, b_N, \tau_1^C, \dots, \tau_N^C), \quad (4.21)$$

wobei

$$h^I(\bar{\tau}^C) \sim \delta_{\bar{\tau}^C} \quad (4.22)$$

und

$$h^A(\mathbf{Q}, \mathbf{Q}_1, \dots, \mathbf{Q}_N, b_1, \dots, b_N, \tau_1^C, \dots, \tau_N^C) \sim \sum_{\alpha=1}^{N_c} \nu_\alpha^A g(\mathbf{Q}, \mathbf{Q}_\alpha, b_\alpha) \delta_{\tau_\alpha^C}. \quad (4.23)$$

Außerdem gilt die Zwangsbedingung

$$\nu^I + \nu^A = 1, \quad \sum_{\alpha=1}^{N_c} \nu_\alpha^A = 1 \quad (4.24)$$

für die Volumenanteile. Der Wert der Verteilungsfunktion $g(\mathbf{Q}, \mathbf{Q}_\alpha, b_\alpha)$ an der Stelle \mathbf{Q} hängt nur vom Orientierungsabstand ω zwischen \mathbf{Q} und \mathbf{Q}_α ab. Er wurde bereits in Kapitel 3.3 durch Gleichung (3.23) definiert. Die Funktion $g(\mathbf{Q}, \mathbf{Q}_\alpha, b_\alpha)$ soll durch eine Mises-Fisher-Verteilungsfunktion spezifiziert werden

$$g(\mathbf{Q}, \mathbf{Q}_\alpha, b_\alpha) = N(S_\alpha(b_\alpha)) \exp(S_\alpha(b_\alpha) \cos(\omega(\mathbf{Q}, \mathbf{Q}_\alpha))). \quad (4.25)$$

Dies erfolgt analog zur Betrachtung für die OVF in Kapitel 3.3 (siehe Gleichung (3.22)). Die Normierungskonstante $N(S_\alpha)$ und die Streubreite $S_\alpha(b_\alpha)$, die durch die Halbwertsbreite b_α ausgedrückt werden kann, wurden ebenfalls in Kapitel 3.3 eingeführt. Wie die OVF kann auch die Verteilungsfunktion $h(\mathbf{Q}, \tau^C)$ die Kristallsymmetrie

$$h(\mathbf{Q}, \tau^C) = h(\mathbf{Q}\mathbf{H}^C, \tau^C) \quad (4.26)$$

$\forall \mathbf{H}^C \in S^C \subseteq SO(3)$ und die Probensymmetrie

$$h(\mathbf{Q}, \tau^C) = h(\mathbf{H}^S \mathbf{Q}, \tau^C) \quad (4.27)$$

$\forall \mathbf{H}^S \in S^S \subseteq SO(3)$ wiedergeben. Die Mises-Fisher-Verteilung

$$g(\mathbf{Q}, \mathbf{Q}_\alpha, b_\alpha) = \frac{1}{24} \sum_{\beta=1}^{24} N(S_\alpha(b_\alpha)) \exp(S_\alpha(b_\alpha) \cos(\omega(\mathbf{Q}, \mathbf{Q}_\alpha \mathbf{H}_\beta^C))) \quad (4.28)$$

erfüllt die Bedingung (4.26) für die Funktion h , wobei die Tensoren $\mathbf{H}_\beta^C \in SO(3)$ die 24 Elemente der Symmetriegruppe der kubischen Einkristalle sind.

Bisher ist der anisotrope Anteil des makroskopischen Spannungsdeviators durch den Orientierungsmittelwert

$$\bar{\tau}'^A = \nu^A \int_{SO(3)} \sum_{\alpha=1}^{N_c} \nu_\alpha^A g(\mathbf{Q}, \mathbf{Q}_\alpha, b_\alpha) \tau'(\bar{\mathbf{D}}', \mathbf{Q}, \tau_\alpha^C) dQ \quad (4.29)$$

gegeben. Nach der Definition von ξ_α durch $\tau_\alpha^C = \xi_\alpha \bar{\tau}^C$ und der Ausnutzung der Homogenität des Spannungsdeviators vom Grade $1/m$ im symmetrischen Anteil des Geschwindigkeitsgradienten ist es möglich, Gleichung (4.29) durch die Beziehung

$$\bar{\tau}'^A = \int_{SO(3)} f^A(\mathbf{Q}) \tau'(\bar{\mathbf{D}}', \mathbf{Q}, \bar{\tau}^C) dQ \quad (4.30)$$

zu ersetzen, wobei

$$f^A(\mathbf{Q}) = \sum_{\alpha=1}^{N_c} \hat{\nu}_\alpha^A g(\mathbf{Q}, \mathbf{Q}_\alpha, b_\alpha) \quad (4.31)$$

und $\hat{\nu}_\alpha^A = \nu^A \nu_\alpha^A (\xi_\alpha)^m$. Somit beeinflusst ein inhomogener Verfestigungszustand die Volumenfraktionen, die bei der Berechnung der Orientierungsverteilungsfunktion auftreten. Für die numerische Auswertung bietet Gleichung (4.30) gegenüber Gleichung (4.29) den Vorteil, dass der Spannungsdeviator nur für ein festes $\bar{\tau}^C$ bestimmt werden muss.

Vereinfachte Berechnung des isotropen Anteils der Makro-Spannung.

Aus den Gleichungen (4.18) und (4.22) folgt der isotrope Anteil der makroskopischen Spannung

$$\bar{\tau}'^I = \nu^I \int_{SO(3)} \tau'(\bar{\mathbf{D}}', \mathbf{Q}, \bar{\tau}^C) dQ. \quad (4.32)$$

Die Auswertung dieser Gleichung erfordert die numerische Integration über den Orientierungsraum. Hier soll eine Möglichkeit diskutiert werden, die auf eine Integration verzichtet und stattdessen ein makroskopisches Gesetz zur Bestimmung des isotropen Anteils der Spannung verwendet. Der Grund liegt in dem hohen numerischen Aufwand der Integration über $SO(3)$ und der Annahme, dass das makroskopisch isotrope Materialverhalten eine untergeordnete Rolle gegenüber

dem makroskopisch anisotropen Materialverhalten spielt. Diese Annahme ist bei Komponententexturen mit einer hohen Texturschärfe, wie sie in dieser Arbeit Verwendung finden, sicherlich vertretbar. Für das isotrope, makroskopische Gesetz ($\nu^I = 1$) wird der Ansatz

$$\bar{\mathbf{D}}' = \frac{3}{2} \frac{\dot{\epsilon}_v(\tau_v)}{\tau_v} \bar{\boldsymbol{\tau}}'^I \quad (4.33)$$

gewählt, dessen Vergleichsdehnrate $\dot{\epsilon}_v(\tau_v)$ auf dem Norton-Ansatz

$$\dot{\epsilon}_v(\tau_v) = \dot{\epsilon}_{v0} \left(\frac{\tau_v}{\tau_{v0}} \right)^k \quad (4.34)$$

basiert. Sie entspricht der von Mises'schen Vergleichsdehnrate

$$\dot{\epsilon}_v = \sqrt{\frac{2}{3}} \|\bar{\mathbf{D}}'\|. \quad (4.35)$$

Analog gilt für die Vergleichsspannung

$$\tau_v = \sqrt{\frac{3}{2}} \|\bar{\boldsymbol{\tau}}'^I\|. \quad (4.36)$$

Beide äquivalenten Größen sind auf den einachsigen Zugversuch normiert. Aus den Gleichungen (4.33)-(4.36) folgt die explizite Form für die Spannungen

$$\bar{\boldsymbol{\tau}}'^I = \frac{2}{3} \frac{\tau_{v0}}{\dot{\epsilon}_{v0}} \left(\frac{\sqrt{\frac{2}{3}} \|\bar{\mathbf{D}}'\|}{\dot{\epsilon}_{v0}} \right)^{\frac{1-k}{k}} \bar{\mathbf{D}}'. \quad (4.37)$$

Gleichung (4.37) impliziert ein Dehnratenpotential für die Spannungen

$$\Phi^D = \frac{k \tau_{v0} \dot{\epsilon}_{v0}}{k+1} \left(\frac{\dot{\epsilon}_v}{\dot{\epsilon}_{v0}} \right)^{\frac{k+1}{k}}. \quad (4.38)$$

Analog folgt ein Spannungspotential für den Dehnratentensor

$$\Phi^\tau = \frac{\tau_{v0} \dot{\epsilon}_{v0}}{k+1} \left(\frac{\tau_v}{\tau_{v0}} \right)^{k+1}. \quad (4.39)$$

Die Materialkonstanten wurden mit der Ausnahme von τ_{v0} analog zu den mesoskopischen Größen gewählt ($\dot{\epsilon}_{v0} = 9 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$, $k = 133$). Die Vergleichsspannung τ_{v0} kann in jedem Inkrement unter Verwendung des Taylor-Faktors $M = 3.06$ aus der gemittelten Schmid-Spannung $\bar{\tau}^C$ bestimmt werden.

4.4 Quasiphänomenologische Modellierung (Zweiskalenmodell)

Die bisher eingeführten Modelle basieren auf Materialgleichungen, die auf der Ebene der Kristallite verfasst sind. Mit Hilfe von Homogenisierungsschemata wurde aus diesen mesoskopischen Gleichungen die makroskopische Spannung bestimmt. Eine andere Möglichkeit ist, die Materialgleichungen rein phänomenologisch zu formulieren. In diesem Fall stellt sich das Problem der Berücksichtigung der Mikrostruktur in den Materialgleichungen. Eine Möglichkeit, die Mikrostruktur in das Makromodell einzubeziehen, ist die Verwendung innerer Variablen im Makromodell, die auf der Mikroebene mit möglichst geringem Aufwand bestimmt werden. Im folgenden Ansatz soll dementsprechend die Orientierungsverteilung der Kristallite ermittelt werden, woraus ein Texturkoeffizient vierter Stufe nach Kapitel 3.5 berechnet wird. Dieser kann als innere Variable in dem elastischen Gesetz und der Fließregel, die auf der Makroskala formuliert sind, verwendet werden. Da in einem derartigen Modell die Materialgleichungen auf der Mesoskala und der Makroskala definiert sind, wird im Weiteren von einem Zweiskalenansatz oder Zweiskalenmodell gesprochen. Das hier verwendete Modell nutzt eine quadratische Form des Fließkriteriums, die ursprünglich auf v. Mises (1928) zurückgeht. Eine ausführliche Diskussion quadratischer Fließkriterien ist in Kapitel 4.5 gegeben.

4.4.1 Elastisches Gesetz

Zur Formulierung des elastischen Gesetzes auf der Makroskala wird dem Ansatz, der auf der Mesoskala formuliert wurde (siehe Gleichung (2.36)), gefolgt

$$\tilde{\mathbf{T}}^{2PK} = \tilde{\mathbb{C}}[\tilde{\mathbf{E}}^G]. \quad (4.40)$$

Es werden demzufolge kleine elastische Verzerrungen aber große Rotationen zugelassen. Im Gegensatz zum elastisch-viskoplastischen Modell für die einkristallinen Verformungen sollen die Materialgleichungen auf der phänomenologischen Ebene nicht für materielle sondern für Euler'sche Größen formuliert werden. Deshalb wird der 2. Piola-Kirchhoff'sche Spannungstensor durch den Kirchhoff'schen Spannungstensor

$$\tilde{\mathbf{T}}^{2PK} = \tilde{\mathbf{F}}^{-1} \tilde{\boldsymbol{\tau}} \tilde{\mathbf{F}}^{-T} \quad (4.41)$$

und der Green'sche Dehnungstensor durch den Almansi'schen Dehnungstensor ersetzt

$$\tilde{\mathbf{E}}^G = \tilde{\mathbf{F}}^T \tilde{\mathbf{E}}^A \tilde{\mathbf{F}}. \quad (4.42)$$

Beide Dehnungstensoren können durch den rechten Cauchy-Green Tensor $\tilde{\mathbf{C}} = \tilde{\mathbf{F}}^T \tilde{\mathbf{F}}$ bzw. linken Cauchy-Green Tensor $\tilde{\mathbf{B}} = \tilde{\mathbf{F}} \tilde{\mathbf{F}}^T$ ausgedrückt werden

$$\tilde{\mathbf{E}}^G = \frac{1}{2}(\tilde{\mathbf{C}} - \mathbf{I}), \quad (4.43)$$

$$\tilde{\mathbf{E}}^A = \frac{1}{2}(\mathbf{I} - \tilde{\mathbf{B}}^{-1}). \quad (4.44)$$

Damit erhält man aus Gleichung (4.40) die Beziehungen

$$\bar{\boldsymbol{\tau}} = \tilde{\mathbf{F}} \tilde{\mathbf{C}} [\tilde{\mathbf{F}}^T \tilde{\mathbf{E}}^A \tilde{\mathbf{F}}] \tilde{\mathbf{F}}^T \quad (4.45)$$

und

$$\bar{\boldsymbol{\tau}} = \left(\tilde{\mathbf{F}} \star \tilde{\mathbf{C}} \right) [\tilde{\mathbf{E}}^A] = \bar{\mathbf{C}}_E [\tilde{\mathbf{E}}^A]. \quad (4.46)$$

Für den Fall kleiner elastischer Verzerrungen kann die Steifigkeitstetrade $\bar{\mathbf{C}}_E$ auch durch Drehung der Referenzsteifigkeit $\tilde{\mathbf{C}}$ mit $\tilde{\mathbf{R}}$, dem orthogonalen Anteil von $\tilde{\mathbf{F}}$, berechnet werden. Zur Bestimmung des Tensors $\bar{\mathbf{C}}_E$ soll der Arbeit von Böhlke (2001) gefolgt werden, wo gezeigt wurde, dass sich die Steifigkeitstetrade $\bar{\mathbf{C}}_E$ bei angenommener Voigt'scher oder Reuss'scher Mittelung additiv in einen isotropen und einen anisotropen Anteil zerlegen lässt

$$\bar{\mathbf{C}}_E = \bar{\mathbf{C}}_E^I + \bar{\mathbf{C}}_E^A, \quad (4.47)$$

wobei der anisotrope Anteil durch den eingeführten Texturkoeffizienten vierter Stufe \mathbb{A}' (siehe Gleichung 3.53) charakterisiert wird

$$\bar{\mathbf{C}}_E^I = 3K\mathbb{P}_1^I + 2G\mathbb{P}_2^I, \quad (4.48)$$

$$\bar{\mathbf{C}}_E^A = \xi \mathbb{A}'.$$

Der Tensor \mathbb{A}' wird aus der Orientierungsverteilung bestimmt, die mit der Hilfe des in Kapitel 2 eingeführten starr-viskoplastischen Materialmodells unter Verwendung der Taylor-Annahme berechnet wird. Der Anisotropieeinfluss auf die

Steifigkeitstetrad $\bar{\mathbb{C}}_E$ kann über den skalaren Parameter ξ gesteuert werden. Für $\xi = 0$ liegt der elastisch isotrope Fall des Materialgesetzes vor. Die Tensoren \mathbb{P}_1^I und \mathbb{P}_2^I , die im isotropen Anteil von $\bar{\mathbb{C}}_E$ Verwendung finden, sind die isotropen Projektoren

$$\mathbb{P}_1^I = \frac{1}{3}\mathbf{I} \otimes \mathbf{I}, \quad (4.49)$$

$$\mathbb{P}_2^I = \mathbb{I}^S - \mathbb{P}_1^I.$$

K und G sind der Kompressionsmodul bzw. der Schubmodul des isotropen Anteils der Steifigkeit.

4.4.2 Fließregel

Die Entwicklung des Steifigkeitstensors $\bar{\mathbb{C}}_E$ wird allein durch die Entwicklung des Texturkoeffizienten \mathbb{A}' bestimmt. Damit folgt aus dem elastischen Gesetz in Gleichung (4.46), dass makroskopisch lediglich eine Entwicklungsgleichung für den symmetrischen Tensor $\tilde{\mathbf{E}}^A$ formuliert werden muss. Aus Gleichung (4.44) folgt, dass auch eine Entwicklungsgleichung für den linken Cauchy-Green-Tensor verwendet werden kann

$$\dot{\tilde{\mathbf{B}}} = \dot{\tilde{\mathbf{F}}}\tilde{\mathbf{F}}^T + \tilde{\mathbf{F}}\dot{\tilde{\mathbf{F}}}^T. \quad (4.50)$$

Analog zum elastisch-viskoplastischen Modell für die einkristalline Verformung (siehe Gleichung (5.1)) kann für die Entwicklung des Tensors $\tilde{\mathbf{F}}$ die Beziehung

$$\dot{\tilde{\mathbf{F}}} = \mathbf{L}\tilde{\mathbf{F}} - \tilde{\mathbf{F}}\tilde{\mathbf{k}}(\tilde{\mathbf{T}}^{2PK'}, \sigma_F) \quad (4.51)$$

formuliert werden, wobei σ_F eine Verfestigungsvariable ist. Mit der Hilfe des Tensors $\tilde{\mathbf{F}}$ kann $\tilde{\mathbf{k}}(\tilde{\mathbf{T}}^{2PK'}, \sigma_F)$ auf die Momentankonfiguration transformiert werden

$$\bar{\mathbf{k}}_E(\bar{\boldsymbol{\tau}}', \sigma_F) = \tilde{\mathbf{F}}\tilde{\mathbf{k}}(\tilde{\mathbf{T}}^{2PK'}, \sigma_F)\tilde{\mathbf{F}}^{-1}. \quad (4.52)$$

Durch Kombination der Gleichungen (4.50), (4.51) und (4.52) erhält man die Entwicklungsgleichung

$$\dot{\tilde{\mathbf{B}}} = \mathbf{L}\tilde{\mathbf{B}} + \tilde{\mathbf{B}}\mathbf{L}^T - 2\text{sym}(\bar{\mathbf{k}}_E\tilde{\mathbf{B}}). \quad (4.53)$$

Unter der Annahme kleiner, elastischer Verzerrungen vereinfacht sich diese Gleichung zu

$$\dot{\bar{\mathbf{B}}} = 2(\mathbf{D} - \text{sym}(\bar{\mathbf{k}}_E)). \quad (4.54)$$

Diese Form der Fließregel erfüllt im Gegensatz zur Fließregel (4.53) nicht die Forderung der Objektivität. Deshalb wird für die numerische Simulation Gleichung (4.53) verwendet. Zur Bestimmung der Funktion $\bar{\mathbf{k}}_E$ soll im Großen und Ganzen der Arbeit von Böhlke (2001) gefolgt werden. Wie in der genannten Arbeit soll auch hier eine quadratische Form des Fließkriteriums Φ_E implementiert werden

$$\Phi_E = \frac{1}{2} \bar{\boldsymbol{\tau}}' \cdot (\mathbb{P}_2^I + \eta \mathbb{A}') [\bar{\boldsymbol{\tau}}'] - \frac{1}{3} \sigma_F^2. \quad (4.55)$$

Das Fließkriterium muss der Bedingung $\Phi_E = 0$ genügen. Der anisotrope Anteil des Fließkriteriums wird durch den Texturkoeffizienten vierter Stufe \mathbb{A}' charakterisiert. Die Funktion $\bar{\mathbf{k}}_E$ kann durch die Fließrichtung, die der Ableitung des Fließkriteriums (4.55) nach der Kirchhoff-Spannung entspricht, und die Vergleichsgeschwindigkeit $\dot{\lambda}$ dargestellt werden

$$\bar{\mathbf{k}}_E = \dot{\lambda} \frac{\partial \Phi_E}{\partial \bar{\boldsymbol{\tau}}'}. \quad (4.56)$$

Für $\dot{\lambda}$ wird der Norton-Ansatz

$$\dot{\lambda} = \frac{3}{2} \frac{\dot{\epsilon}_0}{\sigma_F} \left(\frac{\sigma_{eq}(\bar{\boldsymbol{\tau}}')}{\sigma_F} \right)^{m-1} \quad (4.57)$$

gewählt, der auf einer anisotropen Variante der von Mises'schen Vergleichsspannung basiert. Die Funktion $\bar{\mathbf{k}}_E$ kann unter Verwendung der Beziehungen (4.55), (4.56) und (4.57) in die Form

$$\bar{\mathbf{k}}_E = \frac{3}{2} \frac{\dot{\epsilon}_0}{\sigma_F} \left(\frac{\sigma_{eq}(\bar{\boldsymbol{\tau}}')}{\sigma_F} \right)^{m-1} (\mathbb{P}_2^I + \eta \mathbb{A}') [\bar{\boldsymbol{\tau}}'] \quad (4.58)$$

gebracht werden. Die äquivalente Spannung $\sigma_{eq}(\bar{\boldsymbol{\tau}}')$ kann aus der makroskopischen Kirchhoff-Spannung und dem Anisotropietensor \mathbb{A}' bestimmt werden

$$\sigma_{eq}(\bar{\boldsymbol{\tau}}') = \sqrt{\frac{3}{2}} \sqrt{\bar{\boldsymbol{\tau}}' \cdot (\mathbb{P}_2^I + \eta \mathbb{A}') [\bar{\boldsymbol{\tau}}']}. \quad (4.59)$$

Diese Vergleichsspannung ist so normiert, dass sie für einen einachsigen Zugversuch des isotropen Polykristalls ($\mathbb{A}' = 0$) den Wert der Zugspannung annimmt. Der Parameter m ist die Dehnratensensitivität. Der Parameter $\dot{\epsilon}_0$ ist eine konstante Dehnratengeschwindigkeit.

4.4.3 Verfestigung

Für die Verfestigung wird analog zum elastisch-viskoplastischen und zum viskoplastischen Einkristallmodell das Kocks-Mecking Modell angewendet. Dabei werden alle Verfestigungsgrößen auf der Makroskala definiert. Die Entwicklungsgleichung für die Fließspannung σ_F ergibt sich dann zu

$$\dot{\sigma}_F = \bar{\theta}_0 \left(1 - \frac{\sigma_F}{\sigma_{FV}} \right) \dot{\epsilon}. \quad (4.60)$$

$\bar{\theta}_0$ ist der makroskopische Verfestigungsmodul. Die Voce-Spannung σ_{FV} ist durch den Zusammenhang

$$\sigma_{FV} = \sigma_{FV0} \left(\frac{\dot{\epsilon}}{\dot{\epsilon}_0^*} \right)^{\frac{1}{n}} \quad (4.61)$$

gegeben. Die Dehnrates $\dot{\epsilon}$ berechnet sich mit der Hilfe der äquivalenten Spannung σ_{eq} aus Gleichung (4.59)

$$\dot{\epsilon} = \frac{3}{2} \dot{\epsilon}_0 \left(\frac{\sigma_{eq}(\bar{\tau}')}{\sigma_F} \right)^{m-1}. \quad (4.62)$$

4.4.4 Materialparameter

Elastisches Gesetz	K	[GPa]	75.2
	G	[GPa]	26.2
Fließregel	$\dot{\epsilon}_0$	[s ⁻¹]	$9 \cdot 10^{-3}$
	m	[-]	133
Verfestigungsregel	$\bar{\Theta}_0$	[MPa]	351.1
	σ_{FV0}	[MPa]	157.8
	n	[-]	22.5
	$\dot{\epsilon}_0^*$	[s ⁻¹]	10^7
	σ_{F0}	[MPa]	45.9

Tabelle 4.1: Materialparameter für Aluminium bei Raumtemperatur auf der Makroebene

Die verwendeten Materialparameter für die makroskopischen Materialgleichungen sind in Tabelle 4.1 angegeben. Die elastischen Konstanten wurden dem Buch von Brandes und Brook (1998) entnommen. Die Parameter m und $\dot{\epsilon}_0$ der Fließregel wurden analog zu den Modellen auf der Mesoskala gewählt. Die Verfestigungsparameter wurden anhand von Experimenten basierend auf den Arbeiten von Les et al. (1999) und Mecking (2001) berechnet. Hierbei wurde der Taylor-Faktor $M = 3.06$ verwendet.

4.5 Phänomenologische Fließkriterien

In diesem Abschnitt wird zunächst ein Überblick über die wichtigsten phänomenologischen Fließkriterien für polykristalline Materialien gegeben. Danach werden zwei quadratische Fließkriterien miteinander verglichen. Das ist zum einen das klassische Hill'sche Fließkriterium (Hill, 1948), das rein phänomenologisch definiert ist, und zum anderen die quadratische Form (4.55) aus Kapitel 4.4.2, in der der Texturkoeffizient vierter Stufe \mathbb{A}' Verwendung findet. Dessen Berechnung ist, wie in Kapitel 3.5 gezeigt wurde, aus der Orientierungsverteilung der Kristallite möglich. Außerdem wurde gezeigt, dass dieser Texturkoeffizient in einen Koeffizienten der tensoriellen Fourierreihe zur Approximation der OVF umgerechnet werden kann. Somit basiert die quadratische Form (4.55) im Gegensatz zum Hill'schen Fließkriterium auf mikrostrukturellen Informationen und ist damit nicht rein phänomenologisch. Wird in der texturbasierten Form der Tensor \mathbb{A}' durch eine makroskopische Entwicklungsgleichung bestimmt (Böhlke, 2001), so kann man sicherlich auch in diesem Fall von einer rein phänomenologischen Form sprechen. Die Identifikationsmöglichkeit des Koeffizienten mittels der OVF bleibt aber vorhanden.

Eine ausführliche Diskussion über makroskopische Fließregeln für die Anwendung in der Metallumformung wird z.B. in Hosford (1993) und Banabic (2000) gegeben.

4.5.1 Überblick zu phänomenologischen Fließkriterien

Zur Beschreibung des makroskopischen Fließvorgangs in Metallen wurden zunächst Fließkriterien zur Charakterisierung isotropen Materialverhaltens verwen-

det. Die älteste Variante stammt von Tresca (1864), in der die maximale Schubspannung einen kritischen Wert erreichen muss, damit ein Fließvorgang ausgelöst wird. Es folgte ein Vorschlag von Huber (1904) und v. Mises (1913), bei der der Fließvorgang durch das Erreichen eines kritischen Wertes für die Norm des Cauchy'schen Spannungsdeviators initiiert werden kann.

Die erste Variante zur Formulierung eines makroskopischen Fließkriteriums für den anisotropen Materialfall geht auf v. Mises (1928) zurück. Er verwendet die quadratische Form

$$\phi(\bar{\mathbf{T}}) = \bar{\mathbf{T}} \cdot \mathbb{H}[\bar{\mathbf{T}}], \quad (4.63)$$

die der Bedingung $\phi(\bar{\mathbf{T}}) = 1$ genügen muss. \mathbb{H} ist ein Tensor vierter Stufe, der beide Subsymmetrien und die Hauptsymmetrie besitzt. Er enthält im Allgemeinen 21 unabhängige Konstanten, die die Anisotropie des Materials beschreiben sollen. Dies entspricht dem Fall der triklinen Symmetrieklasse. Da makroskopische Fließkriterien oft für die Umformsimulation gewalzter Bleche verwendet werden, sind diese Funktionen in der Regel für den Fall der orthotropen Symmetrieklasse abgeleitet worden. Der Grund ist die durch den Walzprozess induzierte orthotrope Probensymmetrie. In einem solchen Fall verbleiben für den Tensor \mathbb{H} neun unabhängige Konstanten zur Beschreibung der Anisotropie. Nach der in Kapitel 2.2 eingeführten modifizierten Voigt'schen Darstellung ergibt sich

$$\mathbb{H} = \begin{bmatrix} H_{11} & H_{12} & H_{13} & 0 & 0 & 0 \\ & H_{22} & H_{23} & 0 & 0 & 0 \\ & & H_{33} & 0 & 0 & 0 \\ & & & H_{44} & 0 & 0 \\ \text{sym.} & & & & H_{55} & 0 \\ & & & & & H_{66} \end{bmatrix} \mathbf{G}_\alpha \otimes \mathbf{G}_\beta. \quad (4.64)$$

Durch die Annahme der Spurfreiheit von \mathbb{H}

$$H_{iikl} = 0, \quad (4.65)$$

die durch die Annahme der Druckunabhängigkeit des Fließkriteriums begründet

werden kann, folgen die Zwangsbedingungen

$$\begin{aligned}
H_{11} + H_{12} + H_{13} &= 0, \\
H_{12} + H_{22} + H_{23} &= 0, \\
H_{13} + H_{23} + H_{33} &= 0, \\
H_{14} + H_{24} + H_{34} &= 0, \\
H_{15} + H_{25} + H_{35} &= 0, \\
H_{16} + H_{26} + H_{36} &= 0.
\end{aligned} \tag{4.66}$$

Das bedeutet, dass sich die Anzahl der notwendigen Konstanten für den Fall orthotroper Symmetrie auf 6 reduziert, wodurch \mathbb{H} die Form

$$\mathbb{H} = \begin{bmatrix} -H_{12} - H_{13} & H_{12} & H_{13} & 0 & 0 & 0 \\ & -H_{12} - H_{23} & H_{23} & 0 & 0 & 0 \\ & & -H_{13} - H_{23} & 0 & 0 & 0 \\ & & & H_{44} & 0 & 0 \\ & \text{sym.} & & & H_{55} & 0 \\ & & & & & H_{66} \end{bmatrix} \mathbf{G}_\alpha \otimes \mathbf{G}_\beta \tag{4.67}$$

annimmt. Nach dem Einsetzen von \mathbb{H} in die quadratische Form in Gleichung (4.63) erhält man das Fließkriterium

$$\phi = -H_{12}(\bar{T}_{11} - \bar{T}_{22})^2 - H_{13}(\bar{T}_{33} - \bar{T}_{11})^2 - H_{23}(\bar{T}_{22} - \bar{T}_{33})^2 + 2H_{44}\bar{T}_{23}^2 + 2H_{55}\bar{T}_{13}^2 + 2H_{66}\bar{T}_{12}^2. \tag{4.68}$$

Es entspricht bis auf die verwendeten Konstanten dem Fließkriterium, das durch Hill (1948) eingeführt wurde. Die Hill'schen Konstanten lauten

$$\begin{aligned}
F &= -H_{23}, & L &= H_{44}, \\
G &= -H_{13}, & M &= H_{55}, \\
H &= -H_{12}, & N &= H_{66}.
\end{aligned} \tag{4.69}$$

Damit ergibt sich die ursprüngliche Variante des Fließkriteriums von Hill (1948)

$$\phi = F(\bar{T}_{22} - \bar{T}_{33})^2 + G(\bar{T}_{33} - \bar{T}_{11})^2 + H(\bar{T}_{11} - \bar{T}_{22})^2 + 2L\bar{T}_{23}^2 + 2M\bar{T}_{13}^2 + 2N\bar{T}_{12}^2. \quad (4.70)$$

Dieses Fließkriterium besitzt den Vorteil, dass sämtliche Konstanten aus einachsigen Versuchen bestimmbar sind. Auf Grund seiner einfachen Formulierung ist es in vielen FE-Programmen standardmäßig implementiert. Ein Nachteil ist die schlechte Voraussage der Fließspannungsverteilungen in der Blechebene, obwohl die R -Wertverteilung in der Regel gut wiedergegeben werden kann. Der R -Wert kann durch die Beziehung

$$R = \frac{\bar{\mathbf{D}} \cdot \mathbf{n}_b \otimes \mathbf{n}_b}{\bar{\mathbf{D}} \cdot \mathbf{n}_d \otimes \mathbf{n}_d} \quad (4.71)$$

definiert werden (siehe z.B. Kocks et al., 1998). Der Vektor \mathbf{n}_b beschreibt den normierten Richtungsvektor in Breitenrichtung und \mathbf{n}_d den normierten Richtungsvektor in Dickenrichtung des Bleches.

Ein weiterer Nachteil der Hill'schen Fließbedingung ist, dass nur zwei oder vier Zipfel bei der Tiefziehsimulation von Blechen berechnet werden können, obwohl in der Praxis auch andere Varianten beobachtet werden. Außerdem versagt die Hill'sche Fließbedingung bei der Voraussage des anomalen Verhaltens erster und zweiter Ordnung (Banabic, 2000), das z.B. in Aluminiumlegierungen auftreten kann. Das anomale Verhalten erster Ordnung wird über den gemittelten R -Wert

$$\bar{R} = \frac{R_0 + 2R_{45} + R_{90}}{4} \quad (4.72)$$

definiert, der sich aus den R -Werten in der Blechebene für die Walzrichtung, die Querrichtung und die um 45° gedrehte Walzrichtung berechnet.

Die experimentellen Untersuchungen von Woodthorpe und Pearce (1970) und Pearce (1968) sagen für $\bar{R} < 1$ im biaxialen Zugversuch an bestimmten Aluminiumlegierungen bzw. anderen Metallegierungen Spannungsverläufe voraus, deren Niveaus niedriger als die entsprechenden des einachsigen Zugversuches sind. Ein derartiges Verhalten ist durch die Hill'sche Fließbedingung nicht reproduzierbar. Im Falle von Werten $\bar{R} > 1$ werden durch die Hill'sche Fließbedingung ähnliche Verläufe wie im Experiment des biaxialen Zugversuches vorhergesagt, wobei deren Niveaus jeweils über denen der Spannungs-Dehnungskurven des einachsigen Versuches liegen.

Neben dem anomalen Verhalten erster Ordnung wird in gewalzten Blechen einiger Aluminiumlegierungen ein anomales Verhalten zweiter Ordnung beobachtet (Banabic, 2000). Dieses Verhalten wird durch die R -Werte und Fließspannungen in Walz- und Querrichtung definiert:

$$R_0 > R_{90}, \quad \sigma_0 < \sigma_{90} \quad (4.73)$$

oder

$$R_0 < R_{90}, \quad \sigma_0 > \sigma_{90}. \quad (4.74)$$

Ein derartiges Verhalten kann die Hill'sche Fließbedingung nicht vorhersagen. Deutlich wird diese Tatsache an den numerischen Untersuchungen, die im Abschnitt 4.5.2 folgen. Auf Grund der genannten Nachteile der quadratischen Hill'schen Fließbedingung wurde eine Vielzahl nichtlinearer Fließkriterien eingeführt. Hill (1979) nutzt die nichtlineare Form

$$\begin{aligned} \sigma_e^m = & f|\bar{T}_{22}^H - \bar{T}_{33}^H|^m + g|\bar{T}_{33}^H - \bar{T}_{11}^H|^m + h|\bar{T}_{11}^H - \bar{T}_{22}^H|^m \\ & + a|2\bar{T}_{11}^H - \bar{T}_{22}^H - \bar{T}_{33}^H|^m + b|2\bar{T}_{22}^H - \bar{T}_{11}^H - \bar{T}_{33}^H|^m \\ & + c|2\bar{T}_{33}^H - \bar{T}_{11}^H - \bar{T}_{22}^H|^m, \end{aligned} \quad (4.75)$$

die bezüglich der Spannungshauptachsen definiert ist. Die Größe der Nichtlinearität dieses Fließkriteriums wird durch den Parameter m charakterisiert. Die Konstanten a , b , c , f , g und h beschreiben die Anisotropie des Materials. Dieses Fließkriterium kann das anomale Verhalten erster Ordnung wiedergeben, scheitert aber bei der Beschreibung der Anomalie zweiter Ordnung. Eine Erweiterung der Funktion lässt zusätzlich eine Beschreibung der Anomalie zweiter Ordnung zu (Hill, 1993). Der größte Nachteil der Fließkriterien von Hill (1979) und Hill (1993) ist die eingeschränkte Nutzung, da eine Verwendung nur möglich ist, wenn die Richtungen der Hauptspannungsachsen mit denen der Orthotropieachsen übereinstimmen. Außerdem stellen insbesondere die berechneten Fließortkurven eine schlechte Approximation an das Experiment dar. Das von Barlat und Lian (1989)

eingeführte Fließkriterium

$$2\sigma_e^m = a|k_1 + k_2|^m + a|k_1 - k_2|^m + c|2k_2|^m, \quad (4.76)$$

$$k_1 = \frac{\bar{T}_{11} + h\bar{T}_{22}}{2},$$

$$k_2 = \sqrt{\left(\frac{\bar{T}_{11} - h\bar{T}_{22}}{2}\right)^2 + p^2\bar{T}_{12}} \quad (4.77)$$

liefert eine bessere Approximation der Fließortkurven gewalzter Bleche. Außerdem werden im Vergleich zu den Fließkriterien von Hill (1979) und Hill (1993) zusätzlich Scherspannungen berücksichtigt. Ein weiterer Vorteil ist die geringe Anzahl an Parametern (a, c, m, h, p). Ein Nachteil ist die Spezialisierung auf den ebenen Spannungszustand. In Hill (1990) wird eine Verallgemeinerung des Fließkriteriums von Hill (1979) vorgestellt. In diesem Fließkriterium müssen die Richtungen der Hauptspannungsachsen nicht mit denen der Orthotropieachsen übereinstimmen. Es wird aber auch hier nur der ebene Spannungszustand betrachtet.

In der Arbeit von Barlat et al. (1991) wird ein Fließkriterium abgeleitet, das einen 3-dimensionalen Spannungszustand berücksichtigt. Es stellt einen Spezialfall des Fließkriteriums von Karafillis und Boyce (1993) dar. In diesem Kriterium ist es durch eine lineare Abbildung des Spannungstensors mit einem Tensor vierter Stufe möglich, auch Anisotropien des Materials zu berücksichtigen, die nicht auf den orthotropen Symmetriefall beschränkt sind. Betrachtet wird allerdings nur der Fall der orthotropen Symmetrie. Beide 3-dimensionalen Fließkriterien bieten eine verbesserte Approximation der R -Wert- und Fließspannungsverteilungen sowie der Fließortkurven. Weitere Verbesserungen in der Approximation der experimentellen Ergebnisse einhergehend mit einer weiteren Erhöhung der Anzahl von Parametern werden unter anderem durch die Fließregeln in den Arbeiten von Barlat et al. (1997a,b, 2005) erzielt. Die Anzahl der Parameter steigt dabei in der Arbeit von Barlat et al. (2005) auf 13 bzw. 18 an.

4.5.2 Das Fließkriterium von Hill (1948)

Dieses Fließkriterium, das im vorherigen Abschnitt bereits diskutiert wurde, zeichnet sich durch seinen rein phänomenologischen Charakter aus. Es kann, wie bereits

erwähnt, durch die Bedingung

$$\bar{\mathbf{T}} \cdot \mathbb{H}[\bar{\mathbf{T}}] = 1 \quad (4.78)$$

beschrieben werden. Der Hill'sche Tensor vierter Stufe nimmt mit den Hill'schen Konstanten, die im vorherigen Abschnitt eingeführt wurden, die Form

$$\mathbb{H} = \begin{bmatrix} G + H & -H & -G & 0 & 0 & 0 \\ & F + H & -F & 0 & 0 & 0 \\ & & F + G & 0 & 0 & 0 \\ & & & L & 0 & 0 \\ & \text{sym.} & & & M & 0 \\ & & & & & N \end{bmatrix} \mathbf{G}_\alpha \otimes \mathbf{G}_\beta \quad (4.79)$$

an. Der Hill'sche Tensor muss wegen der Forderung der Konvexität des Fließkriteriums die Eigenschaft der positiven Definitheit besitzen. Dies hat zur Folge, dass seine Eigenwerte die Positivitätsbedingung $\lambda_i > 0$ erfüllen müssen. Wegen der Annahme der Spurfreiheit des Tensors \mathbb{H} müssen allerdings nur fünf Eigenwerte positiv sein ($\lambda_1 = 0$), da im 5-dimensionalen Vektorraum für symmetrische Deviatoren nur fünf Eigenwerte für \mathbb{H} existieren können.

Aus den Eigenwerten

$$\lambda_2 = L, \quad \lambda_3 = M, \quad \lambda_4 = N \quad (4.80)$$

können direkt die Beziehungen

$$L > 0, \quad M > 0, \quad N > 0 \quad (4.81)$$

gefolgert werden. Die anderen beiden Eigenwerte sind identisch

$$\lambda_5 = \lambda_6 = F + G + H + \sqrt{F^2 - FH - FG + G^2 - GH + H^2}. \quad (4.82)$$

Somit muss zusätzlich die Beziehung

$$F + G + H + \sqrt{F^2 - FH - FG + G^2 - GH + H^2} > 0 \quad (4.83)$$

gelten. Diese Bedingung wird auf jedem Fall erfüllt, wenn gilt:

$$F > 0, \quad G > 0, \quad H > 0. \quad (4.84)$$

Der isotrope Sonderfall des Fließkriteriums ergibt sich durch

$$F = G = H, \quad L = M = N = 3F. \quad (4.85)$$

Zur besseren Anschauung des Verhaltens des Fließkriteriums in Abhängigkeit der Parameter sollen im Folgenden einachsige Zugversuche in der Blechebene (\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2 -Ebene) betrachtet werden, aus denen die Fließspannungs- und R -Wertverteilungen bestimmt werden. Die Cauchy-Spannung ergibt sich aus der Zugspannung $\sigma(\mathbf{n}_\sigma)$ und der Zugrichtung \mathbf{n}_σ

$$\bar{\mathbf{T}} = \sigma \mathbf{n}_\sigma \otimes \mathbf{n}_\sigma. \quad (4.86)$$

Nach dem Einsetzen der Spannung in Gleichung (4.78) ergibt sich für die Zugspannung $\sigma(\mathbf{n}_\sigma)$

$$\sigma(\mathbf{n}_\sigma) = \frac{1}{\sqrt{\mathbf{n}_\sigma \otimes \mathbf{n}_\sigma \cdot \mathbb{H}[\mathbf{n}_\sigma \otimes \mathbf{n}_\sigma]}}. \quad (4.87)$$

Für die weiteren Betrachtungen soll die normierte Zugspannung

$$\frac{\sigma(\mathbf{n}_\sigma)}{\sigma_0} = \frac{\sqrt{\mathbf{n}_\sigma^0 \otimes \mathbf{n}_\sigma^0 \cdot \mathbb{H}[\mathbf{n}_\sigma^0 \otimes \mathbf{n}_\sigma^0]}}{\sqrt{\mathbf{n}_\sigma \otimes \mathbf{n}_\sigma \cdot \mathbb{H}[\mathbf{n}_\sigma \otimes \mathbf{n}_\sigma]}} \quad (4.88)$$

verwendet werden. Die Richtung \mathbf{n}_σ^0 entspricht der Zugrichtung $\mathbf{n}_\sigma(\alpha = 0^\circ)$, worin α der Winkel zwischen der Walzrichtung \mathbf{e}_1 und der Zugrichtung ist. Die Ableitung einer Funktion für die R -Wertverteilung in der Blechebene folgt aus der Annahme kleiner elastischer Verzerrungen und Rotationen aus den Gleichungen (4.71) und (4.78)

$$R = \frac{\mathbf{n}_b \otimes \mathbf{n}_b \cdot \mathbb{H}[\mathbf{n}_\sigma \otimes \mathbf{n}_\sigma]}{\mathbf{n}_d \otimes \mathbf{n}_d \cdot \mathbb{H}[\mathbf{n}_\sigma \otimes \mathbf{n}_\sigma]} \quad (4.89)$$

(vergleiche Böhlke, 2001).

Bei der Betrachtung einachsiger Zugversuche in der Blechebene liegt ein ebener Spannungszustand vor. In dem hier betrachteten Fall wird die \mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2 -Ebene gewählt. Dadurch spielen die Konstanten L und M keine Rolle. Es verbleiben somit vier unabhängige Konstanten zur Beschreibung der Anisotropie in der Blechebene. Ausgehend vom isotropen Sonderfall der Fließregel, der durch Gleichung (4.85) wiedergegeben wird, können vier Fälle für die R -Wert- und Fließspannungsverteilung unterschieden werden:

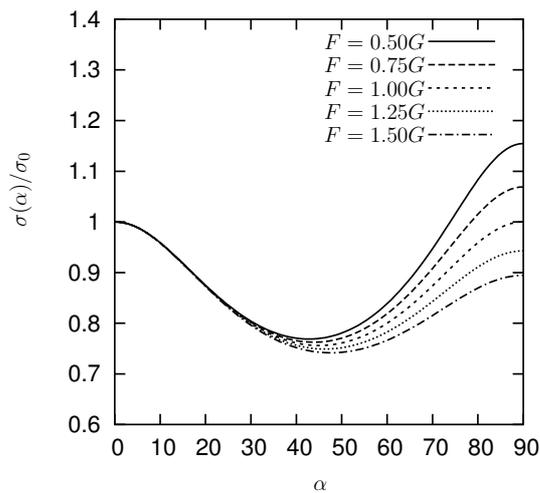
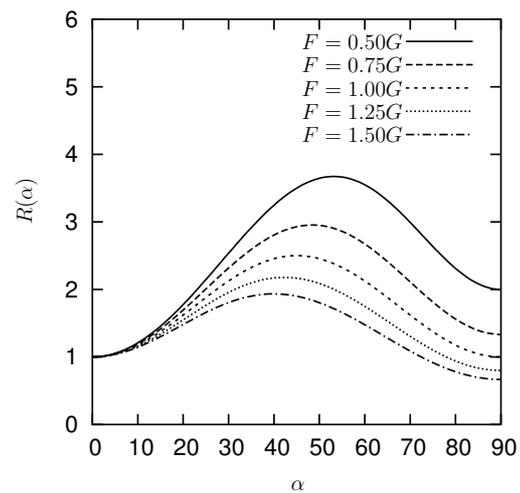
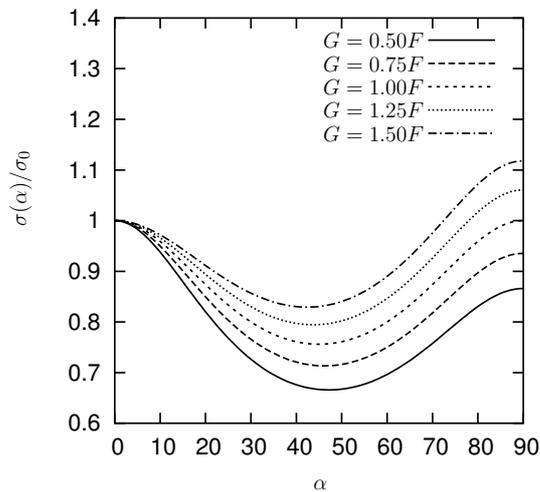
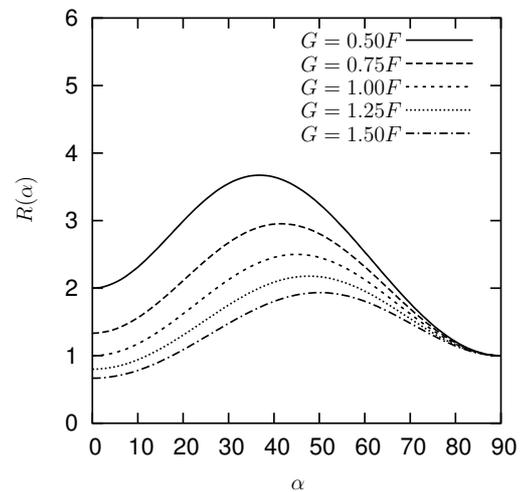
(a) $G = H = konst.; N = 6G$ (b) $G = H = konst.; N = 6G$ (c) $F = H = konst.; N = 6F$ (d) $F = H = konst.; N = 6F$

Abbildung 4.1: Einfluss der Variation der Parameter F bzw. G auf die R -Wert- und Fließspannungsverteilung für den Fall: $N > G + 2H$ und $N > F + 2H$

1. $N > G + 2H$ und $N > F + 2H$,
2. $N < G + 2H$ und $N < F + 2H$,
3. $N < G + 2H$ und $N > F + 2H$,
4. $N > G + 2H$ und $N < F + 2H$.

Diese sind bereits in der Arbeit von Hosford (1993) diskutiert worden. An dieser Stelle soll zusätzlich der Einfluss der einzelnen Parameter auf die Verteilungen der

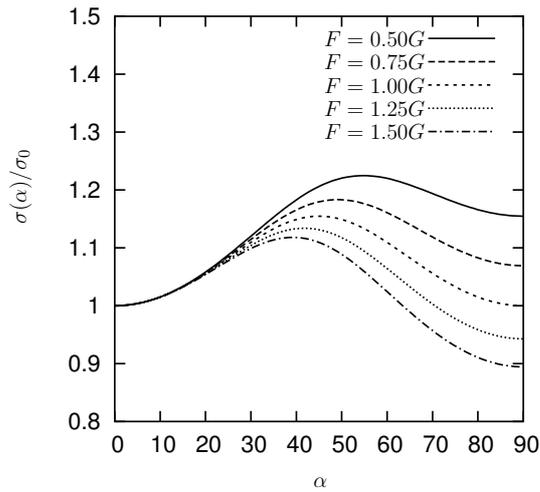
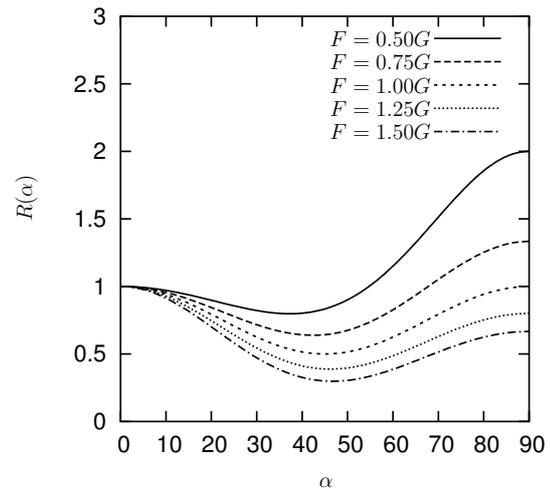
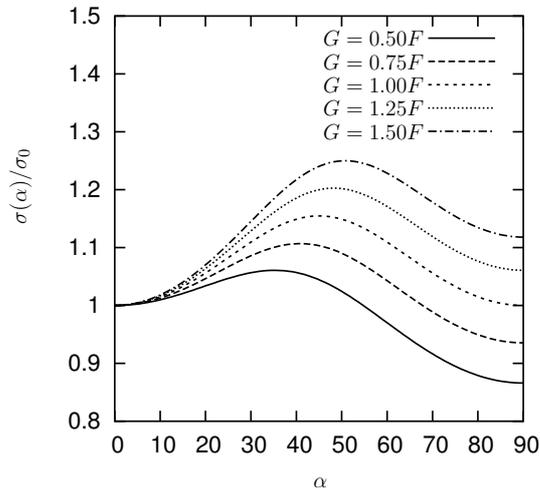
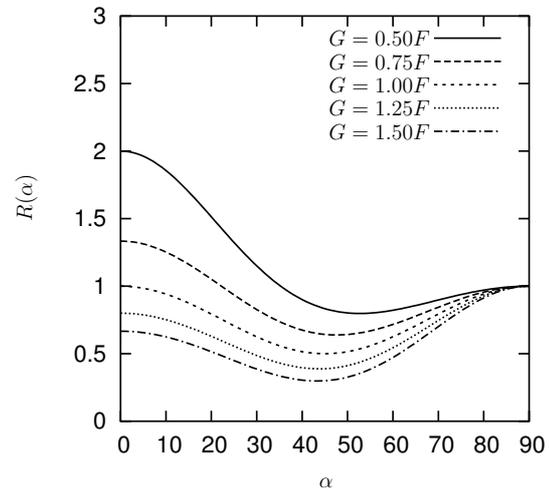
(a) $G = H = konst.; N = 2G$ (b) $G = H = konst.; N = 2G$ (c) $F = H = konst.; N = 2F$ (d) $F = H = konst.; N = 2F$

Abbildung 4.2: Einfluss der Variation der Parameter F bzw. G auf die R -Wert- und Fließspannungsverteilung für den Fall: $N < G + 2H$ und $N < F + 2H$

R -Werte und Fließspannungen diskutiert werden. Die Verläufe der Fließspannungen und der R -Werte sind für Fall 1 und speziell für die Parameter $F = G = H$ symmetrisch und besitzen ein Minimum bzw. Maximum bei einem Winkel $\alpha = 45^\circ$ (siehe Abbildung 4.1). Im Fall 2 (Abbildung 4.2) tritt für $F = G = H$ eine Vertauschung von Minimum und Maximum zwischen der Fließspannungs- und der R -Wertverteilung im Vergleich zu Fall 1 auf. Eine Variation der Parameter F bzw. G hat in beiden Fällen eine Verschiebung dieser Extrema zur Folge. Außerdem verändern sich die Amplituden der Verteilungen sowie die Verhältnisse σ_{90}/σ_0

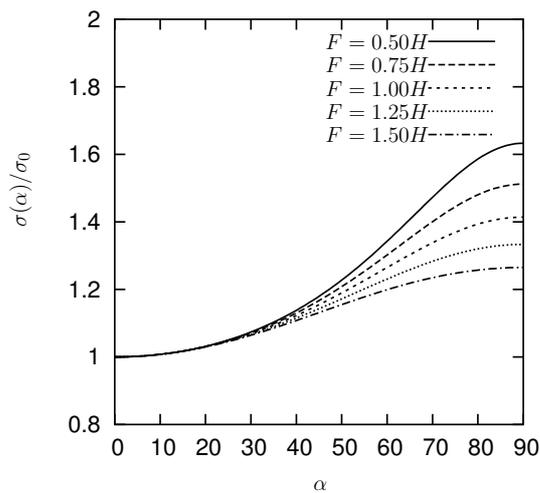
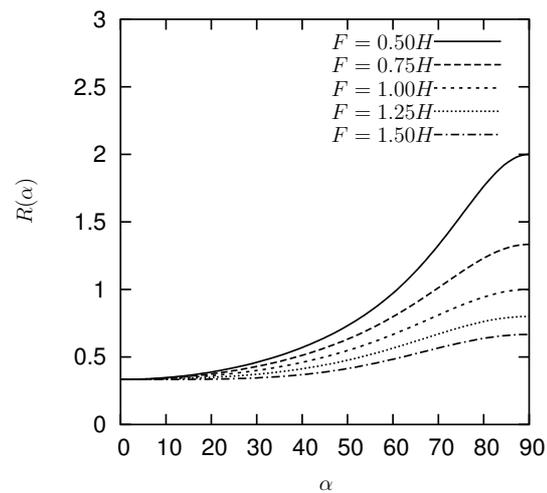
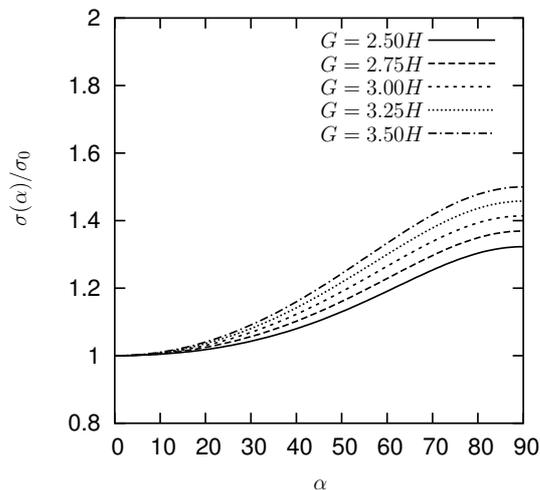
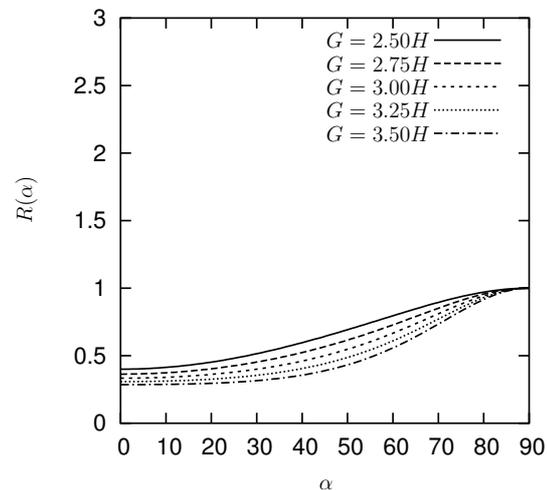
(a) $G = H = konst.; N = 4G$ (b) $G = H = konst.; N = 4G$ (c) $F = H = konst.; N = 4F$ (d) $F = H = konst.; N = 4F$

Abbildung 4.3: Einfluss der Variation der Parameter F bzw. G auf die R -Wert- und Fließspannungsverteilung für den Fall: $N < G + 2H$ und $N > F + 2H$

und R_{90}/R_0 . Der 3. Fall in Abbildung 4.3 ist durch ein Minimum für $\alpha = 0^\circ$ und ein Maximum für $\alpha = 90^\circ$, sowohl für die Fließspannungen als auch für die R -Werte, gekennzeichnet. Für den 4. Fall (Abbildung 4.4) erfolgt eine Vertauschung der Extrema im Vergleich zum 3. Fall. An allen Verläufen kann erkannt werden, dass das Hill-Kriterium nicht in der Lage ist, die Anomalie zweiter Ordnung zu beschreiben. In Abbildung 4.5 ist die Abhängigkeit zweier speziell gewählter Verteilungen vom Parameter N dargestellt, wobei erkennbar wird, dass N die Höhe und Richtung der Anisotropie steuert.

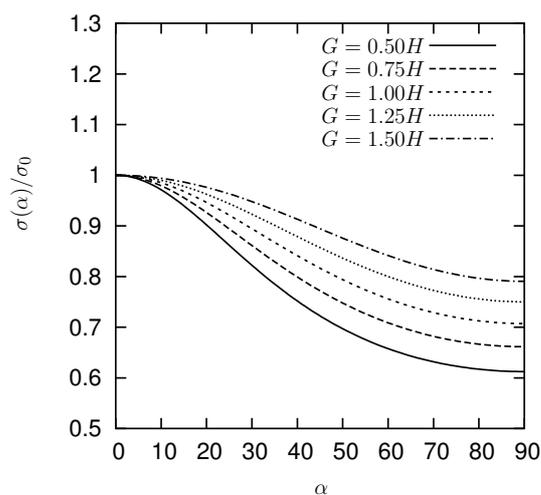
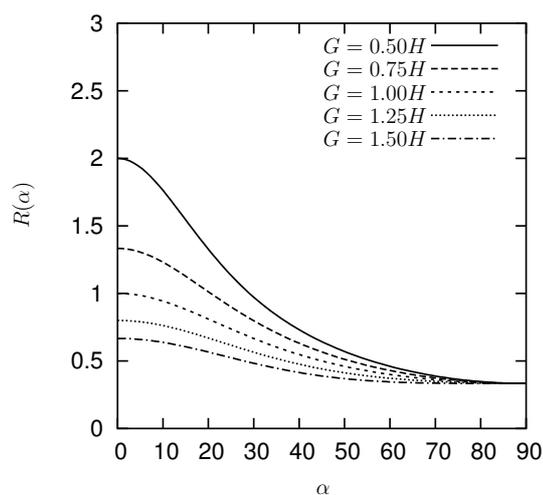
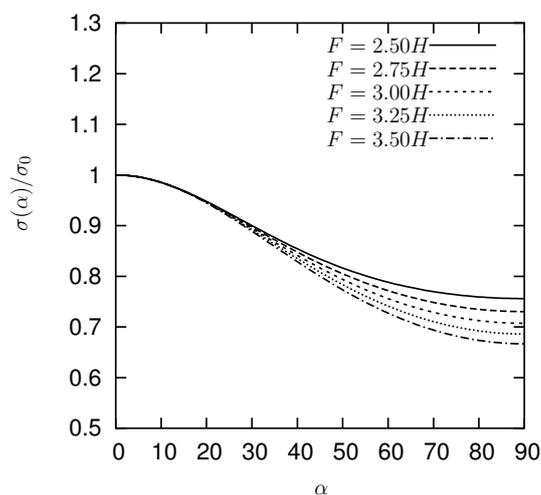
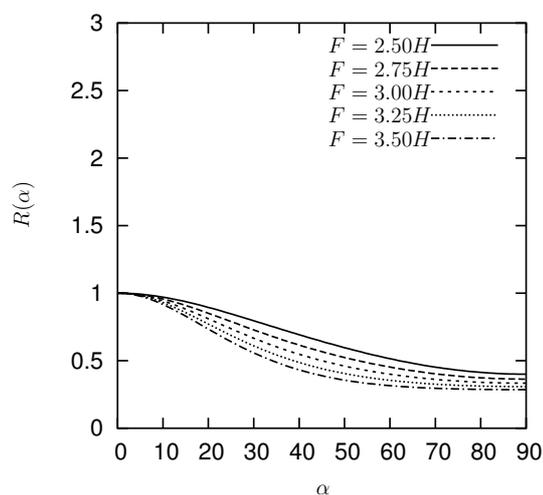
(a) $G = H = konst.; N = 4G$ (b) $G = H = konst.; N = 4G$ (c) $F = H = konst.; N = 4F$ (d) $F = H = konst.; N = 4F$

Abbildung 4.4: Einfluss der Variation der Parameter F bzw. G auf die R -Wert- und Fließspannungsverteilung für den Fall: $N > G + 2H$ und $N < F + 2H$

Zur experimentellen Bestimmung der Hill-Parameter F , G , H und N genügen im ebenen Spannungszustand vier Versuche. Für die Identifikation können zum Beispiel die gemessenen R -Werte R_0 , R_{45} und R_{90} und die Fließspannung σ_0 verwendet werden. Mit der Hilfe der Gleichungen (4.87) und (4.89) ergeben sich in diesem Fall die Hill-Parameter

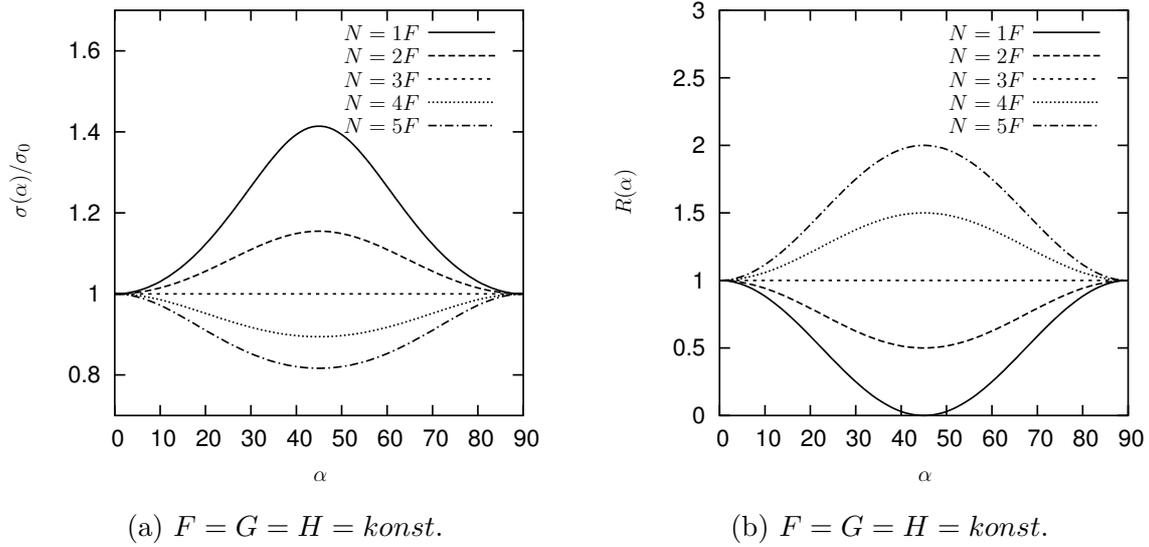


Abbildung 4.5: Einfluss der Variation des Parameters N auf die R -Wert- und Fließspannungsverteilung

$$F = \frac{R_0}{R_{90}\sigma_0^2(R_0 + 1)}, \quad (4.90)$$

$$G = \frac{1}{\sigma_0^2(R_0 + 1)}, \quad (4.91)$$

$$H = \frac{R_0}{\sigma_0^2(R_0 + 1)}, \quad (4.92)$$

$$N = \frac{(2R_{45} + 1)(R_{90} + R_0)}{2R_{90}\sigma_0^2(R_0 + 1)}. \quad (4.93)$$

Werden die Parameter in die Hill'sche Fließregel in Gleichung (4.78) eingesetzt, so nimmt diese für den ebenen Spannungszustand die Form

$$\bar{T}_{11}^2 - \frac{2R_0}{R_0 + 1}\bar{T}_{11}\bar{T}_{22} + \frac{R_0(R_{90} + 1)}{R_{90}(R_0 + 1)}\bar{T}_{22}^2 + \frac{(2R_{45} + 1)(R_{90} + R_0)}{R_{90}(R_0 + 1)}\bar{T}_{12}^2 = \sigma_0^2 \quad (4.94)$$

an. Eine weitere Beziehung, die aus den Gleichungen (4.87), (4.89) und (4.90)-(4.93) abgeleitet werden kann, ist

$$\frac{\sigma_0}{\sigma_{90}} = \sqrt{\frac{R_0(R_{90} + 1)}{R_{90}(R_0 + 1)}}. \quad (4.95)$$

Diese Gleichung verdeutlicht, dass das Hill'sche Fließkriterium das anomale Verhalten zweiter Ordnung nicht beschreiben kann.

4.5.3 Texturabhängiges Fließkriterium

In Kapitel 4.4.2 wurde eine quadratische Form der Fließregel eingeführt, die es zulässt, die durch den Deformationsprozess induzierte Texturentwicklung zu berücksichtigen. Diese Fließregel wurde bereits in der Arbeit von Böhlke (2001) in einem rein phänomenologischen Materialmodell verwendet, während sie in dieser Arbeit in dem eingeführten Zweiskalenmodell verwendet wird. Unter der Annahme kleiner Volumenänderungen und durch die Nutzung der Eigenschaft der Spurfreiheit des Tensors $\mathbb{P}_2^I + \eta\mathbb{A}'$ kann im Gegensatz zu Gleichung (4.55) auch die Form

$$\Phi(\bar{\mathbf{T}}) = \frac{1}{2}\bar{\mathbf{T}} \cdot \left(\mathbb{P}_2^I + \eta\mathbb{A}'\right) [\bar{\mathbf{T}}] - \frac{1}{3}\sigma_F^2 \quad (4.96)$$

verwendet werden ($\Phi(\bar{\mathbf{T}}) = 0$). Der Texturkoeffizient \mathbb{A}' bestimmt die induzierte Anisotropie. Er besitzt neben der Spurfreiheit, die auch der Hill'sche Tensor aufweist, die Eigenschaft der Komplettsymmetrie. Tensoren, die beide Eigenschaften besitzen, werden als irreduzibel bezeichnet. Das bedeutet, dass für einen solchen Tensor vierter Stufe insgesamt 12 Zwangsbedingungen formuliert werden können

$$\begin{aligned} A'_{11} + A'_{12} + A'_{13} &= 0, & A'_{44} - 2A'_{23} &= 0, \\ A'_{12} + A'_{22} + A'_{23} &= 0, & A'_{55} - 2A'_{13} &= 0, \\ A'_{13} + A'_{23} + A'_{33} &= 0, & A'_{66} - 2A'_{12} &= 0, \\ A'_{14} + A'_{24} + A'_{34} &= 0, & A'_{45} - \sqrt{2}A'_{36} &= 0, \\ A'_{15} + A'_{25} + A'_{35} &= 0, & A'_{46} - \sqrt{2}A'_{25} &= 0, \\ A'_{16} + A'_{26} + A'_{36} &= 0, & A'_{56} - \sqrt{2}A'_{14} &= 0. \end{aligned} \quad (4.97)$$

Unter Berücksichtigung dieser Zwangsbedingungen, verbleiben für einen Tensor \mathbb{A}' mit trikliner Symmetrie 9 statt ursprünglich 21 unabhängige Parameter. Auch für andere Symmetriegruppen verringert sich die Anzahl der verbleibenden Parameter

deutlich. Bei angenommener orthotroper Symmetrie verringert sich die Anzahl der Parameter von 9 im allgemeinen orthotropen Fall auf 3 im irreduziblen Fall

$$\mathbb{A}'_{orthotrop} = \begin{bmatrix} -A'_{12} - A'_{13} & A'_{12} & A'_{13} & 0 & 0 & 0 \\ & -A'_{12} - A'_{23} & A'_{23} & 0 & 0 & 0 \\ & & -A'_{13} - A'_{23} & 0 & 0 & 0 \\ & & & 2A'_{23} & 0 & 0 \\ & \text{sym.} & & & 2A'_{13} & 0 \\ & & & & & 2A'_{12} \end{bmatrix} \mathbf{G}_\alpha \otimes \mathbf{G}_\beta. \quad (4.98)$$

Im Vergleich zum Hill'schen Tensor verringert sich die Anzahl der Parameter von 6 auf 3. Die Ursache ist die zusätzliche Annahme einer Komplettsymmetrie. Hierdurch wird eine Kopplung zwischen den Anisotropiekoeffizienten in den Achsenrichtungen mit den entsprechenden Schubtermen erzeugt. Führt man für den Tensor $\mathbb{A}'_{orthotrop}$ im Weiteren die Zwangsbedingungen $A'_{12} = A'_{13} = A'_{23}$ ein, so erhält man den kubischen Symmetriefall für \mathbb{A}' . Fordert man außerdem die in Kapitel 3.5 genutzte Bedingung $\|\mathbb{A}'_{kubisch}\| = 1$, ergibt sich der Anisotropietensor

$$\mathbb{A}'_{kubisch} = \frac{\sqrt{30}}{30} \begin{bmatrix} -2 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ & -2 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ & & -2 & 0 & 0 & 0 \\ & & & 2 & 0 & 0 \\ \text{sym.} & & & & 2 & 0 \\ & & & & & 2 \end{bmatrix} \mathbf{G}_\alpha \otimes \mathbf{G}_\beta. \quad (4.99)$$

Für den hexagonalen bzw. transversalisotropen Symmetriefall ($A'_{12} \neq A'_{13} = A'_{23}$)

kann unter der Nutzung der Bedingung $\|\mathbb{A}'_{hexagonal}\| = 1$ der Tensor

$$\mathbb{A}'_{hexagonal} = \frac{1}{16} \begin{bmatrix} 3 & 1 & -4 & 0 & 0 & 0 \\ & 3 & -4 & 0 & 0 & 0 \\ & & 8 & 0 & 0 & 0 \\ & & & -8 & 0 & 0 \\ \text{sym.} & & & & -8 & 0 \\ & & & & & 2 \end{bmatrix} \mathbf{G}_\alpha \otimes \mathbf{G}_\beta. \quad (4.100)$$

abgeleitet werden. Dementsprechend gibt es wie im kubischen Symmetriefall nur einen Parameter, der die Anisotropie des Materials charakterisiert. Wird die Irreduzibilität für den Tensor \mathbb{A}' nicht gefordert, gibt es im hexagonalen Symmetriefall 5 unabhängige Anisotropieparameter. Der isotrope Symmetriefall des Tensors \mathbb{A}' entspricht

$$\mathbb{A}'_{isotrop} = \mathbb{O}, \quad (4.101)$$

da die Bedingungen der Isotropie und der Irreduzibilität nur gleichzeitig erfüllt werden können, wenn alle Komponenten von \mathbb{A}' identisch null sind.

Für einen Vergleich des Fließkriteriums in Gleichung (4.96) und dem Hill'schen Fließkriterium in Gleichung (4.78) wird im Folgenden der Tensor $\mathbb{A}'_{orthotrop}$ aus Gleichung (4.98) verwendet. Ausgehend von der quadratischen Form der Fließregel in Gleichung (4.96) muss für den Tensor $\mathbb{P}'_2 + \eta\mathbb{A}'$ positive Definitheit gefordert werden, damit das Fließkriterium die Bedingung der Konvexität erfüllt. Das bedeutet, es muss auch in diesem Fall die Positivitätsbedingung für die Eigenwerte $\lambda_i > 0$ erfüllt sein. Wie schon beim Hill'schen Tensor ist ein Eigenwert λ_1 identisch null. Dieser Fakt folgt aus der Spurfreiheit von \mathbb{A}' . Deshalb genügt es auch hier, wenn alle anderen Eigenwerte größer als null sind. Aus den drei Eigenwerten

$$\lambda_2 = 1 + 2\eta A'_{23}, \quad \lambda_3 = 1 + 2\eta A'_{13}, \quad \lambda_4 = 1 + 2\eta A'_{12} \quad (4.102)$$

können direkt die Beziehungen

$$\eta A'_{23} > -\frac{1}{2}, \quad \eta A'_{13} > -\frac{1}{2}, \quad \eta A'_{12} > -\frac{1}{2} \quad (4.103)$$

abgeleitet werden. Die beiden anderen Eigenwerte sind wie schon beim Hill'schen Tensor identisch

$$\lambda_5 = \lambda_6 = -\eta(A'_{23} + A'_{13} + A'_{12}) + 1 + |\eta| \sqrt{\frac{1}{2}((A'_{13} - A'_{23})^2 + (A'_{13} - A'_{12})^2 + (A'_{12} - A'_{23})^2)}. \quad (4.104)$$

Hieraus folgt die weitere notwendige Bedingung an die Parameter η , A'_{12} , A'_{13} und A'_{23}

$$\eta(A'_{23} + A'_{13} + A'_{12}) < |\eta| \sqrt{\frac{1}{2}((A'_{13} - A'_{23})^2 + (A'_{13} - A'_{12})^2 + (A'_{12} - A'_{23})^2)} + 1. \quad (4.105)$$

Für den kubischen Sonderfall ($A'_{12} = A'_{13} = A'_{23}$) ergibt sich

$$\eta A'_{12} = \eta A'_{13} = \eta A'_{23} < \frac{1}{3}. \quad (4.106)$$

Nutzt man die Normierung aus Gleichung (4.99) ergibt sich $A'_{12} = \frac{\sqrt{30}}{30}$ und damit eine obere Schranke für η

$$\eta < \frac{\sqrt{30}}{3}. \quad (4.107)$$

Aus Gleichung (4.103) folgt dann eine untere Schranke für η

$$\eta > -\frac{\sqrt{30}}{2}. \quad (4.108)$$

Diese beiden Schranken des Parameters η für den kubischen Symmetriefall wurden bereits in Böhlke (2001) abgeleitet. Da hier aber der orthotrope Symmetriefall von \mathbb{A}' betrachtet wird, müssen die Bedingungen in den Gleichungen (4.103) und (4.105) erfüllt werden.

Für den Vergleich mit dem Hill'schen Fließkriterium sollen nun auch für das in diesem Abschnitt verwendete Fließkriterium die Fließspannungs- und R -Wertverteilungen resultierend aus einachsigen Zugversuchen in der Blechebene analysiert werden. Hierfür kann die Funktion der Fließspannung aus Gleichung (4.96) in Abhängigkeit der Zugrichtung \mathbf{n}_σ abgeleitet werden

$$\frac{\sigma(\mathbf{n}_\sigma)}{\sigma_F} = \sqrt{\frac{2}{3}} \frac{1}{\sqrt{\mathbf{n}_\sigma \otimes \mathbf{n}_\sigma \cdot (\mathbb{P}_2^I + \eta \mathbb{A}') [\mathbf{n}_\sigma \otimes \mathbf{n}_\sigma]}}. \quad (4.109)$$

Die Verteilung der R -Werte in der Blechebene ergibt sich analog zu Gleichung (4.89)

$$R = \frac{\mathbf{n}_b \otimes \mathbf{n}_b \cdot (\mathbb{P}_2^I + \eta \mathbb{A}') [\mathbf{n}_\sigma \otimes \mathbf{n}_\sigma]}{\mathbf{n}_d \otimes \mathbf{n}_d \cdot (\mathbb{P}_2^I + \eta \mathbb{A}') [\mathbf{n}_\sigma \otimes \mathbf{n}_\sigma]}. \quad (4.110)$$

Im Falle dieses ebenen Spannungszustandes verbleiben im Hill'schen Fließkriterium die vier unabhängigen Parameter F, G, H und N . Sie konnten durch die R -Werte R_0, R_{45}, R_{90} und die Fließspannung σ_0 ausgedrückt werden (siehe Gleichungen (4.90)-(4.93)). Bei Verwendung der quadratischen Form aus Gleichung (4.96) verbleiben bei der Annahme orthotroper Symmetrie und der Annahme eines ebenen Spannungszustandes, wie im allgemeinen orthogonalen 3-dimensionalen Fall, fünf Parameter: $\eta, A'_{12}, A'_{13}, A'_{23}$ und σ_F . Allerdings kann der Einfluss des Parameters η durch eine geeignete Wahl der Parameter A'_{12}, A'_{13} und A'_{23} kompensiert werden, wodurch wie im Hill'schen Fall vier unabhängige Parameter verbleiben.

Bestimmt man mit der Hilfe der Gleichungen (4.109) und (4.110) die R -Werte R_0, R_{45}, R_{90} und die Fließspannung σ_0 , so ergeben sich aus der Lösung des hieraus resultierenden Gleichungssystems die Parameter

$$\eta A'_{12} = \frac{1}{3} \frac{R_0 + R_{90} - 6R_0R_{90} + 2R_0R_{45} + 2R_{45}R_{90}}{R_0 + R_{90} + 4R_0R_{90} + 2R_0R_{45} + 2R_{45}R_{90}}, \quad (4.111)$$

$$\eta A'_{13} = \frac{1}{3} \frac{R_0 - 9R_{90} + 4R_0R_{90} + 2R_0R_{45} + 2R_{45}R_{90}}{R_0 + R_{90} + 4R_0R_{90} + 2R_0R_{45} + 2R_{45}R_{90}}, \quad (4.112)$$

$$\eta A'_{23} = \frac{1}{3} \frac{-9R_0 + R_{90} + 4R_0R_{90} + 2R_0R_{45} + 2R_{45}R_{90}}{R_0 + R_{90} + 4R_0R_{90} + 2R_0R_{45} + 2R_{45}R_{90}}, \quad (4.113)$$

$$\sigma_F = \sigma_0 \sqrt{\frac{5R_{90}(R_0 + 1)}{R_0 + R_{90} + 4R_0R_{90} + 2R_0R_{45} + 2R_{45}R_{90}}}. \quad (4.114)$$

Setzt man diese Parameter in das Fließkriterium in Gleichung (4.96) ein, so erhält man für den ebenen Spannungszustand das Hill'sche Fließkriterium in Gleichung (4.94). Damit sind im Falle orthotroper Symmetrie und der zusätzlichen Annahme eines ebenen Spannungszustand das Hill'sche Fließkriterium und das in dieser Arbeit verwendete texturbasierte Fließkriterium äquivalent. Zwischen den Koeffizienten beider Fließkriterien ergeben sich die Zusammenhänge

$$\eta A'_{12} = \frac{N - 3H}{3(N + 2H)}, \quad (4.115)$$

$$\eta A'_{13} = \frac{N + 2H - 5G}{3(N + 2H)}, \quad (4.116)$$

$$\eta A'_{23} = \frac{N + 2H - 5F}{3(N + 2H)}, \quad (4.117)$$

$$\sigma_F = \sqrt{\frac{5}{2(N + 2H)}}. \quad (4.118)$$

Kapitel 5

Numerische Implementierung

In diesem Kapitel wird zunächst die Lösung der Differentialgleichungen für das elastisch-viskoplastische und das viskoplastische Einkristallmodell sowie für das Zweiskalenmodell beschrieben. Danach wird auf die Diskretisierung im Ort mit Hilfe der Finite-Elemente-Methode eingegangen. In diesem Zusammenhang wird kurz die Implementation der in Kapitel 4 eingeführten Taylor-Modelle sowie die Implementation des Zweiskalenmodells in das Finite-Elemente-Programm ABAQUS (ABAQUS/Standard, 2005) diskutiert. Eine ausführliche Diskussion nichtlinearer Berechnungen unter Verwendung der FEM kann man unter anderem in den Büchern von Crisfield (1991), Simo und Hughes (1997), Zienkiewicz und Taylor (2000) und Wriggers (2001) finden.

5.1 Zeitintegration

5.1.1 Elastisch-viskoplastisches Einkristallmodell

Unter Verwendung von Gleichung (2.45) aus Kapitel 2.2.3 erhält man die Differentialgleichung für $\tilde{\mathbf{F}}$ des elastisch-viskoplastischen Einkristallmodells

$$\dot{\tilde{\mathbf{F}}} = \dot{\tilde{\mathbf{F}}}(\tilde{\mathbf{F}}, \tau^C) = \mathbf{L}\tilde{\mathbf{F}} - \tilde{\mathbf{F}}\tilde{\mathbf{k}}(\tilde{\mathbf{T}}', \tau^C). \quad (5.1)$$

Hinzu kommt eine Differentialgleichung für die Verfestigungsvariable der kritischen Schmid-Spannung τ^C

$$\dot{\tau}^C = \dot{\tau}^C(\tilde{\mathbf{F}}, \tau^C). \quad (5.2)$$

Die Anfangsbedingungen werden mit

$$\tilde{\mathbf{F}}(t=0) = \mathbf{Q}(t=0), \quad (5.3)$$

$$\tau^C(t=0) = \tau_0^C$$

festgelegt. \mathbf{Q} ist die Orientierung des Kristalls. τ_0^C definiert die kritische Schmid-Spannung zum Zeitpunkt $t=0$. Die Entwicklungsgleichungen für $\tilde{\mathbf{F}}$ und τ^C sind miteinander gekoppelt. Für die weiteren Betrachtungen werden die Komponenten von $\tilde{\mathbf{F}}$ und τ^C in einem Vektor $\mathbf{h}(\tilde{\mathbf{F}}, \tau^C)$ gespeichert. Zur Lösung des Differentialgleichungssystems wird das implizite Euler-Verfahren verwendet. Damit ergibt sich für einen Zeitschritt $t_{n+1} = t_n + \Delta t$ die Gleichung

$$\mathbf{h}_{n+1} = \mathbf{h}_n + \Delta t \dot{\mathbf{h}}_{n+1}. \quad (5.4)$$

Aus Gleichung (5.4) erhält man die Funktion

$$\mathbf{g}(\tilde{\mathbf{F}}_{n+1}, \tau_{n+1}^C) = \mathbf{h}_{n+1} - \Delta t \dot{\mathbf{h}}_{n+1} - \mathbf{h}_n = \mathbf{0}. \quad (5.5)$$

Dieses nichtlineare System von Gleichungen wird mit Hilfe eines Newton-Verfahrens gelöst. Dazu wurde im Fortran-Quelltext das Unterprogramm SMNEWDT von Engeln-Müllges und Reutter (1996) verwendet. Die zur Lösung des Newton-Verfahrens in jedem Iterationsschritt benötigte Jacobi-Matrix

$$\mathbf{J}_{n+1} = \frac{\partial \mathbf{g}_{n+1}}{\partial \mathbf{h}_{n+1}} \quad (5.6)$$

wurde analytisch bestimmt. Ihre Herleitung ist in Anhang C beschrieben. Da das Newton-Verfahren die plastische Inkompressibilität, d.h. $\det(\mathbf{P}) = 1$ nicht sicherstellt, muss in jedem Iterationsschritt eine Determinantenkorrektur für $\tilde{\mathbf{F}}$ vorgenommen werden (siehe z.B. Sarma und Zacharia, 1999; Böhlke, 2001)

$$\tilde{\mathbf{F}}_{n+1}^* = \sqrt[3]{\frac{\det(\mathbf{F}_{n+1})}{\det(\tilde{\mathbf{F}}_{n+1})}} \tilde{\mathbf{F}}_{n+1}. \quad (5.7)$$

Die Genauigkeit der Lösung des Verfahrens mit Determinantenkorrektur ist wie im Fall des Verfahrens ohne Determinantenkorrektur von erster Ordnung (Böhlke, 2001).

Wie in Gleichung (5.1) ersichtlich ist, hängt die Entwicklungsgleichung für $\tilde{\mathbf{F}}$ vom Geschwindigkeitsgradienten \mathbf{L} ab. Dieser ist durch Gleichung (2.46) in Abhängigkeit des Deformationsgradienten \mathbf{F} und dessen zeitlicher Änderung gegeben. Da im verwendeten FE-Programm die Deformationsgradienten \mathbf{F}_n und \mathbf{F}_{n+1} für jeden Integrationspunkt und für jeden Iterationsschritt zur Verfügung gestellt werden, kann somit ein mittlerer Geschwindigkeitsgradient \mathbf{L} berechnet werden. Wendet man auf Gleichung (2.46) das implizite Euler-Verfahren an, kann folgende Approximation für \mathbf{L} abgeleitet werden

$$\mathbf{L} = \frac{1}{\Delta t}(\mathbf{F}_{n+1} - \mathbf{F}_n)\mathbf{F}_{n+1}^{-1}. \quad (5.8)$$

Prinzip der Forminvarianz (PFI). Wie bereits bei der Einführung des elastischen Gesetzes diskutiert wurde, erfüllt dieses das PMO, das PISM und somit auch das PFI. Im Folgenden soll nachgewiesen werden, dass die Prinzipien auch nach der Algebraisierung der Differentialgleichungen eingehalten werden. Aus diesem Grund ist eine Untersuchung der Newton-Gleichung (5.5) erforderlich. Hierbei genügt es, nur den Teil für die Entwicklung von $\tilde{\mathbf{F}}$ zu betrachten

$$\tilde{\mathbf{F}}_{n+1} - \tilde{\mathbf{F}}_n - \Delta t(\mathbf{L}\tilde{\mathbf{F}}_{n+1} - \tilde{\mathbf{F}}_{n+1}\tilde{\mathbf{k}}_{n+1}) = \mathbf{0}, \quad (5.9)$$

da die Entwicklungsgleichung für τ^C skalarwertig ist und somit generell die Prinzipien erfüllt. Für den Nachweis des PFI muss gezeigt werden, dass die Materialfunktionen invariant unter Beobachterwechseln sind (siehe Anhang A). Bei der Durchführung eines Beobachterwechsels ergeben sich mit der Hilfe der Rotation $\mathbf{Q} \in SO(3)$ (siehe Anhang A) die Deformationsgradienten des zweiten Beobachters $\hat{\mathbf{F}}_{n+1}$ und $\hat{\mathbf{F}}_n$ aus denen des ersten Beobachters durch

$$\hat{\mathbf{F}}_{n+1} = \mathbf{Q}\mathbf{F}_{n+1}, \quad \hat{\mathbf{F}}_n = \mathbf{Q}\mathbf{F}_n. \quad (5.10)$$

Geht man ferner davon aus, dass die plastische Transformation \mathbf{P} invariant unter Euklidischen Transformationen ist, so ergibt sich analog für den Tensor $\tilde{\mathbf{F}}$

$$\hat{\tilde{\mathbf{F}}}_{n+1} = \mathbf{Q}\tilde{\mathbf{F}}_{n+1}, \quad \hat{\tilde{\mathbf{F}}}_n = \mathbf{Q}\tilde{\mathbf{F}}_n. \quad (5.11)$$

Unter Anwendung der Gleichungen (5.8) und (5.10) erhält man für den Geschwindigkeitsgradienten des zweiten Beobachters

$$\hat{\mathbf{L}} = \mathbf{Q}\mathbf{L}\mathbf{Q}^T. \quad (5.12)$$

Nutzt man weiterhin die Invarianz unter Euklidischen Transformationen der Funktion $\tilde{\mathbf{k}}_{n+1}$ aus und setzt die obigen Ergebnisse in die Newton-Gleichung für den zweiten Beobachter

$$\hat{\mathbf{F}}_{n+1} - \hat{\mathbf{F}}_n - \Delta t (\hat{\mathbf{L}} \hat{\mathbf{F}}_{n+1} - \hat{\mathbf{F}}_{n+1} \hat{\mathbf{k}}_{n+1}) = \mathbf{0} \quad (5.13)$$

ein, erhält man schließlich wieder die Newton-Gleichung des ersten Beobachters (5.9), womit die Gültigkeit des PFI nachgewiesen ist. Die Objektivität des Geschwindigkeitsgradienten \mathbf{L} folgt aus der Berechnungsvorschrift (5.8). Im Allgemeinen ist der Geschwindigkeitsgradient weder objektiv noch invariant. Auf die Gültigkeit des PFI für die vorliegenden diskretisierten Materialgleichungen hat diese Tatsache keinen Einfluss.

Prinzip der Invarianz gegen überlagerte Starrkörpermodifikationen (PISM). Eine überlagerte Starrkörpermodifikation bezüglich des momentanen Deformationsprozesses führt nach Bertram (2005) zu einem gedrehten Cauchy'schen Spannungstensor. Die Differentialgleichung zur Bestimmung der inneren Variablen wird hingegen nicht beeinflusst (siehe Anhang A). Der Beweis muss deshalb wieder an Newton-Gleichung (5.9) geführt werden. Durch eine Starrkörpermodifikation ergibt sich für den Deformationsgradienten der Zusammenhang

$$\mathbf{F}_{n+1} = \mathbf{Q} \mathbf{F}_n. \quad (5.14)$$

Da die plastische Transformation \mathbf{P} als invariant unter derartigen Modifikationen angenommen werden kann, ergibt sich analog für den Tensor $\tilde{\mathbf{F}}$ der Zusammenhang

$$\tilde{\mathbf{F}}_{n+1} = \mathbf{Q} \tilde{\mathbf{F}}_n. \quad (5.15)$$

Setzt man diese Beziehungen in Gleichung (5.9) ein, berücksichtigt zur Bestimmung des Geschwindigkeitsgradienten Gleichung (5.8), so erhält man

$$\mathbf{0} = \mathbf{Q} \tilde{\mathbf{F}}_n - \tilde{\mathbf{F}}_n - \Delta t \left(\frac{1}{\Delta t} (\mathbf{Q} \mathbf{F}_n - \mathbf{F}_n) \mathbf{F}_n^{-1} \tilde{\mathbf{F}}_n - \mathbf{Q} \tilde{\mathbf{F}}_n \tilde{\mathbf{k}}_{n+1} \right). \quad (5.16)$$

Nimmt man ferner an, dass eine überlagerte Starrkörpermodifikation keine plastische Deformation erzeugt ($\tilde{\mathbf{k}}_{n+1} = \mathbf{0}$), so ist Gleichung (5.16) für beliebige Starrkörperrotationen \mathbf{Q} und damit das PISM erfüllt. Da PFI und PISM nachgewiesen werden konnten, ist auch das PMO identisch erfüllt.

5.1.2 Viskoplastisches Einkristallmodell

Zur Lösung der Differentialgleichung des starr-viskoplastischen Materialmodells, das die Entwicklung der Kristallorientierung $\mathbf{Q}(t)$ spezifiziert und durch Gleichung (2.51)₂ in Kapitel 2.3.2 gegeben ist, wird zunächst die Kirchhoff-Spannung aus Gleichung (2.51)₁ bestimmt. Betrachtet man einen gegebenen Zeitschritt $t_{n+1} = t_n + \Delta t$, so berechnet sich die Spannung $\boldsymbol{\tau}'_n$ zum Zeitpunkt t_n aus der Kristallorientierung \mathbf{Q}_n , der kritischen Schmid-Spannung τ_n^C und dem symmetrischen Anteil des Geschwindigkeitsgradienten \mathbf{D}' , der für einen Zeitschritt als konstant angenommen wird. Er wird aus dem Geschwindigkeitsgradienten \mathbf{L} bestimmt, der durch Gleichung (5.8) gegeben ist. Zur Lösung des nichtlinearen Gleichungssystems in Gleichung (2.51)₁ ist es notwendig dieses in einem 5-dimensionalen Deviatorraum zu formulieren, um eine eindeutige Lösung für die Kirchhoff-Spannung zu finden. Hierbei ergeben sich die Spannung $\boldsymbol{\tau}'$ und der Dehnratentensor \mathbf{D}' als 5-dimensionale Vektoren

$$\boldsymbol{\tau}' = \left[\sqrt{\frac{3}{2}}\tau'_{11} \quad \frac{1}{\sqrt{2}}(\tau'_{22} - \tau'_{33}) \quad \sqrt{2}\tau'_{23} \quad \sqrt{2}\tau'_{13} \quad \sqrt{2}\tau'_{12} \right]_{\mathbf{B}_i}, \quad (5.17)$$

$$\mathbf{D}' = \left[\sqrt{\frac{3}{2}}\mathbf{D}'_{11} \quad \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{D}'_{22} - \mathbf{D}'_{33}) \quad \sqrt{2}\mathbf{D}'_{23} \quad \sqrt{2}\mathbf{D}'_{13} \quad \sqrt{2}\mathbf{D}'_{12} \right]_{\mathbf{B}_i},$$

die bezüglich der Basis \mathbf{B}_i definiert sind

$$\begin{aligned} \mathbf{B}_1 &= \frac{1}{\sqrt{6}}(2\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_2 - \mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_3), \\ \mathbf{B}_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_2 - \mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_3), \\ \mathbf{B}_3 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_3 + \mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_2), \\ \mathbf{B}_4 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_3 + \mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_1), \\ \mathbf{B}_5 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_1). \end{aligned} \quad (5.18)$$

Diese Basis besitzt die Eigenschaft der Orthonormalität und ist anwendbar für symmetrische, spurfreie Tensoren. Die Lösung des so definierten nichtlinearen Gleichungssystem zum Zeitpunkt t_n

$$\mathbf{G}_n = \mathbf{D}'_n - \mathbf{Q}_n \operatorname{sym}(\tilde{\mathbf{k}}(\mathbf{Q}_n^T \boldsymbol{\tau}'_n \mathbf{Q}_n, \tau_n^C)) \mathbf{Q}_n^T = \mathbf{0} \quad (5.19)$$

liefert somit einen 5-dimensionalen Vektor für $\boldsymbol{\tau}'_n$. Zur Lösung dieses Gleichungssystems wird erneut ein Newton-Verfahren verwendet. Dazu wird in jedem Iterationsschritt die Jacobi-Matrix

$$\mathbf{J}'_n = \frac{\partial \mathbf{G}_n}{\partial \boldsymbol{\tau}'_n} \quad (5.20)$$

benötigt, die eine 5x5 Komponentenmatrix bezüglich der Basis \mathbf{B}_i ist. Sie kann analytisch bestimmt werden und besitzt die Form

$$\mathbf{J}'_n = - \sum_{\alpha=1}^{12} \dot{\gamma}_0 m \left| \frac{\boldsymbol{\tau}'_n \cdot \mathbf{Q} \tilde{\mathbf{M}}_\alpha \mathbf{Q}^\top}{\tau^C} \right|^{m-1} \mathbf{Q} \tilde{\mathbf{M}}_\alpha^{sym} \mathbf{Q}^\top \otimes \mathbf{Q} \tilde{\mathbf{M}}_\alpha^{sym} \mathbf{Q}^\top. \quad (5.21)$$

Die Tensoren $\tilde{\mathbf{M}}_\alpha^{sym}$ sind die symmetrischen Anteile der Schmid-Tensoren. Sie sind ebenfalls bezüglich der Basis \mathbf{B}_i dargestellt. Mit den berechneten Spannungen zum Zeitpunkt t_n kann nun die Kristallorientierung \mathbf{Q}_{n+1} zum Zeitpunkt t_{n+1} bestimmt werden. Dies erfolgt unter Lösung der Differentialgleichung aus Gleichung (2.51)₂. Diese kann in die Form

$$\tilde{\mathbf{W}} = \mathbf{Q}^\top \dot{\mathbf{Q}} = \mathbf{Q}^\top \mathbf{W} \mathbf{Q} - \text{skw}(\tilde{\mathbf{k}}(\mathbf{Q}^\top \boldsymbol{\tau}' \mathbf{Q}, \tau^C)) \quad (5.22)$$

gebracht werden. Zur Lösung der Differentialgleichung wird eine explizite exponentielle Abbildungsmethode angewendet (Weber und Anand, 1990; Miehe, 1996; Simo und Hughes, 1997), d.h. die Lösung zum Zeitpunkt t_{n+1} ergibt sich explizit aus der Lösung zum Zeitpunkt t_n

$$\mathbf{Q}_{n+1} = \mathbf{Q}_n \exp(\tilde{\mathbf{W}}_n \Delta t). \quad (5.23)$$

Bei der Anwendung dieser exponentiellen Abbildungsmethode ist die Berechnung der Exponentialfunktion für Tensoren 2. Stufe erforderlich. Sie kann für einen beliebigen Tensor 2. Stufe \mathbf{A} durch die unendliche Reihe

$$\exp(\mathbf{A}) = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{i!} \mathbf{A}^i \quad (5.24)$$

dargestellt werden und ist konvergent für alle Tensoren 2. Stufe (Zurmühl und Falk, 1984; Walter, 1997). Zur Bestimmung der Exponentialfunktion gibt es verschiedene Ansätze (Moler und van Loan, 1978). Nutzt man den Reihenansatz aus

Gleichung (5.24) und verwendet das Theorem von Cayley-Hamilton für Tensoren 2. Stufe

$$\mathbf{A}^n = I_1 \mathbf{A}^{n-1} - I_2 \mathbf{A}^{n-2} + I_3 \mathbf{A}^{n-3}, \quad (5.25)$$

mit den Hauptinvarianten von \mathbf{A}

$$I_1 = \text{sp}(\mathbf{A}),$$

$$I_2 = \frac{1}{2}(\text{sp}(\mathbf{A})^2 - \text{sp}(\mathbf{A}^2)), \quad (5.26)$$

$$I_3 = \det(\mathbf{A}),$$

so ergeben sich anstatt der unendlichen Reihe aus Tensorpotenzen in Gleichung (5.24) unendliche skalarwertige Reihen zur Approximation der tensoriellen Exponentialfunktion

$$\exp(\mathbf{A}) = \left(1 + \sum_{i=3}^{\infty} \frac{1}{i!} \varsigma_i^I\right) \mathbf{I} + \left(1 + \sum_{i=3}^{\infty} \frac{1}{i!} \varsigma_i^{II}\right) \mathbf{A} + \left(\frac{1}{2} + \sum_{i=3}^{\infty} \frac{1}{i!} \varsigma_i^{III}\right) \mathbf{A}^2 \quad (5.27)$$

(Böhlke, 2001). Die Skalare ς_i^I , ς_i^{II} und ς_i^{III} sind für $i \geq 3$ aus der rekursiven Bildungsvorschrift

$$\begin{aligned} \varsigma_i^I &= I_3 \varsigma_{i-1}^{III}, & \varsigma_2^I &= 0, \\ \varsigma_i^{II} &= \varsigma_{i-1}^I - I_2 \varsigma_{i-1}^{III}, & \varsigma_2^{II} &= 0, \\ \varsigma_i^{III} &= \varsigma_{i-1}^{II} + I_1 \varsigma_{i-1}^{III}, & \varsigma_2^{III} &= 1 \end{aligned} \quad (5.28)$$

zu bestimmen. In dem vorliegenden Fall ist das Argument der Exponentialfunktion (siehe Gleichung (5.23)) ein schiefsymmetrischer Tensor 2. Stufe. Für einen derartigen Tensor sind die skalarwertigen Reihen in Gleichung (5.27) endlich. Ist der Tensor \mathbf{A} in Gleichung (5.27) schiefsymmetrisch, so sind dessen Hauptinvarianten

$$I_1 = 0, \quad I_2 = |\mathbf{A}|^2, \quad I_3 = 0 \quad (5.29)$$

und somit ergibt sich die vereinfachte Darstellung

$$\exp(\mathbf{A}) = \mathbf{I} + \frac{\sin(|\mathbf{A}|)}{|\mathbf{A}|} \mathbf{A} + 2 \left(\frac{\sin\left(\frac{|\mathbf{A}|}{2}\right)}{|\mathbf{A}|} \right)^2 \mathbf{A}^2. \quad (5.30)$$

Der Vorteil dieser Berechnungsvorschrift der Exponentialfunktion ist, dass im Gegensatz zu Gleichung (5.27) nur Reihenterme zur Berechnung der Sinusfunktion ausgewertet werden müssen. Dies hat in erster Linie den Vorteil einer geringeren Berechnungszeit für die Exponentialfunktion. Ein Vorteil der Anwendung der exponentiellen Abbildungsmethode zur Lösung der Differentialgleichung ist die Sicherstellung der plastischen Inkompressibilität (siehe z.B. Böhlke, 2001). Beim impliziten Euler-Verfahren ist dies nicht der Fall. Dort muss eine Determinantenkorrektur der Lösung vorgenommen werden (siehe Gleichung (5.7)).

Mit der aus der Lösung der Differentialgleichung erhaltenen Kristallorientierung \mathbf{Q}_{n+1} kann nun eine Aktualisierung der Kirchhoff-Spannungen zum Zeitpunkt t_{n+1} erfolgen. Diese Aktualisierung erfolgt wieder durch die Lösung des nichtlinearen Gleichungssystems in Gleichung (2.51)₁, dessen Lösungsprozedur oben beschrieben wurde. Hierbei muss auch die Schmid-Spannung τ_{n+1}^C zum Zeitpunkt t_{n+1} berücksichtigt werden, die explizit aus τ_n^C bestimmt wird

$$\tau_{n+1}^C = \tau_n^C + \Delta t \dot{\tau}^C(\mathbf{Q}_n, \tau_n^C). \quad (5.31)$$

5.1.3 Zweiskalenmodell

Basierend auf der Berechnung der Orientierungsverteilung wird der Texturkoeffizient vierter Stufe \mathbb{A}' bestimmt. Eine Anfangsorientierungsverteilung wird für die Berechnung vorgegeben. Die Entwicklung der Orientierungsverteilung wird mit Hilfe eines diskreten Taylor-Modells bestimmt, das auf dem starr-viskoplastischen Einkristallmodell (siehe Kapitel 2.3 und 5.1.2) basiert. Damit der numerische Aufwand dabei möglichst gering bleibt, wurden für die im nächsten Kapitel beschriebenen Simulationen nur die mittleren Orientierungen der Texturkomponenten verwendet. Das Differentialgleichungssystem auf der Makroskala ist durch die Gleichungen (4.53) und (4.60) definiert. Hierbei werden die Anfangsbedingungen

$$\tilde{\mathbf{B}}(t = 0) = \mathbf{I}, \quad (5.32)$$

$$\sigma_F(t = 0) = \sigma_{F0}$$

berücksichtigt. Die Lösung des Systems erfolgt wie im elastisch-viskoplastischen Modell für die einkristalline Verformung unter Verwendung eines impliziten Euler-

Verfahrens. Damit ergeben sich ähnliche Zusammenhänge wie in Kapitel 5.1.1. Auf eine weitere Diskussion wird deshalb verzichtet.

5.2 Finite-Elemente-Implementation

5.2.1 Integrale Form des Gleichgewichtes

Zur Herleitung der integralen Form des Gleichgewichtes geht man zunächst von der lokalen Impulsbilanz aus

$$\operatorname{div}(\mathbf{T}) + \rho\mathbf{b} = \rho\mathbf{a}. \quad (5.33)$$

Der Vektor \mathbf{b} beinhaltet die auf den Körper wirkenden Massenkräfte. ρ ist die Massendichte. Der Beschleunigungsvektor \mathbf{a} soll im Folgenden vernachlässigt werden, da quasi-statische Prozesse betrachtet werden. Unter Anwendung des Prinzips der virtuellen Verschiebung wird Gleichung (5.33) mit einem infinitesimalen Verschiebungsvektor $\delta\mathbf{u}$ skalar multipliziert

$$\operatorname{div}(\mathbf{T}) \cdot \delta\mathbf{u} + \rho\mathbf{b} \cdot \delta\mathbf{u} = 0. \quad (5.34)$$

Aus der lokalen Form des Gleichgewichtes in Gleichung (5.34) kann durch Integration über das momentane Volumen des Körpers die globale Form bestimmt werden

$$\int_v \operatorname{div}(\mathbf{T}) \cdot \delta\mathbf{u} dv + \int_v \rho\mathbf{b} \cdot \delta\mathbf{u} dv = 0. \quad (5.35)$$

Nutzt man die Identität

$$\operatorname{div}(\mathbf{T}) \cdot \delta\mathbf{u} = \operatorname{div}(\mathbf{T}\delta\mathbf{u}) - \mathbf{T} \cdot (\nabla\delta\mathbf{u}), \quad (5.36)$$

sowie den Satz von Gauß zur Transformation von Volumen- in Oberflächenintegrale

$$\int_v \operatorname{div}(\mathbf{T}\delta\mathbf{u}) dv = \int_{\partial v} (\mathbf{T}\delta\mathbf{u}) \cdot \mathbf{n} da, \quad (5.37)$$

erhält man aus Gleichung (5.35)

$$\int_v \mathbf{T} \cdot (\nabla\delta\mathbf{u}) dv - \int_v \rho\mathbf{b} \cdot \delta\mathbf{u} dv - \int_{\partial v} (\mathbf{T}\mathbf{n}) \cdot \delta\mathbf{u} da = 0. \quad (5.38)$$

Der Vektor \mathbf{n} ist die Normalenrichtung in einem Randpunkt des Körpers. Er bildet den Cauchy'schen Spannungstensor \mathbf{T} in einem Randpunkt in den Randspannungsvektor $\mathbf{t} = \mathbf{T}\mathbf{n}$ ab. Das Oberflächenintegral in Gleichung (5.38) verschwindet bei diesen Betrachtungen auf dem Verschiebungsrand und ist nur auf dem Spannungsrand verschieden von null. Wegen der Symmetrie des Cauchy'schen Spannungstensors ist es weiterhin möglich, nur den symmetrischen Anteil von $\nabla\delta\mathbf{u}$ zu verwenden. Mit diesen Annahmen folgt die schwache globale Formulierung, die als Ausgangspunkt zur Diskretisierung mit finiten Elementen genutzt wird

$$\int_v \mathbf{T} \cdot \text{sym}(\nabla\delta\mathbf{u}) dv - \int_v \rho\mathbf{b} \cdot \delta\mathbf{u} dv - \int_{\partial v} \mathbf{t} \cdot \delta\mathbf{u} da = 0. \quad (5.39)$$

Wird der Cauchy'sche Spannungstensor \mathbf{T} durch den Kirchhoff'schen Spannungstensor $\boldsymbol{\tau}$ ersetzt, kann das erste Integral in Gleichung (5.39) auch durch Integration über das Referenzvolumen berechnet werden

$$\int_v \mathbf{T} \cdot \text{sym}(\nabla\delta\mathbf{u}) dv = \int_V \boldsymbol{\tau} \cdot \text{sym}(\nabla\delta\mathbf{u}) dV. \quad (5.40)$$

5.2.2 Ortsdiskretisierung

Der nächste Schritt besteht in der Diskretisierung im Ort von Gleichung (5.39). Hierzu wird der Körper in eine Anzahl von n_e finiten Elementen zerlegt

$$v \cong \bigcup_{e=1}^{n_e} v_e \quad (5.41)$$

Für den Rand des Körpers wird eine ähnliche Aufteilung erzeugt, wobei sich der Rand nur aus Flächen und Kanten der am Rand liegenden Elemente zusammensetzt,

$$\partial v \cong \bigcup_{e=1}^{n_r} \partial v_e. \quad (5.42)$$

n_r ist die Anzahl der am Rand liegenden Elemente. Wendet man diese Beziehungen auf Gleichung (5.39) an, so erhält man

$$\bigcup_{e=1}^{n_e} \int_{v_e} \mathbf{T}_e \cdot \text{sym}(\nabla\delta\mathbf{u}_e) dv_e - \bigcup_{e=1}^{n_e} \int_{v_e} \rho\mathbf{b}_e \cdot \delta\mathbf{u}_e dv_e - \bigcup_{e=1}^{n_r} \int_{\partial v_e} \mathbf{t}_e \cdot \delta\mathbf{u}_e da_e = 0. \quad (5.43)$$

Der Spannungstensor \mathbf{T}_e und der Tensor $\text{sym}(\nabla\delta\mathbf{u}_e)$ werden im Weiteren als Vektoren verwendet, die nur die symmetrischen Komponenten beinhalten. Sie werden deshalb mit dem Index V gekennzeichnet. Außerdem wird die Matrix \mathbf{N}_e eingeführt, die die Formfunktionen des Elements speichert. Sie verknüpft den Knotenverschiebungsvektor \mathbf{u}_k , der die Verschiebungen aller Knoten des finiten Elementes speichert, mit dem Verschiebungsvektor des Elementes

$$\mathbf{u}_e(\mathbf{x}_e) = \mathbf{N}_e(\mathbf{x}_e)\mathbf{u}_k. \quad (5.44)$$

Desweiteren folgen für die virtuelle Verschiebung $\delta\mathbf{u}_e$ und den Gradienten $\text{sym}(\nabla\delta\mathbf{u}_e)^V$

$$\delta\mathbf{u}_e(\mathbf{x}_e) = \mathbf{N}_e(\mathbf{x}_e)\delta\mathbf{u}_k \quad (5.45)$$

bzw.

$$\text{sym}(\nabla\delta\mathbf{u}_e)^V = \mathbf{B}_e(\mathbf{N}_e(\mathbf{x}_e), \mathbf{x}_e)\delta\mathbf{u}_k. \quad (5.46)$$

Die Matrix $\mathbf{B}_e(\mathbf{N}_e(\mathbf{x}_e), \mathbf{x}_e)$ in Gleichung (5.46) beinhaltet die Ableitungen der Formfunktionen. Die Kombination der Gleichungen (5.43), (5.45) und (5.46) und die Annahme der Beliebigkeit der virtuellen Verschiebung $\delta\mathbf{u}_k$ führt schließlich auf die diskretisierte Form des Gleichgewichtes

$$\bigcup_{e=1}^{n_e} \int_v \mathbf{B}_e^T \mathbf{T}_e^V dv_e - \bigcup_{e=1}^{n_e} \int_{v_e} \rho \mathbf{N}_e^T \mathbf{b}_e dv_e - \bigcup_{e=1}^{n_r} \int_{\partial v_e} \mathbf{N}_e^T \mathbf{t}_e da_e = \mathbf{0}. \quad (5.47)$$

5.2.3 Algorithmisch konsistente Linearisierung

Gleichung (5.47) stellt ein nichtlineares Gleichungssystem für die Verschiebungen in den Elementknoten der finiten Elemente dar. Die Lösung dieses nichtlinearen Gleichungssystems erfordert dessen Linearisierung. Hierzu wird im FE-Programm ABAQUS ein Newton-Verfahren verwendet, wie es schon zur Lösung der gewöhnlichen Differentialgleichungen der zuvor diskutierten Materialmodelle verwendet wurde. Dabei muss in jedem Zeitschritt und Iterationsschritt des Newton-Verfahrens die Jacobi-Matrix ermittelt werden. Diese berücksichtigt auch den Teil, der durch das Materialmodell des Benutzers definiert wird. Dieser Teil der Materialtangente sowie die Cauchy-Spannung müssen vom Benutzer in jedem

Gauß-Punkt und in jedem Iterationsschritt der globalen Iteration des Newton-Verfahrens am Ende des Inkrementes bereitgestellt werden. Die Berechnungsvorschrift ist durch die Beziehung

$$\mathbb{K}_{n+1} = \frac{1}{J_{n+1}} \frac{1}{\Delta t} \frac{\partial \boldsymbol{\tau}_{n+1}}{\partial \mathbf{D}_{n+1}} \quad (5.48)$$

gegeben. Durch $n + 1$ werden die Größen am Inkrementende charakterisiert. Die Schnittstelle zwischen dem FE-Programm ABAQUS und dem lokalen Materialmodell des Nutzers erfolgt durch das Unterprogramm Umat.f. Hierfür werden von ABAQUS in jedem Iterationsschritt der Deformationsgradient am Beginn und am Ende des Inkrementes zur Verfügung gestellt. Der Nutzer führt die Integration der differentiellen Materialgleichungen durch und gibt, wie oben erwähnt, die Spannungen und die Materialtangente am Ende des Inkrementes zurück. Im Fall des Zweiskalenmodells wurde die Materialtangente numerisch bestimmt. Für den Fall des elastisch-viskoplastischen Taylor-Modells ergibt sich die Materialtangente für einen Polykristall, bestehend aus M Einkristallen mit jeweiliger Volumenfraktion ν_i , aus den Materialtangente der Einkristalle durch die Vorschrift

$$\bar{\mathbb{K}}^{evp} = \sum_{i=1}^M \nu_i \mathbb{K}_i^{evp}. \quad (5.49)$$

Die Einkristallmaterialtangente \mathbb{K}^{evp} ist im Anhang D hergeleitet. Für das Komponentenmodell, das auf der Homogenisierung der viskoplastischen Einkristallgleichungen basiert, ist zur Bestimmung der Tangente eine Zerlegung in Kugel- und Deviatoranteil sinnvoll

$$\bar{\mathbb{K}}^{vp} = \bar{\mathbb{K}}^{vp^\circ} + \bar{\mathbb{K}}^{vp'}. \quad (5.50)$$

Dies erfolgt analog zur Bestimmung der makroskopischen Spannung (vergleiche Gleichung (4.16)). Der Kugelanteil kann mit der Hilfe des Kompressionsmoduls und der Determinante des Deformationsgradienten bestimmt werden

$$\bar{\mathbb{K}}^{vp^\circ} = 3K J_{n+1} \mathbb{P}_1^I. \quad (5.51)$$

Der deviatorische Anteil ist analog zur makroskopischen deviatorischen Spannung $\bar{\boldsymbol{\tau}}'$ bestimmbar

$$\bar{\mathbb{K}}^{vp'} = \int_{SO(3)} \nu_I \mathbb{K}^{vp'}(\bar{\mathbf{D}}', \mathbf{Q}, \bar{\boldsymbol{\tau}}^C) dQ + \int_{SO(3)} f^A(\mathbf{Q}) \mathbb{K}^{vp'}(\bar{\mathbf{D}}', \mathbf{Q}, \bar{\boldsymbol{\tau}}^C) dQ. \quad (5.52)$$

Er besteht aus einem isotropen und anisotropen Anteil. Die Materialtangente des viskoplastischen Einkristalls $\mathbb{K}^{vp'}$ ergibt sich aus der Jacobi-Matrix des Newton-Verfahrens aus Gleichung (5.21) für die Spannungsberechnung von $\boldsymbol{\tau}'_{n+1}$

$$\mathbb{K}^{vp'} = -\frac{1}{J_{n+1}} \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{\partial \mathbf{G}_{n+1}}{\partial \boldsymbol{\tau}'_{n+1}} \right)^{-1}. \quad (5.53)$$

Die Herleitung ist in Anhang E zu finden. Da für die Berechnung der makroskopischen, deviatorischen Spannung im Komponentenmodell die Jacobi-Matrix bei der Auswertung des Integrales über den Orientierungsraum für jeden Gitterpunkt bestimmt wird, kann diese gleichzeitig für die Auswertung von Gleichung (5.52) genutzt werden. Damit wird der Rechenaufwand nur geringfügig erhöht.

Kapitel 6

Simulation der plastischen Anisotropie

In den Kapiteln 2 bis 4 wurden drei Materialmodelle vorgestellt. Zum einen ein Taylor-Modell basierend auf einer diskreten Approximation der OVF (DT-Modell) und zum anderen ein Taylor-Modell basierend auf einer kontinuierlichen Beschreibung der OVF mit Hilfe von Mises-Fisher-Verteilungen (KT-Modell). Zusätzlich wurde in Kapitel 4 ein Zweiskalenmodell eingeführt, das die OVF durch einen Texturkoeffizienten vierter Stufe berücksichtigt (ZS-Modell). Die Implementation der Modelle in das FE-Programm ABAQUS wurde diskutiert. In diesem Kapitel werden diese Modelle verwendet, um das plastische Verformungsverhalten von Aluminium unter Nutzung von ABAQUS zu simulieren. Dabei ist die induzierte plastische Anisotropie von besonderem Interesse. Die Beschreibung der plastischen Anisotropie kann durch unterschiedliche Versuche und Simulationen dieser Versuche erfolgen. In dieser Arbeit sollen die Verteilungen der Fließspannungen und der R -Werte, die in der Blechebene eines gewalzten Aluminiumbleches auftreten, untersucht werden. Als weiteres Maß der plastischen Anisotropie wird die sich einstellende Zipfelbildung, die beim Tiefziehen gewalzter Bleche auftritt, untersucht. Neben dem Vergleich der Modelle untereinander erfolgt ein Vergleich der Berechnungsergebnisse mit experimentell ermittelten Werten für die oben genannten Anisotropiemaße.

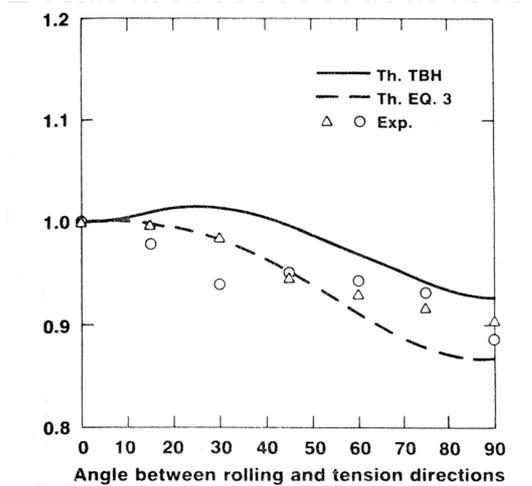
6.1 Fließspannungen und R -Werte

Neben den Fließspannungen charakterisieren die R -Werte die plastische Anisotropie eines gewalzten polykristallinen Bleches. Sie werden durch Zugversuche in der Blechebene an herausgeschnittenen Proben bestimmt. Der R -Wert wurde ursprünglich durch Lankford et al. (1950) eingeführt und trägt deshalb auch den Namen Lankford-Koeffizient. In Gleichung (4.71) in Kapitel 4.5.1 ist der R -Wert in Abhängigkeit der Dehnrates dargestellt. In der ursprünglichen Form wird hingegen das Verhältnis der plastischen Dehnung in Breiten- zur plastischen Dehnung in Dickenrichtung verwendet. Diese Formulierung hat den Nachteil einer starken Abhängigkeit von der Dehnung, weshalb in dieser Arbeit die Variante aus Gleichung (4.71) benutzt wird.

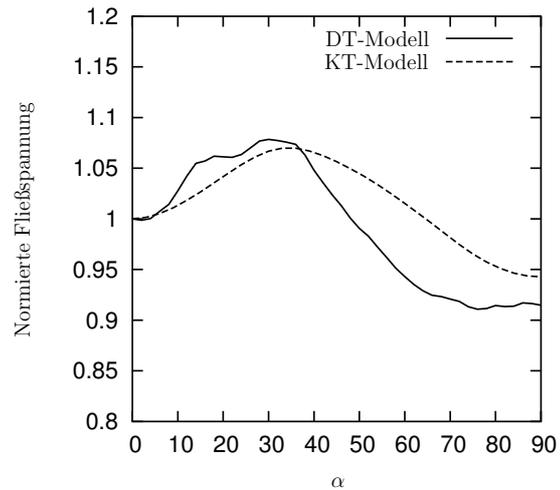
6.1.1 Blech mit vier Texturkomponenten

Für das folgende Beispiel werden die Texturkomponenten eines gewalzten Aluminiumbleches verwendet, die bereits in Kapitel 3.3.2 eingeführt wurden. Die Komponenten i , charakterisiert durch ihre mittleren Orientierungen \mathbf{Q}_i , ihre Halbwertsbreiten b_i und ihre Volumenanteile ν_i , sind in Tabelle 3.1 angegeben. Die entsprechenden $\{100\}$ -Polfiguren des Experiments, der Komponentenanpassung und der einzelnen Komponenten sind in Abbildung 3.2 dargestellt. Diese Texturkomponenten wurden der Arbeit von Lege et al. (1989) entnommen.

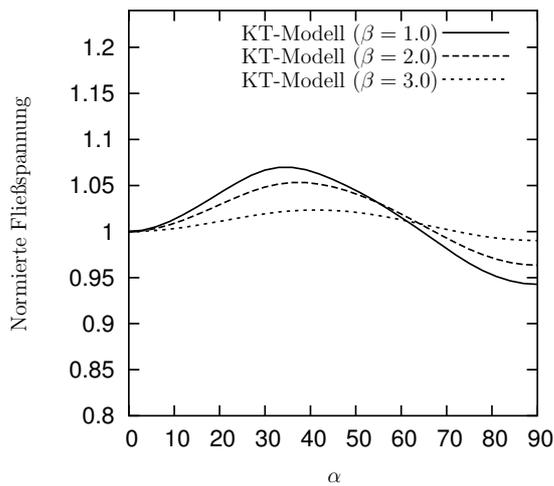
Lege et al. führten für das gewalzte Blech mit diesen Komponenten verschiedene Versuche durch, um die plastische Anisotropie des Bleches quantitativ zu bestimmen. Unter anderem ermittelten sie die R -Wertverteilung und die Verteilung der Fließspannungen in der Blechebene. Neben der experimentellen Bestimmung der Verteilungen führten Lege et al. auch Berechnungen mit der Hilfe eines Taylor-Bishop-Hill-Modells und eines Modells von Barlat und Lian (1989) durch. Im Folgenden werden das DT-, KT- und ZS-Modell für die Simulation der Fließspannungs- und R -Wertverteilung genutzt. Dazu werden für das DT- sowie das ZS-Modell in jedem Gauß-Punkt des Finite-Elemente-Modells die mittleren Orientierungen und die Volumenanteile der Komponenten zur Approximation der OVF verwendet. Für das KT-Modell werden zusätzlich die Halbwertsbreiten berücksichtigt. Das FE-Modell besteht in diesem Fall aus einem finiten Element. Für



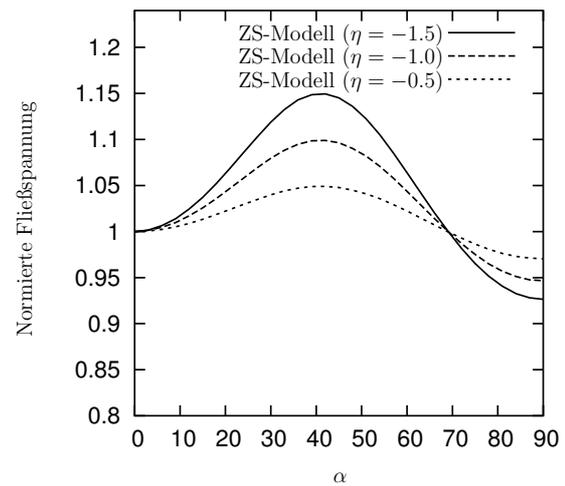
(a) Experimentelle und numerische Ergebnisse nach Lege et al. (1989)



(b) Ergebnisse des DT- und KT-Modells



(c) Ergebnisse des KT-Modells bei Variation der Halbwertsbreiten

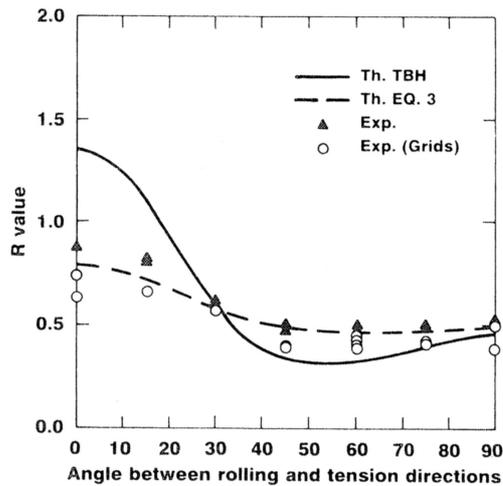


(d) Ergebnisse des ZS-Modells bei Variation der Variable η

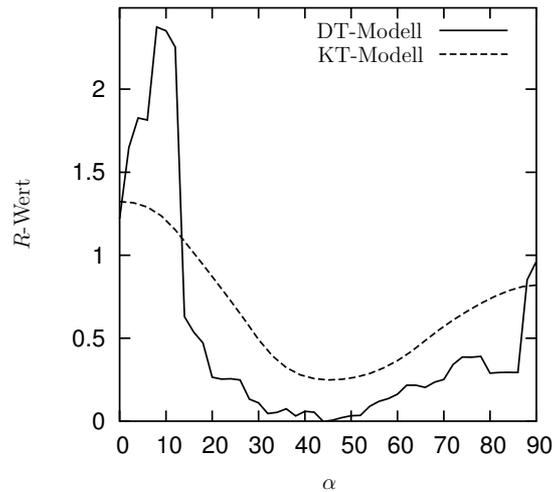
Abbildung 6.1: Vergleich der Fließspannungsverteilungen in der Blechebene für ein gewalztes Aluminiumblech nach Lege et al. (1989)

dieses Element werden Zugversuche simuliert. Dabei werden mehrere Berechnungen durchgeführt, wobei die Probe jeweils um einen Winkel α ($0^\circ \leq \alpha \leq 90^\circ$) bezogen auf die Walzrichtung gedreht wird, sodass man eine Fließspannungs- und R -Wertverteilung über den Winkel α erhält.

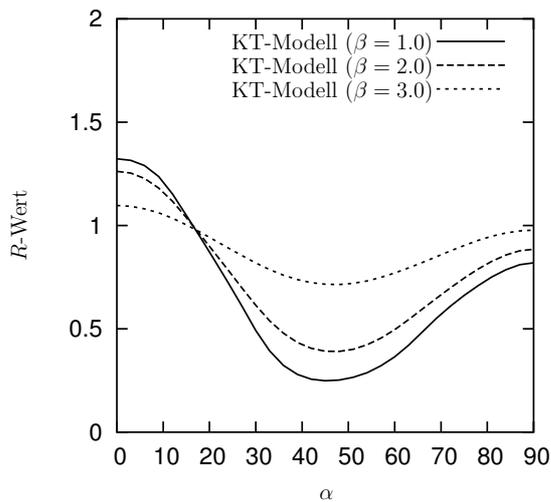
In Abbildung 6.1 (b) ist die berechnete normierte Fließspannungsverteilung des



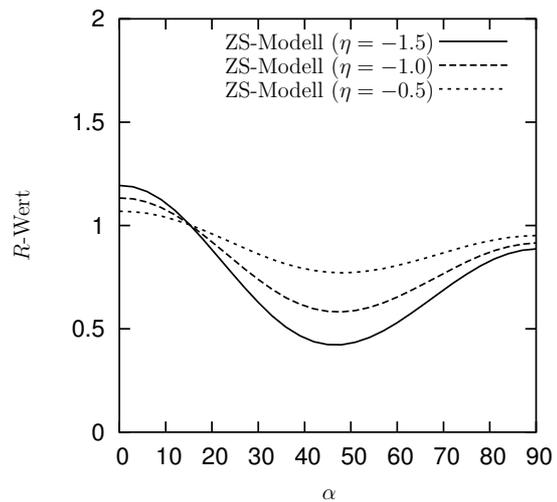
(a) Experimentelle und numerische Ergebnisse nach Lege et al. (1989)



(b) Ergebnisse des DT- und KT-Modells



(c) Ergebnisse des KT-Modells bei Variation der Halbwertsbreiten



(d) Ergebnisse des ZS-Modells bei Variation der Variable η

Abbildung 6.2: Vergleich der R -Wertverteilungen in der Blechebene für ein gewalztes Aluminiumblech nach Lege et al. (1989)

KT- und des DT- Modells dargestellt. Vergleicht man diese mit den berechneten Verteilungen von Lege et al. für das Taylor-Bishop-Hill-Modell (TBH-Modell) in Abbildung 6.1 (a), so erkennt man eine gute Übereinstimmung des TBH-Modells mit dem KT-Modell. Das DT-Modell liefert ebenfalls eine akzeptable Fließkurve. Im Falle der R -Wertverteilung des DT-Modells in Abbildung 6.2 (b) kann man im

Vergleich zur Verteilung des TBH-Modells in Abbildung 6.2 (a) aber nicht mehr von einer akzeptablen Lösung sprechen. Der Grund ist in der viel geringeren Anzahl berücksichtigter Einkristalle beim DT-Modell im Vergleich zum TBH-Modell von Lege et al. zu suchen. Das KT-Modell, das im Gegensatz zum DT-Modell auch die Nachbarschaft der mittleren Orientierungen berücksichtigt, liefert auch bei den R -Werten (Abbildung 6.2 (b)) eine ähnliche Verteilung wie das TBH-Modell in Abbildung 6.2 (a).

Vergleicht man die Verteilungen der Fließspannungen und der R -Werte der drei Taylor-Modelle mit den experimentellen Ergebnissen in den Abbildungen 6.1 (a) und 6.2 (a), so wird für jedes Modell eine deutliche Überschätzung der plastischen Anisotropie gegenüber dem Experiment erkennbar. Um diese Überschätzung zu verringern, ist es im Fall des KT-Modells möglich, die Halbwertsbreiten der verwendeten Texturkomponenten zu erhöhen. Damit wird eine Senkung der Texturschärfe vorgenommen. Zu diesem Zweck wird ein Parameter β eingeführt, der mit den ursprünglichen Halbwertsbreiten b_i der Komponenten multipliziert wird. Das Ergebnis der Fließspannungsverteilung in Abbildung 6.1 (c) zeigt, dass bei einer Erhöhung der Halbwertsbreiten die experimentellen Werte in Abbildung 6.1 (a) gut wiedergegeben werden können. Der gleiche Effekt kann auch beim Vergleich der entsprechenden Verteilungen der R -Werte in den Abbildungen 6.2 (c) und 6.2 (a) festgestellt werden.

Beim ZS-Modell ist der Anisotropieeinfluss durch den Texturkoeffizienten \mathbb{A}' mit Hilfe des Parameters η in der Fließregel steuerbar. Bei einer geeigneten Wahl dieses Parameters ist es ebenfalls möglich die Fließspannungs- (Abbildung 6.1 (d)) und die R -Wertverteilungen (Abbildung 6.2 (d)) an die experimentellen Verteilungen anzupassen. Ein hoher Einfluss des Texturkoeffizienten ($\eta = -1.5$) führt zu einer starken Überschätzung der plastischen Anisotropie.

6.1.2 Blech mit Textur aus Simulation der ebenen Kompression

Diesem Beispiel liegt eine Textur zu Grunde, die mit Hilfe des DT-Modells für die Simulation der ebenen Kompression bestimmt wurde (Abbildung 6.3 (a)). Die Dickenreduktion betrug 90%. Es wurden 1000 Einkristalle verwendet, die ursprünglich isotrop im Orientierungsraum verteilt waren. Diese 1000 Kristalle werden nun für das DT-Modell zur Berechnung der Fließspannungen und der R -

Wertverteilungen in der Blechebene benutzt. In Kapitel 3.4.2 wurde durch Lösung

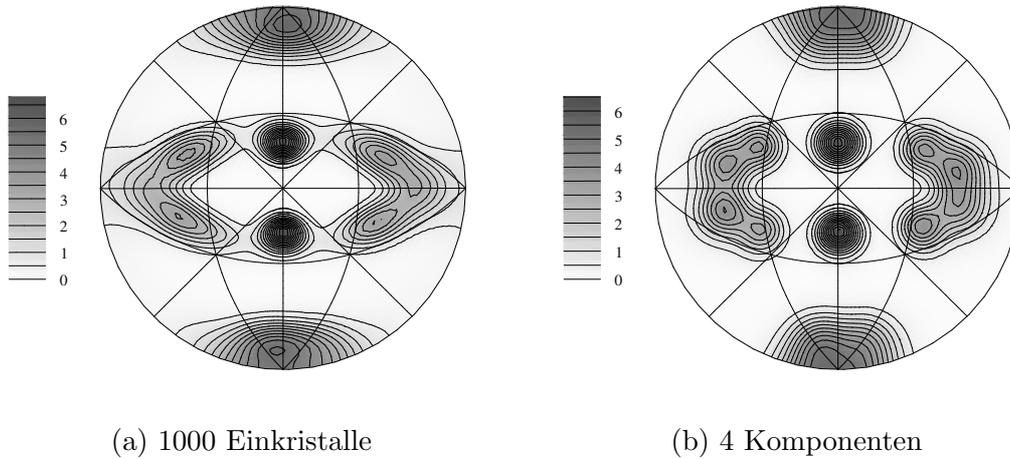


Abbildung 6.3: $\{111\}$ -Polfigur des DT-Modells für die Simulation der Ebenen Kompression (a). $\{111\}$ -Polfigur berechnet aus vier Texturkomponenten (b). (Horizontale Achse: Querrichtung, Vertikale Achse: Walzrichtung)

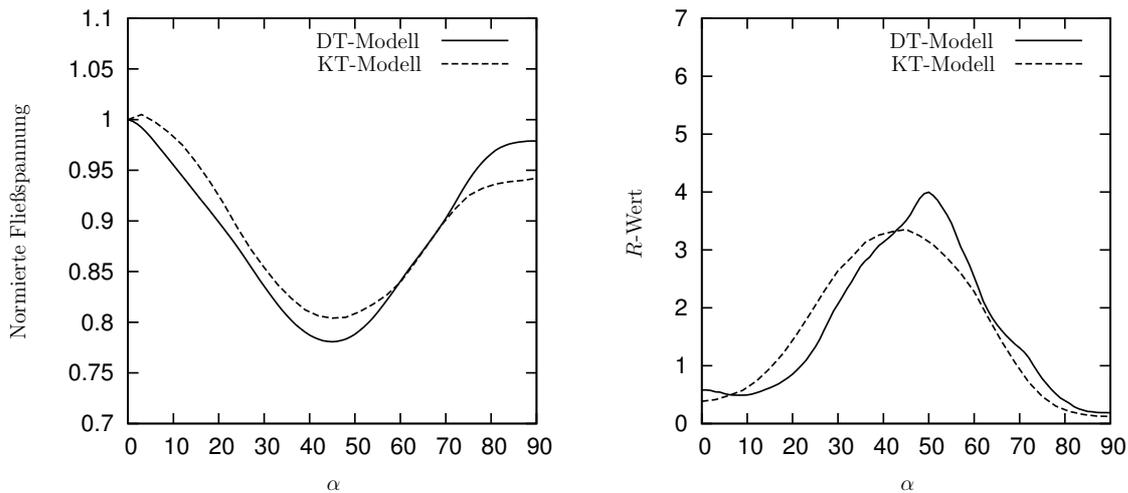


Abbildung 6.4: Normierte Fließspannungs- und R -Wertverteilungen in der Blechebene für das KT- und das DT-Modell

eines Optimierungsproblems eine OVF bestehend aus vier Texturkomponenten bestimmt, die an die oben beschriebene Textur angepasst wurde. Die entsprechenden Komponenten sind in Tabelle 3.2 aufgelistet. Die entsprechenden $\{100\}$ - und $\{111\}$ -Polfiguren sind in den Abbildungen 3.3 und 6.3 dargestellt. Sie gelten im Folgenden als Eingangsparameter für das KT-Modell.

Die Ergebnisse für die Verteilungen der Fließspannungen und der R -Werte beider Modelle in Abbildung 6.4 zeigen eine gute Übereinstimmung. Im Falle des

KT-Modells ist die Anzahl der benötigten Variablen zur Bestimmung der Simulationsergebnisse allerdings deutlich geringer. Es werden 16 Variablen pro Integrationspunkt des FE-Modells benötigt. Bei einer Anzahl von vier Komponenten werden pro Komponente drei Eulerwinkel und eine kritische Schubspannung benötigt. Das DT-Modell verwendet hingegen 10000 Variablen pro Integrationspunkt. Bei einer Anzahl von 1000 Einkristallen werden pro Einkristall 9 Komponenten zur Speicherung von $\tilde{\mathbf{F}}$ und eine kritische Schubspannung benötigt. Für den Fall der reinen Texturbeschreibung wurde die Reduktion der Parameter bereits in Kapitel 3 diskutiert.

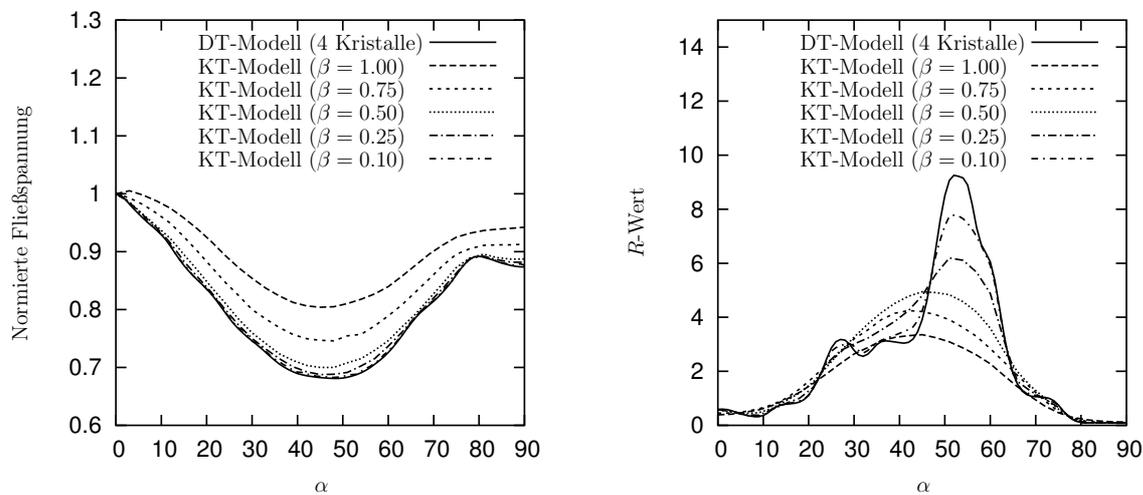


Abbildung 6.5: Vergleich der normierten Fließspannungs- und R -Wertverteilungen in der Blechebene des KT-Modells, unter Variation der Halbwertsbreiten, und des DT-Modells, unter Verwendung der mittleren Orientierungen der Texturkomponenten

Im Beispiel 6.1.1 wurde gezeigt, dass eine Erhöhung der Halbwertsbreiten der Texturkomponenten beim KT-Modell zu einer guten Übereinstimmung der berechneten Fließspannungen und R -Werte mit den entsprechenden experimentellen Werten führt. In Abbildung 6.5 sind dagegen Fließspannungen und R -Werte für den Fall $b_i \rightarrow 0$ dargestellt. Das führt dazu, dass die Lösungen des KT-Modells mit fallenden Halbwertsbreiten immer näher zu den Lösungen des DT-Modells tendieren, wenn im Fall des DT-Modells die mittleren Orientierungen der Texturkomponenten verwendet werden, die als Eingangsparameter für das KT-Modell dienen.

6.2 Tiefziehsimulation

Der Tiefziehprozeß von ein- und polykristallinen Blechen ist zum Studium von deren plastischer Anisotropie gut geeignet. Häufig werden Näpfe, die aus dem Tiefziehen kreisförmiger Blechabschnitte entstehen, untersucht. Treten auf dem oberen Rand des Napfes Erhöhungen entlang des Umfanges auf, so nennt man diese Zipfel. Man spricht auch von einer Zipfelbildung, die in erster Linie durch die Textur des Bleches bestimmt wird. Das bedeutet, dass bei der Verwendung einer isotropen Orientierungsverteilung im Blech in der Regel keine Zipfelbildung beobachtet wird. In Abbildung 6.6 ist ein tiefgezogener Napf aus Aluminium dargestellt. Hier treten Zipfel in einem Winkel von 0° und 90° zur Walzrichtung auf. Vier Zipfel pro Napf entsprechen dem in der industriellen Herstellung von Blechen am häufigsten auftretenden Fall. Allerdings ist dies stark vom Herstellungsprozess und der verwendeten Legierung abhängig (Engler und Kalz, 2004).



Abbildung 6.6: Zipfelbildung eines tiefgezogenen Napfes aus Aluminium (Engler und Kalz, 2004)

Die Geometrie einer Tiefziehapparatur ist in Abbildung 6.7 dargestellt. Das Blech wird dabei auf die Matrize gelegt und durch den Stempel in diese hineingepresst. Der Niederhalter verhindert dabei ein Abheben des Bleches von der Matrize und

beugt somit einer möglichen Faltenbildung im Blech vor.

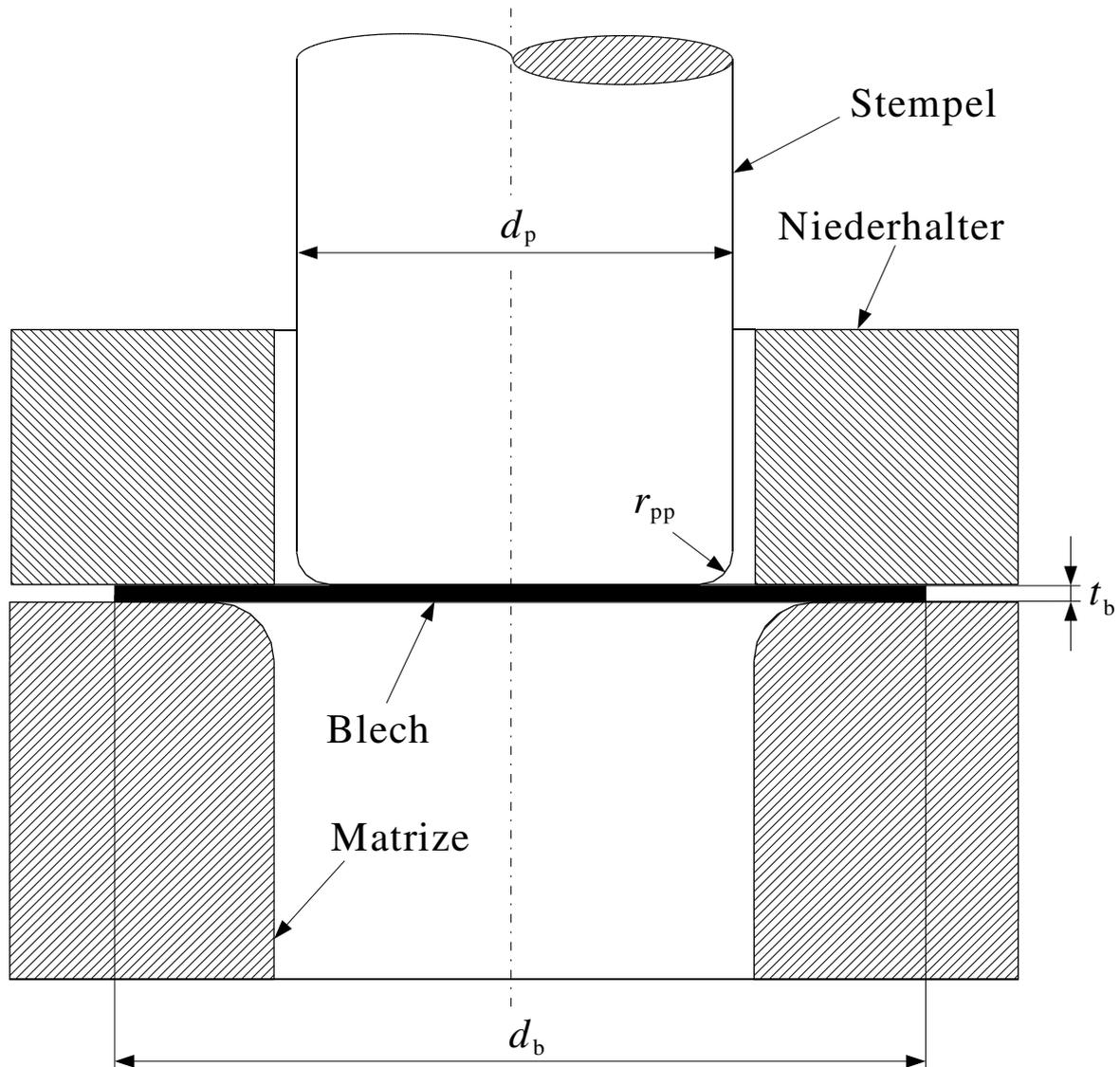


Abbildung 6.7: Geometrie der Apparatur für den Tiefziehprozeß

Tucker (1961) untersuchte das Verhalten von einkristallinem Aluminium während des Tiefziehversuches. Hierbei wurden experimentelle Zipfelprofile für Standardlagen des Einkristalls bestimmt. Desweiteren nutzte Tucker ein einfaches Modell, das auf dem Kriterium der maximal auftretenden Schubspannung im Einkristall beruht, um die Zipfelbildung qualitativ zu ermitteln. Dieses Modell wurde im Weiteren auf polykristallines Materialverhalten übertragen (siehe z.B. Kanetake et al., 1983, 1985; Van Houtte et al., 1993). In diesen Arbeiten werden Formulier-

rungen für die Zipfelhöhe hergeleitet, die von der Tiefziehgeometrie, der Geometrie des Bleches und der auftretenden Dehnungsverteilung in der Blechebene abhängig sind. Der numerische Aufwand der Modelle hängt dabei stark von den implementierten, konstitutiven Gleichungen ab. Im Gegensatz zur Arbeit von Tucker (1961) werden mit diesen Modellen quantitative Aussagen zur Zipfelhöhe getroffen.

Eine weitere Möglichkeit Tiefziehprofile zu bestimmen, besteht in der Nutzung der Finite-Elemente-Methode. Bei dieser Methode können die Geometrie des Bleches und der Tiefziehvorrichtung vollständig berücksichtigt werden. Das Hauptproblem für die FE-Berechnung besteht in der Wahl des Materialmodells. Das Ziel ist es, ein Materialmodell zu verwenden, das mit vertretbarem Rechenaufwand eine hinreichende Abbildung der Zipfelprofile zulässt. Am häufigsten werden makroskopische Materialgesetze (siehe z.B. Barlat et al., 1997a; Hu et al., 1998; Choi et al., 2000; Yoon et al., 2006) in ein FE-Programm implementiert. Der Vorteil dieser Modelle ist die im Vergleich zu anderen Modellen geringe Rechenzeit. Die Nachteile der Modelle sind die aufwendige Bestimmung der Materialparameter und die in der Regel nicht berücksichtigte Texturentwicklung. Deswegen werden Polykristallmodelle mit der FE-Methode kombiniert. Um den Rechenaufwand dabei möglichst gering zu halten, wird in vielen Fällen die Taylor-Annahme zur Homogenisierung im Gauß-Punkt des Finite-Elemente-Modells verwendet (siehe z.B. Becker et al., 1993; Balasubramanian und Anand, 1996; Miehe und Schotte, 2004). Die ausreichende Berücksichtigung der Textur erfordert aber eine relativ hohe Anzahl von Einkristallen pro Gauß-Punkt des FE-Modells und somit einen immer noch zu hohen Rechenaufwand.

Aus diesem Grund führten Raabe et al. (2001, 2002a,b) und Raabe und Roters (2004) die „Texturkomponentenmethode der Kristallplastizität“ ein. In dieser Methode werden die Texturkomponenten eines Bleches, die durch eine mittlere Orientierung und eine Halbwertsbreite beschrieben werden können, durch eine Anzahl einzelner Kristallite approximiert. Diese Kristallite werden im FE-Modell über die Dicke des vernetzten Bleches „statistisch“ verteilt. Somit ergeben sich die Texturkomponenten nur noch als Summe der gewichteten Kristallite über die Blechdicke. Im Gauß-Punkt wird ebenfalls die Taylor-Annahme getroffen. Der Vorteil dieser Methode ist die relativ geringe Anzahl an Einkristallen, die für die Simulation des Tiefziehprozesses benötigt wird. Damit folgt eine im Vergleich zu anderen Polykristallmodellen geringe Rechenzeit. Der Nachteil dieses Modells ist

eine starke Überschätzung der plastischen Anisotropie in einem lokalen Bereich des FE-Modells. Das bedeutet z.B., dass sich die Bestimmung von R -Werten und Fließspannungen für dieses Modell als schwierig darstellt. Eine Abschwächung der Anisotropie erfolgt erst durch Mittelung über das FE-Modell. Ein anderes Problem eines derartigen Ansatzes ist die Reproduzierbarkeit der erzielten Ergebnisse. So wird in den Arbeiten von Raabe et al. (2001, 2002a,b) und Raabe und Roters (2004) nicht im Detail beschrieben, wie die Orientierungen auf das FE-Netz verteilt werden. Berechnet man die OVF durch das gewichtete Mittel der einzelnen Orientierungen über die Blechdicke, sind somit unterschiedliche Verteilungen der Kristallite im Ort denkbar.

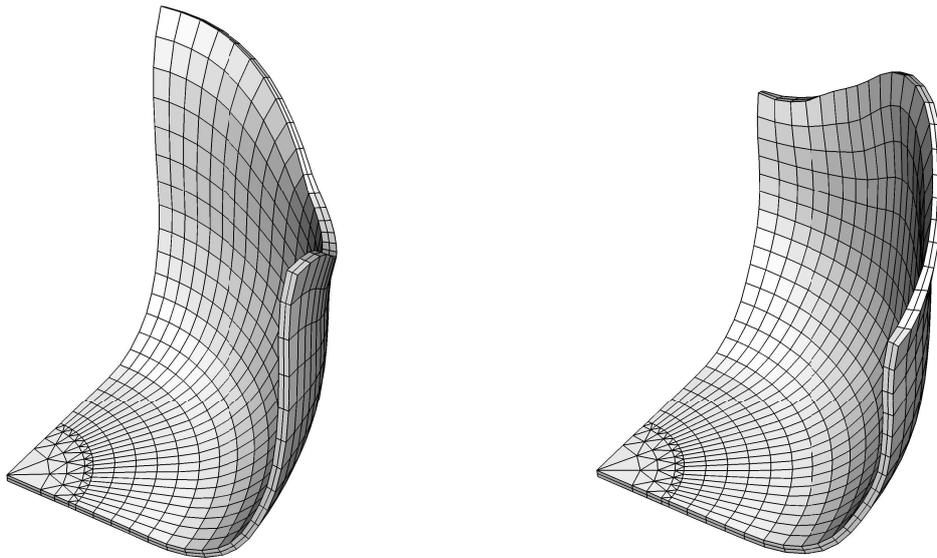
Das KT-Modell, das in dieser Arbeit eingeführt wurde, stellt ebenfalls ein Modell dar, das besonders für Texturkomponenten geeignet ist. Im Gegensatz zum Modell nach Raabe et al. (2001) werden hier in jedem Gauß-Punkt des FE-Modells dieselben Texturkomponenten am Beginn der Berechnung verwendet. Damit wird die Anisotropie lokal nur aufgrund der Taylor-Annahme überschätzt und ist damit geringer als im Modell nach Raabe et al. (2001). Außerdem werden die Halbwertsbreiten der Texturkomponenten direkt in die FE-Berechnung einbezogen. Die Anzahl der Parameter unterscheidet sich in beiden Fällen nur geringfügig. Da die Integration über den Orientierungsraum mit einem Mehraufwand verbunden ist, ist der Rechenaufwand des Modells nach Raabe et al. (2001) geringer. Er sollte bei der Verwendung einer gleichen Anzahl von Kristalliten im Bereich des DT-Modells liegen.

6.2.1 Sensitivität der Zipfelhöhe

Wie bereits zuvor erwähnt, ist die Zipfelbildung in erster Linie eine Folge der Texturierung des Bleches. In diesem Beispiel soll gezeigt werden, dass bereits eine geringfügige Änderung der Textur zu einer deutlichen Änderung des Zipfelprofils führen kann.

In Bezug auf Abbildung 6.7 wurden die Geometrieparameter wie folgt gewählt: Blechdurchmesser $d_b = 60\text{mm}$, Stempeldurchmesser $d_p = 33.3\text{mm}$, Blechdicke $t_b = 0.5\text{mm}$ und der Profilradius des Stempels $r_{pp} = 6\text{mm}$. Diese Geometriedaten werden auch im nächsten Beispiel verwendet. Sie sind der Arbeit von Engler und Kalz (2004) entnommen. Für dieses und die folgenden Beispiele kann im Blech eine

orthotrope Probensymmetrie der OVF angenommen werden. Aus diesem Grund wird nur ein Viertel des gesamten Bleches modelliert. In der FE-Simulation wurde das Blech mit Volumenelementen der Typen 960 C3D8H und 132 C3D6H vernetzt. Diese Vernetzung wird auch für die nachfolgenden Beispiele gewählt. Auf die Verwendung von Schalenelementen soll trotz einer zur erwartenden Verbesserung der Simulationsergebnisse verzichtet werden.



(a) $\varphi_1^K = 0^\circ, \Phi^K = 45^\circ, \varphi_2^K = 0^\circ$ (Goss-Lage)

(b) $\varphi_1^K = 45^\circ, \Phi^K = 45^\circ, \varphi_2^K = 0^\circ$

Abbildung 6.8: Deformierte FE-Struktur nach Simulation des Tiefziehprozesses für das DT-Modell für zwei verschiedene Einkristallorientierungen

Abbildung 6.8 zeigt die tiefgezogenen Bleche, die mit Hilfe des DT-Modells, unter Berücksichtigung unterschiedlicher Ausgangstexturen, simuliert wurden. Die Texturen werden für Abbildung 6.8(a) durch die Goss-Lage ($\varphi_1^K = 0^\circ$) und für Abbildung 6.8(b) durch eine rotierte Goss-Lage ($\varphi_1^K = 45^\circ$) spezifiziert. In Abbildung 6.9 sind die Zipfelprofile für diese beiden Orientierungen dargestellt. Zusätzlich sind die Profile für die Orientierungen einiger Zwischenwerte ($\varphi_1^K = 10^\circ, 20^\circ, 30^\circ$) und das Profil für die um den Winkel $\varphi_1^K = 90^\circ$ gedrehte Goss-Lage dargestellt. Betrachtet man zunächst nur die Profile der Goss-Lage (Abbildung 6.9(a)) und der um 10° gedrehten Goss-Lage (Abbildung 6.9(b)), so besitzen beide ihre Ma-

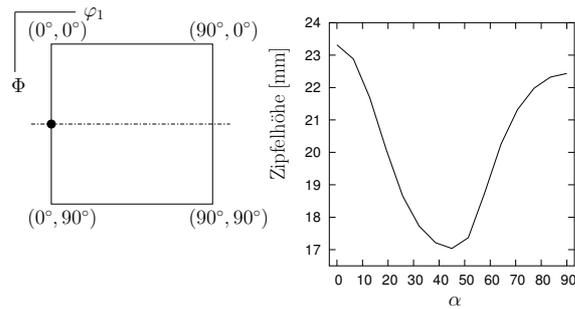
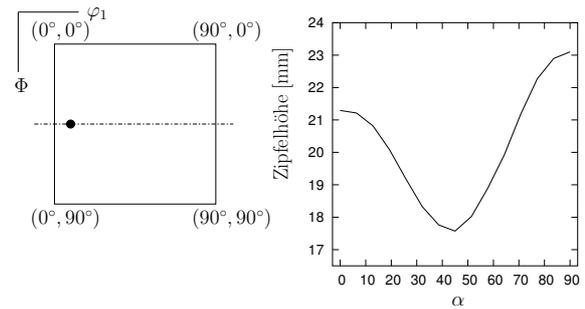
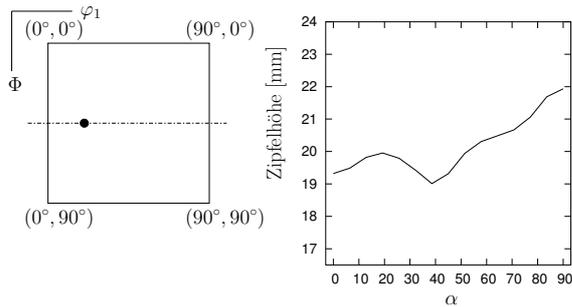
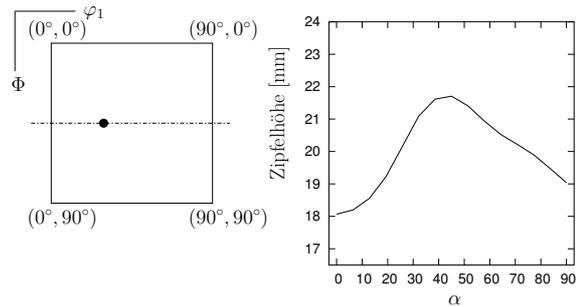
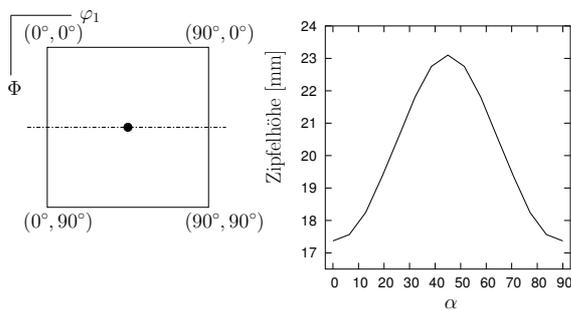
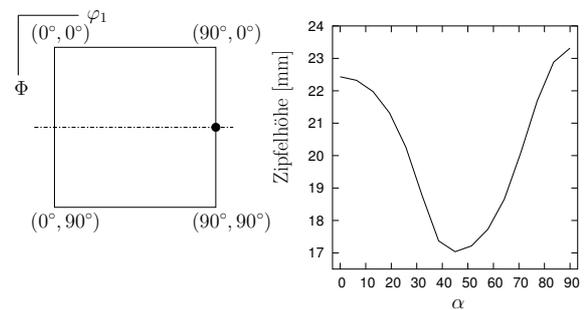
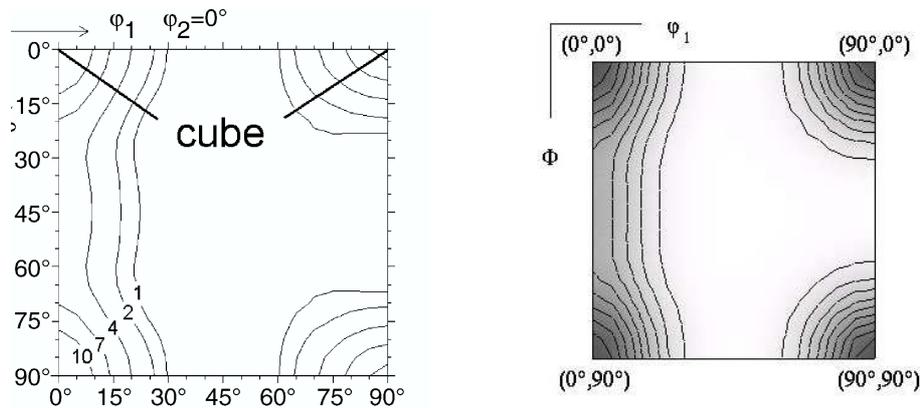
(a) $\varphi_1^K = 0^\circ, \Phi^K = 45^\circ, \varphi_2^K = 0^\circ$ (b) $\varphi_1^K = 10^\circ, \Phi^K = 45^\circ, \varphi_2^K = 0^\circ$ (c) $\varphi_1^K = 20^\circ, \Phi^K = 45^\circ, \varphi_2^K = 0^\circ$ (d) $\varphi_1^K = 30^\circ, \Phi^K = 45^\circ, \varphi_2^K = 0^\circ$ (e) $\varphi_1^K = 45^\circ, \Phi^K = 45^\circ, \varphi_2^K = 0^\circ$ (f) $\varphi_1^K = 90^\circ, \Phi^K = 45^\circ, \varphi_2^K = 0^\circ$

Abbildung 6.9: Abhängigkeit des Zipfelprofils von der Textur des tiefgezogenen Bleches, die in diesem Fall nur durch die Orientierung eines Einkristalls bestimmt wird.

xima bei einem Winkel α zur ursprünglichen Walzrichtung von 0° und 90° , wobei die Lage der absoluten Maxima beider Fälle miteinander vertauscht ist. Für den Winkel $\varphi_1^K = 20^\circ$ (Abbildung 6.9(c)) ergibt sich ein deutlich flacheres Zipfelprofil als in den beiden Fällen zuvor. Für den Winkel $\varphi_1^K = 30^\circ$ (Abbildung 6.9(d)) bildet sich ein sichtbar anderes Profil aus. Das Maximum liegt hier ungefähr bei $\alpha = 45^\circ$, während die Minima der Zipfelhöhe bei $\alpha = 0^\circ$ und $\alpha = 90^\circ$ zu finden

sind. Das Profil für den Winkel $\varphi_1^K = 45^\circ$ (Abbildung 6.9(e)) zeigt schließlich eine Symmetrie bezüglich $\alpha = 45^\circ$. Das Profil für den Winkel $\varphi_1^K = 90^\circ$ (Abbildung 6.9(e)) entspricht dem Spiegelbild der Goss-Lage. Fasst man diese Ergebnisse zusammen, so stellt man fest, dass die Lage der Maxima der Zipfelprofile sehr sensitiv gegenüber relativ kleinen Texturänderungen ist.

6.2.2 Würfeltextrur



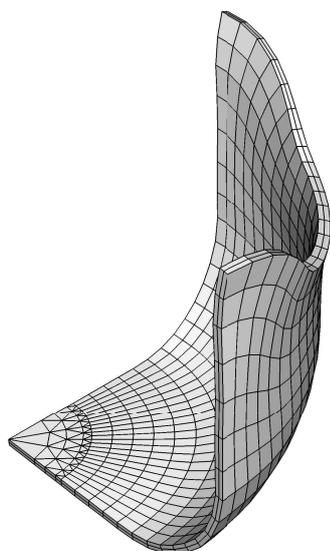
(a) Experiment

(b) Approximation

Abbildung 6.10: $(\varphi_2 = 0^\circ)$ -Schnitte des Orientierungsraumes für eine experimentell bestimmte Würfeltextrur mit Goss-Anteil und deren Approximation durch Texturkomponenten

i	b_i	ν_i	φ_1^i	Φ^i	φ_2^i
1 (Würfellage)	32.5°	0.6	0	0	0
2	27.5°	0.06	0	15°	0
3	27.5°	0.08	0	30°	0
4 (Goss-Lage)	27.5°	0.12	0	45°	0
5	27.5°	0.08	0	60°	0
6	27.5°	0.06	0	75°	0

Tabelle 6.1: Texturkomponenten eines Aluminiumbleches, charakterisiert durch mittlere Orientierungen, Halbwertsbreiten und Volumenanteile, deren OVF in Abbildung 6.10 dargestellt ist.



(a) DT-Modell

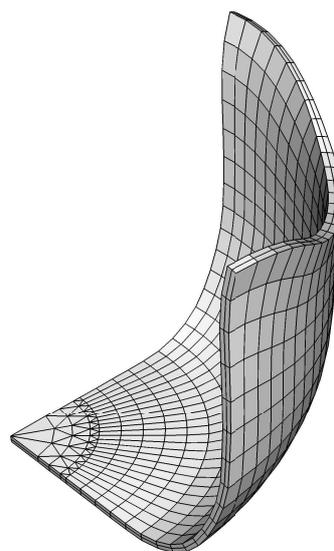
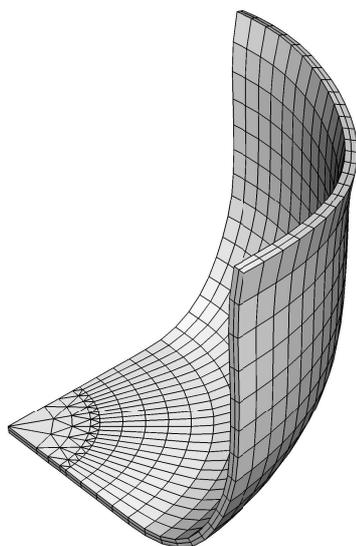
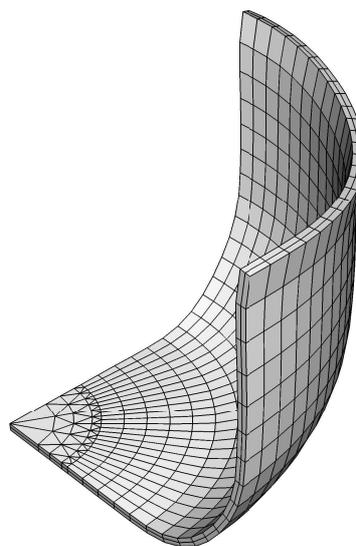
(b) KT-Modell ($\beta = 1$)(c) KT-Modell ($\beta = 2$)(d) ZS-Modell ($\eta = -0.18$)

Abbildung 6.11: Deformierte FE-Struktur nach Simulation des Tiefziehprozesses für das DT-, KT- und ZS-Modell

In diesem Beispiel wird eine Ausgangstextur verwendet, die mit Hilfe von Texturkomponenten an eine experimentell bestimmte Textur angepasst wurde (Ab-

bildung 6.10). Die experimentelle OVF wurde der Arbeit von Engler und Kalz (2004) entnommen. Sie stellt die Rekristallisationstextur eines industriell gefertigten Aluminiumbleches zur Nutzung in der Automobilindustrie dar. Die an diese Textur angepassten Texturkomponenten, charakterisiert durch mittlere Orientierungen, Halbwertsbreiten und Volumenanteile sind in Tabelle 6.1 dargestellt. Die einzelnen Komponenten wurden aus der Würfellage durch eine Drehung um die Walzrichtung des Bleches erzeugt. Sie werden als Startwerte für das KT-Modell verwendet. Für das DT- und das ZS-Modell werden nur die mittleren Orientierungen und die Volumenanteile als Startwerte genutzt.

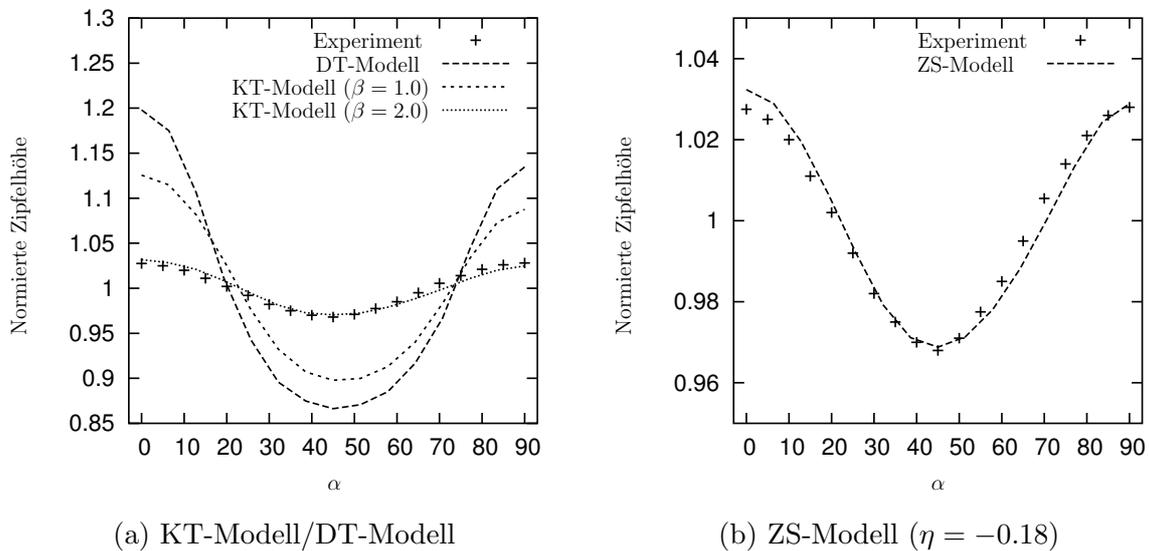


Abbildung 6.12: Vergleich der normierten Zipfelprofile für das KT-, DT- und ZS-Modell mit den Experimenten nach Engler und Kalz (2004)

In Abbildung 6.11 sind die tiefgezogenen Näpfe der drei Modelle dargestellt. Die zugehörigen normierten und die experimentell bestimmten Zipfelprofile findet man in Abbildung 6.12. Hierbei erfolgt eine Überschätzung des experimentellen Profils durch das DT-Modell und das KT-Modell bei der Verwendung der angepassten Halbwertsbreiten ($\beta = 1$). Dieser Effekt wurde bereits im Beispiel 6.1.1 für die simulierten R -Wert- und Fließspannungsverteilungen festgestellt. Erzeugt man durch Erhöhung der Halbwertsbreiten der Texturkomponenten ($\beta = 2$) eine weichere Textur, erzielt man bei der Simulation des Zipfelprofils mit dem KT-Modell eine gute Übereinstimmung mit dem experimentell bestimmten Profil. Auch dieser Effekt wurde bereits in Beispiel 6.1.1 beobachtet. Bei Verwendung des ZS-Modells

kann ebenfalls ein Parameter η gefunden werden, der eine gute Approximation an die experimentellen Ergebnisse zulässt (Abbildung 6.12(b)).

6.2.3 Blech mit vier Texturkomponenten

Für dieses Beispiel werden für das KT-Modell die Texturkomponenten genutzt, die in Kapitel 3.3.2 beschrieben sind und bereits in Kapitel 6.1.1 für die Simulation der R -Wert- und Fließspannungsverteilungen genutzt wurden. Dementsprechend werden die mittleren Orientierungen und Volumenanteile der Komponenten für das DT-Modell und das ZS-Modell genutzt. Die Daten für die Tiefziehgeometrie wurden der Arbeit von Lege et al. (1989) entnommen. Sie sind durch $d_b = 162\text{mm}$, $d_p = 97\text{mm}$, $t_b = 1.24\text{mm}$ und $r_{pp} = 4.75\text{mm}$ gegeben.

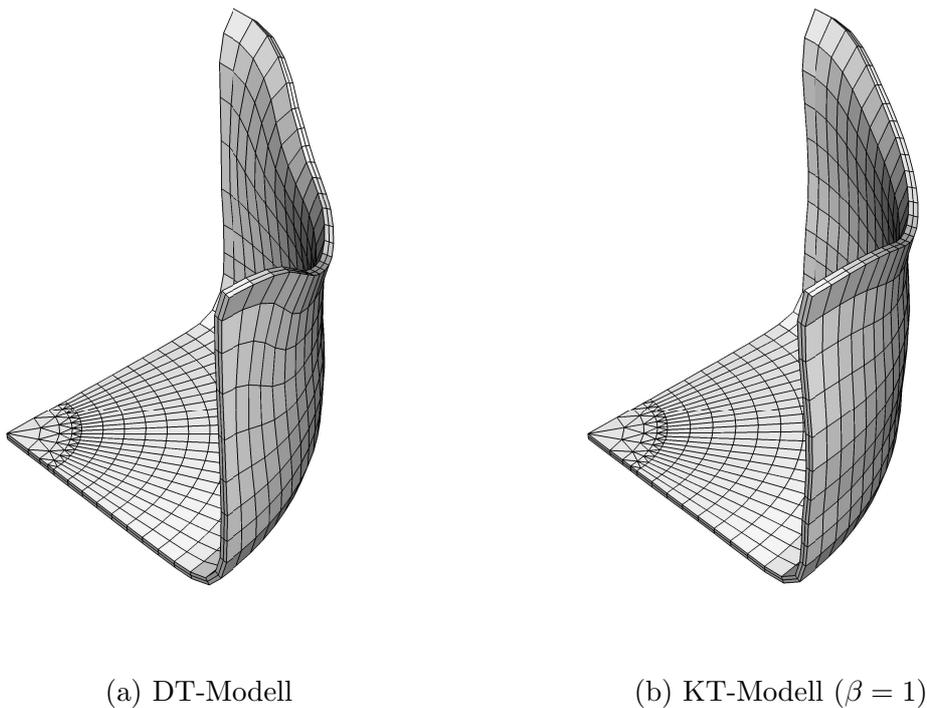


Abbildung 6.13: Deformierte FE-Struktur nach Simulation des Tiefziehprozesses für das DT- und KT-Modell

In Abbildung 6.13 sind die tiefgezogenen Näpfe für das DT- und das KT-Modell ($\beta = 1$) dargestellt. Es ist eine ausgeprägte Zipfelbildung für beide Modelle erkennbar. Ein Vergleich mit dem experimentell bestimmten Profil in Abbildung 6.14 (a) zeigt wie in den bereits diskutierten Beispielen eine deutliche Überschätzung des Zipfelprofils. Für das KT-Modell ist nach einer Erhöhung der Streuung

um die Texturkomponenten ($\beta = 3$) eine gute Wiedergabe der experimentellen Ergebnisse möglich. Für den Fall des ZS-Modells kann wie im zuvor diskutierten Beispiel eine gute Approximation an das Experiment erreicht werden (Abbildung 6.14 (b)).

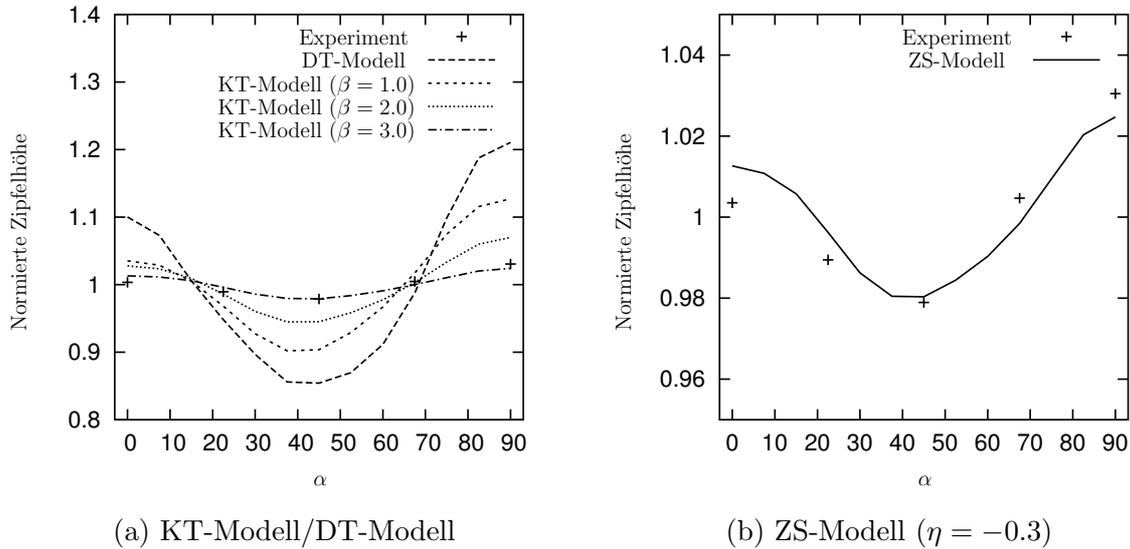


Abbildung 6.14: Vergleich der normierten Zipfelprofile für das KT-, DT- und ZS-Modell mit den Experimenten nach Lege et al. (1989)

6.2.4 Blech mit Textur aus Simulation der ebenen Kompression

Dieses Beispiel stellt eine Erweiterung der Simulationen für die R -Wert- und Fließspannungsverteilungen in Absatz 6.1.2 auf die Berechnung der entsprechenden Zipfelprofile dar. Für die Berechnungen wird dasselbe FE-Modell mit den entsprechenden Geometrieparametern aus den Beispielen 6.2.1 und 6.15 verwendet. Die tiefgezogenen Näpfe des DT-Modells, basierend auf 1000 Einkristallen pro Gauß-Punkt des FE-Modells, und des KT-Modells, basierend auf vier Texturkomponenten pro Gauß-Punkt des FE-Modells, sind in Abbildung 6.16 dargestellt. Die ermittelten Ergebnisse für die normierten und absoluten Zipfelprofile zeigen eine gute Übereinstimmung (Abbildung 6.16). Das führt wie in Kapitel 6.1.2 zu der Schlussfolgerung der Äquivalenz beider Modelle, allerdings mit dem Vorteil des KT-Modells, der deutlich reduzierten Anzahl an Modellparametern. Die Rechenzeiten des KT-Modells sind in diesem Beispiel ungefähr acht mal kürzer als die

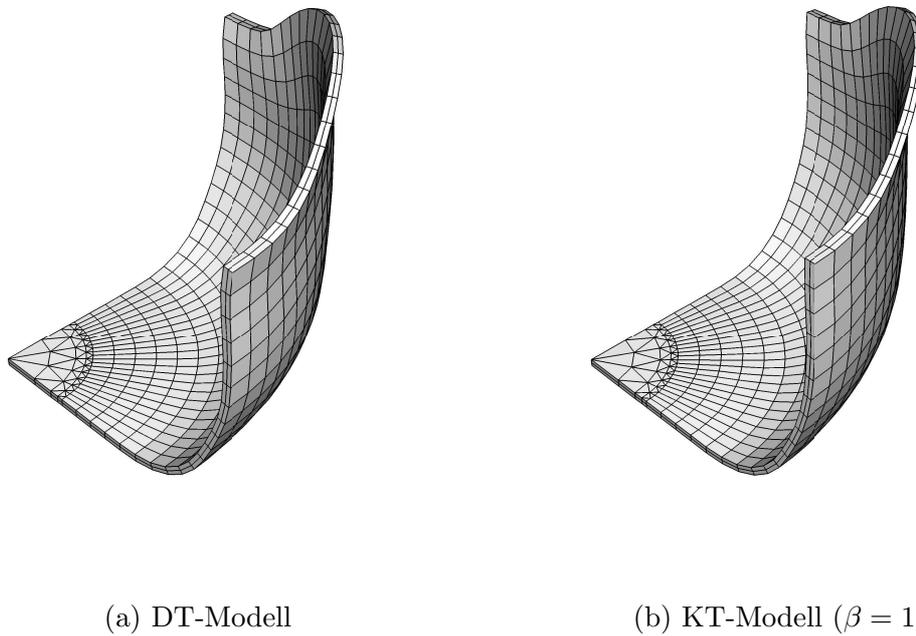


Abbildung 6.15: Tiefgezogener Napf für das DT-Modell, basierend auf 1000 Einkristallen, und das KT-Modell, basierend auf vier Texturkomponenten

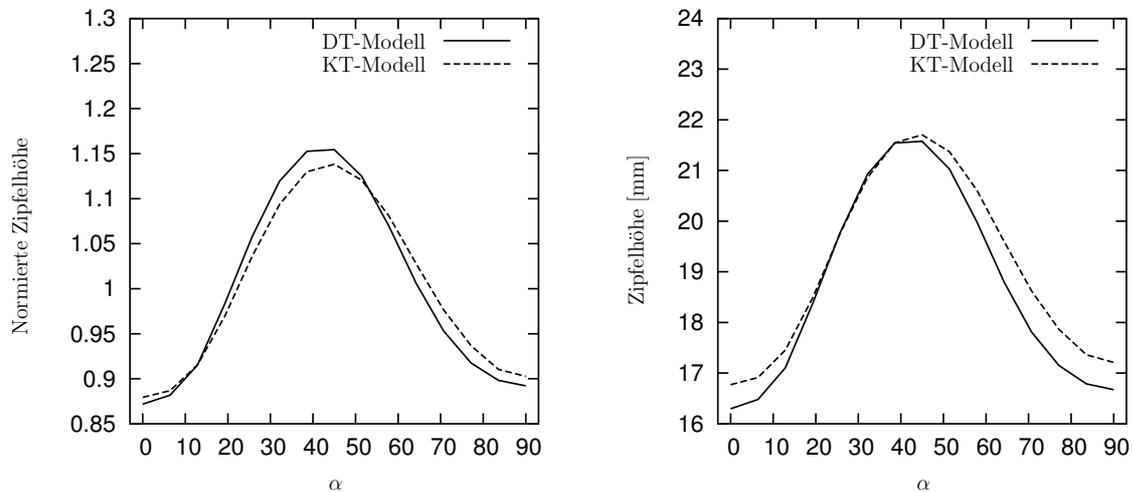


Abbildung 6.16: Normierte und absolute Zipfelprofile für das DT-Modell, basierend auf 1000 Einkristallen, und das KT-Modell ($\beta = 1$), basierend auf vier Texturkomponenten

des DT-Modells. Werden im Falle des DT-Modells lediglich die mittleren Orientierungen der Komponenten zur Berechnung verwendet, besitzt dieses gegenüber dem KT-Modell natürlich einen Geschwindigkeitsvorteil. In diesem Fall sind die

Rechenzeiten des DT-Modells ungefähr 15 mal kürzer als die des KT-Modells. Der Grund ist die numerische Integration über $SO(3)$, die für das KT-Modell durchgeführt werden muss. Wird im ZS-Modell dieselbe Anzahl an Kristalliten verwendet wie im DT-Modell, so sind die Berechnungszeiten des ZS-Modells in etwa zwei bis dreimal länger als die entsprechenden des DT-Modells.

6.2.5 Einfluss eines isotropen Volumenanteils im DT-Modell auf die Zipfelbildung

Wie die bereits diskutierten Beispiele gezeigt haben, wird durch die Taylor-Annahme bei der Verformung des Polykristalls die Anisotropie stark überschätzt. Im Falle des KT-Modells und des ZS-Modells konnte diese Überschätzung reduziert werden, indem die Halbwertsbreiten der Komponenten vergrößert bzw. der Anisotropieeinfluss auf die makroskopische Fließregel verringert wurde. In beiden Fällen konnte die Anzahl der Einkristallorientierungen konstant gehalten werden. Bei der Verwendung des DT-Modells ist nur eine Erhöhung der Anzahl der Kristallite möglich, um eine bessere Abbildung der experimentellen Zipfelprofile zu erreichen. Die zusätzlichen Orientierungen besitzen die Aufgabe, die Streuung um die Texturkomponenten zu approximieren. Im Folgenden soll gezeigt werden, wie mit Hilfe einer leichten Modifikation des DT-Modell die Voraussagen der Zipfelbildung für dieses Modell verbessert werden können.

Der isotrope Hintergrund der OVF wurde bisher im DT-Modell vernachlässigt. Dieser Anteil der OVF induziert ein isotropes, effektives, viskoplastisches Materialverhalten. Die Art des isotropen Verhaltens wird durch die aktiven Gleitsysteme der Einkristalle bestimmt. Im Falle von k.-f.-z. Metallen ist das effektive, isotrope Verhalten nicht zwangsläufig vom von Mises-Typ (Böhlke, 2004), aber es kann angenommen werden, dass die Details des isotropen Verhaltens von geringerer Bedeutung im Vergleich zum anisotropen Verhalten sind.

Deshalb wird eine Modifikation des DT-Modells durch die Aufteilung der Spannungen in zwei Teile vorgenommen. Der erste Teil beschreibt das isotrope, effektive, viskoplastische Materialverhalten, das aus dem isotropen Anteil der OVF resultiert. Der andere Teil wird wie zuvor durch die Superposition der Einkristallspannungen bestimmt. Im Ergebnis gibt es zwei Arten von Volumenfraktionen.

Eine Volumenfraktion bestimmt das anisotrope Verhalten des Polykristalls, während die andere eine Aussage über die Isotropie der Mikrostruktur trifft. Wird die Volumenfraktion des isotropen Anteils größer gewählt als die Volumenfraktion, die aus dem isotropen Anteil der OVF bestimmt wurde, so kann die Überschätzung der Anisotropie im DT-Modell verringert werden. Ein derartiger Ansatz wird in den Arbeiten von Böhlke et al. (2006b) und Schulze (2006) verwendet.

Der isotrope Anteil des modifizierten DT-Modells wird folgendermaßen spezifiziert. Es wird eine lineare, isotrope Beziehung zwischen dem Kirchhoff'schen Spannungstensor und dem Almansi'schen Verzerrungstensor gewählt

$$\boldsymbol{\tau} = \mathbb{C}_E[\tilde{\mathbf{E}}^A]. \quad (6.1)$$

(vergleiche (4.46)). Der Unterschied zum anisotropen Verhalten besteht in der Annahme der Isotropie ($\mathbb{C}_E \approx \tilde{\mathbb{C}}$). Aus dem selben Grund wird nur eine Entwicklungsgleichung für den symmetrischen Tensor $\tilde{\mathbf{B}}$ verwendet

$$\dot{\tilde{\mathbf{B}}} = \mathbf{L}\tilde{\mathbf{B}} + \tilde{\mathbf{B}}\mathbf{L}^T - 2\text{sym}(\mathbf{k}_E\tilde{\mathbf{B}}) \quad (6.2)$$

(vergleiche (4.53)). Die Funktion \mathbf{k}_E wird in viskoplastischer Form mit Hilfe eines Potenzgesetzes, das die äquivalente von Mises-Spannung mit der äquivalenten, viskoplastischen Dehnrate verbindet, modelliert

$$\mathbf{k}_E = \frac{3}{2} \frac{\dot{\epsilon}_{v0}}{\tau_{v0}} \left(\frac{\tau_v(\boldsymbol{\tau}')}{\tau_{v0}} \right)^{k-1} \boldsymbol{\tau}' \quad (6.3)$$

(siehe Kapitel 4.3). Für das KT-Modell wurde in Kapitel 4.3 bereits ein isotroper Anteil eingeführt. Ein derartiger Ansatz erlaubt die Variation der isotropen Volumenfraktion unabhängig von den Halbwertsbreiten. Die Materialparameter $\dot{\epsilon}_{v0}$ und k werden analog zu Kapitel 4.3 gewählt ($\dot{\epsilon}_{v0} = 9 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$, $k = 133$). Die Vergleichsspannung τ_{v0} wird aus der gemittelten kritischen Schmid-Spannung des Einkristallmodells und dem Taylor-Faktor 3.06 bestimmt.

Die Voraussagen des modifizierten Modells sollen nun für den Fall einer reinen Würfeltextur analysiert werden. Die Geometrieparameter der Tiefziehapparatur und des Bleches wurden analog zu Beispiel 6.2.1 gewählt. In Abbildung 6.17 sind die berechneten Zipfelprofile für das KT-Modell und das modifizierte DT-Modell

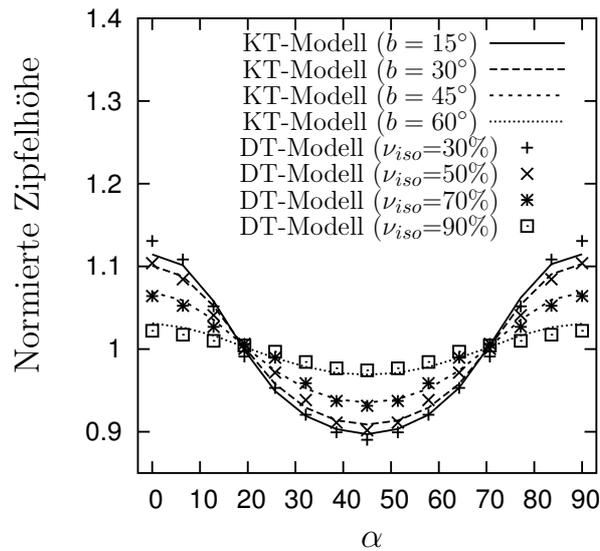


Abbildung 6.17: Zipfelprofile für ein Blech mit Würfeltextrur bei unterschiedlichen isotropen Volumenfraktionen im DT-Modell und verschiedenen Halbwertsbreiten im KT-Modell

dargestellt. Im Falle des DT-Modells wurde die isotrope Volumenfraktion im Bereich von 30% - 90% und im Falle des KT-Modells wurden die Halbwertsbreiten im Bereich 15° - 60° variiert. Es kann festgestellt werden, dass die Ergebnisse für das DT-Modell mit 30% isotroper Volumenfraktion zu einer Halbwertsbreite von 15° beim KT-Modell korrespondieren. Eine Volumenfraktion von 50% korrespondiert zu einer Halbwertsbreite von 30° . Für dieses Beispiel kann, für Halbwertsbreiten größer als 10° , die Volumenfraktion im DT-Modell durch die einfache Beziehung $(10 + 240b/\pi)\%$ (b in rad) näherungsweise bestimmt werden. Zieht man in betracht, dass b durch einen Faktor 2...3 vergrößert werden muss, so besitzt man eine ungefähre Schätzung des isotropen Volumenanteils im DT-Modell basierend auf der OVF. Die Schätzung hängt natürlich von der Anzahl der verwendeten Einkristalle im DT-Modell ab. Die angegebene Schätzung kann aber als eine obere Schranke betrachtet werden. Wird die Anzahl der Orientierungen erhöht, sollte die Volumenfraktion entsprechend kleiner werden. Da der numerische Aufwand des DT-Modells bei einer kleinen Anzahl von Orientierungen geringer ist, sollte es als Alternative zum KT-Modell und ZS-Modell gesehen werden.

Kapitel 7

Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurden drei Materialmodelle zur Berechnung von Umformprozessen für k.-f.-z. Aluminium vorgestellt. Alle drei Modelle basieren auf der Taylor-Annahme zur Beschreibung des Deformationsverhaltens des Polykristalls. Während zwei Modelle auf der Mesoskala definiert sind, nutzt das dritte zusätzlich ein elastisches Gesetz, eine Fließregel und eine Verfestigungsregel auf der Makroskala (ZS-Modell). Der Einfluss der Textur wird im letzten Falle durch einen Texturkoeffizienten vierter Stufe im elastischen Gesetz und der quadratischen Fließregel berücksichtigt. Die Entwicklung des Texturkoeffizienten wird durch ein Taylor-Modell basierend auf einem starr-viskoplastischen Einkristallmaterialverhalten berechnet. Das starr-viskoplastische Einkristallmodell bildet auch die Grundlage für das eingeführte kontinuierliche Taylor-Modell (KT-Modell). Es unterscheidet sich in der Berechnung der makroskopischen Spannungen vom klassischen Taylor-Ansatz. Durch die Verwendung von Mises-Fisher Verteilungsfunktionen zur Approximation der OVF erfolgt die Berechnung der Spannungen durch eine Integration über $SO(3)$. Somit kann die Nachbarschaft einer festen Kristallorientierung mit in die Berechnung der effektiven Größen einbezogen werden. Dieser Ansatz eignet sich besonders für Texturkomponenten, die in einem solchem Ansatz durch eine Kristallorientierung und eine Halbwertsbreite beschrieben werden können. Zur Verifikation des KT-Modells wurde zusätzlich ein klassisches elastisch-viskoplastisches Taylor-Modell (DT-Modell) programmiert. Alle drei Modelle wurden in das FE-Programm ABAQUS implementiert.

Die Modelle wurden zur Simulation der plastischen Anisotropie verwendet. Hierzu wurden Berechnungen der R -Wert- und Fließspannungsverteilungen und der Zip-

felprofile gewalzter Aluminiumbleche durchgeführt. Dabei wurden die folgenden Punkte festgestellt. 1.) Sowohl das KT-Modell als auch das DT-Modell überschätzen die auftretende Anisotropie stark. Die Überschätzung im Falle des DT-Modells ist bei der Verwendung einer geringen Anzahl von Kristalliten am stärksten. Erst eine Erhöhung der Anzahl der Kristallite führt zu einer Verringerung der Anisotropiemaße auf das Niveau des KT-Modells. 2.) Im KT-Modell wird durch eine Erhöhung der Halbwertsbreitenparameter der Texturkomponenten eine Absenkung der Anisotropie erreicht. Damit wird die Texturschärfe reduziert und dem Fehler, der durch die Taylor-Annahme entsteht, entgegengewirkt. Die so erzielten Ergebnisse zeigen eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Werten. 3.) Im Falle des DT-Modells wurde durch die zusätzliche Überlagerung eines isotropen Polykristallmodells die Reduktion der Anisotropie ermöglicht. Außerdem wurde eine Beziehung zwischen den Halbwertsbreiten des KT-Modells und der isotropen Volumenfraktion des modifizierten DT-Modells angegeben. 4.) Durch eine geeignete Wahl des Anisotropieeinflusses im ZS-Modell konnte ebenfalls eine gute Übereinkunft mit den experimentellen Ergebnissen erzielt werden.

In folgenden Arbeiten kann eine Erweiterung der Modelle auf andere Kristallgittertypen erfolgen (z.B. k.-r.-z. Gitter). Für den Tiefziehprozess ist vor allem die Verwendung von Stahlblechen interessant. Ferner sollte eine Anwendung auf Bleche mit komplexeren Texturen zur Verifikation der Modelle durchgeführt werden. Beim ZS-Modell könnten neben dem Texturkoeffizienten vierter Stufe zusätzliche Koeffizienten höherer Stufe berücksichtigt werden. Außerdem sollte die quadratische Form der Fließregel durch Terme höherer Ordnung ergänzt oder durch eine ambitioniertere Form ersetzt werden.

Anhang A

Euklidische Invarianzen der Materialgesetze

Die in diesem Abschnitt kurz diskutierten Prinzipien sind in der Arbeit von Bertram (2005) in detaillierter Form beschrieben. Für weitere Ausführungen sind die Arbeiten von Truesdell und Noll (1965) und Simo und Hughes (1997) zu empfehlen.

Prinzip der materiellen Objektivität (PMO). Zur Definition dieses Prinzips werden zwei Beobachter benötigt, die denselben Deformationsprozess betrachten. Beschreibt $\hat{\mathbf{x}}(t)$ den Ortsvektor des zweiten Beobachters für einen materiellen Punkt zu einem Zeitpunkt t , so ergibt sich dieser aus einer euklidischen Transformation des Ortsvektors $\mathbf{x}(t)$ dieses Punktes des ersten Beobachters zu demselben Zeitpunkt

$$\hat{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{Q}(t)\mathbf{x}(t) + \mathbf{c}(t), \quad (\text{A.1})$$

wobei $\mathbf{c}(t)$ eine translatorische und $\mathbf{Q}(t) \in SO(3)$ eine rotatorische Transformation zwischen den betrachteten Räumen beider Beobachter ist. Dem PMO liegt die Annahme zu Grunde, dass die spezifische Spannungsleistung des ersten Beobachters $l_i = \rho^{-1}\mathbf{T} \cdot \mathbf{L}$ identisch der Spannungsleistung des zweiten Beobachters $\hat{l}_i = \hat{\rho}^{-1}\hat{\mathbf{T}} \cdot \hat{\mathbf{L}}$ ist (Bertram, 2005). Das bedeutet, dass die Spannungsleistung objektiv (und damit gleichzeitig invariant) unter Euklidischen Transformationen ist. Diese Annahme führt zu der Aussage, dass sich der Cauchy'sche Spannungstensor objektiv unter Euklidischen Transformationen verhält

$$\hat{\mathbf{T}} = \mathbf{Q}\mathbf{T}\mathbf{Q}^{\mathbf{T}}. \quad (\text{A.2})$$

Dementsprechend folgt für materielle Größen wie z.B. dem 2. Piola-Kirchhoff'schen Spannungstensor die Invarianz unter derartigen Transformationen

$$\hat{\mathbf{T}}^{2PK} = \mathbf{T}^{2PK}. \quad (\text{A.3})$$

Prinzip der Invarianz unter überlagerten Starrkörpermodifikationen (PISM). Beim PISM wird der Deformationsprozeß im Gegensatz zum PMO nur durch einen Beobachter betrachtet. Es wird die Annahme getroffen, dass sich die Cauchy-Spannung nach der Überlagerung einer Starrkörpermodifikation

$$\mathbf{Q}(t)\mathbf{x}(t) + c(t), \quad (\text{A.4})$$

durch eine reine Drehung

$$\mathbf{Q}(t) \star \mathbf{T}(t) = \mathbf{Q}(t)\mathbf{T}(t)\mathbf{Q}(t)^{\mathbf{T}} \quad (\text{A.5})$$

aus der ursprünglichen Spannung $\mathbf{T}(t)$ ergibt (Bertram, 2005). Das PISM stellt eine stärkere Restriktion an das Materialverhalten als das PMO dar. Außerdem gibt es Beispiele aus verschiedenen Bereichen, die zeigen, dass dieses Gesetz nicht generell erfüllt sein muss. Die Abweichungen von diesem Prinzip sind aber in der Regel vernachlässigbar.

Prinzip der Forminvarianz (PFI). Das Prinzip der Forminvarianz nimmt an, dass die Materialfunktionen invariant unter Beobachterwechseln sind (Bertram, 2005). Das PFI kann direkt aus dem PMO und dem PISM abgeleitet werden bzw. es folgt: wenn das PMO und das PISM gelten, gilt zwangsläufig auch das PFI. Es kann auch generell die Gültigkeit des dritten Prinzips gefolgert werden, wenn die beiden anderen gelten. Außerdem folgt bei der Gültigkeit eines Prinzips, dass die beiden anderen äquivalent sind, obwohl deren physikalische Bedeutung verschieden ist (Bertram, 1982; Svendsen und Bertram, 1999; Bertram und Svendsen, 2001).

Anhang B

Materialien mit isomorphen elastischen Bereichen

Eine detaillierte Beschreibung des Isomorphiekonzeptes findet man z.B. in den Arbeiten von Noll (1958), Truesdell und Noll (1965) und Bertram (1992, 2005).

Ein elastischer Bereich $\{\mathcal{E}, \mathbf{h}\}$ besteht 1.) aus einer wegzusammenhängenden Untermannigfaltigkeit mit Rand $\mathcal{E} \subset Psym$ im Raum des rechten Cauchy-Green Tensors; 2.) aus einem elastischen Gesetz

$$\mathbf{h} : \mathcal{E} \rightarrow Sym, \quad \mathbf{C} \mapsto \mathbf{S}, \quad (\text{B.1})$$

das die materiellen Spannungen $\mathbf{S} = \mathbf{F}^{-1} \mathbf{T} \mathbf{F}^{-T}$ zu einem festen Zeitpunkt t des Deformationsprozesses, charakterisiert durch $\mathbf{C}(t) \in \mathcal{E}$, durch die Konfiguration zu diesem Zeitpunkt bestimmt

$$\mathbf{S}(t) = \mathbf{h}(\mathbf{C}(t)) \quad (\text{B.2})$$

(Bertram, 2005). Geht man davon aus, dass die elastischen Gesetze aller elastischen Bereiche von elastisch-plastischen Materialien isomorph sind, dann folgt nach Bertram (2005), dass es für zwei elastische Bereiche $\{\mathcal{E}_1, \mathbf{h}_1\}$ und $\{\mathcal{E}_2, \mathbf{h}_2\}$ einen Tensor $\mathbf{P}_{12} \in Inv^+$ gibt, so dass

$$\mathbf{h}_1(\mathbf{C}) = \mathbf{P}_{12} \mathbf{h}_2(\mathbf{P}_{12}^T \mathbf{C} \mathbf{P}_{12}) \mathbf{P}_{12}^T \quad (\text{B.3})$$

für alle $\mathbf{C} \in P_{sym}$. Das bedeutet, dass immer ein elastisches Gesetz gefunden werden kann, das sich während des Deformationsprozesses nicht ändert. Dieses konstante Gesetz wird auf die ungestörte Bezugsplatzierung $\tilde{\mathcal{B}}$ bezogen (Truesdell und Noll, 1965)

$$\mathbf{S} = \mathbf{h}(\mathbf{C}) = \mathbf{P}\tilde{\mathbf{h}}(\mathbf{P}^T\mathbf{C}\mathbf{P})\mathbf{P}^T. \quad (\text{B.4})$$

Der Tensor \mathbf{P} wird als materieller Isomorphismus oder plastische Transformation bezeichnet (Wang und Bloom, 1974; Halphen und Nguyen, 1975; Bertram, 2005), da eine Änderung dieses Tensors nur während einer plastischen Deformation eintritt. Da von einem hyperelastischen Materialverhalten ausgegangen wird, kann die Isomorphie der elastischen Bereiche analog auf die Funktion der freien Energie übertragen werden

$$\psi(\mathbf{C}) = \tilde{\psi}(\mathbf{P}^T\mathbf{C}\mathbf{P}). \quad (\text{B.5})$$

Theorem: Für die beiden elastischen Bereiche $\{\mathcal{E}, \mathbf{h}\}$ und $\{\tilde{\mathcal{E}}, \tilde{\mathbf{h}}\}$ können folgende Aussagen getroffen werden (Bertram, 2005): 1.) Wenn \mathbf{P} die plastische Transformation von $\tilde{\mathcal{E}}$ nach \mathcal{E} und $\tilde{\mathcal{S}}$ die Symmetriegruppe von $\tilde{\mathbf{h}}$ ist, dann ist

$$\mathcal{S} = \mathbf{P}\tilde{\mathcal{S}}\mathbf{P}^{-1} \quad (\text{B.6})$$

die Symmetriegruppe von \mathbf{h} . 2.) Wenn \mathbf{P} die plastische Transformation von $\tilde{\mathcal{E}}$ nach \mathcal{E} ist, dann ist $\mathbf{A}\mathbf{P}\tilde{\mathbf{A}}$ für alle $\tilde{\mathbf{A}} \in \tilde{\mathcal{S}}$ und alle $\mathbf{A} \in \mathcal{S}$ ebenfalls eine plastische Transformation von $\tilde{\mathcal{E}}$ nach \mathcal{E} . 3.) Wenn \mathbf{P} und $\hat{\mathbf{P}}$ plastische Transformationen von $\tilde{\mathcal{E}}$ nach \mathcal{E} sind, so gilt: $\mathbf{P}\hat{\mathbf{P}}^{-1} \in \mathcal{S}$ und $\mathbf{P}^{-1}\hat{\mathbf{P}} \in \tilde{\mathcal{S}}$.

Aus den obigen Punkten kann direkt gefolgert werden, dass die plastische Transformation nur bis auf eine Symmetrietransformation eindeutig bestimmbar ist.

Anhang C

Jacobi-Matrix des Newton-Verfahrens zur Lösung der Differentialgleichungen des elastisch-viskoplastischen Einkristallmodells

Für die Jacobi-Matrix des Newton-Verfahrens in Gleichung (5.5) soll in diesem Kapitel eine analytische Beziehung abgeleitet werden. Die gekoppelten Newton-Gleichungen besitzen die Form

$$\mathbf{G}_{n+1} = \tilde{\mathbf{F}}_{n+1} - \tilde{\mathbf{F}}_n - \Delta t \dot{\tilde{\mathbf{F}}}_{n+1}(\tilde{\mathbf{F}}_{n+1}, \tau_{n+1}^C) = \mathbf{0}, \quad (\text{C.1})$$

$$g_{n+1} = \tau_{n+1}^C - \tau_n^C - \Delta t \dot{\tau}_{n+1}^C(\tilde{\mathbf{F}}_{n+1}, \tau_{n+1}^C) = 0.$$

Die zur Lösung der Newton-Gleichungen benötigte Jacobi-Matrix ist

$$\mathbf{J}_{n+1} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \mathbf{G}_{n+1}}{\partial \tilde{\mathbf{F}}_{n+1}} & \frac{\partial \mathbf{G}_{n+1}}{\partial \tau_{n+1}^C} \\ \frac{\partial g_{n+1}}{\partial \tilde{\mathbf{F}}_{n+1}} & \frac{\partial g_{n+1}}{\partial \tau_{n+1}^C} \end{bmatrix}. \quad (\text{C.2})$$

Die Jacobi-Matrix enthält insgesamt vier partielle Ableitungen, die im Weiteren bestimmt werden. Zur besseren Lesbarkeit werden die Indizes $n + 1$ zur Definition des Inkrementendes weggelassen.

Zur Ermittlung der Ableitung $\partial \mathbf{G} / \partial \tilde{\mathbf{F}}$ werden zunächst die bereits definierten Zusammenhänge

$$\dot{\tilde{\mathbf{F}}} = \mathbf{L} \tilde{\mathbf{F}} - \tilde{\mathbf{F}} \tilde{\mathbf{k}}(\tau_\alpha, \tau^C) \quad (\text{C.3})$$

und

$$\tilde{\mathbf{k}}(\tau_\alpha, \tau^C) = \sum_{\alpha=1}^{12} \dot{\gamma}_0 \operatorname{sgn}(\tau_\alpha) \left| \frac{\tau_\alpha}{\tau^C} \right|^m \tilde{\mathbf{M}}_\alpha \quad (\text{C.4})$$

benötigt. Mit deren Hilfe und unter der Annahme kleiner, elastischer Verzerrungen ergibt sich

$$\frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \tilde{\mathbf{F}}} = \mathbb{I} - \Delta t (\mathbb{K}^R(\mathbf{L}) - \mathbb{K}^L(\tilde{\mathbf{k}})) - \Delta t \sum_{\alpha=1}^{12} \frac{\dot{\gamma}_0 m}{\tau^C} \left| \frac{\tau_\alpha}{\tau^C} \right|^{m-1} \tilde{\mathbf{F}} \tilde{\mathbf{M}}_\alpha \otimes \tilde{\mathbf{F}} \tilde{\mathbf{C}}[\tilde{\mathbf{M}}_\alpha]. \quad (\text{C.5})$$

In Gleichung (C.5) werden die Abkürzungen

$$\mathbb{K}^L(\mathbf{B}) = \frac{\partial \mathbf{A} \mathbf{B}}{\partial \mathbf{A}} = \delta_{ik} B_{lj} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l \quad (\text{C.6})$$

und

$$\mathbb{K}^R(\mathbf{B}) = \frac{\partial \mathbf{B} \mathbf{A}}{\partial \mathbf{A}} = B_{ik} \delta_{lj} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l \quad (\text{C.7})$$

verwendet. Die Ableitung $\partial \mathbf{G} / \partial \tau^C$ ergibt sich nach Ableitung von Gleichung (C.1)₁

$$\frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \tau^C} = \Delta t \tilde{\mathbf{F}} \frac{\partial \tilde{\mathbf{k}}(\tau_\alpha, \tau^C)}{\partial \tau^C} \quad (\text{C.8})$$

und somit als

$$\frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \tau^C} = -\Delta t \frac{m}{\tau^C} \tilde{\mathbf{F}} \tilde{\mathbf{k}}(\tau_\alpha, \tau^C). \quad (\text{C.9})$$

Zur Bestimmung der Ableitung $\partial g / \partial \tilde{\mathbf{F}}$ werden zunächst die ebenfalls bereits definierten Beziehungen

$$\dot{\tau}^C = \Theta_0 \left(1 - \frac{\tau^C}{\tau_V^C} \right) \dot{\gamma}(\tau_\alpha, \tau^C), \quad (\text{C.10})$$

$$\dot{\gamma}(\tau_\alpha, \tau^C) = \sum_{\alpha=1}^{12} \dot{\gamma}_0 \left| \frac{\tau_\alpha}{\tau^C} \right|^m \quad (\text{C.11})$$

und

$$\tau_V^C(\tau_\alpha, \tau^C) = \tau_{V0}^C \left| \frac{\dot{\gamma}}{\dot{\gamma}_0^*} \right|^{\frac{1}{n}} \quad (\text{C.12})$$

benötigt. Die Ableitung $\partial g / \partial \tilde{\mathbf{F}}$ ergibt sich durch Ableitung von $\dot{\tau}^C$

$$\frac{\partial g}{\partial \tilde{\mathbf{F}}} = -\Delta t \frac{\partial \dot{\tau}^C}{\partial \tilde{\mathbf{F}}}. \quad (\text{C.13})$$

Sie kann unter Verwendung der Kettenregel in die Form

$$\frac{\partial g}{\partial \tilde{\mathbf{F}}} = -\Delta t \frac{\partial \dot{\tau}^C}{\partial \dot{\gamma}} \frac{\partial \dot{\gamma}}{\partial \tau_\alpha} \frac{\partial \tau_\alpha}{\partial \tilde{\mathbf{F}}} \quad (\text{C.14})$$

gebracht werden. Die einzelnen Faktoren in Gleichung (C.14) sind

$$\frac{\partial \dot{\tau}^C}{\partial \dot{\gamma}} = \Theta_0 \left(1 + \frac{1-n}{n} \frac{\tau^C}{\tau_V^C} \right), \quad (\text{C.15})$$

$$\frac{\partial \dot{\gamma}}{\partial \tau_\alpha} = \frac{m}{\tau^C} \sum_{\alpha=1}^{12} \dot{\gamma}_0 \operatorname{sgn}(\tau_\alpha) \left| \frac{\tau_\alpha}{\tau^C} \right|^{m-1} \quad (\text{C.16})$$

und

$$\frac{\partial \tau_\alpha}{\partial \tilde{\mathbf{F}}} = \tilde{\mathbf{F}} \tilde{\mathbf{C}}[\tilde{\mathbf{M}}_\alpha]. \quad (\text{C.17})$$

Gleichung (C.17) wurde unter der Voraussetzung kleiner, elastischer Verzerrungen hergeleitet. Mit den Gleichungen (C.15), (C.16) und (C.17) folgt die Ableitung

$$\frac{\partial g}{\partial \tilde{\mathbf{F}}} = -\Delta t \Theta_0 \frac{m}{\tau^C} \left(1 + \frac{1-n}{n} \frac{\tau^C}{\tau_V^C} \right) \sum_{\alpha=1}^{12} \dot{\gamma}_0 \operatorname{sgn}(\tau_\alpha) \left| \frac{\tau_\alpha}{\tau^C} \right|^{m-1} \tilde{\mathbf{F}} \tilde{\mathbf{C}}[\tilde{\mathbf{M}}_\alpha]. \quad (\text{C.18})$$

Die Ableitung $\partial g / \partial \tau^C$ ergibt sich zunächst ebenfalls durch Ableitung von $\dot{\tau}^C$

$$\frac{\partial g}{\partial \tau^C} = 1 - \Delta t \frac{\partial \dot{\tau}^C}{\partial \tau^C}. \quad (\text{C.19})$$

Sie kann mit Hilfe der Kettenregel umformuliert werden

$$\frac{\partial g}{\partial \tau^C} = 1 - \Delta t \frac{\partial \dot{\tau}^C}{\partial \dot{\gamma}} \frac{\partial \dot{\gamma}}{\partial \tau^C}. \quad (\text{C.20})$$

Die einzelnen Ableitungen sind

$$\frac{\partial \dot{\tau}^C}{\partial \dot{\gamma}} = \Theta_0 \left(1 - \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{n} - 1 \right) \frac{\tau^C}{\tau_V^C} \right) \quad (\text{C.21})$$

und

$$\frac{\partial \dot{\gamma}}{\partial \tau^C} = -\frac{m}{\tau^C} \dot{\gamma}. \quad (\text{C.22})$$

Mit den Gleichungen (C.21) und (C.22) ergibt sich

$$\frac{\partial g}{\partial \tau^C} = 1 + \Delta t \Theta_0 \dot{\gamma} \left(\frac{m}{\tau^C} + \frac{1}{\tau_V^C} \left(1 - m + \frac{m}{n} \right) \right). \quad (\text{C.23})$$

Anhang D

Algorithmisch konsistente Tangente des elastisch-viskoplastischen Einkristallmodells

Das für die nichtlinearen Berechnungen genutzte Finite-Elemente-Programm ABAQUS berechnet in jedem Iterationsschritt des verwendeten globalen Newton-Verfahrens die Jacobi-Matrix. Hierfür ist durch den Nutzer der Anteil, der durch das programmierte Materialmodell bedingt wird, am Inkrementende zu berechnen. Dieser ist mit

$$\mathbb{K} = \frac{1}{J_{n+1}} \frac{1}{\Delta t} \frac{\partial \boldsymbol{\tau}_{n+1}}{\partial \mathbf{D}_{n+1}} \quad (\text{D.1})$$

definiert. Zur Vereinfachung werden im Folgenden die Indizes $n + 1$ weggelassen. Für das elastisch-viskoplastische Materialmodell ist es nützlich, die Tangente nach der Kettenregel in drei Teile zu zerlegen

$$\mathbb{K}^{evp} = \frac{1}{J} \frac{1}{\Delta t} \frac{\partial \boldsymbol{\tau}}{\partial \tilde{\mathbf{F}}} \frac{\partial \tilde{\mathbf{F}}}{\partial \mathbf{L}} \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{D}}. \quad (\text{D.2})$$

Die Ableitung $\partial \boldsymbol{\tau} / \partial \tilde{\mathbf{F}}$ hängt nur vom verwendeten elastischen Gesetz ab

$$\frac{\partial \boldsymbol{\tau}}{\partial \tilde{\mathbf{F}}} = (\delta_{ik} \tilde{T}_{lm}^{2PK} \tilde{F}_{jm} + \delta_{jk} \tilde{T}_{lm}^{2PK} \tilde{F}_{im} + C_{ijkl}^E \tilde{F}_{ml}^{-T}) \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l. \quad (\text{D.3})$$

Die Ableitung $\partial \mathbf{L} / \partial \mathbf{D}$ liefert den Symmetrisierer vierter Stufe

$$\frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{D}} = \mathbb{I}^S, \quad (\text{D.4})$$

der jeden Tensor zweiter Stufe in seinen symmetrischen Anteil abbildet. Die Ableitung $\partial \tilde{\mathbf{F}} / \partial \mathbf{L}$ berücksichtigt das verwendete Verfahren zur Lösung der ODE's, die vom benutzten Materialmodell abhängen. Für das elastisch-viskoplastische Materialmodell wurde ein implizites Euler-Verfahren verwendet. Die nach der Zeitdiskretisierung zu lösenden Newton-Gleichungen sind durch die Gleichungen (C.1)₁ und (C.1)₂ gegeben. Für beide Gleichungen kann das totale Differential bestimmt werden

$$d\mathbf{G} = \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \tilde{\mathbf{F}}} [d\tilde{\mathbf{F}}] + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \tau^C} d\tau^C + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{L}} [d\mathbf{L}] = 0, \quad (\text{D.5})$$

$$dg = \frac{\partial g}{\partial \tilde{\mathbf{F}}} \cdot d\tilde{\mathbf{F}} + \frac{\partial g}{\partial \tau^C} d\tau^C = 0. \quad (\text{D.6})$$

Aus den Gleichungen (D.5) und (D.6) kann eine Berechnungsvorschrift für $\partial \tilde{\mathbf{F}} / \partial \mathbf{L}$ abgeleitet werden

$$\frac{\partial \tilde{\mathbf{F}}}{\partial \mathbf{L}} = - \left(\frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \tilde{\mathbf{F}}} - \left(\frac{\partial g}{\partial \tau^C} \right)^{-1} \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \tau^C} \otimes \frac{\partial g}{\partial \tilde{\mathbf{F}}} \right)^{-1} \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{L}}. \quad (\text{D.7})$$

Die Ableitung $\partial \mathbf{G} / \partial \mathbf{L}$ ist durch den Zusammenhang

$$\frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{L}} = -\Delta t \mathbb{K}^L(\tilde{\mathbf{F}}) \quad (\text{D.8})$$

gegeben. Der Tensor $\mathbb{K}^L(\tilde{\mathbf{F}})$ wurde bereits in Gleichung (C.6) eingeführt. Alle anderen Ableitungen in Gleichung (D.7) sind die Bestandteile der Jacobi-Matrix, die im Anhang C bestimmt wurde. Mit der Hilfe der Gleichungen (D.3), (D.4), (D.7) und (D.8) kann dann die algorithmisch konsistente Tangente ermittelt werden

$$\mathbb{K}^{evp} = \frac{1}{J} \frac{\partial \tau}{\partial \tilde{\mathbf{F}}} \left(\frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \tilde{\mathbf{F}}} - \left(\frac{\partial g}{\partial \tau^C} \right)^{-1} \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \tau^C} \otimes \frac{\partial g}{\partial \tilde{\mathbf{F}}} \right)^{-1} \mathbb{K}^L(\tilde{\mathbf{F}}) \mathbb{I}^S. \quad (\text{D.9})$$

Anhang E

Algorithmisch konsistente Tangente des (starr-)viskoplastischen Einkristallmodells

Für den (starr-)viskoplastischen Einkristall kann bei der Berechnung der algorithmisch konsistenten Tangente die Zerlegung in einen Kugel- und Deviatoranteil ausgenutzt werden, was gleichbedeutend mit der entsprechenden Zerlegung der Ableitung $\partial\boldsymbol{\tau}/\partial\mathbf{D}$ ist

$$\frac{\partial\boldsymbol{\tau}}{\partial\mathbf{D}} = \frac{\partial\boldsymbol{\tau}^\circ}{\partial\mathbf{D}} + \frac{\partial\boldsymbol{\tau}'}{\partial\mathbf{D}}. \quad (\text{E.1})$$

Die Ableitung des Kugelanteils kann mit der Hilfe der Kettenregel berechnet werden

$$\frac{\partial\boldsymbol{\tau}^\circ}{\partial\mathbf{D}} = \frac{\partial\boldsymbol{\tau}^\circ}{\partial J} \frac{\partial J}{\partial\mathbf{D}}. \quad (\text{E.2})$$

Verwendet man für den Kugelanteil der Spannungen

$$\boldsymbol{\tau}^\circ = \frac{K}{2}(J^2 - 1)\mathbf{I} \quad (\text{E.3})$$

und nutzt für die Determinante des Deformationsgradienten die Lösung der Differentialgleichung

$$\dot{J}J^{-1} = \text{sp}(\mathbf{D}), \quad (\text{E.4})$$

so erhält man für Gleichung (E.2)

$$\frac{\partial \boldsymbol{\tau}^\circ}{\partial \mathbf{D}} = 3K J^2 \Delta t \mathbb{P}_1^I \quad (\text{E.5})$$

und somit für den Kugelanteil der Materialtangente

$$\mathbb{K}^{vp^\circ} = 3K J_{n+1} \mathbb{P}_1^I. \quad (\text{E.6})$$

Zur Berechnung der Ableitung des deviatorischen Anteils der Spannungen nach dem Dehnratentensor wird ebenfalls die Kettenregel angewendet

$$\frac{\partial \boldsymbol{\tau}'}{\partial \mathbf{D}} = \frac{\partial \boldsymbol{\tau}'}{\partial \mathbf{D}'} \frac{\partial \mathbf{D}'}{\partial \mathbf{D}}. \quad (\text{E.7})$$

Da sich für die Ableitung des deviatorischen Anteils des Dehnratentensors

$$\frac{\partial \mathbf{D}'}{\partial \mathbf{D}} = \mathbb{P}_2^I \quad (\text{E.8})$$

ergibt, verbleibt für Gleichung (E.7)

$$\frac{\partial \boldsymbol{\tau}'}{\partial \mathbf{D}} = \frac{\partial \boldsymbol{\tau}'}{\partial \mathbf{D}'}. \quad (\text{E.9})$$

Die Beziehung zwischen dem deviatorischen Anteil der Spannung und dem deviatorischen Anteil des Dehnratentensors ist durch das nichtlineare Gleichungssystem (5.19) zu einem festen Zeitpunkt t_n definiert. Dessen Lösung ist in Kapitel 5.1.2 beschrieben. Da die Spannung nicht explizit in Abhängigkeit des Dehnratentensors gegeben ist, muss für die Bestimmung von Ableitung (E.9) das vollständige Differential von Gleichung (5.19) bestimmt werden

$$d\mathbf{G} = \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{D}'} [d\mathbf{D}'] + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \boldsymbol{\tau}'} [d\boldsymbol{\tau}'] = \mathbf{0}. \quad (\text{E.10})$$

Hieraus folgt für Gleichung (E.9)

$$\frac{\partial \boldsymbol{\tau}'}{\partial \mathbf{D}} = - \left(\frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \boldsymbol{\tau}'} \right)^{-1} \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{D}'} \quad (\text{E.11})$$

und unter Auswertung von Gleichung (5.19)

$$\frac{\partial \boldsymbol{\tau}'}{\partial \mathbf{D}} = - \left(\frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \boldsymbol{\tau}'} \right)^{-1}. \quad (\text{E.12})$$

Damit folgt für den deviatorischen Anteil der Materialtangente

$$\mathbb{K}^{vp'} = - \frac{1}{J_{n+1}} \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{\partial \mathbf{G}_{n+1}}{\partial \boldsymbol{\tau}'_{n+1}} \right)^{-1} \quad (\text{E.13})$$

und somit unter Verwendung des Kugelanteils in Gleichung (E.6) die Materialtangente des viskoplastischen Einkristallmodells

$$\mathbb{K}^{vp} = 3K J_{n+1} \mathbb{P}_1^I - \frac{1}{J_{n+1}} \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{\partial \mathbf{G}_{n+1}}{\partial \boldsymbol{\tau}'_{n+1}} \right)^{-1}. \quad (\text{E.14})$$

Die Ableitung $\partial \mathbf{G}_{n+1} / \partial \boldsymbol{\tau}'_{n+1}$ entspricht der Jacobi-Matrix des Newton-Verfahrens zur Spannungsberechnung. Sie ist in Kapitel 5.1.2 angegeben. Sie muss in Gleichung (E.14) aus der 5-dimensionalen Deviatorbasis in die 6-dimensionale ABAQUS Notation für symmetrische Tensoren umgewandelt werden.

Literaturverzeichnis

ABAQUS/Standard. Hibbitt, Karlsson & Sorensen, Inc., 2005.

B.L. Adams, J.P. Boehler, M. Guidi, und E.T. Onat. Group theory and representation of microstructure and mechanical behavior of polycrystals. *J. Mech. Phys. Solids*, 40(4):723–737, 1992.

B.L. Adams, P.R. Morris, T.T. Wang, K.S. Willden, und S.I. Wright. Description of orientation coherence in polycrystalline materials. *Acta Metall.*, 35:2935, 1987.

L. Anand. Single-crystal elasto-viscoplasticity: application to texture evolution in polycrystalline metals at large strains. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 193:5359–5383, 2004.

S. Balasubramanian und L. Anand. Single Crystal and Polycrystal Elasto-Viscoplasticity: Application to Earing In Cup Drawing of FCC Materials. *Computational Mechanics*, 17:209–225, 1996.

D. Banabic. *Formability of Metallic Materials*. Springer-Verlag Berlin, 2000.

F. Barlat, H. Aretz, J.W. Yoon, M.W. Karabin, J.C. Brem, und R.E. Dick. Linear transformation-based anisotropic yield functions. *Int. J. Plast.*, 21(4):1009–1039, 2005.

F. Barlat, R.C. Becker, Y. Hayashida, Y. Maeda, M. Yanagawa, K. Chung, J.C. Brem, D.J. Lege, K. Matsui, S.J. Murtha, und S. Hattori. Yielding description for solution strengthened aluminum alloys. *Int. J. Plast.*, 13(4):385–401, 1997a.

F. Barlat, D.J. Lege, und J.C. Brem. A six-component yield function for anisotropic materials. *Int. J. Plast.*, 7:693–712, 1991.

- F. Barlat und J. Lian. Plastic behavior and stretchability of sheet metals. Part I: A yield function for orthotropic sheets under plane stress conditions. *Int. J. Plast.*, 5:51–66, 1989.
- F. Barlat, Y. Maeda, K. Chung, M. Yanagawa, J.C. Brem, Y. Hayashida, D.J. Lege, K. Matsui, S.J. Murtha, S. Hattori, R.C. Becker, und S. Makosey. Yield function development for aluminum alloy sheets. *J. Mech. Phys. Solids*, 45 (11/12):1727–1763, 1997b.
- R. Becker und S. Panchanadeeswaran. Crystal rotations represented as Rodrigues vectors. *Textures and Microstructures*, 10:167–194, 1989.
- R. Becker, R.E. Smelser, und S. Panchanadeeswaran. Simulation of earing in aluminum single crystals and polycrystals. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, 1:203–224, 1993.
- M.J. Beran, T.A. Mason, B.L. Adams, und T. Olsen. Bounding elastic constants of an orthotropic polycrystal using measurements of the microstructure. *J. Mech. Phys. Solids*, 44(9):1543–1563, 1996.
- J. Berntsen und T.O. Espelid. An adaptive algorithm for the approximate calculation of multiple integrals. *ACM Transactions on Mathematical Software*, 17 (4):437–451, 1991a.
- J. Berntsen und T.O. Espelid. Algorithm 698: Dcuhre: An adaptive multidimensional integration routine for a vector of integrals. *ACM Transactions on Mathematical Software*, 17(4):452–456, 1991b.
- A. Bertram. Material systems - a framework for the description of material behavior. *Arch. Rat. Mech. Anal.*, 2:99–133, 1982.
- A. Bertram. Description of finite inelastic deformations. In A. Benallal, R. Bilardon, und D. Marquis, editors, *Proceedings of MECAMAT'92, International Seminar on Multiaxial Plasticity*, 821–835, 1992.
- A. Bertram. *Elasticity and Plasticity of Large Deformations*. Springer-Verlag, 2005.
- A. Bertram und J. Olschewski. Formulation of anisotropic linear viscoelastic constitutive laws by a projection method. In A. Freed und K.P. Walker, editors,

- High temperature constitutive modelling: Theory and Application*, 129–137. ASME, 1991. MD-Vol. 26, AMD-Vol. 121.
- A. Bertram und B. Svendsen. On material objectivity and reduced constitutive equations. *Arch. Mech.*, 53(6):653–675, 2001.
- J.F.W. Bishop und R. Hill. A theory of the plastic distortion of a polycrystalline aggregate under combined stress. *Phil. Mag.*, 42:414–427, 1951.
- C.G.E. Boender, A.H.G. Rinnooy Kan, G.T. Timmer, und L. Stougie. A stochastic method for global optimization. *Mathematical Programming*, 22:125–140, 1982.
- T. Böhlke. *Crystallographic Texture Evolution and Elastic Anisotropy: Simulation, Modeling, and Applications*. Aachen: Shaker Verlag, 2001. Dissertation, Fakultät für Maschinenbau, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg.
- T. Böhlke. The Voigt bound of the stress potential of isotropic viscoplastic fcc polycrystals. *Archive of Mechanics*, 56(6):1867–1884, 2004.
- T. Böhlke. Application of the maximum entropy method in texture analysis. *Comp. Mat. Science*, 32:276–283, 2005.
- T. Böhlke. Texture simulation based on tensorial Fourier coefficients. *Computers and Structures*, 84:1086–1094, 2006.
- T. Böhlke, U.U. Haus, und V. Schulze. Chrystallographic texture approximation by quadratic programming. *Acta Mater.*, 54:1359–1368, 2006a.
- T. Böhlke, G. Risý, und A. Bertram. A texture component model for anisotropic polycrystal plasticity. *Comp. Mat. Science*, 32:284–293, 2005a.
- T. Böhlke, G. Risý, und A. Bertram. A texture based model for polycrystal plasticity. *Materials Science Forum*, 495-497:1091–1096, 2005b.
- T. Böhlke, G. Risý, und A. Bertram. Finite element simulation of metal forming operations with texture based material models. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, 14:1–23, 2006b.
- E.A. Brandes und G.B. Brook. *Smithells Metals Reference Book*. Butterworth-Heinemann, 7 edition, 1998.

- C.A. Bronkhorst, S.R. Kalidindi, und L. Anand. Polycrystalline plasticity and the evolution of crystallographic texture in fcc metals. *R. Soc. Lond.*, A341: 443–477, 1992.
- B. Budiansky und T.T. Wu. Theoretical prediction of plastic strains of polycrystals. *Proc. Fourth U.S. Nat. Congr. Appl. Mech.*, 1175–1185, 1962.
- H.-J. Bunge. Zur Darstellung allgemeiner Texturen. *Z. Metallkde.*, 56:872–874, 1965.
- H.-J. Bunge. The Effective Elastic Constants of Textured Polycrystals in Second Order Approximation. *Kristall und Technik*, 9(4):413–424, 1974.
- H.-J. Bunge. *Texture Analysis in Material Science*. Cuviller Verlag Göttingen, 1993.
- M.J. Cai und W.B. Lee. Automatic quantitative analysis of texture components from codf data. *Materials Science Forum*, 157-162:327–332, 1994.
- J.H. Cho, A.D. Rollett, und K.H. Oh. Determination of volume fractions of texture components with standard distributions in euler space. *Metal. Mat. Trans. A*, 35A:1075–1086, 2004.
- S.-H. Choi, J.-H. Cho, K.H. Oh, K. Chung, und F. Barlat. Texture evolution of fcc sheet metals during deep drawing process. *Int. J. Mech. Sci.*, 42:1571–1592, 2000.
- S.C. Cowin. Properties of the anisotropic elasticity tensor. *Q. J. Mech. appl. Math.*, 42:249–266, 1989.
- M.A. Crisfield. *Non-linear finite element analysis of solids and structures*. Wiley, 1991.
- M. Crumbach, G. Pomana, P. Wagner, und G. Gottstein. A Taylor type deformation texture model considering grain interaction and material properties. Part I - Fundamentals. In Gottstein, G. and Molodov, D.A., editor, *Recrystallisation and Grain Growth, Proceedings of the First Joint Conference*, 1053–1060, 2001. Springer-Verlag.

- T. Csendes, B. Daroczy, und Z. Hantos. Nonlinear parameter estimation by global optimization: comparison of local search methods in respiratory system modelling. In *System Modelling and Optimization: proceedings of the 12th IFIP Conference*, 188–192, 1986. Springer-Verlag Berlin.
- P. Dawson, A. Beaudoin, und K. Mathur. Finite element modelling of polycrystalline solids. *Revue européenne des éléments finis*, 3(4):543–571, 1994.
- L. Delannay, P. Van Houtte, A. Van Bael, und D. Vanderschueren. Application of a texture parameter model to study planar anisotropy of rolled steel sheets. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, 8:413–422, 2000.
- G. Engeln-Müllges und F. Reutter. *Numerik-Algorithmen: Entscheidungshilfe zur Auswahl und Nutzung*. VDI Verlag, 1996.
- O. Engler und S. Kalz. Simulation of earing profiles from texture data by means of a visco-plastic self-consistent polycrystal plasticity approach. *Materials Science and Engineering A*, 373:350–362, 2004.
- T. Eschner. Texture analysis by means of modelfunctions. *Textures and Microstructures*, 21:139–146, 1993.
- T. Eschner. *Quantitative Texturanalyse durch Komponentenzerlegung von Beugungspolfiguren*. Laborbericht PTB-7.4-95-1. Physikalisch-Technische Bundesanstalt, Braunschweig und Berlin, Abteilung Neutronenphysik, 1995.
- J.D. Eshelby. The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion and related problems. *Proc. R. Soc. London*, 1957.
- Y. Estrin, R. Hellmig, und S.C. Baik. Hochgradige plastische Verformung - Ein Weg zu verbesserten Werkstoffen. *TU Contact*, 11:29–34, 2002.
- Y. Estrin und H. Mecking. A unified phenomenological description of work hardening and creep based on one parameter models. *Acta Metall.*, 57–70, 1984.
- P. Etingof und B.L. Adams. Representation of polycrystalline microstructure by n-point correlation tensors. *Textures and Microstructures*, 1993.
- F.I. Federov. *Theory of Elastic Waves in Crystals*. Plenum Press, New York, 1968.

- S. Forest. *Mechanical modelling of non-homogeneous deformation of single crystals*. Thesis, Ecole des Mines de Paris, 1996.
- N.M. Ghoniem, E.P. Busso, N. Kioussis, und H. Huang. Multiscale modelling of nanomechanics and micromechanics: an overview. *Philosophical Magazine*, 83: 3475–3528, 2003.
- Philip E. Gill, W. Murray, und M. Wright. *Practical Optimization*. Academic Press, New York, 1981.
- Ch. Großmann und J. Terno. *Numerik der Optimierung*. Teubner Studienbücher. Teubner, 1993.
- M. Guidi, B.L. Adams, und E.T. Onat. Tensorial representation of the orientation distribution function in cubic polycrystals. *Textures Microstruct.*, 19:147–167, 1992.
- P. Halmos. *Finite-Dimensional Vector Spaces*. D. van Nostrand, New York, 1958.
- M.B. Halphen und Q.S. Nguyen. Sur le champ des vitesses en thermoplasticite finie. *Int. J. Solids Structures*, 11:947–960, 1975.
- J. Hansen, J. Prospeich, und Lücke K. *Tables for Texture Analysis of Cubic Crystals*. Springer, 1978.
- J. Harder. Simulation lokaler Fließvorgänge in Polykristallen. In *Braunschweiger Schriften zur Mechanik Nr. 28*. Institut für Allgemeine Mechanik und Festigkeitslehre, TU Braunschweig, 1997.
- S.V. Harren. The finite deformation of rate-dependent polycrystals-I. A self-consistent framework. *J. Mech. Phys. Solids*, 39(3):345–360, 1991a.
- S.V. Harren. The finite deformation of rate-dependent polycrystals-II. A comparison of the self-consistent and Taylor methods. *J. Mech. Phys. Solids*, 39(3): 345–360, 1991b.
- Z. Hashin und S. Shtrikman. A variational approach to the theory of the elastic behaviour of polycrystals. *J. Mech. Phys. Solids*, 10:343–352, 1962.
- Q.-C. He und A. Curnier. A more fundamental approach to damaged elastic stress-strain relations. *Int. J. Solids Struct.*, 32(10):1433–1457, 1994.

- K. Helming. *Texturapproximation durch Modellkomponenten*. Cuvillier Verlag Göttingen, 1996.
- A.V. Hershey. The elasticity of an isotropic aggregate of anisotropic crystals. *J. Appl. Mech.*, 21:236–241, 1954.
- R. Hill. A theory of yielding and plastic flow of anisotropic materials. *Proc. Phys. Soc. Lond.*, A 193:281–297, 1948.
- R. Hill. The elastic behaviour of a crystalline aggregate. *Proc. Phys. Soc. Lond.*, A 65:349–354, 1952.
- R. Hill. Elastic properties of reinforced solids: some theoretical principles. *J. Mech. Phys. Solids*, 11:357–372, 1963.
- R. Hill. Continuum micro-mechanics of elastoplastic polycrystals. *J. Mech. Phys. Solids*, 13:89–101, 1965.
- R. Hill. Theoretical plasticity of textured aggregates. *Math. Proc. Cambridge Phi. Soc.*, 85:179–191, 1979.
- R. Hill. Constitutive modelling of orthotropic plasticity in sheet metals. *J. Mech. Phys. Solids*, 38:405–417, 1990.
- R. Hill. A user-friendly theory of orthotropic plasticity in sheet metals. *Int. J. Mech. Sci.*, 15:19–25, 1993.
- H. Honnef und H. Mecking. A method for the determination of the active slip systems and orientation changes during single slip deformation. In G. Gottstein und K. Lücke, editors, *Textures of Materials*, 265–275, 1978.
- F.H. Hosford. *The Behaviour of Crystals and Textured Polycrystals*. Oxford University Press, 1993.
- J. Hu, T. Ishikawa, und K. Ikeda. Analysis on earing behavior of textured pure aluminum and A5083 alloy sheets. *Journal of Materials Processing Technology*, 83:200–208, 1998.
- M.T. Huber. The specific strain work as a measure of material effort. *Czasopismo Techniczne*, 22:81–83, 1904.

- J.W. Hutchinson. Elastic-plastic behaviour of polycrystalline metals and composites. *Proc. R. Soc. Lon., A* 319:247–272, 1970.
- J.W. Hutchinson. Bounds and self-consistent estimates for creep of polycrystalline materials. *Proc. R. Soc. Lon., A* 348:101–127, 1976.
- S.R. Kalidindi, C.A. Bronkhorst, und L. Anand. Crystallographic texture evolution in bulk deformation processing of fcc metals. *J. Mech. Phys. Solids*, 40(3): 537–569, 1992.
- N. Kanetake, Y. Tozawa, und T. Otani. Calculations from texture of earing in deep drawing for fcc metal sheets. *Int. J. Mech. Sci.*, 25(5):337–345, 1983.
- N. Kanetake, Y. Tozawa, und S. Yamamoto. Calculations of earing in deep drawing for bcc metal sheets using texture data. *Int. J. Mech. Sci.*, 27(4):249–256, 1985.
- T. Kanit, S. Forest, I. Galliet, V. Mounoury, und D. Jeulin. Determination of the size of the representative volume element for random composites: statistical and numerical approach. *Int. J. Solids Struct.*, 40:3647–3679, 2003.
- A.P. Karafillis und M.C. Boyce. A general anisotropic yield criterion using bounds and a transformation weighting tensor. *J. Mech. Phys. Solids*, 41(12):1859–1886, 1993.
- U. F. Kocks. Reliable modeling of complex behavior. In T. C. Lowe, A. D. Rollett, und G. S. Follansbee, P. S. Daehn, editors, *Modeling the Deformation of Crystalline Solids*, 175–188, 1991.
- U.F. Kocks. Laws for work hardening and low temperature creep. *J. Eng. Mater. Techn. (ASMEH)*, 98:75–85, 1976.
- U.F. Kocks und H. Mecking. Physics and phenomenology of strain hardening: The FCC case. *Progr. Mat. Sci.*, 48:171–273, 2003.
- U.F. Kocks, C.N. Tomé, und H.R. Wenk. *Texture and Anisotropy: Preferred Orientations in Polycrystals and Their Effect on Materials Properties*. Cambridge Univ. Pr., 1998.
- E. Kröner. Berechnung der elastischen Konstanten des Vielkristalls aus den Konstanten des Einkristalls. *Z. Phys.*, 151:504–518, 1958.

- E. Kröner. Zur plastischen Verformung des Vielkristalls. *Acta Metall.*, 9:155–161, 1961.
- S. Kumar. *Computer simulation of three-dimensional material microstructure and its application in the determination of mechanical behavior of polycrystalline materials and engineering structures*. PhD thesis, The Pennsylvania State University, 1992.
- S. Kumar und S. K. Kurtz. Simulation of material microstructure using a 3d voronoi tessellation: Calculation of effective thermal expansion coefficient of polycrystalline materials. *Acta metall. mater.*, 42(12):3917–3927, 1994.
- W.T. Lankford, S.C. Snyder, und J.A. Bausch. New criteria for predicting the press performance of deep drawing steels. *Trans. ASM*, 42:1197–1232, 1950.
- R.A. Lebensohn und C.N. Tomé. A self-consistent anisotropic approach for the simulation of plastic deformation and texture development of polycrystals: application to zirconium alloys. *Acta metall. mater.*, 41(9):2611–2624, 1993.
- T. Leffers. *Texturen in Forschung und Praxis*, 184, 1968. Riso. Rep.
- D.J. Lege, F. Barlat, und J.C. Brem. Characterization and modelling of the mechanical behavior and formability of a 2008-T4 sheet sample. *Int. J. Mech. Sci.*, 31(7):549–563, 1989.
- P. Les, M. Zehetbauer, E.F. Rauch, und I. Kopacz. Cold work hardening of Al from shear deformation up to large strains. *Scripta Materialia*, 41(5):523–228, 1999.
- S. Li und P. Van Houtte. Performance of statistical (Taylor, Lamel) and CP-FE models in texture predictions of aluminium alloys in cold rolling. *Aluminium*, 78:918–922, 2002.
- T.H. Lin. Analysis of elastic and plastic strains of a face-centered cubic crystal. *J. Mech. Phys. solids*, 5:143–149, 1957.
- J. Mandel. Thermodynamics and plasticity. In J.J. Delgado Domingos, M.N. Nina, und J.H. Whitlaw, editors, *Proc. Int. Symp. Foundations of Continuum Thermodynamics*, McMillan, London, 283, 1974.

- K.V. Mardia und P.E. Jupp. *Directional Statistics*. John Wiley & Sons, Ltd, 2000.
- K.K. Mathur und P.R. Dawson. On modeling the development of crystallographic texture in bulk forming processes. *Int. J. Plast.*, 5:67–94, 1989.
- S. Matthies. Standard functions in texture analysis. *Phys. Stat. Sol. B*, 101: K111–K115, 1980.
- S. Matthies und M. Humbert. On the principle of a geometric mean of even-rank symmetric tensors for textured polycrystals. *J. Appl. Cryst.*, 28:254–266, 1995.
- S. Matthies, J. Muller, und G.W. Vinel. On the normal distribution in the orientation space. *Textures and Microstructures*, 10:77–96, 1988.
- S. Matthies, G.W. Vinel, und K. Helming. *Standard Distributions in Texture Analysis*, volume 1. Akademie-Verlag Berlin, 1987.
- H. Mecking. Computer simulation of texture development. In *Sixth Int. Conf. on Textures of Materials, Tokyo*, 53–66, 1981.
- H. Mecking. Work hardening of single-phase polycrystals. In *Encyclopedia of Materials: Science and Technology*, 9785–9795. Elsevier Science Ltd., 2001.
- L. Méric und G. Cailletaud. Finite element implementation of a model for single crystals at finite strain. In P. Ladevèze und O.C. Zienkiewicz, editors, *New Advances in Computational Structural Mechanics*, 1992.
- L. Méric, G. Cailletaud, und M. Gaspérini. Calculations of copper bicrystal specimens submitted to tension–compression tests. *Acta metall. mater.*, 42(3): 921–935, 1994.
- C. Miehe. Exponential map algorithm for stress updates in anisotropic multiplicative elastoplasticity for single crystals. *Int. J. Num. Meth. Eng.*, 39:3367–3390, 1996.
- C. Miehe und J. Schotte. Anisotropic nite elastoplastic analysis of shells: simulation of earing in deep-drawing of single- and polycrystalline sheets by Taylor-type micro-to-macro transitions. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 193:25–57, 2004.

- C. Miehe, J. Schröder, und J. Schotte. Computational homogenization in finite plasticity. Simulation of texture development in polycrystalline materials. *Comp. Meth. Appl. Mech. Engng.*, 171:387–418, 1999.
- C. Moler und Charles van Loan. Nineteen dubious ways to compute the exponential of a matrix. *SIAM Revue*, 20(4):801–387, 1978.
- A. Molinari, G.R. Canova, und S. Ahzi. A self consistent approach of the large deformation polycrystal viscoplasticity. *Acta metall.*, 35:2983, 1987.
- J.W. Morris. Dislocation controlled plasticity of crystalline materials: Overview. In *Encyclopedia of Materials: Science and Technology*, 2245–2256. Elsevier Science Ltd., 2001.
- P.R. Morris. Averaging fourth-order tensors with weight functions. *J. Appl. Phys.*, 40(2):447–448, 1969.
- M.V. Nebozhyn, P. Gilormini, und P. Ponte Castaneda. Variational self-consistent estimates for cubic viscoplastic polycrystals: the effects of grain anisotropy and shape. *J. Mech. Phys. solids*, 49:313–340, 2001.
- S. Nemat-Nasser und M. Hori. *Micromechanics: Overall Properties of Heterogeneous Materials*, volume 37 of *North-Holland series in applied mathematics and mechanics*. Elsevier Science Publishers B.V, 1993.
- D.I. Nikolayev, T.I. Savyolova, und K. Feldmann. Approximation of the orientation distribution of grains in polycrystalline samples by means of Gaussians. *Textures and Microstructures*, 19:9–27, 1992.
- W. Noll. A mathematical theory of the mechanical behavior of continuous media. *Arch. Rat. Mech. Anal.*, 2:197–226, 1958.
- R.W. Ogden. Large deformation isotropic elasticity: on the correlation of theory and experiment for compressible rubberlike materials. *Proc. Royal. Soc. Lond.*, A328:567–583, 1972.
- R. Pearce. Some aspects of anisotropic plasticity in sheet metals. *Int. J. Mech. Sci.*, 10:995–1005, 1968.

- P. Ponte Castaneda. The effective mechanical properties of nonlinear isotropic composites. *J. Mech. Phys. solids*, 39(1):45–71, 1991.
- D. Raabe, P. Klose, B. Engl, K.-P. Imlau, F. Friedel, und F. Roters. Concepts for integrating plastic anisotropy into metal forming simulations. *Advanced Engineering Materials*, 4(4):169–180, 2002a.
- D. Raabe und F. Roters. Using texture components in crystal plasticity finite element simulations. *Int. J. Plast*, 20:339–361, 2004.
- D. Raabe, F. Roters, und Z. Zhao. A texture component crystal plasticity finite element method for physically-based metal forming simulations including texture update. *Materials Science Forum*, 396-402:31–36, 2002b.
- D. Raabe, Z. Zhao, und F. Roters. A finite element method on the basis of texture components for fast predictions of anisotropic forming operations. *Steel Research*, 72(10):421–426, 2001.
- A. Reuss. Berechnung der Fließgrenze von Mischkristallen auf Grund der Plastizitätsbedingung für Einkristalle. *Z. Angew. Math. Mech.*, 9:49–58, 1929.
- R.J. Roe. Description of crystalline orientation of polycrystalline materials. III. General solution to pole figure inversion. *J. Appl. Phys.*, 36:2024–2031, 1965.
- J. Rychlewski. Unconventional approach to linear elasticity. *Arch. Mech.*, 47(2):149–171, 1995.
- J. Rychlewski und J.M. Zhang. Anisotropy degree of elastic materials. *Arch. Mech.*, 47(5):697–715, 1989.
- G. Sachs. Zur Ableitung einer Fließbedingung. *Z. Verein dt. Ing.*, 72:734–736, 1928.
- M. Sachtleber, Z. Zhao, und D. Raabe. Experimental investigation of plastic grain interaction. *Materials Science and Engineering*, A336:81–87, 2002.
- G.B. Sarma und T. Zacharia. Integration algorithm for modeling the elasto-viscoplastic response of polycrystalline materials. *J. Mech. Phys. Solids*, 47:1219–1238, 1999.

- E. Schaberger, F. Grote, und A. Schievenbusch. Farbätzung und Farbbildanalyse - Ein Weg zur Charakterisierung von Gefügen innovativer Gusswerkstoffe. *Prakt. Metallogr.*, 37(8):419–433, 2000.
- H. Schaeben. “Normal” orientation distribution. *Textures and Microstructures*, 19:197–202, 1992.
- H. Schaeben. *Diskrete mathematische Methoden zur Berechnung und Interpretation von kristallographischen Orientierungsdichten*. DGM Informationsgesellschaft mbH, 1994.
- V. Schulze. *Anwendung eines kristallplastischen Materialmodells in der Umformsimulation*. PhD thesis, Otto von Guericke Universität Magdeburg, 2006.
- C. Shannon. A mathematical theory of communication. *Bell Sys. Tech. J.*, 27: 623–656, 1948.
- J.W. Signorelli, R. Logé, P.A. Turner, V. Sordi, E.A. Vieira, M. Ferrante, und R.E. Bolmaro. ECAE of Al-4%Cu alloys: experimental study assisted by polycrystalline-FEM simulations. *Materials Science Forum*, 495-497:775–784, 2005.
- J.C. Simo und T.R.J. Hughes. *Computational Inelasticity*. Springer, 1997.
- J.C. Simo und C. Miehe. Associative coupled thermoplasticity at finite stains: Formulation, numerical analyses and implementation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 98:41–104, 1992.
- G. Simons. *Mechanical Size Effects in Thin Copper Foils: An Experimental Study*. 2004. Dissertation, Swiss Federal Institute of Technology Zurich.
- B. Svendsen und A. Bertram. On frame-indifference and form-invariance in constitutive theory. *Acta Mech.*, 132:195–207, 1999.
- J. Tarasiuk, K. Wierzbanski, und B. Bacroix. Texture decomposition into Gauss-shaped functions: classical and genetic algorithm methods. *Comp. Mat. Science*, 29:179–186, 2004.
- G.I. Taylor. Plastic strain in metals. *J. Inst. Metals*, 62:307–324, 1938.

- C. Teodosiu, J.L. Raphanel, und L. Tabourot. Finite element simulation of the large elastoplastic deformation of multicrystals. In C. Teodosiu, J.L. Raphanel, und F. Sidoroff, editors, *MECAMAT'91*, 153–168, 1993.
- C.N. Tomé, P.J. Maudlin, R.A. Lebensohn, und G.C. Kaschner. Mechanical Response of Zirconium-I. Derivation of a Polycrystal Constitutive Law and Finite Element Analysis. *Acta mater.*, 49:3085–3096, 2001.
- L.S. Toth und P. Van Houtte. Discretization techniques for orientation distribution functions. *Textures and Microstructures*, 19:229–244, 1992.
- H. Tresca. Mémoire sur l'écoulement des corps solides soumis à de fortes pressions. *Comptes Rendus Acad. Sci. Paris*, 59:754, 1864.
- C. Truesdell und W. Noll. *The Non-Linear Field Theories of Mechanics*, volume III/3 of *Encyclopedia of Physics*. Springer, 1965.
- G.E.G. Tucker. Texture and earing in deep drawing of aluminium. *Acta Metallurgica*, 9:275–286, 1961.
- R. v. Mises. Mechanik der festen Körper im plastisch-deformablen Zustand. *Nachr. Kgl. Ges. Wiss. Göttingen, Math. Phys. Klasse*, 1:582–592, 1913.
- R. v. Mises. Mechanik der plastischen Formänderung bei Kristallen. *Z. angew. Math. Mech.*, 8(3):161–185, 1928.
- P. Van Houtte. Calculation of the Yield Locus of Textured Polycrystals Using the Taylor and the Relaxed Taylor Theory. *Textures Microstruct.*, 7:29–72, 1987.
- P. Van Houtte. A comprehensive mathematical formulation of an extended Taylor-Bishop-Hill model featuring relaxed constraints, the Renouard-Winterberger theory and a strain rate sensitive model. *Textures Microstruct.*, 8/9:313–350, 1988.
- P. Van Houtte. Quantitative prediction of cold rolling textures in low-carbon steel by means of the Lamel model. *Textures Microstruct.*, 31:109–149, 1999.
- P. Van Houtte, P. Clarke, und S. Saimoto. A quantitative analysis of earing during deep drawing. In J.G. Morris, H.D. Merchant, E.J. Westermann, und

- P.L. Morris, editors, *Aluminum Alloys for Packaging*, 261–273. The Minerals, Metals and Materials Society, 1993.
- P. Van Houtte, S. Li, M. Seefeldt, und L. Delannay. Comparison of two grain interaction models for polycrystal plasticity and deformation texture prediction. *Int. J. Plast.*, 18:359–377, 2002.
- P. Van Houtte, S. Li, M. Seefeldt, und L. Delannay. Deformation texture prediction: from the Taylor model to the advanced Lamel model. *Int. J. Plast.*, 21: 589–624, 2005.
- W. Voigt. *Lehrbuch der Kristallphysik*. Teubner Leipzig, 1910.
- M. Šilhavý. *The Mechanics and Thermodynamics of Continuous Media*. Springer, 1997.
- W. Walter. *Gewöhnliche Differentialgleichungen: Eine Einführung*. Springer, 1997.
- C.C. Wang und F. Bloom. Material uniformity and inhomogeneity in anelastic bodies. *Arch. Rat. Mech. An.*, 53:246–276, 1974.
- G. Wasserman und J. Grewen. *Texturen metallischer Werkstoffe*. Springer, 1962.
- G. Weber und L. Anand. Finite deformation constitutive equations and a time integration procedure for isotropic, hyperelastic-viscoplastic solids. *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*, 79:173–202, 1990.
- J. Woodthorpe und R. Pearce. The anomalous behaviour of aluminium sheet under balanced biaxial tension. *Int. J. Mech. Sci.*, 12:341–347, 1970.
- P. Wriggers. *Nichtlineare Finite-Element-Methoden*. Springer, 2001.
- J.W. Yoon, F. Barlat, R.E. Dick, und M.E. Karabin. Prediction of six or eight ears in a drawn cup based on a new anisotropic yield function. *Int. J. Plast.*, 22:174–193, 2006.
- A. Zaoui. Approximate statistical modeling and applications. In E. Sanchez-Palencia und A. Zaoui, editors, *Homogenization Techniques for Composite Media*, 338–383, 1996. Lecture Notes in Physics 272.

- K.S. Zhang, M.S. Wu, und R. Feng. Simulation of microplasticity-induced deformation in uniaxially strained ceramics by 3-D Voronoi polycrystal modeling. *Int. J. Plast.*, 21:801–834, 2005.
- Q.-S. Zheng und Y.-B. Fu. Orientation distribution functions for microstructures of heterogeneous materials: I Directional distribution functions and irreducible tensors. *Appl. Math. Mech.*, 22(8):865–884, 2001a.
- Q.-S. Zheng und Y.-B. Fu. Orientation distribution functions for microstructures of heterogeneous materials: II Crystal Distribution functions and irreducible tensors restricted by various material symmetries. *Appl. Math. Mech.*, 22(8): 885–903, 2001b.
- O.C. Zienkiewicz und R.L. Taylor. *The finite element method*. Butterworth-Heinemann, 5th edition, 2000.
- R. Zurmühl und S. Falk. *Matrizen und ihre Anwendungen: Für Angewandte Mathematiker, Physiker und Ingenieure*. Springer, 1984.

Abbildungsverzeichnis

1.1	Mikrostrukturen von einphasigem Kupfer (Estrin et al., 2002) und zweiphasigem NiAl (Schaberger et al., 2000)	1
2.1	Verschiebung eines Punktes bei der Bewegung des Körpers \mathcal{B}	8
2.2	Kubische Einkristalle für den k.-f.-z. und k.-r.-z. Gittertyp	16
3.1	OVF-Schnitte der Würfellage und der Goss-Lage für Mises-Fisher-Verteilungen mit $b = 25^\circ$ ($0 \leq \phi_1 \leq 90^\circ, 0 \leq \Phi \leq 90^\circ, 0 \leq \phi_2 \leq 90^\circ$)	33
3.2	Vergleich der experimentellen $\{100\}$ -Polfigur eines texturierten Aluminiumbleches (Lege et al., 1989) und deren Approximation durch Texturkomponenten	35
3.3	Vergleich der $\{100\}$ -Polfiguren für Taylor-Simulationen an Kupfer mit 1000 Einkristallen und für Anpassung mit Texturkomponenten	42
3.4	Vergleich der Entwicklung des Approximationsfehlers δ mit steigender Komponentenzahl bei der Anpassung an die Referenztexturen in den Abbildungen 3.3 (a,c,e) bei gleichen Volumenanteilen der Texturkomponenten	43
3.5	OVF-Darstellungen für die Würfellage und die Goss-Lage bestimmt aus dem in Gleichung (3.53) definierten Texturkoeffizienten vierter Stufe \mathbb{A}' ($0 \leq \phi_1 \leq 90^\circ, 0 \leq \Phi \leq 90^\circ, 0 \leq \phi_2 \leq 90^\circ$)	47
4.1	Einfluss der Variation der Parameter F bzw. G auf die R -Wert- und Fließspannungsverteilung für den Fall: $N > G + 2H$ und $N > F + 2H$	77
4.2	Einfluss der Variation der Parameter F bzw. G auf die R -Wert- und Fließspannungsverteilung für den Fall: $N < G + 2H$ und $N < F + 2H$	78

4.3	Einfluss der Variation der Parameter F bzw. G auf die R -Wert- und Fließspannungsverteilung für den Fall: $N < G + 2H$ und $N > F + 2H$	79
4.4	Einfluss der Variation der Parameter F bzw. G auf die R -Wert- und Fließspannungsverteilung für den Fall: $N > G + 2H$ und $N < F + 2H$	80
4.5	Einfluss der Variation des Parameters N auf die R -Wert- und Fließspannungsverteilung	81
6.1	Vergleich der Fließspannungsverteilungen in der Blechebene für ein gewalztes Aluminiumblech nach Lege et al. (1989)	105
6.2	Vergleich der R -Wertverteilungen in der Blechebene für ein gewalztes Aluminiumblech nach Lege et al. (1989)	106
6.3	{111}-Polfigur des DT-Modells für die Simulation der Ebenen Kompression (a). {111}-Polfigur berechnet aus vier Texturkomponenten (b). (Horizontale Achse: Querrichtung, Vertikale Achse: Walzrichtung)	108
6.4	Normierte Fließspannungs- und R -Wertverteilungen in der Blechebene für das KT- und das DT-Modell	108
6.5	Vergleich der normierten Fließspannungs- und R -Wertverteilungen in der Blechebene des KT-Modells, unter Variation der Halbwertsbreiten, und des DT-Modells, unter Verwendung der mittleren Orientierungen der Texturkomponenten	109
6.6	Zipfelbildung eines tiefgezogenen Napfes aus Aluminium (Engler und Kalz, 2004)	110
6.7	Geometrie der Apparatur für den Tiefziehprozeß	111
6.8	Deformierte FE-Struktur nach Simulation des Tiefziehprozesses für das DT-Modell für zwei verschiedene Einkristallorientierungen . .	114
6.9	Abhängigkeit des Zipfelprofils von der Textur des tiefgezogenen Bleches, die in diesem Fall nur durch die Orientierung eines Einkristalls bestimmt wird.	115
6.10	$(\varphi_2 = 0^\circ)$ -Schnitte des Orientierungsraumes für eine experimentell bestimmte Würfelftextur mit Goss-Anteil und deren Approximation durch Texturkomponenten	116

6.11	Deformierte FE-Struktur nach Simulation des Tiefziehprozesses für das DT-, KT- und ZS-Modell	117
6.12	Vergleich der normierten Zipfelprofile für das KT-, DT- und ZS-Modell mit den Experimenten nach Engler und Kalz (2004)	118
6.13	Deformierte FE-Struktur nach Simulation des Tiefziehprozesses für das DT- und KT-Modell	119
6.14	Vergleich der normierten Zipfelprofile für das KT-, DT- und ZS-Modell mit den Experimenten nach Lege et al. (1989)	120
6.15	Tiefgezogener Napf für das DT-Modell, basierend auf 1000 Einkristallen, und das KT-Modell, basierend auf vier Texturkomponenten	121
6.16	Normierte und absolute Zipfelprofile für das DT-Modell, basierend auf 1000 Einkristallen, und das KT-Modell ($\beta = 1$), basierend auf vier Texturkomponenten	121
6.17	Zipfelprofile für ein Blech mit Würfelftextur bei unterschiedlichen isotropen Volumenfraktionen im DT-Modell und verschiedenen Halbwertsbreiten im KT-Modell	124

Tabellenverzeichnis

2.1	Gleitsysteme für einkristallines Aluminium	16
2.2	Gleitsysteme für einkristallines α -Eisen in Abhängigkeit der Temperatur ϑ	17
2.3	Materialparameter für Aluminium bei Raumtemperatur	23
3.1	Haupttexturkomponenten eines 2008-T4 Bleches (Lege et al., 1989) charakterisiert durch Volumenfraktionen, Halbwertsbreiten und Eulerwinkel unter Berücksichtigung orthotroper Probensymmetrie	33
3.2	Angepasste Komponenten für die ebene Kompression, die einfache Scherung und die Elongation	41
4.1	Materialparameter für Aluminium bei Raumtemperatur auf der Makroebene	68
6.1	Texturkomponenten eines Aluminiumbleches, charakterisiert durch mittlere Orientierungen, Halbwertsbreiten und Volumenanteile, deren OVF in Abbildung 6.10 dargestellt ist.	116