

**BEITRÄGE  
ZUR  
MATERIALTHEORIE**

**Herausgeber: Univ.-Prof. Dr.-Ing. habil. Alexander Lion**

---

**Johannes Retka und Philipp Höfer**

**Numerische Simulation aushärtender  
Klebstoffe**



# **Numerische Simulation aushärtender Klebstoffe**

von

**Johannes Retka und Philipp Höfer**

Universität der Bundeswehr München  
Fakultät für Luft- und Raumfahrttechnik  
Institut für Mechanik (LRT 4)  
Werner-Heisenberg-Weg 39  
85579 Neubiberg  
Deutschland

**Heft 1/07 der Reihe**

**Beiträge zur Materialtheorie**

**Herausgeber: Univ.-Prof. Dr.-Ing. habil. Alexander Lion**

**ISSN 1862-5703**



**Herausgeber:**

Univ.-Prof. Dr.-Ing. habil. Alexander Lion  
Universität der Bundeswehr München  
Fakultät für Luft- und Raumfahrttechnik  
Institut für Mechanik (LRT 4)  
Werner-Heisenberg-Weg 39  
85579 Neubiberg  
Deutschland

---

**Postanschrift der Verfasser:**

Johannes Retka  
Fakultät für Luft- und Raumfahrttechnik  
Institut für Mechanik  
Universität der Bundeswehr München  
85577 Neubiberg

Philipp Höfer  
Fakultät für Luft- und Raumfahrttechnik  
Institut für Mechanik  
Universität der Bundeswehr München  
85577 Neubiberg

Dieses Werk ist urheberrechtlich geschützt. Jede Verwertung außerhalb der Grenzen des Urheberrechtsgesetzes ist unzulässig und strafbar. Insbesondere gilt dies für die Übersetzung, den Nachdruck sowie die Speicherung auf Mikrofilm, mit vergleichbaren Verfahren oder in Datenverarbeitungsanlagen.



# Vorwort

Kleben als Füge­technik kommt in der Luftfahrt- und Automobilindustrie verstärkt auch in strukturellen Bereichen zum Einsatz. Dadurch sind die Anforderungen an Zuverlässigkeit und Vorhersagbarkeit der Klebeverbindung besonders hoch. Maßgeblichen Einfluss auf die Festigkeit haben u.a. während der Aushärtung entstehende Eigenspannungen, die bisher nur über einige Umwege simuliert werden können. Das Institut für Mechanik entwickelt neue Materialmodelle und führt Experimente an Klebstoffen durch, um durch FE-Simulationen bereits im Vorfeld qualitative und quantitative Aussagen über die Klebeverbindung treffen zu können.

Thematisch befasst sich diese Arbeit mit der kontinuumsmechanischen Beschreibung und der numerischen Simulation aushärtender Klebstoffe. Ein entsprechender thermodynamisch konsistenter kontinuumsmechanischer Modellierungsansatz wurde bereits in Lion u. Höfer (2006) vorgeschlagen, und bildet die Grundlage für die in dieser Arbeit durchgeführten Untersuchungen. Die sehr allgemein gehaltene Formulierung ist zunächst auf eine Vielzahl denkbarer Phasenumwandlungsprozesse anwendbar (z.B. auch Vulkanisationsprozesse) und beinhaltet keinerlei Einschränkungen hinsichtlich spezieller Klebstoffsysteme. In diesem Sinne ist dieser Bericht als grundlegende Untersuchung der Implementierbarkeit ohne eine genauere Spezifizierung des verwendeten Klebstoffes zu betrachten.

Das Ziel der Arbeit ist eine Implementierung des o.g. Materialmodells in ein kommerzielles Finite-Element Programm, in diesem Fall MSC.Marc. Damit sind die wesentlichen Kernpunkte dieser Arbeit die Ableitung konsistenter Tangenten bzw. Steifigkeitsmatrizen sowie die entsprechende numerische Umsetzung in ein thermomechanisch gekoppeltes Lösungsschema. Abschließend werden einige Testsimulationen durchgeführt, die die Möglichkeiten des Materialmodells unter Beweis stellen. Auf Begleitmaterial zu dieser Arbeit (Animation der Simulationsergebnisse) kann über die Homepage des Instituts zugegriffen werden. Parameterstudien, die Formulierung spezieller Evolutionsgleichungen und die Identifikation von Parametern für konkrete Klebstoffsysteme sollen in weiterführenden Arbeiten und Projekten untersucht werden.

Die vorliegende Arbeit wurde von Herrn Johannes Retka als Diplomarbeit am Institut für Mechanik angefertigt. Er hat bei seiner Arbeit ein hervorragendes Ergebnis erzielt und wurde auf der Diplomierungsfeier der Universität der Bundeswehr München am 15.12.2006 für seine Diplomarbeit mit dem Studienpreis der EADS ausgezeichnet.

Philipp Höfer





# Inhaltsverzeichnis

<b>Verzeichnisse</b>	<b>i</b>
Inhaltsverzeichnis . . . . .	i
Abbildungsverzeichnis . . . . .	iv
Tabellenverzeichnis . . . . .	v
Abkürzungsverzeichnis . . . . .	vi
Formelzeichenverzeichnis . . . . .	vii
<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>1 Grundlagen der Kontinuumsmechanik</b>	<b>3</b>
1.1 Allgemeines . . . . .	3
1.2 Kinematik . . . . .	3
1.2.1 Konfiguration und Bewegung . . . . .	3
1.2.2 Deformationsgradient . . . . .	4
1.2.3 Zerlegung des Deformationsgradienten . . . . .	7
1.2.4 Deformations- und Verzerrungstensoren . . . . .	9
1.2.5 Spannungstensoren . . . . .	12
1.3 Bilanzrelationen . . . . .	14
1.3.1 Massenbilanz . . . . .	14
1.3.2 Impulsbilanz . . . . .	15
1.3.3 Drehimpulsbilanz . . . . .	16
1.3.4 Erster Hauptsatz der Thermodynamik . . . . .	17
1.3.5 Zweiter Hauptsatz der Thermodynamik . . . . .	20
1.4 Konstitutive Gleichungen . . . . .	23
1.4.1 Hyperelastische Materialien . . . . .	23
1.4.2 Auswertung der Clausius-Duhem Ungleichung . . . . .	24
1.4.3 Berücksichtigung der Inkompressibilität . . . . .	26
1.4.4 Inkompressibles Neo-Hooke-Material . . . . .	28
<b>2 Methode der finiten Elemente</b>	<b>30</b>
2.1 Gateaux-Ableitung . . . . .	31
2.2 Newton-Raphson-Verfahren . . . . .	32
2.3 Lösungsverfahren für thermomechanisch gekoppelte Problemstellungen	34
2.4 Mechanisches Funktional . . . . .	35
2.4.1 Schwache Form der Bewegungsgleichung . . . . .	35
2.4.2 Linearisierung des Arbeitsprinzips . . . . .	38
2.4.3 Diskretisierung des Arbeitsprinzips . . . . .	40
2.5 Thermisches Funktional . . . . .	43
2.5.1 Schwache Form der Wärmeleitgleichung . . . . .	43
2.5.2 Numerische Lösung des thermischen Funktionals . . . . .	46
2.6 Berücksichtigung der Inkompressibilität . . . . .	46
2.6.1 Methode der Lagrangeschen Multiplikatoren . . . . .	46
2.6.2 Herrmann-Formulierung . . . . .	48
2.7 Implementierung in MSC.MARC . . . . .	49

2.7.1	Berücksichtigung des mechanischen Funktionals . . . . .	51
2.7.2	Berücksichtigung des thermischen Funktionals . . . . .	51
<b>3</b>	<b>Lineare Viskoelastizität</b>	<b>53</b>
3.1	Konzept der inneren Variablen . . . . .	53
3.2	Rheologische Modelle . . . . .	53
3.2.1	Maxwell-Modell . . . . .	54
<b>4</b>	<b>Thermomechanik von Aushärtvorgängen</b>	<b>59</b>
4.1	Beschreibung der Aushärtung . . . . .	59
4.2	Kinematik . . . . .	61
4.2.1	Zerlegung des Deformationsgradienten . . . . .	61
4.2.2	Mechanisch inkompressibles Verhalten . . . . .	63
4.3	Freie Helmholtzsche Energie . . . . .	63
4.3.1	Zerlegung der Spannungsleistung . . . . .	63
4.3.2	Ansatz für die Freie Helmholtzsche Energie . . . . .	66
4.4	Auswertung der Clausius-Duhem-Ungleichung . . . . .	69
4.5	Ableitung der Wärmeleitgleichung . . . . .	71
4.6	Zusammenfassung . . . . .	73
4.6.1	Kinematik . . . . .	73
4.6.2	Konstitutive Beziehungen . . . . .	74
<b>5</b>	<b>Implementierung in MSC.MARC</b>	<b>77</b>
5.1	Innere Variablen . . . . .	77
5.1.1	Aushärtgrad . . . . .	77
5.1.2	Intrinsische Zeit . . . . .	78
5.2	Kinematik . . . . .	78
5.2.1	Zerlegung des Deformationsgradienten . . . . .	79
5.2.2	Zwangsbedingung . . . . .	79
5.3	Spannungstensor . . . . .	82
5.4	Temperaturspannungstensor . . . . .	84
5.5	Tangentenoperator . . . . .	85
5.6	Wärmeleitgleichung . . . . .	86
<b>6</b>	<b>Auswertung anhand von Beispielsimulationen</b>	<b>90</b>
6.1	Simulationsbeispiele . . . . .	90
6.1.1	Realisierung der FE-Rechnung . . . . .	90
6.1.2	Beispielsimulationen . . . . .	91
6.1.3	Materialparameter . . . . .	92
6.2	Deformationsverhalten . . . . .	93
6.3	Temperaturentwicklung . . . . .	94
6.4	Spannungen . . . . .	102
<b>7</b>	<b>Diskussion und Ausblick</b>	<b>105</b>

<b>A Grundlagen der Tensoralgebra</b>	<b>107</b>
A.1 Anmerkungen zur Notation . . . . .	107
A.2 Produkte von Tensoren . . . . .	108
A.2.1 Skalarprodukt . . . . .	108
A.2.2 Kreuzprodukt . . . . .	109
A.2.3 Dyadische Verknüpfung . . . . .	109
A.3 Transponierte und Inverse . . . . .	110
A.4 Abgewandelte Elastizitätsmatrix eines FE-Programmes . . . . .	111
<b>B Kelvin-Modell</b>	<b>112</b>
<b>C Quellcode der User Subroutinen</b>	<b>115</b>
C.1 Übersicht über die verwendeten Bezeichnungen . . . . .	115
C.2 Übersicht der eingeführten State Variables . . . . .	119
C.3 Quellcode . . . . .	120
<b>Literatur</b>	<b>137</b>

## Abbildungsverzeichnis

1	Konfigurationen und Bewegung eines Kontinuums. . . . .	4
2	Umgebung eines Punktes in der Theorie einfacher Stoffe. . . . .	6
3	Polare Zerlegung des Deformationsgradienten. . . . .	8
4	Volumetrisch-isochores Zerlegung des Deformationsgradienten. . . . .	9
5	Aufteilung eines Kontinuums in finite Elemente. . . . .	30
6	Gateaux-Ableitung einer skalaren Funktion in Richtung eines Vektors. . . . .	32
7	Schematische Darstellung des Newton-Raphson-Verfahrens. . . . .	33
8	Schematische Darstellung des Staggered Solution Algorithmus. . . . .	35
9	Maxwell-Modell. . . . .	54
10	Verallgemeinertes Maxwell-Modell. . . . .	57
11	Vorbereitung und Aushärtung eines zwei-Komponenten Klebers. . . . .	60
12	Multiplikative Zerlegung des Deformationsgradienten. . . . .	62
13	Relative mechanische Deformationsgradienten. . . . .	67
14	Schematische Darstellung einer überlappenden Klebeverbindung. . . . .	90
15	Veranschaulichung der Beispielrechnungen. . . . .	91
16	Volumen-Zeit-Diagramm. . . . .	93
17	Deformationsverhalten. . . . .	95
18	Temperatur-Zeit-Diagramm des adiabaten Aushärteprozesses. . . . .	96
19	Temperaturverteilung am Ende des adiabaten Aushärteprozesses. . . . .	97
20	Temperaturverteilung während des Aushärteprozesses mit Wärmetransport. . . . .	97
21	Temperatur-Zeit-Diagramm eines Aushärteprozesses mit Wärmetransport; Temperaturentwicklung in der Mitte des Klebemittels. . . . .	98
22	Temperatur-Zeit-Diagramm eines Aushärteprozesses mit Wärmetransport; Temperaturentwicklung am Rand des Klebemittels. . . . .	98
23	Temperaturentwicklung des adiabaten Aushärteprozesses. . . . .	100
24	Temperaturentwicklung eines Aushärteprozesses mit Wärmetransport. . . . .	101
25	Spannungen entlang der Achsen. . . . .	103
26	Schubspannungen. . . . .	104
27	Kelvin-Modell. . . . .	112

## Tabellenverzeichnis

1	Materialparameter. . . . .	92
---	----------------------------	----

## Abkürzungsverzeichnis

Dgl.	Differentialgleichung
FE	<u>F</u> inite <u>E</u> lemente
FEM	<u>F</u> inite <u>E</u> lemente <u>M</u> ethode
Glg.	Gleichung

# Formelzeichenverzeichnis

## Bezeichnungen

$P$	materieller Punkt im dreidimensionalen Raum
$p$	räumlicher Punkt im dreidimensionalen Raum
$Q$	materieller Punkt im dreidimensionalen Raum
$q$	räumlicher Punkt im dreidimensionalen Raum
$\mathcal{R}$	Referenzkonfiguration
$\mathcal{C}$	Momentankonfiguration
$\mathcal{Z}$	Zwischenkonfiguration
$d(\dots)$	differentielle Größe
$\nabla_0$	materieller Nablaoperator
$\nabla$	räumlicher Nablaoperator
$(\dots)^T$	Transponierte eines Tensors 2. Stufe
$(\dots)^{-1}$	Inverse eines Tensors 2. Stufe
$(\dots)^{-T}$	Inverse eines transponierten Tensors 2. Stufe
	$(\dots)^{-T} = ((\dots)^T)^{-1} = ((\dots)^{-1})^T$
$\det(\dots) = \text{III}(\dots)$	Determinante eines Tensors 2. Stufe bzw. 3. Invariante
$\text{II}(\dots)$	2. Invariante eines Tensors 2. Stufe
$\text{trace}(\dots) = \text{I}(\dots)$	Spur eines Tensors 2. Stufe bzw. 1. Invariante
$\delta_{ij}, \delta_{IJ}$	Kronecker-Delta
$(\dots)_R$	Größe der Referenzkonfiguration
$(\dots)_{int}$	interne Größe
$(\dots)_{ext}$	externe Größe
$\text{Grad}(\dots)$	materieller Gradient, $\text{Grad}(\dots) = \nabla_0 \otimes (\dots)$
$\text{grad}(\dots)$	räumlicher Gradient, $\text{grad}(\dots) = \nabla \otimes (\dots)$
$\text{Div}(\dots)$	materielle Divergenz, $\text{Div}(\dots) = \nabla_0 \cdot (\dots)$
$\text{div}(\dots)$	räumliche Divergenz, $\text{div}(\dots) = \nabla \cdot (\dots)$
$\text{D}(\dots)[\dots]$	Gateaux-Ableitung
$(\dots)^{T_{ij}}$	Transposition der Indizes $i$ und $j$ eines Tensors 4. Stufe
$(\dots)_p, (\dots)^p$	Größe bezieht sich auf den hydrostatischen Druck
$(\dots)_u$	Größe bezieht sich auf die Verzerrungsenergiefunktion
$(\dots)_{iso}$	isochore Größe
$(\dots)_{vol}$	volumetrische Größe
$(\dots)_M$	mechanische Größe
$(\dots)_\theta$	Größe bezieht sich auf die Temperatur
$(\dots)_{el}$	elastische Größe
$(\dots)_{in}$	inelastische Größe
$X'(y)$	Ableitung der Funktion $X$ nach dem zugehörigen Argument $y$
$(\dots)_F$	Größe bezieht sich auf einen Federanteil
$(\dots)_D$	Größe bezieht sich auf einen Dämpferanteil
$(\dots)_{Hz}$	Größe bezieht sich auf das Harz

$(\dots)_{Ht}$	Größe bezieht sich auf den Härter
$(\dots)_{Kl}$	Größe bezieht sich auf den festen Kleber
$(\dots)_C$	chemische Größe
$\Delta(\dots) = \text{Div}(\text{Grad}(\dots))$	Laplace-Operator
$(\dots)_{C\theta}$	thermochemische Größe
$(\dots)^\psi$	Größe bezieht sich auf die freie Energie

### Skalare

$t$	Zeit
$V$	Volumen
$F$	Determinante des Deformationsgradienten
$m$	Masse
$\rho$	Dichte
$A$	Oberfläche
$\mathcal{P}$	mechanische Leistung
$\mathcal{K}$	kinetische Energie
$\mathcal{E}$	innere Energie
$Q$	thermische Energie
$e$	spezifische innere Energie
$r$	spezifische Wärmequelle
$\Gamma$	innere Entropieproduktion
$\gamma$	spezifische innere Entropieproduktion
$S$	Entropie
$s$	spezifische Entropie
$\psi$	Helmholtzsche freie Energie
$H$	Rate der zugeführten Entropie
$\tilde{r}$	spezifische Entropiequelle
$\theta$	Temperatur
$z$	intrinsische Zeit
$N_a$	Ansatzfunktionen
$u$	Verzerrungsenergiefunktion
$\alpha, \beta, \mu$	allgemeine skalare Größen
$p$	hydrostatischer Druck
$\kappa$	Wärmeleitfähigkeit
$\omega$	Restgröße
$q_N$	materieller Wärmefluss auf der Oberfläche
$R$	allgemeine Wärmequelle
$\Pi$	Potentialenergie
$c_d$	Wärmekapazität
$\varepsilon$	eindimensionale Dehnung
$\sigma$	eindimensionale Spannung
$\eta$	Viskosität
$E$	Elastizitätsmodul
$\tau$	Relaxationszeit bzw. Retardationszeit



$\xi$	Zeitvariable
$G$	Relaxationsfunktion
$g$	freie Enthalpie
$J$	Kriechfunktion
$L$	Nachgiebigkeit
$\nu$	Massenverhältnis
$q$	chemische Reaktionskoordinate bzw. Aushärtegrad
$g$	Aushärtung-Volumen-Funktion
$\varphi$	Temperatur-Volumen-Funktion
$w$	Spannungsleistung
$\Phi$	chemisch gebundene freie Energie
$h$	thermisch gebundene freie Energie
$\lambda, \mu_0, z_0$	Materialparameter
$m, n, \tau_+, \tau_-$	Materialparameter
$\alpha, \beta, \gamma$	Materialparameter
$\beta_C$	chemischer Ausdehnungskoeffizient
$\beta_\theta$	thermischer Ausdehnungskoeffizient
$W$	Arbeit

### Spaltenmatrizen

$\{\mathbf{u}\}$	Spaltenmatrix der Knotenpunktverschiebungen
$\{\delta\mathbf{u}\}$	Spaltenmatrix der virtuellen Knotenpunktverschiebungen
$\{\Delta\mathbf{u}\}$	Spaltenmatrix der inkrementellen Knotenpunktverschiebungen
$\{\mathbf{R}\}$	Spaltenmatrix der Knotenpunktkräfte bzw. -lasten
$[\mathbf{K}]$	Tangentensteifigkeitsmatrix

### Vektoren

$\mathbf{X}$	materieller Ortsvektor
$\mathbf{x}$	räumlicher Ortsvektor
$\mathbf{u}$	Verschiebungsfeld
$\chi$	Bewegung
$\mathbf{E}_i$	orthonormierter Vektor der Ausgangskonfiguration
$\mathbf{e}_i$	orthonormierter Vektor der Momentankonfiguration
$\mathbf{A}$	materieller Flächenvektor
$\mathbf{a}$	räumlicher Flächenvektor
$\mathbf{f}$	Kraftvektor
$\mathbf{L}$	Impulsvektor
$\hat{\mathbf{t}}$	Oberflächenkraftvektor Momentankonfiguration
$\hat{\mathbf{T}}$	Oberflächenkraftvektor Referenzkonfiguration
$\mathbf{k}$	Massenkraftvektor
$\mathbf{v}$	Geschwindigkeitsvektor
$\mathbf{n}$	Normalenvektor Momentankonfiguration

<b>J</b>	Drehimpulsvektor
<b>m</b>	Momentenvektor Momentankonfiguration
<b>q</b>	Wärmestromvektor
<b>h</b>	Entropiestromvektor
<b>r</b>	Lastvektor
$\varsigma$	Residuenvektor
$\xi$	isoparametrische Koordinaten

### Tensoren 2. Stufe

<b>F</b>	Deformationsgradient
<b>1</b>	Einheitsmatrix
<b>H</b>	Verschiebungsgradient
<b>U</b>	rechter Strecktensor
<b>V</b>	linker Strecktensor
<b>R</b>	Drehtensor
<b>C</b>	rechter Cauchy-Green-Tensor
<b>B</b>	linker Cauchy-Green-Tensor
<b>E</b>	Verzerrungstensor nach Green-Lagrange
<b>A</b>	Verzerrungstensor nach Euler-Almansi
<b>e</b>	Verzerrungstensor nach Piola
<b>T</b>	Cauchyscher Spannungstensor
<b>P</b>	1. Piola-Kirchhoffscher Spannungstensor
$\tilde{\mathbf{T}}$	2. Piola-Kirchhoffscher Spannungstensor
<b>d</b>	Deformationsrate
<b>w</b>	Spintensor
<b>K</b>	Operator 2. Stufe
$\Theta$	Temperatur-Spannungstensor
<b>D</b>	Tensor 2. Stufe
$\tilde{\mathbf{T}}_\theta$	thermisch induzierte Spannungen
<b>L</b>	räumlicher Geschwindigkeitsgradient

### Tensoren 3. Stufe

$\varepsilon$	Permutationstensor $\varepsilon = e_{ijk} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_k$
---------------	---

### Tensoren 4. Stufe

<b>C</b>	materieller Elastizitätstensor
<b>E</b>	Ableitungstensor

## Einleitung

Vor allem in der Autoindustrie werden in den letzten Jahren verstärkt Klebeverbindungen eingesetzt, um Bleche zu verbinden. Dabei muss die Festigkeit unter monotoner Beanspruchung, Scherbelastungen oder Crashbelastungen gegeben sein. Zur Simulation des Verhaltens ausgehärteter Klebstoffe existieren bereits Finite Elemente (FE) Anwendungen.

In einer Vielzahl anderer Anwendungen sind aber der zeitabhängige Aushärteprozess und die dabei auftretenden thermomechanischen Eigenschaften des Klebemittels von Bedeutung.

Das Ziel dieser Arbeit ist es, ein Materialmodell, das die Thermomechanik von Aushärteprozessen beschreibt, in ein kommerzielles FE-Programm zu implementieren und anhand einfacher Beispielrechnungen zu überprüfen.

Das verwendete Materialmodell wurde erstmals von Lion u. Höfer (2006) beschrieben und behandelt die Phänomenologie von Aushärteprozessen eines zwei-Komponenten Klebers. Dem Modell liegt eine finite thermoviskoelastische Theorie zu Grunde, die den zweiten Hauptsatz der Thermodynamik erfüllt. Durch das Modell besteht die Möglichkeit alle wesentlichen Merkmale eines Aushärteprozesses darzustellen. Diese sind die Phasenumwandlung von einem viskosen Fluid zu einem viskoelastischen Festkörper, die aufgrund der chemischen Reaktion und dissipativer Prozesse entstehende Wärme, die chemische Schrumpfung und thermisch bedingte Volumenänderung während des Aushärteprozesses sowie die entstehenden Spannungen.

Um die Aushärtung beliebiger Klebeverbindungen simulieren zu können, ist es sinnvoll das Materialmodell in ein kommerzielles FE-Programm zu implementieren.

Treten wie in diesem Fall finite Deformationen auf, ist eine lineare Behandlung des Problems nicht mehr möglich. Daher wird das Problem mit Hilfe der Kontinuumsmechanik behandelt. Die zugehörige Kinematik und die in den daraus resultierenden Größen formulierten Bilanzgleichungen werden kurz in Kap. 1 beschrieben. Weiterhin wird in diesem Kapitel ein einfaches Modell zur Beschreibung inkompressibler Hyperelastizität betrachtet, an dem die Berücksichtigung der Inkompressibilität veranschaulicht wird.

In Kap. 2 wird die Methode der finiten Elemente betrachtet. Es werden eine Richtungsableitung sowie ein häufig verwendetes Lösungsverfahren vorgestellt, bevor im Einzelnen darauf eingegangen wird, wie eine thermomechanisch gekoppelte Problemstellung gelöst werden kann. Ausgehend von den Bilanzrelationen werden anschließend das mechanische und das thermische Funktional hergeleitet und linearisiert. Am Beispiel des mechanischen Funktionals wird außerdem die bei der Finiten Elemente Methode (FEM) durchgeführte Ortsdiskretisierung veranschaulicht. Da das Materialmodell mechanische Inkompressibilität voraussetzt, wird weiterhin auf die Möglichkeiten zur Berücksichtigung dieser Zwangsbedingung eingegangen und die Herrmann-Formulierung eingeführt. Das vorliegende Materialmodell wird in das FE-Programm MSC.MARC implementiert. Der letzte Teil des Kap. 2 behandelt deswegen die programmspezifischen Gegebenheiten, die bei der Implementierung berücksichtigt werden müssen. Dazu wird die verwendete User-Subroutine HYPELA2 vorgestellt sowie das Vorgehen zur Implementierung der thermomechanischen Kopplung erläutert.

Das dritte Kapitel behandelt die Grundlagen der linearen Viskoelastizität, da das Ma-

terialmodell auf der Theorie der Viskoelastizität aufbaut. Aufgrund der Vorteile rheologischer Modelle zur Beschreibung von viskoelastischem Materialverhalten wird exemplarisch das Maxwell-Modell betrachtet.

Darauf aufbauend wird in Kap. 4 das Materialmodell zur Beschreibung der Thermo-  
mechanik von Aushärtvorgängen vorgestellt und die benötigten konstitutiven Gleichungen bestimmt. Ausgehend von diesen Gleichungen werden in Kap. 5 schließlich die notwendigen Schritte dargestellt, um die konstitutiven Gleichungen des Materialmodells in das FE-Programm MSC.MARC zu implementieren. Anschließend werden in Kap. 6 verschiedene Beispielsimulationen durchgeführt, mit dem Ziel, die Eigenschaften des Materialmodells zu verifizieren. Die gewonnenen Ergebnisse werden anschließend in Kap. 7 diskutiert.

Im Anhang werden kurz die in dieser Arbeit verwendeten Schreibweisen erläutert. Zudem findet sich dort der erstellte Quellcode.

# 1 Grundlagen der Kontinuumsmechanik

## 1.1 Allgemeines

Unter dem Begriff Kontinuum wird eine innerhalb eines Volumens gleichmäßig verteilte Menge von Materie mit kontinuierlichem Materialverhalten verstanden. Das Ziel der Kontinuumsmechanik ist es, das Materialverhalten der Berechnung zugänglich zu machen. Behandelt werden Materialien endlicher Größe, d. h. makroskopische Systeme, so dass von einem mittleren, kontinuierlichen Materialverhalten ausgegangen werden kann. Im Gegensatz dazu sind der mikroskopische Gefügeaufbau und damit die mikroskopischen Werkstoffeigenschaften in der Regel nicht kontinuierlich.

In der Kontinuumsmechanik unterscheidet man drei Klassen funktionaler Beziehungen.

**Kinematik** Die Kinematik beschreibt die Bewegung eines Kontinuums unabhängig von der Ursache.

**Bilanzrelationen** Die Bilanzrelationen umfassen allgemein gültige Prinzipien und Naturgesetze.

**konstitutive Gleichungen** Die konstitutiven Gleichungen sind die Beziehungen, die i. Allg. die jeweiligen Materialeigenschaften festlegen.

Analog zu dieser Ausführung ist dieses Kapitel aufgebaut.

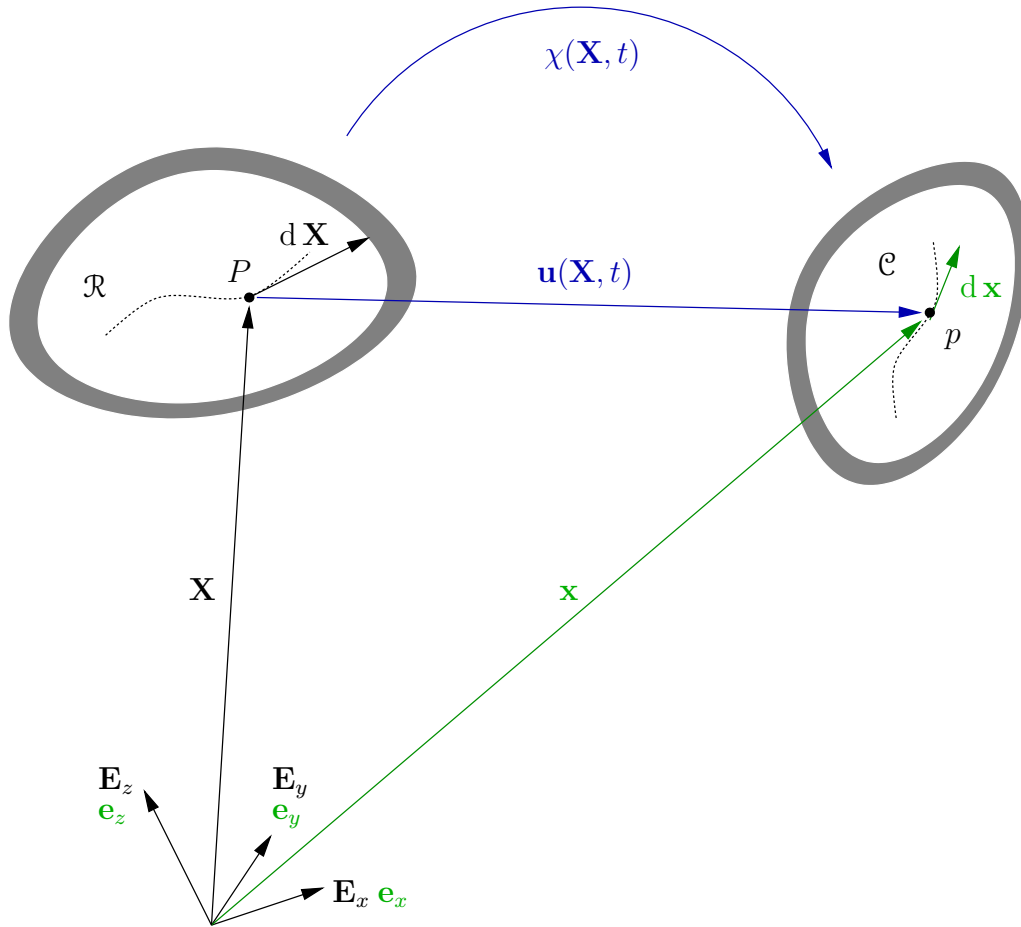
Die Darstellung bezieht sich im Wesentlichen auf Holzapfel (2000), Parisch (2003) und Emmerling (1998). Die gewählte Notation kann im Anhang A nachgeschlagen werden und die eingeführten Größen sind zusätzlich im Formelzeichenverzeichnis aufgeführt.

## 1.2 Kinematik

### 1.2.1 Konfiguration und Bewegung

Da bei allgemeinen finiten Deformationen die Lage der materiellen Punkte des kontinuierlichen Körpers zu Beginn, d. h. zum Zeitpunkt  $t = 0$ , nicht mit ihrer aktuellen Lage übereinstimmt, muss zwischen diesen in geeigneter Weise unterschieden werden. Hierzu wird der Begriff der Konfiguration eingeführt. Ein Körper ist zum Zeitpunkt  $t = 0$  in der Ausgangskonfiguration  $\mathcal{R}$ ; der aktuelle Verformungszustand wird als Momentankonfiguration  $\mathcal{C}$  bezeichnet. Weiterhin können eine oder mehrere so genannte Zwischenkonfigurationen  $\mathcal{Z}_i$  definiert werden. Diese müssen nicht vom Kontinuum eingenommen werden, vielmehr dient eine solche Definition einer einfacheren mathematischen Betrachtung. Beziehen sich alle Größen auf eine Konfiguration, so wird von der Referenzkonfiguration gesprochen. Diese fällt in dieser Arbeit immer mit der Ausgangskonfiguration zusammen.

Der Ortsvektor eines Punktes in einem Kontinuum in der Ausgangskonfiguration  $\mathcal{R}$  wird mit dem Symbol  $\mathbf{X}$ , den materiellen Koordinaten, dargestellt, derjenige desselben Punktes in der Momentankonfiguration  $\mathcal{C}$  mit dem Symbol  $\mathbf{x}$ , den räumlichen Koordinaten. Drückt man einen Zustand mit Größen der Referenzkonfiguration aus, handelt es sich um die Lagrangesche Betrachtungsweise. Beschreibt man den gleichen Zustand



**Abbildung 1:** Konfigurationen und Bewegung eines Kontinuums. Die Koordinatensysteme fallen ohne Beschränkung der Allgemeinheit zusammen.

mit Größen der Momentankonfiguration, wird dies als Eulersche Betrachtungsweise bezeichnet.

Wie in Abb. 1 weiter deutlich wird, sind die Ortsvektoren durch das Verschiebungsfeld  $\mathbf{u}(\mathbf{X}, t)$  verbunden. Die Bewegung  $\chi(\mathbf{X}, t)$  bildet die materiellen Koordinaten  $\mathbf{X}$  auf die räumlichen Koordinaten  $\mathbf{x}$  ab. Somit folgt

$$\mathbf{x} = \mathbf{X} + \mathbf{u}(\mathbf{X}, t) = \chi(\mathbf{X}, t) \quad . \quad (1.1)$$

### 1.2.2 Deformationsgradient

Als Maß für die lokale Deformation wird der Deformationsgradient verwendet. Er ist eine fundamentale Größe der Kontinuumsmechanik und beschreibt die Deformation in der Umgebung eines materiellen Punktes  $P$  mit dem materiellen Ortsvektor  $\mathbf{X}$  in den zugeordneten räumlichen Punkt  $p$  mit dem räumlichen Ortsvektor  $\mathbf{x}$ .

Aus Gründen der Übersichtlichkeit werden die Argumente der einzelnen Größen nur angeführt, wenn es für das Verständnis nötig ist.

Wie in Abb. 1 dargestellt ist, verformen sich eine materielle Kurve und damit der

Tangentenvektor  $d\mathbf{X}$  im Punkt  $P$  während einer Bewegung  $\chi$ . Der materielle Tangentenvektor  $d\mathbf{X}$  wird dabei mit dem Deformationsgradienten linear in den räumlichen Tangentenvektor  $d\mathbf{x}$  überführt. Es gilt

$$d\mathbf{x} = \mathbf{F}(\mathbf{X}, t) d\mathbf{X} \quad , \quad (1.2)$$

wobei der Deformationsgradient als

$$\begin{aligned} \mathbf{F}(\mathbf{X}, t) &= \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{X}} = \frac{\partial \chi(\mathbf{X}, t)}{\partial \mathbf{X}} = \text{Grad } \mathbf{x}(\mathbf{X}, t) \\ &= F_{jM} \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{E}_M \end{aligned} \quad (1.3)$$

definiert ist. Die Indexschreibweise

$$F_{jM} = \frac{\partial x_j}{\partial X_M} \quad (1.4)$$

wird in dieser Arbeit verwendet, wo es aufgrund der Übersichtlichkeit und Praktikabilität für sinnvoll erachtet wird. Weitere Ausführungen zur Indexschreibweise können dem Anhang A entnommen werden.

Durch die Indexschreibweise wird deutlich, dass es sich bei dem Deformationsgradienten um einen Zweifeldtensor handelt. Diese Bezeichnung bringt zum Ausdruck, dass sich der Deformationsgradient sowohl auf die Ausgangs- als auch auf die Momentan- konfiguration bezieht.

Die umgekehrte Abbildung des räumlichen Tangentenvektors auf den materiellen Tangentenvektor geschieht durch den inversen Deformationsgradienten. Es gilt

$$d\mathbf{X} = \mathbf{F}^{-1}(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} \quad (1.5)$$

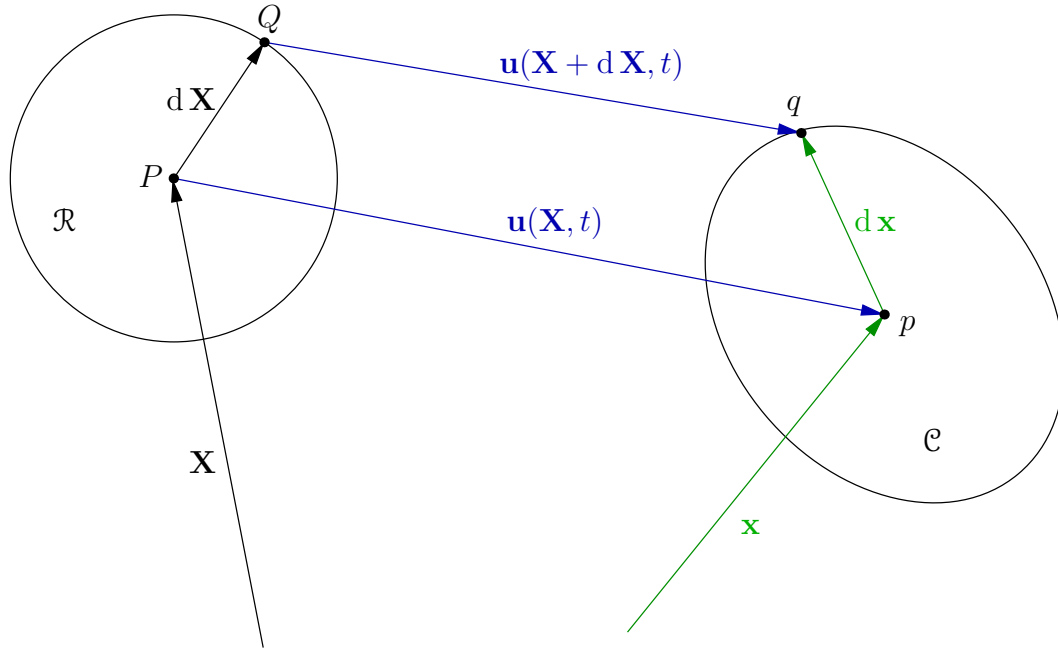
mit

$$\mathbf{F}^{-1}(\mathbf{x}, t) = \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \mathbf{x}} = \text{grad } \mathbf{X}(\mathbf{x}, t) \quad . \quad (1.6)$$

Unter der linearen Abbildung des materiellen Tangentenvektors  $d\mathbf{X}$  auf den räumlichen Tangentenvektor  $d\mathbf{x}$  gemäß Glg. (1.2) wird eine push-forward Operation, unter der umgekehrten Abbildung gemäß Glg. (1.5) eine pull-back Operation verstanden.

Betrachtet man die Theorie einfacher Stoffe, so lässt sich der Deformationsgradient  $\mathbf{F}$  noch auf andere Weise bilden. Voraussetzung ist, dass der Deformations- und Spannungszustand eines Punktes im Material nur von seiner unmittelbaren Umgebung abhängt. Sei nach Abb. 2 in der Ausgangskonfiguration  $\mathcal{R}$  der Punkt  $Q$  dem Punkt  $P$  infinitesimal benachbart. Analog zum Verschiebungsfeld  $\mathbf{u}(\mathbf{X}, t)$  wird das Verschiebungsfeld  $\mathbf{u}(\mathbf{X} + d\mathbf{X}, t)$  eingeführt, welches die Punkte  $Q$  und  $q$  verbindet. Anschließend lässt sich der räumliche Tangentenvektor  $d\mathbf{x}$  durch

$$d\mathbf{x} = d\mathbf{X} + \mathbf{u}(\mathbf{X} + d\mathbf{X}, t) - \mathbf{u}(\mathbf{X}, t) \quad (1.7)$$



**Abbildung 2:** Umgebung eines Punktes in der Theorie einfacher Stoffe.

ausdrücken. Die Entwicklung von  $\mathbf{u}(\mathbf{X} + d\mathbf{X}, t)$  in eine Taylor-Reihe, die nach dem linearen Term abgebrochen wird, führt auf

$$\begin{aligned} d\mathbf{x} &= d\mathbf{X} + [\mathbf{u}(\mathbf{X}, t) + d\mathbf{X} (\nabla_0 \otimes \mathbf{u}(\mathbf{X}, t)) - \mathbf{u}(\mathbf{X}, t)] \\ &= [\mathbf{1} + \text{Grad } \mathbf{u}(\mathbf{X}, t)] d\mathbf{X} \quad . \end{aligned} \quad (1.8)$$

Somit lässt sich der Deformationsgradient

$$\mathbf{F} = \mathbf{1} + \text{Grad } \mathbf{u}(\mathbf{X}, t) = \mathbf{1} + \mathbf{H} \quad (1.9)$$

in Abhängigkeit vom Verschiebungsfeld  $\mathbf{u}(\mathbf{X}, t)$  ausdrücken. Dabei wird  $\mathbf{H}$  als Verschiebungsgradient bezeichnet.

In Hinblick auf die Methode der Finiten Elemente (FEM) wird deutlich, warum diese Herleitung Sinn macht. Die meisten FEM-Programme basieren auf der Verschiebungsmethode, d. h. die Verschiebungen bzw. das Verschiebungsfeld werden approximiert. Daraus kann über Glg. (1.9) für einfache Stoffe direkt der Deformationsgradient berechnet werden.

Die lokale Volumenänderung zwischen der Ausgangs- und der Momentankonfiguration wird durch die Determinante des Deformationsgradienten beschrieben. Es gilt

$$dv = F(\mathbf{X}, t) dV \quad (1.10)$$

mit

$$F(\mathbf{X}, t) = \det(\mathbf{F}(\mathbf{X}, t)) \quad . \quad (1.11)$$



Es ist leicht ersichtlich, dass kein Teil eines Körpers mit einem endlichen positiven Volumen in ein Volumen Null deformiert werden kann, d. h.  $F(\mathbf{X}, t) > 0$ . Somit ist der Deformationsgradient immer invertierbar.

Wird das infinitesimale Volumenelement durch das Skalarprodukt aus einem infinitesimalen Flächenvektor und einem Tangentenvektor ausgedrückt, so erhält man ausgehend von Glg. (1.10)

$$d v = d \mathbf{a} \cdot d \mathbf{x} = F d \mathbf{A} \cdot d \mathbf{X} \quad . \quad (1.12)$$

Mit der pull-back Operation nach Glg. (1.5) und den Rechenregeln für das Skalarprodukt im Anhang A folgt schließlich

$$(\mathbf{F}^T d \mathbf{a} - F d \mathbf{A}) \cdot d \mathbf{X} = 0 \quad (1.13)$$

und damit

$$d \mathbf{a} = F \mathbf{F}^{-T} d \mathbf{A} \quad . \quad (1.14)$$

Die letzte Gleichung ist auch als Nanson-Beziehung bekannt.

### 1.2.3 Zerlegung des Deformationsgradienten

Wie in Abschnitt 1.2.1 beschrieben ist, können zur Beschreibung von Materialeigenschaften beliebige Zwischenkonfigurationen  $\mathcal{Z}$  definiert werden, unabhängig davon, ob diese Konfigurationen in der Realität eingenommen werden. Dieses Vorgehen führt zu einer Zerlegung des Deformationsgradienten. Zur Veranschaulichung soll die Zerlegung des Deformationsgradienten an den Beispielen

- polare Zerlegung und
- volumetrisch-isochorer Split

veranschaulicht werden. Im Zuge des in dieser Arbeit implementierten Materialmodells kommt der Zerlegung des Deformationsgradienten eine zentrale Bedeutung zu.

**Polare Zerlegung** Wird die Bewegung eines Körpers betrachtet, so lässt diese sich eindeutig in eine Rotation und eine Streckung aufteilen, wie in Abb. 3 dargestellt ist. Dies entspricht einer reinen Starrkörperbewegung und einer reinen Deformation. Dabei wird die Zwischenkonfiguration  $\mathcal{Z}$  so gewählt, dass entweder der Körper zuerst rotiert und dann gestreckt wird oder umgekehrt. Der Deformationsgradient wird entsprechend in zwei Anteile zerlegt. Es gilt

$$\mathbf{F} = \mathbf{R} \mathbf{U} \quad \text{bzw.} \quad \mathbf{F} = \mathbf{V} \mathbf{R} \quad , \quad (1.15)$$

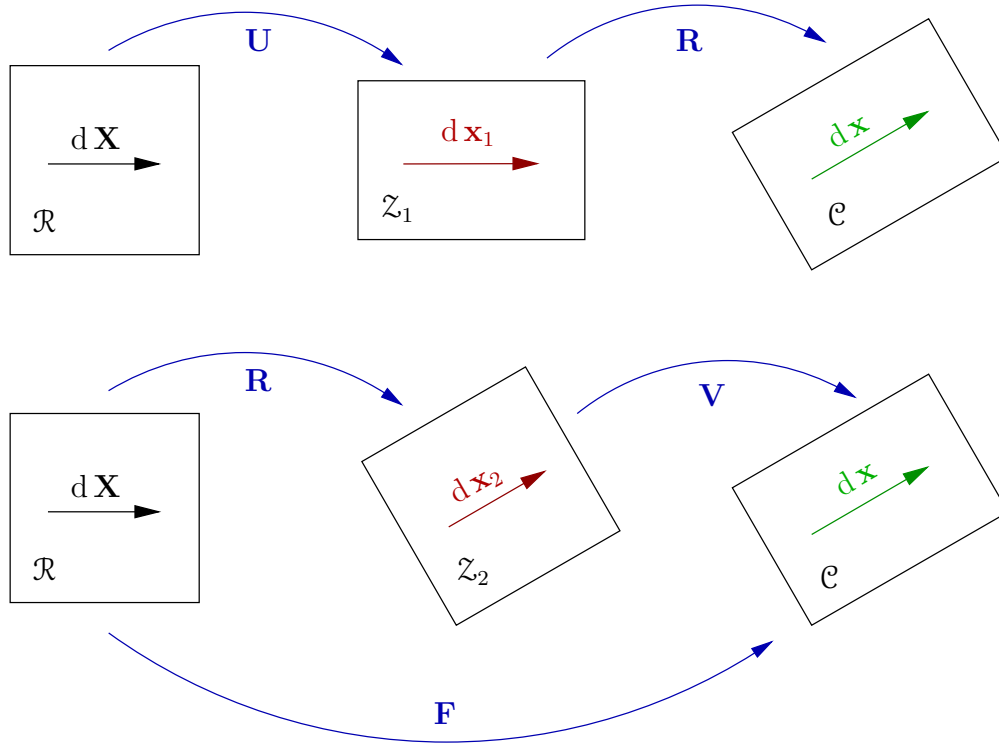


Abbildung 3: Polare Zerlegung des Deformationsgradienten.

wobei die erste Zerlegung als rechte polare Zerlegung und die zweite Zerlegung als linke polare Zerlegung bezeichnet wird. Bei der rechten polaren Zerlegung wird der Körper zuerst durch den rechten Strecktensor  $\mathbf{U}$  gestreckt und anschließend durch den Drehtensor  $\mathbf{R}$  rotiert. Bei der linken polaren Zerlegung wird der Körper zuerst rotiert und anschließend durch den linken Strecktensor  $\mathbf{V}$  gestreckt. Für den räumlichen Tangentenvektor  $d\mathbf{x}$  gilt also

$$\begin{aligned} d\mathbf{x} &= \mathbf{F} d\mathbf{X} = (\mathbf{R} \mathbf{U}) d\mathbf{X} = \mathbf{R} (\mathbf{U} d\mathbf{X}) \quad \text{bzw.} \\ d\mathbf{x} &= \mathbf{F} d\mathbf{X} = (\mathbf{V} \mathbf{R}) d\mathbf{X} = \mathbf{V} (\mathbf{R} d\mathbf{X}) \quad . \end{aligned} \quad (1.16)$$

**Volumetrisch-isochoerer Split** Beim volumetrisch-isochoeren Split wird die Bewegung in einen gestaltändernden bzw. isochoren und einen volumenändernden Anteil aufgeteilt, wie in Abb. 4 deutlich wird. Der Deformationsgradient wird entsprechend zerlegt bzw. aufgespalten. Der gestaltändernde, isochore Teil von  $\mathbf{F}$  soll  $\mathbf{F}_{iso}$  sein, der volumenändernde Teil durch  $\mathbf{F}_{vol}$  beschrieben werden. Als Bedingung folgt dann

$$\det(\mathbf{F}_{iso}) = F_{iso} = 1 \quad , \quad (1.17)$$

die erfüllt wird, wenn gilt

$$\mathbf{F}_{iso} = F^{-\frac{1}{3}} \mathbf{F} \quad (1.18)$$

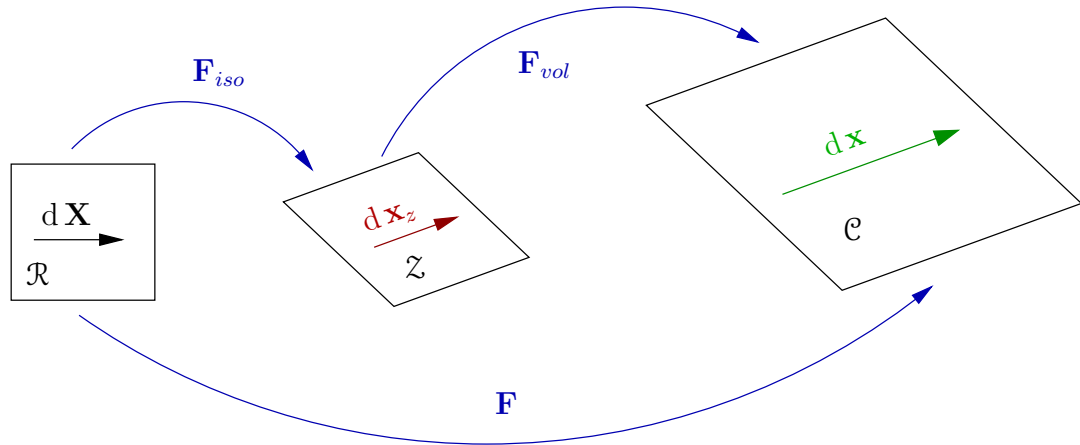


Abbildung 4: Volumetrisch-isochores Zerlegung des Deformationsgradienten.

und damit

$$\mathbf{F}_{vol} = F^{\frac{1}{3}} \mathbf{1} \quad , \quad (1.19)$$

so dass für die Zerlegung des Deformationsgradienten

$$\mathbf{F} = F^{\frac{1}{3}} \mathbf{F}_{iso} \quad (1.20)$$

folgt.

#### 1.2.4 Deformations- und Verzerrungstensoren

Ausgehend von der polaren Zerlegung lassen sich mit dem Deformationsgradienten  $\mathbf{F}$  Deformationstensoren bilden, die keine Starrkörperbewegung, d. h. Rotation, mehr enthalten. Sie beschreiben die reine Deformation eines Körpers.

Man führt den rechten Cauchy-Green Tensor

$$\begin{aligned} \mathbf{C} &= \mathbf{F}^T \mathbf{F} \\ &= (F_{iJ} \mathbf{E}_J \otimes \mathbf{e}_i)(F_{kL} \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{E}_L) = F_{iJ} F_{kL} \delta_{ik} \mathbf{E}_J \otimes \mathbf{E}_L = F_{iJ} F_{iL} \mathbf{E}_J \otimes \mathbf{E}_L \end{aligned} \quad (1.21)$$

ein, der auf der Ausgangskonfiguration definiert ist, und den linken Cauchy-Green Tensor

$$\begin{aligned} \mathbf{B} &= \mathbf{F} \mathbf{F}^T \\ &= (F_{iJ} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{E}_J)(F_{kL} \mathbf{E}_L \otimes \mathbf{e}_k) = F_{iJ} F_{kL} \delta_{JL} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_k = F_{iJ} F_{kJ} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_k \quad , \end{aligned} \quad (1.22)$$

der auf der Momentankonfiguration definiert ist. Der Zusatz links bzw. rechts richtet sich dabei nach der Position von  $\mathbf{F}$ . Aufgrund der Bildungsvorschrift sind die Cauchy-Green Tensoren immer symmetrisch.

Betrachtet man die rechte polare Zerlegung  $\mathbf{F} = \mathbf{R} \mathbf{U}$ , folgt für den Rechten Cauchy-Green Tensor

$$\mathbf{C} = (\mathbf{R} \mathbf{U})^T (\mathbf{R} \mathbf{U}) = \mathbf{U}^T \mathbf{R}^T \mathbf{R} \mathbf{U} \quad . \quad (1.23)$$

Es gilt aufgrund der Orthogonalität des Drehtensors

$$\mathbf{R}^T \mathbf{R} = \mathbf{1} \quad \text{und} \quad \mathbf{U}^T = \mathbf{U} \quad (1.24)$$

und damit

$$\mathbf{C} = \mathbf{U}^2 \quad . \quad (1.25)$$

Analog lässt sich die Beziehung

$$\mathbf{B} = \mathbf{V}^2 \quad (1.26)$$

für den linken Cauchy-Green Tensor herleiten.

Die Starrkörperrotation ist also, wie beschrieben, in den Deformationstensenoren nicht mehr enthalten.

Weiterhin werden so genannte Verzerrungstensenoren eingeführt. Als Verzerrungstensenoren werden Maßtensenoren bezeichnet, die auf dem quadratischen Streckungsmaß basieren und keinen Einschränkungen unterliegen.

Betrachtet werden die Längen  $dS$  und  $ds$  der Tangentenvektoren  $d\mathbf{X}$  und  $d\mathbf{x}$ , die über die Euklidische Norm berechnet werden:

$$dS = |d\mathbf{X}| = \sqrt{d\mathbf{X} \cdot d\mathbf{X}} \quad (1.27)$$

und

$$ds = |d\mathbf{x}| = \sqrt{d\mathbf{x} \cdot d\mathbf{x}} \quad . \quad (1.28)$$

Die Quadrate der Längen lassen sich mit Hilfe der Glg. (1.21) und (1.22) als

$$\begin{aligned} dS^2 &= d\mathbf{X} \cdot d\mathbf{X} = (\mathbf{F}^{-1} d\mathbf{x}) \cdot (\mathbf{F}^{-1} d\mathbf{x}) \\ &= d\mathbf{x} \cdot (\mathbf{F}^{-T} \mathbf{F}^{-1}) d\mathbf{x} = d\mathbf{x} \cdot (\mathbf{F} \mathbf{F}^T)^{-1} d\mathbf{x} = d\mathbf{x} \cdot \mathbf{B}^{-1} d\mathbf{x} \end{aligned} \quad (1.29)$$

und

$$\begin{aligned} ds^2 &= d\mathbf{x} \cdot d\mathbf{x} = (\mathbf{F} d\mathbf{X}) \cdot (\mathbf{F} d\mathbf{X}) \\ &= d\mathbf{X} \cdot (\mathbf{F}^T \mathbf{F}) d\mathbf{X} = d\mathbf{X} \cdot \mathbf{C} d\mathbf{X} \end{aligned} \quad (1.30)$$

schreiben.

Die Differenz  $ds^2 - dS^2$  der Längen ergibt schließlich ein quadratisches Streckungsmaß und damit eine Definitionsgleichung für Verzerrungstensenoren.

$$\begin{aligned} ds^2 - dS^2 &= d\mathbf{x} \cdot d\mathbf{x} - d\mathbf{X} \cdot d\mathbf{X} \\ &= d\mathbf{X} \cdot (\mathbf{C} - \mathbf{1}) d\mathbf{X} = 2 d\mathbf{X} \cdot \mathbf{E} d\mathbf{X} \quad , \end{aligned} \quad (1.31)$$

mit

$$\begin{aligned}\mathbf{E} &= \frac{1}{2}(\mathbf{C} - \mathbf{1}) = \frac{1}{2}(\mathbf{F}^T \mathbf{F} - \mathbf{1}) \\ &= (F_{iJ} F_{iL} - \delta_{JL})\mathbf{E}_J \otimes \mathbf{E}_L \quad .\end{aligned}\tag{1.32}$$

Der Tensor  $\mathbf{E}$  wird als Green-Lagrangescher Verzerrungstensor bezeichnet und operiert auf der Ausgangskonfiguration. In Hinblick auf die FEM erhält man mit Glg. (1.9)

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2}(\mathbf{H} + \mathbf{H}^T + \mathbf{H}^T \mathbf{H})\tag{1.33}$$

als Bildungsvorschrift für den Green-Lagrangeschen Verzerrungstensor. Weiterhin kann aus der Differenz  $d s^2 - d S^2$

$$\begin{aligned}d s^2 - d S^2 &= d \mathbf{x} \cdot d \mathbf{x} - d \mathbf{X} \cdot d \mathbf{X} = d \mathbf{X} \cdot (\mathbf{F}^T \mathbf{F} - \mathbf{1}) d \mathbf{X} \\ &= d \mathbf{x} \cdot \mathbf{F}^{-T} (\mathbf{F}^T \mathbf{F} - \mathbf{1}) \mathbf{F}^{-1} d \mathbf{X} = d \mathbf{x} \cdot (\mathbf{1} - \mathbf{F}^{-T} \mathbf{F}^{-1}) d \mathbf{X} \\ &= d \mathbf{x} \cdot (\mathbf{1} - \mathbf{B}^{-1}) d \mathbf{x} = 2 d \mathbf{x} \cdot \mathbf{A} d \mathbf{x}\end{aligned}\tag{1.34}$$

mit

$$\begin{aligned}\mathbf{A} &= \frac{1}{2}(\mathbf{1} - \mathbf{B}^{-1}) = \frac{1}{2}(\mathbf{1} - \mathbf{F}^{-T} \mathbf{F}^{-1}) \\ &= (\delta_{jl} - F_{Ij} F_{Il})\mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_l\end{aligned}\tag{1.35}$$

abgeleitet werden.  $\mathbf{A}$  wird als Euler-Almansischer Verzerrungstensor bezeichnet und operiert auf der Momentankonfiguration. Sowohl der Green-Lagrangesche als auch der Euler-Almansische Verzerrungstensor sind symmetrisch, weil sie aus symmetrischen Tensoren aufgebaut sind.

Als weiterer Verzerrungstensor wird in dieser Arbeit der Piola Verzerrungstensor eingeführt, der auf der Ausgangskonfiguration operiert.

$$\mathbf{e} = \frac{1}{2}(\mathbf{C}^{-1} - \mathbf{1}) \quad .\tag{1.36}$$

Weiterhin sollen die push-forward und pull-back Operation für die Verzerrungstensoren nach Euler-Almanschi und Green-Lagrange dargestellt werden.

$$\mathbf{A} = \mathbf{F}^{-T} \mathbf{E} \mathbf{F}^{-1}\tag{1.37}$$

ist die push-forward Operation. Analog folgt für die pull-back Operation

$$\mathbf{E} = \mathbf{F}^T \mathbf{A} \mathbf{F} \quad .\tag{1.38}$$

### 1.2.5 Spannungstensoren

Wie bei den kinematischen Größen können Spannungstensoren auf unterschiedlichen Konfigurationen definiert sein. Sie gehen in die Bilanzrelationen und die konstitutiven Gleichungen ein. Es wird zwischen dem Cauchyschen, dem ersten und dem zweiten Piola-Kirchhoffschen Spannungstensor unterschieden.

Wird die Momentankonfiguration betrachtet, so kann der infinitesimale Vektor der Flächenkraft  $d\mathbf{f}$  durch den infinitesimalen Flächenvektor  $d\mathbf{a}$  und den Cauchyschen Spannungstensor  $\mathbf{T}$  ausgedrückt werden

$$d\mathbf{f} = d\mathbf{a} \mathbf{T} \quad . \quad (1.39)$$

Beim Cauchyschen Spannungstensor beziehen sich also alle Größen auf die Momentankonfiguration. Die so genannten Ingenieurspannungen, die i. Allg. bei Versuchen verwendet werden, beziehen die Kräfte der Momentankonfiguration jedoch auf die Fläche der Ausgangskonfiguration. Der Cauchysche Spannungstensor ist somit wenig praktikabel.

Will man nun die räumlichen Spannungen auf das materielle Flächenelement beziehen, muss der räumliche Flächenvektor  $d\mathbf{a}$  einer pull-back Operation unterzogen werden. Es folgt nach der Nanson-Beziehung in Glg. (1.14)

$$\begin{aligned} d\mathbf{f} &= F \mathbf{F}^{-T} d\mathbf{A} \mathbf{T} = d\mathbf{A} F \mathbf{F}^{-1} \mathbf{T} = d\mathbf{A} \mathbf{P} \\ &= F dA_I F_{Jk} \sigma_{lm} \mathbf{E}_I (\mathbf{E}_J \otimes \mathbf{e}_k) (\mathbf{e}_l \otimes \mathbf{e}_m) \\ &= F dA_I F_{Jk} \sigma_{lm} \delta_{IJ} \delta_{kl} \mathbf{e}_m \\ &= F dA_J F_{Jk} \sigma_{km} \mathbf{e}_m = F dA_J P_{Jm} \mathbf{e}_m \quad . \end{aligned} \quad (1.40)$$

Der Tensor  $\mathbf{P}$  wird als erster Piola-Kirchhoffscher Spannungstensor bezeichnet und ist ein Zweifeldtensor, der sowohl auf der Ausgangs- als auch auf der Momentankonfiguration basiert. Wie später in den Bilanzrelationen hergeleitet wird, ist der Cauchysche Spannungstensor symmetrisch. Dies trifft auf den 1. Piola-Kirchhoffschen Spannungstensor nicht mehr zu.

Zu diesem Nachteil kommen die Eigenschaften als Zweifeldtensor hinzu, die den 1. Piola-Kirchhoffschen Spannungstensor für die Implementierung in ein FE-Programm ungeeignet machen. In der Regel werden die numerischen Berechnungen nur mit Größen der Ausgangskonfiguration bzw. der Momentankonfiguration durchgeführt. Bei MSC.MARC wird entsprechend zwischen den Berechnungsmethoden Total und Updated Lagrange unterschieden.

In der Konsequenz wird ein Spannungstensor benötigt, der nur auf der Ausgangskonfiguration definiert ist. Dafür wird an den 1. Piola-Kirchhoffschen Spannungstensor von rechts  $\mathbf{F}^{-T}$  multipliziert. Der so erhaltene Spannungstensor wird als 2. Piola-Kirchhoffscher Spannungstensor  $\tilde{\mathbf{T}}$  bezeichnet. Für diesen gilt

$$\tilde{\mathbf{T}} = \mathbf{P} \mathbf{F}^{-T} \quad . \quad (1.41)$$

Die Zusammenhänge zwischen den einzelnen Spannungstensoren sind

$$\begin{aligned}
 \mathbf{T} &= F^{-1} \mathbf{F} \mathbf{P} = F^{-1} \mathbf{F} \tilde{\mathbf{T}} \mathbf{F}^T, \\
 F \mathbf{F}^{-1} \mathbf{T} &= \mathbf{P} = \tilde{\mathbf{T}} \mathbf{F}^T \quad \text{und} \\
 F \mathbf{F}^{-1} \mathbf{T} \mathbf{F}^{-T} &= \mathbf{P} \mathbf{F}^{-T} = \tilde{\mathbf{T}}.
 \end{aligned} \tag{1.42}$$

### 1.3 Bilanzrelationen

Als zweite Klasse funktionaler Beziehungen gehen die Bilanzrelationen in die Kontinuumsmechanik ein. Sie stellen allgemein gültige Prinzipien und Naturgesetze dar und sind unabhängig von den Stoffeigenschaften für jeden materiellen Körper zu jedem Zeitpunkt gültig. In der klassischen Kontinuumsmechanik sind dies

- die Massenbilanz,
- die Impulsbilanz,
- die Drehimpulsbilanz,
- der erste Hauptsatz der Thermodynamik und
- der zweite Hauptsatz der Thermodynamik.

Die Bilanzrelationen lassen sich jeweils in einer lokalen und einer globalen Form darstellen. Voraussetzung für die Äquivalenz zwischen den beiden Formen ist die stetige Differenzierbarkeit der enthaltenen Feldgrößen, die im Folgenden angenommen wird. Weiterhin lassen sich die lokale und globale Form der Bilanzrelationen mit Größen der Ausgangskonfiguration oder der Momentankonfiguration darstellen.

In dieser Arbeit werden die Bilanzrelationen in der lokalen Form mit den Größen der Ausgangskonfiguration dargestellt.

Neben den schon erwähnten Quellen findet sich eine anschauliche Darstellung der Bilanzrelationen in Altenbach u. Altenbach (1994).

#### 1.3.1 Massenbilanz

Jeder Körper besitzt zum Zeitpunkt  $t = 0$  eine Masse  $m_R$ . Diese berechnet sich mit der Dichte  $\rho_R$  über

$$m_R = \int_V \rho_R \, dV \quad . \quad (1.43)$$

Eine skalare Größe der Referenzkonfiguration wird durch den Index R kenntlich gemacht, sofern sie nicht groß geschrieben wird. Die skalaren Größen der Momentankonfiguration tragen keine Indizes.

Die Massenbilanz besagt, dass die Masse bei jeder beliebigen Bewegung erhalten bleiben muss. Es folgt

$$m_R = \int_V \rho_R \, dV = \text{const.} \quad (1.44)$$

und damit in der lokalen Form

$$\rho_R = \text{const.} \quad \text{bzw.} \quad \dot{\rho}_R = 0 \quad . \quad (1.45)$$



Weiterhin ist die Differenz der Masse der Referenzkonfiguration und der Momentankonfiguration Null. Dies führt auf

$$\begin{aligned} m_R - m &= \int_V \rho_R \, dV - \int_v \rho \, dv \\ &= \int_V \rho_R \, dV - \int_V \rho F \, dV = \int_V (\rho_R - \rho F) \, dV = 0 \end{aligned} \quad (1.46)$$

und in der lokalen Form auf

$$\rho_R = \rho F \quad . \quad (1.47)$$

### 1.3.2 Impulsbilanz

Die Impulsbilanz besagt, dass die Summe aller am Körper angreifenden Kräfte gleich der Änderung des Impulses des Körpers mit der Zeit ist. Für einen Körper in der Momentankonfiguration gilt somit

$$\sum \mathbf{f}(t) = \dot{\mathbf{L}}(t) = \frac{d}{dt} \left( \int_v \rho \mathbf{v} \, dv \right) = \int_a \hat{\mathbf{t}} \, da + \int_v \mathbf{k} \rho \, dv \quad . \quad (1.48)$$

$\mathbf{v} = \dot{\mathbf{x}} = \dot{\mathbf{u}}$  ist der Geschwindigkeitsvektor,  $a$  die räumliche Oberfläche des Körpers,  $\hat{\mathbf{t}}$  der räumliche Oberflächenkraftvektor und  $\mathbf{k}$  der Massenkraftvektor.

Da  $\mathbf{v}$  und  $\mathbf{k}$  unabhängig von der gewählten Konfiguration sind und mit Glg. (1.47) sowie dem materiellen Oberflächenkraftvektor  $\hat{\mathbf{T}}$ , lautet die globale Formulierung der Impulsbilanz in der Referenzkonfiguration

$$\frac{d}{dt} \left( \int_V \rho_R \mathbf{v} \, dV \right) = \int_A \hat{\mathbf{T}} \, dA + \int_V \mathbf{k} \rho_R \, dV \quad . \quad (1.49)$$

Die lokale Formulierung der Impulsbilanz wird ausgehend von der Momentankonfiguration entwickelt und anschließend in die Referenzkonfiguration überführt. Dazu wird das Oberflächenintegral unter Verwendung des Zusammenhangs zwischen dem Oberflächenkraftvektor und dem Spannungstensor (Oberflächenbedingung)  $\hat{\mathbf{t}} = \mathbf{T} \mathbf{n}$  und dem Gaußschen Integralsatz in ein Volumenintegral

$$\int_a \hat{\mathbf{t}} \, da = \int_a \mathbf{T} \mathbf{n} \, da = \int_v \operatorname{div} \mathbf{T} \, dv \quad (1.50)$$

überführt.

Damit ergibt sich die lokale Form der Impulsbilanz, die auch als lokale Form der Bewegungsgleichung bezeichnet wird:

$$\operatorname{div} \mathbf{T} + \rho \mathbf{k} = \rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} \quad . \quad (1.51)$$

Mit der Beziehung  $\text{Div } \mathbf{P} = F \text{ div } \mathbf{T}$ , die Holzapfel (2000, S. 146) entnommen werden kann, und Glg. (1.47) folgt sofort

$$\text{Div } \mathbf{P} + \rho_R \mathbf{k} = \rho_R \frac{d\mathbf{v}}{dt} \quad . \quad (1.52)$$

Berücksichtigt man schließlich Glg. (1.42), erhält man die lokale Form der Bewegungsgleichung bezüglich der Referenzkonfiguration:

$$\text{Div}(\tilde{\mathbf{T}} \mathbf{F}^T) + \rho_R \mathbf{k} = \rho_R \dot{\mathbf{v}} = \rho_R \ddot{\mathbf{u}} \quad . \quad (1.53)$$

Die lokale Form der Bewegungsgleichung wird in ein Arbeitsprinzip überführt, dessen Linearisierung die Grundlage der FEM darstellt, wie in Kap. 2 beschrieben wird.

### 1.3.3 Drehimpulsbilanz

Die Drehimpulsbilanz führt auf die Symmetrie des Cauchyschen Spannungstensor und wird deswegen nur mit den Größen der Momentankonfiguration behandelt. Analog zur Definition der Impulsbilanz besagt die Drehimpulsbilanz, dass die zeitliche Änderung des Gesamtdrehimpulses bezüglich eines Punktes  $p$  mit dem räumlichen Ortsvektor  $\mathbf{x}_p$  gleich der Summe aller dort angreifenden Momente resultierend aus den Oberflächen- und Volumenkräften ist.

Aus der Definition für den Gesamtdrehimpuls

$$\mathbf{J}(t) = \int_v \mathbf{x}_p \times \mathbf{v} \rho \, dv \quad (1.54)$$

ergibt sich für die zeitliche Differentiation

$$\frac{d\mathbf{J}(t)}{dt} = \sum \mathbf{m}(t) = \int_v \left( \frac{d\mathbf{x}_p}{dt} \times \mathbf{v} + \mathbf{x}_p \times \frac{d\mathbf{v}}{dt} \right) \rho \, dv \quad . \quad (1.55)$$

Wird  $\dot{\mathbf{x}}_p = \mathbf{v}$  berücksichtigt, vereinfacht sich der Ausdruck zu

$$\frac{d\mathbf{J}(t)}{dt} = \int_v \mathbf{x}_p \times \frac{d\mathbf{v}}{dt} \rho \, dv \quad . \quad (1.56)$$

Die Summe aller angreifenden Momente ist

$$\sum \mathbf{m}(t) = \int_a \mathbf{x}_p \times \hat{\mathbf{t}} \, da + \int_v \mathbf{x}_p \times \mathbf{k} \, dv \quad . \quad (1.57)$$

Berücksichtigt man außerdem die Oberflächenbedingung und wendet den Gaußschen Integralsatz an, ergibt sich für das Flächenintegral

$$\int_a \mathbf{x}_p \times \hat{\mathbf{t}} \, da = - \int_a \mathbf{n}(\mathbf{T} \times \mathbf{x}_p) \, da = - \int_v (\nabla \mathbf{T} \times \mathbf{x}_p + \mathbf{T} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}) \, dv \quad . \quad (1.58)$$

$\varepsilon$  ist dabei der Permutationstensor, der Glg. A.6 im Anhang entnommen werden kann. Damit kann die Drehimpulsbilanz durch

$$\int_v \left[ \mathbf{x}_p \times \left( \operatorname{div} \mathbf{T} + \rho \mathbf{k} - \rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} \right) \right] dv - \int_v \mathbf{T} \cdot \varepsilon dv = 0 \quad (1.59)$$

ausgedrückt werden. Da der erste Term wegen der lokalen Form der Bewegungsgleichung (1.51) Null ist, folgt

$$\int_v \mathbf{T} \cdot \varepsilon dv = 0 \quad \text{bzw.} \quad \mathbf{T} \cdot \varepsilon = 0 \quad . \quad (1.60)$$

Diese Bedingung wird nur erfüllt, wenn der Cauchysche Spannungstensor symmetrisch ist, d. h.  $\mathbf{T} = \mathbf{T}^T$ . Daraus folgt sofort, dass der zweite Piola-Kirchhoffsche Spannungstensor ebenfalls symmetrisch ist, d. h.  $\tilde{\mathbf{T}} = \tilde{\mathbf{T}}^T$ .

### 1.3.4 Erster Hauptsatz der Thermodynamik

Der Erste Hauptsatz der Thermodynamik bilanziert die thermische und mechanische Energie eines Systems. Es werden folglich thermische und mechanische Feldgrößen in einen Zusammenhang gebracht. Für ein geschlossenes System besagt die Energiebilanz, dass die Summe aus thermischer und mechanischer Energie konstant sein muss.

Die zeitliche Änderung der Gesamtenergie, die sich aus kinetischer und innerer Energie zusammensetzt, muss folglich gleich der Summe der Leistung aus der Wärmezufuhr und der Leistung aller äußeren Kräfte sein.

$$\dot{\mathcal{K}} + \dot{\mathcal{E}} = \dot{Q}_{ext} + \mathcal{P}_{ext} \quad . \quad (1.61)$$

Die Auswertung des ersten Hauptsatzes der Thermodynamik wird der Übersichtlichkeit wegen in drei Paragraphen unterteilt.

**Leistungssatz der Mechanik** Der Leistungssatz der Mechanik fasst die Leistung der eingepägten Volumen- und Oberflächenkräfte zusammen. Diese folgt direkt aus der energetischen Auswertung der Impulsbilanz in Glg. (1.48).

Analog zu dem Vorgehen bei der Herleitung der materiellen Impulsbilanz in lokaler Form wird die Bilanzgleichung zuerst bezüglich der Momentankonfiguration ausgewertet. Über die im nächsten Paragraphen behandelten leistungskonjugierten Tensoren kann schließlich eine Darstellung des ersten Hauptsatzes der Thermodynamik bezüglich der Referenzkonfiguration eingeführt werden.

Die äußere mechanische Leistung ist

$$\mathcal{P}_{ext} = \int_a \hat{\mathbf{t}} \mathbf{v} da + \int_v \mathbf{k} \mathbf{v} \rho dv \quad . \quad (1.62)$$

Berücksichtigt man die Oberflächenbedingung und den Gaußschen Integralsatz, so dass das Oberflächenintegral in das Volumenintegral

$$\begin{aligned} \int_a \hat{\mathbf{t}} \mathbf{v} \, d a &= \int_a (\mathbf{T} \mathbf{n}) \mathbf{v} \, d a = \int_v \operatorname{div}(\mathbf{T}^T \mathbf{v}) \, d v \\ &= \int_v (\operatorname{div} \mathbf{T} \mathbf{v} + \mathbf{T} \cdot \operatorname{grad} \mathbf{v}) \, d v \end{aligned} \quad (1.63)$$

überführt wird, zerlegt weiterhin den Geschwindigkeitsgradienten  $\operatorname{grad} \mathbf{v} = \mathbf{d} + \mathbf{w}$  in die symmetrische Deformationsrate  $\mathbf{d}$  und den antimetrischen Spintensor bzw. Drehgeschwindigkeitstensor  $\mathbf{w}$  und führt schließlich eine Null

$$0 = \int_v \dot{\mathbf{v}} \mathbf{v} \rho \, d v - \int_v \dot{\mathbf{v}} \mathbf{v} \rho \, d v \quad (1.64)$$

ein, ergibt sich die äußere mechanische Leistung

$$\mathcal{P}_{ext} = \int_v (\dot{\mathbf{v}} \mathbf{v} \rho + \mathbf{T} \cdot \mathbf{d}) \, d v + \int_v \underbrace{(\operatorname{div} \mathbf{T} + \mathbf{k} \rho - \dot{\mathbf{v}} \rho)}_{\mathbf{0}} \mathbf{v} \, d v \quad . \quad (1.65)$$

Das zweite Integral enthält die lokale, räumliche Form der Impulsbilanz nach Glg. (1.51) und ist gleich Null.

Der verbleibende Anteil aus der obigen Gleichung enthält die zeitliche Änderung der kinetischen Energie

$$\frac{d\mathcal{K}}{dt} = \frac{d}{dt} \left( \frac{1}{2} \int_v \mathbf{v}^2 \rho \, d v \right) = \int_v \dot{\mathbf{v}} \mathbf{v} \rho \, d v \quad (1.66)$$

und die Leistung der Spannungen an der Deformationsrate

$$\mathcal{P}_{int} = \int_v \mathbf{T} \cdot \mathbf{d} \, d v \quad . \quad (1.67)$$

Es folgt

$$\mathcal{P}_{ext} = \frac{d\mathcal{K}}{dt} + \mathcal{P}_{int} \quad . \quad (1.68)$$

**Leistungskonjugierte Tensoren** Die Leistung der Spannungen an der Deformationsrate kann äquivalent durch verschiedene Größen ausgedrückt werden.

Für den Geschwindigkeitsgradienten lässt sich leicht die Beziehung  $\operatorname{grad} \mathbf{v} = \dot{\mathbf{F}} \mathbf{F}^{-1}$  herleiten, so dass sich mit Glg. (1.10) und (1.42)

$$\begin{aligned}
\mathcal{P}_{int} &= \int_v \mathbf{T} \cdot \text{grad } \mathbf{v} \, dv = \int_V F \mathbf{T} \cdot (\dot{\mathbf{F}} \mathbf{F}^{-1}) \, dV \\
&= \int_V F \mathbf{T} \mathbf{F}^{-T} \cdot \dot{\mathbf{F}} \, dV = \int_V \mathbf{P} \cdot \dot{\mathbf{F}} \, dV
\end{aligned} \tag{1.69}$$

schreiben lässt.

Ausgehend von Glg. (1.67) und den Beziehungen

$$\mathbf{d} = \frac{1}{2}(\text{grad } \mathbf{v} + \text{grad}^T \mathbf{v}) \quad , \quad \dot{\mathbf{F}} = (\text{grad } \mathbf{v}) \mathbf{F} \quad , \quad \dot{\mathbf{E}} = \frac{1}{2}(\overline{\dot{\mathbf{F}}^T \mathbf{F}}) \tag{1.70}$$

folgt über Glg. (1.42)

$$\begin{aligned}
\mathcal{P}_{int} &= \int_V F \mathbf{T} \cdot \mathbf{d} \, dV = \int_V F \mathbf{T} \cdot (\mathbf{F}^{-T} \dot{\mathbf{E}} \mathbf{F}^{-1}) \, dV \\
&= \int_V F(\mathbf{F}^{-1} \mathbf{T} \mathbf{F}^{-T}) \cdot \dot{\mathbf{E}} \, dV = \int_V \tilde{\mathbf{T}} \cdot \dot{\mathbf{E}} \, dV \quad .
\end{aligned} \tag{1.71}$$

Die Leistung der Spannungen an der Deformationsrate lässt sich somit äquivalent durch die so genannten leistungskonjugierten Tensoren  $\mathbf{T}$  und  $\mathbf{d}$ ,  $\mathbf{P}$  und  $\dot{\mathbf{F}}$  sowie  $\tilde{\mathbf{T}}$  und  $\dot{\mathbf{E}}$  ausdrücken.

Die Forderung, dass die aus den Bilanzgleichungen resultierenden Arbeits- und Leistungsterme invariant bezüglich der Konfiguration sein sollen und die daraus resultierenden leistungskonjugierten Größen, wird auch als Konzept der dualen Variablen bezeichnet.

**Erster Hauptsatz der Thermodynamik** Mit diesen Vorbetrachtungen ist es nun möglich, den ersten Hauptsatz der Thermodynamik in einer materiellen, lokalen Form darzustellen. Ausgehend von Glg. (1.61) und unter Berücksichtigung von Glg. (1.68)

$$\mathcal{P}_{int} = \mathcal{P}_{ext} - \dot{\mathcal{K}} \tag{1.72}$$

und

$$\dot{\mathcal{E}} = \int_v \dot{e} \rho \, dv \quad , \tag{1.73}$$

wobei  $e$  die spezifische innere Energie ist, folgt für die Energiebilanz

$$\dot{\mathcal{E}} = \mathcal{P}_{int} + \dot{\mathcal{Q}}_{ext} \quad . \tag{1.74}$$

Die zugeführte Wärmeleistung resultiert aus einer spezifischen Wärmequelle  $r$  abzüglich einer über die Oberfläche mittels eines Wärmestromvektors  $\mathbf{q}$  abgegebenen Wärmeleistung, so dass sich

$$\dot{Q}_{ext} = \int_v r \rho \, dv - \int_a \mathbf{n} \cdot \mathbf{q} \, da \quad (1.75)$$

schreiben lässt.

Die Anwendung des Gaußschen Integralsatzes führt auf

$$\dot{Q}_{ext} = \int_v (r \rho - \operatorname{div} \mathbf{q}) \, dv \quad , \quad (1.76)$$

womit sich die Energiebilanz nach Glg. (1.74) in integraler Form durch

$$\int_v (\mathbf{T} \cdot \mathbf{d} + \rho r - \operatorname{div} \mathbf{q} - \rho \dot{e}) \, dv = 0 \quad (1.77)$$

ausdrücken lässt. Die lokale Form in Größen der Momentankonfiguration ergibt sich entsprechend zu

$$\rho \dot{e} = \mathbf{T} \cdot \mathbf{d} + \rho r - \operatorname{div} \mathbf{q} \quad . \quad (1.78)$$

Über die leistungskonjugierten Tensoren folgt sofort die materielle Form

$$\rho_R \dot{e} = \tilde{\mathbf{T}} \cdot \dot{\mathbf{E}} + \rho_R r - \operatorname{Div} \mathbf{q}_R \quad . \quad (1.79)$$

### 1.3.5 Zweiter Hauptsatz der Thermodynamik

Der zweite Hauptsatz der Thermodynamik ist nicht wie die anderen Bilanzrelationen eine Erhaltungsgleichung. Er trifft eine Aussage über die Richtung eines Prozesses; so fließt Wärme immer vom wärmeren zum kälteren Teil eines Körpers. Ein weiteres Beispiel ist die vollständige Umwandlung von mechanischer Energie über Dissipation in Wärmeenergie, die nicht umkehrbar ist. Um diese Beobachtung zu beschreiben, wird die Zustandvariable Entropie eingeführt. Die Entropie geht in das Dissipationsprinzip ein, welches besagt, dass die innere Entropieproduktion immer größer gleich Null ist.

$$\Gamma = \int_v \gamma \rho \, dv \geq 0 \quad , \quad (1.80)$$

wobei  $\gamma$  die spezifische innere Entropieproduktion ist.

Die Entropie  $S$ , die ein Körper besitzt, setzt sich aus der zugeführten Entropie und der aus der inneren Entropieproduktion stammenden Entropie zusammen. Die zeitliche Änderung der Entropie in der Momentankonfiguration führt auf

$$\Gamma = \frac{dS}{dt} - H \geq 0 \quad \text{bzw.} \quad (1.81)$$

$$\int_v \gamma \rho \, dv = \int_v \dot{s} \rho \, dv - \left[ \int_v \tilde{r} \rho \, dv - \int_a \mathbf{h} \mathbf{n} \, da \right] \geq 0 \quad .$$

$H$  ist die Rate der zugeführten Entropie, die sich aus einer spezifischen Entropiequelle  $\tilde{r}$  im Körper und dem abfließenden Entropiestrom, der auf die Körperoberfläche bezogen ist und durch den Entropiestromvektor  $\mathbf{h}$  ausgedrückt wird, zusammensetzt.  $s$  ist die spezifische Entropie.

Die Rate der zugeführten Entropie kann mit Hilfe des Gaußschen Integralsatzes in ein Volumenintegral überführt werden.

$$H = \int_v \tilde{r} \rho \, dv - \int_a \mathbf{h} \mathbf{n} \, da = \int_v (\tilde{r} \rho - \operatorname{div} \mathbf{h}) \, dv \quad . \quad (1.82)$$

Weiterhin lassen sich  $\mathbf{h}$  und  $\tilde{r}$  in Relation zu thermischen Größen setzen. Es gilt

$$\mathbf{h} = \frac{\mathbf{q}}{\theta} \quad \text{und} \quad \tilde{r} = \frac{r}{\theta} \quad , \quad (1.83)$$

wobei  $\theta$  die absolute Temperatur ist.

Mit

$$\operatorname{div} \mathbf{h} = \operatorname{div} \left( \frac{\mathbf{q}}{\theta} \right) = \frac{\operatorname{div} \mathbf{q}}{\theta} - \frac{\mathbf{q} \operatorname{grad} \theta}{\theta^2} \quad (1.84)$$

folgt

$$H = \int_v \left( \frac{r}{\theta} \rho - \frac{\operatorname{div} \mathbf{q}}{\theta} + \frac{\mathbf{q} \operatorname{grad} \theta}{\theta^2} \right) \, dv \quad . \quad (1.85)$$

Damit lässt sich Glg. (1.81) zu

$$\int_v \gamma \rho \, dv = \int_v \left( \dot{s} \rho - \frac{r}{\theta} \rho + \frac{\operatorname{div} \mathbf{q}}{\theta} - \frac{\mathbf{q} \operatorname{grad} \theta}{\theta^2} \right) \, dv \geq 0 \quad (1.86)$$

umschreiben.

Die lokale Form kann sofort aus der obigen globalen Form gefolgert werden.

$$\rho \theta \gamma = \dot{s} \theta \rho - r \rho + \operatorname{div} \mathbf{q} - \frac{\mathbf{q} \operatorname{grad} \theta}{\theta} \geq 0 \quad . \quad (1.87)$$

Wird weiter der erste Hauptsatz der Thermodynamik nach Glg. (1.78) berücksichtigt, kann mit

$$\operatorname{div} \mathbf{q} = \mathbf{T} \cdot \mathbf{d} + \rho r - \rho \dot{e} \quad (1.88)$$

auf die lokale Form des zweiten Hauptsatzes bezüglich der Momentankonfiguration

$$\dot{s} \theta + \mathbf{T} \cdot \mathbf{d} - \rho \dot{e} - \frac{\mathbf{q} \operatorname{grad} \theta}{\theta} \geq 0 \quad (1.89)$$

geschlossen werden, die auch als Clausius-Duhem Ungleichung bezeichnet wird.

Da die im Rahmen dieser Arbeit betrachteten Materialmodelle auf einer geeigneten Formulierung der freien Helmholtzschen Energie  $\psi$  als thermodynamischem Potential basieren, wird die Clausius-Duhem Ungleichung entsprechend umformuliert.

Die Definition der freien Helmholtzschen Energie

$$\psi = e - s \theta \quad (1.90)$$

wird dazu abgeleitet und die Ableitung

$$\dot{\psi} = \dot{e} - \dot{s} \theta - s \dot{\theta} \quad (1.91)$$

nach der Rate der spezifischen inneren Energie aufgelöst. Setzt man die entstandene Beziehung in die Clausius-Duhem Ungleichung ein, erhält man

$$-\rho \dot{\psi} + \mathbf{T} \cdot \mathbf{d} - \rho s \dot{\theta} - \frac{\mathbf{q} \operatorname{grad} \theta}{\theta} \geq 0 \quad (1.92)$$

als räumliche Form der Clausius-Duhem Ungleichung und über die leistungskonjugierten Tensoren

$$-\rho_R \dot{\psi} + \tilde{\mathbf{T}} \cdot \dot{\mathbf{E}} - \rho_R s \dot{\theta} - \frac{\mathbf{q}_R \operatorname{Grad} \theta}{\theta} \geq 0 \quad (1.93)$$

als materielle Form der Clausius-Duhem Ungleichung, die im Folgenden verwendet werden soll.

Die Dissipationsungleichung in Form der Clausius-Duhem Ungleichung stellt eine Anforderung an Materialmodelle dar, die sich direkt auf die Wahl der freien Helmholtzschen Energie auswirkt. Erfüllt ein Materialmodell die Dissipationsungleichung, wird es als thermomechanisch konsistent bezeichnet. Da es schwierig ist, ein Materialmodell nachträglich thermomechanisch konsistent zu gestalten, also einen geeignete Formulierung der freien Helmholtzschen Energie zu finden, sollte die Dissipationsungleichung gleich in die Modellbildung mit einfließen.

In der Regel werden der Verzerrungstensor nach Green-Lagrange  $\mathbf{E}$  und die absolute Temperatur  $\theta$  als unabhängige Variablen gewählt. Dementsprechend müssen konstitutive Gleichungen für die freie Helmholtzsche Energie  $\psi$ , den zweiten Piola-Kirchhoffschen Spannungstensor  $\tilde{\mathbf{T}}$ , die spezifische Entropie  $s$  und den Wärmestromvektor  $\mathbf{q}_R$  vorgegeben werden.



## 1.4 Konstitutive Gleichungen

Die in den Abschnitten 1.2 und 1.3 hergeleiteten Beziehungen gelten zu jedem Zeitpunkt für jeden Körper. Sie beinhalten keine Aussage über das spezielle Materialverhalten. Um das gesuchte Materialverhalten zu beschreiben, müssen folglich weitere, so genannte konstitutive Gleichungen aufgestellt werden. Diese dürfen natürlich nicht im Widerspruch zu den im vorherigen Abschnitt abgeleiteten Bilanzrelationen stehen.

Das Materialmodell, das in dieser Arbeit behandelt wird, verwendet die freie Helmholtzsche Energie als thermodynamisches Potential. Sie wird unter Berücksichtigung der Bilanzrelationen und über die Definition geeigneter konstitutiver Gleichungen für die verbleibenden abhängigen Variablen entwickelt.

Die erstmals von Lion u. Höfer (2006) vorgeschlagene Modellbildung zur Thermomechanik von Aushärtvorgängen berücksichtigt über den Aushärtegrad  $q$  die Änderung der Eigenschaften eines Klebers. Zu Beginn der Aushärtung wird von viskoelastischem Materialverhalten ausgegangen, das abklingt, bis der Kleber bei vollständiger Aushärtung ausschließlich sein spezifisches Materialverhalten und eine evtl. verbleibende konstante zusätzliche Spannung aufweist. Der spezifische Teil des Materialverhaltens kann durch den Anwender festgelegt und rechnerisch unabhängig von der in Kap. 4 dargestellten Thermomechanik betrachtet werden. Die einzige Einschränkung, die sich aus der Thermomechanik des Aushärtvorganges ergibt, ist die dort angenommene Inkompressibilität des mechanischen Anteils der Verformung, die für das spezifische Materialverhalten übernommen werden muss. Als einfaches Beispiel für ein Material, welches die freie Helmholtzsche Energie als Potential verwendet, wird in dieser Arbeit das inkompressible Neo-Hooksche Material ohne thermomechanische Kopplung betrachtet. Hierbei handelt es sich um einen Spezialfall des Mooney-Rivlin Modells.

Die Herleitung der konstitutiven Gleichungen für das Neo-Hooksche Material soll den Abschluss dieses Grundlagenkapitels darstellen.

### 1.4.1 Hyperelastische Materialien

Das Neo-Hooksche Material ist ein so genanntes hyperelastisches bzw. Greenelastisches Material, welches dazu geeignet ist, nichtlineare, finite Deformationen zu beschreiben. Es wird davon ausgegangen, dass die Verformung ideal-elastisch, d. h. vollständig reversibel, ist.

Ein typisches Anwendungsgebiet für solche Materialmodelle stellen Elastomerwerkstoffe dar, die in der Regel große Dehnungen zulassen. Die Deformation beruht hauptsächlich auf der Umordnung von Molekülketten, so dass von entropie-elastischem Verhalten gesprochen wird und die Annahme von ideal-elastischem Verhalten gerechtfertigt ist. Weitere Annahmen, die getroffen werden, sind die Homogenität des Materials und die alleinige Abhängigkeit der freien Helmholtzschen Energie vom Deformationsgradienten. Aufgrund der zweiten Annahme wird die freie Helmholtzsche Energie auch als Verzerungsenergiefunktion bezeichnet.

### 1.4.2 Auswertung der Clausius-Duhem Ungleichung

Ausgehend von den obigen Annahmen kann nun die Clausius-Duhem Ungleichung ausgewertet werden. Nach Glg. (1.93) muss

$$-\rho_R \dot{\psi} + \tilde{\mathbf{T}} \cdot \dot{\mathbf{E}} - \rho_R s \dot{\theta} - \frac{\mathbf{q}_R \text{ Grad } \theta}{\theta} \geq 0 \quad (1.94)$$

gelten.

In diesem Beispiel wird von einem isothermen Prozess ausgegangen, d. h. es treten keine Temperaturgradienten und -änderungen auf. Die Clausius-Duhem Ungleichung vereinfacht sich entsprechend zu

$$-\rho_R \dot{\psi} + \tilde{\mathbf{T}} \cdot \dot{\mathbf{E}} \geq 0 \quad . \quad (1.95)$$

Über die Kettenregel wird der erste Term umgeschrieben und man erhält

$$\left( -\rho_R \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{E}} + \tilde{\mathbf{T}} \right) \cdot \dot{\mathbf{E}} \geq 0 \quad . \quad (1.96)$$

In Abschnitt 1.3.1 ist ausgeführt, dass die Dichte  $\rho_R$  konstant ist und somit in der Verzerrungsenergiefunktion, die nun mit  $u$  bezeichnet wird, enthalten sein kann. Es ergibt sich damit

$$\left( -\frac{\partial u}{\partial \mathbf{E}} + \tilde{\mathbf{T}} \right) \cdot \dot{\mathbf{E}} \geq 0 \quad . \quad (1.97)$$

Da die Clausius-Duhem-Ungleichung für beliebige thermomechanische Prozesse und damit auch für beliebige Verzerrungsraten erfüllt sein muss, kann für den zweiten Piola-Kirchhoffschen Spannungstensor auf die konstitutive Beziehung

$$\tilde{\mathbf{T}} = \frac{\partial u}{\partial \mathbf{E}} \quad (1.98)$$

geschlossen werden. Damit wurde gezeigt, dass ein elastisches Material bei isothermen Prozessen keine Entropie produziert.

In diesem einfachen Materialmodell wird die Verzerrungsenergiefunktion in Abhängigkeit von dem Deformationsgradienten  $\mathbf{F}$  bzw. den daraus resultierenden Deformations- und Verzerrungstensoren  $\mathbf{C}$  und  $\mathbf{E}$  definiert. Dabei handelt es sich um so genannte objektive Größen, so dass die Verzerrungsenergiefunktion  $u$  ebenfalls eine objektive Größe ist. Unter Objektivität wird die Invarianz von Größen gegenüber einer Starrkörperbewegung in Form einer Rotation oder Translation verstanden.

Wird die rechte polare Zerlegung, wie in Abschnitt 1.2.3 beschrieben, betrachtet, können die Beziehungen

$$\mathbf{F} = \mathbf{R} \mathbf{U} \quad , \quad \mathbf{C} = \mathbf{U}^2 \quad \text{und} \quad \mathbf{E} = \frac{1}{2}(\mathbf{U}^2 - \mathbf{1}) \quad (1.99)$$

abgeleitet werden, so dass

$$\psi(\mathbf{F}) = \psi(\mathbf{U}) = \psi(\mathbf{C}) = \psi(\mathbf{E}) \quad (1.100)$$

gefolgert werden kann, wobei die Funktion  $\psi$  jeweils eine andere Form hätte. Wird wiederum die Kettenregel auf die Beziehung (1.99)<sub>3</sub> angewandt, ist die Beschreibung der konstitutiven Beziehung für den zweiten Piola-Kirchhoffschen Spannungstensor auch durch den rechten Cauchy-Green Tensor möglich.

$$\tilde{\mathbf{T}} = \frac{\partial u}{\partial \mathbf{E}} = \frac{\partial u}{\partial \mathbf{C}} \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial \mathbf{E}} = 2 \frac{\partial u}{\partial \mathbf{C}} \quad . \quad (1.101)$$

Für das hier verwendete Material wird isotropes Verhalten angenommen. Das Materialverhalten ist also unabhängig von der Richtung. Entsprechend kann die freie Helmholtzsche Energie auch durch die Invarianten der entsprechenden tensoriellen Größe ausgedrückt werden. Am Beispiel des rechten Cauchy-Green Tensors sind dies

$$\mathbf{I}_{\mathbf{C}} = \mathbf{C} \cdot \mathbf{1} \quad , \quad \mathbf{II}_{\mathbf{C}} = \frac{1}{2} [\mathbf{I}_{\mathbf{C}}^2 - \mathbf{I}_{\mathbf{C}^2}] \quad \text{und} \quad \mathbf{III}_{\mathbf{C}} = \det(\mathbf{C}) \quad . \quad (1.102)$$

Für den den zweiten Piola-Kirchhoffschen Spannungstensor folgt dann

$$\tilde{\mathbf{T}} = 2 \left( \frac{\partial u}{\partial \mathbf{I}_{\mathbf{C}}} \frac{\partial \mathbf{I}_{\mathbf{C}}}{\partial \mathbf{C}} + \frac{\partial u}{\partial \mathbf{II}_{\mathbf{C}}} \frac{\partial \mathbf{II}_{\mathbf{C}}}{\partial \mathbf{C}} + \frac{\partial u}{\partial \mathbf{III}_{\mathbf{C}}} \frac{\partial \mathbf{III}_{\mathbf{C}}}{\partial \mathbf{C}} \right) \quad , \quad (1.103)$$

mit

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{I}_{\mathbf{C}}}{\partial \mathbf{C}} &= \frac{\partial (\mathbf{C} \cdot \mathbf{1})}{\partial \mathbf{C}} = \mathbf{1} \quad , \\ \frac{\partial \mathbf{II}_{\mathbf{C}}}{\partial \mathbf{C}} &= \frac{1}{2} (2 \mathbf{I}_{\mathbf{C}} \mathbf{1} - 2 \mathbf{C}) = \mathbf{I}_{\mathbf{C}} \mathbf{1} - \mathbf{C} \quad , \\ \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{III}_{\mathbf{C}}} &= \mathbf{III}_{\mathbf{C}} \mathbf{C}^{-1} \quad . \end{aligned} \quad (1.104)$$

Wie in Kapitel 2.4.2 dargestellt ist, wird im Rahmen der Linearisierung des Arbeitsprinzips ein materieller Elastizitätstensor  $\mathbb{C}$  definiert, der aus den konstitutiven Beziehungen resultiert.

Ausgehend von der Definition nach Glg. (2.33), kann

$$\mathbb{D}(\tilde{\mathbf{T}})[\Delta \mathbf{u}] = \mathbb{C} \cdot \mathbb{D}(\mathbf{E})[\Delta \mathbf{u}] = \frac{\partial \tilde{\mathbf{T}}}{\partial \mathbf{E}} \cdot \mathbb{D}(\mathbf{E})[\Delta \mathbf{u}] \quad (1.105)$$

geschrieben werden. Über die Zusammenhänge in Glg. (1.99) und mit Hilfe der Kettenregel lässt sich für den Elastizitätstensor

$$\frac{\partial \tilde{\mathbf{T}}}{\partial \mathbf{E}} = \frac{\partial^2 u}{\partial \mathbf{E} \partial \mathbf{E}} = \mathbb{C} = 2 \frac{\partial \tilde{\mathbf{T}}}{\partial \mathbf{C}} = 4 \frac{\partial^2 u}{\partial \mathbf{C} \partial \mathbf{C}} \quad (1.106)$$

schreiben. Wird die Indexschreibweise verwendet, wird deutlich wie der Elastizitätstensor als Tensor 4. Stufe gebildet wird.

$${}^4\mathring{\mathbf{C}}_{IJKL} = 2 \frac{\partial \tilde{T}_{IJ}}{\partial C_{KL}} = \frac{\partial \tilde{T}_{IJ}}{\partial E_{KL}} = 4 \frac{\partial^2 u}{\partial C_{IJ} \partial C_{KL}} = \frac{\partial^2 u}{\partial E_{IJ} \partial E_{IJ}} \quad (1.107)$$

Analog lässt sich ein räumlicher Elastizitätstensor definieren, der aber in dieser Arbeit keine Verwendung findet. Dieser wird über die push-forward Operation

$${}^4\mathring{\mathbf{c}}_{ijkl} = F^{-1} F_{iI} F_{jJ} F_{kK} F_{lL} {}^4\mathring{\mathbf{C}}_{IJKL} \quad (1.108)$$

erhalten. Da die freie Variable das Verschiebungsfeld  $\mathbf{u}$  ist, müssen zur Modellierung eines rein mechanischen Prozesses keine weiteren Größen über die konstitutiven Beziehungen bestimmt werden. Siehe dazu auch Kap. 2.

### 1.4.3 Berücksichtigung der Inkompressibilität

Die Berücksichtigung der Inkompressibilität führt auf eine geometrische Zwangsbedingung, die in geeigneter Weise in den konstitutiven Beziehungen berücksichtigt werden muss. Mathematisch drückt sich Inkompressibilität in der Forderung

$$\det(\mathbf{F}) = F = 1 \quad (1.109)$$

aus, die sofort auf

$$\dot{F} = 0 \quad (1.110)$$

führt. Mit den Beziehungen

$$\frac{\partial F}{\partial \mathbf{F}} = F \mathbf{F}^{-T} \quad \text{und} \quad \dot{\mathbf{F}} = \text{grad } \mathbf{v} \mathbf{F} \quad (1.111)$$

lässt sich

$$\begin{aligned} \dot{F} &= \frac{\partial F}{\partial \mathbf{F}} \cdot \dot{\mathbf{F}} = F \mathbf{F}^{-T} \cdot \text{grad } \mathbf{v} \mathbf{F} \\ &= F \mathbf{F}^{-T} \mathbf{F}^T \cdot \text{grad } \mathbf{v} = F(\mathbf{1} \cdot \text{grad } \mathbf{v}) \end{aligned} \quad (1.112)$$

schreiben, woraus sich schließlich mit den Beziehungen aus Glg. (1.70)

$$\begin{aligned} \dot{F} &= F(\mathbf{1} \cdot \mathbf{d}) = F(\mathbf{1} \cdot (\mathbf{F}^{-T} \dot{\mathbf{E}} \mathbf{F}^{-1})) \\ &= F(\mathbf{F}^{-1} \mathbf{F}^{-T} \cdot \dot{\mathbf{E}}) = F \mathbf{C}^{-1} \cdot \dot{\mathbf{E}} = \frac{1}{2} F \mathbf{C}^{-1} \cdot \dot{\mathbf{C}} \end{aligned} \quad (1.113)$$

ergibt.

Damit können die zeitlichen Änderungen des Deformations- und Verzerrungstensors nicht mehr beliebig gewählt und Glg. (1.97) kann nicht wie in Abschnitt 1.4.2 ausgewertet werden.

Wird in Glg. (1.97) der Verzerrungstensor  $\mathbf{E}$  durch den rechten Cauchy-Green Tensor  $\mathbf{C}$  ersetzt, erhält man die Beziehung

$$\left( -\frac{\partial u}{\partial \mathbf{C}} + \frac{1}{2} \tilde{\mathbf{T}} \right) \cdot \dot{\mathbf{C}} \geq 0 \quad , \quad (1.114)$$

die wegen der Zwangsbedingung als verallgemeinerte Winkelbeziehung der beiden Terme des Skalarprodukts interpretiert werden kann.

Aus den Glg. 1.110 und 1.113 folgt

$$\frac{1}{2} \alpha F \mathbf{C}^{-1} \cdot \dot{\mathbf{C}} = 0 \quad . \quad (1.115)$$

Diese Null kann nun zu Glg. 1.114 addiert werden, so dass man

$$\left( \frac{1}{2} \tilde{\mathbf{T}} - \frac{\partial u}{\partial \mathbf{C}} - \alpha \frac{1}{2} F \mathbf{C}^{-1} \right) \cdot \dot{\mathbf{C}} \geq 0 \quad (1.116)$$

bzw.

$$\begin{aligned} & \left( \frac{1}{2} \tilde{\mathbf{T}} - \frac{\partial u}{\partial \mathbf{C}} - \alpha \frac{1}{2} F \mathbf{C}^{-1} \right)_{11} \dot{\mathbf{C}}_{11} + (\dots)_{22} \dot{\mathbf{C}}_{22} + (\dots)_{33} \dot{\mathbf{C}}_{33} + \\ & + 2 (\dots)_{12} \dot{\mathbf{C}}_{12} + 2 (\dots)_{23} \dot{\mathbf{C}}_{23} + 2 (\dots)_{13} \dot{\mathbf{C}}_{13} \geq 0 \end{aligned} \quad (1.117)$$

erhält.

Aufgrund der skalaren Nebenbedingung  $F = 1$  und entsprechend  $\text{III}_{\mathbf{C}} = 1$  bzw.  $\text{III}_{\mathbf{C}} = 0$  können von den sechs Komponenten des rechten Cauchy-Green Tensors  $\mathbf{C}$  nur fünf voneinander unabhängig sein. Wählt man den skalaren Faktor  $\alpha$  so, dass  $(\dots)_{11} = 0$  ist, können die Komponenten  $\dot{\mathbf{C}}_{22}$ ,  $\dot{\mathbf{C}}_{33}$ ,  $\dot{\mathbf{C}}_{12}$ ,  $\dot{\mathbf{C}}_{13}$ ,  $\dot{\mathbf{C}}_{23}$  beliebig variiert werden. Soll sich die obige Ungleichung erfüllen, muss also  $(\dots)_{22} = 0$ ,  $\dots$ ,  $(\dots)_{23} = 0$  gelten. Somit folgt

$$\left( \frac{1}{2} \tilde{\mathbf{T}} - \frac{\partial u}{\partial \mathbf{C}} - \alpha \frac{1}{2} F \mathbf{C}^{-1} \right) = 0 \quad . \quad (1.118)$$

Es kann gezeigt werden, dass der skalare Faktor unter bestimmten Bedingungen dem hydrostatischen Druck  $p$  entspricht. Dazu muss die Verzerrungsenergiefunktion homogen vom Grade Null sein. Es muss

$$u(\mathbf{D}) = u(\beta \mathbf{D}) \quad (1.119)$$

gelten. Dies ist der Fall, wenn ein volumetrisch isochorer Split, vgl. Abschnitt 1.2.3, eingeführt wird, und die Verzerrungsenergiefunktion durch den isochoren Teil des Cauchy-Green Tensors ausgedrückt wird. Für den isochoren Verformungsanteil gilt

$$\mathbf{F}_{iso} = F^{-\frac{1}{3}} \mathbf{F} \quad \text{bzw.} \quad \mathbf{C}_{iso} = \mathbf{F}_{iso}^T \mathbf{F}_{iso} = F^{-\frac{2}{3}} \mathbf{C} = \text{III}_{\mathbf{C}}^{-\frac{1}{3}} \mathbf{C} \quad . \quad (1.120)$$

#### 1.4.4 Inkompressibles Neo-Hooke-Material

Die Verzerrungsenergiefunktion für ein inkompressibles und isotropes Neo-Hooke Material ist

$$u = \frac{\mu}{2}(\mathbf{I}_{\mathbf{C}_{iso}} - 3) = \frac{\mu}{2}(\mathbf{1} \cdot \mathbf{C}_{iso} - 3) = \frac{\mu}{2} \text{III}_{\mathbf{C}}^{-\frac{1}{3}}(\mathbf{1} \cdot \mathbf{C} - 3) \quad . \quad (1.121)$$

Bei der Ableitung der Verzerrungsenergiefunktion muss die Determinante des Cauchy-Green Tensors berücksichtigt werden, auch wenn aufgrund der Inkompressibilität  $\text{III}_{\mathbf{C}} = 1$  und somit  $\mathbf{C}_{iso} = \mathbf{C}$  gilt.

Der zweite Piola-Kirchhoffsche Spannungstensor ergibt sich nach Glg. (1.118) zu

$$\tilde{\mathbf{T}} = 2 \frac{\partial u}{\partial \mathbf{C}} + p F \mathbf{C}^{-1} \quad . \quad (1.122)$$

Mit den Beziehungen in Glg. (1.104) kann

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{T}} &= \tilde{\mathbf{T}}_u + \tilde{\mathbf{T}}_p \\ &= 2 \frac{\partial}{\partial \mathbf{C}} \left[ \frac{\mu}{2} \text{III}_{\mathbf{C}}^{-\frac{1}{3}}(\mathbf{1} \cdot \mathbf{C} - 3) \right] + p F \mathbf{C}^{-1} \\ &= \mu \left[ \frac{\partial \text{III}_{\mathbf{C}}^{-\frac{1}{3}}}{\partial \mathbf{C}}(\mathbf{1} \cdot \mathbf{C}) + \text{III}_{\mathbf{C}}^{-\frac{1}{3}} \frac{\partial(\mathbf{1} \cdot \mathbf{C})}{\partial \mathbf{C}} \right] + p F \mathbf{C}^{-1} \\ &= \mu \text{III}_{\mathbf{C}}^{-\frac{1}{3}} \left[ \mathbf{1} - \frac{1}{3}(\mathbf{1} \cdot \mathbf{C})\mathbf{C}^{-1} \right] + p F \mathbf{C}^{-1} \end{aligned} \quad (1.123)$$

geschrieben werden.

Aus dem zweiten Piola-Kirchhoffschen Spannungstensor kann wiederum der Elastizitätstensor ermittelt werden. Der Übersichtlichkeit halber wird der zweite Piola-Kirchhoffsche Spannungstensor dazu in einen Anteil resultierend aus dem hydrostatischen Druck  $\tilde{\mathbf{T}}_p$  und einen Anteil resultierend aus der Verzerrungsenergiefunktion  $\tilde{\mathbf{T}}_u$  zerlegt. Zur Berechnung der zugehörigen Elastizitätstensoren, wird ein Tensor vierter Stufe

$$\mathbb{E} = -\frac{\partial \mathbf{C}^{-1}}{\partial \mathbf{C}} \quad (1.124)$$

eingeführt. Die Definition der zugehörigen Indexschreibweise ergibt sich aus

$$\frac{\partial}{\partial C_{MN}} (C_{JK}^{-1} C_{KL}) = \frac{\partial C_{JK}^{-1}}{\partial C_{MN}} C_{KL} + C_{JK}^{-1} \frac{\partial C_{KL}}{\partial C_{MN}} = 0 \quad (1.125)$$

und damit

$$\frac{\partial C_{JK}^{-1}}{\partial C_{MN}} C_{KL} = -C_{JM}^{-1} \delta_{LN} \quad . \quad (1.126)$$

Die Multiplikation mit  $C_{LR}^{-1}$  führt auf

$$\frac{\partial C_{JK}^{-1}}{\partial C_{MN}} C_{KL} C_{LR}^{-1} = \frac{\partial C_{JK}^{-1}}{\partial C_{MN}} \delta_{KR} = -C_{JM}^{-1} \delta_{LN} C_{LR}^{-1} = -C_{JM}^{-1} C_{NR}^{-1} \quad (1.127)$$

und in der Folge auf

$$\frac{\partial C_{JR}^{-1}}{\partial C_{MN}} = -C_{JM}^{-1} C_{NR}^{-1} \quad . \quad (1.128)$$

Da der rechte Cauchy-Green Tensor symmetrisch ist, kann schließlich

$$\mathbb{E}^4_{IJKL} = C_{IK}^{-1} C_{JL}^{-1} \quad (1.129)$$

geschrieben werden. Mit der Beziehung

$$\frac{\partial F}{\partial \mathbf{C}} = \frac{F}{2} \mathbf{C}^{-1} \quad (1.130)$$

folgt für den hydrostatischen Anteil des Elastizitätstensor

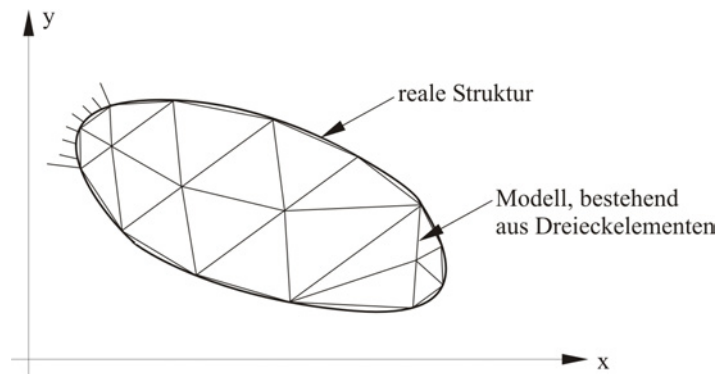
$$\begin{aligned} \mathbb{C}_p &= 2 \frac{\partial \tilde{\mathbf{T}}_p}{\partial \mathbf{C}} = 2 \frac{\partial}{\partial \mathbf{C}} (p F \mathbf{C}^{-1}) \\ &= 2 p \left( \frac{\partial F}{\partial \mathbf{C}} \mathbf{C}^{-1} + F \frac{\partial \mathbf{C}^{-1}}{\partial \mathbf{C}} \right) \\ &= p F (\mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{C}^{-1} - 2 \mathbb{E}) \quad , \end{aligned} \quad (1.131)$$

wobei die Komponenten dieses Tensors unabhängig von den Materialeigenschaften sind. Der Anteil aus der Verzerrungsenergiefunktion ergibt sich entsprechend zu

$$\begin{aligned} \mathbb{C}_u &= 2 \frac{\partial \tilde{\mathbf{T}}_u}{\partial \mathbf{C}} \\ &= 2 \frac{\partial}{\partial \mathbf{C}} \left( \mu \text{III}_{\mathbf{C}}^{-\frac{1}{3}} \left[ \mathbf{1} - \frac{1}{3} (\mathbf{1} \cdot \mathbf{C}) \mathbf{C}^{-1} \right] \right) \\ &= 2 \mu \left[ -\frac{1}{3} \text{III}_{\mathbf{C}}^{-\frac{1}{3}} \mathbf{C}^{-1} \otimes \left( \mathbf{1} - \frac{1}{3} \text{I}_{\mathbf{C}} \mathbf{C}^{-1} \right) - \frac{1}{3} \text{III}_{\mathbf{C}}^{-\frac{1}{3}} (\mathbf{1} \otimes \mathbf{C}^1 - \text{I}_{\mathbf{C}} \mathbb{E}) \right] \\ &= \frac{2}{3} \mu \text{III}_{\mathbf{C}}^{-\frac{1}{3}} \left[ \text{I}_{\mathbf{C}} \mathbb{E} - \mathbf{1} \otimes \mathbf{C}^{-1} - \mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{1} + \frac{1}{3} \text{I}_{\mathbf{C}} \mathbf{C}^{-1} \otimes \mathbf{C}^{-1} \right] \quad . \end{aligned} \quad (1.132)$$

## 2 Methode der finiten Elemente

Die Finite Elemente Methode (FEM) ist auf den aktuellen ingenieurwissenschaftlichen Gebieten zu einem Standardverfahren zur näherungsweise Lösung von komplexen Problemen geworden. Die Entwicklung der FEM erfolgte aufgrund immer komplexerer Problemstellungen, die mit den klassischen naturwissenschaftlichen Algorithmen nicht mehr lösbar waren. Im Zuge der Weiterentwicklung der digitalen Rechentechnik wurde die Lösung immer umfangreicherer Aufgaben möglich.



**Abbildung 5:** Aufteilung eines Kontinuums in finite Elemente.

Das Grundprinzip der FEM ist es, ein Kontinuum in eine endliche (finite) Anzahl von Elementen zu unterteilen, wie in Abb. 5 dargestellt ist.

Die FEM kann über die Verschiebungs- und die Kraftgrößenmethode hergeleitet werden, wobei die zweite Methode eher unüblich ist. Bei der in der Regel verwendeten Verschiebungsmethode werden die Verschiebungen im Element approximiert und die Kompatibilitätsbedingungen exakt erfüllt.

Es werden verschiedene Arten von Nichtlinearitäten unterschieden, die über die Theorie der FEM berücksichtigt werden können.

**Geometrische Nichtlinearität** Unter geometrischer Nichtlinearität wird das Auftreten großer Verschiebungen und Verdrehungen bei kleinen oder großen Verzerrungen verstanden. In Abschnitt 1.2 ist die zugehörige Kinematik näher beschrieben.

**Physikalische Nichtlinearitäten** Physikalische Nichtlinearität liegt vor, wenn das Materialverhalten, d. h. die Spannungs-Dehnungs-Beziehungen, nicht linear sind. Sie sind oft mit geometrischen Nichtlinearitäten verbunden, wie das Beispiel des Neo-Hookschen Materials in Abschnitt 1.4 zeigt.

**Nichtlinearität in Folge von Randbedingungen** Mit Nichtlinearitäten infolge von Randbedingungen werden allgemein Änderungen der Randbedingungen während eines Prozesses beschrieben. Dies führt genau genommen auf ein abschnittsweises lineares Verhalten. In dieser Arbeit ist dieser Punkt nur der Vollständigkeit halber aufgelistet.

Dieses Kapitel umfasst die grundlegenden Züge der Finiten Elemente Implementierung, die zur Lösung eines thermomechanischen Problems nötig sind.



Als unabhängige Variablen sind für gekoppelte Analysen der Green-Lagrangesche Verzerrungstensor  $\mathbf{E}$ , der aus dem Verschiebungsfeld  $\mathbf{u}$  resultiert, und die Temperatur  $\theta$  durch das FE-Programm MSC.MARC vorgegeben.

Um die nichtlineare thermomechanische Problemstellung zu lösen, müssen sowohl die Impulsbilanz in Form der lokalen Bewegungsgleichung als auch die Energiebilanz, also der erste Hauptsatz der Thermodynamik, ausgewertet werden. Diese werden dazu in schwache Formen überführt. Da die Lösung des gekoppelten Problems im FE-Programm MSC.MARC über den Staggered Solution Algorithmus erfolgt, werden das mechanische und das thermische Funktional getrennt gelöst. Die schwache Form der Bewegungsgleichung wird dazu mit Hilfe der Gateaux-Ableitung linearisiert und dann mit dem Newton-Raphson-Verfahren gelöst.

Die schwache Form der aus dem ersten Hauptsatz der Thermodynamik resultierenden Energiebilanz weist jedoch relativ geringe Nichtlinearitäten auf, weshalb im FE-Programm MSC.MARC zur Lösung eine quasilineare Berechnung durchgeführt wird. Eine ausführliche Behandlung der linearen und nichtlinearen FEM kann der Leser z. B. den Ausführungen von Bathe (2002), Emmerling (2003), Bonet u. Wood (1997), Zienkiewicz u. Taylor (2000a) und Zienkiewicz u. Taylor (2000b) entnehmen. Letztere beschreiben auch eingehend numerische Verfahren zur Lösung der auftretenden Gleichungen. Eine ausführlich Darstellung der Linearisierung und Diskretisierung der auftretenden Funktionale kann weiterhin Heimes (2003), Heimes (2004), Middendorf (2002), Fritsch (2004) sowie Wriggers (2001) entnommen werden.

## 2.1 Gateaux-Ableitung

Die Gateaux-Ableitung wird auch als Richtungsableitung bezeichnet und stellt eine verallgemeinerte Differentiation dar. Sie beschreibt die Änderung einer Größe aufgrund des differentiellen Zuwachses einer abhängigen Variable.

Als Beispiel soll die Änderung einer skalaren Funktion  $\phi(\mathbf{x})$  am Punkt  $P$  in Richtung des Vektors  $\mathbf{u}$  betrachtet werden, wie in Abb. 6 dargestellt ist. Die mathematische Definition der Gateaux-Ableitung ist

$$D(\phi(\mathbf{x}))[\mathbf{u}] = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{d}{d\epsilon} \phi(\mathbf{x} + \epsilon \mathbf{u}) \quad , \quad (2.1)$$

die über die Kettenregel und anschließende Grenzwertbetrachtung ausgewertet werden kann.

$$D(\phi)[\mathbf{u}] = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left[ \frac{\partial \phi(\mathbf{x} + \epsilon \mathbf{u})}{\partial(\mathbf{x} + \epsilon \mathbf{u})} \frac{\partial(\mathbf{x} + \epsilon \mathbf{u})}{\partial \epsilon} \right] = \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{u} = (\text{grad } \phi) \mathbf{u} \quad . \quad (2.2)$$

Für diesen Fall ist eine anschauliche Darstellung möglich.  $\phi(\mathbf{x}) = \phi(x_1, x_2, x_3) = \text{const.}$  beschreibt eine dreidimensionale Fläche, auf der im Punkt  $P$  senkrecht  $\text{grad } \phi$  steht. Es muss folglich

$$d\phi = \frac{\partial \phi}{\partial x_j} dx_j = (\text{grad } \phi) d\mathbf{x} = 0 \quad (2.3)$$

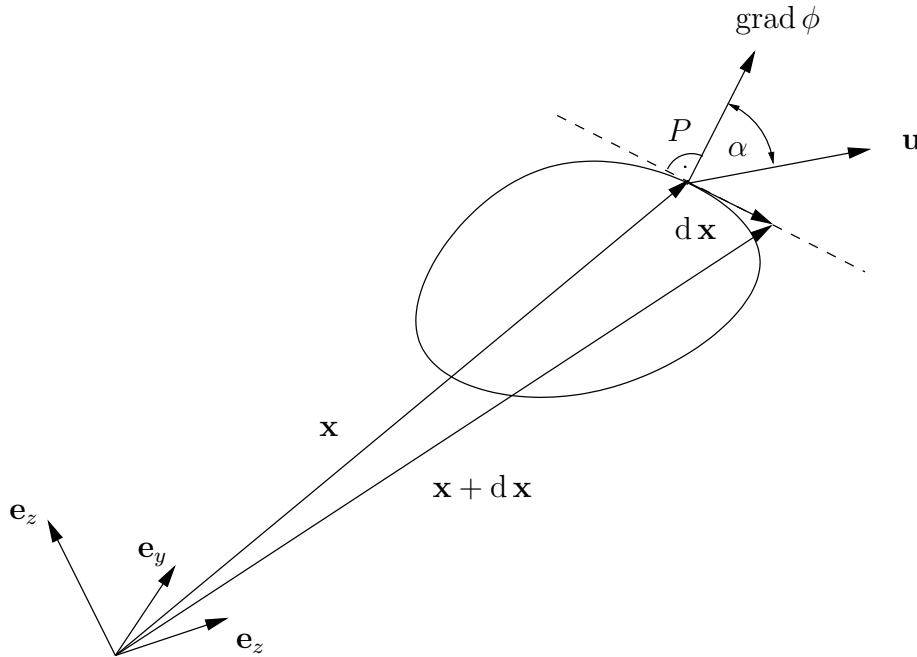


Abbildung 6: Gateaux-Ableitung einer skalaren Funktion in Richtung eines Vektors.

gelten.

Der beliebige Vektor  $\mathbf{u}$  in  $P$  schließt mit  $\text{grad } \phi$  den Winkel  $\alpha$  ein, so dass das Skalarprodukt

$$\text{grad } \phi \mathbf{u} = \frac{\partial \phi}{\partial x_1} u_1 + \frac{\partial \phi}{\partial x_2} u_2 + \frac{\partial \phi}{\partial x_3} u_3 \quad (2.4)$$

berechnet werden kann, welches identisch mit Glg. (2.2) ist. Das Skalarprodukt beschreibt die Änderung von  $\phi$  in Richtung des Vektors  $\mathbf{u}$  und stellt somit eine Richtungs- bzw. Gateaux-Ableitung dar.

Analog gilt die Richtungsableitung für beliebige Tensorfunktionen  $\mathbf{A}(\mathbf{x})$ . Die allgemeine Definition lautet

$$D(\mathbf{A}(\mathbf{x}))[\mathbf{u}] = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{d}{d\epsilon} \mathbf{A}(\mathbf{x} + \epsilon \mathbf{u}) \quad . \quad (2.5)$$

## 2.2 Newton-Raphson-Verfahren

Für die numerische Lösung eines nichtlinearen Problems mit Hilfe der FEM wird ein geeignetes numerisches Verfahren benötigt. Die Diskretisierung des Kontinuums führt für statische Probleme auf ein nichtlineares algebraisches Gleichungssystem der Form

$$\mathbf{K}(\mathbf{u}) \mathbf{u} = \mathbf{r} \quad . \quad (2.6)$$

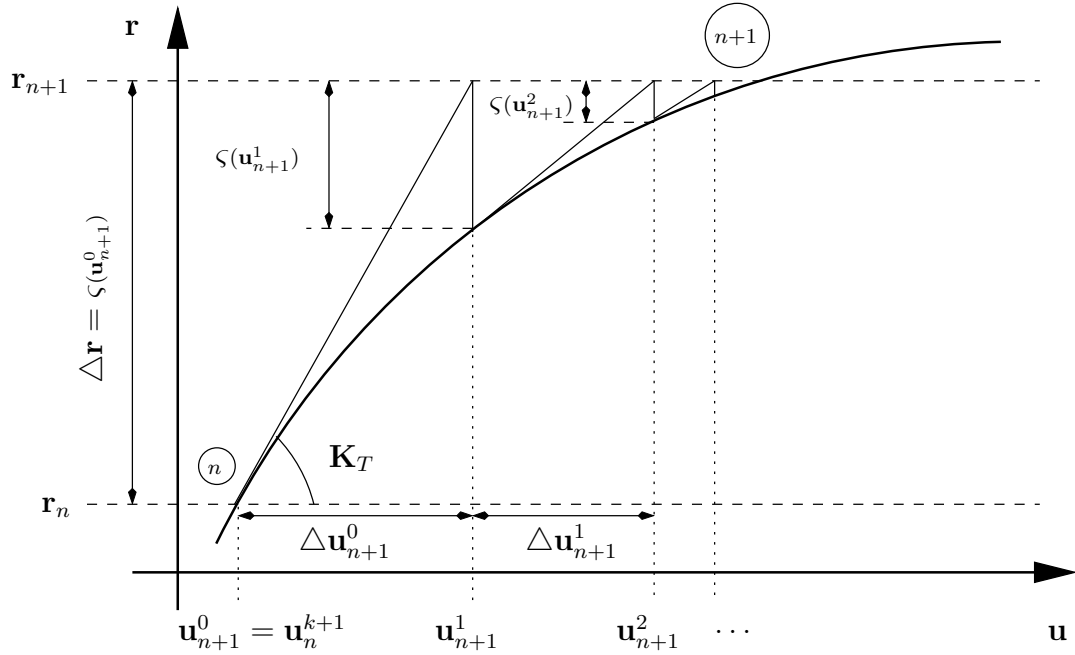


Abbildung 7: Schematische Darstellung des Newton-Raphson-Verfahrens.

Hierbei ist  $\mathbf{K}$  ein Tensoroperator zweiter Stufe,  $\mathbf{u}$  das bereits eingeführte Verschiebungsfeld und  $\mathbf{r}$  der Vektor, der die Summe der äußeren Lasten darstellt.

Zur Lösung dieses Gleichungssystems wird das inkrementelle Newton-Raphson-Verfahren gewählt, dessen Funktionsweise am Beispiel eines Inkrementes zwischen den Zeitpunkten  $t_n$  und  $t_{n+1}$  beschrieben werden soll.

Die obige Gleichung wird nach einem Residuenvektor

$$\zeta(\mathbf{u}) = \mathbf{K}(\mathbf{u}) \mathbf{u} - \mathbf{r} = 0 \quad (2.7)$$

umgestellt.

Zu Beginn des Inkrementes wird ein Lastinkrement

$$\Delta \mathbf{r}_n = \mathbf{r}_{n+1} - \mathbf{r}_n \quad (2.8)$$

aufgebracht und eine Näherung für das Verschiebungsfeld aus dem letzten Inkrement bzw. Iterationsschritt festgelegt.

$$\mathbf{u}_{n+1}^0 = \mathbf{u}_n^{k+1} \quad (2.9)$$

Diese wird in Glg. (2.7) eingesetzt und der Residuenvektor

$$\zeta = \mathbf{K}(\mathbf{u}_{n+1}^k) \mathbf{u}_{n+1}^k - \mathbf{r}_{n+1} \quad (2.10)$$

bestimmt. Anschließend wird diese Beziehung mit Hilfe der Gateaux-Ableitung linearisiert. Dieses Vorgehen entspricht einer Entwicklung in eine Taylorreihe.

$$\zeta(\mathbf{u}_{n+1}^{k+1}) \approx \zeta(\mathbf{u}_{n+1}^k) + D(\zeta(\mathbf{u}_{n+1}^k))[\Delta \mathbf{u}_{n+1}^k] = 0 \quad (2.11)$$

Die Gateaux-Ableitung berechnet sich zu

$$\begin{aligned} D(\varsigma(\mathbf{u}_{n+1}^k))[\Delta\mathbf{u}_{n+1}^k] &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{d}{d\epsilon} \varsigma(\mathbf{u}_{n+1}^k + \epsilon \Delta\mathbf{u}_{n+1}^k) \\ &= \left[ \frac{\partial \varsigma}{\partial \mathbf{u}} \right]_{n+1}^k \Delta\mathbf{u}_{n+1}^k = \mathbf{K}_T \Delta\mathbf{u}_{n+1}^k, \end{aligned} \quad (2.12)$$

wobei  $\mathbf{K}_T$  ein Tangentenoperator zweiter Stufe ist und die Steifigkeit eines Materials wiedergibt.

Nun wird die Differenz  $\Delta\mathbf{u}_{n+1}^k$  über das entstandene lineare Gleichungssystem

$$-\varsigma(\mathbf{u}_{n+1}^k) = \mathbf{K}_T \Delta\mathbf{u}_{n+1}^k \quad (2.13)$$

ermittelt, mit der das Verschiebungsfeld zum neuen Iterationsschritt

$$\mathbf{u}_{n+1}^{k+1} = \mathbf{u}_{n+1}^k + \Delta\mathbf{u}_{n+1}^k \quad (2.14)$$

bestimmt werden kann.

Die Iteration innerhalb des Inkrementes wird so lange wiederholt, bis der Residuenvektor eine Toleranzschranke unterschreitet.

$$\|\varsigma\| \leq \textit{Toleranz} \quad (2.15)$$

Anschließend wird ein neues Lastinkrement aufgebracht und die Iteration beginnt von neuem. Die schematische Vorgehensweise ist in Abb. 7 dargestellt.

Das Newton-Raphson-Verfahren ist eine von verschiedenen Methoden zur numerischen Lösung nichtlinearer algebraischer Gleichungssysteme. Das hier vorgestellte Verfahren wird als Full Newton-Raphson bezeichnet und hat den Vorteil quadratisch zu konvergieren. Dieses geht jedoch zu Lasten des Rechenaufwands, da für jeden Iterationsschritt der Tangentenoperator neu bestimmt werden muss. Um diesen Nachteil zu kompensieren, besteht in FEM-Programmen oftmals die Möglichkeit zwischen Full und Modified Newton-Raphson zu wählen. Beim modifizierten Newton-Raphson-Verfahren wird nur zu Beginn jedes Inkrementes der Tangentenoperator berechnet. So wird der Rechenaufwand erheblich reduziert.

Ein allgemeiner Nachteil des Newton-Raphson-Verfahrens besteht darin, dass nur monotone Zusammenhänge zwischen der Last und dem Verschiebungsfeld erfasst werden. Abhilfe schaffen so genannte Liniensuchmethoden oder Bogenlängenverfahren.

### 2.3 Lösungsverfahren für thermomechanisch gekoppelte Problemstellungen

Um ein thermomechanisch gekoppeltes Problem zu lösen, müssen die in Abschnitt 2.4.1 und 2.5.1 abgeleiteten schwachen Formen bzw. Funktionale ausgewertet werden.

Die thermomechanische Kopplung wird voll berücksichtigt, wenn beide schwache Formen, also das thermische und das mechanische Funktional, in einem Funktional zusammengefasst und monolithisch, d. h. gleichzeitig, gelöst werden. Der Nachteil besteht

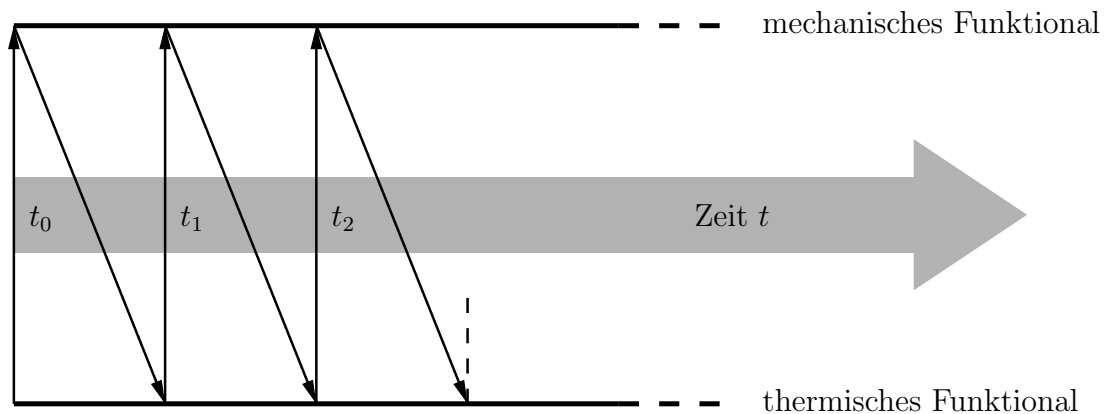


Abbildung 8: Schematische Darstellung des Staggered Solution Algorithmus.

jedoch darin, dass numerische Schwierigkeiten auftreten, wie unsymmetrische Steifigkeitsmatrizen und schwach besetzte Teilmatrizen.

Deswegen ist es sinnvoll für schwach gekoppelte thermomechanische Probleme die Funktionale getrennt zu betrachten, so dass sie quasi entkoppelt sind. Dazu wird zuerst das thermische Funktional bei konstantem Verschiebungsfeld gelöst und mit der resultierenden neuen Temperatur anschließend das mechanische Funktional betrachtet, wobei die Temperatur konstant gehalten wird. Die daraus resultierende Wärme aufgrund dissipativer Prozesse oder der thermomechanischen Kopplung wird wiederum im nächsten Schritt berücksichtigt, wie in Abb. 8 dargestellt ist. Die umgekehrte Reihenfolge ist ebenso möglich. Diese Vorgehensweise wird als Staggered Solution Algorithmus bezeichnet und wird von dem FE-Programm MSC.MARC verwendet. Der Staggered Solution Algorithmus bietet neben numerischen Vorteilen die Möglichkeit Wärmeentwicklung während des Deformationsprozesses zu berücksichtigen, da das thermische Funktional zu Beginn eines jeden Inkrementes gelöst wird.

## 2.4 Mechanisches Funktional

In diesem Abschnitt wird aus der lokalen Form der Bewegungsgleichung über das Prinzip der virtuellen Arbeit eine schwache Form der lokalen Gleichgewichtsbeziehung hergeleitet, die auch als mechanisches Funktional bezeichnet wird. Damit diese der numerischen Berechnung zugänglich ist, wird das Funktional anschließend mit Hilfe der Gateaux-Ableitung linearisiert. Abschließend wird exemplarisch die Diskretisierung der Grundgleichungen vorgestellt, so dass eine FE-Formulierung möglich ist.

### 2.4.1 Schwache Form der Bewegungsgleichung

Ausgehend von Glg. (1.51) folgt

$$\operatorname{div} \mathbf{T} + \rho \mathbf{k} = 0 \quad (2.16)$$

für statische Probleme bezüglich der Momentankonfiguration.

Indem ein mit den geometrischen Randbedingungen kompatibles virtuelles Verschiebungsfeld  $\delta \mathbf{u}$  übergeschoben und anschließend über das Volumen integriert wird, wird eine schwache Form der Bewegungsgleichung erzeugt. Die resultierende virtuelle Arbeit ist

$$\delta W = \int_v (\operatorname{div} \mathbf{T} + \rho \mathbf{k}) \delta \mathbf{u} \, d v = 0 \quad . \quad (2.17)$$

Mit geeigneten Umformungen kann die virtuelle Arbeit in eine Form, die dem Prinzip von d'Alembert in Lagrangescher Fassung entspricht, überführt werden. Ausgehend von

$$\operatorname{div}(\mathbf{T}^T \delta \mathbf{u}) = (\operatorname{div} \mathbf{T}) \delta \mathbf{u} + \mathbf{T} \cdot \operatorname{grad} \delta \mathbf{u} \quad (2.18)$$

folgt mit dem Gaußschen Integralsatz

$$\begin{aligned} \int_v (\operatorname{div} \mathbf{T}) \delta \mathbf{u} \, d v &= \int_v (\operatorname{div}(\mathbf{T} \delta \mathbf{u}) - \mathbf{T} \cdot \operatorname{grad} \delta \mathbf{u}) \, d v \\ &= \int_a \mathbf{T} \mathbf{n} \delta \mathbf{u} \, d a - \int_v \mathbf{T} \cdot \operatorname{grad} \delta \mathbf{u} \, d v \\ &= \int_a \hat{\mathbf{t}} \delta \mathbf{u} \, d a - \int_v \mathbf{T} \cdot \operatorname{grad} \delta \mathbf{u} \, d v \quad , \end{aligned} \quad (2.19)$$

wobei die Oberflächenbedingung berücksichtigt wird. Weiterhin führt Glg. (1.9) auf

$$\delta \mathbf{F} = \operatorname{Grad} \delta \mathbf{u} \quad \text{und mit} \quad \operatorname{grad} \mathbf{u} = \operatorname{Grad} \mathbf{u} \mathbf{F}^{-1} \quad (2.20)$$

auf die Definition des virtuellen Verzerrungstensors

$$\delta \mathbf{A} = \frac{1}{2} (\operatorname{grad}^T \delta \mathbf{u} + \operatorname{grad} \delta \mathbf{u}) \quad . \quad (2.21)$$

Da der Cauchysche Spannungstensor symmetrisch ist, gilt somit

$$\mathbf{T} \cdot \operatorname{grad} \delta \mathbf{u} = \mathbf{T} \cdot \delta \mathbf{A} \quad (2.22)$$

und die virtuelle Arbeit kann durch

$$\delta W = 0 = \int_v \mathbf{T} \cdot \delta \mathbf{A} \, d v - \int_v \rho \mathbf{k} \delta \mathbf{u} \, d v - \int_a \hat{\mathbf{t}} \delta \mathbf{u} \, d a \quad (2.23)$$

ausgedrückt werden. Die virtuelle Arbeit ist damit in das Prinzip von d'Alembert in Lagrangescher Fassung überführt, welches besagt, dass die Arbeit der inneren Spannungen an den virtuellen Verzerrungen  $\delta W_{int}$  für ein statisches Problem gleich der Arbeit der Volumen- und Oberflächenkräfte an den virtuellen Verschiebungen  $\delta W_{ext}$  ist. Die Arbeit der Trägheitskräfte an den virtuellen Verschiebungen  $\delta W_T$  ist bei statischen Problemen gleich Null.

$$\delta W_{int} = \delta W_{ext} \quad (2.24)$$

mit

$$\delta W_{int} = \int_v \mathbf{T} \cdot \delta \mathbf{A} \, dv \quad (2.25)$$

und

$$\delta W_{ext} = \int_v \rho \mathbf{k} \delta \mathbf{u} \, dv + \int_a \hat{\mathbf{t}} \delta \mathbf{u} \, da \quad . \quad (2.26)$$

Über die Beziehung in Glg. (1.10) kann die virtuelle Arbeit der äußeren Lasten auch in Größen der Referenzkonfiguration ausgedrückt werden:

$$\delta W_{ext} = \int_V \rho_R \mathbf{k} \delta \mathbf{u} \, dV + \int_A \hat{\mathbf{T}} \delta \mathbf{u} \, dA \quad . \quad (2.27)$$

Mit den Umformungen nach Glg. (1.42) sowie den Definitionen in den Glg. (1.32) und (1.35) kann auch die innere virtuelle Arbeit umgeschrieben werden.

$$\begin{aligned} \delta W_{int} &= \int_v (F^{-1} \mathbf{F} \tilde{\mathbf{T}} \mathbf{F}^T) \cdot \delta \mathbf{A} \, dv \\ &= \int_V \tilde{\mathbf{T}} \cdot (\mathbf{F}^T \delta \mathbf{A} \mathbf{F}) \, dV = \int_V \tilde{\mathbf{T}} \cdot \delta \mathbf{E} \, dV \quad . \end{aligned} \quad (2.28)$$

In den Größen der Referenzkonfiguration lässt sich die virtuelle Arbeit somit durch

$$\delta W = 0 = \int_V \tilde{\mathbf{T}} \cdot \delta \mathbf{E} \, dV - \int_V \rho_R \mathbf{k} \delta \mathbf{u} \, dV - \int_A \hat{\mathbf{T}} \delta \mathbf{u} \, dA \quad (2.29)$$

ausdrücken. Da die FE-Implementierung über Größen der Referenzkonfiguration realisiert wird, stellt diese Gleichung in dieser Arbeit die Basis für die FE-Formulierung dar.

I. Allg. kann der Nutzer eines FE-Programmes zwischen der Updated und der Total Lagrange Beschreibungsweise wählen. Entsprechend wird die Berechnung eines Problems mit Größen der Momentan- oder der Referenzkonfiguration durchgeführt.

### 2.4.2 Linearisierung des Arbeitsprinzips

Da die virtuelle Arbeit in einem nichtlinearen Zusammenhang zum Verschiebungsfeld  $\mathbf{u}$  und der Temperatur  $\theta$  steht, muss sie zur Berechnung so umgeformt werden, dass das Newton-Raphson-Verfahren oder ein anderes numerisches Verfahren anwendbar ist. Dazu muss das Funktional linearisiert werden.

Die weiteren Schritte bis hin zur FE-Formulierung werden beispielhaft an der inneren virtuellen Arbeit veranschaulicht.

Um die Änderung der gesamten virtuellen Arbeit  $\delta W(\mathbf{u}, \theta, \delta \mathbf{u})$  in Richtung des Verschiebungsinkrementes  $\Delta \mathbf{u}$  um das aktuelle Verschiebungsfeld  $\mathbf{u}$  und in Abhängigkeit von der zweiten freien Variablen  $\theta$  zu beschreiben, wird die Gateaux-Ableitung verwendet. Es muss dann gemäß Glg. (2.29)

$$\delta W(\mathbf{u}_{n+1}^{k+1}, \theta_{n+1}^{k+1}, \delta \mathbf{u}) = 0 = \delta W(\mathbf{u}_{n+1}^k, \theta_{n+1}^k, \delta \mathbf{u}) + D(\delta W(\mathbf{u}_{n+1}^k, \theta_{n+1}^k, \delta \mathbf{u}))[\Delta \mathbf{u}] + D(\delta W(\mathbf{u}_{n+1}^k, \theta_{n+1}^k, \delta \mathbf{u}))[\Delta \theta] \quad (2.30)$$

gelten.

Da im Folgenden die prinzipielle Linearisierung veranschaulicht werden soll, also die Linearisierung für das Inkrement  $n + 1$  in dem neuen Iterationsschritt  $k + 1$ , basierend auf den Größen der vorangegangenen Iteration  $k$ , wird aufgrund der Übersichtlichkeit auf die entsprechenden Indizes verzichtet.

Grundlage der Betrachtung ist die rechte Seite der obigen Gleichung:

$$\delta W(\mathbf{u}, \theta, \delta \mathbf{u}) + D(\delta W(\mathbf{u}, \theta, \delta \mathbf{u}))[\Delta \mathbf{u}] + D(\delta W(\mathbf{u}, \theta, \delta \mathbf{u}))[\Delta \theta] = 0 \quad . \quad (2.31)$$

Die innere virtuelle Arbeit ist nach Gleichung (2.28)

$$\delta W_{int}(\mathbf{u}, \theta, \delta \mathbf{u}) = \int_V \tilde{\mathbf{T}} \cdot \delta \mathbf{E} \, dV \quad . \quad (2.32)$$

Wird ein materieller Elastizitätstensor  $\mathbb{C}$  über die Gateaux-Ableitung

$$D(\tilde{\mathbf{T}})[\Delta \mathbf{u}] = \mathbb{C} \, D(\mathbf{E})[\Delta \mathbf{u}] \quad (2.33)$$

definiert und weiterhin über Glg. (2.20) mit  $\delta \mathbf{F} = D(\mathbf{F})[\delta \mathbf{u}]$  die Identität

$$\delta \mathbf{E} = \frac{1}{2}(\delta \mathbf{F}^T \mathbf{F} + \mathbf{F}^T \delta \mathbf{F}) = D(\mathbf{E})[\delta \mathbf{u}] \quad (2.34)$$

nachgewiesen, kann die Richtungsableitung der inneren virtuellen Arbeit umgeformt werden. Mit

$$D(\delta \mathbf{E})[\Delta \mathbf{u}] = \frac{1}{2}(\text{Grad}^T \Delta \mathbf{u} \, \text{Grad} \mathbf{u} + \text{Grad}^T \mathbf{u} \, \text{Grad} \Delta \mathbf{u}) \quad (2.35)$$



gilt dann für die Gateaux-Ableitung in Richtung des Verschiebungsincrementes

$$\begin{aligned}
D(\delta W_{int})[\Delta \mathbf{u}] &= \int_V D(\tilde{\mathbf{T}} \cdot \delta \mathbf{E})[\Delta \mathbf{u}] \, dV \\
&= \int_V \delta \mathbf{E} \cdot D(\tilde{\mathbf{T}})[\Delta \mathbf{u}] \, dV + \int_V \tilde{\mathbf{T}} \cdot D(\delta \mathbf{E})[\Delta \mathbf{u}] \, dV \\
&= \int_V \delta \mathbf{E} \cdot \mathbb{C} \cdot D(\mathbf{E})[\Delta \mathbf{u}] \, dV + \int_V \tilde{\mathbf{T}} \cdot D(\delta \mathbf{E})[\Delta \mathbf{u}] \, dV \\
&= \int_V \delta \mathbf{E} \cdot \mathbb{C} \cdot D(\mathbf{E})[\Delta \mathbf{u}] \, dV + \int_V \tilde{\mathbf{T}} \cdot [\text{Grad}^T \mathbf{u} \, \text{Grad} \delta \mathbf{u}] \, dV \\
&= \int_V D(\mathbf{E})[\delta \mathbf{u}] \cdot \mathbb{C} \cdot D(\mathbf{E})[\Delta \mathbf{u}] \, dV \\
&\quad + \int_V \tilde{\mathbf{T}} \cdot [\text{Grad}^T \mathbf{u} \, \text{Grad} \delta \mathbf{u}] \, dV \quad ,
\end{aligned} \tag{2.36}$$

wobei bei der vorletzten Umformung die Symmetrie des zweiten Piola-Kirchhoffschen Spannungstensors berücksichtigt wird.

Für die Gateaux-Ableitung bezüglich der Temperatur  $\theta$  gilt

$$\begin{aligned}
D(\delta W_{int})[\Delta \theta] &= \int_V D(\tilde{\mathbf{T}} \cdot \delta \mathbf{E})[\Delta \theta] \, dV \\
&= \int_V \delta \mathbf{E} \cdot D(\tilde{\mathbf{T}})[\Delta \theta] \, dV \\
&= \int_V \delta \mathbf{E} \cdot \left[ \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\partial \tilde{\mathbf{T}}(\theta + \epsilon \Delta \theta)}{\partial(\theta + \epsilon \Delta \theta)} \frac{\partial(\theta + \epsilon \Delta \theta)}{d\epsilon} \right] \, dV \\
&= \int_V \delta \mathbf{E} \cdot \frac{\partial \tilde{\mathbf{T}}}{\partial \theta} \Delta \theta \, dV \\
&= \int_V D(\mathbf{E})[\delta \mathbf{u}] \cdot \Theta \, \Delta \theta \, dV \quad .
\end{aligned} \tag{2.37}$$

Dabei ist berücksichtigt, dass der Green-Lagrangesche Verzerrungstensor nur vom Verschiebungsfeld  $\mathbf{u}$  abhängt, da die Temperatur während der Auswertung des mechanischen Funktionals konstant ist.

Aus den Glg. (2.36) und (2.37) folgt sofort, dass für die Lösung des mechanischen Funktionals der materielle Elastizitätstensor  $\mathbb{C}$ , der zweite Piola-Kirchhoffsche Spannungstensor  $\tilde{\mathbf{T}}$  und der Temperatur-Spannungstensor  $\Theta = \frac{\partial \tilde{\mathbf{T}}}{\partial \theta}$  berechnet werden müssen. Ziel der Implementierung eines Materialmodells in das FE-Programm MSC.MARC muss es also sein, diese drei Größen aus den konstitutiven Beziehungen des Modells abzuleiten

und dem FE-Programm zur Lösung des mechanischen Funktionals zur Verfügung zu stellen.

Aus der Linearisierung der virtuellen Arbeit der äußeren Lasten ergeben sich keine weitere Größen, die vom Nutzer berechnet werden müssen, da diese aus den im Programm festgelegten Randbedingungen resultieren.

### 2.4.3 Diskretisierung des Arbeitsprinzips

Am Beispiel der linearisierten virtuellen Arbeit soll weiterhin gezeigt werden, wie die Ortsdiskretisierung realisiert wird. Es werden dabei keine bestimmten Elementansätze berücksichtigt und ein isoparametrisches Konzept wird vorausgesetzt.

Das Verschiebungsfeld wird durch den Ansatz

$$\mathbf{u} = \sum_a N_a \mathbf{u}_a \quad (2.38)$$

angenähert. Dabei handelt es sich bei  $\mathbf{u}_a$  um Knotenpunktverschiebungen und bei  $N_a(\xi)$  um Ansatzfunktionen, die von den isoparametrischen Koordinaten  $\xi$  abhängig sind.

Analog gilt für den materiellen und den räumlichen Ortsvektor

$$\mathbf{X} = \sum_a N_a \mathbf{X}_a \quad \text{und} \quad \mathbf{x} = \sum_a N_a \mathbf{x}_a \quad (2.39)$$

sowie für die Variation und die inkrementelle Knotenpunktverschiebung

$$\delta \mathbf{u} = \delta \mathbf{x} = \sum_a N_a \delta \mathbf{u}_a \quad \text{und} \quad \Delta \mathbf{u} = \sum_a N_a \Delta \mathbf{u}_a \quad . \quad (2.40)$$

Damit lassen sich alle kinematischen Größen durch die Approximation des Verschiebungsfeldes in Glg. (2.38) ausdrücken. Aus Glg. (1.9) folgt

$$\mathbf{F} = \mathbf{1} + \text{Grad } \mathbf{u} = \mathbf{1} + \sum_a \mathbf{u}_a \otimes \text{Grad } N_a(\xi) \quad (2.41)$$

und

$$\delta \mathbf{F} = \text{Grad } \delta \mathbf{u} = \sum_a \delta \mathbf{u}_a \otimes \text{Grad } N_a(\xi) \quad . \quad (2.42)$$

Aus Glg. (2.34) folgt

$$\begin{aligned} \delta \mathbf{E} &= \frac{1}{2} (\delta \mathbf{F}^T \mathbf{F} + \mathbf{F}^T \delta \mathbf{F}) \\ &= \frac{1}{2} \left\{ \left( \sum_a \text{Grad } N_a \otimes \delta \mathbf{u}_a \right) \mathbf{F} + \mathbf{F}^T \left( \sum_a \delta \mathbf{u}_a \otimes \text{Grad } N_a \right) \right\} \\ &= \frac{1}{2} \sum_a \delta \mathbf{u}_a \left\{ (\text{Grad } N_a \otimes \mathbf{F})^T + (\mathbf{F} \otimes \text{Grad } N_a) \right\} \quad , \end{aligned} \quad (2.43)$$

wobei bezüglich der letzten Umformung auf Middendorf (2002, S. 33) verwiesen wird. Damit lassen sich die einzelnen Terme aus Gleichung (2.30)

$$\delta W + D(\delta W)[\Delta \mathbf{u}] + D(\delta W)[\Delta \theta] = 0 \quad (2.44)$$

diskretisieren.

Wird das linearisierte Arbeitsprinzip im Sinne eines Newton-Raphson-Verfahrens nach Glg. (2.13) umgeformt, folgt

$$-\delta W = D(\delta W)[\Delta \mathbf{u}] + D(\delta W)[\Delta \theta] \quad . \quad (2.45)$$

Der Übersichtlichkeit halber wird die Diskretisierung der einzelnen Terme getrennt behandelt. Auch wird die Diskretisierung der Gateaux-Ableitung nur exemplarisch für die innere virtuelle Arbeit hergeleitet.

**Diskretisierung der virtuellen Arbeit** Die innere virtuelle Arbeit an einem Knotenpunkt  $a$  eines beliebigen Elementes wird wie folgt diskretisiert.

$$\begin{aligned} \delta W_{a, \text{int}} &= \int_V \tilde{\mathbf{T}} \cdot \delta \mathbf{E} \, dV \\ &= \delta \mathbf{u}_a \underbrace{\left\{ \int_V \frac{1}{2} \tilde{\mathbf{T}} \cdot \left[ (\text{Grad } N_a \otimes \mathbf{F})^{\text{T}12} + (\mathbf{F} \otimes \text{Grad } N_a) \right] dV \right\}}_{\mathbf{R}_{a, \text{int}}} \quad , \quad (2.46) \end{aligned}$$

mit  $\mathbf{R}_{a, \text{int}}$  als Knotenpunktkraft.

Die Vorgehensweise für die Diskretisierung der virtuellen Arbeit infolge der äußeren Lasten ist analog und führt auf

$$\delta W_a = \delta \mathbf{u}_a \mathbf{R}_{a, \text{ext}} \quad . \quad (2.47)$$

Fasst man alle Knotenpunktverschiebungen zusammen, kann dies durch die Überführung der virtuellen Knotenpunktverschiebungen in eine Spaltenmatrix  $\{\delta \mathbf{u}\}$  und der Knotenpunktkräfte in eine Spaltenmatrix  $\{\mathbf{R}\}$  geschehen. Es ergibt sich somit für die virtuelle Arbeit

$$\delta W = \{\delta \mathbf{u}\} (\{\mathbf{R}_{\text{int}}\} - \{\mathbf{R}_{\text{ext}}\}) = \{\delta \mathbf{u}\} \{\mathbf{R}\} = 0 \quad . \quad (2.48)$$

Da das virtuelle Verschiebungsfeld beliebig und ungleich Null ist, folgt

$$\{\mathbf{R}_{\text{int}}\} - \{\mathbf{R}_{\text{ext}}\} = 0 \quad . \quad (2.49)$$

Nach dem Newton-Raphson-Verfahren in Abschnitt 2.2 ergibt sich daraus der Residuenvektor

$$\varsigma = \{\mathbf{R}_{\text{int}}\} - \{\mathbf{R}_{\text{ext}}\} \quad . \quad (2.50)$$

**Diskretisierung der bezüglich des Verschiebungsfeldes linearisierten inneren virtuellen Arbeit** Nachdem im vorangestellten Paragraphen das gesamte Arbeitsprinzip diskretisiert wurde, beschränkt sich dieser Paragraph auf die Darstellung der Diskretisierung der Gateaux-Ableitung im Sinne des Newton-Raphson-Verfahrens für die innere virtuelle Arbeit. Das Vorgehen kann analog auf die linearisierte virtuelle Arbeit infolge der äußeren Lasten übertragen werden.

Die linearisierte innere virtuelle Arbeit

$$\begin{aligned} D(\delta W_{int})[\Delta \mathbf{u}] &= \int_V D(\mathbf{E})[\delta \mathbf{u}] \cdot \mathbb{C} \cdot D(\mathbf{E})[\Delta \mathbf{u}] \, dV + \int_V \tilde{\mathbf{T}} \cdot [\text{Grad}^T \mathbf{u} \, \text{Grad} \delta \mathbf{u}] \, dV \\ &= D(\delta W_c)[\Delta \mathbf{u}] + D(\delta W_\sigma)[\Delta \mathbf{u}] \end{aligned} \quad (2.51)$$

wird in einen Anteil  $D(\delta W_c)[\Delta \mathbf{u}]$  mit dem materiellen Elastizitätstensor und einen Anteil  $D(\delta W_\sigma)[\Delta \mathbf{u}]$  mit dem Spannungstensor zerlegt. Unter Berücksichtigung von Glg. (2.34) und (2.35) kann

$$\begin{aligned} D(\delta W_c(\mathbf{u}, \theta, N_a \delta \mathbf{u}_a))[N_b \Delta \mathbf{u}_b] &= \\ &= \int_V \frac{1}{2} \delta \mathbf{u}_a \left[ (\text{Grad} N_a \otimes \mathbf{F})^{T_{12}} + (\mathbf{F} \otimes \text{Grad} N_a) \right] \cdot \mathbb{C} \cdot \\ &\quad \frac{1}{2} \left[ (\text{Grad} N_b \otimes \mathbf{F}^T) + (\mathbf{F}^T \otimes \text{Grad} N_b)^{T_{23}} \right] \Delta \mathbf{u}_b \, dV \\ &= \delta \mathbf{u}_a \mathbf{K}_{c, ab} \Delta \mathbf{u}_b \end{aligned} \quad (2.52)$$

geschrieben werden. Für alle Knotenpunktverschiebungen gilt entsprechend

$$D(\delta W_c)[\{\Delta \mathbf{u}\}] = \{\delta \mathbf{u}\} [\mathbf{K}_c] \{\Delta \mathbf{u}\} \quad . \quad (2.53)$$

Dabei stellt  $[\mathbf{K}]$  eine Tangentensteifigkeitsmatrix dar.

Für den geometrischen Anteil gilt

$$\begin{aligned} D(\delta W_\sigma(\mathbf{u}, \theta, N_a \delta \mathbf{u}_a))[N_b \Delta \mathbf{u}_b] &= \int_V \tilde{\mathbf{T}} \cdot [(\text{Grad} N_b \otimes \Delta \mathbf{u}_b) (\delta \mathbf{u}_a \otimes \text{Grad} N_a)] \, dV \\ &= \int_V \tilde{\mathbf{T}} \cdot [\delta \mathbf{u}_a \Delta \mathbf{u}_b (\text{Grad} N_b \otimes \text{Grad} N_a)] \, dV \\ &= \delta \mathbf{u}_a \mathbf{K}_{\sigma, ab} \Delta \mathbf{u}_b \quad . \end{aligned} \quad (2.54)$$

Für alle Knotenpunktverschiebungen folgt wiederum

$$D(\delta W_\sigma)[\{\Delta \mathbf{u}\}] = \{\delta \mathbf{u}\} [\mathbf{K}_\sigma] \{\Delta \mathbf{u}\} \quad . \quad (2.55)$$

**Diskretisierung der bezüglich der Temperatur linearisierten inneren virtuellen Arbeit** Die Diskretisierung der Gateaux-Ableitung bezüglich der Temperatur wird analog zu der vorigen Gateaux-Ableitung berechnet.

$$\begin{aligned}
 D(\delta W_{int}(\mathbf{u}, \theta, N_a \delta \mathbf{u}_a))[\Delta \theta] &= \int_V D(\mathbf{E})[N_a \delta \mathbf{u}_a] \cdot \Theta \Delta \theta \, dV \\
 &= \int_V \frac{1}{2} \delta \mathbf{u}_a \left[ (\text{Grad } N_a \otimes \mathbf{F})^{\text{T}12} + (\mathbf{F} \otimes \text{Grad } N_a) \right] \cdot \Theta \Delta \theta \, dV \\
 &= \delta \mathbf{u}_a \mathbf{R}_\theta \quad ,
 \end{aligned} \tag{2.56}$$

womit für alle Knotenpunktverschiebungen

$$D(\delta W_{int})[\Delta \theta] = \{\delta \mathbf{u}\} \{\mathbf{R}_\theta\} \tag{2.57}$$

gilt. Fasst man die Ergebnisse aus den Diskretisierungen zusammen, entsteht nach Glg. (2.45) und (2.50) ein Ausdruck der Form

$$\{\delta \mathbf{u}\} (-\varsigma) = \{\delta \mathbf{u}\} (\dots) \quad , \tag{2.58}$$

der aufgrund der Tatsache, dass  $\{\delta \mathbf{u}\}$  beliebig und ungleich Null ist im Sinne des Newton-Raphson-Verfahrens, auch

$$-\varsigma = (\dots) \tag{2.59}$$

geschrieben werden kann.

## 2.5 Thermisches Funktional

### 2.5.1 Schwache Form der Wärmeleitgleichung

Dieser Abschnitt beschreibt, wie aus dem ersten Hauptsatz der Thermodynamik die Wärmeleitgleichung ermittelt und diese in eine schwache Form überführt wird. Abschließend wird erläutert, wie die schwache Form in dem FE-Programm MSC.MARC ausgewertet wird. Um die Wärmeleitgleichung zu erhalten, muss der zweite Hauptsatz der Thermodynamik in Form der Clausius-Duhem-Ungleichung ausgewertet werden. Da dies einen Vorgriff auf die Materialmodellierung in Kap. 4 darstellt, wird das Vorgehen an dieser Stelle nur grob skizziert.

**Auswertung der Clausius-Duhem-Ungleichung** Die Clausius-Duhem-Ungleichung ist nach Glg. (1.93) durch

$$-\rho_R \dot{\psi} + \tilde{\mathbf{T}} \cdot \dot{\mathbf{E}} - \rho_R s \dot{\theta} - \frac{\mathbf{q}_R \text{Grad } \theta}{\theta} \geq 0 \tag{2.60}$$

gegeben. Sie wird häufig in die zwei unabhängigen Gleichungen

$$-\rho_R \dot{\psi} + \tilde{\mathbf{T}} \cdot \dot{\mathbf{E}} - \rho_R s \dot{\theta} \geq 0 \quad (2.61)$$

und

$$-\frac{\mathbf{q}_R \text{ Grad } \theta}{\theta} \geq 0 \quad (2.62)$$

aufgeteilt. Der Wärmeleitanteil der Clausius-Duhem-Ungleichung wird erfüllt, wenn ein Fourierscher Wärmefluss mit

$$\mathbf{q}_R = -\kappa \text{ Grad } \theta \quad (2.63)$$

eingeführt und somit eine positive quadratische Form erzeugt wird, weil die Wärmeleitzahl  $\kappa$  immer positiv angenommen wird.

In der Folge vereinfacht sich die Auswertung der Clausius-Duhem-Ungleichung auf den ersten Teil. Die freien Variablen sind für thermomechanische Prozesse der Verzerrungstensor  $\mathbf{E}$  und die Temperatur  $\theta$ . Für den Fall, dass die freie Helmholtzsche Energie über diese beiden Variablen und weitere innere Variablen, z. Bsp.  $\alpha$ , ausgedrückt wird, folgt die Ableitung zu

$$\dot{\psi} = \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{E}} \cdot \dot{\mathbf{E}} + \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \dot{\theta} + \frac{\partial \psi}{\partial \alpha} \dot{\alpha} + \dots \quad (2.64)$$

Somit kann

$$-\rho_R \left( \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{E}} \cdot \dot{\mathbf{E}} + \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \dot{\theta} + \frac{\partial \psi}{\partial \alpha} \dot{\alpha} + \dots \right) + \tilde{\mathbf{T}} \cdot \dot{\mathbf{E}} - \rho_R s \dot{\theta} \geq 0 \quad (2.65)$$

geschrieben werden. Durch weitere Umformungen und die Wahl eines geeigneten Ansatzes für die freie Helmholtzsche Energie resultiert die Form

$$\{\dots\} \cdot \dot{\mathbf{E}} + \{\dots\} \dot{\theta} + \omega \geq 0 \quad (2.66)$$

Da die zeitlichen Änderungen der freien Variablen beliebig sind, gewinnt man aus den ersten beiden Termen konstitutive Gleichungen für den zweiten Piola-Kirchhoffschen Spannungstensor und die spezifische Entropie  $s$ , so dass die geklammerten Terme verschwinden und die Restungleichung aus einem Anteil  $\omega$  besteht, der mit der linken Seite in Glg. (2.61) identisch sein muss.

**Wärmeleitgleichung und schwache Form** Ausgehend vom ersten Hauptsatz der Thermodynamik in der lokalen materiellen Form nach Glg. (1.79)

$$\rho_R \dot{e} = \tilde{\mathbf{T}} \cdot \dot{\mathbf{E}} + \rho_R r - \text{Div } \mathbf{q}_R \quad (2.67)$$

und unter Berücksichtigung von Glg. (1.90) kann

$$\rho_R(\dot{\psi} + s \dot{\theta} + \dot{s} \theta) = \rho_R(\dot{\psi} + s \dot{\theta}) + \rho_R \theta \dot{s} = \tilde{\mathbf{T}} \cdot \dot{\mathbf{E}} + \rho_R r - \text{Div } \mathbf{q}_R \quad (2.68)$$

und schließlich

$$-\tilde{\mathbf{T}} \cdot \dot{\mathbf{E}} + \rho_R(\dot{\psi} + s \dot{\theta}) + \rho_R \theta \dot{s} = \rho_R r - \text{Div } \mathbf{q}_R \quad (2.69)$$

geschrieben werden. Auf der Grundlage der Betrachtung der Clausius-Duhem-Ungleichung können die beiden ersten Terme der rechten Seite durch die Restgröße  $\omega$  ersetzt werden:

$$\omega - \rho_R \theta \dot{s} + \rho_R r - \text{Div } \mathbf{q}_R = 0 \quad . \quad (2.70)$$

Die letzte Gleichung wird als Wärmeleitgleichung bezeichnet und muss nun in eine schwache Form überführt werden. Dazu wird die Wärmeleitgleichung mit einem virtuellen Temperaturfeld  $\delta\theta$  multipliziert und anschließend über das Volumen integriert. Es ergibt sich

$$\int_V \omega \delta\theta \, dV - \int_V \rho_R \theta \dot{s} \delta\theta \, dV + \int_V \rho_R r \delta\theta \, dV - \int_V \text{Div } \mathbf{q}_R \delta\theta \, dV = 0 \quad . \quad (2.71)$$

Der letzte Term lässt sich mit Hilfe des Gaußschen Integralsatzes in

$$\int_V \text{Div } \mathbf{q}_R \delta\theta \, dV = \int_A q_N \delta\theta \, dA - \int_V \mathbf{q}_R \text{Grad } \delta\theta \, dV \quad (2.72)$$

zerlegen, so dass sich

$$\begin{aligned} \int_V \omega \delta\theta \, dV - \int_V \rho_R \theta \dot{s} \delta\theta \, dV + \int_V \rho_R r \delta\theta \, dV \\ + \int_V \mathbf{q}_R \text{Grad } \delta\theta \, dV - \int_A q_N \delta\theta \, dA = 0 \end{aligned} \quad (2.73)$$

ergibt.

Die Zeitableitung der spezifischen Entropie  $\dot{s}$  lässt sich in Abhängigkeit der freien und der inneren Variablen weiter aufschlüsseln, so dass i. Allg.

$$\dot{s} = \frac{\partial s}{\partial \mathbf{E}} \cdot \dot{\mathbf{E}} + \frac{\partial s}{\partial \theta} \dot{\theta} + \frac{\partial s}{\partial \alpha} \dot{\alpha} + \dots = \frac{c_d}{\theta} \dot{\theta} + \omega_s \quad (2.74)$$

geschrieben werden kann, wobei durch  $c_d = \theta \frac{\partial s}{\partial \theta}$  die Wärmekapazität definiert ist und in der Größe  $\omega_s$  die verbleibenden Terme zusammengefasst sind.

Da die Wärmeleistung aufgrund dissipativer Prozesse für jedes Materialmodell verschieden ist, wird sie durch das FE-Programm MSC.MARC nicht gesondert berücksichtigt. Die Berücksichtigung der Dissipationsleistung kann also nur indirekt erfolgen, indem diese mit der spezifischen Wärmequelle zusammengefasst wird. Dazu wird die allgemeine Wärmequelle

$$R = r + \omega - \theta \omega_s \quad (2.75)$$

eingeführt, so dass sich Glg. (2.73) zu

$$\int_V \rho_R R \delta \theta \, dV - \int_V \rho_R c_d \dot{\theta} \delta \theta \, dV + \int_V \mathbf{q}_R \text{Grad} \delta \theta \, dV - \int_A q_N \delta \theta \, dA = 0 \quad (2.76)$$

vereinfacht.

### 2.5.2 Numerische Lösung des thermischen Funktionals

Im FE-Programm MSC.MARC wird das thermische Funktional quasilinear gelöst, so dass die obige Gleichung nicht linearisiert werden muss. Die Diskretisierung erfolgt analog zur Diskretisierung des mechanischen Funktionals. Der Temperaturverlauf wird entsprechend durch die lineare Beziehung

$$\theta(\xi) = \theta(t) + \frac{\xi}{\Delta t} (\theta(\xi) - \theta(t - \Delta t)) \quad \text{mit} \quad \xi \in [t, t + \Delta t] \quad (2.77)$$

angenähert und alle temperaturabhängigen Größen  $f$  werden über die Beziehung

$$f(t + \Delta t) = \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} f(\theta(\xi)) \, d\xi \quad (2.78)$$

gemittelt.

## 2.6 Berücksichtigung der Inkompressibilität

### 2.6.1 Methode der Lagrangeschen Multiplikatoren

Zur Berücksichtigung der Zwangsbedingung aufgrund der Inkompressibilität sind reine Verschiebungselemente ungeeignet. Deshalb wurden spezielle Elemente entwickelt, um die auftretenden Zwangsbedingungen einhalten zu können. Im Falle der Inkompressibilität ( $F - 1 = 0$ ) bietet sich die Methode des Lagrangeschen Multiplikators an. Diese führt auf eine Zweifeldvariation und wird durch das in MSC.MARC verfügbare Herrmann-Element realisiert.



Den hier eingeführten Materialmodellen liegt die freie Helmholtzsche Energie  $\psi$  als Potential zu Grunde, so dass die schwachen Formen der Bilanzrelationen auch über das Minimum der Gesamtpotentialenergie bestimmt werden können. Es gilt

$$\Pi = \Pi_{int} + \Pi_{ext} \quad . \quad (2.79)$$

In die freie Helmholtzsche Energie wird über den Lagrangeschen Multiplikator  $p$  die Zwangsbedingung der Inkompressibilität eingebracht. Die freie Helmholtzsche Energie hat nun die Form

$$\psi(\mathbf{E}, \theta, p) = \psi(\mathbf{E}, \theta) + p (F - 1) \quad , \quad (2.80)$$

mit der sich die gesamte freie Energie in der Form

$$\Pi_{int} = \int_V (\psi(\mathbf{E}, \theta) + p (F - 1)) dV \quad (2.81)$$

schreiben lässt. Die Forderung nach dem Minimum der Gesamtpotentialenergie führt auf die Stationarität der zugehörigen Richtungsableitungen. Dabei muss der Lagrange-Multiplikator als unabhängige Variable berücksichtigt werden. Es folgt

$$\delta\Pi = 0 = D(\Pi)[\Delta\mathbf{u}] + D(\Pi)[\Delta\theta] + D(\Pi)[\Delta p] \quad , \quad (2.82)$$

wobei die Gleichung in zwei Teile zerlegt werden kann. Der erste Teil ist

$$D(\Pi)[\Delta\mathbf{u}] + D(\Pi)[\Delta\theta] = 0 \quad (2.83)$$

und der zweite Teil folgt zu

$$D(\Pi)[\Delta p] = 0 \quad . \quad (2.84)$$

Die Diskretisierung führt auf das lineare Gleichungssystem

$$\begin{bmatrix} [K_{T,uu}] & [K_{T,up}] \\ [K_{T,pu}] & [0] \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Delta\mathbf{u} \\ \Delta p \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{R}_u \\ \mathbf{R}_p \end{Bmatrix} \quad . \quad (2.85)$$

Die Methode des Lagrangeschen Multiplikators führt also auf eine weitere Unbekannte und erhöht die Anzahl der zu lösenden Gleichungen. Durch die Null auf der Hauptdiagonale, müssen zudem spezielle Gleichungslöser verwendet werden. Aufgrund dieser Nachteile sind weitere Verfahren wie die gestörte Lagrange-Methode oder die Dreifeldvariation entwickelt worden, die aber in dieser Arbeit nicht benötigt werden.

### 2.6.2 Herrmann-Formulierung

Die Herrmann-Formulierung beruht auf der Einführung eines Lagrangeschen Multiplikators und ermöglicht so die Berücksichtigung der Inkompressibilität.

Bevor auf die Herrmann-Formulierung eingegangen wird, wird zuerst die in FE-Programmen gebräuchliche Formulierung der Spannungen, Verzerrungen und der Elastizitätsmatrix am Beispiel der Referenzkonfiguration eingeführt. Die entsprechenden Tensoren 2. Stufe werden aufgrund ihrer Symmetrieeigenschaften in Spaltenmatrizen überführt. Daraus ergibt sich entsprechend die Änderung der Elastizitätsmatrix. Für die Tensoren 2. Stufe wird

$$\{\tilde{\mathbf{T}}\} = \{\tilde{T}_{11} \quad \tilde{T}_{22} \quad \tilde{T}_{33} \quad \tilde{T}_{12} \quad \tilde{T}_{23} \quad \tilde{T}_{13}\} \quad , \quad (2.86)$$

$$\{\mathbf{E}\} = \{E_{11} \quad E_{22} \quad E_{33} \quad 2 E_{12} \quad 2 E_{23} \quad 2 E_{13}\} \quad \text{und} \quad (2.87)$$

$$\begin{aligned} \{\Theta\} &= \left\{ \frac{\partial \tilde{\mathbf{T}}}{\partial \theta} \right\} \\ &= \left\{ \Theta_{11} \quad \Theta_{22} \quad \Theta_{33} \quad \frac{1}{2}(\Theta_{12} + \Theta_{21}) \quad \frac{1}{2}(\Theta_{13} + \Theta_{31}) \quad \frac{1}{2}(\Theta_{23} + \Theta_{32}) \right\} \end{aligned} \quad (2.88)$$

gesetzt. Die daraus resultierende abgewandelte  $6 \times 6$  Elastizitätsmatrix ist im Anhang A.4 dargestellt.

In der Herrmann-Formulierung wird die linearisierte Zwangsbedingung als zusätzlich zu erfüllende Gleichung berücksichtigt. Um die entstehenden Terme einzuordnen, muss auf die Struktur der Subroutine HYPELA2 eingegangen werden, über die das Materialmodell implementiert wird, s. auch Abschnitt 2.7.1. Dieser ist folgender Zusammenhang zu Grunde gelegt:

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{T}}_{n+1}^k &= \tilde{\mathbf{T}}_n^k + \mathbb{C}_n^k \, d\mathbf{E}_n^k + d(\tilde{\mathbf{T}}_\theta)_n^k \\ &= \tilde{\mathbf{T}}_n^k + \mathbb{C}_n^k \, d\mathbf{E}_n^k + \Theta_n^k \, d\theta \quad . \end{aligned} \quad (2.89)$$

Für den inkrementellen Spannungszuwachs ergibt sich folglich

$$d\tilde{\mathbf{T}}_n^k = \mathbb{C}_n^k \, d\mathbf{E}_n^k + \Theta_n^k \, d\theta \quad . \quad (2.90)$$

Die auftretenden Größen sind bereits bei der Linearisierung in Abschnitt 2.4.2 als notwendige Größen ermittelt worden. Die obige Gleichung stellt vereinfacht die Struktur der Vorgehensweise des FE-Programmes MSC.MARC dar, wobei der Tensor  $d\tilde{\mathbf{T}}_\theta$  die inkrementellen rein thermisch induzierten Spannungen enthält.

Das lineare Gleichungssystem wird nun um eine Gleichung erweitert, so dass der zweite Piola-Kirchhoffsche Spannungs-, der Temperaturspannungs- und der Green-Lagrangesche Verzerrungstensor um eine Zeile erweitert werden. Die Elastizitätsmatrix wird entsprechend um eine Zeile und eine Spalte erweitert.

Der Lagrangesche Multiplikator steht in der siebten Zeile des Verzerrungstensors, wie aus dem vorherigen Abschnitt hervorgeht. Die zusätzliche Gleichung, die in die siebte Zeile mit aufgenommen wird, ist die linearisierte Zwangsbedingung

$$(F - 1)_{n+1}^k = (F - 1)_n^k + D((F - 1)_n^k)[d\mathbf{E}_n^k] + D((F - 1)_n^k)[d\theta_n^k] = 0 \quad . \quad (2.91)$$

Die Gateaux-Ableitung der Zwangsbedingung in Richtung des Verzerrungstensors  $\mathbf{E}$  ergibt mit Berücksichtigung der Glg. (1.32) und (1.130) und unter Verwendung der Kettenregel

$$D((F - 1))[d\mathbf{E}] = F \mathbf{C}^{-1} \cdot d\mathbf{E} \quad . \quad (2.92)$$

Diese Beziehung tritt in dem Produkt der Elastizitätsmatrix mit dem Verzerrungstensor auf.

Der Spannungstensor enthält in der siebten Zeile die Zwangsbedingung  $(F - 1)$ , die Gateaux-Ableitung bezüglich der Temperatur

$$D((F - 1))[d\theta] = \frac{\partial F}{\partial \theta} d\theta \quad (2.93)$$

ist im Temperaturspannungstensor enthalten.

Die Herrmann-Formulierung ist also für den zweiten Piola-Kirchhoffschen Spannungstensor

$$\{\tilde{\mathbf{T}}\} = \{\tilde{T}_{11} \quad \tilde{T}_{22} \quad \tilde{T}_{33} \quad \tilde{T}_{12} \quad \tilde{T}_{23} \quad \tilde{T}_{13} \quad (F - 1)\} \quad , \quad (2.94)$$

für den inkrementellen Green-Lagrangeschen Verzerrungstensor

$$\{d\mathbf{E}\} = \{dE_{11} \quad dE_{22} \quad dE_{33} \quad 2 dE_{12} \quad 2 dE_{23} \quad 2 dE_{13} \quad dp\} \quad (2.95)$$

und für den Temperaturspannungstensor

$$\{\Theta\} = \{\Theta_{11} \quad \Theta_{22} \quad \Theta_{33} \quad \frac{1}{2}(\Theta_{12} + \Theta_{21}) \quad \frac{1}{2}(\Theta_{13} + \Theta_{31}) \quad \frac{1}{2}(\Theta_{23} + \Theta_{32}) \quad \frac{\partial F}{\partial \theta}\} \quad . \quad (2.96)$$

Die Form der Elastizitätsmatrix kann Seite 50 entnommen werden.

Diese Betrachtung gilt nur für vollständig inkompressibles Materialverhalten. Die Thermomechanik von Aushärtvorgängen teilt die Deformation jedoch in verschiedene Anteile auf und geht nur von mechanisch inkompressiblen Materialverhalten aus. Das Vorgehen zur Berücksichtigung der mechanischen Inkompressibilität ist jedoch dasselbe und wird in Abschnitt 5.2.2 näher erläutert.

## 2.7 Implementierung eines thermomechanischen Materialmodells in MSC.MARC

In diesem Abschnitt wird kurz erläutert, welche Möglichkeiten genutzt werden, um das thermomechanische Verhalten von Aushärtvorgängen in das FE-Programm MSC.MARC zu implementieren. Für weitere Informationen wird auf das User Manual von MSC.MARC verwiesen. Die grundlegende Theorie wird in MSC (2006a) dargestellt. Ausführungen zu den verschiedenen Elementen, insbesondere auch der Herrmann-Formulierung, kann man MSC (2006b) entnehmen. Fragen zu verschiedenen Eingabeparametern werden in MSC (2006c) beantwortet und eine vollständige Auflistung aller User Subroutinen mit Anmerkungen wird in MSC (2006d) bereitgestellt.

$$\begin{bmatrix}
 C_{1111} & C_{1122} & C_{1133} & \frac{1}{2}(C_{1112} + C_{1121}) & \frac{1}{2}(C_{1123} + C_{1132}) & \frac{1}{2}(C_{1113} + C_{1131}) & F C_{11}^{-1} \\
 C_{2211} & C_{2222} & C_{2233} & \frac{1}{2}(C_{2212} + C_{2221}) & \frac{1}{2}(C_{2223} + C_{2232}) & \frac{1}{2}(C_{2213} + C_{2231}) & F C_{22}^{-1} \\
 C_{3311} & C_{3322} & C_{3333} & \frac{1}{2}(C_{3312} + C_{3321}) & \frac{1}{2}(C_{3323} + C_{3332}) & \frac{1}{2}(C_{3313} + C_{3331}) & F C_{33}^{-1} \\
 \frac{1}{2} \begin{pmatrix} C_{1211}^+ \\ C_{2111} \end{pmatrix} & \frac{1}{2} \begin{pmatrix} C_{1222}^+ \\ C_{2122} \end{pmatrix} & \frac{1}{2} \begin{pmatrix} C_{1233}^+ \\ C_{2133} \end{pmatrix} & \frac{1}{4} \begin{pmatrix} C_{1212} + C_{2112}^+ \\ C_{1221} + C_{2121} \end{pmatrix} & \frac{1}{4} \begin{pmatrix} C_{1223} + C_{2123}^+ \\ C_{1232} + C_{2132} \end{pmatrix} & \frac{1}{4} \begin{pmatrix} C_{1213} + C_{2113}^+ \\ C_{1231} + C_{2131} \end{pmatrix} & F C_{12}^{-1} \\
 \frac{1}{2} \begin{pmatrix} C_{2311}^+ \\ C_{3211} \end{pmatrix} & \frac{1}{2} \begin{pmatrix} C_{2322}^+ \\ C_{3222} \end{pmatrix} & \frac{1}{2} \begin{pmatrix} C_{2333}^+ \\ C_{3233} \end{pmatrix} & \frac{1}{4} \begin{pmatrix} C_{2312} + C_{3212}^+ \\ C_{2321} + C_{3221} \end{pmatrix} & \frac{1}{4} \begin{pmatrix} C_{2323} + C_{3223}^+ \\ C_{2332} + C_{3232} \end{pmatrix} & \frac{1}{4} \begin{pmatrix} C_{2313} + C_{3213}^+ \\ C_{2331} + C_{3231} \end{pmatrix} & F C_{23}^{-1} \\
 \frac{1}{2} \begin{pmatrix} C_{1311}^+ \\ C_{3111} \end{pmatrix} & \frac{1}{2} \begin{pmatrix} C_{1322}^+ \\ C_{3122} \end{pmatrix} & \frac{1}{2} \begin{pmatrix} C_{1333}^+ \\ C_{3133} \end{pmatrix} & \frac{1}{4} \begin{pmatrix} C_{1312} + C_{3112}^+ \\ C_{1321} + C_{3121} \end{pmatrix} & \frac{1}{4} \begin{pmatrix} C_{1323} + C_{3123}^+ \\ C_{1332} + C_{3132} \end{pmatrix} & \frac{1}{4} \begin{pmatrix} C_{1313} + C_{3113}^+ \\ C_{1331} + C_{3131} \end{pmatrix} & F C_{13}^{-1} \\
 F C_{11}^{-1} & F C_{22}^{-1} & F C_{33}^{-1} & F C_{12}^{-1} & F C_{23}^{-1} & F C_{13}^{-1} & 0
 \end{bmatrix}$$

### 2.7.1 Berücksichtigung des mechanischen Funktionals

In Abschnitt 2.5 wird beschrieben, welche Größen über die konstitutiven Gleichungen zur Verfügung gestellt werden müssen, damit das entsprechende Materialmodell berücksichtigt wird. In Glg. (2.89) wird dies ebenfalls deutlich.

**User Subroutine HYPELA2** Das FE-Programm MSC.MARC bietet für thermo-mechanische Probleme als Schnittstelle die User Subroutine HYPELA2 an. Dabei kann der Benutzer zwischen der materiellen Total Lagrange und der räumlichen Updated Lagrange Beschreibungsweise wählen. Für das vorliegende Problem wird die Beschreibung in Größen der Referenzkonfiguration, also Total Lagrange, gewählt.

In der Subroutine HYPELA2 besteht für den Nutzer nun die Möglichkeit, den aktuellen zweiten Piola-Kirchhoffschen Spannungstensor  $\hat{\mathbf{T}}$ , die inkrementellen thermisch induzierten Spannungen  $d\tilde{\mathbf{T}}_\theta = \Theta d\theta$  und den aktuellen materiellen Elastizitätstensor  $\mathbb{C}$  aus gegebenen kinematischen Größen zu berechnen und anschließend an das FE-Programm MSC.MARC zu übergeben.

In dieser Arbeit werden für die Implementierung quaderförmige HEX8 Volumenelemente mit Herrmann-Formulierung verwendet. Der entsprechende Elementtyp ist in dem FE-Programm MSC.MARC Elementtyp 84. Dieser ermöglicht gleichzeitig gekoppelte thermomechanische Berechnungen, da er mit dem quaderförmigen Wärmeleitelement 43 assoziiert ist.

Um ein Materialmodell zu implementieren, muss es zuerst der Numerik zugänglich gemacht werden, wie in Kap. 5 beschrieben ist. Auf dieser Grundlage erfolgt die Erstellung des Quellcodes, der dem Anhang C.3 entnommen werden kann.

### 2.7.2 Berücksichtigung des thermischen Funktionals

Das FE-Programm MSC.MARC braucht gemäß den Glg. (2.63) und (2.76) in Abschnitt 2.5 die Wärmeleitfähigkeit  $\kappa$ , die Wärmekapazität  $c_d$ , den materiellen Wärmefluss  $q_N$  und die allgemeine Wärmequelle  $R$  als Eingabegrößen, um das Wärmeleitproblem lösen zu können. Die beiden letzten Größen sind optional. Die Wärmeleitfähigkeit muss über den Preprocessor MSC.MENTAT eingegeben werden, die allgemeine Wärmequelle kann hingegen entweder über MSC.MENTAT als fester Wert eingegeben oder über eine thermische Randbedingung berücksichtigt werden. Die Berücksichtigung eines Wärmeflusses ist nur über eine thermische Randbedingung möglich. Die Wärmekapazität kann wiederum als fester Wert in MSC.MENTAT eingegeben oder durch die Benutzung der User Subroutine USPCHT beeinflusst werden. Eine kurze Übersicht über die benutzten Subroutinen und deren Einbindung in das Programm MSC.MARC ist im Folgenden gegeben.

**User Subroutine USPCHT** Mit der User Subroutine USPCHT kann eine benutzerdefinierte Wärmekapazität vorgegeben werden. Dazu muss in MSC.MENTAT keine weitere Einstellung getroffen werden, da die User Subroutine bei gekoppelten Problemstellungen automatisch aufgerufen wird.

In dieser Arbeit spielt die Verwendung dieser Subroutine eine untergeordnete Rolle, da

für die Wärmekapazität ein konstanter Wert angenommen wird. Um jedoch in weiteren Schritten beliebige Abhängigkeiten einbinden zu können, wird die Wärmekapazität bezüglich der Implementierung wie die allgemeine Wärmequelle behandelt.

**User Subroutine FLUX** Diese Subroutine wird durch das FE-Programm MSC.MARC nur aufgerufen, wenn ein Volumenfluss über eine thermische Randbedingung eingestellt und die Subroutine angewählt wird.

Bis auf die Zeit und die Temperatur werden jedoch keine Prozessgrößen durch die Subroutine an den Nutzer übergeben, so dass für den Fall der Abhängigkeit der Wärmekapazität von kinematischen Größen, direkt oder indirekt, ein besonderes Vorgehen nötig wird. Das FE-Programm MSC.MARC bietet die Möglichkeit über MSC.MENTAT eine benutzerdefinierte Anzahl so genannter State Variables zu verwenden. Diese stellen eine Erweiterung des Temperaturfeldes  $t(i)$  dar und ermöglichen es, beliebige Größen in der Subroutine HYPELA2 abzuspeichern, so dass sie beim nächsten Aufruf zur Verfügung stehen. Die State Variables  $t(2)$  und  $t(3)$  können als einzige über die Subroutine ELMVAR in jeder anderen Subroutine abgefragt werden.

Da bei der Modellierung des Aushärtprozesses von Klebern alle Wärmequellen, die aufgrund dissipativer Prozesse vorhanden sind, über eine allgemeine Wärmequelle beschrieben werden müssen, ist eine Abhängigkeit von kinematischen Größen vorhanden. Die allgemeine Wärmequelle wird also in der Subroutine HYPELA2 berechnet und als State Variable  $t(3)$  abgespeichert und in der User Subroutine FLUX wieder aufgerufen und an MSC.MARC übergeben.

Für die Wärmekapazität, die in dieser Arbeit als State Variable  $t(2)$  abgespeichert wird, ist das Vorgehen analog.

**Subroutine ELMVAR** Über diese Subroutine ist es möglich, verschiedene Größen in einer beliebigen Subroutine aufzurufen. Eine genaue Aufstellung der zugänglichen Größen kann der Dokumentation von MSC.Software entnommen werden. In dieser Arbeit wird die Subroutine verwendet, um die State Variables  $t(2)$  und  $t(3)$  aufzurufen.

### 3 Lineare Viskoelastizität

Die Thermomechanik von aushärtenden Klebstoffen beschreibt die chemische Umwandlung während des Aushärteprozesses. Die Materialeigenschaften ändern sich dabei von denen eines viskosen Fluids zu denen eines viskoelastischen Festkörpers.

Viskoelastizität wird dabei wie folgt definiert. Ein entsprechendes Material wird beliebig zeitabhängig belastet und die Belastung schließlich über einen ausreichend langen Zeitraum konstant gehalten. Während der dynamischen Belastung ist der Zustand des Materials geschwindigkeitsabhängig. Der Zustand nähert sich jedoch bei konstanter statischer Belastung mit zunehmender Haltezeit einem Gleichgewichts- bzw. relaxierten Zustand an. Ursache sind Erholungsvorgänge auf mikroskopischer Ebene, die sich in dem Material abspielen. Hängt der relaxierte Zustand nicht von der Belastungsgeschichte, sondern nur von dem aktuellen Wert der Beanspruchung ab, wird das Material als viskoelastisch bezeichnet. Man spricht auch von einem nachlassenden Gedächtnis bzw. fading memory. Der Zusatz linear bezieht sich auf die linearen funktionalen Zuordnungen zwischen den Spannungs- und Deformationsprozessen.

In dieser Arbeit soll viskoelastisches Materialverhalten mit Hilfe von eindimensionalen rheologischen Modellen veranschaulicht werden. Diese können ohne weiteres auf drei Dimensionen und finite Deformationen sowie physikalische Nichtlinearitäten verallgemeinert werden. Außerdem bieten rheologische Modelle den Vorteil, apriori thermomechanisch konsistent zu sein. Diese Eigenschaft bleibt bei der Verallgemeinerung erhalten.

Die folgenden Ausführungen beziehen sich auf Lion (2000), Middendorf (2002) und Holzapfel (2000) sowie Haupt u. Lion (2002). Eine ausführliche Darstellung im Frequenzbereich kann Tschoegl (1989) entnommen werden.

#### 3.1 Konzept der inneren Variablen

Zur Beschreibung von Materialverhalten können so genannte innere Variablen eingeführt werden. Bei elastischen Materialien ist dies nicht nötig, da diese ausreichend durch externe Variablen beschrieben werden können, wie in Abschnitt 1.4 für hyperelastische Materialien dargestellt ist. Extern bedeutet, dass die Größen direkt der Messung zugänglich sind wie die Temperatur  $\theta$  oder die Deformation in Form des Deformationsgradienten  $\mathbf{F}$ . Innere Variablen hingegen sind der Messung nicht direkt zugänglich und können eingeführt werden, um spezielle thermomechanische Eigenschaften zu beschreiben. Mathematisch bedeutet die Einführung einer inneren Variablen eine zusätzliche Unbekannte, für die eine weitere Gleichung zur Verfügung stehen muss, um das Problem lösen zu können. Für die inneren Variablen werden deshalb so genannte Evolutionsgleichungen bzw. konstitutive Beziehungen eingeführt, mit deren Hilfe die Entwicklung der inneren Variablen in Abhängigkeit der gegebenen Größen beschrieben werden kann.

#### 3.2 Rheologische Modelle

Rheologische Modelle werden aus Kombinationen einfacher Grundelemente erstellt. Diese sind in dieser Arbeit die Hookesche Feder und der Newtonsche Dämpfer. Dadurch

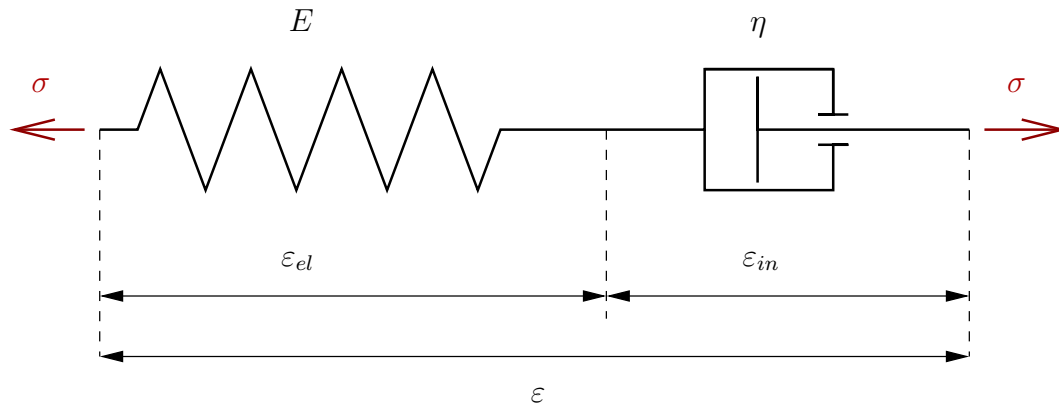


Abbildung 9: Maxwell-Modell.

können reale Materialeigenschaften konstruiert werden, wie bei der linearen Viskoelastizität deutlich wird.

Für die Hooksche Feder gilt der lineare Zusammenhang

$$\sigma = E \varepsilon \quad , \quad (3.1)$$

der auch als Hookesches Gesetz mit dem Elastizitätsmodul  $E$  bekannt ist. Beim Newtonschen Dämpfer ist die Spannung direkt proportional zur Dehnungsgeschwindigkeit, so dass sich

$$\sigma = \eta \dot{\varepsilon} \quad (3.2)$$

schreiben lässt, wobei  $\eta$  die Viskosität ist.

Temperaturdehnungen werden im Folgenden nicht berücksichtigt, da lediglich die wesentlichen Zusammenhänge veranschaulicht werden sollen. Sollen die Temperaturdehnungen mit einfließen, muss die Gesamtdehnung  $\varepsilon$  durch die mechanische Dehnung  $\varepsilon_M = \varepsilon - \varepsilon_\theta$  ersetzt und für die thermische Dehnung  $\varepsilon_\theta$  eine konstitutive Gleichung aufgestellt werden.

### 3.2.1 Maxwell-Modell

Eine Möglichkeit linear viskoelastisches Verhalten darzustellen, ist durch das Maxwell-Modell gegeben. Wie in Abb. 9 deutlich wird, handelt es sich bei dem Maxwell-Modell um eine Hookesche Feder und einen Newtonschen Dämpfer, die in Reihe geschaltet sind. Die gesamte Deformation, die eine externe, messbare Größe ist, kann dabei in einen elastischen und einen inelastischen Anteil zerlegt werden.

$$\varepsilon = \varepsilon_{el} + \varepsilon_{in} \quad . \quad (3.3)$$

Diese Anteile sind entsprechend innere Variablen, da sie nicht messbar sind. Die Beziehung aus Glg. (3.2) stellt dabei die Evolutionsgleichung für die inelastische Dehnung



$$\dot{\varepsilon}_{in} = \frac{1}{\eta} \sigma \quad (3.4)$$

dar. Weiterhin wird eine Konstitutivgleichung für die Spannung benötigt sowie eine Materialgleichung für die freie Energie. Diese sind

$$\rho \psi = \frac{1}{2} E \varepsilon_{el}^2 \quad (3.5)$$

und

$$\sigma = \rho \frac{\partial \psi}{\partial \varepsilon_{el}} = E \varepsilon_{el} \quad (3.6)$$

Ausgehend von der zeitlichen Ableitung von Glg. (3.3) ergibt sich unter Berücksichtigung der eingeführten Beziehungen die lineare Differentialgleichung (Dgl.)

$$\frac{1}{\eta} \sigma + \frac{1}{E} \dot{\sigma} = \dot{\varepsilon} \quad (3.7)$$

Die Dgl. kann weiter umgeformt werden. Stellt man die Dgl. zu

$$\dot{\sigma} + \frac{E}{\eta} \sigma = E \dot{\varepsilon} \quad (3.8)$$

um, kann auch

$$\left( e^{\left(\frac{E}{\eta} t\right)} \sigma \right)^{\bullet} e^{-\left(\frac{E}{\eta} t\right)} = E \dot{\varepsilon} \quad (3.9)$$

geschrieben werden. Damit folgt sofort

$$\left( e^{\left(\frac{E}{\eta} t\right)} \sigma \right)^{\bullet} = e^{\left(\frac{E}{\eta} t\right)} E \dot{\varepsilon} \quad (3.10)$$

Mit der Relaxationszeit  $\tau = \frac{\eta}{E}$  ergibt sich nach Integration über die Zeit für die Spannung

$$\sigma = \int_{-\infty}^t E e^{\left(-\frac{t-\xi}{\tau}\right)} \dot{\varepsilon}(\xi) \, d\xi \quad (3.11)$$

Der elastische Dehnungsanteil folgt dann zu

$$\varepsilon_{el} = \varepsilon - \varepsilon_{in} = \frac{\sigma}{E} = \int_{-\infty}^t e^{\left(-\frac{t-\xi}{\tau}\right)} \dot{\varepsilon}(\xi) \, d\xi \quad (3.12)$$

und die freie Energie zu

$$\rho \psi = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^t \int_{-\infty}^t E e^{(-\frac{2t-\xi_1-\xi_2}{\tau})} \dot{\varepsilon}(\xi_1) \dot{\varepsilon}(\xi_2) d\xi_1 d\xi_2 \quad , \quad (3.13)$$

wobei das quadratische Integral durch ein Doppelintegral ausgedrückt wird.

Gemäß Glg. (3.11) ist die Spannung ein lineares Funktional der Deformationsgeschichte, weswegen von linearer Viskoelastizität gesprochen wird.

Ausgehend von den Beziehungen in den Glg. (3.11) und (3.13) können verallgemeinerte Materialmodelle formuliert werden. Dazu wird

$$\sigma = \int_{-\infty}^t G(t-\xi) \dot{\varepsilon}(\xi) d\xi \quad (3.14)$$

und

$$\rho \psi = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^t \int_{-\infty}^t G(2t-\xi_1-\xi_2) \dot{\varepsilon}(\xi_1) \dot{\varepsilon}(\xi_2) d\xi_1 d\xi_2 \quad (3.15)$$

gesetzt, wobei  $G$  die Relaxationsfunktion ist.

Werden nun  $N$  Maxwell-Elemente parallel geschaltet, wie in Abb. 10 dargestellt ist, erhält man für die Relaxationsfunktion

$$G(t) = \sum_{k=1}^N E_k e^{(-\frac{t}{\tau_k})} \quad . \quad (3.16)$$

Neben diesem diskreten Relaxationsspektrum ist auch ein kontinuierliches Relaxationsspektrum ausgehend von kontinuierlich verteilten Maxwell-Elementen möglich. Die Relaxationsfunktion hat dann die Form

$$G(t) = \int_0^{\infty} E(\tau) e^{(-\frac{t}{\tau})} d\tau \quad . \quad (3.17)$$

Eine Erweiterung auf dreidimensionale Probleme kann Haupt u. Lion (2002) entnommen werden.

Zur Überprüfung der thermomechanischen Konsistenz wird die Clausius-Duhem-Ungleichung ausgewertet. Für den isothermen, eindimensionalen Fall folgt aus Glg. (1.93)

$$\rho \theta \gamma = \sigma \dot{\varepsilon} - \rho \dot{\psi} \geq 0 \quad (3.18)$$

und mit den Beziehungen

$$\dot{\varepsilon} = \dot{\varepsilon}_{el} + \dot{\varepsilon}_{in} \quad (3.19)$$

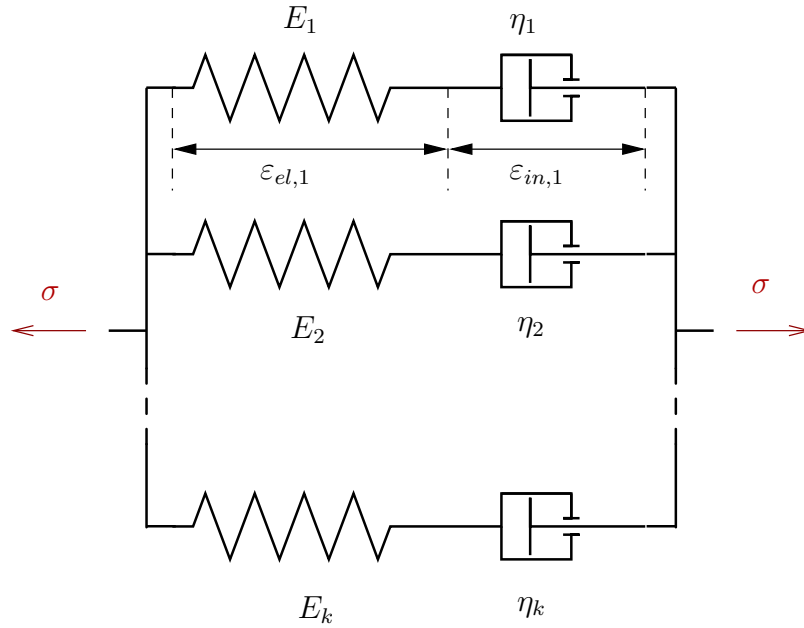


Abbildung 10: Verallgemeinertes Maxwell-Modell.

und

$$\rho \dot{\psi} = E \varepsilon_{el} \dot{\varepsilon}_{el} = \sigma \dot{\varepsilon}_{el} \quad (3.20)$$

kann

$$\rho \theta \gamma = \sigma \dot{\varepsilon}_{in} = \frac{1}{\eta} \sigma^2 \geq 0 \quad (3.21)$$

geschrieben werden. Ist die Viskosität konstant positiv oder ein positivwertiges Funktional der Prozessgeschichte, ist die Entropieproduktion immer größer gleich Null. Damit ist das Maxwell Modell immer thermomechanisch konsistent. Aus der obigen Gleichung folgt sofort, dass die Entropieproduktion nur von der inelastischen Spannungsleistung  $\sigma \dot{\varepsilon}_{in}$  abhängt.

Für das verallgemeinerte Modell erfolgt der Nachweis ausgehend von Glg. (3.18) mit Glg. (3.14) und der Ableitung der freien Helmholtzschen Energie

$$\begin{aligned} \rho \dot{\psi} = & \int_{-\infty}^t G(t-\xi) \dot{\varepsilon}(\xi) \, d\xi \dot{\varepsilon}(t) \\ & + \int_{-\infty}^t \int_{-\infty}^t G'(2t-\xi_1-\xi_2) \dot{\varepsilon}(\xi_1) \dot{\varepsilon}(\xi_2) \, d\xi_1 \, d\xi_2 \quad . \end{aligned} \quad (3.22)$$

Dabei bringt die Schreibweise  $X'(y) = \frac{dX}{dy}$  die Ableitung der Funktion  $X$  nach ihrem Argument  $y$  zum Ausdruck. Damit ergibt sich für die Clausius-Duhem-Ungleichung

$$\rho \theta \dot{\gamma} = - \int_{-\infty}^t \int_{-\infty}^t G'(2t - \xi_1 - \xi_2) \dot{\varepsilon}(\xi_1) \dot{\varepsilon}(\xi_2) d\xi_1 d\xi_2 \quad (3.23)$$

und somit beispielhaft für ein diskretes Relaxationsspektrum

$$\begin{aligned} \rho \theta \dot{\gamma} &= \sum_{K=1}^N \frac{E_k}{\tau_k} \int_{-\infty}^t \int_{-\infty}^t e\left(-\frac{2t - \xi_1 - \xi_2}{\tau_k}\right) \dot{\varepsilon}(\xi_1) \dot{\varepsilon}(\xi_2) d\xi_1 d\xi_2 \\ &= \sum_{K=1}^N \frac{E_k}{\tau_k} \left[ \int_{-\infty}^t e\left(-\frac{t - \xi}{\tau_k}\right) \dot{\varepsilon}(\xi) d\xi \right]^2 . \end{aligned} \quad (3.24)$$

Die Clausius-Duhem-Ungleichung ist erfüllt, wenn die Elastizitätsmoduli  $E_k$  und Viskositäten  $\eta_k$  größer als Null sind. Damit ist das Doppelintegral auch in die hier dargestellte quadratische Form überführbar.

Analog ist eine Darstellung des viskoelastischen Materialverhaltens durch das so genannte Kelvin-Modell möglich. Hier erfolgt die Darstellung im Spannungsraum, d. h. die aktuelle Deformation wird über ein lineares Funktional der Spannungsgeschichte ermittelt. Eine Darstellung des Kelvin-Modells kann Anhang B entnommen werden.

## 4 Thermomechanik von Aushärtvorgängen

Das hier verwendete Modell zur Thermomechanik von Aushärtvorgängen wurde erstmals von Lion u. Höfer (2006) vorgeschlagen. Ziel des Materialmodells ist es, den gesamten Aushärtprozess thermomechanisch konsistent für finite Deformationen darzustellen. Basierend auf den physikalischen Eigenschaften des Aushärtprozesses wird dafür ein finites thermoviskoelastisches Modell entwickelt.

Während des Aushärtprozesses findet eine Phasenumwandlung des Klebemittels von einer viskosen Flüssigkeit zu einem viskoelastischen Kleber statt. Dabei handelt es sich um eine exotherme chemische Reaktion, die mit einem Temperaturanstieg verbunden ist. Aus dem Temperaturanstieg resultiert eine thermische Expansion des Materials, während gleichzeitig aufgrund der chemischen Reaktion und der damit verbundenen Phasenumwandlung eine chemische Schrumpfung stattfindet. Letztere kann bis zu 12% des ursprünglichen Volumens betragen.

Um den zeitabhängigen Aushärtungsprozess zu beschreiben, wird eine innere Variable eingeführt, die die chemische Reaktion und damit den Grad der Aushärtung beschreibt. Weiterhin wird eine multiplikative Zerlegung des Deformationsgradienten vorgenommen und in der Folge wird das Modell in Abhängigkeit der unabhängigen Variablen  $\mathbf{E}_M$  und  $\theta$  formuliert. Über die Auswertung der Clausius-Duhem-Ungleichung und die Ableitung der Wärmeleitgleichung werden schließlich die benötigten konstitutiven Beziehungen vervollständigt.

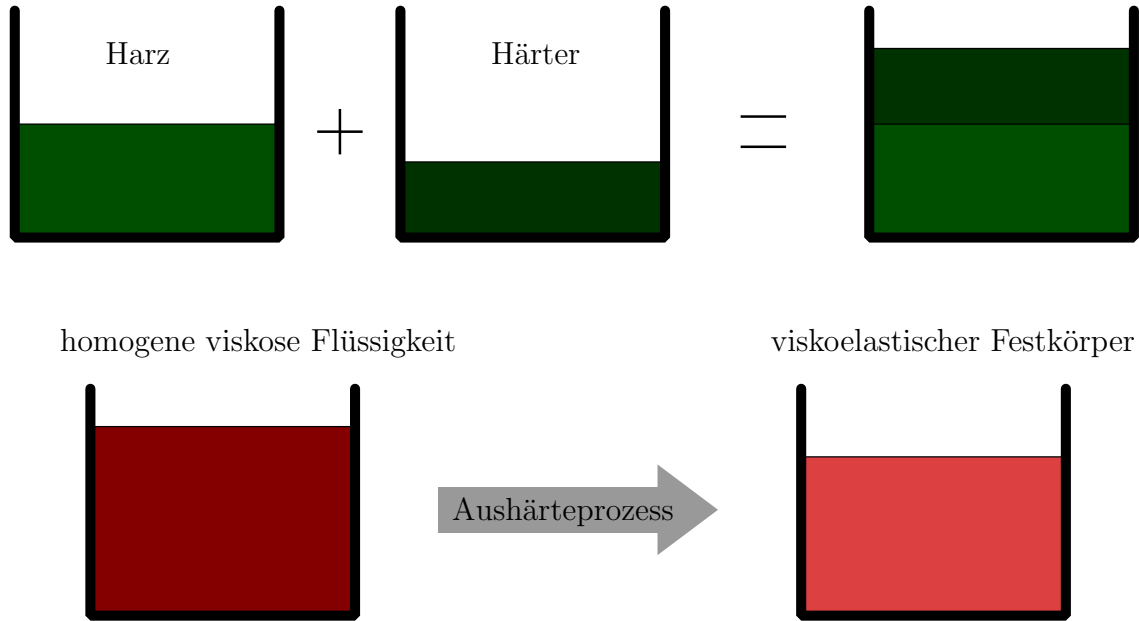
Die Struktur des spannungserzeugenden mechanischen Anteils dieses Modells stammt von Haupt u. Lion (2002).

### 4.1 Beschreibung der Aushärtung

Um den Aushärtvorgang zu beschreiben wird ein zwei-Komponenten Kleber betrachtet. Dabei entsteht die Klebeverbindung aufgrund der chemischen Reaktion eines Harzes mit einem Härter. Die phänomenologische Beschreibung der Vorbereitung eines zwei-Komponenten Klebers und der Aushärtung kann Abb. 11 entnommen werden. Dabei werden verschiedene Vereinfachungen eingeführt und nur die wesentlichen Eigenschaften des Aushärtprozesses betrachtet. Zum einen wird von stöchiometrischen Massenanteilen des Harzes und des Härters ausgegangen, so dass nach der chemischen Reaktion kein flüssiges Harz bzw. flüssiger Härter verbleibt und nur ein fester Kleber vorhanden ist. Zum anderen wird von einer homogenen Mischung des Härters, des Harzes und des entstehenden Klebemittels ausgegangen. In der Folge müssen keine Konzentrationsgradienten und daraus resultierende Diffusionsvorgänge berücksichtigt werden.

Aufgrund der Massenerhaltung während des Aushärtvorganges muss

$$m_{Hz}(t) + m_{Ht}(t) + m_{Kl}(t) = m_0 = const \quad (4.1)$$



**Abbildung 11:** Vorbereitung und Aushärtung eines zwei-Komponenten Klebers.

gelten. Die zeitabhängigen Variablen  $m_{Hz}(t)$ ,  $m_{Ht}(t)$  und  $m_{Kl}(t)$  stehen dabei für die Massen des Harzes, des Härterers und des festen Klebers. Die Gesamtmasse der Mischung  $m_0$  ist konstant.

Werden nun die Massenverhältnisse bezüglich der Gesamtmasse  $m_0$  betrachtet, folgt

$$\nu_{Hz}(t) + \nu_{Ht}(t) + \nu_{Kl}(t) = 1 \quad . \quad (4.2)$$

Die Massenverhältnisse sind dabei durch

$$\nu_{Hz}(t) = \frac{m_{Hz}(t)}{m_0} \quad , \quad \nu_{Ht}(t) = \frac{m_{Ht}(t)}{m_0} \quad \text{und} \quad \nu_{Kl}(t) = \frac{m_{Kl}(t)}{m_0} \quad (4.3)$$

definiert.

Die Massenverhältnisse lassen sich in Abhängigkeit von der chemischen Reaktion bzw. vom Aushärtegrad angeben. Dazu wird eine chemische Reaktionskoordinate  $q(t)$  eingeführt, die äquivalent mit dem Grad der Aushärtung ist und deswegen auch als Aushärtegrad bezeichnet wird. Es gilt

$$0 \leq q(t) \leq 1 \quad , \quad (4.4)$$

womit unter Berücksichtigung der Stöchiometrie

$$\nu_{Hz}(t) = \nu_{Hz,0} - \chi_{Hz} q(t) \quad , \quad (4.5)$$

$$\nu_{Ht}(t) = \nu_{Ht,0} - \chi_{Ht} q(t) \quad \text{und} \quad (4.6)$$

$$\nu_{Kl}(t) = (\chi_{Hz} + \chi_{Ht}) q(t) \quad (4.7)$$

geschrieben werden kann.

Wird nun der Prozess zum Zeitpunkt  $t = 0$  mit  $q(0) = 0$  und nach einem ausreichend langem Zeitraum mit  $q(\infty) = 1$  betrachtet, ergeben sich aus den Anfangsbedingungen

$$\nu_{Hz}(0) = \nu_{Hz,0} \quad , \quad \nu_{Ht}(0) = \nu_{Ht,0} \quad \text{und} \quad \nu_{Kl}(0) = 0 \quad (4.8)$$

und den Randbedingungen

$$\nu_{Hz}(\infty) = 0 \quad , \quad \nu_{Ht}(\infty) = 0 \quad \text{und} \quad \nu_{Kl}(\infty) = 1 \quad (4.9)$$

die Zusammenhänge

$$\chi_{Hz} = \nu_{Hz,0} \quad , \quad \chi_{Ht} = \nu_{Ht,0} \quad \text{und} \quad \text{damit} \quad \nu_{Ht,0} = 1 - \nu_{Hz,0} \quad . \quad (4.10)$$

Für die Relationen in den Glg. (4.5) bis (4.7) folgt somit

$$\nu_{Hz}(t) = \nu_{Hz,0} (1 - q(t)) \quad , \quad (4.11)$$

$$\nu_{Ht}(t) = (1 - \nu_{Hz,0}) (1 - q(t)) \quad \text{und} \quad (4.12)$$

$$\nu_{Kl}(t) = q(t) \quad . \quad (4.13)$$

Daraus wird deutlich, dass zur Beschreibung des zeitlichen Verlaufs der Massenverhältnisse während der chemischen Reaktion nur die chemische Reaktionskoordinate  $q(t)$  benötigt wird.

Diese wird oft über das Verhältnis der abgegebenen zur totalen Reaktionswärme definiert. In dieser Arbeit wird jedoch im Weiteren der Ausdruck Aushärtegrad für die Variable  $q$  verwendet.

Um die Entwicklung der inneren Variablen  $q$  zu beschreiben, muss eine Evolutionsgleichung formuliert werden. Diese führt in der Regel auf eine Differentialgleichung für den Aushärtegrad in der Form  $\dot{q}(t) = f(q, t, \theta, \dots)$  mit den Bedingungen  $q(0) = 0$  und  $q(\infty) = 1$ . D. h. zum Zeitpunkt  $t = 0$  ist kein fester Kleber vorhanden und nach einem ausreichend langen Zeitraum ist der Aushärteprozess vollständig abgeschlossen.

Die Aushärterate  $\dot{q}(t)$  wächst dabei mit in der Regel zunehmenden Massenanteil des festen Klebers, wenn der Aushärteprozess autokatalytisch ist.

## 4.2 Kinematik

### 4.2.1 Zerlegung des Deformationsgradienten

Die bei dem Aushärteprozess auftretenden Deformationen können auf drei ursächliche Einflüsse zurückgeführt werden. Aufgrund der exothermen chemischen Reaktion kommt es zu Temperaturänderungen und in der Folge zu thermischen Dehnungen im Material. Weiterhin resultieren Deformationen aus der mechanischen Beanspruchung des Materials. Außerdem kommt es aufgrund der Phasenumwandlung des Harzes und des Härters zu einem festen Kleber zur Schrumpfung des Materials. Die Ursache hierfür

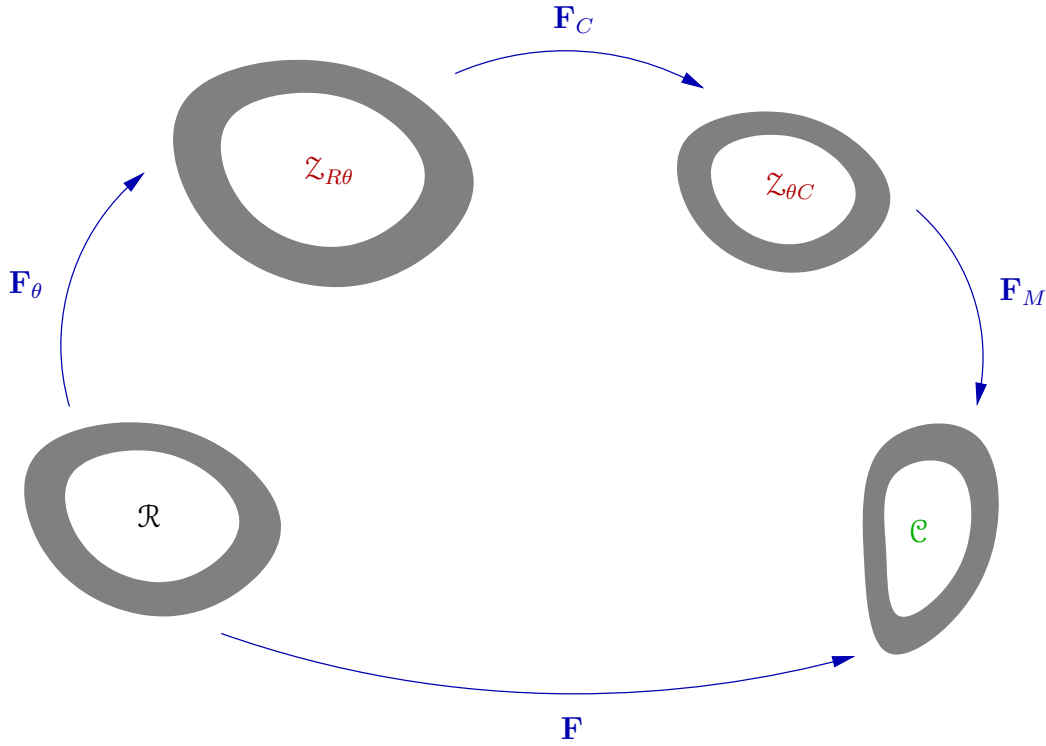


Abbildung 12: Multiplikative Zerlegung des Deformationsgradienten.

liegt in der geringeren Dichte des festen Klebers gegenüber den flüssigen Komponenten. Der Unterschied kann in der Größe von 10% liegen.

Wie in Abb. 12 dargestellt ist, wird der Deformationsgradient entsprechend multiplikativ in einen mechanischen Anteil  $\mathbf{F}_M$ , einen chemischen Anteil  $\mathbf{F}_C$  und einen thermischen Anteil  $\mathbf{F}_\theta$  zerlegt. Es kann somit

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_M \mathbf{F}_C \mathbf{F}_\theta \quad (4.14)$$

geschrieben werden.

Die dadurch entstandenen Zwischenkonfigurationen werden als thermische Zwischenkonfiguration  $\mathcal{Z}_{R\theta}$  und thermochemische Zwischenkonfiguration  $\mathcal{Z}_{\theta C}$  bezeichnet.

Da die thermische Expansion und die chemische Schrumpfung für die betrachteten Harze isotrop sind, können der chemische und der thermische Deformationsgradient vereinfacht werden. Dazu werden die Aushärtung-Volumen-Funktion  $g(q)$  und die Temperatur-Volumen-Funktion  $\varphi(\theta)$  eingeführt, die die chemisch und thermisch induzierte Volumenänderung beschreiben. Es gilt

$$\mathbf{F}_C = g(q)^{\frac{1}{3}} \mathbf{1} \quad \text{und} \quad \mathbf{F}_\theta = \varphi(\theta)^{\frac{1}{3}} \mathbf{1} \quad . \quad (4.15)$$



Die Ansätze und Parameter für die eingeführten Volumen-Funktionen sind durch den Anwender vorzugeben und müssen experimentell ermittelt werden. Prinzipiell lassen sich auch komplexere Kopplungen, z. Bsp. in Form von  $g(q, \theta)$  und  $\varphi(q, \theta)$  einführen. Um den Aufwand möglichst gering zu halten, wird in dieser Arbeit von thermischer und chemischer Isotropie ausgegangen. Aufgrund dieser Annahme gilt die Aussage

$$\mathbf{F}_C \mathbf{F}_\theta = \mathbf{F}_\theta \mathbf{F}_C \quad . \quad (4.16)$$

Die Dichte der Materials in der thermochemischen Zwischenkonfiguration  $\rho_{\theta C}$  folgt aus der Massenerhaltung über Glg. (1.47) zu

$$\rho_{\theta C} = \frac{\rho_r}{F_C F_\theta} \quad . \quad (4.17)$$

#### 4.2.2 Mechanisch inkompressibles Verhalten

Bei dem verwendeten Modell ist allein der mechanische Anteil der Deformation spannungserzeugend, weswegen der mechanische Green-Lagrangesche Tensor und die Temperatur als unabhängige Variablen gewählt werden. Das FE-Programm MSC.MARC unterscheidet aber nicht zwischen den einzelnen Anteilen der Deformationstensoren. Eine Aufgabe der Implementierung dieses Materialmodells, die in Kap. 5 beschrieben wird, ist es also die hier abgeleiteten Größen zu berechnen, indem der multiplikative Split in der User-Subroutine HYPELA2 durchgeführt wird, und diese in die durch das Programm MSC.MARC geforderten Größen zu transformieren.

Bei dem zugrunde liegenden Ansatz für die freie Helmholtzsche Energie wird davon ausgegangen, dass das Material mechanisch inkompressibel ist. Es gilt also

$$\det \mathbf{F}_M = F_M = 1 \quad (4.18)$$

bzw.

$$F_M - 1 = 0 \quad . \quad (4.19)$$

### 4.3 Freie Helmholtzsche Energie

#### 4.3.1 Zerlegung der Spannungsleistung

Da die konstitutiven Gleichungen in Abhängigkeit vom mechanischen Green-Lagrange-schen Tensor bestimmt werden, muss die Spannungsleistung, die in dem ersten und zweiten Hauptsatz in Form der Clausius-Duhem-Ungleichung auftritt, entsprechend umgeformt werden. Die Spannungsleistung ist durch den Term

$$w = \frac{1}{\rho_R} \tilde{\mathbf{T}} \cdot \dot{\mathbf{E}} \quad (4.20)$$

gegeben.

Der zweite Piola-Kirchhoffsche Spannungstensor ist über die pull-back Operation

$$\tilde{\mathbf{T}} = F \mathbf{F}^{-1} \mathbf{T} \mathbf{F}^{-T} \quad (4.21)$$

gemäß Glg. (1.42) definiert. Wird die multiplikative Zerlegung des Deformationsgradienten in Glg. (4.14) berücksichtigt, erhält man

$$\tilde{\mathbf{T}} = F_M F_C F_\theta \mathbf{F}_\theta^{-1} \mathbf{F}_C^{-1} \mathbf{F}_M^{-1} \mathbf{T} \mathbf{F}_M^{-T} \mathbf{F}_C^{-T} \mathbf{F}_\theta^{-T} \quad , \quad (4.22)$$

so dass ein auf der thermochemischen Zwischenkonfiguration  $\mathcal{Z}_{\theta C}$  operierender mechanischer Spannungstensor, der so genannte mechanische zweite Piola-Kirchhoffsche Tensor,

$$\tilde{\mathbf{T}}_M = F_M \mathbf{F}_M^{-1} \mathbf{T} \mathbf{F}_M^{-T} \quad (4.23)$$

definiert werden kann. Daraus folgt sofort

$$\tilde{\mathbf{T}} = F_C F_\theta \mathbf{F}_\theta^{-1} \mathbf{F}_C^{-1} \tilde{\mathbf{T}}_M \mathbf{F}_C^{-T} \mathbf{F}_\theta^{-T} \quad . \quad (4.24)$$

Als zweite Größe, die in die Spannungsleistung eingeht, muss der Green-Lagrangesche Tensor betrachtet werden.

Dazu werden der mechanische rechte Cauchy-Green Tensor  $\mathbf{C}_M$  und der zugehörige mechanische Green-Lagrangesche Tensor  $\mathbf{E}_M$  eingeführt. Diese sind durch

$$\mathbf{C}_M = \mathbf{F}_M^T \mathbf{F}_M \quad \text{und} \quad \mathbf{E}_M = (\mathbf{C}_M - \mathbf{1}) \quad (4.25)$$

definiert.

Mit der multiplikativen Zerlegung in Glg. (4.14) folgt dann für den Green-Lagrangeschen Verzerrungstensor

$$\mathbf{E} = (\mathbf{F}^T \mathbf{F} - \mathbf{1}) = (\mathbf{F}_\theta^T \mathbf{F}_C^T \mathbf{F}_M^T \mathbf{F}_M \mathbf{F}_C \mathbf{F}_\theta - \mathbf{1}) = (\mathbf{F}_\theta^T \mathbf{F}_C^T \mathbf{C}_M \mathbf{F}_C \mathbf{F}_\theta - \mathbf{1}) \quad (4.26)$$

und die zeitliche Ableitung ergibt sich entsprechend zu

$$\dot{\mathbf{E}} = \frac{1}{2} \left( \dot{\mathbf{F}}_\theta^T \mathbf{F}_C^T \mathbf{C}_M \mathbf{F}_C \mathbf{F}_\theta + \mathbf{F}_\theta^T \dot{\mathbf{F}}_C^T \mathbf{C}_M \mathbf{F}_C \mathbf{F}_\theta + \mathbf{F}_\theta^T \mathbf{F}_C^T \dot{\mathbf{C}}_M \mathbf{F}_C \mathbf{F}_\theta + \mathbf{F}_\theta^T \mathbf{F}_C^T \mathbf{C}_M \dot{\mathbf{F}}_C \mathbf{F}_\theta + \mathbf{F}_\theta^T \mathbf{F}_C^T \mathbf{C}_M \mathbf{F}_C \dot{\mathbf{F}}_\theta \right) \quad . \quad (4.27)$$

Unter Anwendung Rechenregeln für das Skalarprodukt in Anhang A.2.1 und unter Berücksichtigung der Symmetrie des mechanischen rechten Cauchy-Green Tensors, aus der  $\dot{\mathbf{E}} = \dot{\mathbf{E}}^T$  folgt, sowie der Symmetrie des zweiten Piola-Kirchhoffschen Spannungstensors und den Glg. (4.24) und (4.27) kann die Spannungsleistung durch

$$\begin{aligned} w &= \frac{1}{\rho_R} \tilde{\mathbf{T}} \cdot \dot{\mathbf{E}} = \frac{1}{\rho_R} \left( \dot{\mathbf{E}}^T \tilde{\mathbf{T}} \right) \cdot \mathbf{1} = \frac{1}{\rho_R} \left( \tilde{\mathbf{T}}^T \dot{\mathbf{E}} \right) \cdot \mathbf{1} = \frac{1}{\rho_R} \left( \tilde{\mathbf{T}} \dot{\mathbf{E}} \right) \cdot \mathbf{1} \\ &= \frac{F_C F_\theta}{2 \rho_R} \left( \mathbf{F}_\theta^{-1} \mathbf{F}_C^{-1} \tilde{\mathbf{T}}_M \mathbf{F}_C^{-T} \mathbf{F}_\theta^{-T} \left( \dot{\mathbf{F}}_\theta^T \mathbf{F}_C^T \mathbf{C}_M \mathbf{F}_C \mathbf{F}_\theta + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \mathbf{F}_\theta^T \dot{\mathbf{F}}_C^T \mathbf{C}_M \mathbf{F}_C \mathbf{F}_\theta + \mathbf{F}_\theta^T \mathbf{F}_C^T \dot{\mathbf{C}}_M \mathbf{F}_C \mathbf{F}_\theta + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \mathbf{F}_\theta^T \mathbf{F}_C^T \mathbf{C}_M \dot{\mathbf{F}}_C \mathbf{F}_\theta + \mathbf{F}_\theta^T \mathbf{F}_C^T \mathbf{C}_M \mathbf{F}_C \dot{\mathbf{F}}_\theta \right) \right) \cdot \mathbf{1} \end{aligned} \quad (4.28)$$

ausgedrückt werden.

Um den Ausdruck zu vereinfachen, werden der thermische und der chemische räumliche Geschwindigkeitsgradient

$$\mathbf{L}_\theta = \dot{\mathbf{F}}_\theta \mathbf{F}_\theta^{-1} = \frac{\varphi'}{3 \varphi} \dot{\theta} \mathbf{1} \quad \text{und} \quad \mathbf{L}_C = \dot{\mathbf{F}}_C \mathbf{F}_C^{-1} = \frac{g'}{3 g} \dot{q} \mathbf{1} \quad (4.29)$$

eingeführt. Werden weiterhin die Glg. (4.16) und (4.17) berücksichtigt, kann

$$\begin{aligned} w &= \frac{1}{2 \rho_{\theta C}} \left( \tilde{\mathbf{T}}_M \mathbf{F}_C^{-T} \mathbf{L}_\theta^T \mathbf{F}_C^T \mathbf{C}_M + \tilde{\mathbf{T}}_M \mathbf{L}_C^T \mathbf{C}_M + \right. \\ &\quad \left. \tilde{\mathbf{T}}_M \dot{\mathbf{C}}_M + \tilde{\mathbf{T}}_M \mathbf{C}_M \mathbf{L}_C + \mathbf{F}_C^{-1} \tilde{\mathbf{T}}_M \mathbf{C}_M \mathbf{F}_C \mathbf{L}_\theta \right) \cdot \mathbf{1} \end{aligned} \quad (4.30)$$

geschrieben werden. Mit den getroffenen Annahmen und Glg. (4.25) können die einzelnen Terme weiter zusammengefasst werden. Mit

$$\begin{aligned} &\left( \tilde{\mathbf{T}}_M \mathbf{F}_C^{-T} \mathbf{L}_\theta^T \mathbf{F}_C^T \mathbf{C}_M + \mathbf{F}_C^{-1} \tilde{\mathbf{T}}_M \mathbf{C}_M \mathbf{F}_C \mathbf{L}_\theta \right) \cdot \mathbf{1} = \\ &= 2 \left( \left( \mathbf{F}_C \mathbf{L}_\theta \mathbf{F}_C^{-1} \right)^T \mathbf{C}_M \tilde{\mathbf{T}}_M \right) \cdot \mathbf{1} = 2 \mathbf{C}_M \tilde{\mathbf{T}}_M \cdot \left( \mathbf{F}_C \mathbf{L}_\theta \mathbf{F}_C^{-1} \right) \quad , \\ &\left( \tilde{\mathbf{T}}_M \mathbf{L}_C^T \mathbf{C}_M + \tilde{\mathbf{T}}_M \mathbf{C}_M \mathbf{L}_C \right) \cdot \mathbf{1} = \\ &= 2 \left( \mathbf{L}_C^T \mathbf{C}_M \tilde{\mathbf{T}}_M \right) \cdot \mathbf{1} = 2 \mathbf{C}_M \tilde{\mathbf{T}}_M \cdot \mathbf{L}_C \quad \text{und} \\ &\left( \tilde{\mathbf{T}}_M \dot{\mathbf{C}}_M \right) \cdot \mathbf{1} = 2 \tilde{\mathbf{T}}_M \cdot \dot{\mathbf{E}}_M \end{aligned} \quad (4.31)$$

folgt für die Spannungsleistung

$$w = \frac{1}{\rho_R} \tilde{\mathbf{T}} \cdot \dot{\mathbf{E}} = \frac{1}{\rho_{\theta C}} \left( \tilde{\mathbf{T}}_M \cdot \dot{\mathbf{E}}_M + \mathbf{C}_M \tilde{\mathbf{T}}_M \cdot \left( \mathbf{F}_C \mathbf{L}_\theta \mathbf{F}_C^{-1} \right) + \mathbf{C}_M \tilde{\mathbf{T}}_M \cdot \mathbf{L}_C \right) \quad . \quad (4.32)$$

Die Spannungsleistung kann nun bezüglich ihrer Anteile interpretiert werden. Der erste Term ist der mechanische Anteil, der zweite Term repräsentiert den thermischen Anteil

und der dritte Term stellt den chemischen Anteil der Spannungsleistung dar. Wird Glg. (4.29) und die mechanische Inkompressibilität berücksichtigt, ergibt sich für die Ausdrücke in Glg. (4.31)

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_M \tilde{\mathbf{T}}_M \cdot \left( \mathbf{F}_C \mathbf{L}_\theta \mathbf{F}_C^{-1} \right) &= \text{tr} \left( \left( \mathbf{F}_M^T \mathbf{F}_M \right) \left( F_M \mathbf{F}_M^{-1} \mathbf{T} \mathbf{F}_M^{-T} \right) \mathbf{F}_C \left( \frac{\varphi'}{3\varphi} \dot{\theta} \mathbf{1} \right) \mathbf{F}_C^{-1} \right) \\ &= \frac{\varphi'}{3\varphi} \text{tr}(\mathbf{T}) \dot{\theta} \end{aligned} \quad (4.33)$$

und

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_M \tilde{\mathbf{T}}_M \cdot \mathbf{L}_C &= \text{tr} \left( \left( \mathbf{F}_M^T \mathbf{F}_M \right) \left( F_M \mathbf{F}_M^{-1} \mathbf{T} \mathbf{F}_M^{-T} \right) \left( \frac{g'}{3g} \dot{q} \right) \right) \\ &= \frac{g'}{3g} \text{tr}(\mathbf{T}) \dot{q} \quad , \end{aligned} \quad (4.34)$$

so dass die Spannungsleistung auch durch

$$w = \frac{1}{\rho_R} \tilde{\mathbf{T}} \cdot \dot{\mathbf{E}} = \frac{1}{\rho_{\theta C}} \left( \tilde{\mathbf{T}}_M \cdot \dot{\mathbf{E}}_M + \frac{\varphi'}{3\varphi} \text{tr}(\mathbf{T}) \dot{\theta} + \frac{g'}{3g} \text{tr}(\mathbf{T}) \dot{q} \right) \quad (4.35)$$

ausgedrückt werden kann.

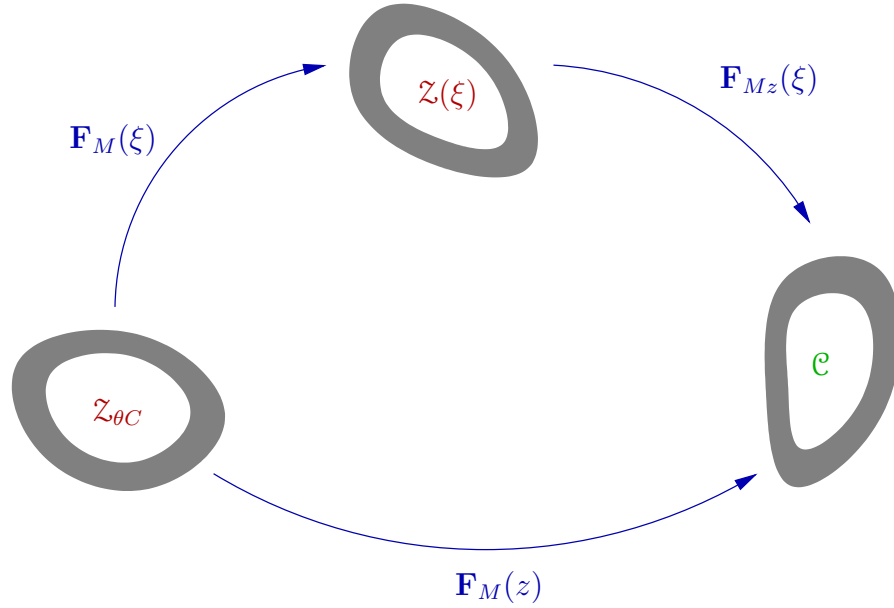
### 4.3.2 Ansatz für die Freie Helmholtzsche Energie

Die Struktur der freien Energie für den mechanischen Anteil wird von Haupt u. Lion (2002) übernommen. Dabei wird das Material als mechanisch inkompressibel angenommen, wie in Abschnitt 4.2.2 beschrieben ist. Um die thermischen und chemischen Vorgänge zu beschreiben, muss die freie Energie entsprechend um einen thermischen und einen chemischen Anteil erweitert werden. Dazu werden die chemisch gebundene freie Energie  $\Phi(q, \theta)$  und die thermisch gebundene freie Energie  $h(\theta)$  eingeführt. Die freie Energie ist dann durch

$$\begin{aligned} \psi &= - \int_{-\infty}^z \left\{ G_A(z - \xi) \text{tr}(\mathbf{e}'_{Mz}(\xi)) + G_B(z - \xi) \text{tr}(\mathbf{E}'_{Mz}(\xi)) \right\} d\xi \\ &\quad + \Phi(q, \theta) + h(\theta) \end{aligned} \quad (4.36)$$

definiert. Der mechanische Anteil der freien Energie ist ein Funktional der Deformationsgeschichte. Dabei sind der relative Piolasche Tensor  $\mathbf{e}_{Mz}$  nach Glg. (1.36) und der relative Green-Lagrangesche Tensor  $\mathbf{E}_{Mz}$  über die relative Zwischenkonfiguration  $\mathcal{Z}(\xi)$  definiert, wie in Abb. 13 dargestellt ist. Außerdem wird eine intrinsische Zeit  $z$  eingeführt.

Für die Relaxationsfunktionen  $G_A(z)$  und  $G_B(z)$  müssen die Bedingungen  $G'_A(z) \leq 0$  und  $G'_B(z) \leq 0$  sowie  $G''_A(z) \geq 0$  und  $G''_B(z) \geq 0$  erfüllt sein.



**Abbildung 13:** Relative mechanische Deformationsgradienten.

Die intrinsische Zeit  $z$  wird in Abhängigkeit der physikalischen Zeit  $t$  definiert. Da die intrinsische Zeit eine weitere innere Variable ist, muss für sie eine Evolutionsgleichung eingeführt werden. Diese kann in Abhängigkeit der thermomechanischen und der chemischen Prozessgeschichte definiert werden. Die Einführung der intrinsischen Zeit ist erforderlich, um die Änderung der Materialeigenschaften während der Aushärtung zu berücksichtigen. Durch eine geeignete Wahl der Evolutionsgleichung kann erreicht werden, dass nach vollständiger Aushärtung des Klebers die intrinsische Zeit stehen bleibt und der mechanische Anteil der freien Energie konstant bleibt und keinen weiteren Beitrag mehr liefert. Die Eigenschaften, die durch diesen Anteil ausgedrückt werden, werden dann in der weiteren Prozessgeschichte nicht mehr berücksichtigt.

Die Berücksichtigung der Prozessgeschichte ist schematisch in Abb. 13 dargestellt. Durch die Integration wird jeder Zeitpunkt  $\xi$  berücksichtigt. Der relative Deformationsgradient  $\mathbf{F}_{Mz}(\xi)$  bildet dabei einen räumlichen Tangentenvektor auf eine vorherige zeitliche Zwischenkonfiguration  $\mathcal{Z}(\xi)$  ab. Damit ergibt sich für den relativen Deformationsgradienten

$$\mathbf{F}_{Mz}(\xi) = \mathbf{F}_M(\xi) \mathbf{F}_M^{-1}(z) \quad . \quad (4.37)$$

entsprechend gilt für den relativen rechten Cauchy-Green Tensor

$$\mathbf{C}_{Mz}(\xi) = \mathbf{F}_M^{-T}(z) \mathbf{C}_M(\xi) \mathbf{F}_M^{-1}(z) \quad , \quad (4.38)$$

den relativen Green-Lagrangeschen Tensor

$$\mathbf{E}_{Mz}(\xi) = \frac{1}{2} (\mathbf{C}_{Mz}(\xi) - \mathbf{1}) \quad (4.39)$$

und den relativen Piolaschen Tensor

$$\mathbf{e}_{Mz}(\xi) = \frac{1}{2} (\mathbf{C}_{Mz}^{-1}(\xi) - \mathbf{1}) \quad . \quad (4.40)$$

Wird nur der Zeitpunkt  $\xi = z$  betrachtet, folgt aus den vorangestellten Beziehungen

$$\mathbf{F}_{Mz}(z) = \mathbf{1} \quad \text{und} \quad \mathbf{C}_{Mz}(z) = \mathbf{1} \quad \text{sowie} \quad (4.41)$$

$$\mathbf{E}_{Mz}(z) = \mathbf{0} \quad \text{und} \quad \mathbf{e}_{Mz}(z) = \mathbf{0} \quad . \quad (4.42)$$

Ohne detaillierten Nachweis gilt weiterhin

$$\text{tr}(\mathbf{E}_{Mz}(z)) = 0 \quad \text{und} \quad \text{tr}(\mathbf{e}_{Mz}(z)) = 0 \quad , \quad (4.43)$$

$$\text{tr}(\mathbf{E}'_{Mz}(z)) = 0 \quad \text{und} \quad \text{tr}(\mathbf{e}'_{Mz}(z)) = 0 \quad \text{sowie} \quad (4.44)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial z \partial \xi} \text{tr}(\mathbf{E}_{Mz}(z)) = -2 \mathbf{C}_M^{-1}(z) \mathbf{E}'_M(\xi) \mathbf{C}_M^{-1}(z) \cdot \mathbf{E}'_M(z) \quad \text{und} \quad (4.45)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial z \partial \xi} \text{tr}(\mathbf{e}_{Mz}(z)) = 2 \mathbf{e}'_M(\xi) \cdot \mathbf{E}'_M(z) \quad . \quad (4.46)$$

Mit den eingeführten Beziehungen kann die zeitliche Ableitung der freien Energie ermittelt werden. Diese ergibt sich zu

$$\begin{aligned} \dot{\psi} = & - \int_{-\infty}^z \{ G'_A(z - \xi) \text{tr}(\mathbf{e}'_{Mz}(\xi)) + G'_B(z - \xi) \text{tr}(\mathbf{E}'_{Mz}(\xi)) \} d\xi \dot{z}(t) - \\ & - 2 \int_{-\infty}^z \{ G_A(z - \xi) \mathbf{e}'_M(\xi) - \\ & - G_B(z - \xi) \mathbf{C}_M^{-1}(z) \mathbf{E}'_M(\xi) \mathbf{C}_M^{-1}(z) \} d\xi \cdot \dot{\mathbf{E}}_M(t) + \\ & + \frac{\partial \Phi}{\partial q} \dot{q} + \left( \frac{\partial \Phi}{\partial \theta} + h'(\theta) \right) \dot{\theta} \quad . \end{aligned} \quad (4.47)$$

Der erste Term aus Glg. (4.47) kann durch partielle Integration weiter vereinfacht werden. Werden neben Glg. (4.43) für die Relaxationsfunktionen asymptotische Eigenschaften angenommen, so dass

$$\lim_{z \rightarrow \infty} G'_A(z) = 0 \quad \text{und} \quad \lim_{z \rightarrow \infty} G'_B(z) = 0 \quad (4.48)$$

gilt, folgt für den ersten Term

$$\begin{aligned}
& - \int_{-\infty}^z \{ G'_A(z - \xi) \operatorname{tr}(\mathbf{e}'_{Mz}(\xi)) + G'_B(z - \xi) \operatorname{tr}(\mathbf{E}'_{Mz}(\xi)) \} d\xi \dot{z}(t) = \\
& = - \left[ G'_A(z - \xi) \operatorname{tr}(\mathbf{e}_{Mz}(\xi)) + G'_B(z - \xi) \operatorname{tr}(\mathbf{E}_{Mz}(\xi)) \right]_{-\infty}^z \dot{z}(t) - \\
& \quad - \int_{-\infty}^z \{ G''_A(z - \xi) \operatorname{tr}(\mathbf{e}_{Mz}(\xi)) + G''_B(z - \xi) \operatorname{tr}(\mathbf{E}_{Mz}(\xi)) \} d\xi \dot{z}(t) = \\
& = - \int_{-\infty}^z \{ G''_A(z - \xi) \operatorname{tr}(\mathbf{e}_{Mz}(\xi)) + G''_B(z - \xi) \operatorname{tr}(\mathbf{E}_{Mz}(\xi)) \} d\xi \dot{z}(t) \quad .
\end{aligned} \tag{4.49}$$

Da für das Modell die Zwangsbedingung  $F_M = 1$  vorgegeben ist, folgt sofort

$$\operatorname{tr}(\mathbf{E}_{Mz}(\xi)) \geq 0 \quad \text{und} \quad \operatorname{tr}(\mathbf{e}_{Mz}(\xi)) \geq 0 \tag{4.50}$$

und somit unter der Voraussetzung, dass  $\dot{z}$  nur positive Werte annimmt,

$$\int_{-\infty}^z \{ G''_A(z - \xi) \operatorname{tr}(\mathbf{e}_{Mz}(\xi)) + G''_B(z - \xi) \operatorname{tr}(\mathbf{E}_{Mz}(\xi)) \} d\xi \dot{z}(t) \geq 0 \quad . \tag{4.51}$$

#### 4.4 Auswertung der Clausius-Duhem-Ungleichung

Ausgangspunkt ist die materielle Darstellung der Clausius-Duhem-Ungleichung nach Glg. (1.93), die durch die Dichte dividiert wird, so dass sich

$$\theta \gamma = -\dot{\psi} + \frac{1}{\rho_R} \tilde{\mathbf{T}} \cdot \dot{\mathbf{E}} - s \dot{\theta} - \frac{\mathbf{q}_R \operatorname{Grad} \theta}{\rho_R \theta} \geq 0 \tag{4.52}$$

ergibt. Werden nun die Zusammenhänge aus den Glg. (4.35) und (4.47) unter Berücksichtigung von (4.49) eingefügt, ergibt sich

$$\begin{aligned}
\theta \gamma & = \int_{-\infty}^z \{ G''_A(z - \xi) \operatorname{tr}(\mathbf{e}_{Mz}(\xi)) + G''_B(z - \xi) \operatorname{tr}(\mathbf{E}_{Mz}(\xi)) \} d\xi \dot{z}(t) + \\
& \quad + 2 \int_{-\infty}^z \{ G_A(z - \xi) \mathbf{e}'_M(\xi) - \\
& \quad \quad - G_B(z - \xi) \mathbf{C}_M^{-1}(z) \mathbf{E}'_M(\xi) \mathbf{C}_M^{-1}(z) \} d\xi \cdot \dot{\mathbf{E}}_M(t) + \\
& \quad - \frac{\partial \Phi}{\partial q} \dot{q} - \left( \frac{\partial \Phi}{\partial \theta} + h'(\theta) \right) \dot{\theta} - s \dot{\theta} - \frac{\mathbf{q}_R \operatorname{Grad} \theta}{\rho_R \theta} + \\
& \quad + \frac{1}{\rho_{\theta C}} \left( \tilde{\mathbf{T}}_M \cdot \dot{\mathbf{E}}_M + \frac{\varphi'}{3 \varphi} \operatorname{tr}(\mathbf{T}) \dot{\theta} + \frac{g'}{3 g} \operatorname{tr}(\mathbf{T}) \dot{q} \right) \quad .
\end{aligned} \tag{4.53}$$

Aus den Glg. (2.62), (4.51) und (2.63) folgt wiederum

$$\int_{-\infty}^z \{G_A''(z-\xi) \operatorname{tr}(\mathbf{e}_{Mz}(\xi)) + G_B''(z-\xi) \operatorname{tr}(\mathbf{E}_{Mz}(\xi))\} d\xi \dot{z}(t) - \frac{\mathbf{q}_R \operatorname{Grad} \theta}{\rho_R \theta} \geq 0, \quad (4.54)$$

so dass nach einigen Umformungen

$$\begin{aligned} & \left( 2 \int_{-\infty}^z \{G_A(z-\xi) \mathbf{e}'_M(\xi) - G_B(z-\xi) \mathbf{C}_M^{-1}(z) \mathbf{E}'_M(\xi) \mathbf{C}_M^{-1}(z)\} d\xi + \right. \\ & \quad \left. + \frac{1}{\rho_{\theta C}} \tilde{\mathbf{T}}_M \right) \cdot \dot{\mathbf{E}}_M + \left( \frac{g'}{3 \rho_{\theta C} g} \operatorname{tr}(\mathbf{T}) - \frac{\partial \Phi}{\partial q} \right) \dot{q} - \\ & \quad - \left( s - \frac{\varphi'}{3 \rho_{\theta C} \varphi} \operatorname{tr}(\mathbf{T}) + \frac{\partial \Phi}{\partial \theta} + h'(\theta) \right) \dot{\theta} \geq 0 \end{aligned} \quad (4.55)$$

als Ungleichung verbleibt, die bezüglich der thermomechanischen Konsistenz ausgewertet werden muss.

Da der mechanische Green-Lagrangesche Tensor eine freie Variable ist, muss der erste Klammerausdruck gleich Null sein, damit die Ungleichung erfüllt ist. Damit ist eine Bestimmungsgleichung für den mechanischen zweiten Piola-Kirchhoffschen Tensor gegeben. In den mechanischen zweiten Piola-Kirchhoffschen Tensor fließt außerdem die mechanische Inkompressibilität ein. Wie in Abschnitt 1.4.3 beschrieben, führt dies auf einen zusätzlichen Term. Für den mechanischen zweiten Piola-Kirchhoffschen Spannungstensor gilt somit die konstitutive Beziehung

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{T}}_M &= -2 \rho_{\theta C} \int_{-\infty}^z \{G_A(z-\xi) \mathbf{e}'_M(\xi) - G_B(z-\xi) \mathbf{C}_M^{-1}(z) \mathbf{E}'_M(\xi) \mathbf{C}_M^{-1}(z)\} d\xi \\ &\quad - p F_M \mathbf{C}_M^{-1}, \end{aligned} \quad (4.56)$$

wobei  $p$  dem hydrostatischen Druck entspricht.

Die zweite freie Variable ist die Temperatur, so dass aus dem dritten Klammerausdruck in Glg. 4.55 die konstitutive Beziehung

$$s = \frac{\varphi'}{3 \rho_{\theta C} \varphi} \operatorname{tr}(\mathbf{T}) - \frac{\partial \Phi}{\partial \theta} - h'(\theta) \quad (4.57)$$

für die spezifische Entropie ermittelt werden kann.

Damit muss nun eine geeignete Evolutionsgleichung für den Aushärtegrad  $q$  gefunden werden, damit der zweite Term in Glg. (4.55) positiv ist und die Clausius-Duhem-Ungleichung erfüllt wird. Um eine quadratische Form zu erzeugen, wird deswegen für die Aushärterate

$$\dot{q} = \lambda \left( \frac{g'}{3 \rho_{\theta C} g} \operatorname{tr}(\mathbf{T}) - \frac{\partial \Phi}{\partial q} \right) \quad (4.58)$$



gesetzt. Dabei ist  $\lambda(\dots) \geq 0$  ein Materialparameter.

Die Clausius-Duhem-Ungleichung ist mit den getroffenen Annahmen für beliebige thermomechanische Prozesse erfüllt. Das verwendeten konstitutiven Beziehungen sind somit thermomechanisch konsistent.

## 4.5 Ableitung der Wärmeleitgleichung

Um die Wärmeleitgleichung abzuleiten, wird von Glg. (2.68) ausgegangen. Die Division durch die Dichte der Referenzkonfiguration  $\rho_R$  führt auf

$$\dot{\psi} + s \dot{\theta} + \dot{s} \theta = \frac{1}{\rho_R} \tilde{\mathbf{T}} \cdot \dot{\mathbf{E}} + r - \frac{1}{\rho_R} \text{Div} \mathbf{q}_R \quad . \quad (4.59)$$

Wird die Definition des Wärmestromvektors gemäß Glg. (2.63)

$$\mathbf{q}_R = -\kappa \text{ Grad } \theta \quad (4.60)$$

berücksichtigt, kann der letzte Term in Glg. (4.59) auch mit Hilfe des Laplace-Operators

$$\text{Div} \mathbf{q}_R = -\kappa \text{ Div}(\text{Grad } \theta) = -\kappa \Delta \theta \quad (4.61)$$

ausgedrückt werden. Wird weiterhin die Spannungsleistung (4.35) eingeführt, kann

$$\dot{\psi} + s \dot{\theta} + \dot{s} \theta = \frac{1}{\rho_R} \left( \tilde{\mathbf{T}}_M \cdot \dot{\mathbf{E}}_M + \frac{\varphi'}{3} \text{tr}(\mathbf{T}) \dot{\theta} + \frac{g'}{3} \text{tr}(\mathbf{T}) \dot{q} \right) + r + \frac{\kappa}{\rho_R} \Delta \theta \quad (4.62)$$

geschrieben werden. Aus Glg. (4.17) folgt mit den Definitionen aus Glg. (4.15)

$$\rho_{\theta C} = \frac{\rho_r}{F_C F_\theta} = \frac{\rho_r}{g(q) \varphi(\theta)} \quad (4.63)$$

und schließlich für Glg. (4.59)

$$\begin{aligned} \dot{\psi} + s \dot{\theta} + \dot{s} \theta &= \\ &= \frac{1}{\rho_{\theta C}} \tilde{\mathbf{T}}_M \cdot \dot{\mathbf{E}}_M + \frac{\varphi' g(q)}{3 \rho_R} \text{tr}(\mathbf{T}) \dot{\theta} + \frac{g' \varphi(\theta)}{3 \rho_R} \text{tr}(\mathbf{T}) \dot{q} + r + \frac{\kappa}{\rho_R} \Delta \theta \quad . \end{aligned} \quad (4.64)$$

Für die Aushärtung- und die Temperatur-Volumen-Funktion werden lineare Abhängigkeiten angenommen. Mit dem chemischen und thermischen Ausdehnungskoeffizienten  $\beta_C$  und  $\beta_\theta$  folgt entsprechend

$$g(q) = 1 + \beta_C q \quad \text{und} \quad (4.65)$$

$$\varphi(\theta) = 1 + \beta_\theta (\theta - \theta_0) \quad . \quad (4.66)$$

Ausgehend von der Phänomenologie des Aushärteprozesses, muss  $\beta_C \leq 0$  und  $\beta_\theta \geq 0$  sein. Die benötigten Ableitungen ergeben sich zu

$$g' = \frac{dg(q)}{dq} = \beta_C \quad \text{und} \quad \varphi' = \frac{d\varphi(\theta)}{d\theta} = \beta_\theta \quad . \quad (4.67)$$

Damit ergeben sich für Glg. (4.64)

$$\begin{aligned} \dot{\psi} + s \dot{\theta} + \dot{s} \theta &= \frac{1}{\rho_{\theta C}} \tilde{\mathbf{T}}_M \cdot \dot{\mathbf{E}}_M + \frac{\beta_\theta (1 + \beta_C q)}{3 \rho_R} \text{tr}(\mathbf{T}) \dot{\theta} + \\ &+ \frac{\beta_C (1 + \beta_\theta (\theta - \theta_0))}{3 \rho_R} \text{tr}(\mathbf{T}) \dot{q} + r + \frac{\kappa}{\rho_R} \Delta\theta \end{aligned} \quad (4.68)$$

und die spezifische Entropie aus Gleichung (4.57)

$$s = \frac{\varphi' g(q)}{3 \rho_R} \text{tr}(\mathbf{T}) - \frac{\partial\Phi}{\partial\theta} - h'(\theta) = \frac{\beta_\theta (1 + \beta_C q)}{3 \rho_R} \text{tr}(\mathbf{T}) - \frac{\partial\Phi}{\partial\theta} - h'(\theta) \quad , \quad (4.69)$$

deren zeitliche Ableitung

$$\dot{s} = \frac{\beta_\theta (1 + \beta_C q)}{3 \rho_R} \text{tr}(\dot{\mathbf{T}}) - \left( \frac{\partial^2\Phi}{\partial\theta^2} + h''(\theta) \right) \dot{\theta} + \left( \frac{\beta_\theta \beta_C}{3 \rho_R} \text{tr}(\mathbf{T}) - \frac{\partial^2\Phi}{\partial q \partial\theta} \right) \dot{q} \quad (4.70)$$

ist. Die Wärmekapazität ist durch  $c_d = \theta \frac{\partial s}{\partial\theta}$  definiert, so dass sich

$$c_d(q, \theta) = -\theta \left( \frac{\partial^2\Phi}{\partial\theta^2} + h''(\theta) \right) \quad (4.71)$$

ergibt. Werden die Beziehungen für die spezifische Entropie und die zeitliche Ableitung der freien Energie nach den Glg. (4.47) und (4.51) berücksichtigt, kann

$$\begin{aligned} & - \int_{-\infty}^z \{ G_A''(z - \xi) \text{tr}(\mathbf{e}_{Mz}(\xi)) + G_B''(z - \xi) \text{tr}(\mathbf{E}_{Mz}(\xi)) \} d\xi \dot{z}(t) - \\ & - 2 \int_{-\infty}^z \{ G_A(z - \xi) \mathbf{e}'_M(\xi) - G_B(z - \xi) \mathbf{C}_M^{-1}(z) \mathbf{E}'_M(\xi) \mathbf{C}_M^{-1}(z) \} d\xi \cdot \dot{\mathbf{E}}_M(t) + \\ & + \frac{\partial\Phi}{\partial q} \dot{q} + \left( \frac{\partial\Phi}{\partial\theta} + h'(\theta) \right) \dot{\theta} + \left( \frac{\beta_\theta (1 + \beta_C q)}{3 \rho_R} \text{tr}(\mathbf{T}) - \frac{\partial\Phi}{\partial\theta} - h'(\theta) \right) \dot{\theta} + \\ & + \left( \frac{\beta_\theta (1 + \beta_C q)}{3 \rho_R} \text{tr}(\dot{\mathbf{T}}) + \frac{1}{\theta} c_d(q, \theta) \dot{\theta} + \left( \frac{\beta_\theta \beta_C}{3 \rho_R} \text{tr}(\mathbf{T}) - \frac{\partial^2\Phi}{\partial q \partial\theta} \right) \dot{q} \right) \theta = \\ & = \frac{1}{\rho_{\theta C}} \tilde{\mathbf{T}}_M \cdot \dot{\mathbf{E}}_M + \frac{\beta_\theta (1 + \beta_C q)}{3 \rho_R} \text{tr}(\mathbf{T}) \dot{\theta} + \\ & + \frac{\beta_C (1 + \beta_\theta (\theta - \theta_0))}{3 \rho_R} \text{tr}(\mathbf{T}) \dot{q} + r + \frac{\kappa}{\rho_R} \Delta\theta \end{aligned} \quad (4.72)$$

geschrieben werden. Werden weiterhin die konstitutiven Beziehungen (4.56) und schließlich (4.58) berücksichtigt, folgt

$$\begin{aligned}
c_d(q, \theta) \dot{\theta} &= \\
&= \frac{\kappa}{\rho_R} \Delta\theta + r + \left( \frac{\beta_C (1 + \beta_\theta (\theta - \theta_0))}{3 \rho_R} \operatorname{tr}(\mathbf{T}) - \frac{\partial\Phi}{\partial q} \right) \dot{q} - \\
&\quad - \frac{\beta_\theta (1 + \beta_C q)}{3 \rho_R} \theta \operatorname{tr}(\dot{\mathbf{T}}) + \left( \frac{\partial^2\Phi}{\partial q \partial \theta} - \frac{\beta_\theta \beta_C}{3 \rho_R} \operatorname{tr}(\mathbf{T}) \right) \theta \dot{q} + \\
&\quad + \int_{-\infty}^z \left\{ G_A''(z - \xi) \operatorname{tr}(\mathbf{e}_{Mz}(\xi)) + G_B''(z - \xi) \operatorname{tr}(\mathbf{E}_{Mz}(\xi)) \right\} d\xi \dot{z}(t) = \tag{4.73} \\
&= \frac{\kappa}{\rho_R} \Delta\theta + r + \frac{\dot{q}^2}{\lambda} - \frac{\beta_\theta (1 + \beta_C q)}{3 \rho_R} \theta \operatorname{tr}(\dot{\mathbf{T}}) + \left( \frac{\partial^2\Phi}{\partial q \partial \theta} - \frac{\beta_\theta \beta_C}{3 \rho_R} \operatorname{tr}(\mathbf{T}) \right) \theta \dot{q} + \\
&\quad + \int_{-\infty}^z \left\{ G_A''(z - \xi) \operatorname{tr}(\mathbf{e}_{Mz}(\xi)) + G_B''(z - \xi) \operatorname{tr}(\mathbf{E}_{Mz}(\xi)) \right\} d\xi \dot{z}(t) \quad .
\end{aligned}$$

## 4.6 Zusammenfassung

In diesem Abschnitt sollen die für die Implementierung des Materialmodells relevanten konstitutiven Beziehungen und kinematischen Annahmen übersichtlich dargestellt werden. Abschnitt 2.7 kann man entnehmen, welche Größen benötigt werden, um die durch das FE-Programm MSC.MARC geforderten Größen zu berechnen.

Für die Implementierung des Materialmodells sind zum Teil weitere Beziehungen notwendig, die in diesem Abschnitt eingeführt werden. Außerdem werden für die Implementierung Beziehungen teilweise vereinfacht. Die entsprechenden Vereinfachungen sind hier ebenfalls dokumentiert.

### 4.6.1 Kinematik

#### Multiplikative Zerlegung

Zur Beschreibung des gesamten Aushärtprozesses wird der Deformationsgradient multiplikativ in einen thermischen, einen chemischen und einen mechanischen Anteil zerlegt:

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_M \mathbf{F}_C \mathbf{F}_\theta \tag{4.74}$$

#### Thermische Deformation

Der thermische Anteil der Deformation wird als isotrop angenommen, so dass sich

$$\mathbf{F}_\theta = \varphi(\theta)^{\frac{1}{3}} \mathbf{1} \tag{4.75}$$

mit der Temperatur-Volumen-Funktion

$$\varphi(\theta) = 1 + \beta_\theta (\theta - \theta_0) \quad (4.76)$$

ergibt. Die Referenztemperatur wird auf  $\theta_0 = 290K$  festgelegt und für den thermischen Ausdehnungskoeffizienten muss  $\beta_\theta \geq 0$  gelten.

Es können auch komplexere Abhängigkeiten der Form  $\varphi = \varphi(q, \theta)$  dargestellt werden.

### Chemische Deformation

Der chemische Anteil der Deformation wird ebenfalls als isotrop angenommen, so dass sich

$$\mathbf{F}_C = g(q)^{\frac{1}{3}} \mathbf{1} \quad (4.77)$$

mit der Aushärtung-Volumen-Funktion

$$g(q) = 1 + \beta_C q \quad (4.78)$$

ergibt. Für den chemischen Ausdehnungskoeffizienten muss  $\beta_C \leq 0$  gelten.

Es können auch komplexere Abhängigkeiten der Form  $g = g(q, \theta)$  dargestellt werden.

### Mechanische Deformation

Die mechanische Deformation ist abhängig von der Deformationsgeschichte, so dass eine relative Zwischenkonfiguration eingeführt wird und

$$\mathbf{F}_M(z) = \mathbf{F}_{Mz}(\xi)^{-1} \mathbf{F}_M(\xi) \quad (4.79)$$

gilt.

### Zwangsbedingung

Für das Materialmodell wird mechanische Inkompressibilität vorausgesetzt:

$$F_M = 1 \quad \text{bzw.} \quad F_M - 1 = 0 \quad . \quad (4.80)$$

## 4.6.2 Konstitutive Beziehungen

### Freie Energie

Die Relaxationsfunktionen  $G_A$  und  $G_B$  können verschieden aufgebaut sein, wie in Abschnitt 3.2.1 ausgeführt wird. Um die grundlegenden Eigenschaften des Materialmodells

zu überprüfen, genügt es jedoch, sich auf einen einfachen Ansatz zu beschränken. Deshalb wird

$$G_A(z) = \mu_0 e^{-\frac{z}{z_0}} \quad \text{und} \quad G_B(z) = 0 \quad (4.81)$$

gesetzt. Wobei  $\mu_0$  und  $z_0$  konstante Materialparameter sind. Weiterhin wird ein Ansatz für die chemisch gebundene freie Energie  $\Phi$  benötigt. Es wird der Einfachheit halber ein von der Temperatur unabhängiger Ansatz gewählt:

$$\Phi = \frac{1}{\lambda} \left( \frac{n^\alpha m^\beta (1-q)^{1+\alpha+\beta}}{\tau_+ (1+\alpha+\beta)} - \frac{1-q^{1+\gamma}}{\tau_- (1+\gamma)} \right) , \quad (4.82)$$

wobei  $n$ ,  $m$ ,  $\tau_+$ ,  $\tau_-$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$  und  $\gamma$  Materialparameter sind. Damit ergibt sich für die freie Energie nach Glg. (4.36)

$$\begin{aligned} \psi = & - \int_{-\infty}^z \left( \mu_0 e^{-\frac{z-\xi}{z_0}} \operatorname{tr}(\mathbf{e}'_{Mz}(\xi)) \right) d\xi \\ & + \frac{1}{\lambda} \left( \frac{n^\alpha m^\beta (1-q)^{1+\alpha+\beta}}{\tau_+ (1+\alpha+\beta)} - \frac{1-q^{1+\gamma}}{\tau_- (1+\gamma)} \right) + h(\theta) . \end{aligned} \quad (4.83)$$

### Mechanischer zweiter Piola-Kirchhoffscher Spannungstensor

Mit den vorausgegangenen Annahmen gilt für den mechanischen zweiten Piola-Kirchhoffschen Tensor

$$\tilde{\mathbf{T}}_M = -2 \rho_{\theta C} \int_{-\infty}^z \left( \mu_0 e^{-\frac{z-\xi}{z_0}} \mathbf{e}'_M(\xi) \right) d\xi - p F_M \mathbf{C}_M^{-1} . \quad (4.84)$$

### Aushärtegrad

Der Aushärtegrad  $q$  wird über die Evolutionsgleichung

$$\dot{q} = \lambda \left( \frac{\beta_C (1 + \beta_\theta (\theta - \theta_0))}{3 \rho_R} \operatorname{tr}(\mathbf{T}) - \frac{\partial \Phi}{\partial q} \right) \quad (4.85)$$

beschrieben. Aus der Definition der chemisch gebundenen freien Energie in Glg. (4.82) folgt für die Aushärterate

$$\dot{q} = \begin{cases} \frac{\lambda \beta_C (1 + \beta_\theta (\theta - \theta_0))}{3 \rho_R} \operatorname{tr}(\mathbf{T}) + \frac{n^\alpha m^\beta}{\tau_+} (1-q)^{\alpha+\beta} - \frac{1}{\tau_-} q^{1+\gamma} & \text{für } q < 1 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} . \quad (4.86)$$

### Intrinsische Zeit

Der Verlauf der intrinsischen Zeit  $z$  muss ebenfalls über eine Evolutionsgleichung vorgegeben werden. Damit die Clausius-Duhem-Ungleichung erfüllt ist, muss die Rate der intrinsischen Zeit immer positiv sein. Außerdem soll die intrinsische Zeit mit dem Ende des Aushärteprozesses stoppen, so dass die Materialeigenschaften des viskosen Fluids komplett verschwunden sind. Diese Forderungen werden durch den einfachen Ansatz

$$\dot{z} = 1 - q \quad (4.87)$$

erfüllt. Auch an dieser Stelle können komplexere Zusammenhänge eingeführt werden.

### Wärmeleitgleichung

Es wird vereinfachend angenommen, dass das Material keine spezifische innere Wärmequelle besitzt, so dass  $r = 0$  gilt. Weiterhin wird berücksichtigt, dass die chemisch gebundene freie Energie keine Funktion der Temperatur ist. Zudem wird für die Wärmekapazität eine Konstante verwendet. Damit ergibt sich für die Wärmeleitgleichung

$$\begin{aligned} c_d \dot{\theta} = & \frac{\kappa}{\rho_R} \Delta\theta + \frac{\dot{q}^2}{\lambda} - \frac{\beta_\theta (1 + \beta_C q)}{3 \rho_R} \theta \operatorname{tr}(\dot{\mathbf{T}}) - \frac{\beta_\theta \beta_C}{3 \rho_R} \operatorname{tr}(\mathbf{T}) \theta \dot{q} + \\ & + \int_{-\infty}^z \left( \frac{\mu_0}{z_0^2} e^{-\frac{z-\xi}{z_0}} \operatorname{tr}(\mathbf{e}_{Mz}(\xi)) \right) d\xi \dot{z}(t) \quad . \end{aligned} \quad (4.88)$$

## 5 Implementierung in MSC.MARC

Dieses Kapitel orientiert sich bei der Berechnung der erforderlichen Größen am Programmablauf des in Anhang C.3 beigefügten Programmes. Im Laufe der Berechnung der erforderlichen Operatoren werden kinematische Größen und innere Variablen am Beginn und am Ende des betrachteten Zeitschrittes benötigt. Eine Größe, die sich auf das Ende eines Zeitinkrementes bezieht, wird in der folgenden Darstellung durch  ${}_{n+1}X$  kenntlich gemacht. Im Quellcode sind diese Größen durch die angehängte Zahl 1 gekennzeichnet. Wird eine Größe zu Beginn des Zeitschrittes verwendet, wird dies durch die Angabe des Zeitpunktes  ${}_nX$  deutlich gemacht. Im Quellcode wird der entsprechenden Größe die Zahl 0 angefügt.

Da die Thermomechanik von Aushärtvorgängen mit den beiden freien Variablen  $\mathbf{E}_M$  und  $\theta$  formuliert ist, das FE-Programm MSC.MARC jedoch nicht zwischen einzelnen Deformationsanteilen unterscheidet, müssen die durch das Materialmodell vorgegebenen Größen wie z. Bsp. der mechanische zweite Piola Kirchhoffsche Tensor durch pull-back Operationen in die Referenzkonfiguration überführt werden. Dazu muss in der User-Subroutine HYPELA2 die multiplikative Zerlegung des Deformationsgradienten berücksichtigt werden. Um dieses zu erreichen, müssen zuerst die Werte der inneren Variablen bestimmt werden, bevor die benötigten kinematischen Größen und schließlich die durch das Programm geforderten Größen berechnet werden können.

Welche Größen benötigt werden, kann Abschnitt 2.7 entnommen werden. Ausgangspunkt für die hier durchgeführten Berechnungen ist die Zusammenfassung in Abschnitt 4.6.

Zur Programmierung der Subroutinen wird die Programmiersprache FORTRAN 77 verwendet. Für die Anforderungen dieser Arbeit bietet Brauch (1983) einen ausreichenden Überblick. Bezüglich der numerischen Integration wird auf Knorrenschild (2003) verwiesen.

### 5.1 Innere Variablen

Als innere Variablen verwendet das Materialmodell die intrinsische Zeit  $z$  und den Aushärtegrad  $q$ , die nach Aufruf der User-Subroutine HYPELA2 für die Zeitpunkte  $t = {}_n t$  und  $t = {}_{n+1} t$  berechnet werden müssen.

#### 5.1.1 Aushärtegrad

Der Aushärtegrad wird als State Variable gespeichert, so dass zum Aufruf der User-Subroutine immer der Aushärtegrad  ${}_n q$  zur Verfügung steht. Der Zuwachs während des Zeitschrittes wird durch die Auswertung der Evolutionsgleichung (4.86) ermittelt. Mit

$${}_n \dot{q} = \begin{cases} \frac{\lambda}{3} \frac{\beta_C}{\rho_R} \frac{(1+\beta_\theta)(\theta-\theta_0)}{\tau_+} \operatorname{tr}(\mathbf{T}) + \frac{n^\alpha m^\beta}{\tau_+} (1 - {}_n q)^{\alpha+\beta} - \frac{1}{\tau_-} {}_n q^{1+\gamma} & \text{für } {}_n q < 1 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (5.1)$$

folgt für den Zeitpunkt  ${}_{n+1} t$

$${}_{n+1} q = {}_n q + \Delta t_n {}_n \dot{q} \quad , \quad (5.2)$$

wobei  $\Delta t_n$  über

$$\Delta t_n = {}_{n+1}t - {}_nt \quad (5.3)$$

definiert ist.

### 5.1.2 Intrinsische Zeit

Die intrinsische Zeit ist über die Evolutionsgleichung (4.87),  $\dot{z} = 1 - q$ , definiert. Für die intrinsische Zeit gilt also

$${}_{n+1}z = \int_{-\infty}^{{}_{n+1}t} \dot{z} \, dt \quad . \quad (5.4)$$

Da davon ausgegangen wird, dass für  $t < 0$  keine Verformung auftritt, kann

$${}_{n+1}z = \int_0^{{}_{n+1}t} (1 - q) \, dt \quad (5.5)$$

geschrieben werden. Dieser Ausdruck kann weiter aufgeschlüsselt werden. Es gilt

$${}_{n+1}z = \int_0^{{}_nt} (1 - q) \, dt + \int_{{}_nt}^{{}_{n+1}t} (1 - q) \, dt = {}_nz + \int_{{}_nt}^{{}_{n+1}t} (1 - q) \, dt \quad . \quad (5.6)$$

Die aktuelle intrinsische Zeit wird als State Variable gespeichert, so dass bei jedem Aufruf der Subroutine  ${}_nz$  bereitgestellt wird. Es muss folglich nur die intrinsische Zeitdifferenz

$$\Delta z_n = {}_{n+1}z - {}_nz = \int_{{}_nt}^{{}_{n+1}t} (1 - q) \, dt \quad (5.7)$$

berechnet werden. Die numerische Integration erfolgt mit Hilfe der Trapezregel, so dass sich

$$\int_{{}_nt}^{{}_{n+1}t} (1 - q) \, dt = \frac{(1 - {}_nq) + (1 - {}_{n+1}q)}{2} \Delta t_n = \frac{2 - ({}_nq + {}_{n+1}q)}{2} \Delta t_n \quad (5.8)$$

ergibt.

## 5.2 Kinematik

In diesem Abschnitt wird auf die Indizes verzichtet, die den Zeitpunkt  ${}_nt$  oder  ${}_{n+1}t$  wiedergeben. Es treten keine kinematischen Beziehungen mit Größen, die sich auf den jeweils anderen Zeitpunkt beziehen, auf.



### 5.2.1 Zerlegung des Deformationsgradienten

Die multiplikative Zerlegung des Deformationsgradienten wird ausgehend von Glg. (4.74) betrachtet. Um die erforderlichen Größen zu berechnen, werden Größen bezüglich der Referenzkonfiguration und der Momentankonfiguration benötigt. Da die konstitutiven Gleichungen bezüglich der thermochemischen Zwischenkonfiguration  $\mathcal{Z}_{\theta C}$  definiert sind, muss diese ebenfalls berücksichtigt werden. Keine der eingeführten und benötigten Größen operiert jedoch auf der thermischen Zwischenkonfiguration  $\mathcal{Z}_{R\theta}$ . Aus diesem Grund werden der chemische und der thermische Deformationsgradient für die Programmierung zusammengefasst. Es gilt somit

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_M \mathbf{F}_C \mathbf{F}_\theta = \mathbf{F}_M \mathbf{F}_{C\theta} \quad (5.9)$$

mit dem thermochemischen Deformationsgradienten

$$\mathbf{F}_{C\theta} = \mathbf{F}_C \mathbf{F}_\theta \quad . \quad (5.10)$$

Unter Berücksichtigung der Aushärtung-Volumen-Funktion  $g = 1 + \beta_C q$  und der Temperatur-Volumen-Funktion  $\varphi = 1 + \beta_\theta (\theta - \theta_0)$  ergibt sich mit den Glg. (4.75) und (4.77)

$$\mathbf{F}_{C\theta} = (g^{\frac{1}{3}} \mathbf{1}) (\varphi^{\frac{1}{3}} \mathbf{1}) = (g \varphi)^{\frac{1}{3}} \mathbf{1} \quad . \quad (5.11)$$

Nachdem der thermochemische Deformationsgradient bestimmt ist, kann aus dem Deformationsgradienten der mechanische Anteil ermittelt werden. Dieser ergibt sich ausgehend von Glg. (4.74) zu

$$\mathbf{F}_M = \mathbf{F} \mathbf{F}_{C\theta}^{-1} \quad . \quad (5.12)$$

### 5.2.2 Zwangsbedingung

Das Materialverhalten wird als mechanisch inkompressibel angenommen. In Abschnitt 2.6.2 ist dargestellt, wie die linearisierte Zwangsbedingung über die Herrmann-Formulierung berücksichtigt wird. Die dort erhaltenen Ergebnisse müssen nun auf die mechanische Inkompressibilität übertragen werden. Nach Glg. (4.80) gilt

$$F_M - 1 = \frac{F}{F_C F_\theta} - 1 = 0 \quad , \quad (5.13)$$

wobei aufgrund des angewendeten Staggered Solution Algorithmus zur Lösung der Funktionale jeweils die nicht betrachtete freie Variable konstant ist. Für die Gateaux-Ableitung der Zwangsbedingung in Richtung des Verzerrungstensors  $\mathbf{E}$  gilt analog zur Vorgehensweise in Glg. (2.92)

$$\begin{aligned} D((F_M - 1))[d\mathbf{E}] &= D\left(\left(\frac{F}{F_C F_\theta} - 1\right)\right)[d\mathbf{E}] \\ &= \frac{1}{F_C F_\theta} F \mathbf{C}^{-1} \cdot d\mathbf{E} = F_M \mathbf{C}^{-1} \cdot d\mathbf{E} \quad . \end{aligned} \quad (5.14)$$

Die daraus resultierende Elastizitätsmatrix ist auf Seite 81 dargestellt. Die Gateaux-Ableitung bezüglich der Temperatur, die in den Temperaturspannungstensor eingeht, ist nach Glg. (2.93)

$$D((F_M - 1))[d\theta] = \frac{\partial F_M}{\partial \theta} d\theta = \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \frac{F}{F_C F_\theta} \right) d\theta \quad , \quad (5.15)$$

wobei bei der Auswertung des thermischen Funktionals die Gesamtdeformation konstant ist. Damit folgt unter Berücksichtigung von Glg. (4.75)

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \frac{F}{F_C F_\theta} \right) &= \frac{F}{F_C} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \frac{1}{F_\theta} \right) \\ &= -\frac{F_M}{F_\theta} \frac{\partial F_\theta}{\partial \theta} \\ &= -F_M \frac{\varphi'}{\varphi} = -F_M \frac{\beta_\theta}{\varphi} \quad . \end{aligned} \quad (5.16)$$

Der erweiterte Temperaturspannungstensor ist somit

$$\{\Theta\} = \left\{ \Theta_{11} \quad \Theta_{22} \quad \Theta_{33} \quad \frac{1}{2}(\Theta_{12} + \Theta_{21}) \quad \frac{1}{2}(\Theta_{13} + \Theta_{31}) \quad \frac{1}{2}(\Theta_{23} + \Theta_{32}) \quad -F_M \frac{\beta_\theta}{\varphi} \right\} \quad (5.17)$$

und der zweite Piola-Kirchhoffsche Spannungstensor enthält die Zwangsbedingung, so dass

$$\{\tilde{\mathbf{T}}\} = \{ \tilde{T}_{11} \quad \tilde{T}_{22} \quad \tilde{T}_{33} \quad \tilde{T}_{12} \quad \tilde{T}_{23} \quad \tilde{T}_{13} \quad (F_M - 1) \} \quad (5.18)$$

gilt.

$$\begin{bmatrix}
 C_{1111} & C_{1122} & C_{1133} & \frac{1}{2}(C_{1112} + C_{1121}) & \frac{1}{2}(C_{1123} + C_{1132}) & \frac{1}{2}(C_{1113} + C_{1131}) & F_M C_{11}^{-1} \\
 C_{2211} & C_{2222} & C_{2233} & \frac{1}{2}(C_{2212} + C_{2221}) & \frac{1}{2}(C_{2223} + C_{2232}) & \frac{1}{2}(C_{2213} + C_{2231}) & F_M C_{22}^{-1} \\
 C_{3311} & C_{3322} & C_{3333} & \frac{1}{2}(C_{3312} + C_{3321}) & \frac{1}{2}(C_{3323} + C_{3332}) & \frac{1}{2}(C_{3313} + C_{3331}) & F_M C_{33}^{-1} \\
 \frac{1}{2} \begin{pmatrix} C_{1211}^+ \\ C_{2111} \end{pmatrix} & \frac{1}{2} \begin{pmatrix} C_{1222}^+ \\ C_{2122} \end{pmatrix} & \frac{1}{2} \begin{pmatrix} C_{1233}^+ \\ C_{2133} \end{pmatrix} & \frac{1}{4} \begin{pmatrix} C_{1212} + C_{2112}^+ \\ C_{1221} + C_{2121} \end{pmatrix} & \frac{1}{4} \begin{pmatrix} C_{1223} + C_{2123}^+ \\ C_{1232} + C_{2132} \end{pmatrix} & \frac{1}{4} \begin{pmatrix} C_{1213} + C_{2113}^+ \\ C_{1231} + C_{2131} \end{pmatrix} & F_M C_{12}^{-1} \\
 \frac{1}{2} \begin{pmatrix} C_{2311}^+ \\ C_{3211} \end{pmatrix} & \frac{1}{2} \begin{pmatrix} C_{2322}^+ \\ C_{3222} \end{pmatrix} & \frac{1}{2} \begin{pmatrix} C_{2333}^+ \\ C_{3233} \end{pmatrix} & \frac{1}{4} \begin{pmatrix} C_{2312} + C_{3212}^+ \\ C_{2321} + C_{3221} \end{pmatrix} & \frac{1}{4} \begin{pmatrix} C_{2323} + C_{3223}^+ \\ C_{2332} + C_{3232} \end{pmatrix} & \frac{1}{4} \begin{pmatrix} C_{2313} + C_{3213}^+ \\ C_{2331} + C_{3231} \end{pmatrix} & F_M C_{23}^{-1} \\
 \frac{1}{2} \begin{pmatrix} C_{1311}^+ \\ C_{3111} \end{pmatrix} & \frac{1}{2} \begin{pmatrix} C_{1322}^+ \\ C_{3122} \end{pmatrix} & \frac{1}{2} \begin{pmatrix} C_{1333}^+ \\ C_{3133} \end{pmatrix} & \frac{1}{4} \begin{pmatrix} C_{1312} + C_{3112}^+ \\ C_{1321} + C_{3121} \end{pmatrix} & \frac{1}{4} \begin{pmatrix} C_{1323} + C_{3123}^+ \\ C_{1332} + C_{3132} \end{pmatrix} & \frac{1}{4} \begin{pmatrix} C_{1313} + C_{3113}^+ \\ C_{1331} + C_{3131} \end{pmatrix} & F_M C_{13}^{-1} \\
 F_M C_{11}^{-1} & F_M C_{22}^{-1} & F_M C_{33}^{-1} & F_M C_{12}^{-1} & F_M C_{23}^{-1} & F_M C_{13}^{-1} & 0
 \end{bmatrix}$$

### 5.3 Spannungstensor

Analog zum Vorgehen in Abschnitt 1.4.4 wird der mechanische zweite Piola-Kirchhoff'sche Spannungstensor in einen Anteil resultierend aus dem hydrostatischen Druck  $p$  und einen Anteil, der aus der freien Energie  $\psi$  resultiert, zerlegt. Es folgt nach Glg. (4.84)

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbf{T}}_M &= \tilde{\mathbf{T}}_M^\psi + \tilde{\mathbf{T}}_M^p \\ &= -2 \rho_{\theta C} \int_{-\infty}^z \left( \mu_0 e^{-\frac{z-\xi}{z_0}} \mathbf{e}'_M(\xi) \right) d\xi - p F_M \mathbf{C}_M^{-1} \quad .\end{aligned}\quad (5.19)$$

Bevor der mechanische Spannungstensor in die Referenzkonfiguration überführt wird, wird der integrale Ausdruck des Anteils aus der freien Energie ausgewertet.

Aus der Annahme, das für  $t < 0$  keine Deformation stattfindet, folgt

$$\begin{aligned}{}_{n+1}\tilde{\mathbf{T}}_M^\psi &= -2 {}_{n+1}\rho_{\theta C} \int_{-\infty}^{n+1z} \left( \mu_0 e^{-\frac{n+1z-\xi}{z_0}} \mathbf{e}'_M(\xi) \right) d\xi \\ &= -2 {}_{n+1}\rho_{\theta C} \int_0^{n+1z} \left( \mu_0 e^{-\frac{n+1z-\xi}{z_0}} \mathbf{e}'_M(\xi) \right) d\xi \quad .\end{aligned}\quad (5.20)$$

Da in der User Subroutine nur der Zuwachs der Spannung berechnet werden soll, wird das Integral in zwei Teile aufgeteilt, so dass

$$\begin{aligned}{}_{n+1}\tilde{\mathbf{T}}_M^\psi &= -2 {}_{n+1}\rho_{\theta C} \left[ e^{-\frac{\Delta z_n}{z_0}} \int_0^{nz} \left( \mu_0 e^{-\frac{nz-\xi}{z_0}} \mathbf{e}'_M(\xi) \right) d\xi + \right. \\ &\quad \left. + \int_{nz}^{n+1z} \left( \mu_0 e^{-\frac{n+1z-\xi}{z_0}} \mathbf{e}'_M(\xi) \right) d\xi \right] \\ &= e^{-\frac{\Delta z_n}{z_0}} {}_n\tilde{\mathbf{T}}_M^\psi - 2 {}_{n+1}\rho_{\theta C} \int_{nz}^{n+1z} \left( \mu_0 e^{-\frac{n+1z-\xi}{z_0}} \mathbf{e}'_M(\xi) \right) d\xi\end{aligned}\quad (5.21)$$

folgt.

Die Ableitung des Piolaschen Verzerrungstensor kann durch

$$\mathbf{e}'_M(\xi) = \lim_{\Delta\xi \rightarrow 0} \frac{\Delta \mathbf{e}_M(\xi)}{\Delta\xi} = \lim_{\Delta z_n \rightarrow 0} \frac{{}_{n+1}\mathbf{e}_M - {}_n\mathbf{e}_M}{\Delta z_n}\quad (5.22)$$

angenähert werden. Damit ergibt sich

$${}_{n+1}\tilde{\mathbf{T}}_M^\psi = e^{-\frac{\Delta z_n}{z_0}} {}_n\tilde{\mathbf{T}}_M^\psi - 2 {}_{n+1}\rho_{\theta C} \mu_0 \int_{nz}^{n+1z} e^{-\frac{n+1z-\xi}{z_0}} d\xi \frac{{}_{n+1}\mathbf{e}_M - {}_n\mathbf{e}_M}{\Delta z_n}\quad (5.23)$$

und mit der Auswertung des Integrals

$$\int_{nz}^{n+1z} e^{-\frac{n+1z-\xi}{z_0}} d\xi = z_0 \left[ e^{-\frac{n+1z-\xi}{z_0}} \right]_{nz}^{n+1z} = z_0 \left( 1 - e^{-\frac{\Delta z_n}{z_0}} \right) \quad (5.24)$$

folgt

$${}_{n+1}\tilde{\mathbf{T}}_M^\psi = e^{-\frac{\Delta z_n}{z_0}} {}_n\tilde{\mathbf{T}}_M^\psi - 2 {}_{n+1}\rho_{\theta C} \mu_0 \frac{1 - e^{-\frac{\Delta z_n}{z_0}}}{\frac{\Delta z_n}{z_0}} ({}_{n+1}\mathbf{e}_M - {}_n\mathbf{e}_M) \quad . \quad (5.25)$$

Der mechanische zweite Piola-Kirchhoffsche Spannungstensor muss nun über eine pull-back Operation in die Referenzkonfiguration überführt werden. Der zweite Piola-Kirchhoffsche Tensor ergibt sich somit durch

$${}_{n+1}\tilde{\mathbf{T}} = {}_{n+1}F_{C\theta} {}_{n+1}\mathbf{F}_{C\theta}^{-1} {}_{n+1}\tilde{\mathbf{T}}_M {}_{n+1}\mathbf{F}_{C\theta}^{-T} \quad . \quad (5.26)$$

Für den hydrostatischen Anteil des Spannungstensor folgt mit den Glg. (4.14) und (4.25)

$$\begin{aligned} {}_{n+1}\tilde{\mathbf{T}}^p &= {}_{n+1}F_{C\theta} {}_{n+1}\mathbf{F}_{C\theta}^{-1} \left( - {}_{n+1}p {}_{n+1}F_M {}_{n+1}\mathbf{C}_M^{-1} \right) {}_{n+1}\mathbf{F}_{C\theta}^{-T} \\ &= - {}_{n+1}p {}_{n+1}F_{C\theta} {}_{n+1}F_M {}_{n+1}\mathbf{F}_{C\theta}^{-1} {}_{n+1}\mathbf{C}_M^{-1} {}_{n+1}\mathbf{F}_{C\theta}^{-T} \\ &= - {}_{n+1}p {}_{n+1}F {}_{n+1}\mathbf{C}^{-1} \quad . \end{aligned} \quad (5.27)$$

Mit der Definition des mechanischen Piolaschen Tensors  $\mathbf{e}_M = \frac{1}{2}(\mathbf{C}_M^{-1} - \mathbf{1})$  folgt für den Anteil aus der freien Energie des zweiten Piola-Kirchhoffschen Spannungstensors

$$\begin{aligned} {}_{n+1}\tilde{\mathbf{T}}^\psi &= {}_{n+1}F_{C\theta} {}_{n+1}\mathbf{F}_{C\theta}^{-1} \left( e^{-\frac{\Delta z_n}{z_0}} {}_n\tilde{\mathbf{T}}_M^\psi - \right. \\ &\quad \left. - {}_{n+1}\rho_{\theta C} \mu_0 \frac{1 - e^{-\frac{\Delta z_n}{z_0}}}{\frac{\Delta z_n}{z_0}} ({}_{n+1}\mathbf{C}_M^{-1} - {}_n\mathbf{C}_M^{-1}) \right) {}_{n+1}\mathbf{F}_{C\theta}^{-T} \\ &= e^{-\frac{\Delta z_n}{z_0}} {}_n\tilde{\mathbf{T}}^\psi - \\ &\quad - {}_{n+1}F_{C\theta} {}_{n+1}\rho_{\theta C} \mu_0 \frac{1 - e^{-\frac{\Delta z_n}{z_0}}}{\frac{\Delta z_n}{z_0}} {}_{n+1}\mathbf{F}_{C\theta}^{-1} ({}_{n+1}\mathbf{C}_M^{-1} - {}_n\mathbf{C}_M^{-1}) {}_{n+1}\mathbf{F}_{C\theta}^{-T} \end{aligned} \quad (5.28)$$

und mit Glg. (4.17) kann schließlich

$$\begin{aligned} {}_{n+1}\tilde{\mathbf{T}}^\psi &= e^{-\frac{\Delta z_n}{z_0}} {}_n\tilde{\mathbf{T}}^\psi - \\ &\quad - {}_{n+1}\rho_R \mu_0 \frac{1 - e^{-\frac{\Delta z_n}{z_0}}}{\frac{\Delta z_n}{z_0}} ({}_{n+1}\mathbf{C}^{-1} - {}_{n+1}\mathbf{F}_{C\theta}^{-1} {}_n\mathbf{C}_M^{-1} {}_{n+1}\mathbf{F}_{C\theta}^{-T}) \end{aligned} \quad (5.29)$$

geschrieben werden. Somit folgt für den zweiten Piola-Kirchhoffschen Spannungstensor

$$\begin{aligned}
{}_{n+1}\tilde{\mathbf{T}} &= {}_{n+1}\tilde{\mathbf{T}}^p + {}_{n+1}\tilde{\mathbf{T}}^\psi \\
&= - {}_{n+1}p {}_{n+1}\mathbf{F} {}_{n+1}\mathbf{C}^{-1} + e^{-\frac{\Delta z_n}{z_0}} {}_n\tilde{\mathbf{T}}^\psi - \\
&\quad - {}_{n+1}\rho_R \mu_0 \frac{1 - e^{-\frac{\Delta z_n}{z_0}}}{\frac{\Delta z_n}{z_0}} \left( {}_{n+1}\mathbf{C}^{-1} - {}_{n+1}\mathbf{F}_{C\theta}^{-1} {}_n\mathbf{C}_M^{-1} {}_{n+1}\mathbf{F}_{C\theta}^{-T} \right) .
\end{aligned} \tag{5.30}$$

Der aktuelle aus der freien Energie resultierende zweite Piola-Kirchhoffsche Spannungstensor wird dabei wiederum mit Hilfe der State Variables abgespeichert, so dass er beim nächsten Aufruf der Usersubroutine wieder zur Verfügung steht und die obige Gleichung ausgewertet werden kann.

## 5.4 Temperaturspannungstensor

Der Temperaturspannungstensor berechnet sich gemäß Glg. (2.37) bei konstanter Gesamtdeformation zu

$${}_{n+1}\Theta = \frac{\partial {}_{n+1}\tilde{\mathbf{T}}}{\partial \theta} . \tag{5.31}$$

Da der aus dem hydrostatischen Druck resultierende Anteil des zweiten Piola-Kirchhoffschen Tensors gemäß Glg. (5.27) allein von Größen der Gesamtdeformation abhängt, gilt

$${}_{n+1}\Theta^p = \frac{\partial {}_{n+1}\tilde{\mathbf{T}}^p}{\partial \theta} = \mathbf{0} . \tag{5.32}$$

Mit Glg. (5.11) kann für den aus der freien Energie resultierenden zweiten Piola-Kirchhoffschen Spannungstensor nach Glg. (5.29)

$${}_{n+1}\tilde{\mathbf{T}}^\psi = e^{-\frac{\Delta z_n}{z_0}} {}_n\tilde{\mathbf{T}}^\psi - {}_{n+1}\rho_R \mu_0 \frac{1 - e^{-\frac{\Delta z_n}{z_0}}}{\frac{\Delta z_n}{z_0}} \left( {}_{n+1}\mathbf{C}^{-1} - {}_{n+1}(g \varphi)^{-\frac{2}{3}} {}_n\mathbf{C}_M^{-1} \right) \tag{5.33}$$

geschrieben werden.

Um die Ableitung zu bestimmen, muss die intrinsische Zeit bezüglich ihrer Abhängigkeit von der Temperatur untersucht werden. Wie in Abschnitt dargestellt ist, ist die intrinsische Zeit über den Aushärtegrad  $q$  definiert, der wiederum über die Evolutionsgleichung in Glg. (5.1) ermittelt wird. In dieser Gleichung ist der Cauchysche Spannungstensor  $\mathbf{T}$  von der Temperatur abhängig, da dieser nur ausgehend von dem mechanischen zweiten Piola-Kirchhoffschen Tensor bestimmt werden kann und dafür der mechanische Deformationsgradient  $\mathbf{F}_M$  benötigt wird, der jedoch nur in Abhängigkeit von der Temperatur bestimmbar ist. Weil für den Materialparameter  $\lambda$  jedoch  $\lambda \lll 1$  gilt, wird diese Abhängigkeit vernachlässigt.

Da alle Größen zum Zeitpunkt  $t = {}_n t$  fest vorgegeben sind, folgt

$$\begin{aligned}
{}_{n+1}\Theta^\psi &= {}_{n+1}\Theta = \frac{\partial {}_{n+1}\tilde{\mathbf{T}}^\psi}{\partial \theta} = \frac{\partial {}_{n+1}(g \varphi)^{-\frac{2}{3}}}{\partial \theta} {}_{n+1}\rho_R \mu_0 \frac{1 - e^{-\frac{\Delta z_n}{z_0}}}{\frac{\Delta z_n}{z_0}} {}_n\mathbf{C}_M^{-1} \\
&= \frac{\partial {}_{n+1}\varphi^{-\frac{2}{3}}}{\partial \theta} {}_{n+1}g^{-\frac{2}{3}} {}_{n+1}\rho_R \mu_0 \frac{1 - e^{-\frac{\Delta z_n}{z_0}}}{\frac{\Delta z_n}{z_0}} {}_n\mathbf{C}_M^{-1}
\end{aligned} \tag{5.34}$$

und damit schließlich

$${}_{n+1}\Theta = -\frac{2}{3} \beta_\theta {}_{n+1}\varphi^{-\frac{5}{3}} {}_{n+1}g^{-\frac{2}{3}} {}_{n+1}\rho_R \mu_0 \frac{1 - e^{-\frac{\Delta z_n}{z_0}}}{\frac{\Delta z_n}{z_0}} {}_n\mathbf{C}_M^{-1} . \tag{5.35}$$

## 5.5 Tangentenoperator

Um das mechanische Funktional lösen zu können, muss nun noch der Tangentenoperator bestimmt werden. Der Übersichtlichkeit halber werden die beiden Anteile des zweiten Piola-Kirchhoffschen Spannungstensors gemäß Glg. (5.30) wieder getrennt betrachtet. Die Bildungsvorschrift für den materiellen Elastizitätstensor kann Glg. (1.106) entnommen werden.

Unter Berücksichtigung der Definition des Ableitungstensors  $\mathbb{E}$  in Glg. (1.124) ergibt sich der aus dem hydrostatischen Druck resultierende materielle Elastizitätstensor nach Glg. (1.131) zu

$${}_{n+1}\mathbb{C}^p = {}_{n+1}p {}_{n+1}\mathbf{F} \left( {}_{n+1}\mathbf{C}^{-1} \otimes {}_{n+1}\mathbf{C}^{-1} - 2 {}_{n+1}\mathbb{E} \right) \tag{5.36}$$

bzw.

$${}_{n+1}\overset{4}{\mathbf{C}}{}^p{}_{IJKL} = {}_{n+1}p {}_{n+1}\mathbf{F} \left( {}_{n+1}C_{IJ}^{-1} {}_{n+1}C_{KL}^{-1} - 2 {}_{n+1}C_{IK}^{-1} {}_{n+1}C_{JL}^{-1} \right) . \tag{5.37}$$

Der aus der freien Energie resultierende Anteil des materiellen Elastizitätstensors kann unter Berücksichtigung von Glg. (1.124) zu

$$\begin{aligned}
{}_{n+1}\mathbb{C}^\psi &= \frac{\partial {}_{n+1}\tilde{\mathbf{T}}^\psi}{\partial {}_{n+1}\mathbf{C}} = \frac{\partial}{\partial {}_{n+1}\mathbf{C}} \left( e^{-\frac{\Delta z_n}{z_0}} {}_n\tilde{\mathbf{T}}^\psi - \right. \\
&\quad \left. - {}_{n+1}\rho_R \mu_0 \frac{1 - e^{-\frac{\Delta z_n}{z_0}}}{\frac{\Delta z_n}{z_0}} \left( {}_{n+1}\mathbf{C}^{-1} - {}_{n+1}\mathbf{F}_{C\theta}^{-1} {}_n\mathbf{C}_M^{-1} {}_{n+1}\mathbf{F}_{C\theta}^{-\text{T}} \right) \right) \\
&= 2 {}_{n+1}\rho_R \mu_0 \frac{1 - e^{-\frac{\Delta z_n}{z_0}}}{\frac{\Delta z_n}{z_0}} {}_{n+1}\mathbb{E}
\end{aligned} \tag{5.38}$$

bzw.

$${}_{n+1}\overset{4}{\mathbf{C}}{}^\psi{}_{IJKL} = 2 {}_{n+1}\rho_R \mu_0 \frac{1 - e^{-\frac{\Delta z_n}{z_0}}}{\frac{\Delta z_n}{z_0}} {}_{n+1}C_{IK}^{-1} {}_{n+1}C_{JL}^{-1} \tag{5.39}$$

bestimmt werden.

Für den gesamten materiellen Elastizitätstensor kann somit

$$\begin{aligned} {}_{n+1}\mathbf{C} = {}_{n+1}\mathbf{C}^p + {}_{n+1}\mathbf{C}^\psi = {}_{n+1}p \, {}_{n+1}F \left( {}_{n+1}\mathbf{C}^{-1} \otimes {}_{n+1}\mathbf{C}^{-1} - 2 \, {}_{n+1}\mathbb{E} \right) + \\ + 2 \, {}_{n+1}\rho_R \, \mu_0 \frac{1 - e^{-\frac{\Delta z_n}{z_0}}}{\frac{\Delta z_n}{z_0}} {}_{n+1}\mathbb{E} \end{aligned} \quad (5.40)$$

geschrieben werden.

## 5.6 Wärmeleitgleichung

Um die thermomechanische Kopplung zu berücksichtigen, muss die Wärmeleitgleichung ausgewertet werden. Diese ergibt sich für diese Problemstellung nach Glg. (4.88) und unter Berücksichtigung, dass für  $t < 0$  keine Deformation auftritt zu

$$\begin{aligned} c_d \dot{\theta} = \frac{\kappa}{{}_{n+1}\rho_R} \Delta\theta - \frac{\beta_\theta (1 + \beta_C \, {}_{n+1}q)}{3 \, {}_{n+1}\rho_R} \, {}_{n+1}\theta \, \text{tr}(\dot{\mathbf{T}}) - \frac{\beta_\theta \, \beta_C}{3 \, {}_{n+1}\rho_R} \, \text{tr}({}_{n+1}\mathbf{T}) \, {}_{n+1}\theta \, \dot{q} + \\ + \frac{\dot{q}^2}{\lambda} + \int_0^{n+1z} \left( \frac{\mu_0}{z_0^2} e^{-\frac{n+1z-\xi}{z_0}} \, \text{tr}(\mathbf{e}_{Mz}(\xi)) \right) d\xi \, \dot{z}(t) \quad . \end{aligned} \quad (5.41)$$

Wie in Abschnitt 2.5.1 beschrieben ist, berücksichtigt das FE-Programm MSC.MARC von Glg. (5.41) über die Wärmekapazität  $c_d$  und die Wärmeleitzahl  $\kappa$  nur die rechte Seite und den ersten Term der linken Seite. Obwohl für die Wärmekapazität ein konstanter Wert vorgegeben wird, wird sie in der User-Subroutine HYPELA2 über die State Variable  $t(2)$  zur Verfügung gestellt, um eine Erweiterung des Programms auf eine prozessabhängige Wärmekapazität zu ermöglichen.

Die restlichen Terme müssen analog zum Vorgehen in Abschnitt 2.5.1 entsprechend Glg. (2.75) in einer allgemeinen Wärmequelle  $R$  zusammengefasst werden.

Unter Berücksichtigung von Glg. 5.1 ergibt sich somit

$$\begin{aligned} R = \underbrace{-\frac{\beta_\theta (1 + \beta_C \, {}_{n+1}q)}{3 \, {}_{n+1}\rho_R} \, {}_{n+1}\theta \, \text{tr}(\dot{\mathbf{T}})}_{R_I} - \underbrace{\frac{\beta_\theta \, \beta_C}{3 \, {}_{n+1}\rho_R} \, \text{tr}({}_{n+1}\mathbf{T}) \, {}_{n+1}\theta \, \dot{q}}_{R_{II}} + \underbrace{\frac{n\dot{q}^2}{\lambda}}_{R_{III}} + \\ + \underbrace{\int_0^{n+1z} \left( \frac{\mu_0}{z_0^2} e^{-\frac{n+1z-\xi}{z_0}} \, \text{tr}(\mathbf{e}_{Mz}(\xi)) \right) d\xi \, \dot{z}(t)}_{R_{IV}} \quad , \end{aligned} \quad (5.42)$$

wobei die einzelnen Anteile getrennt betrachtet werden sollen.

Für den ersten Anteil  $R_I$  wird die Näherung

$$\text{tr}(\dot{\mathbf{T}}) = \frac{{}_{n+1} \text{tr}(\mathbf{T}) - {}_n \text{tr}(\mathbf{T})}{\Delta t_n} \quad (5.43)$$



für die zeitliche Ableitung der Spur des Cauchyschen Spannungstensor verwendet. Der aktuelle Cauchysche Spannungstensor wird dafür aus dem zweiten Piola-Kirchhoffschen Spannungstensor mittels eine push-forward Operation

$${}_{n+1}\mathbf{T} = \frac{1}{{}_{n+1}F} {}_{n+1}\mathbf{F} {}_{n+1}\tilde{\mathbf{T}} {}_{n+1}\mathbf{F}^T \quad (5.44)$$

bestimmt und als State Variable abgespeichert, so dass der Wert beim nächsten Aufruf der User Subroutine zur Verfügung steht. Damit ergibt sich

$$R_I = -\frac{\beta_\theta}{{}_3} \frac{{}_{n+1}g}{{}_{n+1}\rho_R} {}_{n+1}\theta \frac{{}_{n+1}\text{tr}(\mathbf{T}) - {}_n\text{tr}(\mathbf{T})}{\Delta t_n} \quad (5.45)$$

Um den zweiten und den dritten Quellterm  $R_{II}$  und  $R_{III}$  zu berechnen, müssen keine weiteren Annahmen getroffen werden. Es gilt somit

$$R_{II} = -\frac{\beta_\theta \beta_C}{{}_3} \frac{\beta_C}{{}_{n+1}\rho_R} \text{tr}({}_{n+1}\mathbf{T}) {}_{n+1}\theta {}_n\dot{q} \quad (5.46)$$

und

$$R_{III} = \frac{{}_n\dot{q}^2}{\lambda} \quad (5.47)$$

Um den vierten Anteil der allgemeinen Wärmequelle

$$R_{IV} = \frac{\mu_0}{{}_2} \int_0^{{}_{n+1}z} \left( e^{-\frac{{}_{n+1}z-\xi}{{}_2}} \text{tr}(\mathbf{e}_{Mz}(\xi)) \right) d\xi \dot{z}(t) \quad (5.48)$$

zu berechnen, muss das Integral ausgewertet werden.

Mit Hilfe der partiellen Integration kann

$$\begin{aligned} \frac{\mu_0}{{}_2} \int_0^{{}_{n+1}z} \left( e^{-\frac{{}_{n+1}z-\xi}{{}_2}} \text{tr}(\mathbf{e}_{Mz}(\xi)) \right) d\xi \dot{z}(t) &= \\ &= \underbrace{\frac{\mu_0}{{}_2} \left[ z_0 e^{-\frac{z-\xi}{{}_2}} \text{tr}(\mathbf{e}_{Mz}(\xi)) \right]_0^{{}_{n+1}z}}_{R_{IVa}} \dot{z}(t) - \\ &\quad - \underbrace{\frac{\mu_0}{{}_2} z_0 \int_0^{{}_{n+1}z} \left( e^{-\frac{{}_{n+1}z-\xi}{{}_2}} \text{tr}(\mathbf{e}'_{Mz}(\xi)) \right) d\xi}_{R_{IVb}} \dot{z}(t) \end{aligned} \quad (5.49)$$

geschrieben werden, wobei wiederum die beiden entstandenen Terme einzeln betrachtet werden sollen.

Für den Quellterm  $R_{IVa}$  muss der Piolasche Verzerrungstensor zu den Zeitpunkten  $\xi = 0$  und  $\xi = {}_{n+1}z$  ausgewertet werden. Ausgehend von den Glg. (4.38), (4.40) und (4.42) gilt

$$\mathbf{e}_{Mz}(\xi) = \frac{1}{2} (\mathbf{C}_{Mz}^{-1}(\xi) - \mathbf{1}) = \frac{1}{2} (\mathbf{F}_{M(n+1)z} \mathbf{C}_M^{-1}(\xi) \mathbf{F}_{M(n+1)z}^T - \mathbf{1}) \quad . \quad (5.50)$$

Für den Zeitpunkt  $\xi = {}_{n+1}z$  folgt somit

$$\mathbf{e}_{Mz}({}_{n+1}z) = \mathbf{0} \quad \text{und damit} \quad \text{tr}(\mathbf{e}_{Mz}({}_{n+1}z)) = 0 \quad . \quad (5.51)$$

Mit der Definition des linken Cauchy-Green Tensors in Glg. (1.22) ergibt sich für den Zeitpunkt  $\xi = 0$  schließlich

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_{Mz}(0) &= \frac{1}{2} (\mathbf{F}_{M(n+1)z} \mathbf{C}_M(0) \mathbf{F}_{M(n+1)z}^T - \mathbf{1}) \\ &= \frac{1}{2} (\mathbf{F}_{M(n+1)z} \mathbf{F}_{M(n+1)z}^T - \mathbf{1}) = \frac{1}{2} ({}_{n+1}\mathbf{B}_M - \mathbf{1}) \quad . \end{aligned} \quad (5.52)$$

Für die Evolutionsgleichung der intrinsischen Zeit gilt gemäß Glg. (4.87)

$$\dot{z}(t) = 1 - {}_{n+1}q \quad , \quad (5.53)$$

womit sich der betrachtete Quellterm zu

$$R_{IVa} = -\frac{1}{2} \frac{\mu_0}{z_0} \left( e^{-\frac{{}_{n+1}z}{z_0}} \text{tr}({}_{n+1}\mathbf{B}_M - \mathbf{1}) \right) (1 - {}_{n+1}q) \quad (5.54)$$

ergibt.

Der zweite Quellterm  $R_{IVb}$  lässt sich zu

$$R_{IVb} = \frac{1}{z_0} \left\{ - \int_0^{{}_{n+1}z} \left( \mu_0 e^{-\frac{{}_{n+1}z-\xi}{z_0}} \text{tr}(\mathbf{e}'_{Mz}(\xi)) \right) d\xi \right\} \dot{z}(t) \quad (5.55)$$

umformen. Dabei kann der umklammerte Term nach Haupt u. Lion (2002) ersetzt werden, so dass sich

$$R_{IVb} = \frac{1}{z_0} \left\{ - \int_0^{{}_{n+1}z} \left( \mu_0 e^{-\frac{{}_{n+1}z-\xi}{z_0}} \mathbf{e}'_{Mz}(\xi) \cdot \mathbf{C}_M({}_{n+1}z) \right) d\xi \right\} \dot{z}(t) \quad (5.56)$$

schreiben lässt.

Weitere Umformungsschritte führen auf

$$R_{IVb} = \frac{1}{2 {}_{n+1}\rho\theta_C z_0} \left\{ -2 {}_{n+1}\rho\theta_C \int_0^{{}_{n+1}z} \left( \mu_0 e^{-\frac{{}_{n+1}z-\xi}{z_0}} \mathbf{e}'_{Mz}(\xi) \right) d\xi \right\} \cdot {}_{n+1}\mathbf{C}_M \dot{z}(t) \quad (5.57)$$

und unter Berücksichtigung der Ergebnisse der Auswertung der Clausius-Duhem-Untergleichung in Glg. (4.56) und den getroffenen Vereinfachungen gemäß Glg. (4.84) auf

$$\begin{aligned} R_{IVb} &= \frac{1}{2 \rho_{\theta C} z_0} \mathbf{\tilde{T}}_M \cdot \mathbf{C}_M \dot{z}(t) \\ &= \frac{1}{2 \rho_{\theta C} z_0} \operatorname{tr} \left( \mathbf{\tilde{T}}_M \mathbf{C}_M \right) \dot{z}(t) \end{aligned} \quad (5.58)$$

und mit Glg. (4.17) erhält man schließlich

$$R_{IVb} = \frac{F_{C\theta}}{2 \rho_R z_0} \operatorname{tr} \left( \mathbf{\tilde{T}}_M \mathbf{C}_M(z) \right) (1 - q) \quad . \quad (5.59)$$

Der mechanische zweite Piola-Kirchhoffsche Spannungstensor wird wiederum über eine push-forward Operation durch

$$\mathbf{\tilde{T}}_M = \frac{1}{F_{C\theta}} \mathbf{F}_{C\theta} \mathbf{\tilde{T}} \mathbf{F}_{C\theta}^T \quad (5.60)$$

ermittelt.

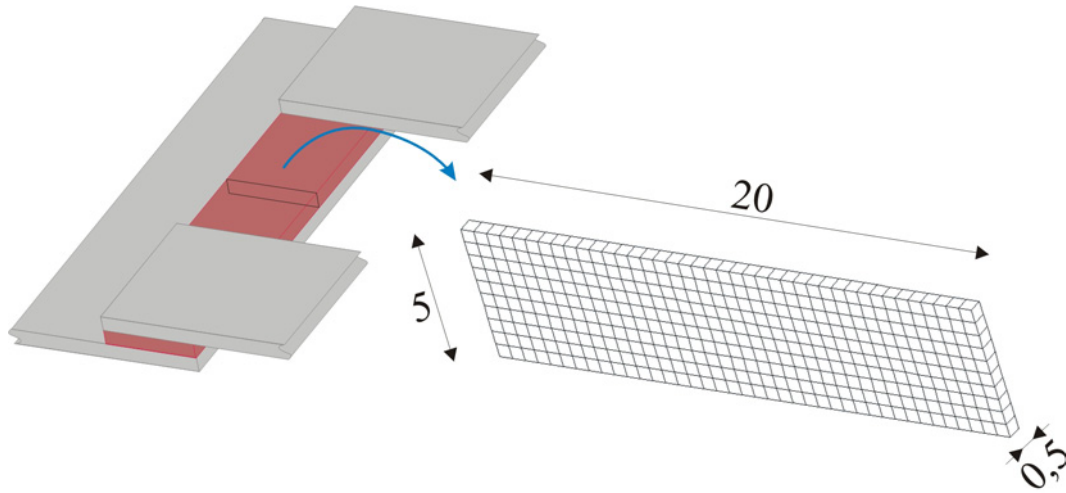


Abbildung 14: Schematische Darstellung einer überlappenden Klebeverbindung.

## 6 Auswertung anhand von Beispielsimulationen

In diesem Kapitel soll an einfachen Beispielsimulationen das implementierte Materialmodell verifiziert werden. Dazu werden verschiedene Simulationsbeispiele betrachtet und ausgewertet. Um den Rechenaufwand möglichst gering zu halten, wird die Problemstellung auf ein quasi zweidimensionales Problem reduziert. Neben dem Deformationsverhalten bei verschiedenen Belastungen wird die Temperaturentwicklung im Klebemittel betrachtet. Dazu werden eine adiabate Rechnung und eine Rechnung, bei der über die Grenzflächen Wärme abgeführt wird, durchgeführt. Bei dem Deformationsverhalten gilt das besondere Augenmerk der chemischen Schrumpfung, die durch das Modell abgebildet werden soll. Schließlich sollen kurz die auftretenden Spannungen auf ihre Plausibilität hin überprüft werden.

### 6.1 Simulationsbeispiele

Um leicht interpretierbare und verständliche Ergebnisse zu erhalten, ist es wichtig, geeignete Simulationsbeispiele zu erstellen. Ziel ist es dabei, mit möglichst geringem Aufwand möglichst aussagekräftige Ergebnisse zu bekommen. Da keine experimentellen Daten vorliegen, können die vorgenommenen Rechnungen nicht anhand experimenteller Daten verifiziert werden. Hinzu kommt, dass die Möglichkeiten ein spezielles Materialverhalten zu simulieren durch die getroffenen Vereinfachungen stark eingeschränkt sind. Eine Erweiterung ist aber ohne Weiteres möglich, wie in Abschnitt 3.2 erläutert wird. Zur Bewertung der Ergebnisse werden deshalb phänomenologische Eigenschaften herangezogen, über die die Bewertung bezüglich der grundsätzlich durch das Modell abgebildeten Eigenschaften möglich ist.

#### 6.1.1 Realisierung der FE-Rechnung

Die Beispielsimulationen werden quasi zweidimensional angelegt, damit die erhaltenen Ergebnisse leichter interpretierbar sind. Das Materialmodell ist jedoch für Volumenele-



**Abbildung 15:** Veranschaulichung der Beispielrechnungen.

- a) stumpfe Klebeverbindung
- b) überlappende Klebeverbindung zweier steifer Materialien
- c) überlappende Klebeverbindung eines steifen und eines elastischen Materials

mente implementiert, so dass allgemeine dreidimensionale Rechnungen ohne Weiteres möglich sind. Ein weiterer Vorteil bei der ausschnittswisen Betrachtung liegt in dem reduzierten Rechenaufwand.

Wie in Abb. 14 dargestellt ist, wird von einer ausreichend langen Klebenaht ausgegangen, die in dem gezeigten Beispiel eine überlappende Klebeverbindung herstellen soll. An einer beliebigen Stelle der Klebenaht, die ausreichend weit vom Anfang und Ende der Naht entfernt ist, sollen die Änderungen der Materialeigenschaften über den Querschnitt betrachtet werden. Aus Abb. 14 wird deutlich, dass dies durch einen ein-Element breiten Nahtquerschnitt realisiert werden kann. Durch dieses Vorgehen erhält man eine quasi zweidimensionale Rechnung.

Die Abmessungen des betrachteten Querschnitts können ebenfalls Abb. 14 entnommen werden. Um der Realität möglichst nahe zu kommen, wird der Freiheitsgrad in z-Richtung, also längs der Klebenaht, für alle Knoten gesperrt. Dabei wird die Annahme zu Grunde gelegt, dass eine Verschiebung in z-Richtung durch die mittige Position in Längsrichtung behindert wird. Die Verbindung des Klebemittels mit dem zu klebenden Material wird als ideal betrachtet. Für die nicht adiabate Berechnung wird weiterhin angenommen, dass die Wärmeableitung durch die umgebenden Medien konstant ist. Mit den getroffenen Annahmen ist es möglich, auf einfache Weise die elementaren Eigenschaften des implementierten Materialmodells zu überprüfen.

### 6.1.2 Beispielsimulationen

Im Folgenden sollen die Eigenschaften des implementierten Materialmodells bezüglich des Deformationsverhaltens, der Temperaturentwicklung und der auftretenden Spannungen untersucht werden. Davon ausgehend müssen geeignete Beispiele gefunden werden, um das entsprechende Verhalten auswerten zu können.

Um das Deformationsverhalten zu beurteilen, werden drei Rechnungen mit unterschiedlichen Voraussetzungen durchgeführt. Eine Übersicht der verwendeten Beispiele kann Abb. 15 entnommen werden. Die erste Rechnung simuliert die Anwendung eines Klebemittels als Dichtmittel. Die Verbindung ist dabei stumpf ausgeführt und die zu fügenden Teile sind starr, wie in Abb. 15 a) dargestellt ist. In der FE-Rechnung werden entsprechend die oberen und unteren Knoten fest eingespannt. Es wird erwartet, dass sich das Klebemittel aufgrund der chemischen Schrumpfung während des Aushärtpro-

zesses zwischen dem oberen und dem unteren Füge­teil einschnürt.

Als zweites Beispiel wird die häufigste Anwendung von Klebemitteln simuliert. Die zu fügenden Bauteile sind sehr steif und werden durch die Spannungen, die während des Klebens entstehen, nicht deformiert. Abb. 15 b) kann die Anordnung entnommen werden. Weiterhin haben die zu fügenden Bauteile einen gewissen Spielraum, der es ihnen ermöglicht sich senkrecht zum Kleber zu bewegen. Aufgrund der chemischen Schrumpfung während des Aushärteprozesses nähern sich die Bauteile in der Folge an. Diese Eigenschaften werden wieder entsprechend über die Randbedingungen in das FE-Programm eingearbeitet.

Als drittes Beispiel wird die Verbindung eines im Vergleich zum Kleber steifen und eines vergleichsweise elastischeren Materials betrachtet. Es wird davon ausgegangen, dass die während des Aushärteprozesses auftretenden Spannungen das elastischere Bauteil verformen. Dieser Fall wird idealisiert realisiert, indem die oberen Knoten nur bezüglich der Freiheitsgrade längs der Klebnaht gesperrt werden und senkrecht zur Klebnaht frei beweglich sind; Das obere Füge­teil hat somit keine Steifigkeit. Das Beispiel wird in Abb. 15 c) veranschaulicht.

Ausgangspunkt für alle weiteren Betrachtungen ist das in Abb. 15 b) dargestellte Beispiel.

Als nächstes soll die Entwicklung der Temperatur während des Aushärteprozesses betrachtet werden. Dazu wird eine adiabate Rechnung durchgeführt. Damit soll die prinzipielle Temperaturentwicklung beurteilt und eine Vergleichsrechnung erstellt werden. Anschließend wird eine Rechnung durchgeführt, in der über thermische Randbedingungen ein konstanter, kontinuierlich abfließender Wärmestrom berücksichtigt wird. Dabei wird davon ausgegangen, dass der Wärmestrom über die zu fügenden Bauteile größer ist als der über das umgebende Medium, in diesem Fall Luft. Es wird erwartet, dass sich das Klebemittel im Zuge der Aushärtung erwärmt. Daraus resultiert eine thermische Expansion, die mit der zunehmenden Abkühlung des Klebers zum Ende des Aushärteprozesses wieder abnimmt.

Als letztes sollen kurz die entstandenen Spannungen diskutiert werden. Dazu wird wieder das in Abb. 15 b) veranschaulichte Beispiel herangezogen.

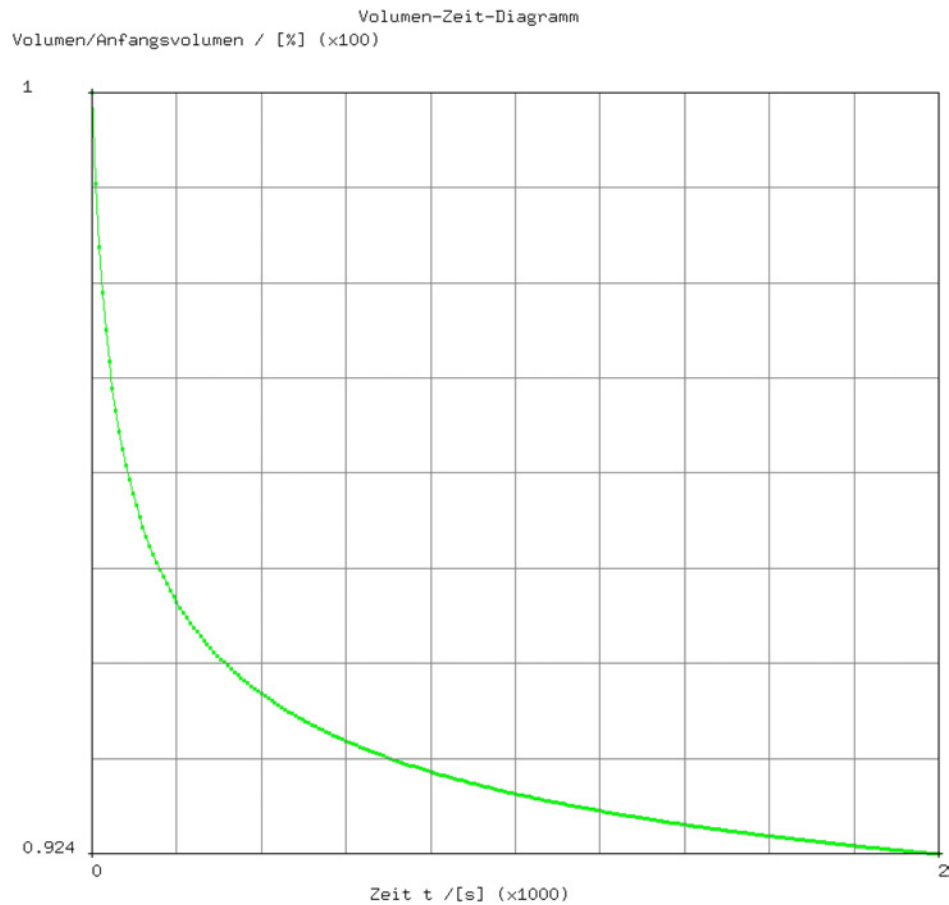
### 6.1.3 Materialparameter

Die Rechnung erstreckt sich über einen Zeitraum von 2000 s und wird in 250 Inkremente unterteilt. Die im Folgenden aufgeführten Materialparameter sind frei gewählt und nicht an experimentelle Werkstoffdaten angepasst. Sie sind jedoch so gewählt, dass die elementaren Eigenschaften des Materialverhaltens deutlich werden. Bei der FE-Rechnung wird das N-mm-s (Newton, Millimeter, Sekunde) System gewählt.

$\beta_C$ [1]	$\beta_\theta$ [1/K]	$\mu_0$ [mm <sup>2</sup> /s <sup>2</sup> ]	$z_0$ [s]	$\theta_0$ [K]	$\tau_+$ [s]	$\tau_-$ [s]	$\kappa$ [kg mm/K s <sup>3</sup> ]
-0,1	10 <sup>-4</sup>	1	10 <sup>4</sup>	290	10	10 <sup>8</sup>	0,26

$\lambda$ [1]	$\alpha$ [1]	$\beta$ [1]	$\gamma$ [1]	$m$ [1]	$n$ [1]	$\rho_R$ [kg/mm <sup>3</sup> ]	$c_d$ [mm <sup>2</sup> /K s <sup>2</sup> ]
10 <sup>-8</sup>	2	2	1	0,5	0,5	1	10 <sup>3</sup>

**Tabelle 1:** Materialparameter



**Abbildung 16:** Volumen-Zeit-Diagramm bezogen auf das Anfangsvolumen.

## 6.2 Deformationsverhalten

In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse der drei Beispielrechnungen, die in Abb. 15 veranschaulicht sind, bezüglich der Deformation erörtert. In Abb. 17 wird die jeweilige Deformation nach der Analysezeit gezeigt. Weiterhin wird in der Abbildung die zugehörige Vergleichsspannung nach von Mises dargestellt.

Für den Fall a) mit zwei starren zu fügenden Bauteilen tritt eine deutliche Einschnürung des Klebemittels auf, wie erwartet wurde. Bei der Vergleichsspannung gibt es in der linken unteren Ecke einen Ausreißer, der sich auch im FE-Netz wiederfindet. Da dieses Problem auf gegenüberliegenden Rand nicht auftritt, ist davon auszugehen, dass eine feinere Vernetzung zu einem besseren Ergebnis führt. Die größten Spannungen treten erwartungsgemäß in den am stärksten deformierten Bereichen des Klebemittels, also in allen Ecken, auf.

Im Fall b) decken sich Ergebnisse ebenfalls mit den Erwartungen bzw. mit den phänomenologischen Beobachtungen. Aufgrund der chemischen Schrumpfung bewegen sich die beiden Bauteile aufeinander zu. Gleichzeitig ist eine leichte Einschnürung des Klebemittels zu erkennen. Im Innern der Klebnaht tritt ein relativ großer homogener Spannungsbereich auf. Erwartungsgemäß ist die Spannungsbelastung am Rand und in den Ecken am größten.

Als letztes Beispiel wird nun die Anordnung c) betrachtet. Hier zeigt sich, dass der Kleber das elastischere zu fügende Bauteil verformt und ebenfalls schrumpft. Die Spannungsspitzen treten dabei in den fixierten unteren beiden Ecken auf. Nach oben hin lässt die Spannung nach, da sich das Material freier verformen kann und so geringere Zwangsspannungen induziert werden. Mit zunehmendem Abstand zur festen Einspannung wird die Spannungsverteilung homogener, d. h. der Einfluss der Randbedingung lässt mit zunehmender Entfernung zu derselben nach.

Das implementierte Materialmodell erfüllt bezüglich des Deformationsverhaltens somit alle Erwartungen. Gemäß der Vorgabe der Materialparameter in Tab. 1 muss die Schrumpfung bei vollständiger Aushärtung und Abkühlung auf die Umgebungstemperatur bei 10% liegen. Dem Diagramm in Abb. 16 kann man entnehmen, dass das Volumen im betrachteten Zeitraum prozentual auf einen Wert von 92,4% sinkt. Da das Material mechanisch inkompressibel modelliert ist und der Temperatureausdehnungskoeffizient  $\beta_\theta$  in Verbindung mit den auftretenden Temperaturen nur Volumenänderungen erzeugt, die mehrere Größenordnungen kleiner sind als die aus der Aushärtung resultierenden, kann aus dem Volumen-Zeit-Diagramm über den Zusammenhang

$$\text{Volumen} = F = F_M F_C F_\theta \approx F_C = 1 - \beta_C q \quad (6.1)$$

indirekt der Aushärtegrad bestimmt werden. Der gewählte Ansatz des Aushärtegrades zeigt für  $t \rightarrow \infty$  asymptotisches Verhalten. Dieses Verhalten überträgt sich entsprechend auf das Volumen. Mit den getroffenen Annahmen beträgt der Aushärtegrad nach  $t = 200 \text{ s}$  in etwa 0,5 und nach  $t = 1000 \text{ s}$  liegt er bei etwa 0,7.

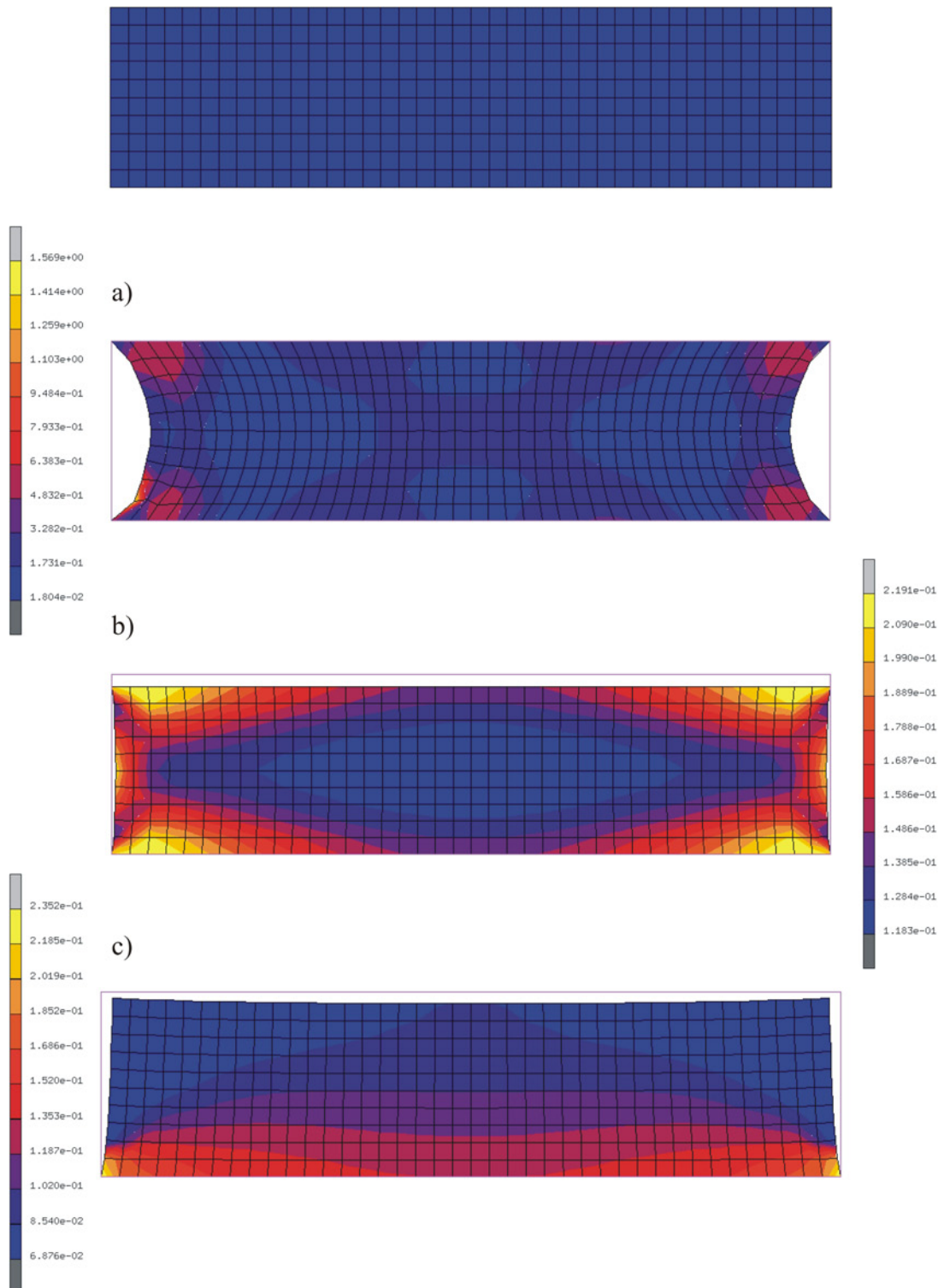
Ausgehend von dem Volumen-Zeit-Diagramm in Abb. 16 kann also festgestellt werden, dass die chemische Schrumpfung voll berücksichtigt wird.

Einige Anmerkungen müssen noch zur Erfüllung der Zwangsbedingung angefügt werden. Diese wird für Elemente in der Mitte des Netzes bei allen drei Beispielen erfüllt. Aufgrund der festen Einspannung am Rand kommt es dort zu numerischen Schwierigkeiten, die zum Abbruch des Programmes aufgrund mangelnder Konvergenz führen können. Verbesserungen werden erzielt, wenn das Netz engmaschiger gemacht wird. Trotzdem wird bei vertretbarem Rechenaufwand die Zwangsbedingung der mechanischen Inkompressibilität am Rand teilweise nicht exakt erfüllt.

### 6.3 Temperaturentwicklung

Im Folgenden wird die Temperaturentwicklung in der Klebenaht betrachtet. Als Beispielrechnung wird wieder die in Abb. 15 b) veranschaulichte Anordnung verwendet. Zuerst soll dazu ein adiabater Prozess simuliert werden. Wie in dem Temperatur-Zeit-Diagramm in Abb. 18 dargestellt ist, nimmt die Temperatur monoton zu. Der Temperaturzuwachs beträgt beim adiabaten Prozess  $\Delta\theta = 7,174 \text{ K}$  für einen Mittenknoten. Bereits nach  $\frac{1}{10}$  der Zeit, also bei  $t = 200 \text{ s}$ , treten über 90% des Temperaturanstiegs auf. Da die Rechnung adiabatisch durchgeführt wird, kann aus der Temperatur direkt auf die Wärmeentwicklung im Material geschlossen werden. In Abb. 20 ist detailliert die Temperaturverteilung am Ende der Analysezeit dargestellt. Man kann erkennen, dass sich die Temperaturen um etwa  $\frac{2}{100}$  unterscheiden. Die Ursache liegt in der Struktur





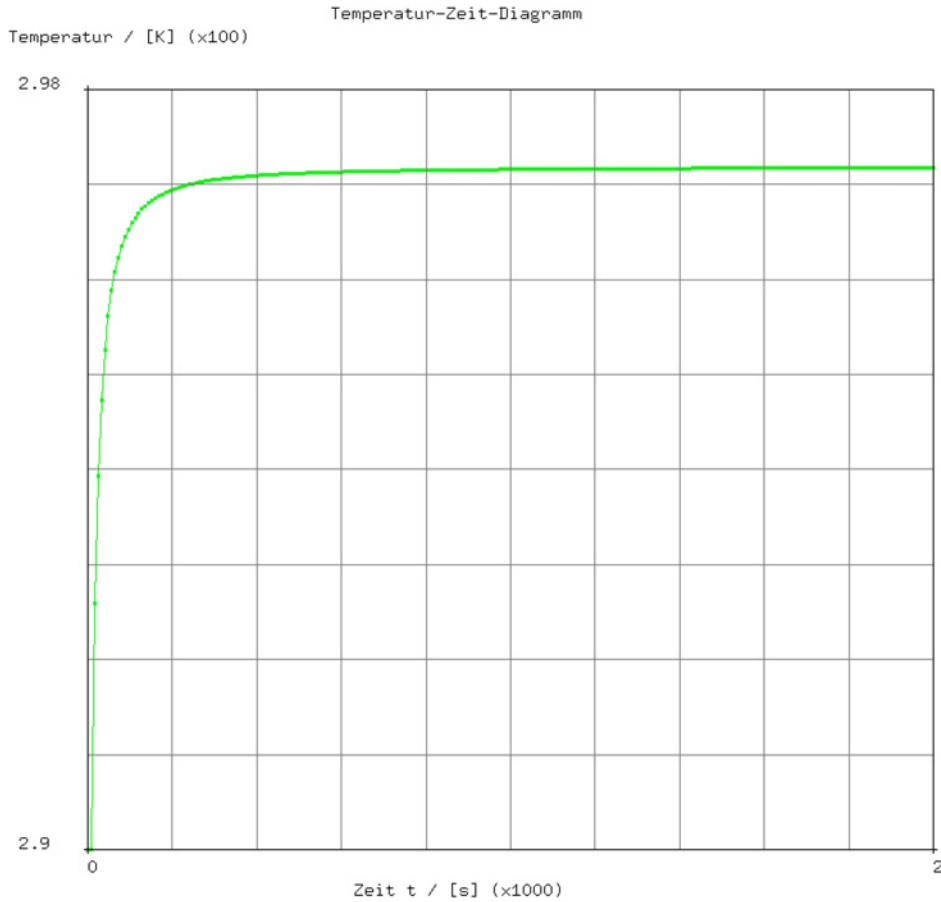
**Abbildung 17:** Darstellung des Deformationsverhaltens der verschiedenen Klebeverbindungen.

Es ist jeweils die Vergleichsspannung nach von Mises / [MPa] angegeben.

a) stumpfe Klebeverbindung

b) überlappende Klebeverbindung zweier steifer Materialien

c) überlappende Klebeverbindung eines steifen und eines elastischen Materials



**Abbildung 18:** Temperatur-Zeit-Diagramm des adiabaten Aushärteprozesses.

der allgemeinen Wärmequelle. So ist eine Abhängigkeit von der Spur des Cauchyschen Spannungstensors vorhanden. Damit spielen die auftretenden Normalspannungen bei der Temperaturentwicklung eine Rolle, so dass die Vergleichsspannung nach von Mises als Referenz wenig geeignet ist. Aus diesem Grund sind in Abb. 25 die auftretenden Normalspannungen am Ende des betrachteten Prozesses dargestellt. Man kann deutlich erkennen, dass die Summe der Normalspannungen am Rand deutlich geringer ist als in der Mitte des Materials, was sich entsprechend auf die Temperaturverteilung im Material auswirkt.

Um einen anschaulichen Vergleich zu einem nicht adiabaten Prozess zu erhalten, ist in Abb. 23 die Temperaturverteilung im Material mit zunehmender Analysezeit dargestellt. Aufgrund der gröberen Auflösung werden die eben erläuterten feinen Unterschiede nicht aufgelöst. Die Temperaturverteilung erscheint homogen. Auf Grundlage des Diagramms in Abb. 18 werden die Zeitpunkte  $t = 0 \text{ s}$ ,  $t = 80 \text{ s}$ ,  $t = 200 \text{ s}$  und  $t = 2000 \text{ s}$  betrachtet. Bei der nicht adiabaten Berechnung, die in Abb. 24 anschaulich dargestellt ist, wird zusätzlich der Zeitpunkt  $t = 1200 \text{ s}$  betrachtet, um eine anschaulichere Darstellung der Abkühlung zu erhalten.

Um der Realität möglichst nahe zu kommen, wird nun ein Aushärtevorgang simuliert, bei dem über die Grenzflächen des Klebemittels Wärme transportiert wird. Dabei wird davon ausgegangen, dass die zu fügenden Bauteile besser leiten als die Umgebung.

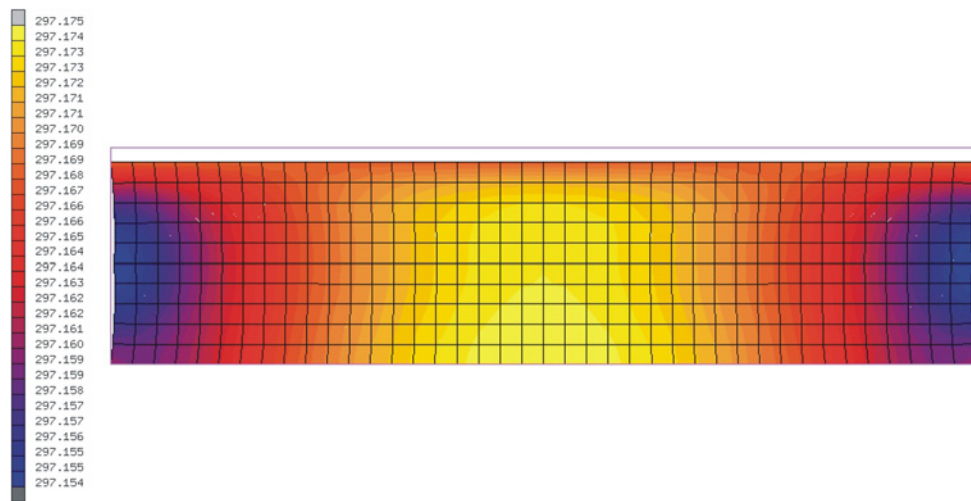


Abbildung 19: Detaillierte Temperaturverteilung am Ende des adiabaten Aushärteprozesses.

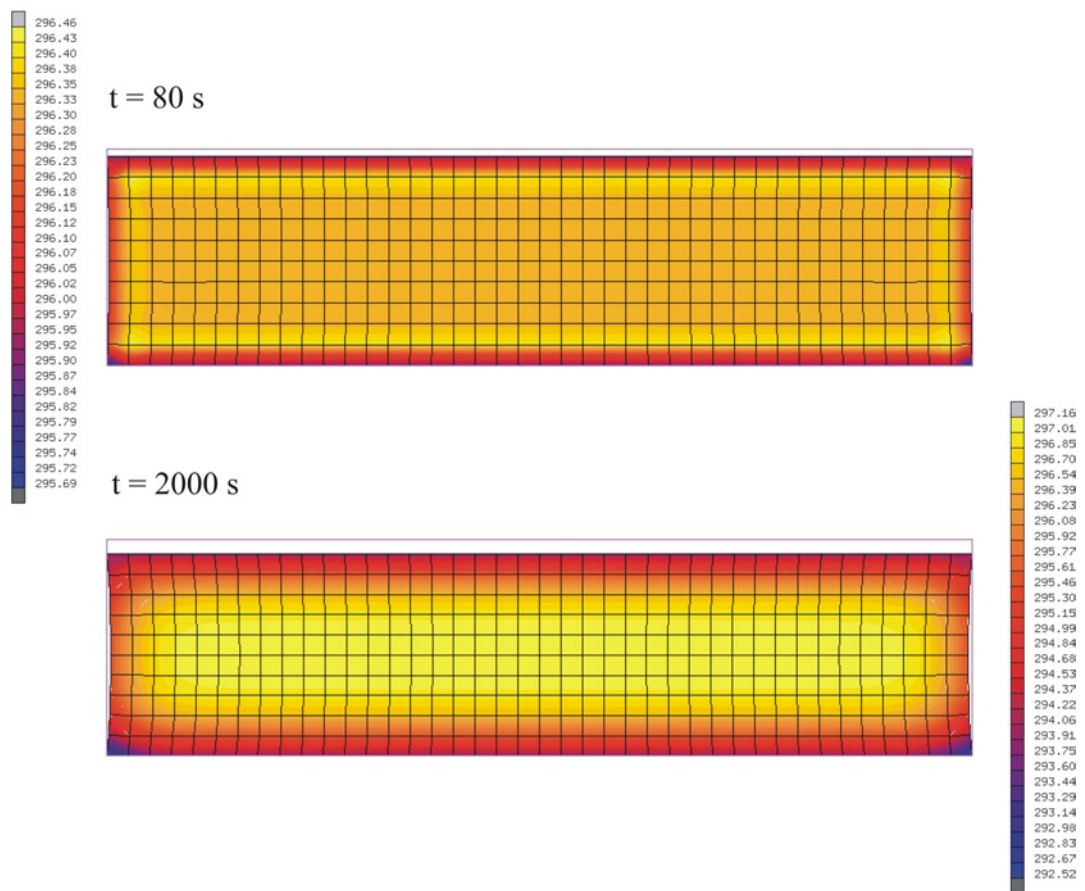
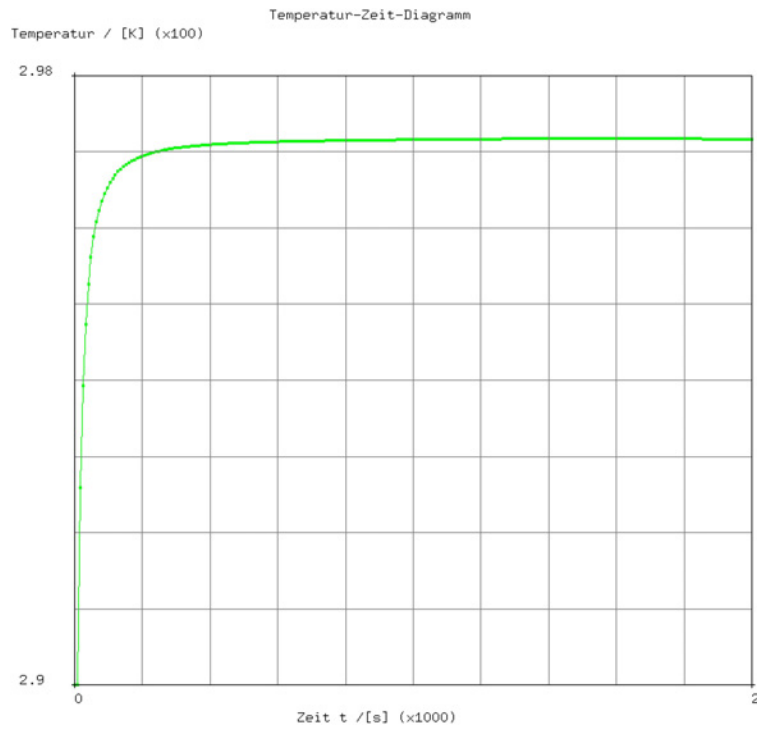
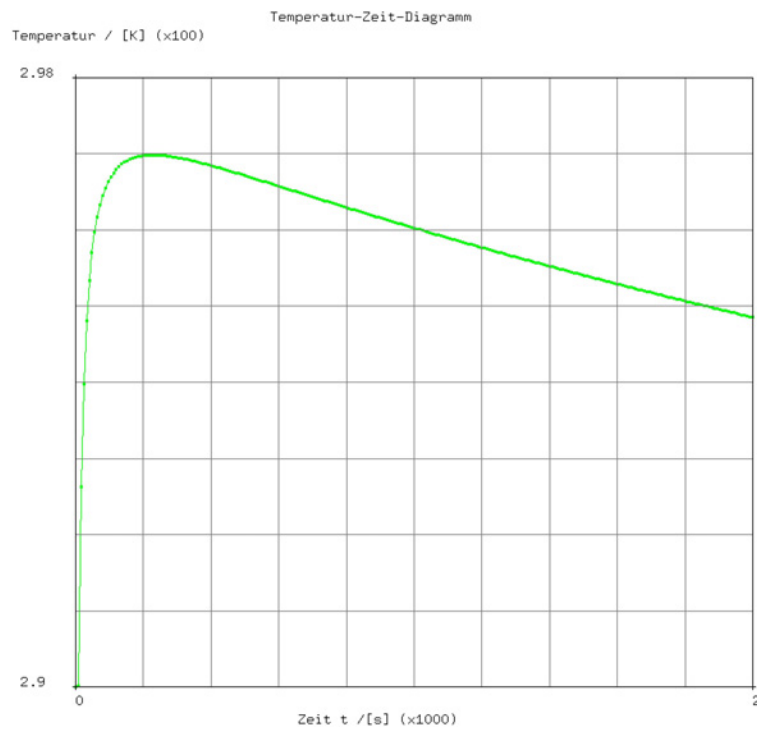


Abbildung 20: Detaillierte Temperaturverteilung während des Aushärteprozesses mit Wärmetransport.



**Abbildung 21:** Temperatur-Zeit-Diagramm eines Aushärteprozesses mit Wärmetransport. Dargestellt ist die Temperaturentwicklung in der Mitte des Materials.



**Abbildung 22:** Temperatur-Zeit-Diagramm eines Aushärteprozesses mit Wärmetransport. Dargestellt ist die Temperaturentwicklung am Rand des Materials.

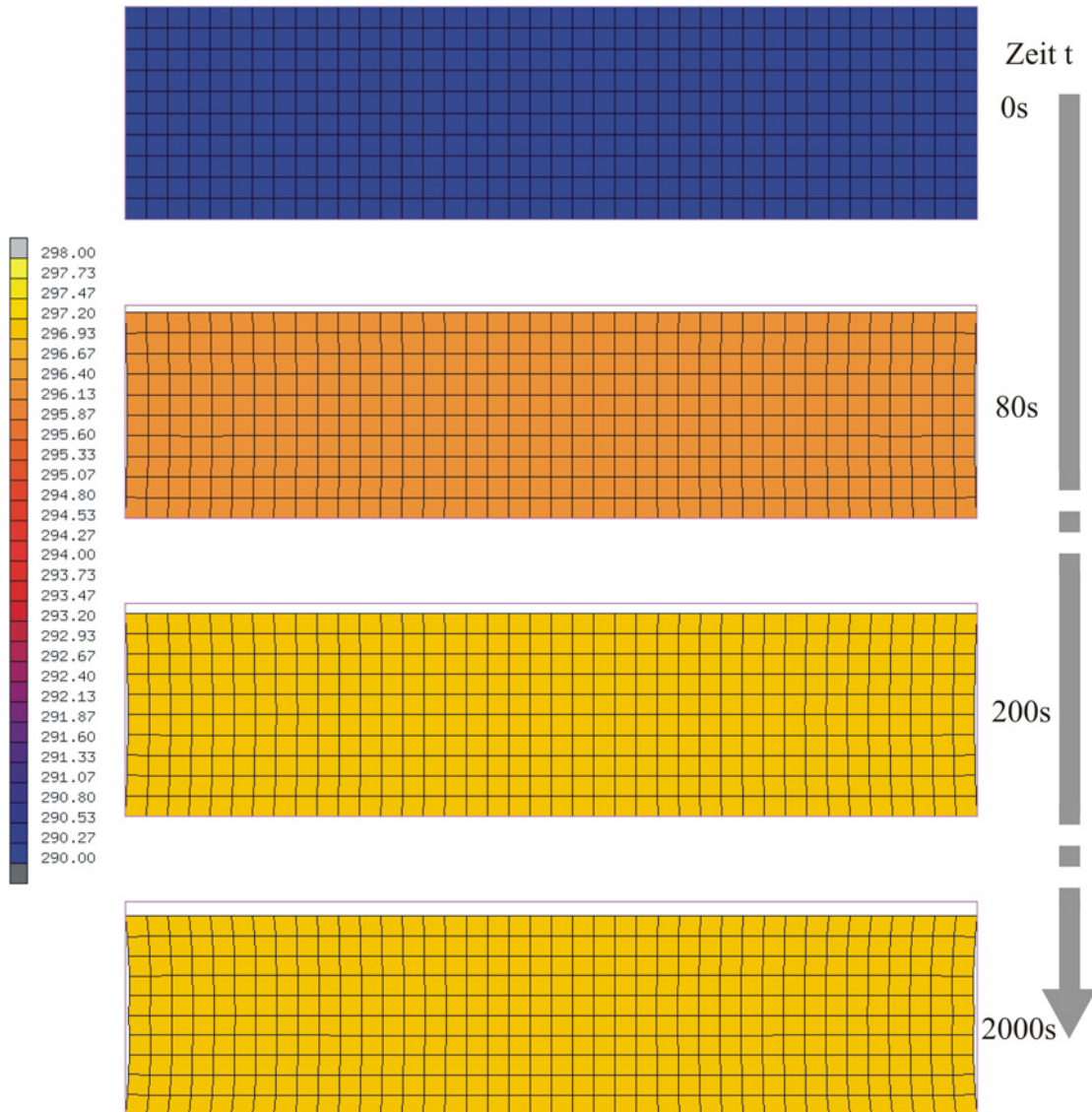
Realisiert wird dies in dem FE-Programm über thermische Randbedingungen. Die Temperaturentwicklung während des betrachteten Zeitraums kann den Diagrammen in den Abb. 21 und 22 entnommen werden.

Aufgrund des Wärmetransports treten in dem Material größere Temperaturgradienten auf, wie in Abb. 20 deutlich wird. Deswegen werden in den Diagrammen je ein Mitknoten und ein Randknoten exemplarisch für die Gesamtmenge der Knotenpunkte betrachtet. Der Kern bzw. die Mitte der Klebnaht verhält sich bei der Temperaturentwicklung wie bei der adiabaten Rechnung. Lediglich gegen Ende der Analysezeit tritt ein leichter Temperaturabfall auf. Die maximale Temperatur beträgt wie bei der adiabaten Rechnung  $\theta = 297,17 \text{ K}$ .

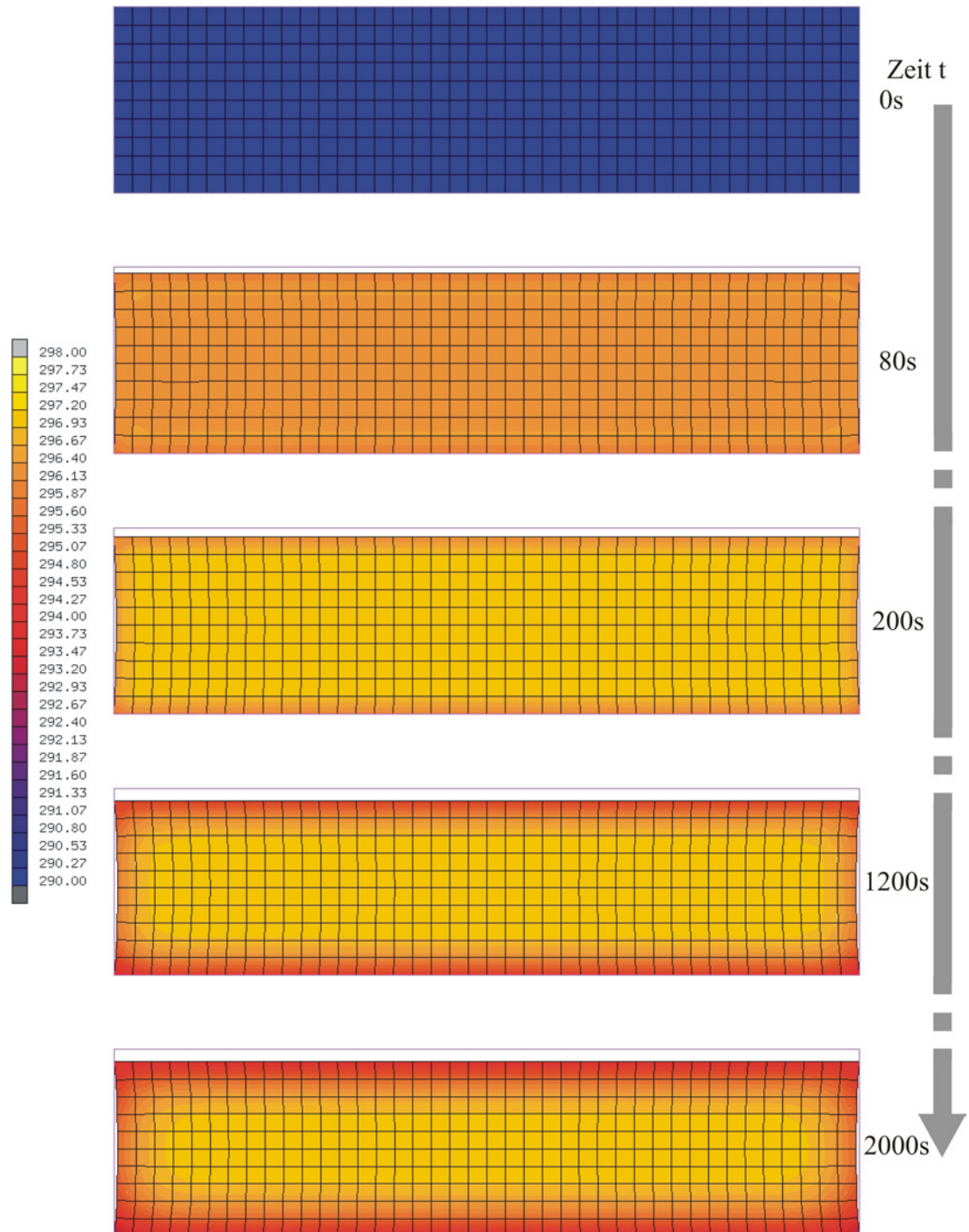
Am Rand verhält sich die Temperatur anders. Im Gegensatz zur Mitte wirkt sich die Wärmeleitung schon zu Beginn der Aushärtung auf die Temperaturentwicklung aus. So wird nur eine maximale Temperatur von  $\theta = 296,98 \text{ K}$  erreicht. Nach etwa  $200 \text{ s}$ , während die Temperatur im adiabaten Vergleichsprozess nahezu stagniert, also nur noch geringe Wärmemengen produziert werden, fällt die Temperatur stetig ab. Betrachtet man die Änderung der Temperaturverteilung zum Zeitpunkt  $t = 80 \text{ s}$  während der Erwärmung und zum Ende des Analyseprozesses, wie in Abb. 20 dargestellt ist, wird sofort deutlich, dass immer ein Temperaturgradient vorhanden ist. Während der Erwärmung, die verhältnismäßig gleichmäßig verläuft, wie der adiabate Vergleichsprozess zeigt, sind die Temperaturunterschiede jedoch wesentlich weniger stärker ausgeprägt als im fortgeschrittenen Stadium der Abkühlung, in dem der Rand schon fast wieder die Umgebungstemperatur angenommen und nur noch ein kleiner Teil des Kerns die ursprüngliche Temperatur beibehalten hat. Die Temperaturentwicklung verhält sich während dem gesamten Analyseprozess den Erwartungen entsprechend.

Um die Erwärmung und die Abkühlung während des Analyse anschaulich darzustellen und vergleichbar zu machen, ist die Temperaturverteilung an ausgewählten Zeitpunkten für die adiabate und die nicht adiabate Simulation in den Abb. 23 und 24 dargestellt. Während bei der adiabaten Rechnung die auftretenden Temperaturunterschiede so gering sind, dass die Temperatur bei der gewählten Auflösung homogen erscheint, sind bei der nicht adiabaten Rechnung deutliche Temperaturgradienten zu erkennen. Bereits während der Erwärmung des Materials treten diese sichtbar auf, wie am Zeitpunkt  $t = 200 \text{ s}$  deutlich wird.

Für  $t > 200 \text{ s}$  wird fast keine Wärme mehr produziert. Die Temperatur im adiabaten Prozess bleibt nun nahezu konstant, während bei der Rechnung mit Wärmetransport deutlich die fortschreitende Abkühlung sichtbar wird.



**Abbildung 23:** Temperaturentwicklung im Klebemittel während des adiabaten Aushärteprozesses.



**Abbildung 24:** Temperaturentwicklung im Klebemittel während eines Aushärteprozesses. Über die Grenzflächen des Klebemittels findet Wärmetransport statt.

## 6.4 Spannungen

Die auftretenden Spannungen sind in den Abb. 25 und 26 dargestellt. Außerdem ist in Abb. 17 für verschiedene Beispiele die Vergleichsspannung nach von Mises dargestellt. Zur Überprüfung dieser Werte liegen keine experimentellen Daten vor, so dass die Ergebnisse nur auf ihre Plausibilität hin geprüft werden können. Die Materialparameter sind so gewählt, dass Spannungen im Bereich weniger MPa auftreten.

Betrachtet man die Vergleichsspannung nach von Mises in Abb. 17 sind die Spannungen an der Einspannung und am Rand am größten und nähern sich mit zunehmender Entfernung zum Rand bzw. zur Einspannung in der Mitte einem Grundwert an, da hier die einzelnen Elemente fast identische Deformationen aufweisen. Für den Fall, dass beide Fügepartner starr sind, treten dabei die größten Vergleichsspannungen auf. Die auftretenden Spannungsverteilungen erscheinen entsprechend plausibel.

Die Homogenität der Spannungen in der Mitte der betrachteten Klebnaht zeigt sich auch bei den einzelnen Komponenten des zweiten Piola-Kirchhoffschen Spannungstensors für die Beispielrechnung nach Abb. 15 b), die in den Abb. 25 und 26 aufgeschlüsselt sind.

Die Normalspannung in x-Richtung ist mittig an den Einspannungen am größten. Gleiches gilt für die Normalspannungen in y- und z- Richtung. Aufgrund der chemischen Schrumpfung im Zuge der Aushärtung sind die hier auftretenden Zwangsspannungen am größten. In Richtung des freien Randes lassen die Spannungen dann nach, da das Material durch die Einschnürung weniger belastet ist.

Die Normalspannungen in x- und z- Richtung unterscheiden sich im Wert und in der Verteilung kaum, so dass davon ausgegangen werden kann, dass sie hauptsächlich aus dem hydrostatischen Druck resultieren.

Die Normalspannungen in y-Richtung sind jedoch um den Faktor drei kleiner als die anderen Normalspannungen. Im Bereich des freien Randes treten sogar Druckspannungen auf. Dies liegt zum einen an dem oberen Füge teil, das sich nicht verformt und so nur eben beweglich ist. Aufgrund der unterschiedlich ausgeprägten Spannungen wird das Füge teil sich in einer Gleichgewichtslage befinden, so dass zusätzliche Spannungen entstehen, die sich dem hydrostatischen Druck überlagern. Zum anderen werden die Elemente an den äußeren freien Rändern, ähnlich wie bei einem Biegebalken, durch die Einschnürung zusammengedrückt, so dass zusätzliche Druckspannungen entstehen. Die Spannungsverteilungen erscheinen somit realistisch.

Die Schubspannungsbeanspruchung kann Abb. 26 entnommen werden. Die Schubspannungen  $\tilde{T}_{yz}$  und  $\tilde{T}_{xz}$  sind unter Berücksichtigung der numerischen Genauigkeit Null. Die Schubspannung  $\tilde{T}_{xy}$  hat die größten Werte an den Übergängen der freien zu den eingespannten Rändern, da hier die Unterschiede der Normalspannungen am größten sind.

Die Schubspannungen erscheinen ebenso bezüglich der Verteilung und der Werte realistisch.



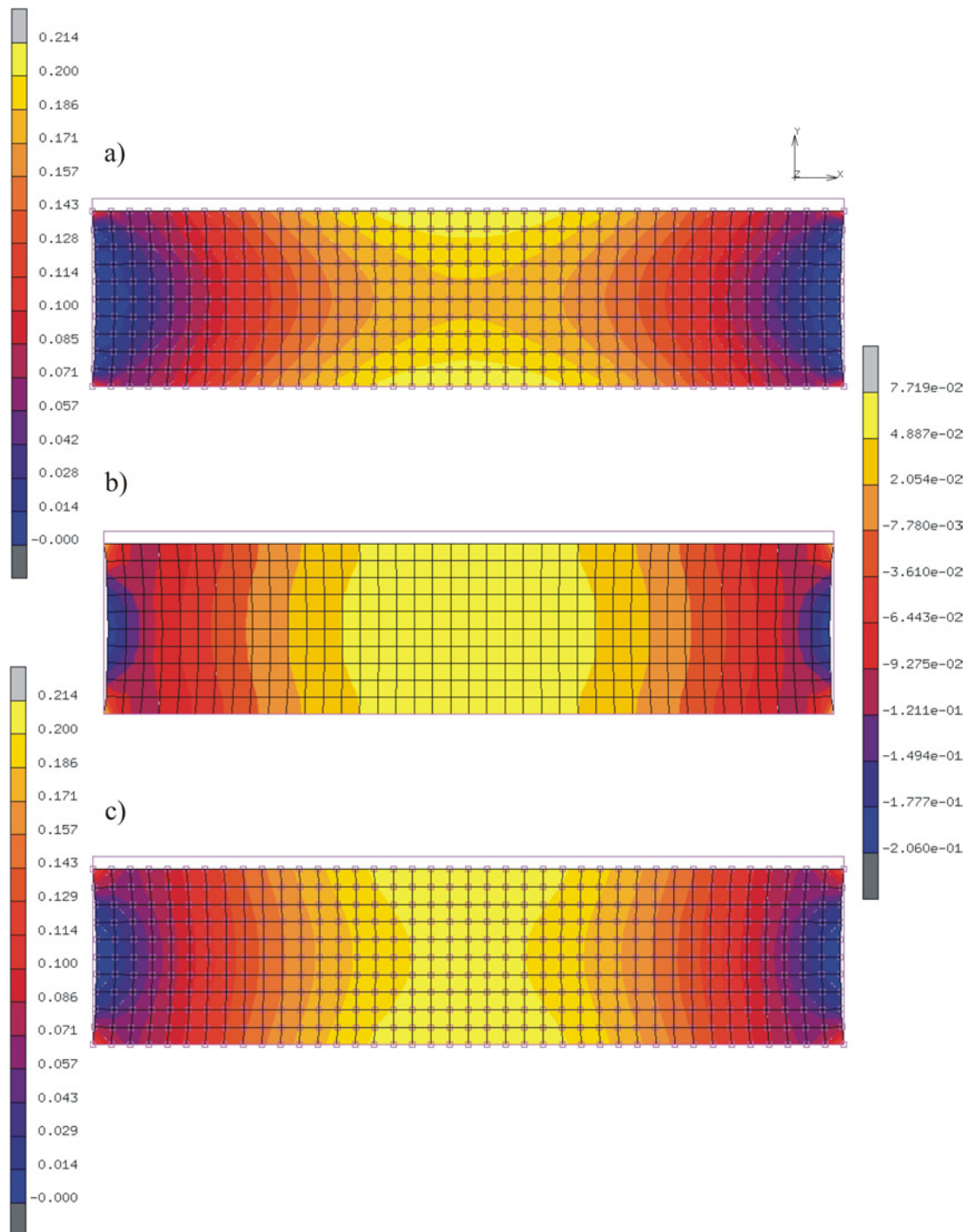


Abbildung 25: Spannungen / [MPa] entlang der Achsen. a)  $\tilde{T}_{xx}$  b)  $\tilde{T}_{yy}$  c)  $\tilde{T}_{zz}$

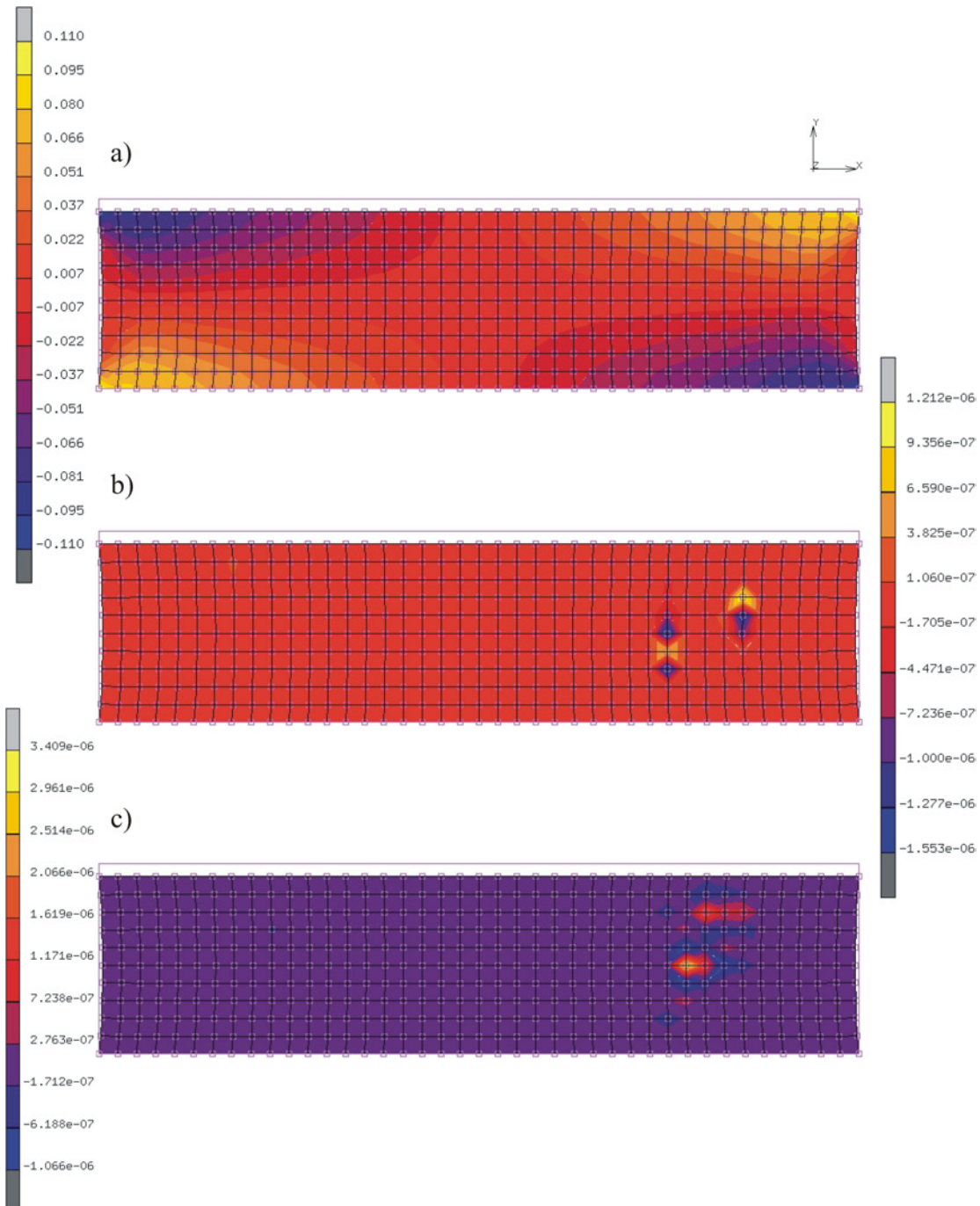


Abbildung 26: Schubspannungen / [MPa]. a)  $\tilde{T}_{xx}$  b)  $\tilde{T}_{yy}$  c)  $\tilde{T}_{zz}$

## 7 Diskussion und Ausblick

In dieser Arbeit wird ein am Institut für Mechanik in Entwicklung befindliches Materialmodell, das die Thermomechanik von Aushärtévorgängen beschreibt, in das kommerzielle FE-Programm MSC.MARC implementiert.

Ein wesentlicher Vorteil des Materialmodells ist seine thermomechanische Konsistenz, d. h. der zweite Hauptsatz der Thermodynamik in Form der Clausius-Duhem-Ungleichung wird erfüllt. Durch das Materialmodell werden die wesentlichen Eigenschaften eines Aushärtéprozesses beschrieben. Es bildet die Schrumpfung aufgrund der Phasenumwandlung von einem viskosen Fluid zu einem viskoelastischen Festkörper, thermisch induzierte Volumenänderungen und die aus der chemischen Reaktion sowie dissipativen Prozessen resultierende Wärmeentwicklung ab. Außerdem werden die während der Aushärtung entstehenden Spannungen ermittelt.

Das Ziel der Modellierung ist es, eine effektive Simulation von Klebeverbindungen zu ermöglichen, um bereits früh während eines Entwicklungsprozesses belastbare Aussagen über den Einsatz von Kleber in Form von Klebepunkten oder -nähten zu gewinnen.

Dies kann aber nur gelingen, wenn das Materialmodell dem Anwender in geeigneten und üblichen Berechnungsprogrammen zur Verfügung gestellt wird. Dazu wird das Materialmodell in dieser Arbeit in das kommerzielle FE-Programm MSC.MARC implementiert. Als erstes müssen dafür die konstitutiven Gleichungen umgeformt, ggf. linearisiert und an die Gegebenheiten des Programmes angepasst werden. Ein besonderes Augenmerk liegt dabei auf der thermomechanischen Kopplung, die für das Materialmodell berücksichtigt werden muss.

Anschließend werden verschiedene Beispielrechnungen durchgeführt und ausgewertet mit dem Ziel, die Programmierung und die Möglichkeiten des Materialmodells zu bewerten.

Um die Fehleranalyse möglichst einfach zu gestalten, werden in dieser Arbeit verschiedene Vereinfachungen getroffen, die jedoch nicht die oben beschriebenen grundsätzlichen Eigenschaften des Materialmodells betreffen. So wird für die Implementierung eine einfache exponentielle Relaxationsfunktion gewählt. In dieser Form ist das Programm bzw. Materialmodell somit noch nicht geeignet, ein reales Material darzustellen. Ausgehend von dem mit diesem Programm zur Verfügung gestellten Gerüst ist es jedoch ohne großen Aufwand möglich, die notwendigen Erweiterungen vorzunehmen.

Die Auswertung der Beispielrechnungen kann nicht auf experimentelle Daten gestützt werden, da solche am Institut nicht vorhanden sind. Sie muss sich also darauf beschränken, die Beispielrechnungen auf Grundlage der Phänomenologie von Klebstoffen zu bewerten.

In dieser Arbeit ist es gelungen das Materialmodell vollständig mit allen wesentlichen Eigenschaften in das FE-Programm MSC.MARC für HEX8 Volumenelemente mit Herrmann-Formulierung zu implementieren. Somit ist es möglich beliebige Geometrien numerisch zu berechnen. Die Ergebnisse der anschließenden Beispielrechnungen decken sich zudem sehr gut mit dem erwarteten Materialverhalten.

Mit der Implementierung des Materialmodells in das kommerzielle FE-Programm besteht nun die Möglichkeit anwenderfreundlich Aushärtéprozesse vollständig zu simulieren.

Diese Arbeit legt aber nur die Grundlagen einer effizienten Simulation von Klebeverbindungen. Als weitere Schritte werden folgende Punkte vorgeschlagen:

- In einem ersten Schritt sollten die getroffenen Vereinfachungen fallen gelassen werden. Damit wird die Basis zur Simulation realer Klebeverbindungen geschaffen.
- Anschließend sollte es auf Grundlage gewonnener experimenteller Daten verifiziert werden. Nur so kann sicher gestellt werden, dass das Materialmodell das reale Materialverhalten in geeigneter Weise beschreibt.
- Sollten die vorangestellten Punkte erfüllt sein, würde es sich anbieten, komplexere Strukturen zu berechnen und die Voraussagen experimentell zu verifizieren.

## A Grundlagen der Tensoralgebra

Ziel dieses Kapitels ist es, dem Leser die mathematische Notation zur Verfügung zu stellen, die in dieser Arbeit verwendet wird. Weiterhin sollen Zusammenhänge und Rechenregeln, die in der Arbeit mehrfach benötigt werden, zur Verfügung gestellt werden.

### A.1 Anmerkungen zur Notation

In dieser Arbeit werden einzelne Größen zur Veranschaulichung durch die Indexschreibweise ausgedrückt. Für diese gilt die Einsteinsche Summationskonvention. Treten in einem Produkt zwei gleiche lateinische Indizes auf, so wird über diese von 1 bis 3 summiert:

$$a_i \mathbf{e}_i = a_j \mathbf{e}_j = \sum_{j=1}^3 a_j \mathbf{e}_j \quad . \quad (\text{A.1})$$

Weiterhin wird über das einfache Skalarprodukt zweier Basisvektoren das Kronecker-Delta

$$\mathbf{e}_i \mathbf{e}_j = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{für } i = j \\ 0 & \text{für } i \neq j \end{cases} \quad (\text{A.2})$$

eingeführt. Bei dem Skalarprodukt wird im Folgenden zwischen dem einfachen und dem doppelten Skalarprodukt unterschieden. Das einfache Skalarprodukt wird durch das Weglassen eines Operators ausgedrückt, das doppelte Skalarprodukt durch die Verwendung eines Punktes als Operator.

Nach der Einsteinschen Summationskonvention gilt

$$\delta_{ii} = \delta_{11} + \delta_{22} + \delta_{33} = 3 \quad . \quad (\text{A.3})$$

Die Wirkung des Kronecker-Deltas besteht darin, dass in dem entsprechenden Term ein Index ausgetauscht wird, wie beim einfachen Skalarprodukt zweier Vektoren:

$$(a_i \mathbf{e}_i) (b_j \mathbf{e}_j) = a_i b_j \delta_{ij} = a_i b_i \quad . \quad (\text{A.4})$$

Das Kreuzprodukt zweier Basisvektoren führt schließlich auf das Permutationssymbol und damit auf den in dieser Arbeit eingeführten Permutationstensor  $\varepsilon$

$$\mathbf{e}_i \times \mathbf{e}_j = \varepsilon_{ijk} \mathbf{e}_k \quad (\text{A.5})$$

mit

$$\varepsilon_{ijk} = \begin{cases} +1 & \text{für } ijk \text{ gerade Permutation} \\ -1 & \text{für } ijk \text{ ungerade Permutation} \\ 0 & \text{für zwei gleiche Indizes} \end{cases} \quad . \quad (\text{A.6})$$

## A.2 Produkte von Tensoren

### A.2.1 Skalarprodukt

In dieser Arbeit werden das einfache und das doppelte Skalarprodukt benötigt, die im Folgenden eingeführt werden.

**Einfaches Skalarprodukt** Das einfache Skalarprodukt wird durch keinen Operator kenntlich gemacht. Bei dem einfachen Skalarprodukt werden die zueinander stehenden Basisvektoren skalar gebunden. Für das einfache Skalarprodukt zweier Vektoren gilt somit

$$\mathbf{a} \mathbf{b} = (a_i \mathbf{e}_i) (b_j \mathbf{e}_j) = a_i b_j \delta_{ij} = a_i b_i \quad . \quad (\text{A.7})$$

Die einfache skalare Verknüpfung eines Tensors zweiter Stufe mit einem Vektor

$$\mathbf{c} = \mathbf{A} \mathbf{b} = (A_{ij} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j) (b_k \mathbf{e}_k) = A_{ij} b_k \delta_{jk} \mathbf{e}_i = A_{ij} b_j \mathbf{e}_i \quad (\text{A.8})$$

veranschaulicht, dass der Tensor zweiter Stufe als linearer Operator interpretiert werden kann.

Für das einfache Skalarprodukt zweier Tensoren zweiter Stufe gilt entsprechend

$$\mathbf{A} \mathbf{B} = (A_{ij} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j) (B_{kl} \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l) = A_{ij} B_{kl} \delta_{jk} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_l = A_{ij} B_{jl} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_l \quad . \quad (\text{A.9})$$

Für das einfache Skalarprodukt gelten Kommutativität, Assoziativität bei Skalarmultiplikationen und Distributivität.

**Doppeltes Skalarprodukt** Das doppelte Skalarprodukt wird durch die Verwendung eines Punktes als Operator kenntlich gemacht. Wie der Name schon sagt, werden beim doppelten Skalarprodukt jeweils zwei Basisvektoren skalar gebunden. Diese Operation ist somit erst für Tensoren größer oder gleich der zweiten Stufe möglich. Für das doppelte Skalarprodukt zwischen zwei Tensoren zweiter Stufe gilt

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = (A_{ij} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j) \cdot (B_{kl} \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l) = A_{ij} B_{kl} \delta_{ik} \delta_{jl} = A_{ij} B_{ij} \quad . \quad (\text{A.10})$$

Mit der Definition der Einheitsmatrix

$$\mathbf{1} = \delta_{ij} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \quad (\text{A.11})$$

folgt

$$\begin{aligned} [\mathbf{B}^T \mathbf{A}] \cdot \mathbf{1} &= [(B_{ji} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j) (A_{kl} \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l)] \cdot (\delta_{mn} \mathbf{e}_m \otimes \mathbf{e}_n) \\ &= (B_{ji} A_{kl} \delta_{jk} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_l) \cdot (\delta_{mn} \mathbf{e}_m \otimes \mathbf{e}_n) \\ &= B_{ji} A_{jl} \delta_{mn} \delta_{im} \delta_{ln} = B_{jn} A_{jn} \quad . \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

womit

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = [\mathbf{B}^T \mathbf{A}] \cdot \mathbf{1} \quad (\text{A.13})$$

geschrieben werden kann.

Das Skalarprodukt eines Tensors vierter Stufe mit einem Tensor zweiter Stufe ist dann entsprechend

$$\mathbb{A} \cdot \mathbf{B} = (A_{ijkl} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l) \cdot (B_{mn} \mathbf{e}_m \otimes \mathbf{e}_n) = A_{ijkl} B_{kl} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \quad . \quad (\text{A.14})$$

### A.2.2 Kreuzprodukt

Das Kreuzprodukt wird durch Operator  $\times$  gekennzeichnet. Für das Kreuzprodukt zweier Vektoren gilt

$$\mathbf{a} \times \mathbf{b} = a_i b_j \epsilon_{ijk} \mathbf{e}_k = \begin{bmatrix} a_2 b_3 - a_3 b_2 \\ -a_1 b_3 + a_3 b_1 \\ a_1 b_2 - a_2 b_1 \end{bmatrix} \quad . \quad (\text{A.15})$$

### A.2.3 Dyadische Verknüpfung

Die dyadische Verbindung wird durch den Operator  $\otimes$  zum Ausdruck gebracht und wird

$$\mathbf{A} = \mathbf{a} \otimes \mathbf{b} \quad \text{bzw.} \quad \mathbb{A} = \mathbf{A} \otimes \mathbf{B} \quad (\text{A.16})$$

geschrieben. Die Verknüpfung ist dabei durch

$$\mathbf{A} = (a_i \mathbf{e}_i) \otimes (b_j \mathbf{e}_j) = a_i b_j (\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j) \quad (\text{A.17})$$

$$A_{ij} = a_i b_j \quad (\text{A.18})$$

bzw.

$$\mathbb{A} = (A_{ij} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j) \otimes (B_{kl} \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l) = A_{ij} B_{kl} (\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l) \quad (\text{A.19})$$

$$\overset{4}{\mathbb{A}}_{ijkl} = A_{ij} B_{kl} \quad (\text{A.20})$$

definiert.

Es kann nachgewiesen werden, dass

$$(\mathbf{a} \otimes \mathbf{b}) \mathbf{c} = \mathbf{a} (\mathbf{b} \mathbf{c}) \quad (\text{A.21})$$

gilt.

### A.3 Transponierte und Inverse

Die Transponierte eines Tensor der geraden Stufe  $2n$  ist durch

$$\begin{aligned} \mathbf{A}^T &= (a_1 \ a_2 \ \dots \ a_{2n}) (\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_2 \ \dots \otimes \mathbf{e}_{2n}) \\ &= (a_{n+1} \ \dots \ a_{2n} \ a_1 \ \dots \ a_n) (\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_2 \ \dots \ \mathbf{e}_n \otimes \mathbf{e}_{n+1} \ \dots \ \mathbf{e}_{2n}) \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

und die Inverse eines Tensors ist durch

$$\mathbf{A}^{-1} \mathbf{A} = \mathbf{1} \quad (\text{A.23})$$

definiert.

Für Tensoren vierter Stufe wird die spezielle Transposition  $T_{ij}$  eingeführt, die zum Ausdruck bringt, dass der  $i$ -te und der  $j$ -te Index vertauscht werden. Ein einfaches Skalarprodukt dreier Tensoren zweiter Stufe, kann somit zu

$$\begin{aligned} \mathbf{A} \mathbf{C} \mathbf{B} &= [\mathbf{A} \otimes \mathbf{B}]^{T_{24}} \cdot \mathbf{C}^T \\ &= [\mathbf{A} \otimes \mathbf{B}^T]^{T_{23}} \cdot \mathbf{C} \\ &= [\mathbf{B} \otimes \mathbf{A}]^{T_{13}} \cdot \mathbf{C}^T \\ &= [\mathbf{B} \otimes \mathbf{A}^T]^{T_{14}} \cdot \mathbf{C} \end{aligned} \quad (\text{A.24})$$

umgeformt werden. Bei der Herleitung von Tangentenoperatoren können mit Hilfe dieser Beziehungen die entstandenen Ausdrücke vereinfacht werden.



A.4 Abgewandelte Elastizitätsmatrix eines FE-Programmes

$$\begin{bmatrix}
 C_{1111} & C_{1122} & C_{1133} & \frac{1}{2}(C_{1112} + C_{1121}) & \frac{1}{2}(C_{1123} + C_{1132}) & \frac{1}{2}(C_{1113} + C_{1131}) \\
 C_{2211} & C_{2222} & C_{2233} & \frac{1}{2}(C_{2212} + C_{2221}) & \frac{1}{2}(C_{2223} + C_{2233}) & \frac{1}{2}(C_{2213} + C_{2231}) \\
 C_{3311} & C_{3322} & C_{3333} & \frac{1}{2}(C_{3312} + C_{3321}) & \frac{1}{2}(C_{3323} + C_{3332}) & \frac{1}{2}(C_{3313} + C_{3331}) \\
 \frac{1}{2} \begin{pmatrix} C_{1211} + \\ C_{2111} \end{pmatrix} & \frac{1}{2} \begin{pmatrix} C_{1222} + \\ C_{2122} \end{pmatrix} & \frac{1}{2} \begin{pmatrix} C_{1233} + \\ C_{2133} \end{pmatrix} & \frac{1}{4} \begin{pmatrix} C_{1212} + C_{2112} + \\ C_{1221} + C_{2121} \end{pmatrix} & \frac{1}{4} \begin{pmatrix} C_{1223} + C_{2123} + \\ C_{1232} + C_{2132} \end{pmatrix} & \frac{1}{4} \begin{pmatrix} C_{1213} + C_{2113} + \\ C_{1231} + C_{2131} \end{pmatrix} \\
 \frac{1}{2} \begin{pmatrix} C_{2311} + \\ C_{3211} \end{pmatrix} & \frac{1}{2} \begin{pmatrix} C_{2322} + \\ C_{3222} \end{pmatrix} & \frac{1}{2} \begin{pmatrix} C_{2333} + \\ C_{3233} \end{pmatrix} & \frac{1}{4} \begin{pmatrix} C_{2312} + C_{3212} + \\ C_{2321} + C_{3221} \end{pmatrix} & \frac{1}{4} \begin{pmatrix} C_{2323} + C_{3223} + \\ C_{2332} + C_{3232} \end{pmatrix} & \frac{1}{4} \begin{pmatrix} C_{2313} + C_{3213} + \\ C_{2331} + C_{3231} \end{pmatrix} \\
 \frac{1}{2} \begin{pmatrix} C_{1311} + \\ C_{3111} \end{pmatrix} & \frac{1}{2} \begin{pmatrix} C_{1322} + \\ C_{3122} \end{pmatrix} & \frac{1}{2} \begin{pmatrix} C_{1333} + \\ C_{3133} \end{pmatrix} & \frac{1}{4} \begin{pmatrix} C_{1312} + C_{3112} + \\ C_{1321} + C_{3121} \end{pmatrix} & \frac{1}{4} \begin{pmatrix} C_{1323} + C_{3123} + \\ C_{1332} + C_{3132} \end{pmatrix} & \frac{1}{4} \begin{pmatrix} C_{1313} + C_{3113} + \\ C_{1331} + C_{3131} \end{pmatrix}
 \end{bmatrix}$$

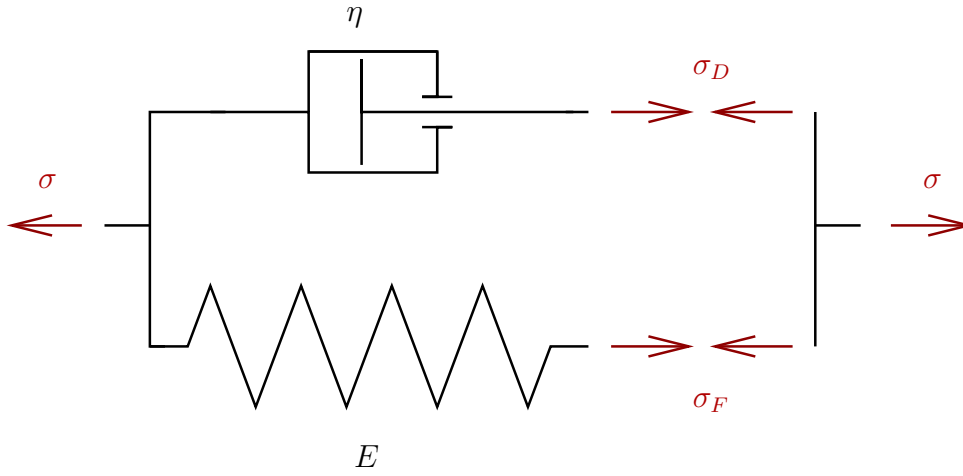


Abbildung 27: Kelvin-Modell.

## B Kelvin-Modell

Beim Kelvin-Modell sind eine Hooksche Feder und ein Newtonscher Dämpfer parallel angeordnet, wie in Abb. 27 dargestellt ist. Aufgrund der Dehnungszerlegung und den daraus resultierenden Beziehungen wird beim Maxwell-Modell von einer Dehnungsraumdarstellung gesprochen. Analog wird die Modellierung der linearen Viskoelastizität über das Kelvin-Modell aufgrund der Spannungszerlegung und der daraus resultierenden Beziehungen in Abhängigkeit von den Spannungen als Spannungsraumdarstellung bezeichnet. Wird beim Maxwell-Modell die Spannung als lineares Funktional der Deformationsgeschichte dargestellt, so wird beim Kelvin-Modell die aktuelle Deformation über ein lineares Funktional der Spannungsgeschichte ermittelt.

Um konstitutive Gleichungen in der Spannungsraumdarstellung zu erhalten, wird anstatt der freien Energie  $\psi$  in der Regel die freie Enthalpie  $g$  verwendet, die über

$$g = \sigma \varepsilon - \rho \psi \quad (\text{B.25})$$

definiert ist. Damit ergibt sich für eindimensionale, isotherme Prozesse die Entropieungleichung nach Glg. (3.18) zu

$$\rho \theta \gamma = \rho \dot{g} - \varepsilon \dot{\sigma} \geq 0 \quad . \quad (\text{B.26})$$

Aus der Spannungszerlegung

$$\sigma = \sigma_F + \sigma_D \quad (\text{B.27})$$

wird die Spannung  $\sigma_F$  als innere Variable festgelegt.

Mit der Freien Energie  $\psi = \frac{1}{2} E \varepsilon^2$  und dem Hookeschen Gesetz für die Feder  $\sigma_F = E \varepsilon$  folgt für die freie Enthalpie nach Glg (B.25)

$$\begin{aligned} \rho g &= \frac{\sigma_F \sigma}{E} - \frac{\sigma_F^2}{2E} \\ &= \frac{1}{E} \left( \sigma_F \sigma + \frac{\sigma_F^2}{2} - \sigma_F^2 \right) = \frac{1}{E} \left( \frac{\sigma_F^2}{2} + \sigma_F (\sigma - \sigma_F) \right) . \end{aligned} \quad (\text{B.28})$$

Die Dehnung  $\varepsilon$  ist durch

$$\varepsilon = \rho \frac{\partial g}{\partial \sigma} \quad (\text{B.29})$$

gegeben und als Evolutionsgleichung für die innere Variable wird

$$\dot{\sigma}_F = \frac{E}{\eta} (\sigma - \sigma_F) \quad (\text{B.30})$$

festgelegt.

Für den Newtonschen Dämpfer gilt der Zusammenhang  $\sigma = \eta \dot{\varepsilon}$ , so dass sich aus der Spannungszerlegung nach Gleichung (B.27) und dem Hookeschen Gesetz die Dgl.

$$\sigma = E \varepsilon + \eta \dot{\varepsilon} \quad (\text{B.31})$$

mit der Lösung

$$\varepsilon = \int_{-\infty}^t \frac{1}{E} \left( 1 - e^{-\frac{t-\xi}{\tau}} \right) \dot{\sigma}(\xi) \, d\xi \quad (\text{B.32})$$

ergibt, wobei  $\tau = \frac{\eta}{E}$  in diesem Fall die Retardationszeit ist. Wird das quadratische Integral wiederum durch ein Doppelintegral ausgedrückt, folgt für die freie Enthalpie

$$\rho g = \frac{1}{2E} \int_{-\infty}^t \int_{-\infty}^t \left( 1 - e^{-\frac{2}{\tau}(t-\xi_1-\xi_2)} \right) \dot{\sigma}(\xi_1) \dot{\sigma}(\xi_2) \, d\xi_1 \, d\xi_2 . \quad (\text{B.33})$$

Ausgehend von den funktionalen Darstellungen der Dehnung und der freien Enthalpie in den Glg. (B.32) und (B.33) kann zur Verallgemeinerung die Kriechfunktion  $J(t)$  eingeführt werden. Damit folgt

$$\varepsilon = \int_{-\infty}^t J(t-\xi) \dot{\sigma}(\xi) \, d\xi \quad (\text{B.34})$$

und

$$\rho g = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^t \int_{-\infty}^t J(2t - \xi_1 - \xi_2) \dot{\sigma}(\xi_1) \dot{\sigma}(\xi_2) d\xi_1 d\xi_2 \quad . \quad (\text{B.35})$$

Werden mehrere Kelvin-Elemente hintereinander geschaltet, erhält man die diskrete Kriechfunktion

$$J(t) = \sum_{k=1}^N L_k \left( 1 - e\left(-\frac{t}{\tau_k}\right) \right) \quad (\text{B.36})$$

mit den Nachgiebigkeiten  $L_k = \frac{1}{E_k}$ .

Bei einer kontinuierlichen Verteilung der Kelvin-Elemente ist auch die Kriechfunktion kontinuierlich und hat die Form

$$J(t) = \int_0^{\infty} L(\tau) \left( 1 - e\left(-\frac{t}{\tau}\right) \right) d\tau \quad . \quad (\text{B.37})$$

Zur Überprüfung der thermomechanischen Konsistenz wird die Clausius-Duhem-Ungleichung ausgewertet. Für den isothermen, eindimensionalen Fall gilt die Entropieungleichung nach Glg. (B.26)

$$\rho \theta \gamma = \rho \dot{g} - \varepsilon \dot{\sigma} \geq 0 \quad . \quad (\text{B.38})$$

Mit der Spannungszerlegung, der Evolutionsgleichung (B.30), der freien Enthalpie und der Definition der Dehnung  $\varepsilon = \rho \frac{\partial g}{\partial \sigma}$  folgt

$$\rho \theta \gamma = \frac{1}{\eta} \sigma_D^2 = \sigma_D \dot{\varepsilon} \geq 0 \quad . \quad (\text{B.39})$$

Für positive Viskositäten ist die Ungleichung aufgrund der quadratischen Form somit immer erfüllt. Diese Eigenschaft bleibt auch erhalten, wenn die Viskosität eine positivwertige Funktion der Prozessgeschichte ist. Der Nachweis der thermomechanischen Konsistenz für das verallgemeinerte Kelvin-Modell erfolgt analog zu dem Nachweis für das verallgemeinerte Maxwell-Modell und soll deshalb im Folgenden nicht erörtert werden.

## C Quellcode der User Subroutinen

### C.1 Übersicht über die verwendeten Bezeichnungen

ee	$\mathbf{1}$ Einheitsmatrix
bc	$\beta_C$ chemischer Ausdehnungskoeffizient
bt	$\beta_\theta$ thermischer Ausdehnungskoeffizient
tap	$\tau_+$ Materialparameter
tam	$\tau_-$ Materialparameter
xlam	$\lambda$ Materialparameter
alp	$\alpha$ Materialparameter
bet	$\beta$ Materialparameter
gam	$\gamma$ Materialparameter
xm	$m$ Materialparameter
xn	$n$ Materialparameter
xmu0	$\mu_0$ Materialparameter
z0	$z_0$ Materialparameter
fct0	${}_n\mathbf{F}_{C\theta}$ thermochemischer Deformationsgradient
fcti0	${}_n\mathbf{F}_{C\theta}^{-1}$ inverser thermochemischer Deformationsgradient
detfct0	${}_nF_{C\theta}$ Determinante thermochemischer Deformationsgradient
ffn	${}_n\mathbf{F}$ Deformationsgradient
fm0	${}_n\mathbf{F}_M$ mechanischer Deformationsgradient

cm0	${}_n \mathbf{C}_M$ mechanischer rechter Cauchy-Green Tensor
cmi0	${}_n \mathbf{C}_M^{-1}$ inverser mechanischer rechter Cauchy-Green Tensor
rhotc0	${}_n \rho_{\theta C}$ Dichte der thermochemischen Zwischenkonfiguration
fct1	${}_{n+1} \mathbf{F}_{C\theta}$ thermochemischer Deformationsgradient
fcti1	${}_{n+1} \mathbf{F}_{C\theta}^{-1}$ inverser thermochemischer Deformationsgradient
detfct1	${}_{n+1} F_{C\theta}$ Determinante thermochemischer Deformationsgradient
ffn1	${}_{n+1} \mathbf{F}$ Deformationsgradient
fm1	${}_{n+1} \mathbf{F}_M$ mechanischer Deformationsgradient
cm1	${}_{n+1} \mathbf{C}_M$ mechanischer rechter Cauchy-Green Tensor
detfm1	${}_{n+1} F_M$ Determinante mechanischer Deformationsgradient
c1	${}_{n+1} \mathbf{C}$ rechter Cauchy-Green Tensor
ci1	${}_{n+1} \mathbf{C}^{-1}$ inverser rechter Cauchy-Green Tensor
su	${}_{n+1} \tilde{\mathbf{T}}^p$ zweiter Piola-Kirchhoffscher Spannungstensor resultierend aus dem hydrostatischen Druck
se_a	${}_{n+1} \tilde{\mathbf{T}}^\psi$ zweiter Piola-Kirchhoffscher Spannungstensor resultierend aus der freien Energie
set	${}_n \tilde{\mathbf{T}}^\psi$ zweiter Piola-Kirchhoffscher Spannungstensor resultierend aus der freien Energie
sc	${}_{n+1} \mathbf{T}$ Cauchyscher Spannungstensor
st	${}_{n+1} \Theta$ Temperaturspannungstensor
hh1	${}_{n+1} \mathbf{F}_{C\theta}^{-1} {}_n \mathbf{C}_M^{-1} {}_{n+1} \mathbf{F}_{C\theta}^{-T}$ Hilftensor 2. Stufe
hh2	${}_{n+1} \mathbf{F} {}_{n+1} \tilde{\mathbf{T}} {}_{n+1} \mathbf{F}^T$ Hilftensor 2. Stufe

hh3	${}_{n+1}\tilde{\mathbf{T}}^p + {}_{n+1}\tilde{\mathbf{T}}^\psi$ Hilfstensor 2. Stufe
hh4	${}_{n+1}\mathbf{B} - \mathbf{1}$ Hilfstensor 2. Stufe
trhh4	$\text{tr}({}_{n+1}\mathbf{B} - \mathbf{1})$ Spur Hilfstensor 2. Stufe
hh5	${}_{n+1}\tilde{\mathbf{T}}_M - {}_{n+1}\mathbf{C}_M$ Hilfstensor 2. Stufe
trhh5	$\text{tr}({}_{n+1}\tilde{\mathbf{T}}_M - {}_{n+1}\mathbf{C}_M)$ Spur Hilfstensor 2. Stufe
hh6	$\frac{1}{{}_{n+1}F_{C\theta}} {}_{n+1}\mathbf{F}_{C\theta} {}_{n+1}\tilde{\mathbf{T}} {}_{n+1}\mathbf{F}_{C\theta}^T$ Hilfstensor 2. Stufe
qn	${}_{n+1}q$ Aushärtegrad
zinc	$\Delta z_n$ intrinsische Zeitdifferenz
phi	$\varphi$ Temperatur-Volumen-Funktion
gq	$g$ Aushärtung-Volumen-Funktion
qpu	${}_{n+1}\dot{q}$ Ableitung des Aushärtegrades
zt	${}_{n+1}z$ intrinsische Zeit
tt	$\text{tr}({}_n\mathbf{T})$ Spur Cauchyscher Spannungstensor
timinc	$\Delta t_n$ Spur Cauchyscher Spannungstensor
rho	${}_{n+1}\rho_R$ Dichte Referenzkonfiguration
p	$p$ hydrostatischer Druck
a1	$R_I$ Wärmequellterm
a2	$R_{II}$ Wärmequellterm
a3	$R_{III}$ Wärmequellterm
a4	$R_{IVa}$ Wärmequellterm

a5	$R_{IVb}$	Wärmequellterm
te	${}_{n+1}\theta$	Temperatur

**Geforderte Ausgabegrößen**

s	${}_{n+1}\tilde{\mathbf{T}}$	zweiter Piola-Kirchhoffscher Spannungstensor
g	${}_{n+1}\Theta \, d\theta$	thermischer Spannungstensor
d	${}_{n+1}\mathbb{C}$	materieller Elastizitätstensor



## C.2 Übersicht der eingeführten State Variables

t(1)	${}_n\theta$	Temperatur
t(2)	$c_d$	Wärmekapazität
t(3)	$\kappa$	Wärmeleitfähigkeit
t(4)	${}_n\tilde{T}_{11}^\psi$	zweiter Piola-Kirchhoffscher Tensor
t(5)	${}_n\tilde{T}_{22}^\psi$	zweiter Piola-Kirchhoffscher Tensor
t(6)	${}_n\tilde{T}_{33}^\psi$	zweiter Piola-Kirchhoffscher Tensor
t(7)	${}_n\tilde{T}_{12}^\psi$	zweiter Piola-Kirchhoffscher Tensor
t(8)	${}_n\tilde{T}_{23}^\psi$	zweiter Piola-Kirchhoffscher Tensor
t(9)	${}_n\tilde{T}_{13}^\psi$	zweiter Piola-Kirchhoffscher Tensor
t(10)	${}_nq$	Aushärtegrad
t(11)	$\text{tr}({}_n\mathbf{T})$	Spur Cauchyscher Tensor
t(12)	${}_nz$	intrinsische Zeit

### C.3 Quellcode

```

c          -- Thermomechanik von Aushaertevorgaengen --

c      Es wird ein Herrmann-Element (Elementtyp 84) in Kombination
c      mit dem Waermeleitelement 43 verwendet.

      subroutine hypela2(d,g,e,de,s,t,dt,ngens,n,mn,kc,mats,ndi,nshear,
2          disp,dispt,coord,ffn,frotn,strechn,eigvn,ffn1,
3          frotn1,strechn1,eigvn1,ncrd,itel,ndeg,ndm,
4          nnode,jtype,lclass,ifr,ifu)

      implicit real*8 (a-h,o-z)

      dimension e(*),de(*),t(*),dt(*),g(*),d(ngens,*),s(*)
      dimension n(2),coord(ncrd*),disp(ndeg*),
*          dispt(ndeg*),ffn(itel*),frotn(itel*),
*          strechn(itel),eigvn(itel*),ffn1(itel*),
*          frotn1(itel*),strechn1(itel),eigvn1(itel*)

c      Dimensionierung der zusaetzlichen Variablen

      dimension ee(3,3),
*          fct0(3,3),
*          fcti0(3,3),
*          fm0(3,3),
*          cm0(3,3),
*          cmi0(3,3),
*          fct1(3,3),
*          fcti1(3,3),
*          fm1(3,3),
*          cm1(3,3),
*          c1(3,3),
*          ci1(3,3),
*          su(3,3),
*          se_a(3,3),
*          set(3,3),
*          sc(3,3),
*          st(3,3),
*          hh1(3,3),
*          hh2(3,3),
*          hh3(3,3),

```

```
*          hh4(3,3),
*          hh5(3,3),
*          hh6(3,3),
*          du(3,3,3,3),
*          de_a(3,3,3,3)

c      Initialisierung der eingefuehrten Variablen

      data ee,
*      fct0, fcti0, fm0, cm0, cmi0,
*      fct1, fcti1, fm1,
*      cm1, c1, ci1,
*      su, se_a, set, sc, st,
*      hh1, hh2, hh3, hh4, hh5,
*      hh6,
*      du, de_a /
*      9*0.,
*      9*0., 9*0., 9*0., 9*0., 9*0.,
*      9*0., 9*0., 9*0.,
*      9*0., 9*0., 9*0.,
*      9*0., 9*0., 9*0., 9*0., 9*0.,
*      9*0., 9*0., 9*0., 9*0., 9*0.,
*      9*0.,
*      81*0., 81*0. /

c      Einbinden von Common-Blöcken

c      inc=Inkrementnummer, subinc=Subinkrementnummer,

      include 'concom'

c      timinc=Delta-t

      include 'creeps'

c      rho='Dichte Referenzzustand'

      include 'matdat'
```

```
C-----  
C   BERECHNUNG DER ERFORDERLICHEN KINEMATISCHEN GROESSEN  
C-----  
  
C   Aufstellen der Einheitsmatrix  
  
    do i1=1,3  
      do i2=1,3  
        ee(i1,i2)=dlt(i1,i2)  
      end do  
    end do  
  
C   Parameterfestlegung  
  
C   Kinematik  
  
    bc=  -0.1  
    bt=  1.e-4  
    tap= 10.  
    tam= 1.e8  
    xlam= 1.e-8  
    alp= 2.  
    bet= 2.  
    gam= 1.  
    xm=  0.5  
    xn=  0.5  
  
C   Spannungen  
  
    xmu0= 1.  
    z0=  10000.  
  
C   Ermittlung der aktuellen Temperatur te  
  
    te=t(1)+dt(1)  
  
C   benoetigte kinematische Groessen zum Zeitpunkt n  
  
    phi=1.+bt*(t(1)-290.)
```

```

gq=1.+bc*t(10)

do i1=1,3
  do i2=1,3
    fct0(i1,i2)=(phi*gq)**(1./3.)*
+           ee(i1,i2)
  end do
end do

call retka_matinv(fcti0,fct0)

call retka_tensprod(fm0,ffn,fcti0)

call retka_recauchygreen(cm0,fm0)

call retka_matinv(cmi0,cm0)

call retka_detc(detfct0,fct0)

```

c    Updaten von q mittels Eulerverfahren

```

rhotc0=rho/detfct0

if(t(10).lt.1.) then

  qpu=(xlam*bc/(3.*rhotc0*(1.+bc*t(10)))*t(11)+
+     xn**alp*xm**bet*(1.-t(10))**(alp+bet)/tap-
+     t(10)**gam/tam)

else

  qpu=0.

  end if

qn=t(10)

t(10)=t(10)+timinc*qpu

```

c    Update des intrinsischen Zeitinkrements

```

zinc=(2.-qn-t(10))/2.*timinc

```

```
      zt=t(12)+zinc
      t(12)=zt

c      benoetigte kinematische Groessen zum Zeitpunkt n+1

      phi=1.+bt*(te-290.)

      gq=1.+bc*t(10)

      do i1=1,3
        do i2=1,3
          fct1(i1,i2)=(phi*gq)**(1./3.)*
+          ee(i1,i2)
        end do
      end do

      call retka_matinv(fcti1,fct1)

      call retka_detc(detfct1,fct1)

      call retka_tensprod(fm1,ffn1,fcti1)

      call retka_detc(detfm1,fm1)

      call retka_recauchygreen(cm1,fm1)

      call retka_detc(detffn1,ffn1)

      call retka_recauchygreen(c1,ffn1)

      call retka_matinv(ci1,c1)

c-----
c      BEGINN ANTEIL AUS HYDROSTATISCHEM DRUCK
c-----

c      Ermittlung des aktuellen Druckes p

      p=e(7)+de(7)
```

c Berechnung des 2. Piola Kirchhoffschen Spannungstensor

```
do i1=1,3
  do i2=1,3
    su(i1,i2)=p*detffn1*ci1(i1,i2)
  end do
end do
```

c Berechnung der Steifigkeitsmatrix

```
do i1=1,3
  do i2=1,3
    do i3=1,3
      do i4=1,3
        du(i1,i2,i3,i4)=
+          p*detffn1*(ci1(i1,i2)*
+            ci1(i3,i4)-
+            2.*ci1(i1,i3)*ci1(i2,i4))
      end do
    end do
  end do
end do
```

c-----

c ENDE ANTEIL AUS HYDROSTATISCHEM DRUCK

c BEGINN ANTEIL AUS FREIER ENERGIE

c-----

c Hilfsmatrix set fuer t(4)-t(9)

```
set(1,1)=t(4)
set(2,2)=t(5)
set(3,3)=t(6)
set(1,2)=t(7)
set(2,1)=t(7)
set(2,3)=t(8)
set(3,2)=t(8)
set(1,3)=t(9)
set(3,1)=t(9)
```

## c Berechnung Spannungen

```

if(zinc.le.0.) then

  do i1=1,3
    do i2=1,3
      se_a(i1,i2)=set(i1,i2)
    end do
  end do

else

  do i1=1,3
    do i2=1,3
      hh1(i1,i2)=0.
      do i3=1,3
        do i4=1,3
          hh1(i1,i2)=hh1(i1,i2)+fcti1(i1,i3)*
+             cmi0(i3,i4)*fcti1(i2,i4)
        end do
      end do
    end do
  end do

  do i1=1,3
    do i2=1,3
      se_a(i1,i2)=exp(-zinc/z0)*set(i1,i2)-
+             rho*xmu0*z0/zinc*
+             (1.-exp(-zinc/z0))*
+             (ci1(i1,i2)-hh1(i1,i2))
    end do
  end do

end if

```

## c Berechnung Tangentenoperator

```

if(zinc.le.0.) then

  do i1=1,3
    do i2=1,3
      do i3=1,3
        do i4=1,3
          de_a(i1,i2,i3,i4)=0.
        end do
      end do
    end do
  end do

```



```

        end do
    end do
end do

else

do i1=1,3
do i2=1,3
do i3=1,3
do i4=1,3
de_a(i1,i2,i3,i4)=
+ ci1(i1,i3)*ci1(i2,i4)*
+ 2.*rho*xmu0*z0/zinc*(1.-exp(-zinc/z0))
end do
end do
end do
end do

end if

```

```

c-----
c ENDE ANTEIL AUS FREIER ENERGIE

c BEGINN UPDATE t(11)
c-----

```

```

do i1=1,3
do i2=1,3
hh3(i1,i2)=su(i1,i2)+se_a(i1,i2)
end do
end do

do i1=1,3
do i2=1,3
hh2(i1,i2)=0.
do i3=1,3
do i4=1,3
hh2(i1,i2)=hh2(i1,i2)+ffn1(i1,i3)*
+ hh3(i3,i4)*ffn1(i2,i4)
end do
end do
end do

```

```

end do

do i1=1,3
  do i2=1,3
    sc(i1,i2)=1./detffn1*hh2(i1,i2)
  end do
end do

tt=t(11)

t(11)=sc(1,1)+sc(2,2)+sc(3,3)

```

```

c-----
c   ENDE UPDATE t(11)

c   Bereitstellung therm. Groessen
c-----

```

```

c   Spannungen aufgrund Temperaturaenderung

  if(zinc.le.0.) then

    do i1=1,3
      do i2=1,3
        st(i1,i2)=0.
      end do
    end do

  else

    do i1=1,3
      do i2=1,3
        st(i1,i2)=-2.*xmu0/3.*rho*bt*gq**(-2./3.)*
+         phi**(-5./3.)*z0/zinc*
+         (1-exp(-zinc/z0))*cmi0(i1,i2)
      end do
    end do

  end if

  g(1)=st(1,1)*dt(1)
  g(2)=st(2,2)*dt(1)
  g(3)=st(3,3)*dt(1)

```

```

g(4)=st(1,2)*dt(1)
g(5)=st(2,3)*dt(1)
g(6)=st(1,3)*dt(1)

c    Zwangsbedingung

g(7)=-detfm1*bt/phi*dt(1)

c    Spezifische Waermekapazitaet

t(2)=1.e3

c    Berechnung der Waermequellen

if(zinc.le.0.) then

t(3) = 0.

else

a1=-te*bt*gq*(t(11)-tt)/(3.*rho*timinc)

a2=-te*bt*bc*t(11)*qpu/(3.*rho)

a3=qpu**2/xlam

do i1=1,3
  do i2=1,3
    hh4(i1,i2)=0.
    do i3=1,3
      hh4(i1,i2)= hh4(i1,i2) + fm1(i1,i3)*
+      fm1(i2,i3)
    end do
  end do
end do

trhh4=hh4(1,1)+hh4(2,2)+hh4(3,3)-3.

a4=-xmu0/z0*(1-t(10))*exp(-zt/z0)/2.*trhh4

do i1=1,3
  do i2=1,3

```

```

        hh6(i1,i2)=0.
        do i3=1,3
            do i4=1,3
                hh6(i1,i2) = hh6(i1,i2)+ 1./detfct1*
+                fct1(i1,i3)*hh3(i3,i4)*fct1(i2,i4)
            end do
        end do
    end do
end do

call retka_tensprod(hh5,hh6,cm1)

trhh5=hh5(1,1)+hh5(2,2)+hh5(3,3)

a5=(1-t(10))*detfct1/(2.*xmu0*rho)*trhh5

t(3)=a1+a2+a3+a4+a5

end if

```

```

c-----
c   BEGINN TRANSFORMATION
c-----

```

```

c   Transformation in die geforderte Spannungsspaltenmatrix

```

```

t(4)=se_a(1,1)
t(5)=se_a(2,2)
t(6)=se_a(3,3)
t(7)=se_a(1,2)
t(8)=se_a(2,3)
t(9)=se_a(1,3)

s(1)=su(1,1)+t(4)
s(2)=su(2,2)+t(5)
s(3)=su(3,3)+t(6)
s(4)=su(1,2)+t(7)
s(5)=su(2,3)+t(8)
s(6)=su(1,3)+t(9)
s(7)=detfm1-1

```

```

c   Transformation zur geforderten Steifigkeitsmatrix

```

```

do i1=1,3
  do i2=1,3
    do i3=1,3
      do i4=1,3
        du(i1,i2,i3,i4)=du(i1,i2,i3,i4)+
+          de_a(i1,i2,i3,i4)
      end do
    end do
  end do
end do

```

```

do i1=1,3
  d(1,i1)=du(1,1,i1,i1)
end do

```

```

d(1,4)=1./2.*(du(1,1,1,2)+du(1,1,2,1))
d(1,5)=1./2.*(du(1,1,2,3)+du(1,1,3,2))
d(1,6)=1./2.*(du(1,1,1,3)+du(1,1,3,1))
d(1,7)=detfm1*ci1(1,1)

```

```

do i1=1,3
  d(2,i1)=du(2,2,i1,i1)
end do

```

```

d(2,4)=1./2.*(du(2,2,1,2)+du(2,2,2,1))
d(2,5)=1./2.*(du(2,2,2,3)+du(2,2,3,2))
d(2,6)=1./2.*(du(2,2,1,3)+du(2,2,3,1))
d(2,7)=detfm1*ci1(2,2)

```

```

do i1=1,3
  d(3,i1)=du(3,3,i1,i1)
end do

```

```

d(3,4)=1./2.*(du(3,3,1,2)+du(3,3,2,1))
d(3,5)=1./2.*(du(3,3,2,3)+du(3,3,3,2))
d(3,6)=1./2.*(du(3,3,1,3)+du(3,3,3,1))
d(3,7)=detfm1*ci1(3,3)

```

```

d(4,1)=1./2.*(du(1,2,1,1)+du(2,1,1,1))
d(4,2)=1./2.*(du(1,2,2,2)+du(2,1,2,2))
d(4,3)=1./2.*(du(1,2,3,3)+du(2,1,3,3))

```

```

d(4,4)=1./4.*(du(1,2,1,2)+du(2,1,1,2)+

```

```

+          du(1,2,2,1)+du(2,1,2,1))
d(4,5)=1./4.*(du(1,2,2,3)+du(2,1,2,3)+
+          du(1,2,3,2)+du(2,1,3,2))
d(4,6)=1./4.*(du(1,2,1,3)+du(2,1,1,3)+
+          du(1,2,3,1)+du(2,1,3,1))
d(4,7)=detfm1*ci1(1,2)

```

```

d(5,1)=1./2.*(du(2,3,1,1)+du(3,2,1,1))
d(5,2)=1./2.*(du(2,3,2,2)+du(3,2,2,2))
d(5,3)=1./2.*(du(2,3,3,3)+du(3,2,3,3))

```

```

d(5,4)=1./4.*(du(2,3,1,2)+du(3,2,1,2)+
+          du(2,3,2,1)+du(3,2,2,1))
d(5,5)=1./4.*(du(2,3,2,3)+du(3,2,2,3)+
+          du(2,3,3,2)+du(3,2,3,2))
d(5,6)=1./4.*(du(2,3,1,3)+du(3,2,1,3)+
+          du(2,3,3,1)+du(3,2,3,1))
d(5,7)=detfm1*ci1(2,3)

```

```

d(6,1)=1./2.*(du(1,3,1,1)+du(3,1,1,1))
d(6,2)=1./2.*(du(1,3,2,2)+du(3,1,2,2))
d(6,3)=1./2.*(du(1,3,3,3)+du(3,1,3,3))

```

```

d(6,4)=1./4.*(du(1,3,1,2)+du(3,1,1,2)+
+          du(1,3,2,1)+du(3,1,2,1))
d(6,5)=1./4.*(du(1,3,2,3)+du(3,1,2,3)+
+          du(1,3,3,2)+du(3,1,3,2))
d(6,6)=1./4.*(du(1,3,1,3)+du(3,1,1,3)+
+          du(1,3,3,1)+du(3,1,3,1))
d(6,7)=detfm1*ci1(1,3)

```

```

d(7,1)=detfm1*ci1(1,1)
d(7,2)=detfm1*ci1(2,2)
d(7,3)=detfm1*ci1(3,3)
d(7,4)=detfm1*ci1(1,2)
d(7,5)=detfm1*ci1(2,3)
d(7,6)=detfm1*ci1(1,3)
d(7,7)=0.

```

```

return

```

```

end

```

```

c-----

      subroutine retka_matinv(cinv,c)
c   Berechnung der Inversen eines Tensors 2-ter Stufe

      implicit real*8 (a-h,o-z)

      dimension cinv(3,3),c(3,3)

c   Determinante eines Tensors 2-ter Stufe:
      detc=c(1,1)*c(2,2)*c(3,3)+c(1,2)*c(2,3)*c(3,1)+
+ c(1,3)*c(2,1)*c(3,2)-c(1,3)*c(2,2)*c(3,1)-
+ c(1,2)*c(2,1)*c(3,3)-c(1,1)*c(2,3)*c(3,2)

      cinv(1,1)=(c(2,2)*c(3,3)-c(2,3)*c(3,2))/detc
      cinv(1,2)=-(c(1,2)*c(3,3)-c(1,3)*c(3,2))/detc
      cinv(1,3)=(c(1,2)*c(2,3)-c(1,3)*c(2,2))/detc
      cinv(2,1)=-(c(2,1)*c(3,3)-c(3,1)*c(2,3))/detc
      cinv(2,2)=(c(1,1)*c(3,3)-c(1,3)*c(3,1))/detc
      cinv(2,3)=-(c(1,1)*c(2,3)-c(1,3)*c(2,1))/detc
      cinv(3,1)=(c(2,1)*c(3,2)-c(3,1)*c(2,2))/detc
      cinv(3,2)=-(c(1,1)*c(3,2)-c(3,1)*c(1,2))/detc
      cinv(3,3)=(c(1,1)*c(2,2)-c(1,2)*c(2,1))/detc

      return
      end

c-----

      subroutine retka_tensprod(te,c1,c2)
c   Einfaches Produkt zweier Tensoren 2-ter Stufe

      implicit real*8 (a-h,o-z)

      dimension c2(3,3),c1(3,3),te(3,3)

      do i1=1,3
      do i2=1,3
         te(i1,i2)=0.
         do i3=1,3

```

```
        te(i1,i2)=te(i1,i2)+c1(i1,i3)*c2(i3,i2)
    end do
end do
end do

return
end
```

c-----

```
subroutine retka_recauchygreen(c,f)
c  Berechnung des rechten Cauchy-Green-Tensors

implicit real*8 (a-h,o-z)

dimension c(3,3),f(3,3)

do i1=1,3
  do i2=1,3
    c(i1,i2)=0.
    do i3=1,3
      c(i1,i2)=c(i1,i2)+f(i3,i1)*f(i3,i2)
    end do
  end do
end do

return
end
```

c-----

```
subroutine retka_trans(ft,f)
c  Berechnung der Transponierten eines Tensors 2-ter Stufe

implicit real*8 (a-h,o-z)

dimension f(3,3),ft(3,3)

do i1=1,3
```



```

    do i2=1,3
      ft(i1,i2)=f(i2,i1)
    end do
end do

return
end

```

c-----

```

subroutine retka_detc(detc,c)
c  Berechnung der Determinate eines Tensors 2-ter Stufe

implicit real*8 (a-h,o-z)

dimension c(3,3)

c  Determinante eines Tensors 2-ter Stufe:
detc=c(1,1)*c(2,2)*c(3,3)+c(1,2)*c(2,3)*c(3,1)+
+ c(1,3)*c(2,1)*c(3,2)-c(1,3)*c(2,2)*c(3,1)-
+ c(1,2)*c(2,1)*c(3,3)-c(1,1)*c(2,3)*c(3,2)

return
end

```

c-----

```

real*8 function dlt(m,n)
c  Kronecker-Delta

dlt=0.

if(m.eq.n) then
  dlt=1.
else
  dlt=0.
end if

end

```

c-----

```
c-----  
c  Routinen zur Implementierung der thermischen Kopplung  
c-----  
c-----
```

```
subroutine uspcht(spheat,m,nn,kc,inc,ncycle,  
2          matus,nstats,temp0,dtemp,time,dtime)
```

```
implicit real*8 (a-h,o-z)
```

```
dimension m(*),matus(*),kc(*)
```

```
call elmvar(29,m,nn,kc,spheat)
```

```
return  
end
```

```
c-----
```

```
subroutine flux(f,temflu,mibody,time)
```

```
implicit real*8 (a-h,o-z)
```

```
include 'implicit'  
include 'concom'  
include 'creeps'  
include 'far'  
include 'lass'
```

```
dimension f(2),mibody(*),temflu(*)
```

```
if (inc.eq.0) then  
f(1) = 0.  
else  
call elmvar(39,n,nn,kc,waerme)  
f(1) = waerme/timinc  
end if
```

```
return  
end
```

## Literatur

### Altenbach u. Altenbach 1994

ALTENBACH, Johannes ; ALTENBACH, Holm: *Einführung in die Kontinuumsmechanik*. Stuttgart ; Leipzig ; Wiesbaden : B. G. Teubner, 1994. – ISBN 3 519 03096 9

### Bathe 2002

BATHE, Klaus-Jürgen: *Finite-Elemente-Methoden*. Berlin ; Heidelberg : Springer-Verlag, 2002 ( 2., vollst. neu bearb. u. erw. Aufl.). – ISBN 3 540 66806 3

### Bonet u. Wood 1997

BONET, Javier ; WOOD, Richard D.: *Nonlinear Continuum Mechanics For Finite Element Analysis*. Cambridge : Cambridge University Press, 1997. – ISBN 052157272 X

### Brauch 1983

BRAUCH, Wolfgang: *Programmieren mit FORTRAN 77 für Ingenieure*. Stuttgart : B. G. Teubner, 1983. – ISBN 3 519 00094 6

### Emmerling 1998

EMMERLING, Franz A.: *Einführung in die Kontinuumsmechanik und Materialtheorie / Universität der Bundeswehr München*. Neubiberg, 1998. – Losebl.-Ausg.

### Emmerling 2003

EMMERLING, Franz A.: *Finite Elemente I / Universität der Bundeswehr München*. Neubiberg, 2003. – Losebl.-Ausg.

### Fritsch 2004

FRITSCH, Armin: *Finite Thermoplastizität : Materialmodellierung und Numerik thermoplastischer Werkstoffe bei finiten Deformationen / VDI*. Düsseldorf, 2004 (290). – Fortschritt-Berichte VDI Reihe 18 Mechanik/ Bruchmechanik. – ISBN 3 18 329018 9

### Haupt u. Lion 2002

HAUPT, Peter ; LION, Alexander: *On Finite Linear Viscoelasticity Of Incompressible Isotropic Materials*. In: *Acta Mechanica* 159 (2002), S. 87–124

### Heimes 2003

HEIMES, Thomas: *Thermohyperelastisches Material mit Zwischenkonfiguration / Technische Mechanik und Flächentragwerke der Fakultäten Bauingenieur- und Vermessungswesen/ Luft- und Raumfahrttechnik*. Neubiberg, 2003 (1/03). – Forschungs- und Seminarberichte aus dem Gebiet Technische Mechanik und Flächentragwerke. – ISSN 0344 6001

### Heimes 2004

HEIMES, Thomas: *Finite Thermoviskoelastizität / Technische Mechanik und Flächentragwerke der Fakultäten Bauingenieur- und Vermessungswesen/ Luft- und*

Raumfahrttechnik. Neubiberg, 2004 (1/04). – Forschungs- und Seminarberichte aus dem Gebiet Technische Mechanik und Flächentragwerke. – ISSN 0944 6001

**Holzapfel 2000**

HOLZAPFEL, Gerhard A.: *Nonlinear Solid Mechanics : A Continuum Approach for Engineering*. Chichester ; Weinheim ; New York ; Brisbane ; Singapore ; Toronto : JOHN WILEY & SONS, LTD, 2000. – ISBN 0 471 82304 X

**Knorrenschild 2003**

KNORRENSCHILD, Michael: *Numerische Mathematik : Eine beispielorientierte Einführung*. München ; Wien : Fachbuchverlag Leipzig im Carl Hanser Verlag, 2003. – ISBN 3 446 22169 7

**Lion 2000**

LION, Alexander: *Thermomechanik von Elastomeren : Experimente und Materialtheorie*. Kassel : Gesamthochschul-Bibliothek Kassel, 2000. – ISBN 3 89792 023 9

**Lion u. Höfer 2006**

LION, Alexander ; HÖFER, Philipp: *On The Phenomenological Representation Of Curing Phenomena In Continuum Mechanics*. 2006. – Archives of Mechanics - zur Publikation angenommen

**Middendorf 2002**

MIDDENDORF, Peter: *Viskoelastisches Verhalten von Polymersystemen / VDI*. Düsseldorf, 2002 (661). – Fortschritt-Berichte VDI Reihe 5 Grund- und Werkstoffe/ Kunststoffe. – ISBN 3 18 366105 5

**MSC 2006a**

MSC.SOFTWARE CORPORATION (Hrsg.): *MSC.Marc Volume A: Theory and User Information*. Santa Ana: MSC.Software Corporation, 2006

**MSC 2006b**

MSC.SOFTWARE CORPORATION (Hrsg.): *MSC.Marc Volume B: Element Library*. Santa Ana: MSC.Software Corporation, 2006

**MSC 2006c**

MSC.SOFTWARE CORPORATION (Hrsg.): *MSC.Marc Volume C: Program Input*. Santa Ana: MSC.Software Corporation, 2006

**MSC 2006d**

MSC.SOFTWARE CORPORATION (Hrsg.): *MSC.Marc Volume D: User Subroutines and Special Routines*. Santa Ana: MSC.Software Corporation, 2006

**Parisch 2003**

PARISCH, Horst: *Festkörper-Kontinuumsmechanik : Von den Grundgleichungen zur Lösung mit Finiten Elementen*. Stuttgart ; Leipzig ; Wiesbaden : B. G. Teubner, 2003. – ISBN 3 519 00434 8

**Tschoegl 1989**

TSCHOEGL, Nicholas W.: *The Phenomenological Theory of Linear Viscoelastic Behavior : An Introduction*. Berlin ; Heidelberg ; New York : Springer-Verlag, 1989. – ISBN 3 540 19173 9

**Wriggers 2001**

WRIGGERS, Peter: *Nichtlineare Finite-Element-Methoden*. Berlin ; Heidelberg ; New York : Springer, 2001. – ISBN 3 540 67747 X

**Zienkiewicz u. Taylor 2000a**

ZIENKIEWICZ, O. C. ; TAYLOR, R. L.: *The Finite Element Method : Solid Mechanics*. Bd. 2. fifth edition. Oxford : Butterworth-Heinemann, 2000. – ISBN 0 7506 5055 9

**Zienkiewicz u. Taylor 2000b**

ZIENKIEWICZ, O. C. ; TAYLOR, R. L.: *The Finite Element Method : The Basis*. Bd. 1. fifth edition. Oxford : Butterworth-Heinemann, 2000. – ISBN 0 7506 5049 4