

# Umwandlungsplastizität bei Stählen im Konzept der Thermoelasto-Plastizität - modelliert mit dem Ansatz einer Zwischenkonfiguration

M. Wolff, M. Böhm

*In der vorliegenden Arbeit werden Phasenumwandlungen und Umwandlungsplastizität (TRIP) beim Stahl im Rahmen der Kontinuumsmechanik modelliert. Dabei werden die Bewegung und die Temperatur des Körpers zusammen mit den Phasenanteilen als „thermokinertischer Prozess mit Phasenumwandlungen“ aufgefasst. Das Ergebnis ist ein makroskopisches Modell, das die Kopplung von mechanische Größen (Verzerrungen, Spannungen), der Temperatur und den Phasenanteilen beschreibt. Ausgangspunkt ist ein geeignet verallgemeinertes Konzept einer spannungsfreien Zwischenkonfiguration, die in der hier betrachteten Situation durch die Umwandlungsplastizität hervorgerufen wird. Aus der Clausius-Duhem-Ungleichung werden Folgerungen für die postulierten Materialgesetze hergeleitet.*

*Das hier vorgeschlagene Modell gestattet die Einbindung unterschiedlicher Modelle für die Phasenumwandlungen wie auch für die Umwandlungsplastizität. Effekte der klassischen Plastizität bleiben in dieser Arbeit unberücksichtigt, lassen sich jedoch in das vorgestellte Konzept ohne prinzipielle Schwierigkeiten einbinden (vgl. hierzu die Arbeit von Wolff und Böhm, 2002a).*

## 1 Einführung

Die vorliegende Arbeit versteht sich sowohl als Beitrag zur Materialtheorie im Kontext der Rationalen Kontinuumsmechanik als auch als Versuch, wesentliche Seiten des Materialverhaltens von Stahl, wie Phasenumwandlungen und Umwandlungsplastizität in ein allgemeineres Modell der Thermoelasto-Plastizität einzufügen. Dabei orientieren wir uns an dem wesentlich von Coleman und Noll (vgl. z.B. die Arbeit von 1963) entwickelte Konzept der Rationalen Mechanik sowie an dem einer spannungsfreien Zwischenkonfiguration bei der Modellierung von plastischen, allgemeiner nichtelastischen Verformungen (vgl. z.B. Haupt, 2000).

Stahl liegt i.A. als eine Mischung seiner Phasen (z.B. Austenit, Martensit, Perlit) vor, die sich durch ihre Mikrostruktur unterscheiden und unterschiedliche Materialparameter besitzen. Diese Phasen werden im hier verwendeten Modell als kontinuierlich verteilt angenommen, so dass der Stahl als eine koexistierende Mischung seiner Phasen (= Komponenten) erscheint, wobei Diffusionsvorgänge vernachlässigt werden. Bei thermomechanischen Prozessen sind daher die mechanischen Größen (Verzerrung, Spannung) nicht nur mit der Temperatur sondern auch mit den Phasenanteilen wechselseitig gekoppelt. Hinzu kommt als wesentliche Besonderheit im Materialverhalten die Umwandlungsplastizität. Während der Phasenumwandlungen führen Spannungen, die wesentlich unter den Fließspannungen der beteiligten Phasen liegen, zu bleibenden Verformungen.

Die vorliegende Arbeit ist eine überarbeitete Version von Wolff und Böhm (2002b). Die Effekte der klassischen Plastizität werden aus Platzgründen nicht berücksichtigt (vgl. hierzu Wolff und Böhm (2002a)). Wir nehmen an, dass während der ablaufenden Prozesse keine größere mechanische Energie eingetragen wird, wie etwa beim Walzen oder Schmieden. Für moderate Abschreckprozesse z.B. erscheint die Vernachlässigung der klassischen Plastizität gerechtfertigt.

Wir verweisen auf die sehr umfangreiche Literatur und die dort zitierten Quellen zum Material- und Umwandlungsverhalten von Stahl und nennen exemplarisch die Übersichtsartikel von Denis (1997), Fischer et al. (1996), Ronda und Oliver (2000) sowie die Dissertationen von Besserdich (1993), Oberste-Brandenburg (1999), Pietzsch (2000a) und Vogelsang (2001).

Eine Zusammenstellung von verschiedenen Umwandlungsmodellen finden sich in Wolff et al. (2003b) sowie in Böhm et al. (2003) zu Vergleichsrechnungen. Die bekannten Modelle der Phasenumwandlungen sind Spezialisierungen unseres allgemeineren kontinuumsmechanischen Ansatzes (vgl. weiter unten die Bilanzgleichung (2.12), das Materialgesetz (3.17) sowie Kapitel 7 der vorliegenden Arbeit).

Für spezielle Anwendungen und Simulationen zu gekoppelten Problemen verweisen wir auf Hömberg (1996), Fuhrmann und Hömberg (1999), Pietzsch (2000b), Wolff et al. (2000) sowie auf die bereits zitierten Dissertationen.

Verschiedentlich ist es notwendig, weitere Kopplungen, z.B. mit elektromagnetischen Feldern, zu betrachten, wie etwa beim Induktionshärten oder Elektroschweißen. Auf diese Effekte wollen wir in der vorliegenden Arbeit nicht eingehen (vgl. Hömberg und Sokolowski (1997), Fuhrmann und Hömberg (1999) sowie Hömberg (2002)).

In der Arbeit auftretende Symbole werden bei ihrem ersten Erscheinen erläutert. An dieser Stelle listen wir von uns verwendete mathematische Standard-Bezeichnungen auf, um den späteren Text zu entlasten.

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

(2) Sei  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$  ein beschränktes Gebiet. Mit  $C(\bar{\Omega})$  bezeichnen wir die Menge der auf  $\bar{\Omega}$  stetigen reellwertigen Funktionen, mit  $C^1(\bar{\Omega})$  die Menge der in  $\Omega$  stetig differenzierbaren Funktionen, deren erste partielle Ableitungen auf  $\bar{\Omega}$  gleichmäßig stetig (und damit auf  $\bar{\Omega}$  stetig fortsetzbar) sind.

Unter  $[C(\bar{\Omega})]^m$  bzw.  $[C^1(\bar{\Omega})]^m$  verstehen wir die (Vektor-) Funktionen von  $\bar{\Omega}$  in  $\mathbb{R}^m$  ( $m = 1, 2, \dots$ ), deren Komponenten jeweils aus  $C(\bar{\Omega})$  bzw.  $C^1(\bar{\Omega})$  sind.

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

- Mit  $C([a, b]; V)$  wird die Menge der auf  $[a, b]$  stetigen Funktionen mit Werten in  $V$  bezeichnet.

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

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

- Eine Funktion  $f : [a, b] \rightarrow V$  heißt stückweise stetig differenzierbar auf  $[a, b]$ , falls

$f \in C([a, b]; V)$  und  $f' \in C_{pw}([a, b]; V)$ . Wir schreiben dann:  $f \in C_{pw}^1([a, b]; V)$ .

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

## 2 Thermoelasto-Plastizität mit Phasenumwandlungen - Vorbereitungen

Im Rahmen der Rationalen Thermomechanik (vgl. z.B. Coleman und Noll (1963), Coleman (1964), Truesdell (1966), Noll (1973), Müller (1973), Haupt (1977, 2000), Sluzalec (1992), Silhavy (1997)) wollen wir ein allgemeines Modell für das thermomechanische Verhalten von (Fest-) Körpern unter Berücksichtigung von Phasenumwandlungen (im Sinne von koexistierenden Mischungen ohne Diffusion) entwickeln. Sukzessive werden Spezialisierungen vorgenommen, wobei wir uns auf die Einbindung der schon erwähnten Umwandlungsplastizität konzentrieren.

Zuerst stellen wir bekannte, in der Folge von uns für die Entwicklung der Materialtheorie benötigte Begriffe bereit. Rein mathematische Definitionen und Erläuterungen finden sich im Anhang.

Für unsere Zwecke genügt die folgende Definition eines Körpers, in der dieser mit seiner Referenzkonfiguration identifiziert wird. Für allgemeinere Darstellungen sei z.B. auf Silhavy (1997) oder Haupt (2000) verwiesen. Eine axiomatische Darstellung der Kontinuumsmechanik auf der Basis differenzierbarer Mannigfaltigkeiten findet sich in Bertram (1989), bezüglich eines alternativen Plastizitätsmodells, das ohne Zwischenkonfiguration auskommt, sei auf die Arbeiten von Bertram (1992, 1999a, 1999b, 2002) verwiesen. Eine darauf aufbauende entsprechende Erweiterung, die Phasenumwandlungen einschließt, wird in Dachkovski und Böhm (2002a, b) vorgestellt.

Für ein  $T > 0$  sei  $J := [0, T]$  ein Grund- (Zeit-) Intervall, welches im Weiteren fixiert sei.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

**Bemerkungen 2.3** (i) Ein thermokinetischer Prozess mit Phasenumwandlungen  $(\chi, \theta, p)$  bestimmt eindeutig einen Prozess  $(F, \theta, p)$  mit  $F = \nabla \chi$ . Wird in der Folge von einem thermokinetischen Prozess  $(F, \theta, p)$  (mit  $F$  aufgefaßt als Deformationsgradient) gesprochen, so wird dabei stets vorausgesetzt, dass eine Bewegung  $\chi$  mit den Eigenschaften in Definition 2.2 (i) existiert, die eindeutig  $F = \nabla \chi$  definiert.

(ii) Wir erwähnen an dieser Stelle, dass in unserem Modellierungsansatz die Phasenanteile  $p$  *nicht* als „innere Variablen“ aufgefasst werden (vgl. Dachkovski und Böhm (2002a, b) für einen alternativen Ansatz). Sie stehen gleichberechtigt neben Bewegung und Temperatur (vgl. hierzu auch Bemerkung 2.4 (ii)). Weiter bemerken wir, dass der Phasenvektor strenggenommen kein geometrischer Vektor, sondern ein Ensemble von  $m$  Skalaren ist.

Die Glattheitsvoraussetzungen an  $\chi, \theta$  und  $p$  wurden im Hinblick auf die aus der Clausius-Duhem-Ungleichung (2.15) zu ziehenden Schlussfolgerungen (Satz 4.5) gewählt. Für die Bilanzgleichungen sind hingegen stärkere Glattheitsvoraussetzungen erforderlich (vgl. (2.9) - (2.15)), obwohl bei entsprechender Wahl des Lösungsbegriffes hier Abschwächungen möglich sind.

Während bei allgemeinen Mischungen oft mit den Massenkonzentrationen gearbeitet wird, werden bei den Phasen des Stahls meist die Volumenkonzentrationen bevorzugt. Daher sprechen wir von Phasenanteilen. Ohne Probleme wäre natürlich auch eine Darlegung des Folgenden mit Massenkonzentrationen möglich.

Wir verwenden zur Beschreibung der Bewegung die Lagrange-Darstellung

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

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

$$u(\xi, t) := \chi(\xi, t) - \xi \quad \text{für } (\xi, t) \in \bar{\Omega} \times J \quad \text{Verschiebung(svektor),} \quad (2.4)$$

$$F(\xi, t) := \nabla_{\xi} \chi(\xi, t) \quad \text{Deformationsgradient,} \quad (2.5)$$

$$C := F^T F, \quad (B = F F^T) \quad \text{rechter (linker) Cauchy-Green-Tensor,} \quad (2.6)$$

$$E := \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T + \nabla \mathbf{u}^T \nabla \mathbf{u}) = \frac{1}{2} (\mathbf{F}^T \mathbf{F} - \mathbf{I}) \quad \text{Greenscher Verzerrungstensor,} \quad (2.7)$$

$$E_L := \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) \quad \text{linearisierter Greenscher Verzerrungstensor.} \quad (2.8)$$

Aus den Bilanzen für Impuls, Drehimpuls, Energie und Entropie werden die Bewegungs-, Wärmeleitungsgleichung und Entropieungleichung (Clausius-Duhem-Ungleichung) in der üblichen Weise gewonnen (vgl. z.B. Haupt (2000), Wilmanski (1998), Silhavy (1997), Marsden und Hughes (1983), Noll (1973), Truesdell (1966) und die dort zitierten Quellen). Außerdem fügen wir die Bilanzgleichungen für (spezielle) Mischungen hinzu. Wir unterstellen die nötige Glattheit der beteiligten Funktionen. Ausgedrückt in Lagrange-Koordinaten lauten diese Beziehungen:

$$\rho_0(\xi) \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2}(\xi, t) - \text{Div} (\mathbf{F} \mathbf{S}(\xi, t)) = \mathbf{f}(\xi, t), \quad (2.9)$$

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}^T, \quad (2.10)$$

$$\rho_0(\xi) \frac{\partial}{\partial t} e(\xi, t) + \text{Div} \mathbf{q}(\xi, t) = \mathbf{F} \mathbf{S}(\xi, t) \bullet \bullet \nabla \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{r}(\xi, t), \quad (2.11)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} p_i(\xi, t) = \Phi_i(\xi, t) + \varphi_i(\xi, t), \quad (2.12)$$

$$\sum_{i=1}^m \Phi_i = 0, \quad (2.13)$$

$$\sum_{i=1}^m \varphi_i = 0, \quad (2.14)$$

$$-\rho_0(\xi) \frac{\partial}{\partial t} \psi(\xi, t) - \rho_0(\xi) \eta(\xi, t) \frac{\partial}{\partial t} \theta(\xi, t) + \mathbf{F} \mathbf{S}(\xi, t) \bullet \bullet \nabla \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} - \frac{1}{\theta} \mathbf{q} \bullet \nabla \theta \geq 0, \quad (2.15)$$

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

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

**Bemerkungen 2.4 (i)** Da wir hier nur Mischungen *ohne* Diffusion betrachten, wie bei der Modellierung von Phasenübergängen im Stahl allgemein üblich, erscheint die Entropieungleichung (auch Clausius-Duhem-Ungleichung genannt) in der Form (2.15) gerechtfertigt (vgl. z.B. Haupt (2000), Müller (1973)). Im selben Ort und zur selben Zeit bekommen alle Phasen die gleiche Bewegung, Spannung, Temperatur, Energie-, Entropiedichten usw. zugeschrieben. In den Bilanzgleichungen für die Phasen (2.12) treten keine Ortsgradienten derselben auf, was mit der Nichtannahme einer Diffusion der Phasen konsistent ist.

**(ii)** In der Regel sind bei Mischungen die äußeren Quelledichten  $\varphi_i$  gleich Null. Aus theoretischen Gründen lassen wir von Null verschiedene Quellen zu. Durch Wahl geeigneter Quellen in den Bilanzgleichungen (2.9), (2.11), (2.12) wird jeder thermokinetische Prozess mit Phasenumwandlungen  $(\chi, \theta, p)$  nach Definition 2.2 auch zu einem real möglichen. Die aus diesem Konzept folgende hinreichend große Auswahl an zulässigen thermokinetischen Prozessen mit Phasenumwandlungen wird bei der Auswertung der Clausius-Duhem-Ungleichung benötigt (vgl. z.B. Coleman (1964), Haupt (1977), Silhavy (1997) für Materialien ohne Phasenumwandlungen).

In der Plastizität wird mit einem „endlichen perfektem Gedächtnis“ gearbeitet. Daher benötigen wir eine (endliche) Geschichte in der folgenden Form.

Für eine Funktion  $v : J \rightarrow L$  ( $L := 3, 3^n, 3^{n^2}$ ) definieren wir in Anlehnung an Coleman (total history) die Geschichte  $v^t : [0, t] \rightarrow L$  der Funktion  $v$  für  $t \in [0, T]$  durch

$$v^t(s) := v(t - s) \quad \text{für } 0 \leq s \leq t \quad (2.16)$$

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

$$v_d^t(s) := v^t(s) - v(t) \quad \text{für } 0 \leq s \leq t. \quad (2.17)$$

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

Wir gehen vom Plastizitätsmodell aus, das auf einer lokal spannungsfreien Zwischenkonfiguration (s. z.B. Haupt (2000)) basiert, und versuchen, die Phasenumwandlungen in dieses Modell zu integrieren. An dieser Stelle unterscheiden wir noch nicht zwischen (klassischer) Plastizität und Umwandlungsplastizität, beides kann sich hinter „inelastisch“ verbergen. In den Formeln (5.5) und (6.4) werden Spezialisierungen vorgenommen. Für die folgenden Größen bringen wir zuerst die mathematische Formulierung und danach die thermomechanische Interpretation.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Die mechanische Interpretation und die verbale Bezeichnung der soeben eingeführten Größen sowie die weitere Charakterisierung der Zwischenkonfiguration erfolgen in Bemerkung 3.3 und natürlich durch die speziellen Materialgesetze eines Körpers in der Definition 3.4. Zunächst ergeben sich folgende Schlüsse.

**Folgerungen 3.2 (i)** Offenbar gilt

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

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

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

wobei  $Q : J \rightarrow SO(n)$  stückweise stetig differenzierbar ist (s. Bezeichnungen am Ende der Einführung).

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

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

in einen rotatorischen und einen Dehnungsanteil zerlegt - analog wie für  $F$  selbst üblich, so bedeutet das Einfügen eines Orthogonalensors nach (3.8), dass  $R_{in}$  durch  $QR_{in}$  zu ersetzen ist. Es tritt also eine mögliche zusätzliche Rotation der Zwischenkonfiguration auf.

Die Eindeutigkeit der Zerlegung (3.1) - bis auf die beschriebene Einfügung eines Orthogonalensors - wird durch die Hinzunahme eines Materialgesetzes erreicht (s. Definition 3.4).

Wir kommen zur thermomechanischen Interpretation der soeben eingeführten, zunächst formalen Größen.

**Bemerkungen 3.3 (i)** Hinter der Zerlegung (3.1) steht das Konzept, die Deformation eines Körpers aufzuteilen in eine plastische oder allgemeiner inelastische und in eine thermoelastische (vgl. Ting (1973), Sluzalec (1992), Miehe (1993), Haupt (2000) und die dort zitierten Quellen). Daher wählen wir die Bezeichnungen der Indices „te“ für thermoelastisch und „in“ für inelastisch. In der folgenden Definition 3.4 wird die Zwischenkonfiguration als lokal spannungsfrei definiert. Das führt dazu, dass i.A.  $F_{in}$  nicht Gradient einer Bewegung ist, ebenso  $\hat{F}_{te}$ . Trotzdem wird oft vom elastischen (oder thermoelastischen) und plastischen (oder inelastischen) Deformationsgradienten gesprochen. Ebenso werden die Größen in (3.2), (3.3) und (3.6) als rechter bzw. linker inelastischer Cauchy-Green-Tensor, inelastischer bzw. thermoelastischer Greenscher Verzerrungstensor bezeichnet. Auf der Zwischenkonfiguration operierende Größen erhalten zur Kennzeichnung ein Dach.

(ii) Der zweite Piola-Kirchhoff-Spannungstensor  $\hat{S}$  lässt sich auf die Zwischenkonfiguration gemäß

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

umrechnen (s. z.B. Haupt (2000)). Diese Übergangsformel ist konsistent mit der in Folgerung 3.2 (ii) beschriebenen Möglichkeit, die Zwischenkonfiguration einer starren Bewegung zu unterwerfen. Wir würden dann

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

erhalten.

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

Zur weiteren Diskussion des Konzeptes der Zwischenkonfiguration sei auf die Literatur (z.B. Haupt (2000), Haupt (1998), Miehe (1993), Sluzalec (1992) sowie auf Bertram (2002) mit einer kritischen Sicht) verwiesen.

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

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

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

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

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

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

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

wobei die  $\tilde{E}_{in}, \hat{S}, \tilde{\psi}, \tilde{\eta}, \tilde{q}, \tilde{\Phi}$  Materialfunktionen sind. Zusätzlich seien  $\tilde{E}_{in}$  und  $\hat{S}$  symmetrische Tensorfunktionen. Außerdem seien stets

$$\det F_{in} = 1 \quad (3.18)$$

sowie

$$\hat{S}(I, \theta, 0, p) = 0 \quad \text{für alle konstanten } \theta \text{ und } p \text{ (I - Einheitstensor)}. \quad (3.19)$$

Desweiteren sei für jeden gegebenen thermokinetischen Prozess  $(F, \theta, p)$  (vgl. Bem. 2.3) der Anteil  $F_{in}$  (und damit auch  $E_{in}$  und  $\hat{F}_{te}$ ) durch (3.12) und (3.3) eindeutig bestimmt, bis auf mögliche orthogonale Transformation gemäß (3.9), wobei (3.18) erfüllt sei.

**Bemerkungen 3.5 (i)** Es gelten neben den Beziehungen (3.12) - (3.19) die vorigen „kinematischen“ Beziehungen, insbesondere (3.7) und (3.3). Zusammen mit (3.3) definiert (3.12) die Zwischenkonfiguration  $F_{in}$  und somit  $E_{in}$  und  $\hat{F}_{te}$  implizit. Die Definition (3.12) ist allgemeiner als z.B.  $E_{in} = \tilde{E}_{in}(F_d^t, \theta_d^t, F, \theta, \nabla\theta, p)$ , umfaßt aber konkrete Modelle, wie weiter unten sichtbar wird.

Zusammengefasst ist das hier verwendete Konzept dadurch charakterisiert, dass jeder Körper durch die (theoretisch mögliche) freie Wahl der äußeren Quellen in den Bilanzgleichungen (2.9), (2.11), (2.12) jeden thermokinetischen Prozess mit Phasenumwandlungen gemäß Definition 2.2 als „seinen real möglichen“ akzeptiert. Durch das Materialgesetz (3.12) erfolgt die eindeutige Zerlegung des Deformationsgradienten  $F$  in die Gestalt (3.1) - bis auf die angesprochene mögliche Orthogonaltransformation. Der Körper akzeptiert also nur Zwischenkonfigurationen, die mit (3.12) verträglich sind.

**(ii)** Die Bedingung (3.18) kann als ein „Volumenerhalt der Zwischenkonfiguration“ interpretiert werden. Diese Forderung wird dadurch gestützt, dass viele inelastische Bewegungen - nach Abzug der thermisch- und umwandlungsbedingten Volumenänderungen - volumenerhaltend sind.

Es ist ebenso möglich, auf die Bedingung (3.18) zu verzichten, wie wir es bei Wolff und Böhm (2002a, b) getan wurde. Dabei wird in (3.13) bis (3.15) eine zusätzliche Abhängigkeit von  $\det F_{in}$  zugelassen, und in einigen nachfolgenden Gleichungen treten zusätzliche Terme auf. Die Grundaussagen sind jedoch analog.

**(iii)** Durch die Beziehung (3.13) wird ausgedrückt, dass sich der Körper bezüglich der Zwischenkonfiguration thermoelastisch (mit integrierten Phasenumwandlungen) verhält.

Aus (3.13) folgt auch, dass es i.A. keinen eindeutigen Zusammenhang zwischen Spannungen und (Gesamt-) Deformation gibt.

**(iv)** Wir lassen in (3.17) eine Abhängigkeit von  $\theta'$  ( $:=$  Zeitableitung von  $\theta$ ) zu, da diese in verschiedenen Modellen für Phasenumwandlungen auftritt. Wir lassen in (3.17) eine Abhängigkeit vom (Orts-)Gradienten von  $\theta$  zu, obwohl eine solche in den bekannten Phasenumwandlungsmodellen nicht auftritt (s. Punkt 7).

**(v)** Durch die Beziehung (3.19) wird die Zwischenkonfiguration als lokal spannungsfrei bei homogener Temperatur- und Phasenverteilung definiert.

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

**Folgerung 3.6** Sei  $(F, \theta, p)$  ein beliebiger thermokinetischer Prozess mit Phasenumwandlungen gemäß Definition 2.3 und Bemerkung 2.3. Dann gelten für die Materialfunktionale in Definition 3.4:

$$\tilde{E}_{in}(F_d^t, \theta_d^t, F, \theta, \nabla\theta, p, (F_{in})_d^t, F_{in}) = \tilde{E}_{in}(F_d^t, \theta_d^t, F, \theta, \nabla\theta, p, (QF_{in})_d^t, QF_{in}), \quad (3.20)$$

$$Q \hat{S}(F_{te}, \theta, \nabla\theta, p) Q^T = \hat{S}(F_{te} Q^T, \theta, \nabla\theta, p), \quad (3.21)$$

$$\hat{\tilde{\psi}}(F_{te}, \theta, \nabla\theta, p) = \hat{\tilde{\psi}}(F_{te} Q^T, \theta, \nabla\theta, p), \quad (3.22)$$

$$\hat{\tilde{\eta}}(F_{te}, \theta, \nabla\theta, p) = \hat{\tilde{\eta}}(F_{te} Q^T, \theta, \nabla\theta, p). \quad (3.23)$$

für alle  $Q \in C_{pw}^1([0, T]; SO(n))$ .

Weitere Einschränkungen an die Materialgesetze beinhaltet die folgende Annahme.

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

$$D_t := L^2(]0, t[, 3^{n^2}) \times L^2(]0, t[, 3) \times 3^{n^2} \times 3 \times 3^n \times 3^m \quad \forall t \in ]0, T].$$

Die Funktionen in der Definition 3.4

$$\tilde{S} : 3^{n^2} \times 3 \times 3^n \times 3^m \rightarrow 3^{n^2}, \quad \tilde{\eta} : 3^{n^2} \times 3 \times 3^n \times 3^m \rightarrow 3,$$

$$\tilde{q} : D_t \rightarrow 3^n, \quad \tilde{\Phi} : L^2(]0, t[, 3^{n^2}) \times L^2(]0, t[, 3) \times 3^{n^2} \times 3 \times 3 \times 3^n \times 3^m \rightarrow 3^m$$

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

$$\tilde{\psi} : 3^{n^2} \times 3 \times 3^n \times 3^m \rightarrow 3, \quad \tilde{E}_{in} : D_t \times L^2(]0, t[, 3^{n^2}) \times 3^{n^2} \rightarrow 3^{n^2}$$

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

Die Wahl der  $L^2$ -Räume anstelle von Räumen stetiger Funktionen erklärt sich damit, dass bei der Berücksichtigung der Vorgeschichte eine Mittelung erfolgt, die durch die Norm in  $L^2$  gut zu erfassen ist. Die Differenzierbarkeitsvoraussetzung lässt sich abschwächen. Wir bemerken, dass - im Unterschied zum Konzept der Visko-Elastizität (s. z.B. Coleman und Noll (1963), Haupt (1977), Krawietz (1986)) - das hier definierte Gedächtnis nicht schwindend ist und sich nur über eine endliche Zeitspanne erstreckt.

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

Die Clausius-Duhem-Ungleichung soll für alle thermokinetischen Prozesse mit Phasenumwandlungen (vgl. Definition 2.2) gelten. Das führt zu weiteren Einschränkungen in den Materialfunktionalen in der Definition 3.4. Hierbei beschreiten wir den von Coleman und Noll vorgeschlagenen Weg zur Auswertung der Entropie-Ungleichung (vgl. z.B. Coleman (1964), Noll (1973), Haupt (1977)). Das von Müller und Liu vorgeschlagene alternative Herangehen (s. Müller (1973)) wird in dieser Arbeit nicht verfolgt.

Wir erhalten Resultate, die analog zu denen für Materialien ohne Phasen (d.h., Mischungskomponenten) sind. Zuerst treffen wir technische Vorbereitungen.

**Definition 4.1** Seien  $\bar{\Omega}$  ein Körper gemäß Definition 3.4,  $(F, \theta, p)$  ein thermokinetischer Prozess auf  $\bar{\Omega} \times [0, t]$  und  $\xi \in \Omega$  beliebig. Sei weiter  $s > 0$  beliebig gewählt mit der Bedingung  $t + s < T$ . Ein thermokinetischer

Prozess  $(\bar{F}, \bar{\theta}, \bar{p})$  auf  $\bar{\Omega} \times [0, t + s]$  heißt thermoelastische Fortsetzung bei eingefrorenen Phasenanteilen im Punkt  $\xi \in \Omega$  des Prozesses  $(F, \theta, p)$  von

$\bar{\Omega} \times [0, t]$  auf  $\bar{\Omega} \times [0, t + s]$ , falls gelten

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

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

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

**Bemerkung 4.2** Nach der Definition des Körpers 3.4 muss für die thermokinetischen Prozesse  $(F, \theta, p)$  und  $(\bar{F}, \bar{\theta}, \bar{p})$  die Bedingung (3.18) erfüllt sein.

Nach Definition 4.1 wird bei einer thermoelastischen Fortsetzung bei eingefrorenen Phasenanteilen auch die Zwischenkonfiguration eingefroren.

Die folgende Annahme postuliert die Existenz einer solchen thermoelastischen Fortsetzung. Außerdem sollen Fortsetzungen, die „in einem Punkt dicht“ bei einer solchen liegen, die Zwischenkonfiguration und die Phasenanteile ebenfalls nicht in diesem Punkt ändern. Diese Annahmen sind Materialannahmen, die zum Beweis der Konsequenzen aus der Clausius-Duhem-Ungleichung benötigt werden. In der Folge sei  $0 < t < T$ .

**Annahme 4.3** Seien  $\bar{\Omega}$  ein Körper gemäß Definition 3.4 und  $(F, \theta, p)$  ein thermokinetischer Prozess auf  $\bar{\Omega} \times [0, t]$ . Dann existiert eine thermoelastische Fortsetzung bei eingefrorenen Phasenanteilen  $(\bar{F}, \bar{\theta}, \bar{p})$  des gegebenen Prozesses  $(F, \theta, p)$  gemäß Definition 4.1 von  $\bar{\Omega} \times [0, t]$  auf  $\bar{\Omega} \times [0, t + s]$  in einem beliebigen  $\xi \in \Omega$ , wobei  $0 < s$  und  $t + s < T$ .

Außerdem existiert ein  $0 < s'(\bar{F}, \bar{\theta}, \bar{p}, \xi) \leq s$  und für alle  $0 < \sigma \leq s'$  existiert ein  $\gamma = \gamma(\bar{F}, \bar{\theta}, \bar{p}, \xi, \sigma) > 0$ , so dass folgende Aussage gilt:

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

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

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

( $\|\cdot\|$  sei die euklidische Norm in  $3^n$ ).

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

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

**Bemerkungen 4.4** (Kommentare zur Definition 4.1 und zur Annahme 4.3)

(i) Ein Einfrieren der Phasenanteile in der thermoelastischen Fortsetzung erscheint sinnvoll, weil die Umwandlungsplastizität in den gängigen Modellen keine Fließgrenze hat (s. Punkt 6). Daher können schon kleine Änderungen in den Phasenanteilen die Zwischenkonfiguration verändern, was wir aus formal-mathematischen Gründen bei obiger Fortsetzungsprozedur ausschließen wollen, um den Satz 4.4 zu beweisen. Wir haben daher die Idee einer thermoelastischen Fortsetzung von Ting (1973) erweitert.

(ii) Ein weiterer Vorteil der konstanten Fortsetzung von  $p$  besteht darin, dass in (3.17) eine Abhängigkeit von  $\theta'$  zugelassen werden kann, die zum einen bei Anwendungen auftritt (vgl. Punkt 7) und zum anderen die Aussagen des Satzes 4.5 nicht gefährdet.

(iii) Aus formal-mathematischen Gründen wird in der Definition 4.1 die Differenzierbarkeitsforderung (4.1) erhoben.

In Ting (1973) werden die Folgerungen aus der Clausius-Duhem-Ungleichung für einen allgemeineren Materialansatz ohne Phasenumwandlungen hergeleitet. Wir wollen einen analogen Satz für unseren Materialansatz beweisen. Für Materialien mit nachlassendem Gedächtnis (und ohne Phasenumwandlungen) wurde ein solcher Satz in Coleman (1964) bewiesen, s.a. Haupt (1977), Silhavy (1997).

**Satz 4.5** (Verallgemeinerte Spannungs- und Entropie-Beziehungen) Sei  $\bar{\Omega}$  ein Körper gemäß der Definition 3.4 und den Annahmen 3.7, 4.3. Dann gelten für jeden thermokinetischen Prozess  $(F, \theta, p)$  die nachfolgenden Beziehungen:

$$\psi = \tilde{\psi}(\hat{F}_{\text{te}}, \theta, p), \quad (4.7)$$

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

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

$$\tilde{S}(\hat{F}_{te}, \theta, p) = \rho_0 \hat{F}_{te}^{-1} \partial_{\hat{F}_{te}}^{\wedge} \tilde{\Psi}(\hat{F}_{te}, \theta, p), \quad (4.10)$$

$$\tilde{\eta}(\hat{F}_{te}, \theta, p) = -\partial_{\theta} \tilde{\Psi}(\hat{F}_{te}, \theta, p), \quad (4.11)$$

$$\frac{1}{\theta} \tilde{q}(\hat{F}_d^t, \theta_d^t, F, \theta, \nabla \theta, p) \cdot \nabla \theta \leq 0 \quad (4.12)$$

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

$$S \bullet \frac{dE_{in}}{dt} - 2 \left( \frac{dF_{in}}{dt} F_{in} S \right) \bullet E_{in} - \rho_0 \frac{\partial \tilde{\Psi}}{\partial p} (\tilde{\Phi} + \varphi) - \frac{1}{\theta} \tilde{q} \cdot \nabla \theta \geq 0 \quad (4.13)$$

in allen  $\xi \in \Omega$  und allen den  $t \in ]0, T[$ , in denen  $(E, \theta, p)$  sowie  $E_{in}$  differenzierbar sind. Wir schicken dem Beweis dieses Satzes zwei technische Lemmata voraus. Das erste ist trivial.

**Lemma 4.6** Es seien  $b, t$  und  $s$  beliebig gegeben mit  $b$  und  $s$  positiv. Dann gelten für die Funktion

$$h(\tau) := \frac{b}{s} \left( 1 - \exp\left(\frac{(\tau-t)(\tau-t-s)}{b}\right) \right) \quad \text{für } \tau \in [t, t+s] \quad (3.14)$$

die Eigenschaften

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

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

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

**Lemma 4.7** Sei  $\bar{\Omega}$  ein Körper gemäß Definition 3.4. Sei  $(\bar{F}, \bar{\theta}, \bar{p})$ , thermoelastische Fortsetzung eines gegebenen thermokinetischen Prozesses  $(F, \theta, p)$  gemäß Annahme 4.2 von  $\bar{\Omega} \times [0, t]$  auf  $\bar{\Omega} \times [0, t+s]$  in einem beliebigen Punkt  $\xi \in \Omega$ . Dann existiert ein  $0 < \sigma \leq s$ , so dass folgende Aussage gilt:

Für jedes  $0 < \sigma' \leq \sigma$ , für jedes  $\varepsilon > 0$ , für beliebige  $A \in 3^{n^2}$ ,  $a \in 3^n$  und  $\alpha \in 3$  existiert ein thermokinetischer Prozess  $(G, \omega, \pi)$  auf  $\bar{\Omega} \times [0, t+\sigma']$ , der Fortsetzung von  $(F, \theta, p)$  auf  $[t, t+\sigma']$  ist und folgende Eigenschaften besitzt:

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

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

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

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

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

( $\|\bullet\|$  Norm in  $L^2(0, T; 3^{n^2})$  bzw. in  $L^2(0, T; 3)$ , ' - Ableitung nach der Zeit)

**Beweis:** Nach Annahme 4.2 existiert für  $(\bar{F}, \bar{\theta}, \bar{p})$  und für jedes  $\xi \in \Omega$  ein  $0 < s'(\bar{F}, \bar{\theta}, \bar{p}, \xi) \leq s$  und für alle  $0 < \sigma' \leq s'$  existiert ein  $\gamma = \gamma(\bar{F}, \bar{\theta}, \bar{p}, \xi, \sigma') > 0$ , so dass die dortigen Aussagen erfüllt sind. Seien nun  $0 < \sigma' \leq s'$ ,  $\varepsilon > 0$ ,  $A \in 3^n$ ,  $a \in 3^n$  und  $\alpha \in 3$  beliebig gegeben. Für dieses  $\sigma'$  (anstelle von  $s$ ) und ein noch zu bestimmendes  $b > 0$  konstruieren wir mit Hilfe der Funktion  $h$  aus Lemma 4.4 eine Funktion  $(G, \omega, \pi)$  in folgender Weise:

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

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

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

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

Dabei sind  $(\bullet | \bullet)$  das Skalarprodukt in  $3^n$  und  $\zeta : 3^+ \rightarrow [0, 1]$  eine glatte Schnittfunktion mit Träger in  $\bar{B}_1(0) \subset 3^n$  und  $\zeta = 1$  auf  $\bar{B}_{\frac{1}{2}}(0)$ . Es lässt sich zeigen, dass die so konstruierte Funktion  $(G, \omega, \pi)$  den behaupteten Anforderungen genügt. Für die technischen Details verweisen wir auf Wolff und Böhm (2002b).

**Beweis von Satz 4.5:** Die tragende Säule des Beweises ist die Tatsache, dass aus

$$ab + c \geq 0 \quad \text{für alle } b \in 3$$

die Aussagen

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

folgen. Mit dieser einfachen Idee wird auch der entsprechende Satz in Coleman (1964) bewiesen. Aufwendig sind die technischen Details, die in Abhängigkeit von den konkreten Ansätzen für die Materialfunktionale variieren.

Sei  $(F, \theta, p)$  ein beliebiger thermokinetischer Prozess auf  $\bar{\Omega} \times [0, t]$  ( $t \in ]0, T[$ ). Für jedes  $\xi \in \Omega$  existiert eine thermoelastische Fortsetzung (bei eingefrorenen Phasenanteilen)  $(\bar{F}, \bar{\theta}, \bar{p})$  auf  $\bar{\Omega} \times [0, t + s]$  ( $t < s < T$ ) nach der Annahme 4.2. Nach Lemma 4.6 gibt es ein  $0 < \sigma \leq s$ , so dass für beliebig gegebene  $0 < \sigma' \leq \sigma$ ,  $\varepsilon > 0$ ,  $A \in 3^n$ ,  $a \in 3^n$ ,  $\alpha \in 3$  eine Fortsetzung  $(G, \omega, \pi)$  von  $(F, \theta, p)$  auf  $[t, t + \sigma']$  mit den in diesem Lemma behaupteten Eigenschaften existiert.

Dann gilt für  $(G, \omega, \pi)$  im Punkt  $(\xi, t + \sigma')$  die Clausius-Duhem-Ungleichung (2.15), wobei die Größen dort auf die Referenzkonfiguration bezogen sind. Somit ist die Beziehung (3.10) zu verwenden, um zu  $\hat{S}$  zu gelangen. Wir berechnen die (totale) Ableitung  $\frac{d}{dt} \tilde{\Psi}$  für die Argumente  $(\hat{G}_{te}, \omega, \pi)$  im Punkt  $(\xi, t + \sigma')$  bzw. im entsprechenden Punkt der Zwischenkonfiguration:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \tilde{\Psi} &= \partial_{F_{te}}^\wedge \tilde{\Psi} \bullet \bullet \frac{d}{dt} \hat{G}_{te} + \partial_\theta \tilde{\Psi} \alpha + \partial_{v_\theta} \tilde{\Psi} \bullet a = \partial_{F_{te}}^\wedge \tilde{\Psi} \bullet \bullet A G_{in}^{-1} + \partial_\theta \tilde{\Psi} \alpha + \partial_{v_\theta} \tilde{\Psi} \bullet a = \\ &= \partial_{F_{te}}^\wedge \tilde{\Psi} G_{in}^{-T} \bullet \bullet A + \partial_\theta \tilde{\Psi} \alpha + \partial_{v_\theta} \tilde{\Psi} \bullet a \end{aligned} \quad (4.26)$$

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

$$\begin{aligned}
& \{ \hat{G}_{te} \tilde{S}(\hat{G}_{te}, \omega, \nabla \omega, \pi) G_{in}^{-T} - \rho_0 \partial_{F_{te}}^{\wedge} \tilde{\Psi}(\hat{G}_{te}, \omega, \nabla \omega, \pi, G_{in}^{-T}) \} \bullet \bullet A + \\
& - \{ \rho_0 \partial_{\theta} \tilde{\Psi}(\hat{G}_{te}, \omega, \nabla \omega, \pi) + \rho_0 \tilde{\eta}(\hat{G}_{te}, \omega, \nabla \omega, \pi) \} \alpha + \\
& - \rho_0 \partial_{\nabla \theta} \tilde{\Psi}(\hat{G}_{te}, \omega, \nabla \omega, \pi) \bullet a - \frac{1}{\omega} \tilde{q}(G_d^{t+\sigma'}, \omega_d^{t+\sigma'}, G, \omega, \nabla \omega, \pi) \bullet \nabla \omega \geq 0.
\end{aligned} \tag{4.27}$$

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

$$\begin{aligned}
& \{ \hat{F}_{te} \tilde{S}(\hat{F}_{te}, \bar{\theta}, \nabla \bar{\theta}, \bar{p}, \bar{F}_{in}^{-T} - \rho_0 \partial_{F_{te}}^{\wedge} \tilde{\Psi}(\hat{F}_{te}, \bar{\theta}, \nabla \bar{\theta}, \bar{p}, \bar{F}_{in}^{-T}) \} \bullet \bullet A + \\
& - \{ \rho_0 \partial_{\theta} \tilde{\Psi}(\hat{F}_{te}, \bar{\theta}, \nabla \bar{\theta}, \bar{p}) + \rho_0 \tilde{\eta}(\hat{F}_{te}, \bar{\theta}, \nabla \bar{\theta}, \bar{p}) \} \alpha + \\
& - \rho_0 \partial_{\nabla \theta} \tilde{\Psi}(\hat{F}_{te}, \bar{\theta}, \nabla \bar{\theta}, \bar{p}) \bullet a - \frac{1}{\bar{\theta}} \tilde{q}(\bar{F}_d^{t+\sigma'}, \bar{\theta}_d^{t+\sigma'}, \bar{F}, \bar{\theta}, \nabla \bar{\theta}, \bar{p}) \bullet \nabla \bar{\theta} + \\
& - \{ \frac{1}{\bar{\theta}} \tilde{q}(G_d^{t+\sigma'}, \omega_d^{t+\sigma'}, \bar{F}, \bar{\theta}, \nabla \bar{\theta}, \bar{p}) \bullet \nabla \bar{\theta} - \frac{1}{\bar{\theta}} \tilde{q}(\bar{F}_d^{t+\sigma'}, \bar{\theta}_d^{t+\sigma'}, \bar{F}, \bar{\theta}, \nabla \bar{\theta}, \bar{p}) \} \bullet \nabla \bar{\theta} \geq 0.
\end{aligned} \tag{4.28}$$

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

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

Somit folgt auch (4.12) wegen der Stetigkeit von  $\tilde{q}$ .

Zum **Beweis der reduzierten Dissipationsungleichung** (4.13):

Aus der Clausius-Duhem-Ungleichung (2.15) folgt (durch Umformen des Dissipationsterms)

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

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

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

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

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

**Folgerung 4.8** (Vereinfachung der Wärmeleitungsgleichung) Unter den Voraussetzungen des Satzes 4.4 ist die Wärmeleitungsgleichung (2.11) äquivalent zu

$$\begin{aligned}
\rho_0 c_e \frac{\partial \theta}{\partial t} + \text{Div } q = \theta \frac{\partial S}{\partial \theta} \bullet \bullet \frac{d E_{te}}{dt} + S \bullet \bullet \frac{d E_{in}}{dt} + 2 (F_{in}^{-1} \frac{d F_{in}}{dt} (S - \theta \frac{\partial S}{\partial \theta})) \bullet \bullet E_{te} + \\
+ \theta F S \frac{\partial F_{in}^T}{\partial \theta} \bullet \bullet \frac{d \hat{F}_{te}}{dt} - \rho_0 \frac{\partial c_e}{\partial \bar{p}}(\tilde{\Phi} + \varphi) + r \quad \text{in } \Omega \times ]0, T[
\end{aligned} \tag{4.31}$$

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

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

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

erhalten wir

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

In Anlehnung und Verallgemeinerung (vgl. z.B. Hömberg (1996)) nennen wir die Größen

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

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

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

$$\rho_0 \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} - \text{Div} ((\mathbf{I} + \nabla \mathbf{u}) \mathbf{S}) = \mathbf{f} \quad \text{in } \Omega \times ]0, T[, \quad (4.33)$$

$$\begin{aligned} \rho_0 c_e \frac{\partial \theta}{\partial t} + \text{Div} \mathbf{q} = \theta \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \theta} \bullet \bullet \frac{d\mathbf{E}_{te}}{dt} + \mathbf{S} \bullet \bullet \frac{d\mathbf{E}_{in}}{dt} + 2 (\mathbf{F}_{in}^{-1} \frac{d\mathbf{F}_{in}}{dt} (\mathbf{S} - \theta \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \theta})) \bullet \bullet \mathbf{E}_{te} + \\ + \theta \mathbf{F} \mathbf{S} \frac{\partial \mathbf{F}_{in}^T}{\partial \theta} \bullet \bullet \frac{d\hat{\mathbf{F}}_{te}}{dt} - \rho_0 \sum_{i=1}^{m-1} \frac{\partial \hat{e}}{\partial p_i} (\tilde{\Phi}_i + \varphi_i) + r \end{aligned} \quad \text{in } \Omega \times ]0, T[, \quad (4.34)$$

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

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

$$\psi = \hat{\psi}(\hat{\mathbf{F}}_{te}, \theta, p), \quad (4.37)$$

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

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

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

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

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

## 5 Weitere Spezialisierungen

Wir wollen jetzt die allgemeinen Ansätze in der Definition 3.4 und am Ende des vorherigen Kapitels weiter spezialisieren. Wir betonen an dieser Stelle nochmals, dass die Volumenänderungen infolge von Temperatur- und Phasenänderungen im thermoelastischen Anteil  $\hat{F}_{te}$  erfasst werden. Sei der Körper weiter isotrop (vgl. Müller (1973), Silhavy (1997), Haupt (2000)), es gelte also - als Spezialisierung von (3.14) -

$$\hat{S} = 2\mu \hat{E}_{te} + \lambda(\text{tr} \hat{E}_{te}) \mathbf{I} + \delta \hat{E}_{te}^2 - (\det \hat{F}_{te}) \left\{ 3K\alpha(\theta - \theta_0) + K \frac{\rho_0 - \rho}{\rho} \right\} (2 \hat{E}_{te} + \mathbf{I})^{-1} \quad (5.1)$$

Hierbei sind:  $\mu, \lambda$  - Lamé-Koeffizienten,  $\delta$  - Koeffizient beim nichtlinearen Term,  $K$  - Kompressionsmodul,  $\alpha$  - linearer Wärmeausdehnungskoeffizient,  $\rho_0$  - Dichte der Referenzkonfiguration,  $\rho$  - aktuelle Dichte, bezogen auf Referenztemperatur  $\theta_0$ . Die Herleitung der Umwandlungsspannungen erfolgt in bekannter Weise (s. z.B. Wolff und Böhm (2002a) oder Wolff et al. (2003a)). Wegen

$$\det \hat{F}_{te} = (\det (2\hat{E}_{te} + \mathbf{I}))^{\frac{1}{2}} (= \det F) \quad \text{und} \quad \rho = \rho(p) \quad (5.2)$$

steht die Darstellung (5.1) nicht im Widerspruch zu (3.14).

Wir bemerken, dass die Beziehung (5.1) konsistent ist mit dem Transformationsverhalten der beteiligten Tensoren (beachte (3.11)), falls in die Zerlegung (3.1) ein Orthogonaltensor gemäß Folgerung 3.2. (ii) eingefügt wird. Eine Umrechnung von (5.1) auf Größen bezüglich der Referenzkonfiguration ergibt unter Beachtung von (3.3), (3.4) und (3.5)

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

Die Größen  $\mu, \lambda, \delta, K$  und  $\alpha$  hängen von  $\theta$  und  $p$  ab. Sie werden oft nach der Mischungsregel aus den entsprechenden Größen für die einzelnen Phasen berechnet.

Wir spezialisieren jetzt die Beziehung (3.13), indem wir ansetzen, dass der inelastische Verzerrungstensor von der Geschichte der Spannung abhängt. In Experimenten tritt keine inelastische Deformation auf, wenn der Deviator des Cauchyschen Spannungstensors verschwindet. Über den bekannten Zusammenhang

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

setzen wir

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

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

**Bemerkung 5.1** Wird der Ausdruck (5.3) für  $S$  in (5.4), und danach in (5.5) eingesetzt, so entsteht ein Ausdruck der Form (3.13). Damit sind die obigen Darlegungen mathematisch konsistent.

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

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

mit  $\kappa > 0$  (Wärmeleitfähigkeit). Das bisher Ausgeführte gilt in dieser Allgemeinheit sowohl für die klassische Plastizität als auch für die Umwandlungsplastizität (TRIP) oder andere bleibende Verformungen. Die Unterschiede liegen in der konkreten Gestalt des Funktionals  $F$  in (5.5). Ausschlaggebend für die Berücksichtigung plastischer Effekte - sowohl klassischer Art als auch aus der Umwandlungsplastizität herrührend - ist die Modellierung des Funktionals  $F$  in der Gleichung (5.5). Im nächsten Punkt wollen wir hierauf näher eingehen, wobei wir hier nur die Umwandlungsplastizität betrachten. In Wolff und Böhm (2002a) finden sich Ausführungen zur simultanen Modellierung von klassischer und Umwandlungsplastizität.

## 6 Umwandlungsplastizität

Zum Phänomen der Umwandlungsplastizität selbst verweisen wir auf die umfangreiche Literatur, so z.B. auf Mitter (1987), Leblond et al. (1989a, b), Fischer et al. (1996, 2000), Denis (1997), Ronda und Oliver (2000), Besserdich (1993), Oberste-Brandenburg (1999), Pietzsch (2000a, b) und Vogelsang (2001), in der teilweise auch historische Entwicklungen aufgezeigt werden. Zuerst wurde die Umwandlungsplastizität für den einachsigen Zugversuch bei konstanter Belastung und einer Phasenumwandlung beobachtet und modelliert. In der Folge wurden der mehrdimensionale Fall unter nichtkonstanter Belastung modelliert (s. Mitter (1987), Leblond (1989a)). Bei der Bildung einer Phase (z.B. Martensit durch Abschrecken) wurde folgender Zusammenhang vorgeschlagen

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

wobei  $E_{L,TRIP}$  ein durch die Umwandlungsplastizität hervorgerufener zusätzlicher linearisierter Verzerrungstensors ist. Die Bezeichnung TRIP rührt her von „transformation-induced plasticity“. Weiter sind  $\tau^*$  der Deviator des Cauchyschen Spannungstensors  $\tau$ ,  $z$  die sich bildende Phase,  $z'$  – Zeitableitung von  $z$ ,  $K$  eine Materialkonstante und  $\Psi$  eine monotone Funktion auf  $[0, 1]$  mit  $\Psi(0) = 0$  und  $\Psi(1) = 1$ . Die Konstante  $K$  wird z.B. in Fischer et al. (1996) angegeben zu

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

für Stahl 42CrMo6 (vgl. auch Besserdich (1994)), für die Funktion  $\Psi$  werden von den Autoren verschiedene Varianten vorgeschlagen (s. Fischer et al. (1996) mit einer Auflistung), so z.B.

$$\begin{array}{lll} \Psi(z) := z(1 - \ln(z)) & \text{in Leblond et al. (1989a)} & \text{sowie} \\ \Psi(z) := z & \text{in Tanaka und Sato (1985)} & \text{und} \\ \Psi(z) := z(2 - z) & \text{in Denis et al. (1983).} & \end{array} \quad (6.2)$$

In Leblond et al. (1989a) werden unter bestimmten Annahmen theoretische Begründungen für  $\Psi$  und  $K$  gegeben und  $K$  durch andere Größen ausgedrückt. Fußend auf Inoue et al. (1989) lässt sich der Ansatz (6.1) auf  $m$  Phasen erweitern zu

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

mit phasenindividuellen  $K_i$  und  $\Psi_i$ . Mit der Heaviside-Funktion berücksichtigen wir nur jeweils die Bildung einer Phase (und nicht deren Abnahme.) (Hier weichen wir von Inoue (1989) ab. Ebenso wird dort statt  $\tau^*$  die Differenz von  $\tau^*$  mit dem Deviator des Eigenspannungstensors genommen.) Eine noch weitergehende Verallgemeinerung, die auch eine nicht durch Spannungen hervorgerufene Umwandlungsplastizität zulässt, wird in Fischer et al. (2000) vorgeschlagen. Diese und andere mögliche Verallgemeinerungen berühren nicht das hier vorgeschlagene Vorgehen, die Umwandlungsplastizität mit Hilfe der Zwischenkonfiguration ins allgemeine Modell der Thermoelastoplastizität mit Phasenumwandlungen einzubinden.

Für große Deformationen wird  $E$  anstelle von  $\varepsilon$  gewählt. Unter der Voraussetzung  $E_{TRIP}(0) = 0$ , (folgt aus Annahme des Modells) folgt aus (6.3) die Beziehung

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

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

$$F = \hat{F}_{te} F_{TRIP}, \quad (6.5)$$

wobei die Zwischenkonfiguration jetzt von der Umwandlungsplastizität erzeugt wird. (Der Index „in“ wird also durch „TRIP“ ersetzt.) Wie Experimente zeigen, führt Umwandlungsplastizität nicht zur Volumenänderung.

Wie vorher wird die mögliche Volumenänderung infolge Phasenumwandlungen in den thermoelastischen Teil integriert.

Wir erhalten somit die **Grundgleichungen der isotropen Umwandlungsplastizität** aus den Gleichungen (4.33) - (4.41), wobei (4.36) durch (6.4) zu ersetzen ist (mit den Indices „TRIP“ anstelle von „in“).

$$\rho_0 \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} - \text{Div} (\mathbf{I} + \nabla \mathbf{u}) \mathbf{S} = \mathbf{f} \quad \text{in } \Omega \times ]0, T[, \quad (6.6)$$

$$\begin{aligned} \rho_0 c_e \frac{\partial}{\partial t} \theta - \text{Div} (\kappa \nabla \theta) = \theta \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \theta} \bullet \bullet \frac{d\mathbf{E}_{te}}{dt} + \mathbf{S} \bullet \bullet \frac{d\mathbf{E}_{TRIP}}{dt} + 2 (\mathbf{F}_{TRIP}^{-1} \frac{d\mathbf{F}_{TRIP}}{dt} (\mathbf{S} - \theta \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \theta})) \bullet \bullet \mathbf{E}_{te} + \\ + \theta \mathbf{F} \mathbf{S} \frac{\partial \mathbf{F}_{TRIP}^T}{\partial \theta} \bullet \bullet \frac{d \hat{\mathbf{F}}_{te}}{dt} - \rho_0 \sum_{i=1}^{m-1} \frac{\partial \hat{e}}{\partial p_i} (\tilde{\Phi}_i + \varphi_i) + \mathbf{r} \quad \text{in } \Omega \times ]0, T[, \end{aligned} \quad (6.7)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} p_i = \tilde{\Phi}_i(\mathbf{E}_d^t, \mathbf{E}, \theta_d^t, \theta, \theta', \nabla \theta, \mathbf{p}) + \varphi_i \quad i = 1, \dots, m-1, \quad \text{in } \Omega \times ]0, T[, \quad (6.8)$$

$$\mathbf{E}_{TRIP}(t) = \frac{3}{2} \sum_{i=1}^m K_i \int_0^t \frac{\partial}{\partial z} \Psi_i(p_i) p_i' H(p_i') \tau^* ds, \quad (6.9)$$

$$\det \mathbf{F}_{TRIP} = 1 \quad \text{in } \Omega \times ]0, T[, \quad (6.10)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{S} = 2\mu \mathbf{C}_{TRIP}^{-1} (\mathbf{E} - \mathbf{E}_{TRIP}) \mathbf{C}_{TRIP}^{-1} + \lambda \text{tr}(\mathbf{F}_{TRIP}^{-T} (\mathbf{E} - \mathbf{E}_{TRIP}) \mathbf{F}_{TRIP}^{-1}) \mathbf{C}_{TRIP}^{-1} + \\ + \delta \mathbf{C}_{TRIP}^{-1} [(\mathbf{E} - \mathbf{E}_{TRIP}) \mathbf{C}_{TRIP}^{-1}]^2 - (\det \mathbf{F}) \{ 3K\alpha (\theta - \theta_0) + K \frac{\rho_0 - \rho}{\rho} \} \mathbf{C}^{-1}, \end{aligned} \quad (6.11)$$

sowie

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T + \nabla \mathbf{u}^T \nabla \mathbf{u}), \quad \mathbf{E}_{TRIP} = \frac{1}{2} (\mathbf{F}_{TRIP}^T \mathbf{F}_{TRIP} - \mathbf{I}), \quad (6.12)$$

$$\mathbf{E}_{te} = \mathbf{E} - \mathbf{E}_{TRIP}, \quad \mathbf{C}_{TRIP} = 2 \mathbf{E}_{TRIP} + \mathbf{I}, \quad \mathbf{C} = 2 \mathbf{E} + \mathbf{I}.$$

Gesucht sind die Verschiebungen  $\mathbf{u}$ , die Temperatur  $\theta$ , die Phasenanteile  $\mathbf{p}$ , sowie das Tensorfeld  $\mathbf{F}_{TRIP}$ .

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

Gilt speziell  $\mathbf{F}_{TRIP}(t) = \mathbf{0}$  für alle Zeiten, so folgen aus den obigen Gleichungen (6.6) - (6.12) die Gleichungen der Thermoelastizität mit Phasenumwandlungen (vgl. Wolff (2000)).

In Wolff et al. (2003c) wurden nach Linearisierungen und anderen Vereinfachungen des Systems (6.6) - (6.12) ein Modell zur Beschreibung eines Abschreckversuchs erhalten und Simulationen durchgeführt.

## 7 Bemerkungen zu Modellen für Phasenumwandlungen

Ein differenziertes Eingehen auf die verschiedenen vorhandenen Modelle für Phasenumwandlungen im Stahl ist an dieser Stelle nicht möglich. Wir verweisen exemplarisch auf Leblond und Devaux (1984), Leblond et al. (1985), Hougardy und Yamazaki (1986), Denis (1997), Mittemeijer (1992), Mittemeijer und Sommer (2002), Larsson und Mangard (1995) sowie auf Böhm et al. (2003) für einen Vergleich einiger Umwandlungsmodelle beim Abkühlen des Stahls 100Cr6 sowie auf eine ausführliche Zusammenstellung wichtiger Umwandlungsmodelle in Wolff et al. (2003b).

Wir zeigen an einem Beispiel die Integration eines gängigen Umwandlungsmodells in das oben entwickelte allgemeine kontinuumsmechanische Konzept. Dazu wird die idealisierte Situation betrachtet, in der nur die beiden Phasen Austenit und Perlit auftreten. Deren Volumenanteile seien entsprechend mit  $p_1$  und  $p_2$  bezeichnet. Für die Umwandlung von Austenit zu Perlit gilt bei konstanter Temperatur die Johnson-Mehl-Avrami-Differential-Gleichung

$$p_2'(\xi, t) = (\bar{p}_2(\theta) - p_2(\xi, t)) \frac{n_2(\theta)}{\tau_2(\theta)} \left( -\ln(1 - p_2(\xi, t) \bar{p}_2(\theta)^{-1}) \right)^{1 - \frac{1}{n_2(\theta)}} \quad (7.1)$$

Hierbei ist  $\bar{p}_2(\theta)$  der von der Temperatur  $\theta$  abhängige Gleichgewichtsanteil von Perlit,  $n_2$  und  $\tau_2$  sind temperaturabhängige Materialparameter mit  $n_2(\theta) \geq 1$  (s. z.B. Hunkel et al. (1999)). Mit  $\ln$  ist der (natürliche) Logarithmus bezeichnet,  $p'$  steht für die Zeitableitung von  $p$ . Die Gleichung (7.1) gilt - wie auch die folgenden - in  $\Omega \times ]0, T[$ .

Für nichtisotherme Abkühlvorgänge wurde in Hunkel et al. (1999) die Formel (7.1) erweitert zu

$$p_2'(\xi, t) = (\bar{p}_2(\theta) - p_2(\xi, t)) \frac{n_2(\theta)}{\tau_2(\theta)} \left( -\ln(1 - p_2(\xi, t) \bar{p}_2(\theta)^{-1}) \right)^{1 - \frac{1}{n_2(\theta)}} f_2(\theta, \theta'). \quad (7.2)$$

Dabei hat  $f_2$  (mit  $f_2(\theta, 0) = 1$ ) eine Korrekturfunktion, da ohne  $f_2$  (7.2) nur für konstantes  $\theta$  gilt.

Die Gleichung (7.2) gilt, falls die Temperatur  $\theta$  unterhalb der Perlit-Starttemperatur  $\theta_p$  liegt, und falls der Gleichgewichtsanteil des Perlits noch nicht erreicht ist. Daher muss (7.2) erweitert werden zu

$$p_2'(\xi, t) = \frac{n_2(\theta)}{\tau_2(\theta)} \left( -\ln(1 - p_2(\xi, t) \bar{p}_2(\theta)^{-1}) \right)^{1 - \frac{1}{n_2(\theta)}} f_2(\theta, \theta') \max\{\bar{p}_2(\theta) - p_2(\xi, t), 0\} H(\theta_p - \theta(t)) \quad (7.3)$$

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

Die Gleichung (7.3) ist nicht zur gleichzeitigen Beschreibung der Rückumwandlung von Perlit zu Austenit geeignet, falls  $\theta$  die entsprechende Start-Temperatur  $\theta_a$  übertrifft, wobei wir  $\theta_a \geq \theta_p$  annehmen.

Die Umwandlung von Perlit zu Austenit verläuft auf gleicher Grundlage wie die von Austenit zu Perlit - mit eigenen Materialparametern. Somit können wir für die Bildung von Austenit aus Perlit schreiben

$$p_1'(\xi, t) = \frac{n_1(\theta)}{\tau_1(\theta)} \left( -\ln(1 - p_1(\xi, t) \bar{p}_1(\theta)^{-1}) \right)^{1 - \frac{1}{n_1(\theta)}} f_1(\theta, \theta') \max\{\bar{p}_1(\theta) - p_1(\xi, t), 0\} H(\theta(t) - \theta_a) \quad (7.4)$$

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

$$p_1'(\xi, t) = \frac{n_1(\theta)}{\tau_1(\theta)} \left( -\ln(1 - p_1(\xi, t) \bar{p}_1(\theta)^{-1}) \right)^{1 - \frac{1}{n_1(\theta)}} f_1(\theta, \theta') \max\{\bar{p}_1(\theta) - p_1(\xi, t), 0\} H(\theta(t) - \theta_a) + \quad (7.5)$$

$$- \frac{n_2(\theta)}{\tau_2(\theta)} \left( -\ln(1 - p_2(\xi, t) \bar{p}_2(\theta)^{-1}) \right)^{1 - \frac{1}{n_2(\theta)}} f_2(\theta, \theta') \max\{\bar{p}_2(\theta) - p_2(\xi, t), 0\} H(\theta_p - \theta(t)),$$

$$p_2'(\xi, t) = \frac{n_2(\theta)}{\tau_2(\theta)} \left( -\ln(1 - p_2(\xi, t) \bar{p}_2(\theta)^{-1}) \right)^{1 - \frac{1}{n_2(\theta)}} f_2(\theta, \theta') \max\{\bar{p}_2(\theta) - p_2(\xi, t), 0\} H(\theta_p - \theta(t)) + \quad (7.6)$$

$$- \frac{n_1(\theta)}{\tau_1(\theta)} \left( -\ln(1 - p_1(\xi, t) \bar{p}_1(\theta)^{-1}) \right)^{1 - \frac{1}{n_1(\theta)}} f_1(\theta, \theta') \max\{\bar{p}_1(\theta) - p_1(\xi, t), 0\} H(\theta(t) - \theta_a).$$

Die zugehörigen Anfangsbedingungen lauten

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

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

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

gelten müssen. Aus (7.5) - (7.8) folgt die Bedingung (2.1) für den Phasenvektor  $p = (p_1, p_2)$  zu beliebigen Zeitpunkten  $t \geq 0$  und an beliebigen Orten  $\xi \in \Omega$ .

Aus mathematischen Gründen müssen die Anfangswerte  $p_{01}$  und  $p_{02}$  verschieden von null und eins sein. Sonst müssen die obigen Gleichungen in einer anderen Form geschrieben werden, für Einzelheiten sei auf Wolff et al. (2003b) verwiesen.

Die Gleichungen (7.5), (7.6) berücksichtigen nicht den oft vernachlässigten Einfluss der Spannungen auf die Phasentransformationen, der bei größeren anliegenden Zug- oder Druckspannungen beträchtlich sein kann (vgl. z.B. Ahrens et al. (2000, 2002) für experimentelle Untersuchungen sowie Inoue und Wang (1985) für Ansatz und Simulation). Eine derartige Abhängigkeit könnte dadurch modelliert werden, dass die Materialfunktionen in (7.5), (7.6) auch von den Invarianten des Cauchyschen Spannungstensors abhängen.

## 8 Abschließende Bemerkungen

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

Bei unserem Vorgehen bilden die Bewegung, die Temperatur und die Phasenanteile den „thermodynamischen Prozess mit Phasenumwandlungen“.

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

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

## Danksagung

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

Die Autoren bedanken sich herzlich bei den Herren Prof. P. Haupt (Universität Kassel), Prof. A. Bertram (Universität Magdeburg) und Dr. D. Helm (Universität Kassel) für die fruchtbaren Diskussionen zum Thema.

## Literatur

- Ahrens, U., Besserdich, G., Maier, H. J.: Spannungsabhängiges bainitisches und martensitisches Umwandlungsverhalten eines niedrig legierten Stahl. *HTM*, 55, (2000), 329-338.
- Ahrens, U., Besserdich, G., Maier, H. J.: Sind aufwändige Experimente zur Beschreibung der Phasenumwandlungen von Stählen noch zeitgemäß? *HTM*, 57, (2002), 99-105.
- Bertram, A.: *Axiomatische Einführung in die Kontinuumsmechanik*. BI-Wissenschaftsverlag, Mannheim, (1989).
- Bertram, A.: Description of Finite Inelastic Deformations. Proceedings of *MECAMAT92 International Seminar of Multiaxial Plasticity*, Sept. 1-4 1992 in Cachan, France. Eds.: Benallal, A., Billardon, R., Marquis, D., 821-835, (1992).
- Bertram, A.: An alternative approach to finite plasticity based on material isomorphisms. *Intern. J. of Plasticity*, 15, (1999a), 353-374.
- Bertram, A.: The Dissipation-Inequality of Rate-independent Thermoplasticity, *Z. Angew. Math. Mech.*, 79, (1999b), S195-S198.
- Bertram, A.: Finite thermoplasticity based on isomorphisms. Institut für Mechanik, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Preprint IFME 02/1, (2002), eingereicht zum *Intern. J. of Plasticity*.
- Besserdich, G.: *Untersuchungen zur Eigenspannungs- und Verzugsbildung beim Abschrecken von Zylindern aus den Stählen 42CrMo4 und Ck45 unter Berücksichtigung der Umwandlungsplastizität*. Universität Karlsruhe, Dissertation, (1993).
- Besserdich, G., Scholtes, B., Müller, H., Macherauch, E.: Consequences of transformation plasticity on the development of residual stresses and distortions during martensitic hardening of SAE 4140 steel cylinders. *Steel Res.*, 65, 1, (1994), 41-46.
- Böhm, M., Hunkel, M., Schmidt, A., Wolff, M.: Evaluation of various phase-transition models for 100Cr6 for application in commercial FEM programs. Eingereicht zu den Proceedings der 2<sup>nd</sup> *Intern. Conference Thermal Process Modelling and Computer Simulation*, Nancy, France, (2003).
- Coleman, B. D., Noll, W.: The Thermodynamics of Elastic Materials with Heat Conduction and Viscosity. *Arch. Rat. Mech. Ana.*, 13, (1963), 167 - 178.
- Coleman, B. D.: Thermodynamics of Materials with Memory. *Arch. Rat. Mech. Ana.*, 17, (1964), 1-46.
- Dachkovski, S., Böhm, M.: A Note on Finite Thermoplasticity with Phase Changes. *Berichte aus der Technomathematik*, 02-04, Universität Bremen, Germany, (2002).

- Dachkovski, S., Böhm, M.: Objective modelling of some elastoplastic materials with phase changes. Eingereicht zu den Proceedings der 2<sup>nd</sup> Intern. Conference Thermal Process Modelling and Computer Simulation, Nancy, France, (2003).
- Denis, S., Simon, A., Beck, G.: Analysis of the thermomechanical behaviour of steel during martensitic quenching and calculation of internal stresses. In: Macherauch, E., Hauk, V., Herausgeber, *Eigenspannungen, Entstehung – Messung - Bewertung*, Int. Eigenspannungstagung Karlsruhe, DGM Vortragsband, 211-238, (1983).
- Denis, S.: Considering Stress-Phase Transformation Interactions in the Calculation of Heat Treatment Residual Stresses. In: *Mechanics of Solids with Phase Changes*, Editors: Berveilleir, M., Fischer, F. D., Springer Wien, New York (1997).
- Fischer, F. D., Sun, Q. P., Tanaka, K.: Transformation-induced plasticity (TRIP). *Appl. Mech. Rev.*, 49, (1996), 317-364.
- Fischer, F. D., Reisner, G., Werner, E., Tanaka, K., Cailletaud, G., Antretter, T.: A new view on transformation induced plasticity (TRIP). *Intern. J. of Plasticity*, 16, (2000), 723-748.
- Fuhrmann, J., Hömberg, D.: Numerical simulation of the surface hardening of steel. *Intern. J. of Num. Methods f. Heat & Fluid Flow*, 9, 6, (1999), 705-724.
- Haupt, P.: *Viskoelastizität und Plastizität*. Springer-Verlag, (1977).
- Haupt, P.: Zur thermomechanischen Modellierung der Plastizität. *ZAMM*, 78, S2, (1998), 459-462.
- Haupt, P.: *Continuum Mechanics and Theorie of Materials*. Springer-Verlag, (2000).
- Hömberg, D.: A numerical simulation of the jominy end-quench test. *Acta mater*, 44, 11, (1996), 4375-4385.
- Hömberg, D., Sokolowski, J.: Optimal control of laser hardening, *Preprint WIAS Berlin*, Nr. 315, (1997).
- Hömberg, D.: *Induction hardening of steel - modeling, analysis, and optimal design of inductors*. Habilitationsschrift, Technische Universität Berlin, (2002).
- Hougardy, H. P., Yamazaki, K.: An improved calculation of the transformation of steel. *steel research*, 57, 9, (1986), 466-471.
- Hunkel, M., Lübben, T., Hoffmann, F., Mayr, P.: Modellierung der bainitischen und perlitischen Umwandlung bei Stählen. *HTM*, 54, 6, (1999), 365-372.
- Inoue, T., Wang, Z.: Coupling between stress, temperature, and metallic structures during processes involving phase transformations. *Mat. Sci. Tech.*, 1, (1985), 845-850.
- Inoue, T., Wang, Z., Miyao, K.: Quenching stress of carburized steel gear wheel. *ICRS2*, Beck, G., Denis, S., Simon, A.(eds) Elsevier Appl. Sci., London, New York, 606-611, (1989).
- Krawietz, A.: *Materialtheorie*. Springer, (1986).
- Larsson, S., Mangard, M.: Determination of phase transformation kinetics when tempering martensitic hardened low alloy steels. LiTH-IKP-Ex-1234, Institut of Technology, Department of Mechanical Engineering, Linköping, Sweden, (1995).
- Leblond, J. B., Devaux, J.: A new kinetic model for anisothermal metallurgical transformations in steels including effect of austenite grain size. *Acta Met.*, 32, (1984), 137-146.
- Leblond, J. B., Mottet, G., Devaux, J., Devaux, J. C.: Mathematical models of anisothermal phase transformations in steels and predicted plastic behaviour. *Mat. Sci. Tech.*, 1, (1985), 815-822.
- Leblond, J. B., Devaux, J., Devaux, J. C.: Mathematical modelling of transformation plasticity in steels. I: Case of ideal-plastic Phases. *Int. J. Plasticity*, 5, (1989), 551-572.
- Leblond, J. B.: Mathematical modelling of transformation plasticity in steels. II: Coupling with strain hardening phenomena. *Int. J. Plasticity*, 5, (1989), 573-591.
- Marsden, J. E., Hughes, J. R.: *Mathematical Foundations of Elasticity*. Engelwood Cliffs, N. J.: Prentice-Hall, (1983).
- Miehe, C.: Kanonische Modelle Multiplikativer Elasto-Plastizität. Thermodynamische Formulierung und numerische Implementation. *Forschungs- und Seminarberichte aus dem Bereich Mechanik der Universität Hannover*, Nr. F 93/1, (1993).
- Mitter, W.: *Umwandlungsplastizität und ihre Berücksichtigung bei der Berechnung von Eigenspannungen*. Materialkundlich-technische Reihe 7, Gebr. Borntraeger, Berlin, Stuttgart (1987).

- Mittemeijer, E. J.: Review - Analysis of the kinetics of phase transformations. *Journal of Materials Science*, 27, (1992), 3977-3987.
- Mittemeijer, E. J., Sommer, F.: Solid state phase transformation kinetics: a modular transformation model. *Z. für Metallkunde*, 93, 5, (9002), 352-361.
- Müller, I.: *Thermodynamik - Grundlagen einer Materialtheorie*. Bertelsmann Universitätsverlag, Düsseldorf (1973).
- Noll, W.: Lectures on the foundations of continuum mechanics and thermodynamics. *Arch. Rat. Mech. Ana.*, 52, (1973), 62-92.
- Oberste-Brandenburg, C.: *Ein Materialgesetz zur Beschreibung der Austenit-Martensit Phasentransformation unter Berücksichtigung der transformationsinduzierten Plastizität*. Ruhr-Universität Bochum, Dissertation, (1999).
- Pietzsch, R.: *Simulation und Minimierung des Verzuges von Stahlprofilen bei der Abkühlung*. Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Dissertation, (2000a).
- Pietzsch, R.: Simulation des Abkühlverzuges von Stahlprofilen. *Technische Mechanik*, 20, 3, (2000b), 265-274.
- Ronda, J., Oliver, G. J.: Consistent thermo-mechano-metallurgical model of welded steel with unified approach to derivation of phase evolution laws and transformation-induced plasticity. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 189, (2000), 361-417.
- Silhavý, M.: *The Mechanics and Thermodynamics of Continuous Media*. Springer-Verlag, (1997).
- Sjöström, S.: Interactions and constitutive models for calculating quench stresses in steel. *Mat. Sci. Tech.*, 1, (1985), 823-829.
- Sluzalec, A.: *Introduction to Nonlinear Thermomechanics - Theory and Finite Element Solution*. Springer-Verlag, London (1992).
- Tanaka, S., Sato, Y.: A mechanical view of transformation-induced plasticity. *Ingenieur-Archiv*, 55, (1985), 147-155.
- Ting, T. W.: Topics in the mathematical theory of plasticity. In: *Handbuch der Physik*, VIa/3, Springer-Verlag, (1973).
- Truesdell, C. A.: *The Elements of Continuum Mechanics*. Springer Verlag, Berlin, Heidelberg (1966).
- Vogelsang, H.: Parameteridentifikation für ein selbstkonsistentes Stoffmodell unter Berücksichtigung von Phasentransformationen. *Mitteilungen aus dem Institut für Mechanik*, Ruhr-Universität Bochum, Germany, (2001).
- Wilmanski, K.: *Thermomechanics of Continua*. Springer-Verlag, (1998).
- Wolff, M., Böhm, M., Bänsch, E., Davis, D.: Modellierung der Abkühlung von Stahlbrammen unter Berücksichtigung von Phasenumwandlungen und mechanischen Deformationen. *Berichte aus der Technomathematik*, 00-07, Universität Bremen, Germany, (2000).
- Wolff, M., Böhm, M.: Zur Modellierung der Thermoelasto-Plastizität mit Phasenumwandlungen bei Stählen sowie der Umwandlungsplastizität. *Berichte aus der Technomathematik*, 02-01, Universität Bremen, Germany, (2002a).
- Wolff, M., Böhm, M.: Phasenumwandlungen und Umwandlungsplastizität bei Stählen im Konzept der Thermoelasto-Plastizität. *Berichte aus der Technomathematik*, 02-05, Universität Bremen, Germany, (2002b).
- Wolff, M., Dachkovski, S., Böhm, M.: Volumenanteile versus Massenanteile – der Dilatometerversuch aus der Sicht der Kontinuumsmechanik. *Berichte aus der Technomathematik*, 03-01, Universität Bremen, Germany, (2003a).
- Wolff, M., Dachkovski, S., Böhm, M.: Phasenumwandlungen im Stahl – eine Übersicht. Erscheint in *Berichte aus der Technomathematik*, Universität Bremen, Germany, (2003b).
- Wolff, M., Schmidt, A., Böhm, M.: Phase transitions and transformation-induced plasticity of steel in the framework of continuum mechanics. Eingereicht zu den Proceedings, *2<sup>nd</sup> Intern. Conf. Thermal Process Modeling and Computer Simulation*, Nancy, France, (2003c).

---

*Anschriften:* Dr. Michael Wolff, Prof. Dr. Michael Böhm, Universität Bremen, FB 3 (Mathematik), Zentrum für Technomathematik, Postfach 330440, D-28334 Bremen, Germany.  
email: mwolff@math.uni-bremen.de; mbohm@math.uni-bremen.de