

Technische Universität Dresden

**Simulationsgestützte Modellierung der elastischen Eigenschaften mikrorissbehafteter
Materialien und deren nichtlineare Wechselwirkung mit geführten Wellen –
Ein Beitrag zur zerstörungsfreien Charakterisierung des Eigenspannungsgradienten**

Dipl.-Math.

Marek Rjelka

von der Fakultät Elektrotechnik und Informationstechnik der Technischen Universität
Dresden

zur Erlangung des akademischen Grades eines

Doktoringenieurs

(Dr.-Ing.)

genehmigte Dissertation

Vorsitzender: apl. Prof. Dr. rer. nat. et Ing. habil. Elfgard Kühnicke
Gutachter: Prof. Dr. rer. nat. habil. Andreas Mayer Tag der Einreichung: 04.01.2018
Gutachter: Dr. rer. nat. et Ing. habil. Bernd Köhler Tag der Verteidigung: 08.06.2018

Zusammenfassung

Über den akustoelastischen Effekt bietet die Dispersion von Rayleighwellen einen Zugang zur Bestimmung mechanischer Spannungen. Die quantitative Relation wird dabei mithilfe der akustoelastischen Konstanten hergestellt, die ihrerseits mit den Konstanten dritter Ordnung (TOEC) in der Entwicklung der Formänderungsenergie eines hyperelastischen Materials nach den Dehnungen verknüpft sind. In Zugversuchen werden die TOEC für die Superlegierungen In718 und Ti6246 hier erstmals bestimmt. Mithilfe eines Modells für die Frequenzverschiebung einer Rayleighwelle in einem bzgl. der Oberfläche vertikal inhomogenen Spannungsfeld wird ein Inversionsmodell zur Bestimmung des unbekanntes Spannungstiefenprofils aus gegebenen Dispersionskurven entwickelt. Es stellt sich heraus, dass die Änderung der Phasengeschwindigkeit der Rayleighwellen infolge der Eigenspannungen weit unterhalb der Änderung in den Dispersionskurven liegt, da sich während der Oberflächenbehandlung auch die elastischen Eigenschaften des Materials ändern. Anhand von Mikrorissen, einer prototypischen Ursache solcher Änderungen, wird die Änderung der Materialeigenschaften und die nichtlineare Wechselwirkung dieser mit geführten Wellen untersucht. Dabei wird die Änderungen der effektiven elastischen Konstanten und Modellparameter mikro-mechanischer Modelle des rissbehafteten Gesamtsystems aus den in quasistatischen 3D-Simulationen gewonnenen Spannungs-Dehnungskurven bestimmt. Die zwei hier betrachteten unterschiedlichen Rissarten (flache und gekrümmte Risse) unterscheiden sich auch qualitativ und werden daher sowohl in den Modellen als auch bei der Auswertung der effektiven Konstanten verschieden behandelt. Die nichtlineare Wechselwirkung zwischen Oberflächenwellen und Mikrorissverteilung wird untersucht, um über die Änderung in den Ausbreitungseigenschaften einen Zugang zur Rissverteilung zu gewinnen. Die flachen Risse zeigen dabei sowohl bei der Wechselwirkung mit langwelligen, symmetrischen Lamb-Wellen als auch mit Rayleighwellen eine nichtklassische Nichtlinearität, d.h. die Amplitude der zweiten Harmonischen wächst hier mit der Amplitude der Grundschiwingung. Im Gegensatz dazu ist das Wachstum derselben bei gekrümmten Rissen quadratisch (klassische Nichtlinearität). Schließlich wird noch eine Inversionsmethode zur Bestimmung der Tiefenprofile elastischer Konstanten aus der Frequenzabhängigkeit des Nichtlinearitätsparameters vorgeschlagen und an einem Beispiel verdeutlicht. Mit den entwickelten Konzepten leistet diese Arbeit damit einen wichtigen Beitrag zur Trennung der Einflüsse von Eigenspannung und plastischer Verformung auf die Rayleighwellendispersion und trägt so zur Entwicklung eines Verfahrens zur zerstörungsfreien Bestimmung von Eigenspannungen in metallischen Werkstoffen bei.

Abstract

Utilizing the acousto-elastic effect, the dispersion of Rayleigh waves provides a way to estimate mechanical stresses in a solid medium. The quantitative relation is given by the so called acousto-elastic constants which are closely related to the third order elastic constants (TOEC) in the series expansion of the strain energy functional of a hyperelastic material. Using tensile tests, the TOEC for the superalloys In718 and Ti6246 are determined for the first time. By means of a model for the frequency shift of a Rayleigh wave in a vertically inhomogeneous stress field, an inversion method for estimating the unknown stress profile is developed. It is observed that the change in Rayleigh wave velocity due to residual stresses is much less than the change in the measured dispersion curves of shot peened superalloys as the elastic properties of the material are altered during the surface treatment, too. As a prototypical example of such altering mechanisms micro-cracks are chosen and investigated as to their influence on the effective material properties as well as their nonlinear interaction with guided waves. The effective elastic constants and model parameters of micro-mechanical models of the cracked medium are determined from stress-strain relations, computed by quasi-static 3D-simulations. The two types of cracks under investigation in this study (flat and curved crack surface) behave differently and therefore are treated differently in developing material models and evaluating the effective properties. The nonlinear interaction between surface waves and micro-cracks are investigated and the changes of the propagation properties are used to draw conclusions about the crack distribution. While interacting with both, Lamb waves and Rayleigh waves, the flat cracks show a non-classical nonlinear behaviour in that the amplitude of the second harmonic grows linearly with the amplitude of the fundamental. In contrast, the growth of the same, while interacting with curved cracks, is quadratic (classical nonlinearity). Finally, an inversion method for the determination of depth profiles of the elastic constants from the frequency dependence of the acoustic nonlinearity parameter is suggested and validated using synthetic data. With the concepts developed here, this work makes an important contribution to the separation of the influences of stress and plastic deformation on the dispersion of guided waves, especially Rayleigh waves, and helps towards the development of a nondestructive procedure to determine residual stresses in metallic materials.

Inhaltsverzeichnis

1. Einführung	9
1.1. Literaturüberblick	10
1.2. Aufbau der Arbeit	17
2. Grundlagen	19
2.1. Die Bewegungsgleichung	23
2.2. Kompatibilitätsbedingungen	25
2.3. Voigtsche Notation	26
2.4. Die Christoffelgleichungen	31
2.5. Volumenwellen	32
2.6. Oberflächenwellen	33
2.7. Gruppengeschwindigkeit	37
3. Bestimmung der Konstanten dritter Ordnung	39
3.1. Volumenwellen im vorgespannten Festkörper	39
3.2. Bestimmung der TOEC mittels Puls-Echo-Methode	44
4. Inversionsalgorithmen zur Eigenspannungsbestimmung	49
4.1. Rayleighwellen in vorgespannten Medien	49
4.2. Rayleighwellen im homogenen Spannungsfeld	51
4.3. Einfluss von Spannungsgradienten auf die Rayleighwellendispersion	53
4.4. Bestimmung von Spannungsgradienten aus Dispersionsmessungen	56
4.5. Dispersionsmessungen mit HUGO III	58
5. Änderung der elastischen Konstanten	63
5.1. Simulation des elastischen Verhaltens von Medien mit Rissen	63
5.2. Simulationsergebnisse	67
5.3. Bestimmung der elastischen Konstanten aus den Simulationsergebnissen	69
5.3.1. Validierung der Auswertestrategien	72
5.3.2. Padé-Approximation	73
5.3.3. SOEC und TOEC im Ausdünnungsversuch mit Gitternichtlinearität	75
5.3.4. Auswertung der Simulationen mit hydrostatischer Vorspannung	75
5.3.5. SOEC und TOEC im Ausdünnungsversuch mit Gitternichtlinearität und Vorspannung	77
5.3.6. Getrennte Auswertung für Zug- und Druckbereich	80
5.4. Spannungs-Dehnungskurven homogener Rissorientierungen	85
5.5. Verhalten paralleler und senkrechter Einzelrisse	87
5.6. Verbesserung der Auswerteergebnisse durch simultane Randbedingungen	89
5.7. Materialmodelle für Medien mit Mikrorissen	91
5.7.1. Hertzsche Kontakte	92
5.7.2. Kissing Bonds	98

6. Nichtlineare Oberflächenwellen	109
6.1. Langwellige S0 Lamb-Wellen	110
6.2. Einfluss tiefenabhängiger SOEC auf lineare Dispersion	113
6.3. Einfluss gradierter Materialparameter auf die Evolution der zweiten Harmonischen	114
6.4. Ausbreitung von Rayleighwellen in Medien mit Rissen	116
6.5. Bestimmung der TOEC aus ANP-Messungen	120
7. Zusammenfassung	125
A. Anhang	129
A.1. Beziehungen zwischen den elastischen Konstanten	129
A.2. SOEC-Umrechnung	130
A.3. TOEC-Umrechnungen	131
A.4. Tensortransformation	131
A.5. Nützliche Identitäten für Tensoren	132
A.6. Invarianten des Dehnungstensors	133
A.7. Alternative Definitionen des Dehnungsenergiefunktionals	134
A.8. Kompressionsrate in isotropen Medien	134
A.9. Dehnungsenergiefunktional für UPF-Implementierung in ANSYS [©]	135
A.10. Berechnung der Integrale für eben ausgerichtete Mikrorisse	141
A.11. Spannungs-Dehnungskurven senkrechter und paralleler Einzelrisse	142
A.12. Volumen-Dehnungskurven senkrechter und paralleler Einzelrisse	148

Abkürzungs- und Formelverzeichnis

Abkürzungen

Abkürzung	Bedeutung	Bemerkung
AEC	akustoelastische Konstante(n)	acousto-elastic constants
ANP	akustischer Nichtlinearitätsparameter	acoustic nonlinearity parameter
ES	Eigenspannung(en)	
FE	Finite Elemente	
FEM	Finite Elemente Methode	
GLS	Gleichungssystem	
HC	Hertzscher Kontakt	Hertzian contact
HUGO	High Precision Ultrasound Goniometer	Ultraschallgoniometer
ID<n>	Strategie zur Auswertung der elastischen Konstanten	
In718	Nickelbasislegierung	Inconel 718
KB	Kissing Bonds (augmented Lagrange)	erweiterte Lagrange-Formulierung
KBL	Kissing Bonds (pure Lagrange)	reine Lagrange-Formulierung
KOS	Koordinatensystem	
LSP	Laserdengeln	Laser-Shock-Peening
NL	Nichtlinearität	
ODF	Orientierungsverteilungsfunktion	orientation distribution function
PK1	erster Piola-Kirchhoffscher Spannungstensor	
PK2	zweiter Piola-Kirchhoffscher Spannungstensor	
RB	Randbedingung	
RHS	rechte Seite	right-hand side
RW	Rayleighwelle	
S0-Mode	niedrigste symmetrische Plattenschwingungsmode	
SAW	Oberflächenwelle	surface acoustic wave
SH	horizontal polarisierte Scherwelle	shear horizontal
SOEC	elastische Konstanten zweiter Ordnung	second order elastic constants
SP	Kugelstrahlverfahren	Shot Peening
SV	vertikal polarisierte Scherwelle	shear vertical
Ti6246	Titanbasislegierung	Titan 6Al-2Sn-4Zr-6Mo
TOEC	elastische Konstanten dritter Ordnung	third order elastic constants
VIG	Volterrasche Integralgleichung	

Formelzeichen

Formelzeichen	Bedeutung	Bemerkung
$\alpha_{0/1}$	Modellparameter	
β	akustischer Nichtlinearitätsparameter	sofern kein Index
β_{\pm}	Modellparameter	
Γ_{JK}^I	Christoffelsymbol	zweiter Art
Γ_{IJK}	Christoffelsymbol	erster Art
Γ_{ik}	Christoffelmatrix	
γ_{ANP}	rissinduzierter Nichtlinearitätsparameter	
γ_{KL}	Grüneisen-Parameter	
δ	Kronecker-Delta	
ϵ_{ij}	infinitesimaler Dehnungstensor	
H_{kL}	Verschiebungsgradient	
Θ	Heaviside-Funktion	
κ_i	Modellparameter	
λ, μ	erste und zweite Lamé-Konstante	
Λ	Versetzungsdichte	
ν	Poissonzahl	
ρ	Dichte	
Σ_I	Cauchyscher Spannungstensor	verkürzte Schreibweise
σ_{ij}	Cauchyscher Spannungstensor	
$\tau_{0/1/L}$	Modellparameter	
ϕ, θ	Azimutwinkel und Polarwinkel	
Φ	Formänderungsenergie	potentielle Energiedichte
ψ	Winkel	
ω	Kreisfrequenz	
B_{IJ}	rechter Cauchy-Green Tensor	
b_{ij}	linker Cauchy-Green Tensor	
C_{IJKL}, C_{IJKLMN}	Konstanten zweiter und dritter Ordnung	bzgl. Lagrange-Dehnung
\mathcal{D}_L	Ableitungsoperator	
E_{IJ}	(Green-)Lagrange Dehnung	
e_{ij}	Euler-Almansi-Dehnung	
F_{kL}	Deformationsgradient	
$g_{1\dots 1N}$	Produkte aus Drehmatrizen	
$G_{1\dots 1N}$	Raumintegrale über $g_{1\dots 1N}$	
H_{IJ}, H_{IJK}	Hilftensoren für geänderte Konstanten	verkürzte Schreibweise
k	Wellenzahl	
n_k	Flächennormale in Eulerkoordinaten	
N_L	Flächennormale in Materialkoordinaten	
P_{iJ}	erster Piola-Kirchhoffscher Spannungstensor	
S_{iJKL}, S_{iJKLmN}	Konstanten zweiter und dritter Ordnung	bzgl. Verschiebungsgradient
T_{IJ}	zweiter Piola-Kirchhoffscher Spannungstensor	
u_i	Verschiebung	
ξ_L, X_L, x_k	Koordinaten bzgl. des natürlichen, initialen und momentanen Zustands	

1. Einführung

Herstellungsbedingte Eigenspannungen, entstanden etwa durch ungleichmäßige Abkühlung erhitzten Materials, können sich defizitär auf die Integrität der sie beinhaltenden Bauteile auswirken. Andererseits kann das gezielte Einbringen von Eigenspannungen in die Oberfläche eines Materials dessen Widerstandsfähigkeit gegenüber Rissen verbessern. Sicherheitskritische Bauteile, die während ihres Betriebs sowohl hohen mechanischen als auch thermischen Belastungen ausgesetzt sind, werden daher randverfestigt. Ein solches Verfestigungsverfahren ist das sogenannte Kugelstrahlverfahren (shot peening, SP), bei dem das zu behandelnde Bauteil mit kleinen Kügelchen beschossen wird. Aufgrund des Hertzschen Druckes unterhalb des Auftreffpunkts der Kügelchen und der Oberflächenelongation werden die oberflächennahen Schichten dabei komprimiert. Unter günstigen Bedingungen können so Druckeigenspannungen bis zu 70 % der Fließgrenze nach Kaltverfestigung in der Komponente zurückbleiben [Hig05]. Das Wesen dieser Spannungen liegt jedoch darin, dass sie auch nach dem Entfernen aller äußeren Kräfte im Material verbleiben. Daher muss sich das Bauteil während der Bestrahlung zwingend auch plastisch verformt haben. Die Stärke dieser plastischen Verformung hängt von den jeweiligen Verfahrensparametern ab. Darüber hinaus ändert sich im Zuge der Randverfestigung die Oberflächenrauigkeit und es kann eine makroskopische Textur, bedingt durch die Vorzugsrichtungen bei der Bearbeitung, eingebracht werden.

In der Luft- und Raumfahrtindustrie etwa möchte man die oben beschriebenen günstigen Eigenschaften der Randverfestigung gern in der Auslegung der Bauteile berücksichtigen, um so Material und letztendlich Treibstoff einzusparen. Da sich der Spannungszustand der behandelten Bauteile während des Einsatzes zum Beispiel aufgrund thermischer Relaxation verändern kann, benötigt man ein Verfahren, das in der Lage ist, solche Spannungen zerstörungsfrei nachzuweisen. Konventionelle und etablierte Verfahren zur Messung von Eigenspannungen, wie die Bohrlochmethode [AST13] und Röntgendiffraktion mit sukzessiver Schichtabtragung [Pre86] sind minimalinvasiv und daher für Inspektionen ungeeignet. Bereits vorhandene zerstörungsfreie Methoden wie die Synchrotrondiffraktion und Neutronenbeugung sind dagegen äußerst aufwendig und nur in wenigen Labors weltweit überhaupt realisierbar [Int05].

Es ist bekannt [Mur37], dass sich elastische Spannungen auf die Ausbreitung elastodynamischer Wellen auswirken. Dieser als akustoelastischer Effekt bekannte Mechanismus soll hier näher auf seine Anwendbarkeit zur Messung von Eigenspannungen in nickel- und titanbasierten Superlegierungen untersucht werden. Da die prozessbedingte Änderung des Spannungszustandes primär in den oberflächennahen Schichten des Materials stattfindet, soll hier in erster Linie auf die Wechselwirkung von Oberflächenwellen, insbesondere Rayleighwellen, mit randverfestigten Materialien eingegangen werden. Die effektive Eindringtiefe dieser Wellen ist direkt proportional zu deren Wellenlänge, sodass die Probendicke mit sinkender Frequenz zunehmend abgedeckt wird. In homogenen Materialien sind die Materialeigenschaften über die gesamte Tiefe gleich. Das bedeutet, dass die Phasengeschwindigkeit von Rayleighwellen in homogenen Medien nicht von der verwendeten Frequenz abhängen kann. Die frequenzabhängige Phasengeschwindigkeitsänderung der Welle bezeichnet man dabei als Dispersion, d.h. Rayleighwellen in homogenen Medien sind dispersionsfrei. Jegliche Variationen der elastischen Eigenschaften in Tiefenrichtung führen dagegen zur Änderung der Materialeigenschaften, die die Welle einer bestimmten Frequenz im Mittel beeinflussen und somit zu Dispersion. Man beachte, dass Größen wie die Geschwindigkeit der Rayleighwelle stets gewichtete integrale Eigenschaften über die Gesamteindringtiefe der Welle darstellen. Um Tiefeninformationen aus Messungen der Phasengeschwindigkeit

1 Einführung

von Oberflächenwellen zu gewinnen, muss daher im Allgemeinen eine Integralgleichung gelöst werden. Eine Alternative zur Messung der Dispersion von Rayleighwellen zur Charakterisierung oberflächennaher Eigenschaftsgradienten bietet die Messung der Elliptizität der Teilchenverschiebung. Die Elliptizität beschreibt das Verhältnis von horizontaler zu vertikaler Auslenkungskomponente (selten auch das reziproke Verhältnis). Theoretische Untersuchungen zeigen zwar, dass der Einfluss mechanischer Spannungen auf die Elliptizität größer ist als auf die Phasengeschwindigkeit [Jun03, JJQ⁺04, JQJ06, ARJQ11], jedoch erfordert die experimentelle Bestimmung des Verhältnisses neben der Messung lateraler Auslenkungen eine sehr genaue Ausrichtung des Messaufbaus bzw. die nachträgliche Ausrichtung der gemessenen Schwingungsellipsen (Hauptachsentransformation), um wenigstens Vergleiche zwischen verschiedenen Messpunkten anstellen zu können. Diese Aufgabe hat sich in den genannten Arbeiten als sehr schwierig bis fast unlösbar herausgestellt und soll hier nicht weiter verfolgt werden.

Neben den Eigenspannungen beeinflussen auch die oben bereits erwähnten Oberflächenrauheit [EM83a, EM83b, ML94, KS95, RN03, HBB04, LKJQ11], die Textur [Say82, AS84] und vor allem die Kaltverfestigung in Folge der Umordnung von Versetzungsstrukturen sowie die Ausbildung von Mikrorissen die Ausbreitung der hier relevanten Oberflächenwellen. Außerdem beeinflussen diffraktive Effekte aufgrund der endlichen Apertur der eingesetzten Wandler [RN02] die ermittelte Phasengeschwindigkeit. Obwohl die Einflüsse von Oberflächenrauigkeit, Textur und Diffraction auf die Dispersion von Oberflächenwellen im Bereich des akustoelastischen Effekts für die hier relevanten Spannungswerte liegen, dominiert der Einfluss plastischer Verformungen im Zuge der Umordnung von Versetzungsstrukturen die Dispersionsmessungen, sodass es vordergründig diesen zu untersuchen und schließlich aus den Messungen zu eliminieren gilt.

Im Laufe der Ermüdung bilden die einzelnen Versetzungen sogenannte Gleitbänder, die sich zur Materialoberfläche hin bewegen und dort zu Mikrorissen führen können. Die Mikrorisse können sich ihrerseits wieder zu größeren Rissen zusammenschließen, die letztendlich zum Versagen des Bauteils führen. Oberflächennahe Druckeigenspannungen wirken der Rissausbreitung entgegen und werden daher, gerade bei kritischen Bauteilen wie etwa Turbinenscheiben, gezielt ins Material eingebracht. Eine frühzeitige Erkennung von Mikrorissen im Material einerseits und die Trennung der Einflüsse von Mikrorissen und mechanischen Spannungen auf die Ausbreitung von Oberflächenwellen andererseits, würde somit eine zuverlässige Aussage über die Materialintegrität erlauben und bildet die Grundlage und Motivation der hier vorliegenden Arbeit.

Dazu ist es einerseits nötig zu verstehen, inwiefern sich die Mikrorisse und deren inhomogene Verteilung auf die elastischen Eigenschaften, insbesondere auf die nichtlinearen Konstanten auswirken. Andererseits möchten man wissen, wie groß der Einfluss von Eigenspannungen und Mikrorissen auf sich im Material ausbreitende, akustische Wellen ist, da Druckspannungen in rissbehafteten Systemen in der Lage sein können, den Einfluss der Mikrorisse zum großen Teil aufzuheben [Pec98]. Mithilfe der Voruntersuchungen soll geklärt werden, ob und wie sich Informationen über die Tiefenprofile der gesuchten Mikrorissverteilungen und damit der Materialparameter aus nichtlinearen Ultraschallexperimenten, insbesondere mit Oberflächenwellen, extrahieren lassen.

1.1. Literaturüberblick

Akustoelastischer Effekt

Auf Grundlage der Theorie von Murnaghan [Mur37] entwickelten Hughes und Kelly eine Theorie der Ausbreitung longitudinaler und transversaler Volumenwellen in isotropen elastischen Medien unter Einfluss einer homogenen Vorspannung [HK53]. Diese Theorie verallgemeinerten Toupin und Bernstein teilweise auf Medien mit beliebiger Symmetrie [TB61]. Für hyperelastische Materialien stellten Thurston und Brugger in [TB64] einen Vergleich zwischen den Formulierungen der akustoelastischen Gleichungen im vorgespannten Zustand (Initialzustand) – dem Zustand aller bisherigen Arbeiten –

und der Materialkonfiguration an.

Im Allgemeinen ist die Materialkonfiguration eines Materials nicht bekannt, lediglich der plastisch vordeformierte, Eigenspannungen enthaltende Initialzustand. Die Annahme hyperelastischen Materialverhaltens schwächt Johnson ab [Joh81] und führt einen plastischen Zwischenzustand ein. Die Form der akustoelastischen Gleichungen entspricht der von Hughes und Kelly. Die darin enthaltenen Konstanten zweiter und dritter Ordnung hängen jedoch von der initialen (plastischen oder elastischen) Verformung ab und können in der fließunabhängigen Form in [Joh83] sowohl auf angelegte Spannungen als auch auf Eigenspannungen angewendet werden. Ein umfangreicher Überblick zur Theorie und Anwendung von Eigenspannungsmessungen findet sich im Übersichtsartikel von Pao, Sachse und Fukuoka [PSF84].

Erste theoretische Untersuchungen zur Ausbreitung akustischer Oberflächenwellen (Surface Acoustic Wave, SAW) in isotropen elastischen Medien unter dem Einfluss von Verzerrungen gehen auf Hayes und Rivlin [HR61] zurück (für spätere Arbeiten hierzu siehe [May95]). Sie wiesen daraufhin, dass im Falle von Rayleighwellen dabei keine Dispersion auftritt, da eine gleichmäßige Belastung des ganzen Halbraumes keine Längenskala impliziert. Wird dagegen eine Schicht auf den Halbraum aufgebracht, deren elastische Eigenschaften von denen des Grundmaterials abweichen, so kann die Existenz transversaler, parallel zur Oberfläche polarisierter, dispersiver geführter Wellen, sogenannter Lovewellen gezeigt werden. Es lässt sich schlussfolgern, dass aufgrund der in diesem Fall nicht mehr vorhandenen Skaleninvarianz auch die sagittal polarisierten Oberflächenwellen (Rayleighwellen) dispersiv werden. In Analogie zu den (Mode-)Grüneisenkonstanten von Volumen-Phononen-Moden [Bru65, MW84] führten Maradudin und Mayer [MM90] Grüneisenkonstanten für akustische Oberflächenwellen ein, die die dehnungsinduzierte Frequenzänderung dieser Wellen charakterisieren. Die dort angegebenen Ausdrücke hängen von einer Linearkombination aus Konstanten zweiter (Second Order Elastic Constants, SOEC) und dritter Ordnung (Third-Order Elastic Constants, TOEC) ab und lassen sich mithilfe des Verschiebungsfeldes der ungestörten Oberflächenwelle darstellen (siehe auch [May95]).

Messung der Konstanten dritter Ordnung

Eine quantitative Beschreibung der Stärke des akustoelastischen Effekts erfolgt unmittelbar über die akustoelastischen Konstanten (Acousto Elastic Constants, AEC) und den daraus resultierenden TOEC. Die Bestimmung der TOEC ist im Wesentlichen über drei Wege möglich, wobei auf die dritte Möglichkeit im nächsten Unterabschnitt näher eingegangen wird.

Den ersten Zugang bilden Ab-Initio-Berechnungen für Einkristalle [KDW⁺96, WL09]. Dabei werden die makroskopischen Ausdrücke für die innere oder freie Energie an Werte ebendieser aus dichtefunktionaltheoretischen Berechnungen bei bekannten Gitterkonstanten durch Variation der elastischen Konstanten angepasst (in [KDW⁺96] über Lokaldichtenäherung mit Ebene-Wellen-Pseudopotential-Methode). Da dieses Verfahren sehr gut mit experimentellen Werten übereinstimmt und Konstanten höherer Ordnung praktisch meist nur schwer zugänglich sind, bietet es einen Weg, die Konstanten dritter, vierter und höherer Ordnung zuverlässig vorherzusagen. Allerdings kann die Methode Mechanismen wie etwa Versetzungen, die bei Metallen und ihren Legierungen jedoch eine wichtige Rolle spielen, nicht berücksichtigen.

Die zweite Möglichkeit zur Bestimmung der TOEC stellt die Messung der Geschwindigkeiten akustischer Volumenwellen unter statischer Belastung [HK53, Smi63, Cre67] dar. Im Falle eines isotropen Körpers reicht es dabei, die Probe uniaxial zu belasten und die drei entsprechenden Schallgeschwindigkeiten bei Ausbreitung senkrecht zur Hauptspannungsrichtung (eine longitudinale und zwei transversale) zu messen. Man erhält drei Gleichungen für die drei gesuchten Konstanten und kann sie so eindeutig bestimmen. Die Verwendung von Rayleighwellen unterschiedlicher Frequenzen würde eine tiefenabhängige Messung der TOEC erlauben.

Neben einem Vergleich verschiedener Formulierungen der akustoelastischen Gleichungen (bzgl. Mo-

1 Einführung

mentan- und Materialkonfiguration) gehen Guz und Makhort in [GM00] vergleichend auf akustoelastische, dielektrische und elektromagnetische Verfahren zur Eigenspannungsbestimmung ein und zeigen die Anwendbarkeit dieser Verfahren unter anderem auf Polymere. Einen sehr umfassenden Beitrag zur Bestimmung nicht nur der nichtlinearen elastischen, sondern auch piezoelektrischen, dielektrischen und elektrostriktiven Konstanten am Beispiel von Lithiumniobat leisten Cho und Yamanouchi in [CY87]. Nach der Herleitung der nötigen Gleichungen für beliebige Symmetrien zeigen sie ebenfalls die nötigen Experimente und geben schließlich die Ergebnisse eigener Messungen an.

Obwohl in diesen und anderen Untersuchungen bereits die TOEC (z.B. [EB76, TB64]) für viele Materialien bestimmt wurden, gab es vor dieser Arbeit weder Messungen der TOEC, noch anderer nichtlinearer Parameter, wie etwa der Grüneisenkonstanten für die hier betrachteten Legierungen In718 und Ti6246, aus denen sich die gesuchten Konstanten berechnen ließen.

Nichtlineare Ultraschallexperimente

Die dritte Möglichkeit zur Ermittlung der TOEC bei bekannten Konstanten zweiter Ordnung bieten nichtlineare dynamische Effekte. Dabei wird versucht, aus den Eigenschaften von Mischfrequenzen mehrerer Wellen oder den Harmonischen einer Welle Aussagen über Materialeigenschaften, insbesondere über die TOEC, zu erhalten. Voraussetzung ist, dass die Anregungswellen genügend große Amplituden besitzen.

Bei der Anregung mit nur einer Welle ist die nichtlineare Antwort des Materials durch den sogenannten *akustischen Nichtlinearitätsparameter* (Acoustic Nonlinearity Parameter, ANP) β gekennzeichnet. [Gre64, BT63]. Für Volumenwellen ist der ANP dabei proportional zum Quotienten aus der Amplitude der zweiten Harmonischen und dem Quadrat der Amplitude der Grundschiwingung. In nichtdispersiven Medien gilt dieser Zusammenhang näherungsweise auch für Rayleighwellen, da die Longitudinalkomponenten in diesem Fall die Transversalkomponenten dominieren (siehe unten sowie [HKJ⁺06, SKQ⁺08, SW11]).

Für den Zusammenhang zwischen ANP und SOEC/TOEC betrachten wir die nichtlineare Wellengleichung, die sich im eindimensionalen Fall zu

$$\ddot{u} = c^2 u_{,11} (1 - \beta u_{,1}) \quad (1.1)$$

mit der Phasengeschwindigkeit c und dem ANP β vereinfacht, wobei

$$c^2 = \frac{S_{1111}}{\rho} = \frac{C_1 + C_{11}}{\rho} \quad \text{und} \quad \beta = -\frac{S_{111111}}{S_{1111}} = -\frac{C_{111} + 3C_{11}}{C_1 + C_{11}}$$

gelten. Die Tensoren \mathbf{S} und \mathbf{C} bezeichnen beide elastische Konstanten, letzterer dabei die üblichen symmetrischen Konstanten in verkürzter Schreibweise. Die Konstante erster Ordnung C_1 nimmt hier die Rolle einer (skalaren) elastischen Vorspannung ein. Selbst bei sehr hohen Eigenspannungen von etwa 1 GPa ist dieser Beitrag klein gegenüber den Werten der Konstanten zweiter und dritter Ordnung für die für uns relevanten Legierungen. Wir können also davon ausgehen, dass sich mithilfe von Messungen des ANP die elastischen Konstanten unabhängig von den Eigenspannungen bestimmen lassen.

Einen allgemeinen Ausdruck für den ANP von Volumenwellen in isotropen, hyperelastischen Materialien gibt Norris in [Nor91] mit

$$\tilde{\beta} = \frac{\partial P_{iJ}}{\partial F_{kL} \partial F_{mN}} m_i m_k m_m N_J N_L N_N = S_{iJkLmN} m_i m_k m_m N_J N_L N_N \quad (1.2)$$

an, wobei die Summenkonvention gelte. Hier bezeichnen \mathbf{P} den ersten Piola-Kirchoff-Tensor, \mathbf{F} den Deformationsgradienten, \mathbf{m} die Polarisierung der betrachteten Mode und \mathbf{N} den Ausbreitungsvektor.

Große lateinische Indizes beziehen sich auf die Materialkonfiguration, kleine auf die Momentankonfiguration (siehe Kap. 2). Diese Definition weicht insofern von der oben gewählten ab, als nicht durch die Konstanten zweiter Ordnung geteilt wird, $\tilde{\beta}$ damit nicht dimensionslos ist. Für die Definition der Tensoren sei auf das Grundlagenkapitel 2 verwiesen. Der ANP hängt also nicht nur von den elastischen Konstanten selbst, sondern auch essentiell von der betrachteten Wellenart ab. Green konnte sogar zeigen, dass der ANP im Falle einer Transversalwelle aus Symmetriegründen verschwindet [Gre65]. Da der Tensor \mathbf{S} eine Kombination elastischer Konstanten zweiter und dritter Ordnung ist, im isotropen Fall damit bei bekannten Lamé-Konstanten immer noch drei unabhängige TOEC besitzt, reichen die Messungen des ANP von Volumenwellen nicht aus, um den vollen Parametersatz zu bestimmen.

Zur Erzeugung der nichtlinearen Effekte sind sehr hohe Leistungen am Sendewandler nötig. Nun können zum einen die erzeugten höheren Harmonischen ausgewertet werden. Dieses Vorgehen birgt jedoch die Gefahr, dass im Wandler selbst bereits Harmonische höherer Ordnung erzeugt werden, die nichts mit den Eigenschaften des Materials zu tun haben. Einen Ausweg bieten (nicht-)kollineare Wellenmischexperimente. Dabei werden Wellen verschiedener Frequenzen ω_1 und ω_2 und/oder verschiedener Richtungen miteinander überlagert. In der Überlagerungszone entstehen Mischfrequenzen der Eingangsfrequenzen und es kann zu Modenumwandlungen kommen. Aufgrund dieser Tatsachen lassen sich dann die im Aufbau selbst erzeugten nichtlinearen Effekte – es sind ebenfalls große Amplituden nötig – von denen im Material trennen.

Die inhärenten Nichtlinearitäten des Aufbaus und die unzureichenden Informationen über die TOEC aus den Messungen des ANP von Volumenwellen motivieren die Betrachtung kollinear und nicht-kollinear Wellenmischexperimente, in denen Wellen unterschiedlicher Frequenzen und/oder Richtungen miteinander kombiniert werden [JK63, CH64]. Dabei können Volumenwellen neue Volumenwellen bilden [JK63, CH64, KNM98, Dem12, DANL12, KD14, DKK14], Volumenwellen Oberflächenwellen ausbilden [NS79], kollineare Mischung von Oberflächenwellen zu Volumenwellen [PS76] bzw. auch wieder zu Oberflächenwellen führen [Kal83] und in piezoelektrischen Materialien im Allgemeinen auch sekundäre Oberflächenwellen durch nicht-kollineare Mischungen von Oberflächenwellen entstehen [Vla82, VB82]. Durch eine geeignete Wahl der involvierten Frequenzen können so störende inhärente Harmonische des Messaufbaus herausgefiltert werden, ohne die eigentliche Information, die in der erzeugten Welle mit der Mischfrequenz enthalten ist, zu verlieren.

In zyklisch beanspruchten metallischen Werkstoffen bilden sich Mikrorisse, die aus der Formation von Versetzungen (Gleitbänder) entstehen. Frühere Studien zeigten bereits, dass diese drastische Auswirkungen auf das nichtlineare Verhalten akustischer Wellen haben [SW94], während sich die linearen Eigenschaften kaum ändern (siehe [MKJQ14] und darin enthaltene Referenzen). Für die tiefenabhängige Bestimmung der TOEC bzw. deren Änderung nahe der Oberfläche ist die Messung des ANP und seiner Verallgemeinerung auf Mischfrequenzen die beste Wahl.

Es ist seit längerer Zeit bekannt, dass gewisse Materialeigenschaften und -defekte in nichtlinearen Ultraschallexperimenten wesentlich besser sichtbar werden als bei rein linearen Untersuchungen (siehe [SKB10] und dort zitierten Arbeiten der Gruppe von Jacobs am Georgia Institute of Technology). Jacobs und Mitarbeiter haben den ANP unterschiedlicher metallischer Werkstoffe, insbesondere auch von kugelgestrahlten Aluminiumplatten, vermessen und fanden eine starke Erhöhung des ANP infolge der Oberflächenbehandlung [LKJQ11].

Eine weitere Klasse geführter Wellen, die in homogenen Materialien den nicht-dispersiven Charakter mit Rayleighwellen teilen, bilden Kantenwellen [MWMB72]. Da die Resonanzbedingungen damit wiederum für alle Frequenzen erfüllt sind, eignen sich Kantenwellen ebenfalls gut zur Erzeugung höherer Harmonischer. Darüber hinaus kann die sogenannten ASF-Mode (Anti-Symmetric-Flexural) in homogenen Materialien keine Harmonische erzeugen, d.h. der ANP verschwindet in diesem Fall. Erst kürzlich wurden Experimente in einer polykristallinen Aluminiumlegierung mit Eigenspannungen durchgeführt [KIK15]. In den Experimenten verhielt sich die Probe nichtklassisch nichtlinear, sodass u.a. die Amplitude der zweiten Harmonischen proportional zur Amplitude der Grundfrequenz war, nicht

1 Einführung

zum Quadrat derselben, wie es bei klassischen Nichtlinearitäten der Fall ist.

Inversionsalgorithmen

Die Dispersion von Rayleighwellen ist im Wesentlichen auf Inhomogenitäten des Materials in Tiefenrichtung zurückzuführen, d.h. auf Tiefengradienten in Dichte und elastischen Eigenschaften, auf Eigenspannungen bzw. Eigenspannungsprofile oder beides.

In [Aul90] leitet Auld mithilfe eines störungstheoretischen Ansatzes einen Ausdruck für die Berechnung von Tiefenprofilen aus den relativen Geschwindigkeitsänderungen von Oberflächenwellen her. Tittmann und Thompson [TT73] fanden eine vereinfachte Form dieser Gesetzmäßigkeiten und konnten so die Dispersionskurven oberflächengehärteten Stahls vorhersagen. Szabo untersuchte die Auswirkung verschiedener Tiefenprofile auf die Dispersion akustischer Oberflächenwellen [Sza75]. Richardson und Tittman entwickelten die genannte störungstheoretische Methode weiter und begegneten der (im mathematischen Sinne) Schlechtgestelltheit der auftretenden inversen Probleme mit einem schätzungstheoretischen Ansatz für den Fall dichter [Ric77] und spärlicher [RT77] Datensätze. Später nutzten sie diese Methode, um oberflächennahe Tiefenprofile der Materialeigenschaften aus Messdaten zu bestimmen [TART87].

Eine noch gröbere Abschätzung des Parameterprofils nahm Hirao in [HKSF81] vor. Um den Verfestigungszustand benutzter Schienen zu bestimmen, verwendet er das Modell einer Schicht auf einem Halbraum und berechnet damit die Dispersion für Rayleighwellen. In der darauffolgenden Veröffentlichung bestimmt er unter Annahme desselben Modells die Dicke der effektiv kaltverfestigten Schicht mithilfe von Lovewellen [HSTF81]. Die guten Übereinstimmungen mit experimentellen Daten bestätigen in beiden Arbeiten seine vereinfachenden Annahmen.

Erste Modelle zur quantitativen Beschreibung der Dispersion von Rayleighwellen aufgrund inhomogener mechanischer elastischer Spannungen in ansonsten homogenen und isotropen Körpern entstammen ebenfalls der Gruppe um Hirao [HFH81, Hir82]. Husson und Kino verallgemeinerten diese Theorie später auf Volumenwellen [HK82] bzw. Oberflächenwellen [Hus85], die sich in ungleichmäßig vorgespannten Medien ausbreiten. Die Stetigkeit der Spannung rechtfertigt den von Ditri und Hongerholt verwandten polynomiellen Ansatz für das gesuchte Spannungsprofil. Eine Entwicklung der Dispersion nach den Frequenzen und ein anschließender Koeffizientenvergleich liefert ihnen eine explizite Lösung für das gesuchte Tiefenprofil [DH96]. Später schwächte Ditri die Voraussetzung eines stetigen Spannungsprofils ab, indem er zur Lösung der sich ergebenden Fredholmgleichung die Mellin-Transformation benutzte [Dit97].

Im Allgemeinen sind Fredholmgleichungen erster Art im mathematischen Sinne inkorrekt gestellte Probleme. Praktisch bedeutet das, dass zu einer gegebenen bzw. gemessenen Dispersionskurve kein Spannungstiefenprofil existiert, dieses nicht eindeutig ist oder Instabilitäten aufweist (keine stetige Abhängigkeit von den Eingangsdaten). Diese Eigenschaft motivierte Rajagopal et al. [RBMK05], die Ausgangsgleichung in eine Volterrasche Integralgleichung zweiter Art umzuformen. Die numerischen Details ihrer Rechnungen geben sie leider nicht preis, sodass es schwierig ist, diese nachzuvollziehen.

Als Eingangsdaten der hier beschriebenen Inversionsalgorithmen können Dispersionskurven, die von diversen Autoren auf unterschiedlichen Materialien gemessen wurden [TBFB95, RN03, SMMR05, DDR⁺06, LKJQ11] im Prinzip verwendet werden. Allen Arbeiten ist gemeinsam, dass sich Oberflächenbehandlungen wie das Kugelstrahlen oder Laser-Peening einerseits deutlich in den gemessenen Dispersionskurven widerspiegeln, andererseits aber der Einfluss der Eigenspannung bisher nicht von dem der Kaltverfestigung getrennt werden konnte.

Änderung der elastischen Konstanten

Nach Hughes und Kelly [HK53] und der darauf aufbauenden Arbeit von Thurston und Brugger [TB64] kann die Änderung der Phasengeschwindigkeit c von Volumenwellen in elastischen Medien aufgrund einer mechanischen Spannung σ in der Form

$$\underbrace{\rho_0 c^2}_{\substack{\text{Ausgangsdichte mal} \\ \text{Quadrat der} \\ \text{Phasengeschwindigkeit}}} = \underbrace{f_1(C_{IJ})}_{\substack{\text{hier gefügeveränderte SOEC} \\ \text{direkter Einfluss plastischer} \\ \text{Verformung}}} + \underbrace{f_2(C_{IJ}; C_{IJK})}_{\substack{\text{geänderte TOEC zu bestimmen}}} \times \underbrace{\sigma}_{\text{Spannung}} \quad (1.3)$$

beschrieben werden. Der funktionale Zusammenhang beinhaltet die elastischen Konstanten zweiter Ordnung C_{IJ} (SOEC) und dritter Ordnung C_{IJK} (TOEC). In dieser allgemeinen Form gilt die Relation auch für akustische Oberflächenwellen. Die genauen Zusammenhänge werden in den entsprechenden Kapiteln hergeleitet.

Die in Gleichung (1.3) nötigen Materialparameter lassen sich zwar im Voraus bestimmen, aber in Folge plastischer Verformung des zu untersuchenden Materials, etwa durch mechanische Oberflächenbehandlung, können sich die TOEC ändern. Durch eine empirische Anpassung der TOEC im Inversionsalgorithmus zur Extraktion des Eigenspannungsprofils aus der Dispersion der akustischen Oberflächenwellen können solche Änderungen mehr oder weniger gut berücksichtigt werden. Der funktionale Zusammenhang zwischen Geschwindigkeit und Spannung ist dann immer noch gegeben, jedoch mit entsprechend geänderten SOEC und TOEC. Wir gehen hier davon aus, dass sich die Änderungen der SOEC hauptsächlich über f_1 auswirken, wogegen f_2 signifikant von den TOEC beeinflusst wird. Da sich die Empirie aber von einem Untersuchungsobjekt zum anderen ändern kann, soll nach Möglichkeiten gesucht werden, die nötigen Materialparameter am veränderten Material selbst zu bestimmen.

Neben den eben beschriebenen gewollten Eigenschaftsänderungen durch gezielte Nachbehandlung des Materials treten im Einsatz nicht vorhersehbare Lasten auf. Derartige zyklischen Belastungen der letztendlich relevanten Bauteile führen zur Ermüdung derselben und somit ebenfalls zur Änderung der elastischen Eigenschaften. Am Anfang der Ermüdung stehen stets Versetzungsbewegungen. Aufgrund zyklischer Spannungen bewegen sich die isolierten Versetzungen (Versetzungsmultipole) hin und her und führen zur Bildung von Versetzungsdipolen (Multipolpaare). Diese können sich ihrerseits wieder zu Gleitbändern (persistente Gleitbänder, Lüdersbänder) zusammenschließen. Hikata, Chick und Elbaum untersuchten in [HCE65] den Einfluss von Versetzungsmultipolen auf den ANP des Materials und zeigten, dass diese einen von der Gitternichtlinearität unabhängigen Beitrag zur Nichtlinearität leisten. Dieser Beitrag ist darüber hinaus proportional zur aufgebrachten Spannung. Das Studium von Versetzungsstrukturen und deren Wechselwirkung insbesondere mit metallischen Werkstoffen erlaubt damit ein frühzeitiges Erkennen von Ermüdungserscheinungen [BT63, BF65, Bre66, MMS63, SKQ⁺08, GB68, BPZ⁺83, ZKS89, Nag98, CY01, KQJ⁺06, KJQL06, HKJ⁺06, PKQJ09, SW11, MKJQ11, WKQJ12]. Für weitere experimentelle Arbeiten und eine Übersicht zur Erzeugung und Nutzung der zweiten Harmonischen in der zerstörungsfreien Prüfung sei auf den Übersichtsartikel [MKJQ14] verwiesen.

Cantrell und Yost erweiterten die Theorie von Hikata et al. und bezogen neben den Multipoleffekten und der Gitternichtlinearität auch die Beiträge von Versetzungsdipolen mit ein [CY01, Can04, Can06, Can09, CY13]. Im Gegensatz zu diesem analytischen Ansatz nebst experimentellem Nachweis untersuchten Cash und Cai den Einfluss von Versetzungen auf den ANP mittels Simulationen der Versetzungsdynamik [CC12, CC11].

Mikrorisse

Die nichtlineare Wechselwirkung von Mikrorissen und akustischen Oberflächenwellen erlangte aufgrund ihrer Relevanz in der zerstörungsfreien Prüfung in den letzten Jahren wieder zunehmend Aufmerksamkeit.

1 Einführung

keit. Damit verbunden waren nicht nur praktische Untersuchungen [OKDG07, CPCD17, MZXZ17, ZX-zXjL17], sondern auch grundlegende theoretische Studien [OKQJ16, ZQJQ15, ZQJQ16a, ZQJQ16b] (siehe auch [ZQJQ16a] und die Referenzen für frühere Arbeiten). Diese beinhalten vor allem transiente Simulationen der Ausbreitung von Rayleighwellen [OKQJ16] und langwelligen Lamb-Wellen (S0-Mode) [ZLC⁺17] in Materialien mit Rissen und die Entstehung sowie das Anwachsen der zweiten Harmonischen infolge der Wechselwirkung mit oberflächennahen Mikrorissen. Dabei wurde auch die Reibung berücksichtigt. In den Simulationen der nichtlinearen Ausbreitung langwelliger S0-Moden mit zweidimensionaler Rissverteilung stellte sich jedoch heraus, dass der Einfluss der Reibung an den Rissflächen auf den ANP vernachlässigbar ist.

Mithilfe quasistatischer Experimente und Simulationen des Materialverhaltens, können daher Modelle für das mikromechanische und makroskopische Verhalten aufgestellt und angepasst sowie die Ausbreitung akustischer Wellen in diesen Medien beschrieben werden. Für spezielle Orientierungsverteilungen der eingebrachten Risse, einfache Formen und gewisse Anforderungen an die Dichte dieser kann der rissinduzierte Beitrag zur Gesamtsteifigkeit des Systems analytisch berechnet werden [SK91, Kac92]. Ist die Rissdichte hinreichend klein, sodass die Risse nicht interagieren können, dann ist die lokale Spannung in der Nähe des Risses in guter Näherung gleich der von außen angelegten Spannung. Die Gesamtdehnung setzt sich folglich aus der Dehnung im ungerissenen Medium und einem rissinduzierten Anteil zusammen.

Mit den von O'Connell und Budiansky [BO76, OB74] vorgeschlagenen selbstkonsistenten Modellen können dagegen auch effektive Konstanten in Medien mit höheren Rissdichten berechnet werden, in denen sich die Spannungsfelder der Risse bereits untereinander beeinflussen. In ihrem Modell wird das lokale Spannungsfeld um den Riss dazu mit der Steifigkeit des rissbehafteten Materials berechnet, was jedoch dazu führt, dass die Risswechselwirkung im Allgemeinen überschätzt wird. Bei hohen Rissdichten reagiert das Gesamtsystem damit viel weicher als es tatsächlich der Fall wäre [Kac92]. Um dieses Problem zu umgehen, steigern Henyey und Pomphrey [HP82] in ihrer differentiellen Methode die Rissdichte in kleinen Schritten und berechnen die Steifigkeit des Gesamtsystems sukzessive neu. Basierend auf den analytischen Ergebnissen von Kachanov [Kac92] für effektive elastische Konstanten in dünn mit Rissen besetzten Systemen, untersucht Pecorari die Auswirkung flacher Risse auf die Ausbreitung von Volumenwellen [Pec15a]. Da die Berechnungen nur für offene Risse gültig sind, wird eine Funktion H eingeführt, die für parallel ausgerichtete Risse gleich der Heavisidefunktion ist und im Falle zufälliger Orientierungsverteilung der Mikrorisse das Verhältnis der Anzahl der geöffneten Risse zur Gesamtanzahl der Risse beschreibt. Reibungen an den Rissoberflächen werden vernachlässigt, da anhand transienter Simulationen des Hystereseverhaltens von Sandstein dissipative Verluste ausgeschlossen werden konnten [Pec15b]. Nazarov und Sutin berechnen neben den SOEC auch Konstanten dritter und vierter Ordnung einer zufälligen Rissverteilung in einer linearen Matrix und benutzen dazu ein einfaches mikromechanisches Modell, dass die Rissöffnung mit der äußeren Spannung verbindet [NS97]. Ihren Aussagen zufolge haben die Mikrorisse dabei einen drastischen Einfluss auf die nichtlinearen Konstanten, während sich die SOEC kaum ändern.

Ein ähnliches Problem stellt die Bestimmung elastischer Konstanten von Polykristallen aus den Werten der konstituierenden Einkristalle dar. Unter der Annahme, dass entweder die Dehnung (Voigt) oder die Spannung (Reuss) im Einkristall gleich der im Polykristall ist, erhält man über eine Richtungsmittelung die mittlere Steifigkeit oder Nachgiebigkeit des Aggregats (siehe [KAT15, KT15] und darin enthaltene Referenzen). Lubarda schwächt die Gleichheitsforderung der Dehnungs- bzw. Spannungstensoren zu einer Proportionalitätsbedingung ab [Lub97] und erhält so bessere Werte der elastischen Konstanten. Die Proportionalitätskonstante selbst folgt dabei aus einer selbstkonsistenten Methode. Die finalen Werte für die SOEC sind hier unabhängig davon, ob als Ausgangspunkt die Proportionalität zwischen den Spannungen oder den Dehnungen gewählt wurde. Lediglich die TOEC unterscheiden sich in Abhängigkeit vom Rechenweg. Die Methode ist damit selbstkonsistent bzgl. der SOEC, nicht jedoch bzgl. der TOEC und wird daher von Lubarda als semi-konsistent bezeichnet.

1.2. Aufbau der Arbeit

Um die Dispersionsmessungen korrekt interpretieren zu können, müssen die Konstanten dritter Ordnung des untersuchten Materials im aktuellen Zustand bekannt sein. Diese werden von der Oberflächenbehandlung beeinflusst und können sich in Abhängigkeit vom Abstand zur Oberfläche ändern. Die Behandlung selber induziert dabei ebenfalls die Eigenspannungen, die es letztendlich zu bestimmen gilt.

Die hier vorliegende Arbeit verfolgt daher zwei Hauptziele. Zum einen soll sie zu einem besseren Verständnis der Änderung der elastischen Konstanten zweiter und dritter Ordnung infolge mechanischer Oberflächenbehandlungen beitragen. Zum anderen soll sie klären, inwiefern sich Informationen über die Tiefenprofile der elastischen Konstanten aus Messungen mit nichtlinearem Ultraschall, insbesondere mithilfe Oberflächenwellen, gewinnen lassen.

Nach einer kurzen Einführung in die Grundlagen der Konzepte dieser Arbeit in Kapitel 2 befasst sich Kapitel 3 mit der Bestimmung der elastischen Konstanten der Superlegierungen In718 und Ti6246. Im uniaxialen Zugversuch wurden dazu an knochenförmigen Zugproben aus unbehandeltem Material die Laufzeiten der Volumenwellen gemessen. Unter der Annahme isotropen Materialverhaltens werden daraus die Phasengeschwindigkeiten der Longitudinalwelle sowie der zwei Transversalwellen, parallel und senkrecht zur Zugrichtung polarisiert, bestimmt. Mithilfe der im Kapitel 3 hergeleiteten akustoelastischen Gleichungen werden die akustoelastischen Konstanten (AEC) und die daraus resultierenden TOEC berechnet.

Die so gewonnenen Materialparameter werden in Kapitel 4 in die dort hergeleiteten Inversionsmodelle zur Bestimmung mechanischer Spannungen aus Dispersionsmessungen eingesetzt. Dabei wurde zunächst angenommen, dass die Eigenspannungen alleinige Ursache für die Dispersion der Oberflächenwellen sind. Eine Rückrechnung der Spannungen aus den Dispersionsdaten und Vergleich mit Messungen der Eigenspannungen per Röntgendiffraktion zeigen jedoch, dass dies nicht ohne Weiteres möglich ist, da die Phasengeschwindigkeit zusätzlich vor allem von der plastischen Verformung des Materials abhängt. Eine Anpassung der Konstanten dritter Ordnung ermöglicht zwar eine Rückrechnung. Da eine zerstörungsfreie Methode zur Messung der Eigenspannungen (ES) aber unabhängig von zusätzlichen (invasiven) Methoden sein sollte, muss der Einfluss der plastischen Verformung auf die Dispersion jedoch genauer untersucht werden.

Einer der vielen bekannten Mechanismen, die die elastischen Konstanten von Metallen und Legierungen beeinflussen, bilden räumliche Verteilungen von Mikrorissen. Der Einfluss der Form, Ausrichtung, Verteilung und Dichte solcher Konstellationen wird in Kapitel 5 näher untersucht. Dazu wurden statische Simulationen an Würfeln durchgeführt, die Risse enthielten, wobei sich die Simulationen gemäß den bereits genannten Gesichtspunkten unterschieden und darüber hinaus der Einfluss verschiedener Randbedingungen auf die numerischen Experimente berücksichtigt wurde. Das Ergebnis der Simulationen sind Spannungs-Dehnungskurven der jeweiligen Konfigurationen, aus denen sich einerseits unter der Annahme analytischen Materialverhaltens effektive elastische Konstanten zweiter und dritter Ordnung berechnen lassen. Andererseits werden mit den in den FEM-Simulationen gewonnenen Erfahrungen ein makroskopisches Modell nach Lyakhovskiy und Myasnikov [LM84] als auch ein mikromechanisches Modell auf Basis von Nazarov und Sutin [NS97] sowie Zhao et al. [ZQJQ15] vorgeschlagen, die das Materialverhalten der gerissenen Systeme möglichst gut widerspiegeln. Aus den Spannungs-Dehnungskurven werden dazu die Modellparameter der makroskopischen und mikromechanischen Modelle berechnet und die Qualität der Modelle beurteilt. Die effektiven Konstanten und Modellparameter können dann im Folgenden verwendet werden, um Größen wie etwa den ANP zu bestimmen, die die Ausbreitung geführter Wellen in rissbehafteten Medien beschreiben, ohne die Interaktion des im Allgemeinen komplizierten Verschiebungsfeldes der Welle mit den Rissen zu kennen. In den Simulationen wurden zwei Arten von Rissen betrachtet. Flache Risse, die im ungespannten Zustand geschlossen sind und Hohlzylinder mit eingesetztem Kugelsegment, sodass die Kugelkalotte

1 Einführung

wie ein Hertzscher Kontakt auf eine der Deckflächen des Zylinders drückt. Der Hertzsche Kontakt steht hier als Beispiel für den Einfluss von Unebenheiten der Kontaktflächen realer Risse. Das Verhalten der beiden Rissarten unterscheidet sich deutlich. Sofern keine Vorspannung vorliegt, zeigen beide Arten ein nicht-analytisches Verhalten.

Die nichtlineare Wechselwirkung der in Kapitel 5 untersuchten Risse mit Oberflächenwellen ist Bestandteil von Kapitel 6. Über einen in der Theorie nichtlinearer Wellen wohlbekanntem störungstheoretischen Ansatz wird dort eine Evolutionsgleichung für die Ausbreitung von Rayleighwellen in derartigen Materialien hergeleitet und der Einfluss der Mikrorisse mit dem Einfluss der klassischen Gitternichtlinearität verglichen. Die Effizienz der Erzeugung der zweiten harmonischen und der nichtlinearen Erzeugung von Mischwellen mit zwei unterschiedlichen Eingangsfrequenzen wird hier in Abhängigkeit von den Eingangsamplituden und Eingangsfrequenzen näher untersucht. Damit die höheren Harmonischen während der Ausbreitung anwachsen können, müssen ihre Phasen an die Grundschiwingung angepasst sein. Für dispersive Wellen, wie etwa Lamb-Wellen, können diese Resonanzbedingungen nur an bestimmten Punkten erfüllt werden. Die niedrigste symmetrische Lamb-Mode (S0-Mode) jedoch ist für hinreichend kleine Frequenzen nahezu dispersionsfrei. Der Einfluss von Mikrorissen auf langwellige S0-Moden wurde kürzlich erst in transienten Simulationen untersucht [WZXT14, ZLC⁺17, MZXZ17]. Die auf der statischen Spannungs-Verzerrungsrelation beruhenden Ergebnisse dieser Arbeit können auch zur Klärung der Frage herangezogen werden, in wieweit aufwändige zeitabhängige Simulationen der nichtlinearen Ausbreitung geführter Wellen nötig sind.

Zum Schluss werden die Tiefenprofile der Risse in den Vorwärtsrechnungen durch Laguerre-Funktionen approximiert und deren Koeffizienten aus dem entstehenden inversen Problem bei gegebener Dispersion berechnet. Unter der Annahme, dass sich alle Parameter in derselben funktionalen Abhängigkeit in der Richtung senkrecht zur Oberfläche ändern, können so Aussagen über das Tiefenprofil der elastischen Konstanten gewonnen werden.

2. Grundlagen

Im Gegensatz zur infinitesimalen Theorie spielen bei den in dieser Arbeit relevanten nichtlinearen Prozessen große Amplituden eine Rolle. Das betrifft sowohl die statischen Dehnungen als auch die transienten Auslenkungen, hervorgerufen durch sich ausbreitende Wellen. Die quadratischen Terme des Dehnungstensors können dort nicht ignoriert werden, die resultierenden Gleichungen nicht einfach linearisiert werden. Für Wellen, die sich auf elastisch vorgedehnten Medien ausbreiten muss außerdem zwischen dem Material- und Momentanzustand unterschieden werden, wie es in Abb. 2.1 schematisch dargestellt ist.

Die Position eines Massenelementes im unverformten Zustand wird dabei mit X_J bezeichnet (Materialkoordinaten oder Lagrangesche Koordinaten). Im verformten Zustand bezeichnen wir die Position des gleichen Massenelementes mit x_j (Raumkoordinaten oder Eulersche Koordinaten). Die Änderung der Eulerschen Koordinaten bzgl. der Materialkoordinaten wird mit dem Deformationsgradienten F_{jJ} beschrieben und es gilt

$$F_{jJ} = \frac{\partial x_j}{\partial X_J} = \frac{\partial(\delta_{jK} X_K + u_j)}{\partial X_J} = \delta_{jJ} + \frac{\partial u_j}{\partial X_J} = \delta_{jJ} + H_{jJ}, \quad (2.1)$$

wobei $u_j(X_J, t) := x_j(X_J, t) - X_J$ die Verschiebungen und $H_{jJ} := \partial u_j / \partial X_J =: u_{j,J}$ die Verschiebungsgradienten sind. Die Determinante der Jacobimatrix F_{iJ} vereinfacht sich für kleine Verschiebungsgradienten $\|u_{j,J}\| \ll 1$ zu

$$|F_{iJ}| \approx 1 + u_{k,k} = 1 + \text{tr } \mathbf{H}. \quad (2.2)$$

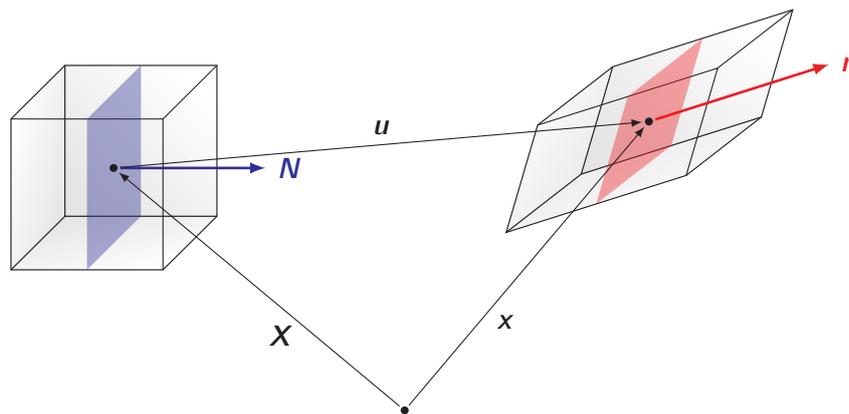


Abbildung 2.1.: Materialkoordinaten \mathbf{X} und Raumkoordinaten \mathbf{x} mit dem Verschiebungsvektor \mathbf{u} .

Bemerkung 2.1 (Volumenverhältnis der Konfigurationen). Seien (dX_I^1) , (dX_J^2) und (dX_K^3) drei infinitesimale Vektoren in der Referenzkonfiguration (unverformter Zustand) und (dx_r^1) , (dx_s^2) und (dx_t^3) ebendiese nach der Deformation in der Momentankonfiguration. Das Volumen des aufgespannten Spats in der Referenzkonfiguration berechnet sich zu

$$dV_0 = [(dX_I^1) \times (dX_J^2)] \cdot (dX_K^3) = \epsilon_{IJK} dX_I^1 dX_J^2 dX_K^3.$$

2 Grundlagen

Im deformierten Zustand ergibt sich mithilfe von

$$dx_r = \frac{\partial x_r}{\partial X_I} dX_I = F_{rI} dX_I$$

demzufolge

$$dV = \epsilon_{rst} F_{rI} dX_I^1 F_{sJ} dX_J^2 F_{tK} dX_K^3.$$

Der Levi-Civita-Tensor ermöglicht es uns, für die Determinante des Deformationsgradienten

$$|F_{rI}| = \epsilon_{rst} F_{r1} F_{s2} F_{t3} = \epsilon_{(IJK)} \epsilon_{rst} F_{r(I)} F_{s(J)} F_{t(K)}, = \frac{1}{6} \epsilon_{IJK} \epsilon_{rst} F_{rI} F_{sJ} F_{tK}, \quad (2.3)$$

zu schreiben, wobei die zweite Gleichheit im Vorzeichenwechsel der Determinante bei Spaltenvertauschung begründet ist (keine Summation über geklammerte Indizes). Somit erhalten wir schließlich

$$dV = \epsilon_{rst} F_{rI} F_{sJ} F_{tK} \epsilon_{IJK} dX_I^1 dX_J^2 dX_K^3 = |F_{rI}| dV_0 \quad (2.4)$$

als das gesuchte Verhältnis beider Volumina. Häufig wird die Funktionaldeterminante mit J bezeichnet, sodass wir auch $dV = J dV_0$ schreiben können. Aus diesem Ergebnis folgt unmittelbar $\rho_0 = J\rho$ für das Verhältnis beider Dichten. ▲

Zur Umrechnung der Spannungen zwischen den unterschiedlichen Konfigurationen aus den Integralen der Spannungsvektoren über den Rand ist das Verhältnis der Flächen nötig.

Bemerkung 2.2 (Flächenverhältnis zwischen den Konfigurationen). Seien (dX_K^1) , (dX_L^2) und (dx_s^1) , (dx_t^2) je zwei infinitesimale Vektoren der Referenzkonfiguration bzw. des deformierten Zustands. Für die aufgespannten Flächen gilt

$$\epsilon_{IKL} dX_K^1 dX_L^2 = \frac{\epsilon_{IKL} dX_K^1 dX_L^2}{|\epsilon_{IKL} dX_K^1 dX_L^2|} |\epsilon_{IKL} dX_K^1 dX_L^2| = N_I dA_0$$

und analog

$$\epsilon_{rst} dx_s^1 dx_t^2 = n_r dA.$$

Mithilfe des Deformationsgradienten erhält man mit

$$\begin{aligned} N_I dA_0 &= \epsilon_{IKL} (F^{-1})_{Ks} dx_s^1 (F^{-1})_{Lt} dx_t^2 \\ &= \delta_{IJ} \epsilon_{JKL} (F^{-1})_{Ks} (F^{-1})_{Lt} dx_s^1 dx_t^2 \\ &= F_{rI} \epsilon_{JKL} (F^{-1})_{Jr} (F^{-1})_{Ks} (F^{-1})_{Lt} dx_s^1 dx_t^2 \\ &= F_{rI} |F^{-1}| \epsilon_{rst} dx_s^1 dx_t^2 \\ &= F_{rI} J^{-1} n_r dA, \end{aligned}$$

bzw.

$$\mathbf{n} dA = \mathbf{J} \mathbf{F}^{-T} \mathbf{N} dA_0 = (\text{cof } \mathbf{F}) \mathbf{N} dA_0, \quad (2.5)$$

die sogenannte Nanson-Gleichung oder Nansonsche Formel, die Flächen und zugehörige Normalenvektoren in der Momentankonfiguration mit denen in der Referenzkonfiguration verbindet. ▲

Bemerkung 2.3 (Euler-Piola-Jacobi). Bei der Umrechnung der Divergenz der Spannungstensenoren zwischen den verschiedenen Konfigurationen tritt die Divergenz des Faktors in der Nanson'schen Formel auf. Es lässt sich zeigen, dass diese verschwindet. Aus der Cramerschen Regel folgt für die Darstellung der Inversen (vgl. (A.17) im Anhang)

$$F_{il} = (\mathbf{F}^{-1})_{il}^{-1} = \frac{\frac{1}{2}\epsilon_{ijk}\epsilon_{IJK}F_{Jj}^{-1}F_{Kk}^{-1}}{\frac{1}{6}\epsilon_{mno}\epsilon_{MNO}F_{Mm}^{-1}F_{Nn}^{-1}F_{Oo}^{-1}}, \quad (2.6)$$

wobei $F_{ii}^{-1} = \partial X_I / \partial x_i$ den inversen Deformationsgradienten bezeichnet, dessen Determinante dem Nenner der rechten Seite entspricht und sich wegen $|\mathbf{F}| = J$ zu $|\mathbf{F}^{-1}| = J^{-1}$ ergibt. Für die Divergenz des Nanson-Faktors erhalten wir somit

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_i} (J^{-1}F_{il}) &= 2\frac{1}{2}\epsilon_{ijk}\epsilon_{IJK}F_{Jj}^{-1}F_{Kk}^{-1} \\ &= \epsilon_{ijk}\epsilon_{IJK}\frac{1}{2}\left(F_{Jj,i}^{-1} + F_{Ji,j}^{-1}\right)F_{Kk}^{-1} \\ &= \epsilon_{ijk}\epsilon_{IJK}\frac{1}{2}\left(F_{Jj,i}^{-1} - F_{Ji,j}^{-1}\right)F_{Kk}^{-1} \\ &= 0, \end{aligned} \quad (2.7)$$

die sogenannte Euler-Piola-Jacobi-Identität. ▲

Mithilfe des Deformationsgradienten lassen sich nun verschiedene Verzerrungstensenoren definieren, von denen einige in Tabelle 2.1 mitsamt Bezeichnung und Bezugssystem aufgelistet sind.

Tabelle 2.1.: Definitionen verschiedener Verzerrungstensenoren (Auswahl). Die Bezugssysteme sind Materialkoordinaten (MK) und Raumkoordinaten (RK).

Bezeichnung	Definition	Bezugssystem
rechter Cauchy-Green-Tensor	$B_{JK} := (F^T F)_{JK} = F_{Jj}F_{jK}$	MK
linker Cauchy-Green-Tensor	$b_{jk} := (F F^T)_{jk} = F_{jJ}F_{kJ}$	RK
Green-Lagrange-Tensor	$E_{JK} := \frac{1}{2}(B - I)_{JK} = \frac{1}{2}(F_{Jj}F_{jK} - \delta_{JK})$	MK
Euler-Almansi-Tensor	$e_{jk} := \frac{1}{2}(I - b^{-1})_{jk} = \frac{1}{2}(\delta_{jk} - F_{Jj}^{-1}F_{Jk}^{-1})$	RK

Im Falle kleiner Deformationen lassen sich diese Ausdrücke linearisieren. Man erhält sowohl für den Green-Lagrange-Tensor (Lagrange-Dehnung)

$$E_{JK} = \frac{1}{2}[(H + I)_{jJ}(H + I)_{jK} - \delta_{JK}] = \epsilon_{JK} + \mathcal{O}(H_{jJ}^2), \quad (2.8)$$

als auch für den Euler-Almansi-Tensor

$$\begin{aligned} e_{jk} &= \frac{1}{2}\left[\delta_{jk} - (H + I)_{Jj}^{-1}(H + I)_{Jk}^{-1}\right] \approx \frac{1}{2}\left[\delta_{jk} - (I - H)_{mM}\delta_{mJ}\delta_{Mj}(I - H)_{nN}\delta_{nJ}\delta_{Nk}\right] \\ &= \frac{1}{2}\left[\delta_{Mj}H_{kM} + \delta_{Nk}H_{jN} - \delta_{Mj}\delta_{Nk}H_{nM}H_{nN}\right] \approx \frac{1}{2}\left[\delta_{Mj}H_{kM} + \delta_{Nk}H_{jN}\right] = \delta_{jJ}\delta_{kK}\epsilon_{JK} \end{aligned} \quad (2.9)$$

den infinitesimalen Dehnungstensor $\epsilon_{IJ} := 1/2(\delta_{jK}H_{jJ} + \delta_{jJ}H_{jK})$. In der Vereinfachung des Euler-Almansi-Tensors wurde zusätzlich die Näherung¹ $(I + H)_{Jj}^{-1} \approx (I - H)_{mM}\delta_{mJ}\delta_{Mj}$ benutzt.

¹folgt aus $(I - H)\sum_{k=0}^N H^k = I - H^{N+1}$ ($N \in \mathbb{N}$) und $\|H\| \ll 1$

Hyperelastische Materialien

Die Hyperelastizität (auch Greensche Elastizität) ist ein spezielles Materialmodell für elastische Körper, deren Spannungs-Dehnungsrelation sich aus der Ableitung einer Formänderungsenergie (auch Dehnungsenergie oder Verzerrungsenergie) nach den Dehnungen ergibt [Wri01]. Wir betrachten hier im Speziellen das Funktional

$$\Phi(\mathbf{X}, E_{IJ}) = \Phi_0 + C_{IJ}E_{IJ} + \frac{1}{2!}C_{IJKL}E_{IJ}E_{KL} + \frac{1}{3!}C_{IJKLMN}E_{IJ}E_{KL}E_{MN} + \mathcal{O}(E_{IJ}^4) \quad (2.10)$$

mit den Brugger-Konstanten ν -ter Ordnung (ν -OEC)

$$C_{I_1 J_1 \dots I_\nu J_\nu} := \left. \frac{\partial^\nu \Phi}{\partial E_{I_1 J_1} \dots \partial E_{I_\nu J_\nu}} \right|_{\mathbf{E}=0}, \quad (2.11)$$

aus dessen Ableitung nach den Green-Lagrangeschen Dehnungen E_{IJ} sich der Spannungstensor, genauer der zweite Piola-Kirchhoffsche Spannungstensor (siehe unten) ergibt.

Bemerkung 2.4 (Symmetrie der ν -OEC). Aus der Symmetrie der Lagrange-Dehnungen und der Tatsache, dass die Konstanten ν -ter Ordnung aus der Reihenentwicklung der Energiedichte stammen, lässt sich auf folgende Eigenschaften der ν -OEC schließen:

$$C_{I_1 J_1 \dots I_\nu J_\nu} = C_{J_1 I_1 \dots J_\nu I_\nu} \quad (2.12)$$

$$C_{J_1 I_1 \dots J_k I_k \dots J_\nu J_\nu} = C_{J_k I_k \dots J_1 I_1 \dots J_\nu J_\nu} \quad (k = 2, \dots, \nu). \quad (2.13)$$

Die erste Eigenschaft liefert sechs verschiedene Kombinationen pro Indexpaar. Aus der zweiten Symmetrie folgert man schließlich, dass es maximal (Kombination mit Wiederholung)

$$\binom{\binom{6}{\nu}}{\nu} = \binom{5 + \nu}{\nu}$$

unabhängige ν -OEC geben kann, d.h. maximal 21 Konstanten zweiter Ordnung und 56 Konstanten dritter Ordnung. Die sechs möglichen Konstanten erster Ordnung beschreiben dabei die Vorspannungen, die den unabhängigen Komponenten des Spannungstensors entsprechen. ▲

Aus der Definition der Green-Lagrangeschen Dehnungen wird deutlich, dass diese Dehnungen unterschiedlicher Größenordnungen enthalten. In Untersuchungen, in denen Terme ab einer bestimmten Ordnung konsequent vernachlässigt werden sollen, ist es sinnvoller, die Koeffizienten der einzelnen Verschiebungsgradienten zu kennen. Um diese zu erhalten, entwickeln wir die potentielle Energiedichte bzgl. der Verschiebungsgradienten $u_{i,J}$:

$$\Phi(\mathbf{X}, u_{i,J}) = \Phi_0 + S_{iJ}u_{i,J} + \frac{1}{2!}S_{iJKL}u_{i,J}u_{k,L} + \frac{1}{3!}S_{iJKLMN}u_{i,J}u_{k,L}u_{m,N} + \mathcal{O}(u_{i,J}^4). \quad (2.14)$$

Ein Koeffizientenvergleich zwischen den Gleichungen (2.10) und (2.14) liefert den Zusammenhang zwischen den Tensoren \mathbf{C} und \mathbf{S} :

$$S_{iJ} = \delta_{iI}C_{IJ}, \quad (2.15)$$

$$S_{iJKL} = C_{JL}\delta_{ik} + C_{IJKL}\delta_{iI}\delta_{kK}, \quad (2.16)$$

$$S_{iJKLMN} = C_{IJKLMN}\delta_{iI}\delta_{kK}\delta_{mM} + C_{IJLN}\delta_{iI}\delta_{kM} + C_{KLJN}\delta_{kK}\delta_{iM} + C_{MNJL}\delta_{mM}\delta_{iK}. \quad (2.17)$$

Der erste Piola-Kirchhoffsche Spannungstensor² (PK1-Tensor) (P_{iJ}) ist nun als Ableitung des Potentials nach den Verschiebungsgradienten

$$P_{iJ} = \frac{\partial \Phi}{\partial u_{i,J}} = S_{iJ} + S_{iJKL}u_{k,L} + \frac{1}{2}S_{iJKLMN}u_{k,L}u_{m,N} + \mathcal{O}(u_{i,J}^3) \quad (2.18)$$

²auch Piola-Lagrange-Tensor

definiert, womit die Konstanten erster Ordnung die Rolle der bereits vorhandenen Vorspannungen (z.B. *Eigenspannung*) einnehmen. Die Koeffizienten ($S_{i_1 J_1 \dots i_\nu J_\nu}$) mit

$$S_{i_1 J_1 \dots i_\nu J_\nu} := \left. \frac{\partial^\nu \Phi}{\partial u_{i_1 J_1} \dots \partial u_{i_\nu J_\nu}} \right|_{u=0}. \quad (2.19)$$

werden in diesem Zusammenhang auch als Huang-Koeffizienten bezeichnet.

Unter Verwendung der Nanson-Gleichung (2.5) kann man die Beziehung zwischen dem PK1-Tensor und dem Cauchyschen Spannungstensor (σ_{ij}) angeben, der die momentane Spannung bezogen auf die Momentankonfiguration beschreibt und damit symmetrisch ist. Es gilt

$$\int_{\partial V} \sigma_{ir} n_r dA = \int_{\partial V_0} \sigma_{ir} (F^{-1})_{I_r} J N_I dA_0 = \int_{\partial V_0} P_{iI} N_I dA_0 =: \int_{\partial V_0} F_{iL} T_{LI} N_I dA_0, \quad (2.20)$$

wobei der zuletzt eingeführte Tensor (T_{LI}) der 2. Piola-Kirchhoffsche Spannungstensor (PK2-Tensor) ist. Im Gegensatz zum PK1-Tensor ist dieser symmetrisch. Da die obigen Beziehungen für beliebige Gebiete gelten, können wir auch

$$J \sigma_{ab} = F_{bB} P_{aB} = F_{aA} F_{bB} T_{AB} \quad (2.21)$$

als Beziehung zwischen Cauchy-, PK1- und PK2-Tensor angeben.

2.1. Die Bewegungsgleichung

Die allgemeine Bewegungsgleichung erhält man nun durch Minimierung des Wirkungsintegrals

$$\int_{t_0}^{t_1} K - V + W dt, \quad (2.22)$$

wobei, K die kinetische Energie, V die potentielle Energie und W die verrichtete Arbeit bezeichnen. Da wir uns des Weiteren für Verschiebungsfelder interessieren, gilt für die Lagrangefunktion $L := K - V$ sowie für die verrichtete Arbeit W

$$L = K - V = \int_{V_0} \rho_0 \dot{u}_j \dot{u}_j - \Phi dV \quad (2.23)$$

$$W = \int_{\partial V_0} t_j u_j dA_0 + \int_{V_0} \rho_0 f_j u_j dV \quad (2.24)$$

Die Variation des Wirkungsintegrals (2.22) ergibt mit

$$\delta L = \int_{V_0} \frac{\partial (\rho_0 \dot{u}_j \dot{u}_j)}{\partial \dot{u}_i} \delta \dot{u}_i - \frac{\partial \Phi}{\partial u_{i,J}} \delta u_{i,J} dV_0 \quad (2.25a)$$

$$\delta W = \int_{\partial V_0} \frac{\partial (t_j u_j)}{\partial u_i} \delta u_i dA_0 + \int_{V_0} \frac{\partial (\rho_0 f_j u_j)}{\partial u_i} \delta u_i dV_0, \quad (2.25b)$$

und der Forderung nach einem stationären Punkt, dass

$$\begin{aligned} 0 &= \delta \int_{t_0}^{t_1} K - V + W dt \\ &= \int_{t_0}^{t_1} \delta K - \delta V + \delta W dt \\ &= \int_{t_0}^{t_1} \left[\int_{V_0} \rho_0 \dot{u}_i \frac{\partial}{\partial t} (\delta u_i) - P_{iJ} \frac{\partial}{\partial X_J} (\delta u_i) dV_0 + \int_{\partial V_0} t_j \delta u_j dA_0 + \int_{V_0} f_j \delta u_j dV \right] dt. \end{aligned} \quad (2.26)$$

2 Grundlagen

Man beachte, dass hier über das Referenzvolumen integriert wird. Die ersten beiden Terme lassen sich mithilfe partieller Integration in

$$\int_{t_0}^{t_1} \int_{V_0} \rho_0 \dot{u}_i \frac{\partial}{\partial t} (\delta u_i) dV_0 dt = \int_{V_0} \left[\rho_0 \dot{u}_i \delta u_i \Big|_{t_0}^{t_1} - \int_{t_0}^{t_1} \rho_0 \ddot{u}_i \delta u_i dt \right] dV_0$$

und

$$\int_{t_0}^{t_1} \int_{V_0} P_{iJ} \frac{\partial}{\partial X_J} (\delta u_i) dV_0 dt = \int_{t_0}^{t_1} \left[\int_{\partial V_0} P_{iJ} \delta u_i N_J dA_0 - \int_{V_0} P_{iJ,J} \delta u_i dV_0 \right] dt$$

umformen, sodass sich für die Variation

$$\begin{aligned} 0 = & - \int_{t_0}^{t_1} \left[\int_{V_0} (\rho_0 \ddot{u}_i - P_{iJ,J} - f_i) \delta u_i dV_0 \right] dt \\ & + \int_{t_0}^{t_1} \left[\int_{\partial V_0} (t_i - P_{iJ} N_J) \delta u_i dA_0 \right] dt + \int_{V_0} \rho_0 \dot{u}_i \delta u_i \Big|_{t_0}^{t_1} dV_0 \end{aligned} \quad (2.27)$$

ergibt. Unter Erfüllung der Randbedingung $P_{iJ} N_J = t_i$ und Voraussetzung fester Endpunkte für die Variation des Verschiebungsfeldes, d.h. $\delta u_i|_{t_0} = \delta u_i|_{t_1} = 0$, erhalten wir unter Vernachlässigung der inneren Kräfte \mathbf{f} , die Bewegungsgleichung

$$\rho_0 \ddot{u}_i = P_{iJ,J} = \frac{\partial}{\partial X_J} (S_{iJKL} u_{k,L} + S_{iJKLMN} u_{k,L} u_{m,N}), \quad (2.28)$$

wobei Terme höherer als quadratischer Ordnung im PK1-Tensor vernachlässigt wurden. Mithilfe der Euler-Piola-Jacobi-Identität (Gl. (2.7)) und der aus dem Volumenverhältnis in Gl. (2.4) resultierenden Relation der deformierten und undeformierten Dichten $\rho_0 = J\rho$ folgt außerdem

$$\rho \ddot{u}_i = \sigma_{ij,j} \quad (2.29)$$

als Bewegungsgleichung in der Momentankonfiguration.

Die Lösungen der Bewegungsgleichung hängen essentiell von den gegebenen Randbedingungen ab. Die wohl wichtigste Randbedingung im Hinblick auf die Ausbreitung von Oberflächenwellen ist eine *freie Oberfläche*, die durch die Spannungsfreiheit in Richtung der Flächennormalen N_J

$$T_{IJ} N_J|_S = 0 \quad (2.30)$$

gekennzeichnet ist, d.h. alle Normalspannungen und Scherungen in Richtung N_J verschwinden auf der Oberfläche S . Im Falle einer *Klemmung* der Oberfläche verschwinden dagegen alle Verschiebungen

$$u_j|_S = 0 \quad (2.31)$$

auf derselben. Die teilweise Einbeziehung von fixierten Oberflächen führt zu einer enormen Vereinfachung der Spannungs-Dehnungsrelationen und spielt daher bei der Validierung der Simulationsergebnisse eine wichtige Rolle. Darüber hinaus können Mischungen der genannten Randbedingungen auftreten. An der Grenzfläche zweier *fest miteinander verbundenen Halbebenen* etwa, müssen sowohl Verschiebungen als auch die Spannungen stetig sein, d.h.

$$\left(T_{IJ}^{(1)} - T_{IJ}^{(2)} \right)_J \Big|_S = 0, \quad (2.32)$$

$$\left(u_j^{(1)} - u_j^{(2)} \right) \Big|_S = 0. \quad (2.33)$$

Ein Beispiel dafür wäre etwa die Grenzfläche zwischen einer dünnen Schicht auf einem Substrat, deren Materialeigenschaften nur teilweise bekannt sind. Mithilfe der Stetigkeit der Dehnungen und Spannungen lässt sich so etwa eine effektive Randbedingung für eine an der Oberfläche geführte Welle herleiten.

Lässt man einen Schlupf zwischen den Halbebenen zu, so gelten die Stetigkeitsbedingungen nur noch für die Normalkomponenten der Verschiebung und der Spannung. Die Scherungen an der Grenzfläche verschwinden in diesem Fall. Ein wichtiges Beispiel für diesen Fall ist etwa die Modellierung flacher Risse.

2.2. Kompatibilitätsbedingungen

Ein gegebenes Randwertproblem, bestehend aus der hergeleiteten Bewegungsgleichung und Randbedingung, muss nicht notwendigerweise eine (eindeutige) Lösung besitzen. Eine Antwort darauf, unter welchen Umständen solche Lösungen existieren, liefern Integrabilitäts- oder Kompatibilitätsbedingungen. Bei kleinen Dehnungen gelten dabei die Kompatibilitätsbedingungen für den Dehnungstensor nach Saint-Venant. Für ein dreimal stetig differenzierbares Vektorfeld $u_i : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^3$ gilt nach dem Satz von Schwarz zunächst

$$\frac{\partial u_{i,J}}{\partial X_K} = \frac{\partial u_{i,K}}{\partial X_J},$$

sodass für den infinitesimalen Dehnungstensor (ϵ_{IJ})

$$2\epsilon_{IJ,KL} = \delta_{Ii}u_{i,JKL} + \delta_{Jj}u_{j,IKL} = (2\epsilon_{iL} - \delta_{LI}u_{i,I}),_{JK} + (2\epsilon_{JK} - \delta_{Kk}u_{k,J}),_{iL} \quad (2.34)$$

$$2\epsilon_{KL,IJ} = \delta_{Kk}u_{k,LIJ} + \delta_{LI}u_{i,KIJ} = (2\epsilon_{JK} - \delta_{Jj}u_{j,K}),_{iL} + (2\epsilon_{iL} - \delta_{Li}u_{i,L}),_{JK} \quad (2.35)$$

folgt. Addiert man nun noch die beiden letzten Gleichungen, so erhält man

$$0 = \epsilon_{IJ,KL} + \epsilon_{KL,IJ} - \epsilon_{iL,JK} - \epsilon_{JK,iL}, \quad (2.36)$$

die sogenannten Saint-Venantschen Integrabilitätsbedingungen. Ist nun ein Dehnungsfeld gegeben, dass diese Bedingungen in jedem Punkt erfüllt, so kann daraus sofort die Existenz eines Verschiebungsfeldes gefolgert werden und man spricht in diesem Fall von einer *kompatiblen* Dehnung.

Für den Fall endlicher Verformung lassen sich die Kompatibilitätsbedingungen mithilfe des Deformationsgradienten beschreiben. Da wiederum nach dem Satz von Schwarz die Ableitungsreihenfolge für hinreichend glatte Felder keine Rolle spielt, muss

$$F_{iK,L} = F_{iL,K} \quad (2.37)$$

gelten. Für $K = L$ ist diese Beziehung trivial, sodass sich Gl. (2.37) zu

$$\epsilon_{JKL}F_{iK,L} = 0 \Leftrightarrow \nabla \times \mathbf{F} = 0 \quad (2.38)$$

vereinfacht.

Sei nun der rechte Cauchy-Green-Tensor (CG-Tensor) (\mathbf{B}_{IJ}) gegeben. Es gilt herauszufinden, unter welchen notwendigen Bedingungen eine entsprechende Deformation existiert. Sei dazu

$$\Gamma_{JKI} := F_{pI}F_{pJ,K}. \quad (2.39)$$

das sogenannte Christoffelsymbol erster Art. Die Ableitung des Deformationstensors kann damit als

$$F_{pJ,K} = (F^{-1})_{Ip} \Gamma_{JKI} = F_{pA} (B^{-1})_{AB} \Gamma_{JKB} \quad (2.40)$$

2 Grundlagen

geschrieben werden, sodass wir durch Differentiation von Gl. (2.39)

$$\begin{aligned} F_{pI}F_{pJ,KL} &= \Gamma_{JKI,L} - F_{pI,L}F_{pJ,K} \\ &= \Gamma_{JKI,L} - F_{pA}(B^{-1})_{AB}\Gamma_{ILB}F_{pJ,K} \\ &= \Gamma_{JKI,L} - \Gamma_{JKA}(B^{-1})_{AB}\Gamma_{ILB} \end{aligned} \quad (2.41)$$

erhalten. Da wiederum die Ableitungsreihenfolge keine Rolle spielt, gilt

$$0 = \Gamma_{JKI,L} - \Gamma_{JLI,K} - (B^{-1})_{AB}(\Gamma_{JKA}\Gamma_{ILB} - \Gamma_{JLA}\Gamma_{IKB}). \quad (2.42)$$

Die Ableitungen der Christoffelsymbole wollen wir nun noch mithilfe der rechten CG-Tensoren schreiben. Dazu berechnen wir die Ableitung Letzterer und ersetzen die vorkommenden Produkte aus Deformationstensoren und ihren Ableitungen durch die entsprechenden Γ -Tensoren. Eine einfache Rechnung ergibt zunächst

$$B_{IJ,K} = \Gamma_{IKJ} + \Gamma_{JKI} \quad (2.43)$$

und eine anschließende Vertauschung der Indizes und Auflösung nach den Christoffelsymbolen

$$\Gamma_{IJK} = \frac{1}{2}(B_{JK,I} + B_{IK,J} - B_{IJ,K}). \quad (2.44)$$

Mit diesem Ausdruck können wir Gl. (2.42) schließlich in der Form

$$0 = B_{IK,JL} - B_{JK,IL} - B_{IL,JK} + B_{JL,IK} - 2(B^{-1})_{AB}(\Gamma_{JKA}\Gamma_{ILB} - \Gamma_{JLA}\Gamma_{IKB}) \quad (2.45)$$

schreiben oder sie unter Verwendung von $2\mathbf{E} = \mathbf{B} - \mathbf{I}$ zu einer Bedingung an die Green-Lagrange Dehnung umformulieren. Diese Bedingung wird von einer gegebenen, hinreichend glatten, regulären Deformation notwendigerweise erfüllt. Darüber hinaus ist Gl. (2.45) auch hinreichend für die Existenz eines glatten, regulären Deformationsfeldes zu einer gegebenen Dehnung \mathbf{E} [Blu89].

2.3. Voigtsche Notation

Aus der Symmetrie der Brugger-Konstanten in Gl. (2.12) folgt, dass höchstens 21 (triklines Medium) der 81 Komponenten des Tensors der elastischen Konstanten zweiter Ordnung unabhängig sein können. Außerdem lässt sich aufgrund der Symmetrieeigenschaften, der Steifigkeitstensor durch eine Matrix repräsentieren, die s.g. *Steifigkeitsmatrix* (C_{IJ}). Für diese sogenannte Voigtsche Notation gilt

$$\begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ & & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ & & & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ & & & & C_{55} & C_{56} \\ & & & & & C_{66} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{1111} & C_{1122} & C_{1133} & C_{1123} & C_{1113} & C_{1112} \\ & C_{2222} & C_{2233} & C_{2223} & C_{2213} & C_{2212} \\ & & C_{3333} & C_{3323} & C_{3313} & C_{3312} \\ & & & C_{2323} & C_{2313} & C_{2312} \\ & & & & C_{1313} & C_{1312} \\ & & & & & C_{1212} \end{pmatrix} \quad (2.46)$$

Die Steifigkeitsmatrix (C_{IJ}) kann also nicht mehr als Tensor aufgefasst werden, da sie sich in den Transformationseigenschaften unter realen, orthogonalen Koordinatentransformationen von Letzterem unterscheidet.

Definition 2.1 (Voigtsche Notation). Im Falle symmetrischer Tensoren kann die abgekürzte bzw. Voigtsche Schreibweise verwendet werden. Für den Spannungs- und den Dehnungstensor definiert man entsprechend

$$\begin{pmatrix} \sigma_1 & \sigma_6 & \sigma_5 \\ & \sigma_2 & \sigma_4 \\ & & \sigma_3 \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ & & \sigma_{33} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \epsilon_1 & \frac{1}{2}\epsilon_6 & \frac{1}{2}\epsilon_5 \\ & \epsilon_2 & \frac{1}{2}\epsilon_4 \\ & & \epsilon_3 \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} \epsilon_{11} & \epsilon_{12} & \epsilon_{13} \\ & \epsilon_{22} & \epsilon_{23} \\ & & \epsilon_{33} \end{pmatrix}$$

und

$$\Sigma := (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4, \sigma_5, \sigma_6), \quad E := (\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3, \epsilon_4, \epsilon_5, \epsilon_6)$$

▲

Das lineare Hookesche Gesetz lautet somit in Voigtscher Notation

$$\begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ & & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ & & & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ & & & & C_{55} & C_{56} \\ & & & & & C_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \\ \epsilon_3 \\ \epsilon_4 \\ \epsilon_5 \\ \epsilon_6 \end{pmatrix}. \quad (2.47)$$

Definition 2.2 (Verkürzer). Für die Verbindung zwischen verkürzter und voller Schreibweise soll im Folgenden ein Verkürzer $(v_{IJ\mathbf{A}})$ benutzt werden, der wie folgt definiert ist:

$$\begin{aligned} v_{IJ\mathbf{A}} &:= \delta_{IJ} (\mathbf{e}_I)_{\mathbf{A}} + (1 - \delta_{IJ}) (\mathbf{e}_{9-I-J})_{\mathbf{A}} \\ &= \begin{pmatrix} \delta_{1\mathbf{A}} & \delta_{6\mathbf{A}} & \delta_{5\mathbf{A}} \\ & \delta_{2\mathbf{A}} & \delta_{4\mathbf{A}} \\ & & \delta_{3\mathbf{A}} \end{pmatrix}_{IJ}, \end{aligned} \quad (2.48)$$

wobei in der ersten Zeile weder über I noch über J summiert wird. ▲

Mithilfe dieses Tensors lassen sich die Spannungs- und Dehnungstensoren leicht verkürzen und expandieren. Es gilt

$$\sigma_{ij} = v_{ijI} \sigma_I \quad \epsilon_{ij} = v_{ijI} D_{IK}^{-1} \epsilon_K \quad (2.49)$$

$$\sigma_I = D_{IK}^{-1} v_{ijK} \sigma_{ij} \quad \epsilon_I = v_{ijI} \epsilon_{ij} \quad (2.50)$$

wobei die Diagonalmatrix $D_{IJ} := v_{ijI} v_{ijJ}$ aus der doppelten Kontraktion zweier Verkürzer hervorgeht. Das Hookesche Gesetz in der obigen verkürzten Form zum Beispiel lässt sich mithilfe des Verkürzers leicht herleiten. Kontrahiert man auf beiden Seiten der ursprünglichen Tensorfassung mit dem $v_{ij\mathbf{A}}$

$$v_{ij\mathbf{A}} \sigma_{ij} = v_{ij\mathbf{A}} C_{ijkl} \epsilon_{kl}, \quad (2.51)$$

ersetzt die Dehnung entsprechend (2.49) und die Spannung gemäß (2.50), so folgt

$$C_{\mathbf{AB}} = D_{\mathbf{AC}}^{-1} v_{ijC} C_{ijkl} v_{klD} D_{\mathbf{DB}}^{-1} \quad (2.52)$$

für die verkürzte Form der Steifigkeitsmatrix.

Bemerkung 2.5 (Transformation in Voigt'scher Notation). Für eine gegebene lineare Transformation mit der Transformationsmatrix \mathbf{a}

$$(a_{ij}) = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}$$

lässt sich der transformierte Tensor $\tilde{\sigma}$ als

$$\tilde{\sigma}_{kl} = a_{ki} a_{lj} \sigma_{ij}.$$

2 Grundlagen

schreiben. Mithilfe des Verkürzers erhalten wir unter Verwendung der Regeln aus Gl. (2.49)

$$v_{ijI}\tilde{\sigma}_I = a_{ik}a_{jl}v_{klI}\sigma_K \quad (2.53)$$

und durch doppelte Kontraktion beider Seiten mit v_{ijJ} und Multiplikation mit D^{-1} schließlich

$$\tilde{\sigma}_I = T_{IJ}^\sigma \sigma_J \quad (2.54)$$

mit

$$T_{IJ}^\sigma = D_{IK}^{-1}v_{ijJ}a_{ik}a_{jl}v_{klI} \quad (2.55)$$

als verkürzte Transformationsmatrix. Analog erhalten wir für die Dehnungen

$$v_{ijI}D_{IK}^{-1}\tilde{\epsilon}_K = a_{ik}a_{jl}v_{klI}D_{IK}^{-1}\epsilon_K, \quad (2.56)$$

sodass sich diese in verkürzter Schreibweise mithilfe der Matrix

$$T_{IJ}^\epsilon = v_{ijI}a_{ik}a_{jl}v_{klI}D_{KJ}^{-1} = D_{IK}T_{KL}^\sigma D_{LJ}^{-1} \quad (2.57)$$

transformieren. Im Falle einer Drehung $\mathbf{a} \in \text{SO}(3)$ sieht man leicht, dass die inversen Transformationsmatrizen durch

$$\left(T^{\sigma^{-1}}\right)_{IJ} = D_{IK}^{-1}v_{ijK}a_{ki}a_{lj}v_{klI} = \left(T^{\epsilon T}\right)_{IJ} = T_{JI}^\epsilon \quad (2.58)$$

gegeben sind. Explizit ist

$$T^\sigma := \begin{pmatrix} a_{11}^2 & a_{12}^2 & a_{13}^2 & 2a_{12}a_{13} & 2a_{11}a_{13} & 2a_{11}a_{12} \\ a_{21}^2 & a_{22}^2 & a_{23}^2 & 2a_{22}a_{23} & 2a_{21}a_{23} & 2a_{21}a_{22} \\ a_{31}^2 & a_{32}^2 & a_{33}^2 & 2a_{32}a_{33} & 2a_{31}a_{33} & 2a_{31}a_{32} \\ a_{21}a_{31} & a_{22}a_{32} & a_{23}a_{33} & a_{23}a_{32} + a_{22}a_{33} & a_{23}a_{31} + a_{21}a_{33} & a_{22}a_{31} + a_{21}a_{32} \\ a_{11}a_{31} & a_{12}a_{32} & a_{13}a_{33} & a_{13}a_{32} + a_{12}a_{33} & a_{13}a_{31} + a_{11}a_{33} & a_{12}a_{31} + a_{11}a_{32} \\ a_{11}a_{21} & a_{12}a_{22} & a_{13}a_{23} & a_{13}a_{22} + a_{12}a_{23} & a_{13}a_{21} + a_{11}a_{23} & a_{12}a_{21} + a_{11}a_{22} \end{pmatrix} \quad (2.59)$$

die verkürzte Transformationsmatrix der Spannung und

$$T^\epsilon := \begin{pmatrix} a_{11}^2 & a_{12}^2 & a_{13}^2 & a_{12}a_{13} & a_{11}a_{13} & a_{11}a_{12} \\ a_{21}^2 & a_{22}^2 & a_{23}^2 & a_{22}a_{23} & a_{21}a_{23} & a_{21}a_{22} \\ a_{31}^2 & a_{32}^2 & a_{33}^2 & a_{32}a_{33} & a_{31}a_{33} & a_{31}a_{32} \\ 2a_{21}a_{31} & 2a_{22}a_{32} & 2a_{23}a_{33} & a_{23}a_{32} + a_{22}a_{33} & a_{23}a_{31} + a_{21}a_{33} & a_{22}a_{31} + a_{21}a_{32} \\ 2a_{11}a_{31} & 2a_{12}a_{32} & 2a_{13}a_{33} & a_{13}a_{32} + a_{12}a_{33} & a_{13}a_{31} + a_{11}a_{33} & a_{12}a_{31} + a_{11}a_{32} \\ 2a_{11}a_{21} & 2a_{12}a_{22} & 2a_{13}a_{23} & a_{13}a_{22} + a_{12}a_{23} & a_{13}a_{21} + a_{11}a_{23} & a_{12}a_{21} + a_{11}a_{22} \end{pmatrix}$$

ebendiese Matrix der Dehnung. Wie aus Gleichung (2.57) bereits ersichtlich, geht die Transformationsmatrix der Dehnung aus T^σ durch Halbierung der letzten drei Spalten und anschließende Verdoppelung der letzten drei Zeilen hervor. ▲

Die Transformationsmatrizen ermöglichen es nun, die Steifigkeitsmatrix (und ebenso die Nachgiebigkeitsmatrix) in einem transformierten Koordinatensystem zu berechnen. Sei dazu eine lineare Transformation mit der orthogonalen Matrix \mathbf{a} gegeben. Das Hookesche Gesetz im transformierten System lautet

$$\begin{aligned} \tilde{\Sigma}_I &= \tilde{C}_{IJ}\tilde{E}_J \\ T_{IK}^\sigma \Sigma_K &= \tilde{C}_{IJ}T_{JL}^\epsilon E_L \\ \Sigma_K &= (T^\sigma)_{KI}^{-1} \tilde{C}_{IJ}T_{JL}^\epsilon E_L. \end{aligned}$$

Mithilfe der obigen Bemerkung folgt nun

$$\tilde{C}_{IJ} = T_{IK}^{\sigma} T_{JL}^{\sigma} C_{KL}. \quad (2.60)$$

für die Steifigkeit im transformierten System.

Beispiel 2.1 (Drehung um z-Achse). Eine Drehung um 90° entgegen dem Uhrzeigersinn um die z-Achse, d.h.

$$\mathbf{a} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

lautet damit in Kurzschreibweise

$$\mathbf{T}^{\sigma} = \mathbf{T}^{\epsilon} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Fordert man, dass die Steifigkeitsmatrix (C_{IJ}) invariant gegenüber dieser Transformation sein soll, d.h.

$$\tilde{C}_{KL} = T_{KI}^{\sigma} C_{IJ} \tilde{T}_{LJ}^{\sigma},$$

so vereinfacht sie sich zu

$$(C_{IJ}^{\circ}) = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & C_{16} \\ & C_{11} & C_{13} & 0 & 0 & -C_{66} \\ & & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ & & & C_{44} & 0 & 0 \\ & & & & C_{44} & 0 \\ & & & & & C_{66} \end{pmatrix}$$

▲

Bemerkung 2.6 (monokline Symmetrie). Für ein monoklines Materialsystem, dessen Symmetrieebene mit der xy-Ebene zusammenfällt, d.h. für

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

erhält man die Steifigkeitsmatrix

$$(C_{IJ}^{\text{mon}}) = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & C_{16} \\ & C_{22} & C_{23} & 0 & 0 & C_{26} \\ & & C_{33} & 0 & 0 & C_{36} \\ & & & C_{44} & C_{45} & 0 \\ & & & & C_{44} & 0 \\ & & & & & C_{66} \end{pmatrix} \quad (2.61)$$

▲

2 Grundlagen

Tabelle 2.2.: Konstanten dritter Ordnung für ausgewählte Symmetrien. Die Symmetrieebene im monoklinen Fall ist die xy -Ebene.

Symmetrie	Anzahl	TOEC
monoklin	32	C_{111} C_{112} C_{113} C_{114} C_{122} C_{123} C_{124} C_{133} C_{134} C_{144}
		C_{155} C_{156} C_{166} C_{222} C_{223} C_{224} C_{233} C_{234} C_{244} C_{255}
		C_{256} C_{266} C_{333} C_{334} C_{344} C_{355} C_{356} C_{366} C_{444} C_{455}
		C_{456} C_{466}
orthotrop	20	C_{111} C_{112} C_{113} C_{122} C_{123} C_{133} C_{144} C_{155} C_{166} C_{222} C_{223} C_{233} C_{244} C_{255} C_{266} C_{333} C_{344} C_{355} C_{366} C_{456}
kubisch	6	C_{111} C_{112} C_{123} C_{144} C_{155} C_{456}
isotrop	3	C_{111} C_{112} C_{123}

Bemerkung 2.7 (kubische und isotrope Materialien). Für kubische Materialien sind nur noch drei der 21 Komponenten des Steifigkeitstensors unabhängig, sodass man

$$(C_{IJ}^{\text{cub}}) = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ & & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ & & & C_{44} & 0 & 0 \\ & & & & C_{44} & 0 \\ & & & & & C_{44} \end{pmatrix} \quad (2.62)$$

erhält. Im isotropen Fall reduziert sich die Anzahl unabhängiger SOEC auf zwei, d.h.

$$(C_{IJ}^{\text{iso}}) = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ & & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ & & & C_{44}^{\text{iso}} & 0 & 0 \\ & & & & C_{44}^{\text{iso}} & 0 \\ & & & & & C_{44}^{\text{iso}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda + 2\mu & \lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ & \lambda + 2\mu & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ & & \lambda + 2\mu & 0 & 0 & 0 \\ & & & \mu & 0 & 0 \\ & & & & \mu & 0 \\ & & & & & \mu \end{pmatrix}, \quad (2.63)$$

mit $C_{44}^{\text{iso}} := \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12})$. ▲

In analoger Weise erhält man für die Konstanten dritter Ordnung

$$\tilde{C}_{IJK} = T_{IL}^{\sigma} T_{JM}^{\sigma} T_{KN}^{\sigma} C_{LMN},$$

womit sich zeigen lässt, dass die Anzahl unabhängiger TOEC zwischen drei im isotropen Fall und 56 im triklinen Fall variiert. In Tabelle 2.2 sind die konkreten Konstanten sowie deren Gesamtanzahl für einige Symmetriegruppen zusammengefasst.

Bemerkung 2.8 (SOEC und TOEC für isotrope Medien). In isotropen Materialien gibt es lediglich zwei unabhängige Konstanten zweiter und drei unabhängige Konstanten dritter Ordnung, die sich auf verschiedene Weise definieren lassen. Die Zusammenhänge zwischen den einzelnen Tensoren vierter

bzw. sechster Stufe und den zwei SOEC bzw. drei TOEC lauten dann

$$C_{ijkl} = \lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + \mu (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) \quad (2.64)$$

$$\begin{aligned} C_{ijklmn} = & \nu_1 \delta_{ij} \delta_{kl} \delta_{mn} \\ & + \nu_2 [\delta_{ij} (\delta_{kn} \delta_{lm} + \delta_{km} \delta_{ln}) + \delta_{kl} (\delta_{in} \delta_{jm} + \delta_{im} \delta_{jn}) + \delta_{mn} (\delta_{il} \delta_{jk} + \delta_{ik} \delta_{jl})] \\ & + \nu_3 [\delta_{km} (\delta_{in} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jn}) + \delta_{kn} (\delta_{im} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jm}) \\ & + \delta_{lm} (\delta_{in} \delta_{jk} + \delta_{ik} \delta_{jn}) + \delta_{ln} (\delta_{im} \delta_{jk} + \delta_{ik} \delta_{jm})], \end{aligned} \quad (2.65)$$

wobei λ und μ als SOEC und ν_1 , ν_2 und ν_3 als TOEC gewählt wurden. Die Beziehungen zu alternativen Definitionen (z.B. Murnaghan-Konstanten) sind dem Anhang zu entnehmen (Tab. A.1). \blacktriangle

2.4. Die Christoffelgleichungen

Einsetzen der konstitutiven Gleichung (2.18) für den ersten Piola- Kirchhoffschen Spannungstensor in (2.28) ergibt

$$\rho \ddot{u}_i = P_{iJJ} = (S_{iJKL} + S_{iJKLMN} u_{m,N}) u_{k,JL} + \left(S_{i3kL,3} + \frac{1}{2} S_{i3kLmN,3} u_{m,N} \right) u_{k,L}, \quad (2.66)$$

wobei der zweite Summand lediglich die in dieser Arbeit relevanten Änderungen der SOEC in Tiefenrichtung einbezieht. Im hiesigen Kapitel sollen zur Vereinfachung jedoch nur homogene Medien betrachtet werden, sodass dieser Summand entfällt.

Für kleine Dehnungen können alle Terme höherer Ordnung bzgl. der Verschiebungsgradienten $u_{k,L}$ in Gl. (2.66) vernachlässigt werden und es ist in diesem Fall auch nicht nötig, zwischen Momentan- und Referenzkonfiguration zu unterscheiden. Wir erhalten eine lineare Gleichung, deren Lösung wie gewöhnlich als

$$\mathbf{u}(\mathbf{q}) = \mathbf{A} \mathbf{b}(\mathbf{q}) \exp [i (\mathbf{q} \cdot \mathbf{X} - \omega(\mathbf{q})t)], \quad (2.67)$$

mit Wellenvektor \mathbf{q} und Frequenz $\omega(\mathbf{q})$ angesetzt werden kann. Gelegentlich wird im Folgenden auch die Abkürzung $U_i := A b_i$ verwendet. Eingesetzt in Gleichung (2.66) ergibt das mit

$$\rho \omega^2 u_i = \Gamma_{ik} u_k, \quad (2.68)$$

die wohlbekannten *Christoffelgleichungen*. Die Matrix $\Gamma_{ik} := C_{ijkl} q_j q_l$ wird dabei als *Christoffelmatrix* bezeichnet und bestimmt über ihre Eigenwerte und Eigenvektoren, die dem gewählten Wellenvektor entsprechenden Phasengeschwindigkeiten und Polarisationen. Zusätzlich wurde angenommen, dass der Körper keinen Vorspannungen unterliegt und die Huang-Koeffizienten S_{ijkl} zweiter Ordnung gleich den symmetrischen Brugger-Koeffizienten C_{ijkl} sind. Sofern nicht explizit anders angegeben, werden wir diese Voraussetzung im Folgenden beibehalten.

Die Steifigkeitsmatrix wird aufgrund ihrer Symmetrien in der Literatur gewöhnlich in verkürzter Schreibweise angegeben. Die Expansion derselben zu einem Tensor vierter Stufe erweist sich ohne Hilfsmittel jedoch als recht umständlich. Es ist also sinnvoll zu wissen, dass man mit

$$\Gamma_{ik} = C_{MNVijM} v_{kIN} q_j q_l = C_{MNVijM} q_M i q_N k, \quad (2.69)$$

die Christoffelmatrix direkt aus der Voigtschen Notation der Steifigkeit berechnen kann. Hier wurde der gegebene Vektor \mathbf{q} mithilfe des Verkürzers zu einer Matrix

$$q_{Mi} := \begin{pmatrix} q_1 & 0 & 0 & 0 & q_3 & q_2 \\ 0 & q_2 & 0 & q_3 & 0 & q_1 \\ 0 & 0 & q_3 & q_2 & q_1 & 0 \end{pmatrix}_{iM} \quad (2.70)$$

expandiert. Wohlgermerkt handelt es sich bei der umgekehrten Reihenfolge der Subskripte auf beiden Seiten um keinen Schreibfehler. Nichttriviale Lösungen der Christoffelgleichung liegen im Nullraum der Matrix $\Gamma - \rho c^2 \mathbf{I}$, sind also für jede vorgegebene Ausbreitungsrichtung \mathbf{q} aus den Nullstellen der Determinante zu berechnen. Man bekommt eine kubische Gleichung in ρc^2 , die im Allgemeinen numerisch zu lösen ist.

2.5. Volumenwellen

Die einfachsten Lösungen des linearen Teils der Gleichung (2.66) bilden ebene, monochromatische Wellen in homogenen Medien mit realem Wellenvektor $\mathbf{q} = k\mathbf{n}$ und dem Polarisationsvektor \mathbf{b} :

$$u_i = Ab_i \exp [ik(n_s x_s - ct)]. \quad (2.71)$$

In einem homogenen, isotropen Medium gibt es keine ausgezeichneten Richtungen und wir können ohne Einschränkung eine sich in x -Richtung ausbreitende Welle betrachten. Die Christoffelmatrix lautet in diesem Fall

$$(\Gamma_{ik}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} (C_{AB}) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{16} & C_{15} \\ C_{61} & C_{66} & C_{65} \\ C_{51} & C_{56} & C_{55} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda + 2\mu & 0 & 0 \\ 0 & \mu & 0 \\ 0 & 0 & \mu \end{pmatrix}, \quad (2.72)$$

hat also lediglich zwei unterschiedliche Eigenwerte. Der Eigenvektor zum ersten Eigenwert ist parallel zur Wellenausbreitungsrichtung und beschreibt somit eine Longitudinalwelle (Abb. 2.2, links), die sich mit der Phasengeschwindigkeit

$$c_L = \sqrt{\frac{\lambda + 2\mu}{\rho}} \quad (2.73)$$

ausbreitet. Die zweite Lösung ergibt eine Transversalwelle, also eine senkrecht zur Ausbreitungsrichtung polarisierte Welle, deren Phasengeschwindigkeit sich damit zu

$$c_T = \sqrt{\frac{\mu}{\rho}} \quad (2.74)$$

ergibt. Eine Unterscheidung der Transversalwellen in horizontal (SH) und vertikal (SV) polarisierte Wellen (Abb. 2.2, Mitte und rechts) ist hier also nicht möglich, da, wie eingangs bereits erwähnt, es in einem unendlich ausgedehnten Medium schlicht keine Auszeichnung der senkrecht zum Wellenvektor stehenden Richtungen gibt. Die schiefe Existenz ausgewiesener Richtungen, wie etwa in einem Halbraum, reicht für die Existenz von SH-Wellen jedoch auch nicht aus. Es müssen darüber hinaus auch gewisse Randbedingungen erfüllt werden, wie es z.B. für Platten der Fall ist.

Mithilfe der Umrechnungstabelle A.1 lässt sich zeigen, dass das Verhältnis von Longitudinal- zu Transversalwellengeschwindigkeit lediglich von der Poissonzahl ν abhängt. Es gilt

$$\left(\frac{c_L}{c_T}\right)^2 = \frac{\lambda + 2\mu}{\mu} = \frac{2 - 2\nu}{1 - 2\nu}. \quad (2.75)$$

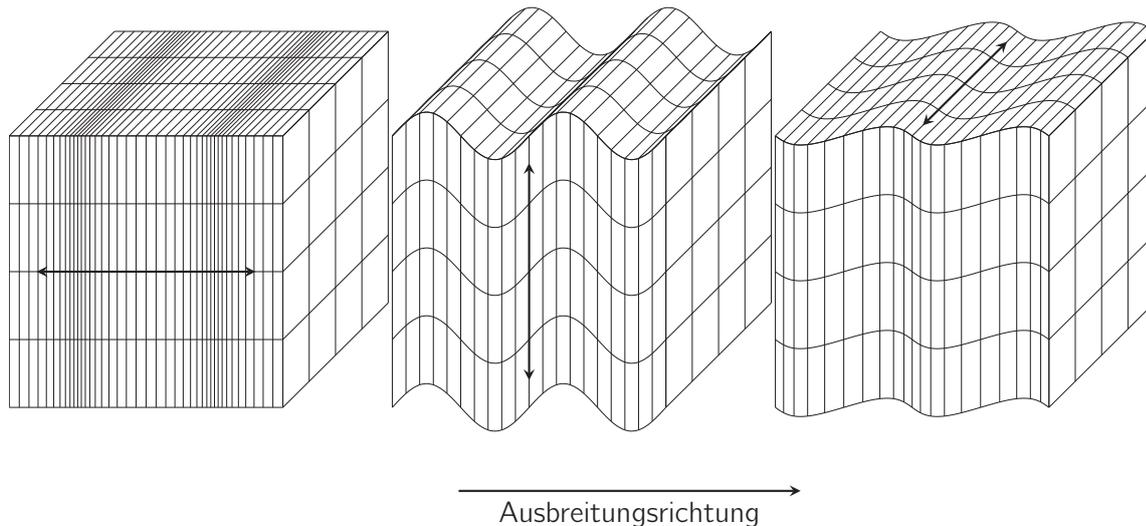


Abbildung 2.2.: Verschiebungsfeld für Longitudinal- (links) und Transversalwellen, wobei letztere noch in SV (Mitte) und SH (rechts) unterteilt werden können, sofern es eine Referenzebene gibt, etwa die Deckfläche der gezeigten Würfel im Materialsystem.

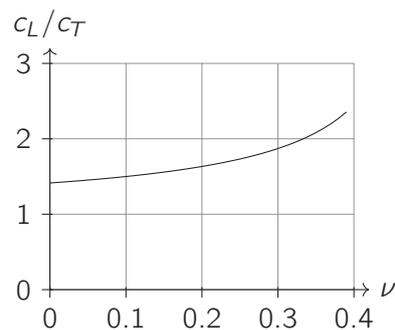


Abbildung 2.3.: Verhältnis von Longitudinal- zu Transversalwellengeschwindigkeit von Volumenwellen in Abhängigkeit von der Poissonzahl im isotropen Medium.

2.6. Oberflächenwellen

Mit dem allgemeinen Ansatz für die Lösung der Bewegungsgleichung können neben Volumenwellen auch Oberflächenwellen (surface acoustic wave, SAW) beschrieben werden. Für eine sich in X_1 -Richtung ausbreitende und in X_3 -Richtung abklingende Welle kann man etwa

$$\mathbf{u}(k) = A \exp[i(kX_1 - \omega t)] \mathbf{b} \exp[\alpha k X_3] = A \mathbf{b} \exp[i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{X} - \omega t)] \quad (2.76)$$

mit dem Wellenvektor $\mathbf{q} := k(1, 0, -i\alpha)^T$ als Lösung der Bewegungsgleichung ansetzen. Wir betrachten also eine sich in X_1 -Richtung ausbreitende und in X_3 -Richtung abklingende, harmonische Welle. Aufgrund der Linearität ist es ausreichend, die Lösung für eine Frequenz zu betrachten. Den Ansatz (2.76) setzen wir nun in die Christoffelgleichung (2.68) ein und bekommen so komplexwertige Einträge in der Christoffelmatrix.

Isotrope Medien

In isotropen Medien erhalten wir für den speziell gewählten Vektor \mathbf{q} die einfache Form

$$\rho\omega^2 \mathbf{u} = k^2 \begin{pmatrix} \lambda + 2\mu - \alpha^2\mu & 0 & -i\alpha(\lambda + \mu) \\ & (1 - \alpha^2)\mu & 0 \\ & & \mu - \alpha^2(\lambda + 2\mu) \end{pmatrix} \mathbf{u} \quad (2.77)$$

mit den bekannten Lamé-Konstanten λ und μ . Die Forderung nach einer nichttrivialen Lösung für das Verschiebungsfeld liefert wiederum die Eigenwertgleichung der Christoffelmatrix (Dispersionsrelation)

$$|\Gamma_{ik} - \rho\omega^2\delta_{ik}| = 0 \quad (2.78)$$

und damit die Abklingkoeffizienten

$$\alpha_L := \sqrt{1 - \frac{\rho c^2}{\lambda + 2\mu}} = \sqrt{1 - \frac{c^2}{c_L^2}} \quad \text{und} \quad \alpha_T := \sqrt{1 - \frac{\rho c^2}{\mu}} = \sqrt{1 - \frac{c^2}{c_T^2}}. \quad (2.79)$$

Da die Determinante verschwindet, ist \mathbf{u} nur bis auf die multiplikative Konstante A eindeutig bestimmt. Wir setzen $\mathbf{b} = (1, 0, p)^T$ an und erhalten

$$p_r = i \frac{\rho c^2 - \lambda - (2 - \alpha_r^2)\mu}{(\lambda + \mu)\alpha_r}, \quad (2.80)$$

d.h.

$$ip_L = \frac{1}{(\lambda + \mu)\alpha_L} \left[(\lambda + 2\mu) \left(1 - \frac{\rho c^2}{\lambda + 2\mu} \right) - \mu\alpha_L^2 \right] = \alpha_L \quad (2.81)$$

und

$$ip_T = \frac{1}{(\lambda + \mu)\alpha_S} \left[(\lambda + \mu) + \mu \left(1 - \frac{\rho c^2}{\mu} \right) - \mu\alpha_S^2 \right] = \alpha_T^{-1} \quad (2.82)$$

Das Verschiebungsfeld aus 2.67 können wir nun als

$$u_i(\mathbf{X}, k) = A \exp [i(kX_1 - \omega t)] w_i(X_3, k) \quad (2.83)$$

$$w_i(X_3, k) := b_{ir} \exp(\alpha_r k X_3) = \zeta_r \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ p_r \end{pmatrix}_i \exp(\alpha_r k X_3) \quad (2.84)$$

schreiben, wobei gemäß Summenkonvention über $r (= L, T)$ summiert wird. Das Verhältnis zwischen den Konstanten $\zeta_r(k)$ erhält man schließlich aus den gewählten Randbedingungen. Für eine freie Oberfläche setzt man dazu (2.83) in (2.30) ein und erhält nach kurzer Rechnung³

$$\begin{pmatrix} 2\alpha_L\alpha_T & 1 + \alpha_T^2 \\ 1 + \alpha_T^2 & 2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \zeta_L \\ \zeta_T \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (2.85)$$

Für nichttriviale Lösungen des homogenen Gleichungssystems muss die Determinante der Koeffizientenmatrix verschwinden und man bekommt die bekannte Rayleigh-Gleichung

$$0 = (1 + \alpha_T^2)^2 - 4\alpha_L\alpha_T. \quad (2.86)$$

³man beachte, dass $(\lambda + 2\mu)\alpha_L^2 = (\lambda + \mu) + \mu\alpha_T^2$ bzw. $(\lambda + 2\mu)\alpha_L^2 - \lambda = \mu(1 + \alpha_T^2)$

Sie beschreibt die Dispersionsrelation für Rayleighwellen in homogenen, isotropen Medien. Diese sind nicht dispersiv, d.h. die Phasengeschwindigkeit hängt nicht von der gewählten Frequenz ab. Durch Resubstitution der α_i lässt sich die Dispersionsrelation in die äquivalente, ebenfalls gut bekannte Form

$$\eta^6 - 8\eta^4 + 8(3 - 2\xi^2)\eta^2 - 16(1 - \xi^2) = 0, \quad (2.87)$$

$$\eta := c/c_T, \quad \xi := c_T/c_L$$

bringen. Ausgehend von der Näherung [Ach73]

$$c \approx \frac{0,862 + 1,14\nu}{1 + \nu} c_T \quad (2.88)$$

kann man die Phasengeschwindigkeit schnell iterativ, numerisch berechnen. Die spezielle bikubische Form der Gleichung erlaubt sogar eine analytische Lösung [Mal00].

Mithilfe von Gl. (2.85) und der Rayleigh-Gleichung ergibt sich die gesuchte Beziehung zwischen den Vektoren aus Gl. (2.83) zu $\zeta_T/\zeta_L = -\sqrt{\alpha_L\alpha_T}$. Das Verschiebungsfeld für Rayleighwellen in homogenen, isotropen Medien vereinfacht sich somit zu

$$u_i = Ae^{i(kX_1 - \omega t)} \begin{pmatrix} 1 & -\sqrt{\alpha_L\alpha_T} \\ 0 & 0 \\ -i\alpha_L & i\sqrt{\alpha_L/\alpha_T} \end{pmatrix}_{ir} \begin{pmatrix} e^{\alpha_L kX_3} \\ e^{\alpha_T kX_3} \end{pmatrix}_r \quad (2.89)$$

$$= e^{i(kX_1 - \omega t)} \begin{pmatrix} A_L & \alpha_T A_T \\ 0 & 0 \\ (-i\alpha_L)A_L & (-i)A_T \end{pmatrix}_{ir} \begin{pmatrix} e^{\alpha_L kX_3} \\ e^{\alpha_T kX_3} \end{pmatrix}_r, \quad (2.90)$$

wobei die neuen Amplituden $A_L := A$ und $A_T = -\sqrt{\alpha_L/\alpha_T}A$ eingeführt wurden. In Abb. 2.4 ist das momentane Verschiebungsfeld einer von links nach rechts laufenden Rayleighwelle beispielhaft abgebildet.

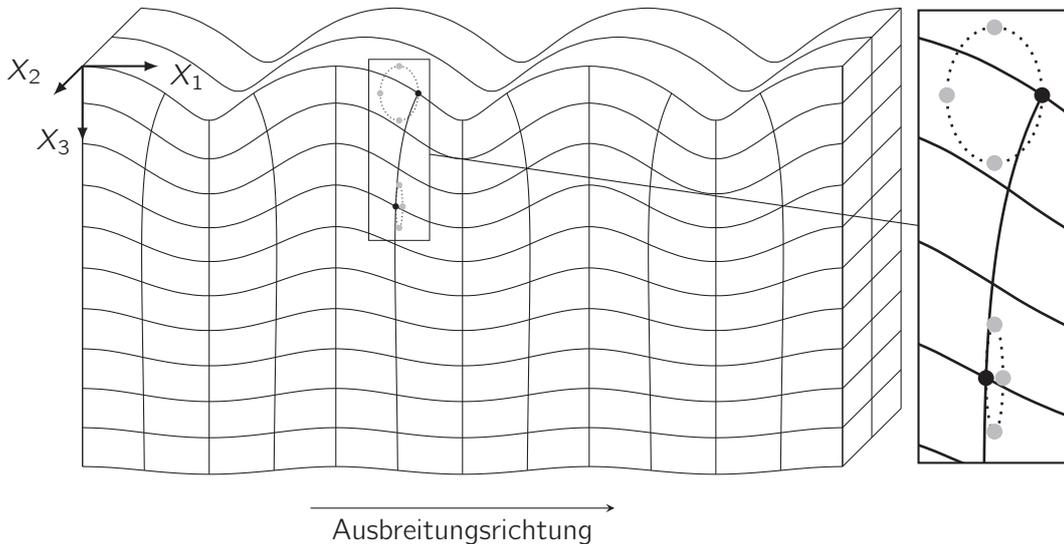


Abbildung 2.4.: Verschiebungsfeld einer von links nach rechts laufenden Rayleighwelle (links) mit tiefenabhängigen Schwingungsellipsen und jeweiligem Drehsinn.

Zunächst stellt man fest, dass die Amplitude der Verschiebungen gemäß den exponentiell abfallenden Termen in Gl. (2.89) zu größeren Tiefen hin abnimmt. Die longitudinale Komponente hat darüber hinaus eine Nullstelle bei $kX_3 = -(\ln \alpha_L - \ln \alpha_T)/2(\alpha_L - \alpha_T)$. Dieser Ausdruck ist für positive

2 Grundlagen

Wellenzahlen k und für Poissonzahlen $0 \leq \nu \leq 0,5$ stets negativ (vgl. Abb. 2.3). Die Transversalkomponente hat dagegen keine Nullstelle im Bereich $-\infty < X_3 \leq 0$. Da die Auslenkungen an einem festen Ort X_1 in Abhängigkeit von der Zeit Ellipsen beschreiben, deren Halbachsen durch die w_i vorgegeben werden, führt die Nullstelle in der longitudinalen Komponente zu einer Umkehrung des Drehsinns der Schwingungsellipsen. Wie im vergrößerten Ausschnitt in Abb. 2.4 gut zu erkennen ist, wechselt dieser von retrograd an der Oberfläche zu prograd unterhalb der genannten Nullstelle.

Kubische Medien

Im Gegensatz zu isotropen Körpern gibt es in kubischen Medien ausgewiesene Richtungen, die durch die Ausrichtung der kubischen Achsen vorgegeben werden. Breitet sich ein Welle entlang einer dieser Achsen, etwa der X_1 -Achse, aus, so hat die Steifigkeitsmatrix die in Gl. (2.62) gegebene einfache Form. Die Christoffelmatrix lautet in diesem Fall

$$k^{-2}\Gamma_{ik} = \begin{pmatrix} C_{11} - \alpha^2 C_{44} & 0 & -i\alpha(C_{12} + C_{44}) \\ 0 & -(\alpha^2 - 1)C_{44} & 0 \\ -i\alpha(C_{12} + C_{44}) & 0 & C_{44} - \alpha^2 C_{11} \end{pmatrix}, \quad (2.91)$$

aus deren Eigenwerten sich wiederum die Wurzeln für α berechnen lassen. Da die betrachtete Rayleighwelle keine Komponenten in X_2 -Richtung besitzt, reduziert sich die charakteristische Gleichung für (Γ_{ik}) und die relevanten Abklingkoeffizienten lauten

$$\begin{aligned} \alpha_{1,2}^2 &= \frac{1}{A_3} \left(A_1 \mp \sqrt{2A_2A_3 + A_1^2} \right) \\ A_1 &= C_{11}^2 - C_{12}(C_{12} + 2C_{44}) - \rho c^2(C_{11} + C_{44}) \\ A_2 &= \rho c^2(C_{11} + C_{44} - \rho c^2) - C_{11}C_{44} \\ A_3 &= 2C_{11}C_{44}. \end{aligned}$$

Die X_3 -Komponente der Teilverschiebungsvektoren aus Gl. (2.80) berechnet sich in dieser Geometrie zu

$$p_r = i \frac{\rho c^2 - C_{11} + \alpha_r^2 C_{44}}{\alpha_r (C_{12} + C_{44})}. \quad (2.92)$$

Aus den Randbedingungen bekommen wir für das Verhältnis der beiden Verschiebungsvektoren

$$\zeta_2/\zeta_1 = - \frac{C_{12}(C_{12} + C_{44}) + C_{11}(\rho c^2 - C_{11} + \alpha_1^2 C_{44})}{C_{12}(C_{12} + C_{44}) + C_{11}(\rho c^2 - C_{11} + \alpha_2^2 C_{44})}, \quad (2.93)$$

sodass wir schließlich

$$u_i = A e^{i(kX_1 - \omega t)} \begin{pmatrix} 1 & \zeta_2/\zeta_1 \\ 0 & 0 \\ p_1 & \zeta_2/\zeta_1 p_2 \end{pmatrix}_{ir} \begin{pmatrix} e^{\alpha_1 k X_3} \\ e^{\alpha_2 k X_3} \end{pmatrix}_r \quad (2.94)$$

schreiben können. Zur Berechnung der Verschiebungen aus den gegebenen Materialkonstanten muss jedoch zunächst die Phasengeschwindigkeit der Rayleighwelle aus der Dispersionsrelation (vgl. Gl. (2.78)) bestimmt werden.

2.7. Gruppengeschwindigkeit

In dispersiven Medien ist die Phasengeschwindigkeit einer monochromatischen Welle abhängig von ihrer Frequenz. Der Geschwindigkeitsvektor eines Wellenpakets, das sich aus mehreren monochromatischen Wellen unterschiedlicher Frequenz zusammensetzt, weicht daher in Betrag und Richtung von den Phasengeschwindigkeiten und Wellenvektoren der Einzelkomponenten ab. Dieser Vektor wird als Gruppengeschwindigkeit bezeichnet und ergibt sich als Gradient der Frequenz bezüglich der Phasengeschwindigkeit. Da wir hier Oberflächenwellen betrachten wollen, interessiert uns lediglich die X_1 -Komponente $c_G := \partial\omega/\partial k$, die wir aus der Dispersionsrelation bekommen. Sofern Letztere nur implizit gegeben ist, erhält man die gesuchte Ableitung wie gewöhnlich mithilfe des Satzes über implizite Funktionen.

Wir wollen nun einen Ausdruck für die Gruppengeschwindigkeit mithilfe des Verschiebungsfeldes einer linearen Welle ausdrücken. Wir betrachten dazu zwei Lösungen der linearen Bewegungsgleichung vom gleichen Modus, wobei sich die Wellenzahlen der beiden Lösungen geringfügig voneinander unterscheiden. Es seien also ohne Einschränkung

$$u_i^{(1)} := w_i(X_3, k) \exp[i(kX_1 - \omega t)] \quad (2.95)$$

und

$$u_i^{(1')} := w_i(X_3, k + \delta k) \exp[i((k + \delta k)X_1 - (\omega + \delta\omega)t)] \quad (2.96)$$

zwei sich entlang der freien Oberfläche $X_3 = 0$ in X_1 -Richtung ausbreitende Rayleighwellen. Wir setzen nun $u_i^{(1)}$ in die Bewegungsgleichung ein, multiplizieren mit $u_i^{(1')*}$ und subtrahieren davon das Produkt aus $u_i^{(1)}$ mit der konjugiert komplexen Bewegungsgleichung von $u_i^{(1')}$. Integration über die gesamte Tiefe ergibt zunächst für die linke Seite

$$\int_{-\infty}^0 \rho \dot{u}_i^{(1')} u_i^{(1)*} - u_i^{(1)} [\rho \dot{u}_i^{(1')}]^* dX_3 = 2\omega\delta\omega \int_{-\infty}^0 \rho w_i(X_3, k) w_i(X_3, k)^* dX_3 + \mathcal{O}(\delta\omega^2). \quad (2.97)$$

Auf der rechten Seite der Bewegungsgleichung erhalten wir mithilfe partieller Integration und der linearen Randbedingung

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^0 u_i^{(1')*} \mathcal{D}_J(k) S_{iJkL} \mathcal{D}_L(k) u_k^{(1)} - u_i^{(1)} [\mathcal{D}_J(k + \delta k) S_{iJkL} \mathcal{D}_L(k + \delta k) u_i^{(1')}]^* dX_3 \\ &= -i\delta k \int_{-\infty}^0 u_i^{(1)} S_{i1kL} [\mathcal{D}_L(k) u_k^{(1)}]^* - [\mathcal{D}_J(k) u_i^{(1)}] S_{iJk1} u_k^{(1)*} dX_3 + \mathcal{O}(\delta k^2), \end{aligned} \quad (2.98)$$

wobei alle Terme höherer Ordnung vernachlässigt wurden und zusätzlich der Ableitungsoperator

$$\mathcal{D}_L(k) := \delta_{L1} ik + \delta_{L3} \frac{\partial}{\partial X_3}, \quad (2.99)$$

zur Vereinfachung der partiellen Ableitungen eingeführt wurde. Das Argument k soll hier und im Folgenden weggelassen werden, wenn klar ist, welche Wellenzahl gemeint ist. Außerdem wurden die Symmetrieeigenschaften des Tensors \mathbf{S} unter Annahme eines verlustfreien Mediums ($\rho^* = \rho$, $\mathbf{S}^* = \mathbf{S}$) benutzt. Die Gleichung lässt sich unter diesen Voraussetzungen weiter vereinfachen, sodass wir für die Gruppengeschwindigkeit schließlich⁴

$$c_G = \frac{\delta\omega}{\delta k} = [N(k)]^{-1} 2\Im \int_{-\infty}^0 w_i(X_3, k)^* S_{i1kL} [\mathcal{D}_L w_k(X_3, k)] dX_3 \quad (2.100)$$

⁴Für die richtigen Vorzeichen beachte man, dass $i(c - c^*) = 2\Im(c^*)$ für alle $c \in \mathbb{C}$ gilt.

2 Grundlagen

mit

$$N(k) := 2\omega(k) \int_{-\infty}^0 \rho w_i(X_3, k)^* w_i(X_3, k) dX_3 \quad (2.101)$$

erhalten. Homogene Medien implizieren keinerlei Längenskala, sodass die Integration äquivalent über kX_3 ausgeführt werden kann. Der Nenner N ist in diesem Fall unabhängig von der Wellenzahl. Ist das Medium zusätzlich isotrop, so muss die Gruppengeschwindigkeit aufgrund des nichtdispersiven Charakters von Rayleighwellen gleich der Phasengeschwindigkeit sein.

Sind die linearen Materialeigenschaften tiefenabhängig, so behält Gl. (2.100) weiterhin ihre Gültigkeit. Das ist wichtig, da wir in späteren Rechnungen die Dispersion der Oberflächenwellen nicht von vornherein ausschließen möchten.

3. Bestimmung der Konstanten dritter Ordnung

In hyperelastischen Materialien wird die Stärke der Gitternichtlinearität durch die entsprechenden Konstanten dritter Ordnung bestimmt [Mur51]. Diese können aus der Messung der akustoelastischen Konstanten berechnet werden [TB61, TB64, NYS73, EB76, BPZ⁺83, CY87], die die relative Änderung der Phasengeschwindigkeit sich im Medium ausbreitender, akustischer Wellen in Abhängigkeit einer eingebrachten Dehnung des Körpers angeben.

Sofern Vordehnung und überlagerte Dehnung im elastischen Bereich des Körpers bleiben, kann die Vorspannung mithilfe der Verallgemeinerung des Hookeschen Gesetzes für hyperelastische Materialien bzgl. der Dehnungen ausgedrückt werden. Die Formulierungen der folgenden Gleichungen im natürlichen Zustand sowie im Initialzustand sind dann äquivalent und müssen die selben Materialparameter liefern.

3.1. Volumenwellen im vorgespannten Festkörper

Die Bestimmung der Konstanten dritter Ordnung erfolgt hier über die Messung der Phasengeschwindigkeit von Volumenwellen in einem vorgespannten Körper. So wird der Körper letztendlich mit zwei unterschiedlichen Dehnungen beaufschlagt (siehe Abb. 3.1), wobei die eine klein gegenüber der anderen ist. Ungeachtet dessen sollen beide Spannungen und deren Summe den elastischen Bereich des Körpers nicht verlassen.

Die Annahme, dass $\mathbf{P} \ll \mathbf{P}^{(i)}$ und damit auch $\nabla \mathbf{u} \ll \nabla \mathbf{u}^{(i)}$, erlaubt es, die Gesamtspannung $\mathbf{P}^{(f)}$ um die Vorspannung $\mathbf{P}^{(i)}$ herum zu entwickeln (vgl. [TB64, CY87])

$$P_{i\beta}^{(f)} = \delta_{i\beta} P_{i\beta}^{(i)} + \left. \frac{\partial P_{i\beta}^{(f)}}{\partial X_{i,\gamma}} \right|_{\mathbf{x}=\mathbf{X}} u_{i,\gamma} + \mathcal{O}(u_{i,\gamma}^2), \quad (3.1)$$

wobei sich der Initialzustand im Gleichgewicht befindet und so $P_{i\beta,\beta}^{(i)} = 0$ und der Verschiebungsgra-

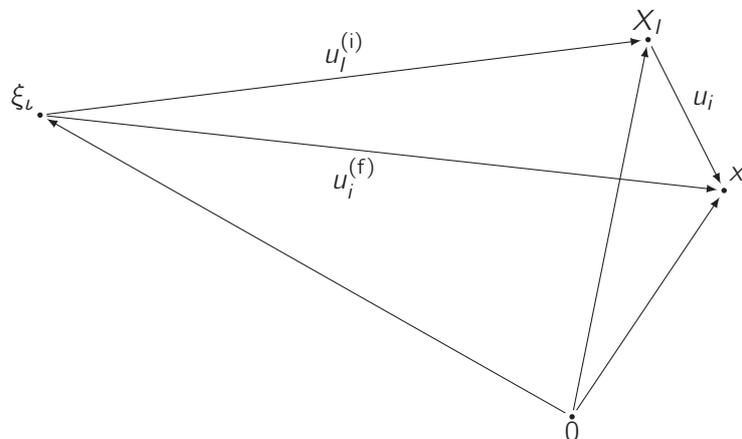


Abbildung 3.1.: Natürlicher (ξ_l), vorgespannter (X_I) und momentaner (x_i) Zustand.

3 Bestimmung der Konstanten dritter Ordnung

dient $u_{i,\gamma}$ als

$$u_{i,\gamma} = u_{i,\gamma}^{(f)} - \delta_{il} u_{l,\gamma}^{(i)} \quad (3.2)$$

zu verstehen ist. Zur Berechnung der Ableitung benutzen wir die Kettenregel und die Beziehung zwischen dem PK1 und PK2 aus Gl. (2.21), sodass

$$P_{i\beta}^{(f)} = F_{i\alpha} T_{\alpha\beta}^{(f)} = F_{i\alpha} \left(C_{\alpha\beta\gamma\delta} E_{\gamma\delta}^{(f)} + \frac{1}{2} C_{\alpha\beta\gamma\delta\epsilon\zeta} E_{\gamma\delta}^{(f)} E_{\epsilon\zeta}^{(f)} \right) \quad (3.3)$$

gilt, wobei

$$E_{\alpha\beta}^{(f)} := \frac{1}{2} \left(\delta_{\alpha i} u_{i,\beta}^{(f)} + \delta_{\beta i} u_{i,\alpha}^{(f)} + u_{i,\alpha}^{(f)} u_{i,\beta}^{(f)} \right) \quad (3.4)$$

die momentanen Lagrangeschen Dehnungen bzgl. der Ausgangskonfiguration bezeichnen. Wir erinnern uns, dass $F_{i\alpha} = x_{i,\alpha}$, sodass sich die Ableitungen des PK1 nach den Deformationsgradienten im Initialzustand schließlich zu

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial P_{i\beta}^{(f)}}{\partial x_{j,\gamma}} \right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}} &= \delta_{ij} T_{\gamma\beta}^{(i)} + F_{i\alpha} \left. \frac{\partial T_{\alpha\beta}^{(f)}}{\partial E_{\epsilon\delta}^{(f)}} \frac{\partial E_{\epsilon\delta}^{(f)}}{\partial x_{j,\gamma}} \right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}} \\ &= \delta_{ij} T_{\gamma\beta}^{(i)} + \delta_{il} \delta_{jJ} F_{l\alpha} F_{J\epsilon} \left(C_{\alpha\beta\epsilon\gamma} + C_{\alpha\beta\epsilon\gamma\delta\zeta} E_{\delta\zeta}^{(i)} \right) \\ &=: \delta_{il} \delta_{jJ} S_{l\beta J\gamma}^{(i)} \end{aligned} \quad (3.5)$$

ergeben. Die Initialdehnungen $\mathbf{E}^{(i)}$ ist dabei analog zu den Dehnungen im Momentanzustand als

$$E_{\alpha\beta}^{(i)} := \frac{1}{2} \left(\delta_{\alpha i} u_{i,\beta}^{(i)} + \delta_{\beta i} u_{i,\alpha}^{(i)} + u_{i,\alpha}^{(i)} u_{i,\beta}^{(i)} \right) \quad (3.6)$$

definiert. Die so erhaltenen Ausdrücke $\mathbf{S}^{(i)}$ beschreiben die Konstanten zweiter Ordnung im vorge-spannten Material, welche selbst von der Vorspannung abhängen. Die Vorspannungen $\mathbf{P}^{(i)}$ in Gleichung (3.1) nehmen hier die Rolle der Konstanten erster Ordnung ein. Diese verschwinden im ungespannten Zustand und es gälte $\mathbf{S} = \mathbf{C}$.

Betrachten wir nun eine durch das Medium laufende ebene Welle. Diese erzeuge das Verschiebungsfeld \mathbf{u} , das klein gegenüber der statischen Vorverschiebung $\mathbf{u}^{(i)}$ sei und so die oben getroffene Annahme erfüllt. Zusammen mit den Gleichungen (3.1) und (3.5) erhalten wir aus (2.28)

$$\rho_0 \ddot{u}_i = \frac{\partial}{\partial \xi_\beta} \left(\delta_{il} \delta_{jJ} S_{l\beta J\gamma}^{(i)} u_{j,\gamma} \right) \quad (3.7)$$

als Bewegungsgleichung im Momentanzustand, wobei ρ_0 die Dichte im unbelasteten Medium beschreibt. Es sei nochmals darauf hingewiesen, dass wir die Vorspannung als statisch annehmen und deren Divergenz $P_{l\beta,\beta}^{(i)}$ wegen $\ddot{u}_l^{(i)} = 0$ verschwindet.

Nehmen wir an, dass die Fronten der ebenen Welle senkrecht zu einem gegebenen Vektor (ν_i) verlaufen, so ist das Verschiebungsfeld (u_i) proportional zu $\exp[ik(ct - \nu_i \xi_i)]$, wobei c die Phasengeschwindigkeit bezeichnet. Mit diesem Ansatz folgt aus der Bewegungsgleichung (3.7)

$$\rho_0 c^2 u_i = \delta_{il} \delta_{jJ} S_{l\beta J\gamma}^{(i)} \nu_\beta \nu_\gamma u_j =: \delta_{il} \delta_{jJ} \tilde{S}_{lJ} u_j. \quad (3.8)$$

Da die uns interessierenden Eigenwerte ρc^2 der Matrix (\tilde{S}_{lJ}) rotationsunabhängig sind, die Matrix selber jedoch sehr wohl Rotationen des Körpers beinhalten kann, soll die Momentanverschiebung u_i auf

Verschiebungen im Materialsystem U_i mithilfe von $\delta_{ij}u_j = F_{il}U_l$ zurückgezogen werden (Pullback). Die neue Eigenwertgleichung lautet dann

$$\rho_0 c^2 U_i = S_{i\lambda} U_\lambda \quad (3.9)$$

mit

$$S_{i\lambda} = F_{il}^{-1} F_{j\lambda} \tilde{S}_{ij}. \quad (3.10)$$

Es handelt sich hier also um nichts anderes als eine Christoffelgleichung zur Huang-Steifigkeit im Initialzustand.

Wir möchten nun wissen, inwiefern sich die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Welle mit der Vorspannung ändert. Da für unsere Experimente nur uniaxiale Belastungen eine Rolle spielen und es somit nur eine unabhängige Variable gibt, wollen wir diese mit p bezeichnen. Die Ableitung von Gl. (3.9) bzgl. dieser Variablen lautet

$$(\rho_0 c^2)_{,p} U_i + \rho c^2 (U_i)_{,p} = (S_{i\lambda})_{,p} U_\lambda + S_{i\lambda} (U_\lambda)_{,p}. \quad (3.11)$$

Ohne Einschränkung kann der Verschiebungsvektor (U_i) als normiert vorausgesetzt werden, sodass wegen $U_i U_i = 1$ sofort die Orthogonalität

$$U_i U_{i,p} = 0 \quad (3.12)$$

des Eigenvektors und seiner Ableitung nach p folgt. Projektion von Gleichung (3.11) auf U_i liefert zunächst

$$(\rho_0 c^2)_{,p} = U_i (S_{i\lambda})_{,p} U_\lambda + U_i S_{i\lambda} (U_\lambda)_{,p}. \quad (3.13)$$

Um die gesuchten Konstanten zu erhalten, müssen wir diesen Ausdruck an der Stelle $p = 0$ auswerten. Dort ist die Matrix $(S_{i\lambda})$ wegen $F_{i\alpha} = \delta_{i\alpha}$ symmetrisch (Gl. (3.5)), sodass der letzte Term der rechten Seite wegen

$$U_i S_{i\lambda}|_{p=0} = \rho c^2 U_\lambda|_{p=0} \quad (3.14)$$

und Gl. (3.12) entfällt und diese sich zu

$$(\rho c^2)_{,p}|_{p=0} = U_i (S_{i\lambda})_{,p} U_\lambda|_{p=0} \quad (3.15)$$

vereinfacht. Um die gesuchten Geschwindigkeitsänderungen zu bekommen, müssen wir nun noch die Ableitungen der Matrix

$$\begin{aligned} S_{i\lambda} &= F_{il}^{-1} F_{j\lambda} S_{i\beta j\gamma} \nu_\beta \nu_\gamma \\ &= F_{il}^{-1} F_{j\lambda} \left[\delta_{ij} T_{\beta\gamma}^{(i)} + F_{i\alpha} F_{j\epsilon} \left(C_{\alpha\beta\epsilon\gamma} + C_{\alpha\beta\epsilon\gamma\delta\zeta} E_{\delta\zeta}^{(i)} \right) \right] \nu_\beta \nu_\gamma \\ &= \left[\delta_{i\lambda} T_{\beta\gamma}^{(i)} + \left(2E_{\lambda\epsilon}^{(i)} + \delta_{\lambda\epsilon} \right) \left(C_{i\beta\epsilon\gamma} + C_{i\beta\epsilon\gamma\delta\zeta} E_{\delta\zeta}^{(i)} \right) \right] \nu_\beta \nu_\gamma \end{aligned} \quad (3.16)$$

für die entsprechenden Lastzustände $T_{\beta\gamma}^{(i)}$ bilden. In den folgenden Zugversuchen wird die Probe mit einer uniaxialen Spannung belastet. Erfolgt die Belastung mit der Kraft F etwa in X_3 -Richtung, d.h. $M_I = (0, 0, 1)_I$, dann ist die Vorspannung durch

$$\sigma_{IJ}^{(i)} = \sigma M_I M_J = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma \end{pmatrix}_{IJ} \quad (3.17)$$

3 Bestimmung der Konstanten dritter Ordnung

mit $\sigma = F/A = p(A_0/A)$ gegeben, wobei A und A_0 die Querschnittsflächeninhalte der Zugprobe im initialen und unverformten Zustand beschreiben. Über einen Pullback der Cauchyschen Vorspannung in Gl. (3.17) auf natürliche Koordinaten erhalten wir den gesuchten Tensor $\mathbf{T}^{(i)}$. Dessen Ableitung interessiert uns lediglich an der Stelle $p = 0$ und wir bekommen

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial}{\partial p} T_{\beta\gamma}^{(i)} \right|_{p=0} &= \left. \frac{\partial}{\partial p} J F_{\beta I}^{-1} F_{\gamma J}^{-1} \sigma M_I M_J \right|_{p=0} \\ &= \left. J F_{\beta I}^{-1} F_{\gamma J}^{-1} \frac{A_0}{A} M_I M_J \right|_{p=0} + \underbrace{p \left. \frac{\partial}{\partial p} (\dots) \right|_{p=0}}_{=0} \\ &= \mu_\beta \mu_\gamma, \end{aligned} \quad (3.18)$$

mit $\mu_\beta := \delta_{\beta I} M_I \big|_{p=0}$. Man beachte dabei, dass an der Stelle $p = 0$ ausgewertet wird und der Ausdruck vor dem dyadischen Produkt der Spannungsrichtungen sich entsprechend vereinfacht.

Den zweiten Teil der Ableitung der Matrix \mathbf{S} aus Gleichung (3.16) können wir nun mithilfe der Kettenregel berechnen, sodass wir zusammen mit Gleichung (3.18)

$$\left. \frac{\partial}{\partial p} S_{\iota\lambda} \right|_{p=0} = \left. \frac{\partial T_{\alpha\kappa}^{(i)}}{\partial p} \frac{\partial E_{\xi\omega}^{(i)}}{\partial T_{\alpha\kappa}^{(i)}} \frac{\partial}{\partial E_{\xi\omega}^{(i)}} S_{\iota\lambda} \right|_{p=0} \quad (3.19)$$

$$= [\mu_\beta \mu_\gamma \delta_{\iota\lambda} + \mu_\alpha \mu_\kappa (2s_{\lambda\epsilon\alpha\kappa} C_{\iota\beta\epsilon\gamma} + s_{\delta\zeta\alpha\kappa} C_{\iota\beta\lambda\gamma\delta\zeta})] \nu_\beta \nu_\gamma \quad (3.20)$$

für die Änderung derselben erhalten. In unseren Experimenten war die Ausbreitungsrichtung der eingeschallten Volumenwellen ν_β stets senkrecht zur Zugrichtung μ_β , sodass das Skalarprodukt beider Vektoren entfällt und damit auch der erste Term der rechten Seite.

Zur Auswertung der Ausdrücke benötigen wir den Nachgiebigkeitstensor ($s_{\alpha\beta\gamma\delta}$), der die selben Symmetrieeigenschaften besitzt wie der Steifigkeitstensor und daher auch in verkürzter Form als Matrix

$$s_{IJ} = \begin{pmatrix} 1/E & -\nu/E & -\nu/E & 0 & 0 & 0 \\ & 1/E & -\nu/E & 0 & 0 & 0 \\ & & 1/E & 0 & 0 & 0 \\ & & & 1/\mu & 0 & 0 \\ & & & & 1/\mu & 0 \\ & & & & & 1/\mu \end{pmatrix}_{IJ} \quad (3.21)$$

dargestellt werden kann. Konkret erhält man für eine sich in ξ_1 -Richtung ausbreitende Welle unter dem Einfluss einer uniaxialen Spannung in ξ_3 -Richtung

$$\left. \frac{\partial}{\partial p} S_{\iota\lambda} \right|_{p=0} = 2s_{\lambda\epsilon 33} C_{\iota 1\epsilon 1} + s_{\delta\zeta 33} C_{\iota 1\lambda 1\delta\zeta}. \quad (3.22)$$

Unter Zuhilfenahme der Tensorarstellung der TOEC in Gl. (2.65) erhalten wir schließlich

$$\left. \frac{\partial}{\partial p} S_{\iota\lambda} \right|_{p=0} = \frac{1}{E} \times \text{diag} \left[\begin{pmatrix} \nu_1 + 2\nu_2 - 2\nu(\lambda + 2\mu + \nu_1 + 4\nu_2 + 4\nu_3) \\ \nu_2 - 2\nu(\mu + \nu_2 + 2\nu_3) \\ 2\mu + \nu_2 + 2\nu_3 - 2\nu(\nu_2 + \nu_3) \end{pmatrix}^T \right]. \quad (3.23)$$

In der gewählten Konfiguration ist die Ableitung der Geschwindigkeitsmatrix also diagonal und besitzt drei verschiedene Eigenwerte. Zu diesen Eigenwerten gehören damit drei verschiedene, zueinander orthogonale Eigenvektoren, die die Polarisation der entsprechenden Welle angeben. Da sich die Welle hier in ξ_1 -Richtung ausbreitet, gehört der erste Eigenwert (Zählung entlang der Diagonalen) zur

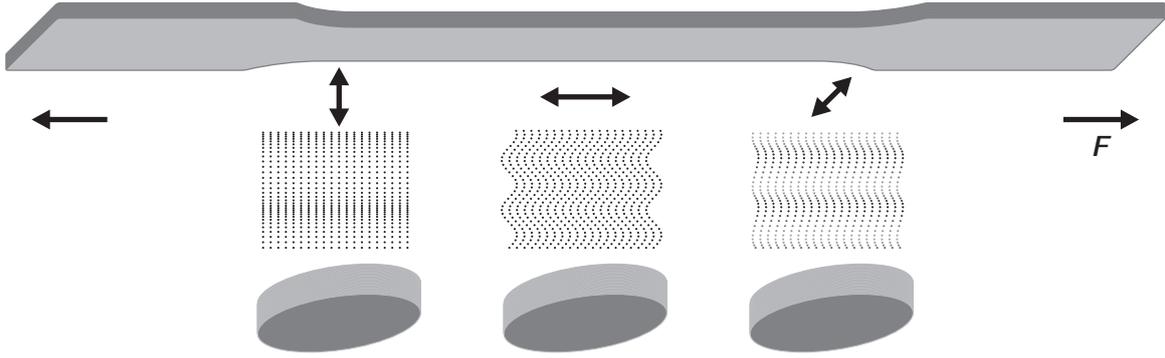


Abbildung 3.2.: Messprinzip zur Bestimmung der TOEC. Abgebildet ist zunächst die knochenförmige Zugprobe (oben), an der mit der Kraft F gezogen wird. Während der Belastung wird die Longitudinal- (links) und Transversalwellengeschwindigkeit bestimmt, wobei die Phasengeschwindigkeit der Scherwellen sowohl für zur Zugrichtung parallele (Mitte) als auch senkrechte Polarisation gemessen wird.

Longitudinalwelle. Der zweite Eigenwert gehört zur Transversalwelle, die senkrecht zur Zugrichtung polarisiert ist und der dritte damit zur parallel zur Zugrichtung polarisierten Welle (siehe Abb. 3.2). Im Allgemeinen muss die Wellenausbreitung nicht genau senkrecht zur Zugrichtung stattfinden, und auch die Polarisierungen der eingeschalteten Wellen müssen nicht parallel oder senkrecht zur Zugrichtung ausgerichtet sein. In diesem Fall würde man wiederum die Eigenwerte berechnen, den größten Wert aber nun der Quasilongitudinalwelle zuordnen, die beiden anderen den Quasitransversalwellen. Mit diesen Ausführungen können wir für unseren Spezialfall die neuen Phasengeschwindigkeiten

$$\begin{aligned}
 \rho_0 c_{\odot}^2 &= \lambda + 2\mu + p [\nu_1 + 2\nu_2 - 2\nu (\lambda + 2\mu + \nu_1 + 4\nu_2 + 4\nu_3)] \\
 &= \lambda + 2\mu + p \left[2(l - \lambda) - \frac{\lambda}{\mu} (2m - \lambda) \right], \\
 \rho_0 c_{\perp}^2 &= \mu + p [\nu_2 - 2\nu (\mu + \nu_2 + 2\nu_3)] \\
 &= \mu + p \left[m - \lambda - \frac{n\lambda + \mu}{2\mu} \right], \\
 \rho_0 c_{\parallel}^2 &= \mu + p [2\mu + \nu_2 + 2\nu_3 - 2\nu (\nu_2 + \nu_3)] \\
 &= \mu + p \left[m + 2(\lambda + \mu) + \frac{n\lambda}{4\mu} \right]
 \end{aligned} \tag{3.24}$$

der Longitudinalwelle (c_{\odot}), der senkrecht zur Zugrichtung polarisierten Transversalwelle (c_{\perp}) sowie der in Zugrichtung polarisierten Scherwelle (c_{\parallel}) angeben. Die jeweils angegebenen rechten Seiten unterscheiden sich hier nur in der Wahl der Konstanten dritter Ordnung (1. Brugger, 2. Murnaghan). In typischen Zugversuchen an den uns interessierenden Legierungen sind die auftretenden Dehnungen und die damit einhergehenden Geschwindigkeitsänderungen sehr gering. Es erscheint also sinnvoll, die Gleichungen (3.24) zu linearisieren. Mit der Entwicklung der aktuellen Phasengeschwindigkeit $c = c_0 + (\partial c / \partial p) p$ nach dem Parameter p an der Stelle $p = 0$ bekommen wir für die Differenz der Geschwindigkeitsquadrate

$$c^2 - c_0^2 = 2c_0 \frac{\partial c}{\partial p} p + \mathcal{O}(\Delta c^2), \tag{3.25}$$

wobei $\Delta c = (\partial c / \partial p) p$. Weiterhin ist die Querschnittsfläche der Probe an der aktuellen Messstelle meist nicht bekannt oder kann nur ungenau bestimmt werden. Die für die Zugversuche verwendete Zugmaschine besitzt jedoch einen Makrowegaufnehmer, mit dessen Hilfe die Längenänderung der

3 Bestimmung der Konstanten dritter Ordnung

Probe im Gegensatz zum Querschnitt sehr genau bestimmt werden kann. Eine weitere anwendungsorientierte Erleichterung ist daher die Ersetzung des Spannungsparameters p durch einen Dehnungsparameter e . Dieser soll in unseren Versuchen die Dehnung in Spannungsrichtung, d.h. in X_3 -Richtung beschreiben. Diese Richtung ist ein Eigenvektor des Deformationstensors und damit gleich der ξ_3 -Richtung im unverformten Zustand. Die Ableitungen nach dem Dehnungsparameter erhält man nun mithilfe der Kettenregel und der Feststellung, dass in unserem Falle $\partial p / \partial e = C_{33} = E$, also gleich dem Elastizitätsmodul ist.

Die in der Geschwindigkeitsänderung linearisierten akustoelastischen Gleichungen für die relative Geschwindigkeitsänderung bzgl. der Dehnung in Zugrichtung lauten nun (vgl. [PSF84])

$$\begin{aligned}
 2(\lambda + 2\mu) L_{\odot}^c &= \nu_1 + 2\nu_2 - 2\nu(\lambda + 2\mu + \nu_1 + 4\nu_2 + 4\nu_3) \\
 &= \frac{1}{\lambda + \mu} [2(l\mu - m\lambda) - \lambda(\lambda + 2\mu)], \\
 2\mu L_{\perp}^c &= \nu_2 - 2\nu(\mu + \nu_2 + 2\nu_3) \\
 &= \frac{m - \lambda}{\lambda + \mu} \mu - \frac{n}{2}, \\
 2\mu L_{\parallel}^c &= 2\mu + \nu_2 + 2\nu_3 - 2\nu(\nu_2 + \nu_3) \\
 &= 2\mu + \frac{4\mu m + n\lambda}{4(\lambda + \mu)}
 \end{aligned} \tag{3.26}$$

wobei die sogenannten *akustoelastischen Konstanten* (AEC) in der Referenzkonfiguration

$$L_{\odot}^c := \left(\frac{\partial}{\partial e} \frac{c_{\odot}}{c_{\odot,0}} \right)_{e=0}, \quad L_{\perp}^c := \left(\frac{\partial}{\partial e} \frac{c_{\perp}}{c_{\perp,0}} \right)_{e=0}, \quad L_{\parallel}^c := \left(\frac{\partial}{\partial e} \frac{c_{\parallel}}{c_{\parallel,0}} \right)_{e=0} \tag{3.27}$$

eingeführt wurden und $c_{\cdot,0}$ die jeweilige Geschwindigkeit im ungespannten Zustand bezeichnet. Die in den bisherigen Formeln verwendeten Phasengeschwindigkeiten bezogen sich immer auf den natürlichen Zustand. Das bedeutet, dass in den Versuchen lediglich die Zeiten zu bestimmen sind, die die Welle für einen Umlauf benötigt, nicht aber der zurückgelegte Weg. Die *natürlichen Geschwindigkeiten* c ergeben sich dann über den Bezug auf den unverformten Zustand, also die Ausgangsdicke d_0 der Probe. Die *Momentangeschwindigkeit* v bezieht sich dagegen auf die aktuelle Dicke $d = (1 - \nu e)d_0$ der Probe, die durch die Dehnung e in ξ_3 -Richtung hervorgerufen wurde. Aufgrund der bloßen Unterscheidung bzgl. des zurückgelegten Weges, stehen beide Geschwindigkeiten daher im selben Verhältnis zueinander.

3.2. Bestimmung der TOEC mittels Puls-Echo-Methode

Wie bereits im vorherigen Abschnitt angedeutet, erfolgte die experimentelle Bestimmung der TOEC in einem Zugversuch mittels Ultraschall-Puls-Echo-Verfahren. Dazu wurde die Zugprobe in eine Zugmaschine eingespannt und über die Regelung der angelegten Kraft gedehnt (kraftgesteuerter Zugversuch). Die Längenänderung des Prüflings wurde dabei über einen *Makrowegaufnehmer* (auch *Ansetzaufnehmer* oder *taktiler Extensometer*) gemessen und die Querdehnung der Probe, sofern nötig, über die Querkontraktion berechnet. Zu jeder eingestellten Kraft wurde dann die Laufzeit der jeweiligen Wellenmoden bestimmt, nachdem der Wegaufnehmer zum Stillstand gekommen ist.

Der akustische Teil des Messaufbaus bestand dabei aus einem Pulser-Receiver mit Longitudinal- und Transversalprüfkopf und einem Oszilloskop. Über die im Pulser-Receiver generierten Schallimpulse wurden die Schallwellen mittels Prüfkopf und geeignetem Koppelmittel senkrecht zur Probenoberfläche eingekoppelt. Aufgrund des Puls-Echo-Betriebs wurden gleichzeitig die Echosignale mit dem Prüfkopf gemessen und über ein Oszilloskop grafisch dargestellt, wo sie zur weiteren Bearbeitung

gespeichert wurden. Die eigentliche Laufzeitbestimmung für die jeweiligen Moden erfolgte im Postprozess mittels Autokorrelation der Messsignale.

Die Laufzeitmessungen wurden jeweils an drei Positionen der Probe wiederholt (Abb. 3.3), um zufällige Fehler bei der Messung gering zu halten und mögliche Inhomogenitäten der Zugprobe heraus zu mitteln. Die Wiederholung erfolgte jedoch stets erst nach einer vollen zyklischen Belastung, da die Prüfköpfe zur gleichbleibenden Einkopplung mit einer Schraubzwinde an der Zugprobe befestigt waren.

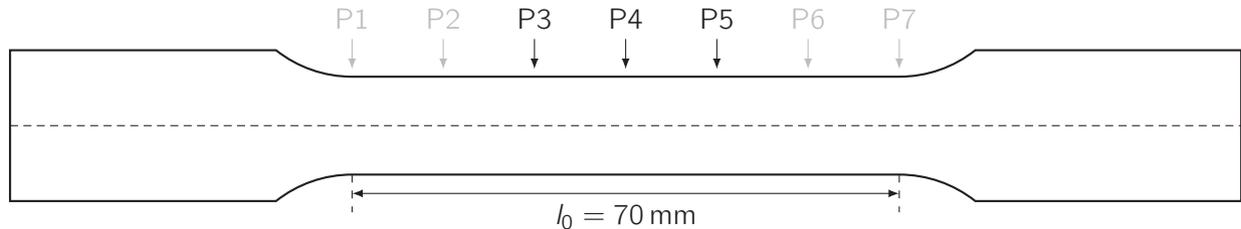


Abbildung 3.3.: Zugprobe mit Messpositionen und Angriffspunkten des Makrowegaufnehmers. Lediglich die Messungen an den Positionen 3, 4 und 5 wurden zur Bestimmung der SOEC und TOEC herangezogen.

Der Abstand zwischen den beiden Messfühlern des Extensometers betrug $l_0 = 70 \text{ mm}$. Mithilfe der im unbelasteten Zustand bestimmten Lamé-Konstanten wurden hier die Querdehnung $\Delta d/d_0$ und dazu die absolute Dickenänderung Δd über die Querkontraktion berechnet.

Die zugrundeliegenden Werkstoffproben aus In718 und Ti6246 wurden als isotrop vorausgesetzt. Mithilfe der Longitudinal- und Transversalwellengeschwindigkeit im unbelasteten Zustand konnten die zwei Lamé-Parameter λ und μ bestimmt werden. Die Auswertung der drei P- und S-Wellenlaufzeiten in den vorgespannten Zuständen ergaben schließlich die AEC L_{\odot}^c , L_{\perp}^c und L_{\parallel}^c (Tab. 3.1), die, eingesetzt in Gl. (3.26), die noch unbekanntenen Konstanten dritter Ordnung l , m und n (Tab. 3.2) ergaben.

Tabelle 3.1.: AEC für In718 und Ti6246 an den Positionen 3, 4 und 5 sowie dem Durchschnitt.

Material	Position	L_{\odot}^c	L_{\perp}^c	L_{\parallel}^c
In718	P3	$0,248 \pm 0,001$	$-0,314 \pm 0,002$	$-0,958 \pm 0,002$
	P4	$0,248 \pm 0,001$	$-0,313 \pm 0,002$	$-0,961 \pm 0,002$
	P5	$0,243 \pm 0,001$	$-0,309 \pm 0,002$	$-0,939 \pm 0,002$
	\emptyset	$0,246 \pm 0,003$	$-0,312 \pm 0,004$	$-0,953 \pm 0,009$
Ti6246	P3	$0,421 \pm 0,001$	$0,781 \pm 0,002$	$-1,531 \pm 0,002$
	P4	$0,416 \pm 0,001$	$1,380 \pm 0,002$	$-1,502 \pm 0,002$
	P5	$0,415 \pm 0,001$	$0,482 \pm 0,002$	$-1,323 \pm 0,002$
	\emptyset	$0,417 \pm 0,003$	$0,881 \pm 0,266$	$-1,452 \pm 0,067$

Anhand der Definition der AEC kann man sich hier nochmals die Bedeutung derselben verdeutlichen. Im Falle von In718 bedeuten die Werte etwa für L_{\odot}^c , dass sich die Phasengeschwindigkeit, bezogen auf die Referenzkonfiguration, der parallel zur Zugrichtung polarisierten Transversalwelle in Folge einer Dehnung um 1%, um nahezu 1% ändert.

Die ersten Versuche lieferten hier noch keine plausiblen Ergebnisse, da zunächst während der Belastung der Probe gemessen wurde und die bestimmten Konstanten aufgrund von Kriechvorgängen noch stark von der Dehnung abhängig waren. Messungen während der Entlastung der Probe verbesserten die Ergebnisse deutlich. Außerdem wurde die Probe vor dem eigentlichen Zugversuch mehrmals zyklisch be- und wieder entlastet.

3 Bestimmung der Konstanten dritter Ordnung

Tabelle 3.2.: TOEC für In718 und Ti6246 an den Positionen 3, 4 und 5 sowie deren Durchschnitt. Die zur Berechnung benutzten Parameter für In718 waren $\lambda = 121,0$ GPa, $\mu = 80,0$ GPa, sowie $\rho = 8220$ kg/m³ und für Ti6246 $\lambda = 76,0$ GPa, $\mu = 44,0$ GPa, und $\rho = 4430$ kg/m³.

Material	Position	l [GPa]	m [GPa]	n [GPa]
In718	P3	$-529,7 \pm 3,2$	$-606,4 \pm 1,8$	$-478,4 \pm 2,3$
	P4	$-530,5 \pm 3,2$	$-607,0 \pm 1,8$	$-479,3 \pm 2,3$
	P5	$-523,5 \pm 3,2$	$-599,9 \pm 1,8$	$-475,0 \pm 2,3$
	Ø	$-527,9 \pm 5,4$	$-604,5 \pm 4,1$	$-477,6 \pm 3,6$
Ti6246	P3	$-357,6 \pm 2,0$	$-398,0 \pm 1,1$	$-485,0 \pm 1,9$
	P4	$-291,1 \pm 2,0$	$-358,2 \pm 1,1$	$-561,3 \pm 1,9$
	P5	$-324,5 \pm 2,0$	$-377,4 \pm 1,1$	$-417,3 \pm 1,9$
	Ø	$-324,4 \pm 21,2$	$-377,9 \pm 12,6$	$-487,9 \pm 43,5$

Zur Abschätzung des Messfehlers wurden die drei Fehlerquellen betrachtet, die nach Auffassung des Autors im Wesentlichen zur Unsicherheit beitragen: die Messung der Probendicke, die Ausrichtung des Transversalwellenprüfkopfes sowie die korrelative Laufzeitbestimmung.

Obwohl die Probendicke keinen Einfluss auf die natürlichen AEC hat, geht sie direkt in die Berechnung der SOEC λ und μ ein und beeinflusst damit die Endergebnisse. Gemessen wurde die Dicke der Probe mittels Bügelmessschraube, für die eine Messunsicherheit von ± 2 μ m angegeben war.

An der Ausrichtung der Transversalprüfköpfe entscheidet sich letztendlich die Gültigkeit der Gleichungen (3.26). Um den Einfluss einer Fehlausrichtung abschätzen zu können, wurden der Scherwellenwandler jeweils um 5° zur parallelen und senkrechten Ausrichtung gedreht und der Zugversuch mit dieser Ausrichtung wiederholt.

Die Dämpfung des Materials führt mit zunehmendem Weg, d.h. mit steigender Echoanzahl, zu weniger scharfen Peaks, sodass sich auch die Maxima der Autokorrelation zunehmend schlechter auswerten lassen. Dies führt unausweichlich zu Fehlauswertungen dieser Positionen und damit zu verfälschten Laufzeiten.

Die Phasengeschwindigkeit der Volumenwellen kann sich darüber hinaus mit der Temperatur ändern. Bei der mechanischen Belastung sind schwankende Umgebungstemperaturen jedoch nicht die einzige Ursache für Temperaturänderungen. Der Joule-Thompson-Effekt beschreibt die Änderung der Temperatur eines Körpers infolge einer äußeren mechanischen Belastung. Die thermoelastische Gleichung [Boy99]

$$\Delta T = -\frac{\alpha T}{\rho C_p} \Delta \sigma \quad (3.28)$$

beschreibt dieses Verhalten quantitativ. Hier ist α der thermische Längenausdehnungskoeffizient, T die Temperatur, ρ die Dichte der Probe und C_p die (isobare) Wärmekapazität.

Für In718 mit $\alpha = 1,3 \cdot 10^{-5} \text{ K}^{-1}$, $C_p = 435 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$ at $T = 293 \text{ K}$ ergibt das bei einer Zugspannung von 1 GPa eine Temperaturänderung von $\Delta T \approx -1,07 \text{ K}$.

Die Änderung des Schermoduls μ pro K beträgt für In718 $\Delta \mu = -1,74 \cdot 10^{-2} \text{ GPa K}^{-1}$. Für die Änderung der Scherwellengeschwindigkeit ergibt sich so wegen

$$2 \frac{\Delta c_T}{c_T} = \frac{\Delta \mu}{\mu} - \frac{\Delta \rho}{\rho} \quad (3.29)$$

und $\Delta \rho = 3\alpha$ eine Änderung der Scherwellengeschwindigkeit von $\Delta c_T \approx -0,28 \text{ m/s}$. Dieser Wert liegt deutlich unter den gemessenen Geschwindigkeitsänderungen, sodass wir den Fehler bzgl. des Joule-Thompson-Effekts vernachlässigen können.

3.2 Bestimmung der TOEC mittels Puls-Echo-Methode

Weitere Fehlerquellen wären etwa nicht planparallele Probenoberflächen mit der Folge einer Vergrößerung des Laufweges, die hier jedoch als vernachlässigbar klein gegenüber den bereits erwähnten Fehlern angenommen wurden.

Die in den Tabellen 3.1 und 3.2 angegebenen Fehler schließen alle eben diskutierten Fehlerquellen ein. Die Durchschnittswerte umfassen dabei neben dem durchschnittlichen Fehler die skalierte Standardabweichung (Messunsicherheit des Mittelwertes) der ermittelten Werte an den jeweiligen Messpositionen.

Es ist deutlich zu erkennen, dass die Werte der Nickelbasislegierung eine viel geringere Streuung aufweisen als die Werte der Titanlegierung. Im Falle von In718 liegen die Abweichungen in der Größenordnung des Messfehlers. Es erscheint somit legitim, das Material als homogen zu betrachten und die jeweiligen Mittelwerte über alle Messpositionen als Ergebnis für die gesamte Probe anzunehmen. Die TOEC für Ti6246 variieren von Position zu Position deutlich über den systematischen Fehler hinaus. Es kann sich daher weniger um zufällige Streuungen als vielmehr um eine Ortsabhängigkeit der Materialkonstanten handeln, die ihrerseits auf eine grobe Körnigkeit der Legierung hindeutet. Der in Tabelle 3.2 angegebene Mittelwert ist somit nur in sehr grober Näherung gerechtfertigt und unterstreicht – im Hinblick auf inverse Verfahren – die Notwendigkeit der Bestimmung der TOEC *vor Ort*, d.h. möglichst an der zu untersuchenden Stelle eines gegebenen Prüflings.

Zum Schluss sei noch bemerkt, dass die Werte für die Ti6246-Legierung von denen in [RBR⁺11] abweichen, da die dort verwandte Poissonzahl zur Berechnung der Dicke nicht mit denen für die Berechnung der TOEC benutzen SOEC korrespondiert.

4. Inversionsalgorithmen zur Eigenspannungsbestimmung

Durch das Kugelstrahlen wird die Probe plastisch verformt, d.h. Versetzungen laufen durch das Material und ordnen sich um. Infolge inhomogener plastischer Verformungen, etwa im Randbereich, bilden sich lokale Eigenspannungen aus, die durch die Versetzungen im Material gehalten werden. Die nun gegebene Versetzungsdichte und/oder -struktur kann sich im Laufe der Zeit – etwa durch äußere Einflüsse oder Wärmebehandlungen – ändern. Das gilt nicht notwendigerweise für das Eigenspannungsniveau, d.h. unterschiedliche plastische Verformungen können das gleiche Eigenspannungsfeld zur Folge haben. Ganz ohne Versetzungen können also keine Eigenspannungen im Material gehalten werden. Es kann jedoch sehr wohl Versetzungsstrukturen ohne makroskopische ES geben (vollkommen plastisch verformte Probe). Eigenspannungen können also nicht ohne plastische Verformung existieren, aber beide können sich in *unterschiedlichem* Maße ändern.

Um die Vorspannung im Körper halten zu können, muss also eine inkompatible (plastische) Dehnung ϵ^p im Material vorhanden sein. Das bedeutet, dass die lokalen Verschiebungsgradienten an bestimmten Zwischenstellen wie etwa Korngrenzen nicht stetig sein müssen. Eine einfache konstitutive Beziehung zwischen Spannung und Dehnung, so wie etwa im hyperelastischen Fall, ist in diesem Fall nicht gegeben. Sind dagegen alle Dehnungen kompatibel, so folgt aus der Gleichgewichtsbedingung $\sigma_{ij,j} = 0$ und der Spannungsfreiheit an der Oberfläche sofort die Spannungsfreiheit im gesamten Körper [PSF84].

Bei der Untersuchung von Eigenspannungen in diesem Kapitel ist der Initialzustand daher dem natürlichen vorzuziehen. Der Initialzustand ist dabei der Zustand, in dem nur plastische Dehnungen vorliegen. Der plastifizierte Zustand dient also als Referenz, auf den die Eigenspannungen aufgebracht werden. Das ist insofern konträr zum Konzept der Eigendehnung in [QC06], als der hier implizierte Eigendehnungstensor als kompatibel vorausgesetzt wird. Bei der additiven Zerlegen der Dehnung in Eigendehnung und elastische Dehnung muss dagegen keine der beiden Komponenten selbst die Kompatibilitätsbedingungen erfüllen, lediglich die Gesamtdehnung [QC06].

4.1. Rayleighwellen in vorgespannten Medien

Oberflächenwellen in vorgespannten Körpern weichen aufgrund der Kleinheit des akustoelastischen Effektes kaum von den linearen Lösungen im ungestörten Medium ab. Mithilfe eines störungstheoretischen Ansatzes können wir daher einen Ausdruck für die spannungsinduzierte Frequenzverschiebung finden, in dem wir die Lösung des gestörten, nichtlinearen Problems auf die Lösung der ungestörten, linearen Bewegungsgleichung projizieren.

Nehmen wir also an, das betrachtete Medium unterliege einer Vorspannung. Diese Vorspannung induziere ein Verschiebungsfeld, dessen Gradienten wir mit $u_{i,j}^{(i)}$ bezeichnen wollen (vgl. Abb. 3.1). Hier wurde implizit die Annahme getroffen, dass die von der Spannung induzierte Dehnung aus einem Verschiebungsfeld berechnet werden kann, die Dehnungen somit kompatibel sind. Insbesondere für Eigenspannungen ist diese Bedingung nicht erfüllt [PSF84]. Da wir in den folgenden Gleichungen aber nur den Gradienten betrachten und äquivalent zu einer verallgemeinerten Dehnung übergehen könnten, wollen wir diese Einschränkung zunächst ignorieren.

4 Inversionsalgorithmen zur Eigenspannungsbestimmung

Breitet sich nun eine Rayleighwelle an der Oberfläche des vorgespannten Mediums aus, so setzt sich das Gesamtfeld des Verschiebungsgradienten gemäß

$$u_{i,J} = u_{i,J}^{(i)} + \tilde{u}_{i,J} \quad (4.1)$$

aus dem eben erwähnten statischen Teil $u_{i,J}^{(i)}$ und einem dynamischen Teil $\tilde{u}_{i,J}$ zusammen. Eingesetzt in die Bewegungsgleichung (2.28) erhalten wir die Bewegungsgleichung

$$\rho_0 \ddot{u}_i = \frac{\partial}{\partial X_J} \left(S_{iJKL} \tilde{u}_{k,L} + S_{iJKLMN} \tilde{u}_{k,L} u_{m,n}^{(i)} \right) \quad (4.2)$$

für den dynamischen Anteil der Rayleighwelle, wobei die Symmetrien der S_{iJKLMN} sowie das statische Gleichgewicht im Initialzustand der Vorspannung $P_{iJ,J}^{(i)} = 0$ benutzt wurden. Die neu erhaltene Bewegungsgleichung (4.2) wird nun auf eine Lösung

$$u_i^{(0)}(\mathbf{X}, k) = U_i(X_3, k) \exp[i(kX_1 - \omega t)] \quad (4.3)$$

des linearen, ungestörten Problems projiziert, d.h. es wird mit der konjugiert komplexen Form der linearen Lösung multipliziert und danach über das gesamte Volumen integriert. Die SAW breitet sich hier o.E. in X_1 -Richtung aus und es gelte das in Abb. 4.1 definierte Koordinatensystem für die folgenden Rechnungen.

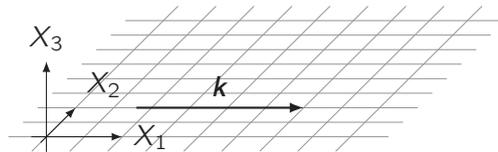


Abbildung 4.1.: Konvention für SAW-Ausbreitung mit dem Wellenvektor $\mathbf{k} = k\hat{\mathbf{k}}$, der Wellenzahl k und der Ausbreitungsrichtung $\hat{\mathbf{k}}$, wobei $\|\hat{\mathbf{k}}\| = 1$ und $\hat{k}_3 = 0$.

Aus der Störungstheorie folgt, dass die gestörte Lösung annähernd die gleiche Form besitzt und lediglich eine Phasendifferenz $\delta\omega t$ zur ungestörten Lösung aufweist. Mithilfe partieller Integration, der Randbedingung für den PK1-Tensor, sowie der Tatsache, dass $\mathbf{u}^{(0)}$ die lineare Bewegungsgleichung erfüllt, erhält man

$$2\omega\delta\omega\rho_0 \int_V U_i^* U_i dV = \int_V [\mathcal{D}_J U_i]^* S_{iJKLMN} [\mathcal{D}_L U_k] u_{m,N}^{(i)} dV \quad (4.4)$$

mit dem Ableitungsoperator aus Abschnitt 2.7, wobei wir das Argument k des Ableitungsoperators \mathcal{D} hier und im Folgenden weglassen, wenn klar ist, welche Wellenzahl gemeint ist. Entsprechendes gilt für die Amplituden U_i . Der Vorfaktor auf der linken Seite von Gl. (4.4) ist dabei eine Näherung der Differenz der Quadrate $(\omega + \delta\omega)^2 - \omega^2$ für kleine Frequenzverschiebungen $\delta\omega/\omega$. Insgesamt lässt sich die dehnungsinduzierte Frequenzverschiebung damit als

$$\delta\omega = N(k)^{-1} \int_V [\mathcal{D}_J w_i]^* S_{iJKLMN} [\mathcal{D}_L w_k] u_{m,N}^{(i)} dV \quad (4.5)$$

mit

$$N(k) := 2\omega(k)\rho_0 \int_V w_i^* w_i dV \quad (4.6)$$

schreiben. Die Frequenzabhängigkeit des Nenners N folgt dabei aus der Dispersionsrelation. Schließlich seien die auftretenden Größen noch periodisch in X_1 - und X_2 -Richtung, sodass in lateraler Richtung jeweils über eine Periodenlänge integriert wird [Zab92] und die auszuwertenden Integrale wohldefiniert sind [PMM92].

4.2. Rayleighwellen im homogenen Spannungsfeld

Die einfachste Form statischer Vordehnungen stellen induzierte Felder homogener Vorspannungen dar. Da eine derartige Vorspannung lediglich die effektiven elastischen Konstanten und damit die Symmetrie der (neuen) Steifigkeitsmatrix beeinflusst, ist hier keine Dispersion der Phasengeschwindigkeit zu erwarten. Die dehnungsinduzierte Frequenzverschiebung ist damit im gesamten Medium konstant und wird für Oberflächenwellen mit Wellenvektor \mathbf{k} analog zu Volumenwellen [Bru65] durch die sogenannten Grüneisen-Konstanten [May95, Gl. (4.20)]

$$\gamma_{KL}(\mathbf{k}) := \left[-\omega_{\mathbf{k}}^{-1} \frac{\partial \omega_{\mathbf{k}}}{\partial E_{KL}} \right]_{E_{KL}=0} \quad (4.7)$$

charakterisiert. Die spezielle Form der Lösungen für Rayleighwellen, d.h. die einfache Form der Amplitudenvektoren und Abklingkoeffizienten in Gl. (2.89), erlaubt es, die Gleichungen weiter zu vereinfachen. Die betrachtete Welle breitet sich wieder o.E. in X_1 -Richtung aus. Alle anderen Richtungen können durch entsprechende Drehung der elastischen Konstanten und der daraus resultierenden Anisotropien betrachtet werden, wodurch die Anzahl der Abklingkonstanten und Partialwellenamplituden variieren kann. Letzteres wird im Folgenden dadurch berücksichtigt, dass die Intervalle der Indizes r und r' nicht fix sind. Darüber hinaus impliziert die homogene Vorspannung ihrerseits keinerlei Längenskala. Die Grüneisen-Konstanten sind also nicht vom Betrag des Wellenvektors abhängig, sodass wir den Index bzw. das Argument \mathbf{k} in der Definition der Konstanten (Gl. (4.7)) im Folgenden weglassen. Mithilfe der einfachen Darstellung der Verschiebungsfelder für Rayleighwellen in homogenen Medien und der Tatsache, dass die Abklingkoeffizienten in diesem Fall reell sind, folgt für die Frequenzänderung

$$\delta\omega = \bar{N}^{-1} k S_{iJkLmN} u_{i,J}^{(i)} D_{Lr}^* b_{kr}^* D_{Nr'} b_{mr'} [\alpha_r + \alpha_{r'}]^{-1} \quad (4.8)$$

mit

$$\bar{N} = 2\rho_0 c b_{ir}^* b_{ir'} [\alpha_r + \alpha_{r'}]^{-1} \quad (4.9)$$

und die aus dem Ableitungsoperator \mathcal{D}_L hervorgehende Matrix

$$D_{Lr} := \delta_{L1} i + \delta_{L3} \alpha_r, \quad (4.10)$$

die aufgrund der Definition der Abklingkonstanten α in Gl. (2.76) nicht von der Wellenzahl abhängt. Die Grüneisen-Konstanten beschreiben nun die Änderung der Frequenz bzgl. der Vordehnungen. Die einzigen Größen in Gl. (4.8), die von diesen abhängen, sind die Initialverschiebungsgradienten $\mathbf{u}^{(i)}$, d.h. die Vordehnungen selbst. Für kleine Dehnungen können wir die quadratischen Terme in den Green-Lagrange-Tensoren \mathbf{E} vernachlässigen und erhalten schließlich

$$\gamma_{KL} = [-\bar{N}c]^{-1} \frac{1}{2} (\delta_{aK} \delta_{BL} + \delta_{aL} \delta_{BK}) S_{aBmMnN} D_{Mr}^* b_{mr}^* D_{Nr'} b_{nr'} [\alpha_r^* + \alpha_{r'}]^{-1} \quad (4.11)$$

als Ausdruck für die Grüneisen-Konstanten von Rayleighwellen auf homogen gespannten Halbräumen. Man beachte den Term $\rho_0 c^2$ im Nenner, der die Dimension einer elastischen Konstante hat und den Gesamtausdruck damit wie erwartet dimensionslos werden lässt. Weiterhin fällt die in der Definition implizite Symmetrie der Konstanten bzgl. der Indizes K und L auf, was die Berechnungen der Gesamtmatrix vor allem bei niedrigeren Symmetrien erheblich beschleunigt.

Für die in dieser Arbeit bestimmten Materialparameter für In718 und Ti6246 sind die Grüneisen-Konstanten in Tab. 4.1 angegeben. Dabei fällt auf, dass lediglich die Diagonale besetzt ist. An diesem Verhalten sieht man beispielhaft, dass Scherdehnungen in isotropen Medien keinen Einfluss auf die Frequenzverschiebung haben.

4 Inversionsalgorithmen zur Eigenspannungsbestimmung

Tabelle 4.1.: Nichtverschwindende Grüneisenkonstanten für In718 und Ti6246, berechnet aus den in dieser Arbeit bestimmten Materialparametern.

Material	γ_{11}	γ_{22}	γ_{33}
In718	1,669	1,186	1,485
Ti6246	2,044	0,388	1,843

Um den Zusammenhang zur dehnungsinduzierten Phasengeschwindigkeitsänderung herzustellen, stellen wir zunächst fest, dass für die relative Frequenzänderung

$$\frac{\delta\omega}{\omega} = \omega^{-1} [(c + \delta c)(k + \delta k) - ck] = \frac{\delta c}{c} + \frac{\delta k}{k} + \mathcal{O}(\delta k^2) \quad (4.12)$$

gilt. Mit der Entwicklung der Phasengeschwindigkeit im gestörten System

$$c(E_{KL}) = c(E_{KL} = 0) + \left. \frac{\partial c}{\partial E_{KL}} \right|_{E_{KL}=0} E_{KL} + \mathcal{O}(E_{KL}^2) \quad (4.13)$$

und der analogen Entwicklung für die Wellenzahl k lässt sich (4.12) mithilfe der Kettenregel in

$$\left[\frac{1}{c} \frac{\partial c}{\partial E_{KL}} \right]_{E_{KL}=0} = -\gamma_{KL} - \left[\frac{1}{k} \frac{\partial k}{\partial E_{KL}} \right]_{E_{KL}=0} \quad (4.14)$$

umformen. Auch der Wellenvektor \mathbf{k} ändert sich im Zuge der Dehnung zu \mathbf{k}' . Da die Wellenfronten definitionsgemäß senkrecht auf dem Wellenvektor stehen, d.h.

$$k'_m x_m = k'_m F_{mM} X_M = k_M X_M, \quad (4.15)$$

transformiert dieser sich kontravariant bzgl. des Deformationsgradienten, sodass im deformierten Zustand in erster Näherung

$$k'_m = \left(\delta_{mN} - u_{m,N}^{(i)} \right) k_N, \quad (4.16)$$

für den Wellenvektor gilt. Das daraus folgende Differential des Betrages k des Wellenvektors

$$dk = d\sqrt{k_M k_M} = \frac{k_M}{k} dk_M \quad (4.17)$$

und die Ableitung der initialen Verschiebungsgradienten nach den Lagrange-Dehnungen liefern schließlich die einfache Form

$$\frac{\delta c}{c} = \left[\frac{1}{c} \frac{\partial c}{\partial E_{KL}} \right]_{E_{KL}=0} E_{KL} = (-\gamma_{KL} + \hat{k}_K \hat{k}_L) E_{KL} \quad (4.18)$$

mit dem Einheitsvektor $\hat{\mathbf{k}}$ in Richtung \mathbf{k} für die relative Phasengeschwindigkeitsänderung der Rayleighwelle infolge einer homogenen Vorspannung. Der zweite Summand in der Klammer der rechten Seite hat dabei in unserem Fall nur eine von Null verschiedene Komponente.

Da die Welle entlang einer freien Oberfläche läuft, kann eine der Dehnungen unter Annahme kleiner Dehnungen mithilfe der Randbedingung $T_{I3}|_{X_3=0} = 0 = \lambda(E_{11} + E_{22}) + (\lambda + 2\mu)E_{33}$ eliminiert werden und eine andere durch die erste Invariante des Green-Lagrange-Tensors ersetzt werden, d.h.

$$E_{33} = -\frac{\lambda}{2\mu} E_{KK}, \quad E_{22} = \frac{\lambda + 2\mu}{2\mu} E_{KK} - E_{11}. \quad (4.19)$$

4.3 Einfluss von Spannungsgradienten auf die Rayleighwellendispersion

Mit diesen Substitutionen vereinfacht sich Gl. (4.18) zu

$$\frac{\delta c}{c} = (1 - \gamma_{11} + \gamma_{22}) E_{11} + \frac{1}{2\mu} [\lambda\gamma_{33} - (\lambda + 2\mu)\gamma_{22}] E_{KK} \quad (4.20)$$

$$= (h_2/h_0) E_{11} + (h/h_0) E_{KK}, \quad (4.21)$$

wobei h , h_0 und h_2 die von Iwashimizu und Kobori in [IK78] ermittelten Dehnungskoeffizienten bezeichnen und dort zu entnehmen sind. Diese zusätzliche Referenz dient hier lediglich zur Validierung der eigenen Berechnungen. Im Falle einer sich auf einer gebogenen Stahlplatte (*mild steel*, $\rho = 7837 \text{ kg/m}^3$, $\lambda = 107,4 \text{ GPa}$, $\mu = 81,9 \text{ GPa}$, $\nu_1 = -13 \text{ GPa}$, $\nu_2 = -200 \text{ GPa}$, $\nu_3 = -200 \text{ GPa}$) senkrecht zur Biegelinie ausbreitenden Rayleighwelle (siehe [HFH81]) liefern beide Ansätze bei einer uniaxialen Oberflächendruckspannung von $\bar{\sigma}_\perp = -63,75 \text{ MPa}$ eine Phasengeschwindigkeitsänderung von $\delta c/c = -0,9 \times 10^{-4}$ und damit den von Hirao in [HFH81] angegebenen Wert.

Ersetzt man die Dehnungen in (4.18) unter Annahme kleiner Verzerrungen mithilfe des Hookeschen Gesetzes [HFH81], so ergibt sich für die relative Phasengeschwindigkeitsänderung der Rayleighwelle

$$\left(\frac{\delta c}{c}\right)_{\text{HFH81}} = -0,57 \cdot 10^{-3} \text{ GPa}^{-1} T_{11} + 1,41 \cdot 10^{-3} \text{ GPa}^{-1} T_{22} \quad (4.22)$$

und damit eine *Reduzierung* der Ausbreitungsgeschwindigkeit unter äquibiaxialer Druckspannung. Im Gegensatz dazu erhalten wir unter den gleichen Bedingungen in In718

$$\left(\frac{\delta c}{c}\right)_{\text{In718}} = 0,68 \cdot 10^{-3} \text{ GPa}^{-1} T_{11} - 2,58 \cdot 10^{-3} \text{ GPa}^{-1} T_{22} \quad (4.23)$$

und damit eine Erhöhung der Phasengeschwindigkeit unter äquibiaxialer Druckspannung. Laservibrometrische Messungen des Wellenfeldes einer sich auf einer Zugprobe ($\sigma_{22} = T_{22} = 0$) ausbreitenden Rayleighwelle ergeben hier einen Wert von etwa $1,3 \cdot 10^{-3} / \text{GPa}$ als akustoelastischen Spannungskoeffizienten vor T_{11} [KBS⁺09].

4.3. Einfluss von Spannungsgradienten auf die Rayleighwellendispersion

In diesem Abschnitt wollen wir nun den vollkommen homogenen Fall verallgemeinern und Variationen der Spannung senkrecht zur Oberfläche zulassen. Der initiale Verschiebungsgradient ist nun auch von X_3 abhängig und kann nicht vor das Integral gezogen werden. Nehmen wir an, die Tiefenvariation folge der Funktion f , so lautet die Frequenzverschiebung

$$\delta\omega = N(k)^{-1} \int_{-\infty}^0 [\mathcal{D}_J U_i]^* S_{iJKLMN} [\mathcal{D}_L U_k] \bar{u}_{m,N}^{(i)} f(X_3) dX_3, \quad (4.24)$$

wobei $\bar{u}_{m,N}^{(i)}$ den Wert des Verschiebungsgradienten an der Oberfläche $X_3 = 0$ bezeichne und f so normiert sei, dass $f(0) = 1$ gilt. Im isotropen Fall können wir zunächst einmal

$$\delta\omega = \bar{N}^{-1} k^2 S_{iJKLMN} \bar{u}_{m,N}^{(i)} D_{Jr}^* b_{ir}^* D_{Lr'} b_{kr'} I_{rr'} \quad (4.25)$$

mit dem von den Abklingkoeffizienten und dem Tiefenprofil abhängigen Tensor

$$I_{rr'} := \int_{-\infty}^0 \exp[(\alpha_r + \alpha_{r'}) k X_3] f(X_3) dX_3 \quad (4.26)$$

schreiben, wobei der Nenner \bar{N} , wiederum die einfache Form aus Gl. (4.9) besitzt.

4 Inversionsalgorithmen zur Eigenspannungsbestimmung

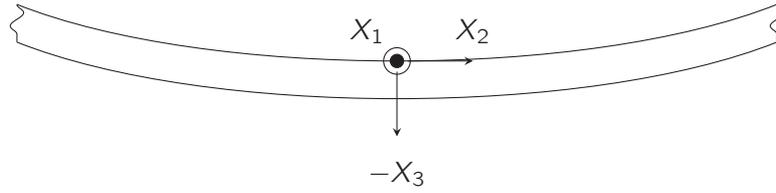


Abbildung 4.2.: Gebogene Platte aus Beispiel in [HFH81]. Die Rayleighwelle breitet sich in X_1 -Richtung aus. Die uniaxiale Spannung an der Oberfläche $X_3 = 0$ nehme dabei den Wert $\sigma_{22}|_{X_3=0} = \bar{\sigma}_\perp = -63,75 \text{ MPa}$ an.

Zur Validierung dieses Ausdrucks für die Frequenzverschiebung soll wieder das Beispiel der gebogenen Platte von Hirao [HFH81] herangezogen werden. Das Tiefenprofil der Spannung wurde in diesem Beispiel als lineare Funktion modelliert, die auf der Oberfläche der Platte, auf der sich die Rayleighwelle ausbreitet, den Wert $\bar{\sigma}_\perp$ annimmt. Auf der gegenüberliegenden Seite erreicht sie folglich die Spannung $-\bar{\sigma}_\perp$. Der Spannungszustand ist uniaxial (X_2 -Richtung) und die Welle breitet sich senkrecht dazu, in Richtung des Biegemoments (X_1 -Richtung) aus (Abb. 4.2).

Aus dem Spannungstiefenprofil folgt wegen $(\bar{\epsilon}_{11}, \bar{\epsilon}_{22})_i = (2\mu)^{-1}(-\nu, 1 - \nu)_i \bar{\sigma}$ sofort

$$f(X_3) = 1 + 2\frac{X_3}{d} \quad (4.27)$$

für das Tiefenprofil der Dehnungen, wobei $\bar{\epsilon}_{ij}$ die Dehnung an der Oberfläche $X_3 = 0$ und d die Dicke der Platte bezeichnen. Die Grenzen des den Tensor $I_{rr'}$ definierenden Integrals müssen für dieses Beispiel natürlich angepasst und die Wellenlängen, für die das Modell noch gilt, sinnvoll nach oben hin begrenzt werden. Dann ist

$$kI_{rr'} = \frac{1}{(\alpha_r + \alpha_{r'})kd} \left((\alpha_r + \alpha_{r'})kd - 2 + [2 + (\alpha_r + \alpha_{r'})kd] e^{-(\alpha_r + \alpha_{r'})kd} \right) \quad (4.28)$$

wobei lediglich in den Grenzen von $-d$ bis 0 integriert wurde. Die Frequenzverschiebung ergibt sich dann wieder mit Gl. (4.25).

$$\frac{\delta\omega}{\omega} = -\bar{\epsilon}_{MM}\gamma_{MMrr'}(\alpha_r + \alpha_{r'})kI_{rr'} \quad (4.29)$$

wobei sich der Tensor

$$\tilde{\gamma}_{MNrr'} := [-\bar{N}c]^{-1} \frac{1}{2} (\delta_{Ma}\delta_{NB} + \delta_{MB}\delta_{NA}) S_{iJkLaB} D_{J(r)}^* b_{i(r)}^* D_{L(r')} b_{k(r')} (\alpha_{(r)} + \alpha_{(r')})^{-1} \quad (4.30)$$

lediglich insofern von dem Ausdruck für die Grüneisen-Parameter in isotropen Medien aus Gl. (4.11) unterscheidet, als nicht über die Indizes r und r' summiert wird. Die Geschwindigkeitsänderung bezogen auf den Initialzustand bekommen wir dann wegen $c = L/T$ mithilfe der Relation

$$\frac{\delta c}{c} = \bar{\epsilon}_{11} + \frac{\delta\omega}{\omega}, \quad (4.31)$$

die für $kd \rightarrow \infty$ wieder den Wert des verspannten Halbraumes aus dem vorigen Abschnitt liefert. Ein Vergleich der Ergebnisse mit dem in [Hus85, HK82] entwickelten und in [DH96, Dit97] verfeinerten Modell anhand dieses Beispiels ist in Abb. 4.3 dargestellt. Der numerische Vergleich zeigt die gute Übereinstimmung beider Modelle und soll hier als Validation ausreichen.

Typische Oberflächenbehandlungen wie etwa das Kugelstrahlen, hinterlassen in guter Näherung einen equibiaxialen Spannungszustand, dessen Betrag zur Tiefe hin abnimmt. Wir können also annehmen,

4.3 Einfluss von Spannungsgradienten auf die Rayleighwellendispersion

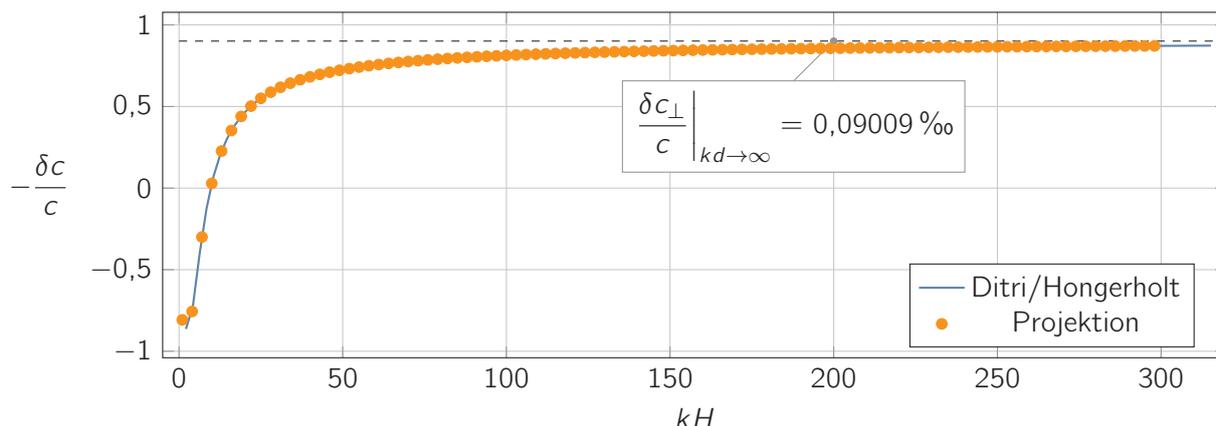


Abbildung 4.3.: Relative Änderung der Phasengeschwindigkeit der sich in Richtung des Biegemoments in Abb. 4.2 ausbreitenden Rayleighwelle für das Modell aus [DH96].

dass der initiale Deformationsgradient die Form

$$\bar{u}_{m,N}^{(i)} = \bar{\epsilon} (\delta_{m1} \delta_{N1} + \delta_{m2} \delta_{N2}) = \begin{pmatrix} \bar{\epsilon} & 0 & 0 \\ & \bar{\epsilon} & 0 \\ & & 0 \end{pmatrix}_{mN} \quad (4.32)$$

besitzt. Als erste grobe Näherung eines möglichen Tiefenprofils wollen wir eine Stufenfunktion

$$f(X_3) = H(X_3 + d) - H(X_3) \quad (4.33)$$

mit der Heaviside-Funktion H annehmen. Das Integral lässt sich dann einfach lösen und die relative Frequenzverschiebung mithilfe der Grüneisen-Parameter als

$$\frac{\delta \omega}{\omega} = -\bar{\epsilon} (\delta_{MN} - \delta_{M3} \delta_{N3}) \left(\gamma_{MN} - \tilde{\gamma}_{MNr'r'} e^{-[\alpha_r + \alpha_{r'}]kd} \right) \quad (4.34)$$

darstellen. Man erkennt sofort, dass die Frequenzverschiebung verschwindet, sobald die Schichtdicke gegen Null geht und dass wir im Fall einer unendlich dicken Schicht den Ausdruck für einen homogen gespannten Halbraum erhalten.

Aus minimal invasiven Messungen wie der Bohrlochmethode oder der Röntgendiffraktion mit sukzessiver Schichtabtragung ist bekannt [KBS⁺09, KBBB10], dass das Spannungsprofil einer kugelgestrahlten Probe sein absolutes Maximum nicht an der Oberfläche erreicht, sondern etwas unterhalb der Oberfläche. Mit zunehmender Tiefe fällt diese Druckspannung in guter Näherung monoton ab. Die für das Kräftegleichgewicht nötigen Zugspannungen verteilen sich über den Rest der Probentiefe und können bei der Untersuchung des Einflusses auf darüberlaufende Rayleighwellen vernachlässigt werden. Im Hinblick auf das inverse Problem erscheint es daher legitim, das Spannungsprofil als stückweise linear anzunähern. Wir möchten das Vorwärtsproblem deshalb auch für diesen Fall untersuchen. Das Tiefenprofil lautet in dieser Näherung

$$f(X_3) = \begin{cases} a_0 + \frac{1 - a_0}{d_1} X_3 & d_1 < X_3 \leq 0 \\ 1 - \frac{1}{d_2 - d_1} (X_3 - d_1) & d_2 < X_3 \leq d_1 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (4.35)$$

4 Inversionsalgorithmen zur Eigenspannungsbestimmung

mit den für die Oberflächenbehandlung spezifischen und später zu bestimmenden Konstanten a_0 , d_1 und d_2 , die die bezüglich des Maximums relative Dehnung an der Oberfläche, die Tiefe des Maximums der Druckspannung (bzw. Dehnung) und die Stelle angeben, an der das Spannungsprofil im wesentlichen abgeklungen ist. Die relative Frequenzverschiebung lautet nun

$$\frac{\delta\omega}{\omega} = -\bar{\epsilon} (\delta_{MN} - \delta_{M3}\delta_{N3}) \{a_0\gamma_{MN} + \tilde{\gamma}_{MNRr'}I_{rr'}\} \quad (4.36)$$

mit dem Tensor

$$I_{rr'} := [k(\alpha_r + \alpha_{r'})]^{-1} \left\{ \frac{(a_0 - 1)}{d_1} [1 - e^{(\alpha_r + \alpha_{r'})kd_1}] + \frac{1}{d_2 - d_1} [e^{(\alpha_r + \alpha_{r'})kd_1} - e^{(\alpha_r + \alpha_{r'})kd_2}] \right\}, \quad (4.37)$$

wobei die Summenkonvention auf der rechten Seite der Definition implizit außer Kraft gesetzt wurde. Legen wir das Maximum auf die Oberfläche ($d_1 \rightarrow 0$), so ergibt sich für die Frequenzverschiebung

$$\frac{\delta\omega}{\omega} = -\bar{\epsilon} (\delta_{MN} - \delta_{M3}\delta_{N3}) \left(\gamma_{MN} + \tilde{\gamma}_{MNRr'} [k(\alpha_r + \alpha_{r'})]^{-1} \frac{1}{d_2} [1 - e^{(\alpha_r + \alpha_{r'})kd_2}] \right), \quad (4.38)$$

womit wir im Falle einer unendlich ausgedehnten Spannungszone ($d_2 \rightarrow 0$) wieder den Ausdruck für einen homogen equibiaxial gespannten Halbraum erhalten.

Im Hinblick auf das inverse Problem, d.h. die Bestimmung des Tiefenprofils f aus den gemessenen Frequenzverschiebungen bzw. Dispersionsdiagrammen, ist es sinnvoll, Gl. (4.36) im Grenzfall kleiner und großer Frequenzen zu betrachten. Für hinreichend große Frequenzen ist der zweite Term in der Klammer vernachlässigbar und die Frequenzverschiebung wird lediglich durch die Dehnung $a_0\bar{\epsilon}$ an der Oberfläche bestimmt. Physikalisch erklären lässt sich das durch die verringerte effektive Eindringtiefe der Rayleighwelle für hohe Frequenzen. Diese ist dann so gering, dass bereits ein kleiner Teil unterhalb der Oberfläche als Halbraum angesehen werden kann, in dem die Spannung konstant ist. Wird die Wellenlänge dagegen sehr groß, so wächst auch die Eindringtiefe der Welle und der Einfluss des Spannungsgradienten auf die Ausbreitung der Welle wird zunehmend unbedeutender. Die relative Frequenzverschiebung verschwindet also für $k \rightarrow 0$.

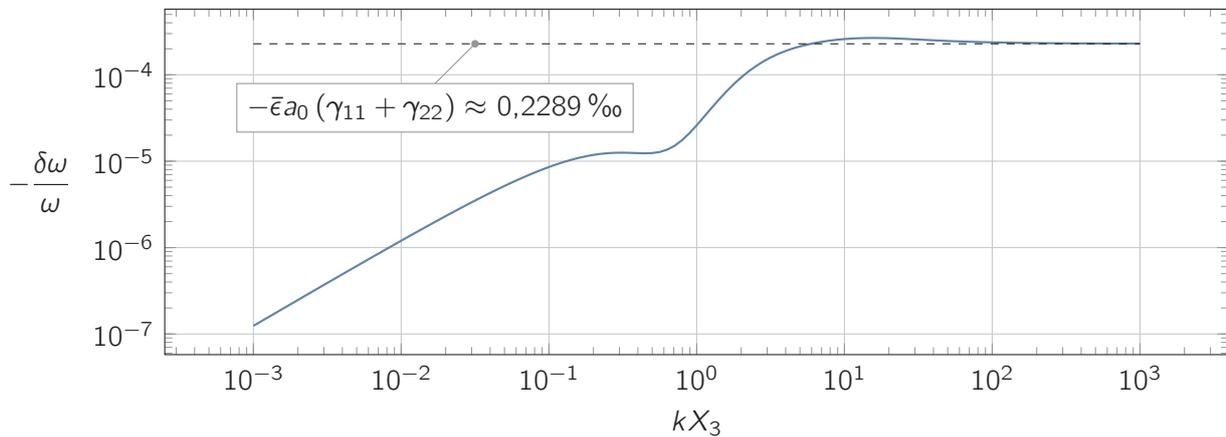


Abbildung 4.4.: Betrag der relativen Frequenzänderung für In718 im Falle eines stückweise linearen Vorspannungsprofils ($a_0 = 0,8$; $kd_1 = 0,2$; $kd_2 = 2$) für eine Oberflächendehnung von $\bar{\epsilon} = 10^{-4}$.

4.4. Bestimmung von Spannungsgradienten aus Dispersionsmessungen

Im vorigen Abschnitt haben wir zu einem gegebenen Tiefenprofil der Vorspannung bzw. des initialen Verschiebungsgradienten die Frequenzverschiebung und die daraus resultierende Phasengeschwindigkeit

4.4 Bestimmung von Spannungsgradienten aus Dispersionsmessungen

keitsänderung berechnet. Hier soll nun dieser Zusammenhang invertiert werden und das Spannungsprofil aus Dispersionsmessungen bzw. gegebenen Dispersionskurven bestimmt werden. Den Ausgangspunkt bildet wiederum Gleichung (4.24). Da wir nun das unter dem Integral stehende Tiefenprofil suchen, handelt es sich um eine Integralgleichung für f , genauer um eine Fredholmsche Gleichung erster Art der Form

$$\frac{\delta\omega}{\omega}(k) = \int_{-\infty}^0 K(kX_3) f(X_3) dX_3. \quad (4.39)$$

Die Unbekannte erscheint hier nur im Integranden und darüberhinaus sind die Integrationsgrenzen unabhängig vom Argument des Tiefenprofils. Das Integral hat dabei glättende Eigenschaften, d.h. Oszillationen in der Funktion f werden in der rechten Seite nur gedämpft wiedergegeben. Bei der Inversion der Gleichung werden dagegen beliebig kleine Fehler in der rechten Seite beliebig verstärkt [EHN00].

Um das unbekannte Profil zu finden, entwickeln die Autoren in [DH96] die Vorspannung bzgl. der Tiefe X_3 . Das führt sie letztendlich auf einen Ausdruck, der als Entwicklung bzgl. der inversen Frequenzen ω^{-1} angesehen werden kann. Eine Entwicklung der Messdaten nach ebendiesen Termen und ein anschließender Koeffizientenvergleich liefert damit die Lösung. Für ein Dreiecksprofil

$$\sigma(\xi) := \begin{cases} \frac{\sigma_1 - \sigma_0}{a_1} \xi + \sigma_0, & 0 \leq \xi < a_1 \\ \frac{-\sigma_1}{a_2 - a_1} (\xi - a_1) + \sigma_1, & a_1 \leq \xi < a_2 \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (4.40)$$

mit einer Oberflächenspannung von $\sigma_0 = -900$ MPa, einer Spitzenspannung von $\sigma_1 = -1100$ MPa bei $a_1 = 50$ μm und dem Abklingen bei $a_2 = 330$ μm ist das Resultat der Inversion der Vorwärtsrechnung in Abb. 4.5 dargestellt [RBR⁺11].

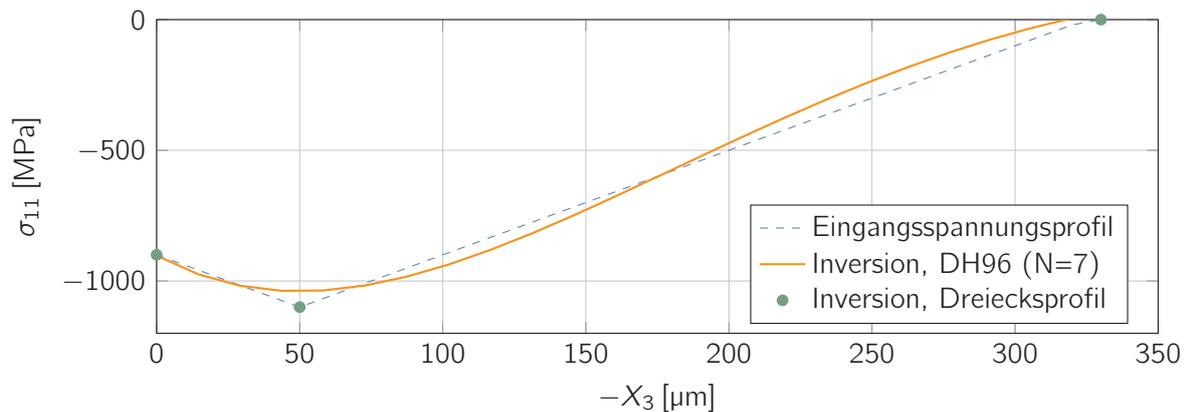


Abbildung 4.5.: Eingangsspannungsprofil und invertiertes Profil mit Reihenansatz aus [DH96] für $N = 7$ sowie mit stückweise stetigem Dreiecksprofil. Letzteres liefert nahezu die exakte Lösung.

Der Polynomgrad wurde hier auf $N = 7$ gesetzt und zeigt für diese Wahl eine gute Übereinstimmung. Die Erhöhung des Polynomgrades N führt aber zu höheren Potenzen der involvierten Frequenzen und damit zu einer stetigen Verschlechterung der Kondition der Koeffizientenmatrix und diese wiederum zu einer oszillierenden Lösung für höhere Polynomgrade. Darüber hinaus werden Störungen in der rechten Seite, d.h. in den Messdaten, umso mehr verstärkt, je schlechter die Kondition der Matrix ist. Man sollte N daher so groß wie nötig aber so klein wie möglich wählen.

Es ist solchen Problemen also zuträglich, die Anzahl der involvierten Unbekannten nach Möglichkeit zu reduzieren. Wir wissen aus Eigenspannungsmessungen mit etablierten Methoden, dass das Eigenspannungsprofil gestrahlter Proben in etwa die in Abb. 4.5 dargestellte Dreiecksform hat. Sofern wir dieses Vorwissen voraussetzen können, reduziert sich die Anzahl der unbekanntem Profilparameter auf vier [RBR⁺13]. Das Resultat der Inversion mit dem gleichen Vorwärtsmodell aber dem Ansatz für das Tiefenprofil aus Gleichung (4.40) ist ebenfalls in Abb. 4.5 dargestellt. Bereits bei der Einbeziehung von lediglich vier zufällig gewählten Punkten der Vorwärtsrechnung ist das Resultat bis auf Rundungsfehler exakt, was aber angesichts der Tatsache, dass dasselbe Modell für Vor- und Rückrechnung benutzt wurde, nicht überrascht und eher als Test dient.

Die Tatsache, dass sich in [DH96] aus dem Reihenansatz für die Spannung bzgl. Potenzen der Tiefe eine Reihe über Potenzen der Frequenz ergibt, motiviert den Autor in [Dit97] dazu, die Mellin-Transformation [Sne61] zu benutzen. Man bekommt eine Gleichung für die transformierte Spannung und das gesuchte Profil somit über eine Rücktransformation der Bildfunktion.

Die Schlechtgestelltheit des inversen Problems ist aufgrund der Form des Integralkerns K ein inhärentes Problem der Integralgleichung (4.39). Die Autoren in [RBMK05] begegnen dieser Tatsache mit der Feststellung, dass die effektive Eindringtiefe der Rayleighwelle in etwa ihrer Wellenlänge entspricht. Diese Annahme ermöglicht es, die Untergrenze in (4.39) durch die (negative) Wellenlänge zu ersetzen. Damit ist auch die Integralgrenze frequenzabhängig und man erhält eine Volterrasche Integralgleichung (VIG) erster Art. Mithilfe partieller Integration kann diese dann noch in eine VIG zweiter Ordnung umgewandelt werden.

Nicht nur Eigenspannungen beeinflussen die Dispersion von Rayleighwellen. Allgemeine Inhomogenitäten wie etwa Störungen der SOEC können ebenfalls eine Frequenzabhängigkeit der Phasengeschwindigkeit hervorrufen. In [TART87, Ric77, RT77] nutzen die Autoren diese Tatsache, um Änderungen linearer Materialeigenschaften mithilfe der von Auld [Aul90] entwickelten Störungstheorie zu bestimmen.

4.5. Dispersionsmessungen mit HUGO III

Laservibrometrische Messungen der Rayleighwellendispersion sind aufwendig und deren Auswertung zeitintensiv. Aus diesem Grund wurden die Dispersionsmessungen in dieser Arbeit mit einem Ultraschallgoniometer namens *HUGO III* (**H**igh Precision **U**ltrasound **G**oniometer, **V**ersion **III**) durchgeführt [BKK⁺11]. Der für das Messprinzip wesentliche Teil des Instruments besteht aus zwei schwenkbar gelagerten Prüfköpfen (Sender und Empfänger), die auf einen gemeinsamen Messpunkt auf ihrer Rotationsachse zeigen. In diesem wird die Oberfläche des zu untersuchenden Objekts platziert (Abb. 4.6). Zur groben Ausrichtung dienen dabei zwei Laserpointer (grün und rot), die Feinausrichtung erfolgt über die Laufzeit von Sender zum Empfänger. Befindet sich die Rotationsachse auf der Probenoberfläche, so ist die Laufzeit unabhängig vom Einschallwinkel. Es handelt sich um eine immersive Technik, d.h. sowohl Prüfköpfe als auch Probe befinden sich während der Messung im Wasser.

Der Empfängerprüfkopf ist darüber hinaus auf einer Linearachse gelagert, kann also horizontal verschoben werden, um auch Messungen im *Dunkelfeld* zu ermöglichen und direkte Reflexionen nach Möglichkeit zu unterdrücken. Beide Wandler können auch getrennt voneinander geschwenkt werden und der Empfängerprüfkopf im S/E-Modus betrieben werden. Zu den Details des Aufbaus und den einzelnen Modi sei hier auf [BKK⁺11] verwiesen.

Der in dieser Arbeit meistgenutzte Modus ist die Hellfeldmessung (α -Scan), die in Abb. 4.6 dargestellt ist und oben bereits beschrieben wurde. Nach der Feinjustierung der Probe wird der Einschallwinkel α variiert und das reflektierte Signal unter dem gleichen Winkel aufgenommen.

Die gemessenen Zeitsignale (A-Bild) werden danach für jeden Winkel in den Frequenzraum transformiert und die gewonnenen Spektren aneinandergereiht. Man erhält so eine Art B-Bild (Goniome-

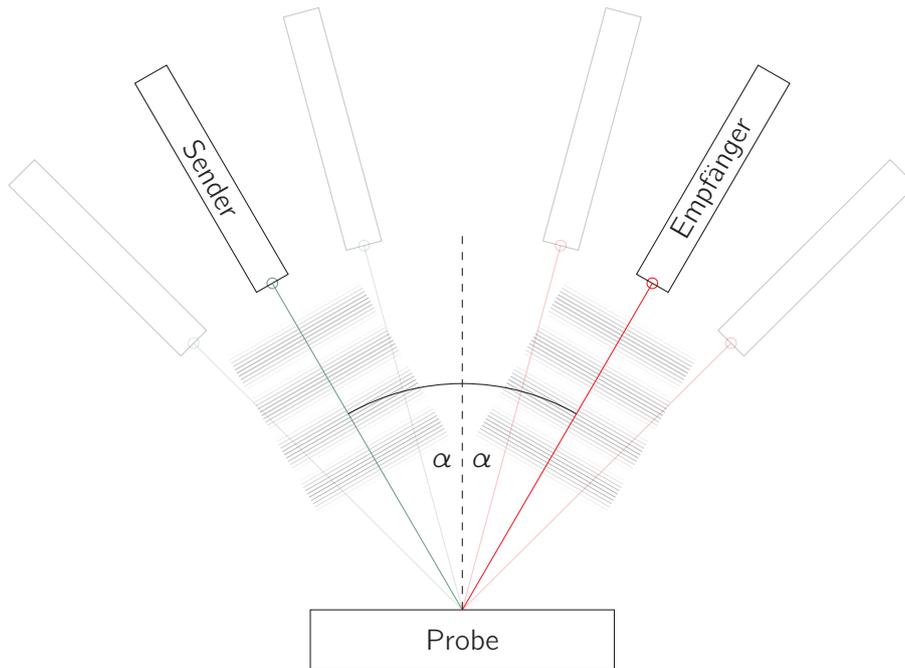


Abbildung 4.6.: Schematischer Aufbau des Ultraschallgoniometers *HUGO III* mit Sende- und Empfangsprüfkopf sowie Probe. Bei der hier dargestellten Messung im Hellfeld (α -Scan) zeigen beide Prüfköpfe auf dieselbe Stelle an der Oberfläche der Probe während der Einschallwinkel variiert wird.

terspektrum), wobei die Scanposition durch den Einschallwinkel α zu ersetzen ist und anstatt des Zeitsignals das Amplitudenspektrum für den jeweiligen Winkel herangezogen wird. Im Goniometerspektrum wird also jedem Punkt (α, f) , wobei f die Frequenz bezeichne, die Amplitude von f im Spektrum des jeweiligen Zeitsignals zugeordnet.

Nun wird für jede dieser Frequenzen das Amplitudenminimum über die Einschallwinkel gesucht. Man sucht das Minimum, da man davon ausgeht, dass zur Erzeugung einer Oberflächenwelle Energie nötig ist, womit sich die Amplitude der reflektierten Welle am Empfänger verringert [Rol65, RLF68]. Mithilfe des Winkels, an dem das Minimum erreicht wird und des Snellius'schen Brechungsgesetzes kann dann die Phasengeschwindigkeit der Rayleighwelle an der betrachteten Frequenz bestimmt werden. Als Resultat erhalten wir eine Darstellung der Phasengeschwindigkeit in Abhängigkeit von der Frequenz – das gesuchte Dispersionsdiagramm – die wir dann für weitere Betrachtungen benutzen.

Kugelstrahlen

Eine wohlbekannte Art der Oberflächennachbehandlung von Triebwerkskomponenten ist das Kugelstrahlen, bei dem das Material mit kleinen Kügelchen hoher Geschwindigkeit beschossen wird. Dabei wird das Material plastisch verformt und es verbleiben Eigenspannungen im Material, die in der Nähe der Oberfläche kompressiver Natur sind und zur Tiefe hin abklingen. Die maximale Druckspannung wird dabei leicht unterhalb der Oberfläche erreicht, wobei die Spannungsspitze mit zunehmender Kaltverformung, d.h. mit zunehmender Strahlintensität, zur Oberfläche hin wandert [SRP96]. Neben dem für diesen Einsatzzweck zuträglichen Effekt der Verspannung der Oberfläche ändert das Material infolge der plastischen Verformung seine Eigenschaften. Insbesondere ändern sich die elastischen Konstanten und auch die Rauheit der Oberfläche nimmt im Allgemeinen zu. Diese Effekte beeinflussen die Rayleighwellengeschwindigkeit ebenso wie die Eigenspannungen.

In Abb. 4.7 sind Dispersionskurven für verschieden behandelte Proben aus In718 abgebildet. Zwei der drei Proben wurden mit unterschiedlichen Almenintensitäten kugelgestrahlt (13 A, 5 A) und alle

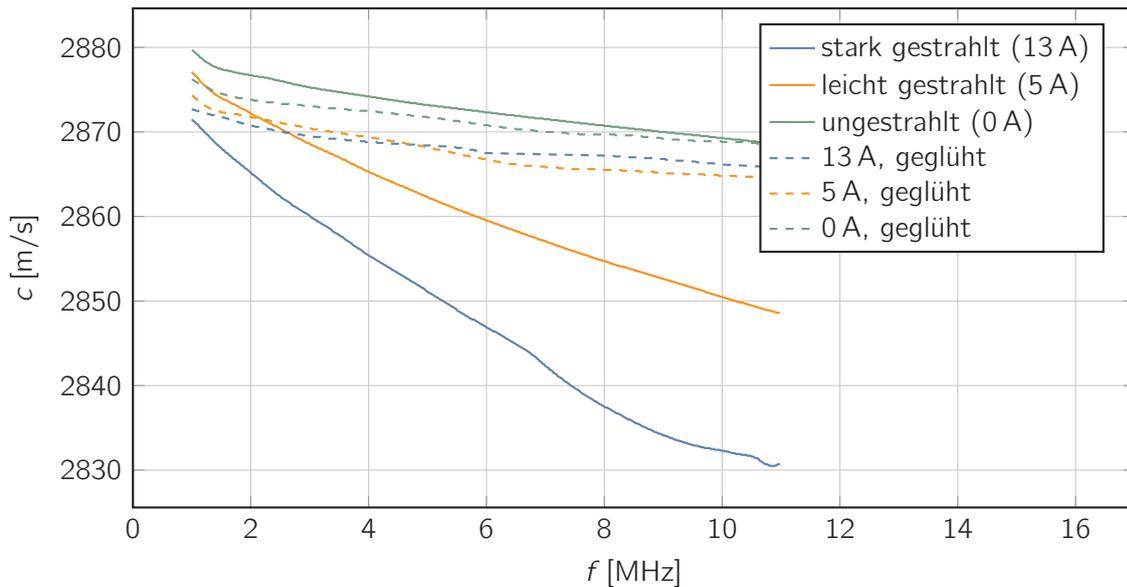


Abbildung 4.7.: Dispersionsdiagramme für verschieden stark kugelgestrahlte Proben aus In718, die daraufhin ausgeglüht und erneut vermessen wurden.

drei Proben nach der Vermessung ausgeglüht. Es ist zu erkennen, dass die Dispersion mit steigender Almenintensität zunimmt und dass sie nach dem Ausglühen wieder den Verlauf der Referenzprobe (0 A) annimmt. Da wir erwarten, dass die Eigenspannungen bei dieser Art des Spannungsarmglühens relaxieren, liegt die Vermutung nahe, die Dispersion als spannungsinduzierten Effekt zu betrachten. Es ist jedoch zu beachten, dass es während des Ausglühens auch zur Rekristallisation kommen kann. Die elastischen Eigenschaften des Materials können sich somit ebenfalls wieder ändern und in ihren Ausgangszustand zurückkehren.

Das Spannungsprofil der hiesigen Proben wurde daher zu Referenzzwecken mit der Bohrlochmethode sowie über Röntgendiffraktion vermessen [KBBB10, KBS⁺09]. Man erkennt dort den oben bereits beschriebenen charakteristischen Eigenspannungsverlauf kugelgestrahlter Proben, die an ein Dreieck erinnern und hier deshalb als Dreiecksprofil bezeichnet werden. Die erwartete Dispersionskurve im Falle eines Dreiecksprofils haben wir für In718 bereits oben berechnet und vorher für einen homogenen Halbraum abgeschätzt. Die relative Geschwindigkeitsänderung war dort $\leq 10^{-3}$, während wir hier für die mit 13 A gestrahlte Probe eine maximale relative Änderung von etwa 1% bekommen. Die Eigenspannungen allein können eine derart hohe Dispersion nicht hervorrufen.

Zur Untersuchung von Textureinflüssen wurde ein weiterer Satz Proben aus In718 unidirektional geschliffen und die Dispersion parallel und senkrecht zur Schleifrichtung gemessen. In Abb. 4.8 sieht man den Einfluss der Schleifrichtung auf die Ausbreitung der Rayleighwelle. Der Profilverlauf ist nahezu unabhängig von der Schleifrichtung, jedoch ändert sich die absolute Phasengeschwindigkeit der Welle. Die Änderung der Absolutgeschwindigkeit kann auch auf geänderte Umgebungsparameter, vor allem die Wassertemperatur, zurückzuführen sein. Die beiden Messungen an unterschiedlichen Messpositionen auf ein und derselben gestrahlten Probe zeigen jedoch auf die gute Reproduzierbarkeit der Messungen sowie auch auf Homogenität innerhalb der Probe.

Laser-Shock-Peening

Neben Spannung, plastischer Verformung und Textur trägt auch die Oberflächenrauheit zur Dispersion bei [EM83a, EM83b, ML94, RN03]. Für LSP-behandelte Bauteile erwarten wir eine gegenüber dem Kugelstrahlen geringere Rauheit nach der Behandlung [SLL⁺07, SDRN10, DZLL16]. Aus diesem

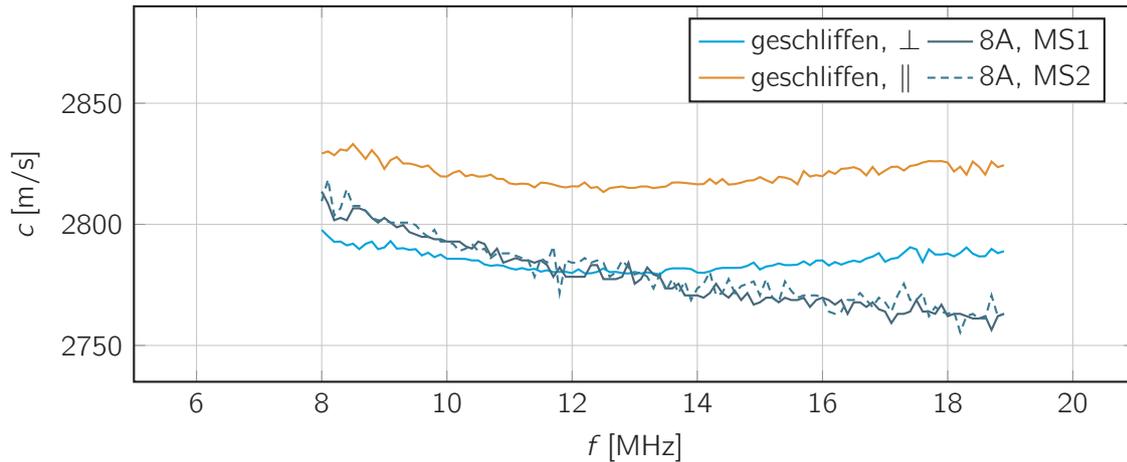


Abbildung 4.8.: Dispersion auf geschliffener und gestrahlter Probe. Die Ausbreitungsrichtung der Rayleighwelle wurde senkrecht bzw. parallel zur Schleifrichtung gewählt und die gestrahlte Probe an zwei Messpositionen vermessen.

Grund wurde ein weiterer Satz Proben aus In718 durch die *Metal Improvement Company* mit diesem Verfahren behandelt. Es wurden 70 mm lange Blöcke mit einer Querschnittsfläche von $30 \times 30 \text{ cm}^2$ poliert und anschließend mit dem Laser behandelt. Der Anregungspunkt hatte dabei einen Durchmesser von etwa 3 mm und wurde mit einem 18 ns langen Puls angeregt. Um verschiedene Spannungsprofile zu generieren, wurden die Proben mit unterschiedlicher Einstrahlungsstärke bestrahlt [RBR⁺13].

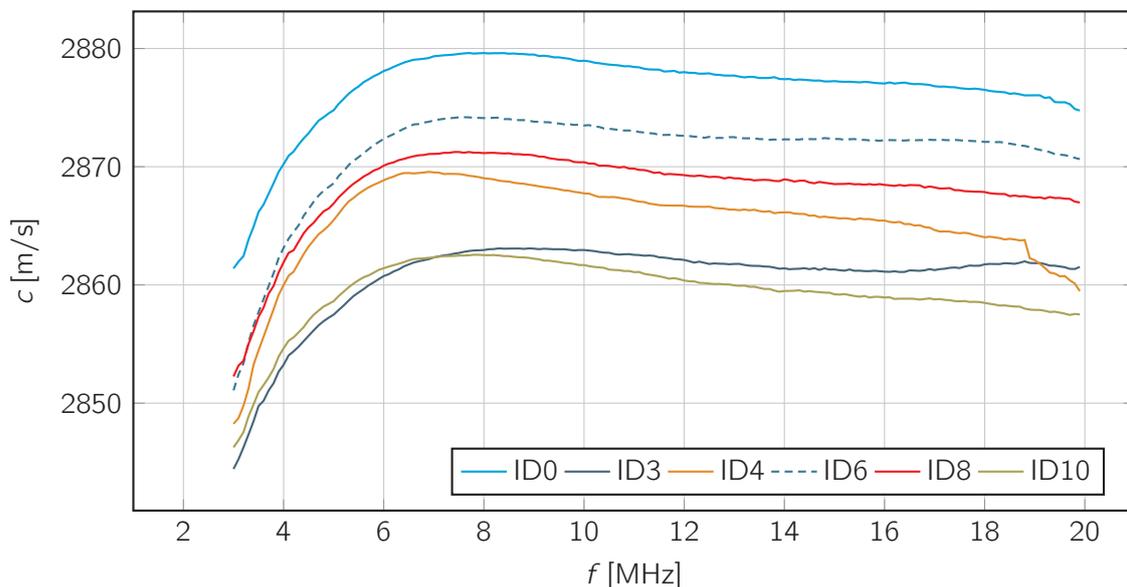


Abbildung 4.9.: Dispersionsdiagramme für verschieden stark LSP-behandelte Proben aus In718. Die ID-Nummer entspricht dabei der Einstrahlungsstärke in GW/cm^2 .

Die Dispersionskurven zeigen alle den annähernd gleichen Verlauf. Für Frequenzen unterhalb von 8 MHz sind die Dispersionserscheinungen am größten. Das kann darauf hindeuten, dass die verfestigte Randzone beim LSP stärker ausgeprägt, d.h. dicker ist. Der nahezu konstante Verlauf für Frequenzen zwischen 8 MHz und 20 MHz und damit für die ca. $400 \mu\text{m}$ dicke Schicht unterhalb der Oberfläche ist ein weiterer Indikator für diese These. Man sieht jedoch auch, dass sich der Absolutwert der

4 Inversionsalgorithmen zur Eigenspannungsbestimmung

Phasengeschwindigkeit im Bereich von 8 MHz bis 20 MHz nicht monoton mit der Einstrahlungsstärke ändert. Das können einerseits schwankende Umwelteinflüsse sein. Andererseits ist es möglich, dass es durch die mehrmalige Bestrahlung zu partieller Rekristallisation an der Oberfläche kommt und der Gesamtverfestigungszustand, d.h. auch die Materialparameter, damit variieren.

Einfluss plastischer Verformung

Um in etwa abschätzen zu können, wie groß der Einfluss plastischer Verformungen auf die Dispersion ist, wurde etwa in [CRBEA99] die Versetzungsdichte eines kohlenstoffarmen Stahls (SAE 1010) im unbehandelten Zustand und nach Bestrahlung gemessen. Für das Kugelstrahlen ergab sich in etwa eine Verzwanzigfachung der Versetzungsdichte Λ im unbehandelten Material. Die in [MCE⁺12] angeordneten Messungen führten bei einer Versechsfachung der Versetzungsdichte zu einer Änderung von C_{11} um etwa 1–2 GPa und von C_{44} um weniger als 1 GPa. Für das Kugelstrahlen käme man mit dieser Abschätzung auf eine Änderung der SOEC von $\Delta C_{11}(\text{SP}) < 6 \text{ GPa}$ bzw. $\Delta C_{44}(\text{SP}) < 3 \text{ GPa}$. Für In718 wären solche Änderungen zwar gering, entsprächen aber einer Änderung der Rayleighwellengeschwindigkeit von ca. 100 m/s gegenüber dem unveränderten Material. Plastische Verformungen spielen somit eine wesentliche Rolle. Zur Eigenspannungsbestimmung reicht es also nicht aus, die Materialparameter des unbehandelten Materials zu kennen. Vielmehr müssen diese quasi *in vivo* am verformten Material bestimmt werden.

Diese These deckt sich mit der am Anfang des Kapitels beschriebenen Wahl des Referenzsystems für die Eigenspannungsuntersuchungen. Die plastischen Anteile, d.h. die elastischen Konstanten des Referenzsystems, müssen vorher bestimmt werden, um Aussagen über den Spannungszustand treffen zu können. Die Frage nach der Änderung der elastischen Konstanten, speziell Änderungen, hervorgerufen durch Mikrorisse im Material, ist daher Inhalt des nächsten Kapitels.

5. Änderung der elastischen Konstanten

Durch das Einbringen von Rissen in das jungfräuliche Material ändern sich dessen elastische Eigenschaften. Betrachten wir etwa einen Körper mit einem Riss und belasten diesen so, dass die Oberflächennormale des Risses parallel zur Krafrichtung orientiert ist, dann ist intuitiv klar, dass die Steifigkeit des Körpers im Druckbereich größer sein muss als im Zugbereich. Die Spannungsantwort des Körpers auf eine lineare Dehnung ist also höchstens stückweise linear und damit insgesamt nichtlinear. Risse können damit eine Ursache für Nichtlinearitäten sein und umgekehrt bieten Nichtlinearitäten somit eine Möglichkeit, eventuelle Risse und deren Verteilung im Medium zu charakterisieren und so Rückschlüsse auf die elastischen Eigenschaften des Körpers zu ziehen.

In diesem Kapitel soll nun die Änderung der elastischen Konstanten infolge von Rissen und deren Verteilung in einem sonst homogenen Körper untersucht werden. Unter Annahme hyperelastischen Materialverhaltens können aus den numerischen Experimenten die Konstanten zweiter und dritter Ordnung etwa für den isotropen Fall extrahiert werden. Auch in den Simulationen konnten physikalische Nichtlinearitäten des Grundmaterials berücksichtigt werden, indem ein zusätzliches Modul für den verwendeten proprietären Löser implementiert wurde.

Dazu wird zunächst ein einfaches analytisches Modell hergeleitet, das neben den rissinduzierten Nichtlinearitäten auch die Gitternichtlinearität des Matrixmaterials und beliebige Rissorientierungsverteilungen berücksichtigt. Die darin auftretenden Parameter können dann mittels Simulationen des Materialverhaltens für bestimmte Rissorientierungen gefunden werden. Ausgehend vom qualitativen Verhalten der rissbehafteten Matrizen werden schließlich einfache mikro-mechanische Modelle und Potentialansätze sowie die daraus folgenden Spannungstensoren diskutiert. Die entsprechenden Modellparameter werden für die entsprechenden vorliegenden Datensätze ausgewertet. Diese effektiven Modelle dienen als Grundlage für die Untersuchung der Wechselwirkung von Oberflächenwellen mit derartigen Materialien im darauffolgenden Kapitel.

5.1. Simulation des elastischen Verhaltens von Medien mit Rissen

Um den Einfluss von Rissen auf die Nichtlinearität des Körpers quantitativ zu erfassen und die Größenordnung rissinduzierter Nichtlinearitäten abschätzen zu können, wurden Simulationen an Würfeln (Kantenlänge w) durchgeführt, die aus 125 kleineren Einzelwürfeln (Kantenlänge $w/5$) zusammengesetzt waren. Jeder dieser Einzelwürfel beinhaltet einen zufällig orientierten Riss (Abb. 5.1, links). Die Maße des Modells sind in Tabelle 5.1 angegeben. Sofern nicht anders vorausgesetzt, sind die Rissorientierung in allen Simulationen gleichverteilt. Da das Verhalten des Matrixmaterials als isotrop mit den Materialparametern in Tabelle 5.2 modelliert wurde, kann auch das Verhalten des Gesamtkörpers in diesem Fall als makroskopisch isotrop vorausgesetzt werden. Die Einzelkontakte wurden zunächst als flache, geschlossene aber nicht verbundene Kreisscheiben (Kissing Bond) modelliert (Abb. 5.1, rechts oben). Für die Umsetzung im Simulationsmodell wurden dafür jeweils zwei identische Sätze aufeinanderliegender Knoten auf einer beliebig orientierten, durch den Mittelpunkt des Einzelwürfels verlaufenden Fläche generiert.

Zur Erzeugung dieser Fläche wurde das Koordinatensystem temporär für jeden Einzelwürfel in den Mittelpunkt desselben verschoben und danach in eine vorher festgelegte Richtung gedreht. Dazu wurden verschiedene Sätze von jeweils 125 Paaren von Winkeln θ_{XY} und θ_{YZ} zufällig generiert, die die Orientierung der jeweiligen Rissnormalen \mathbf{N} beschreiben. Jeder Einzelwürfel wurde dann mithilfe der

5 Änderung der elastischen Konstanten

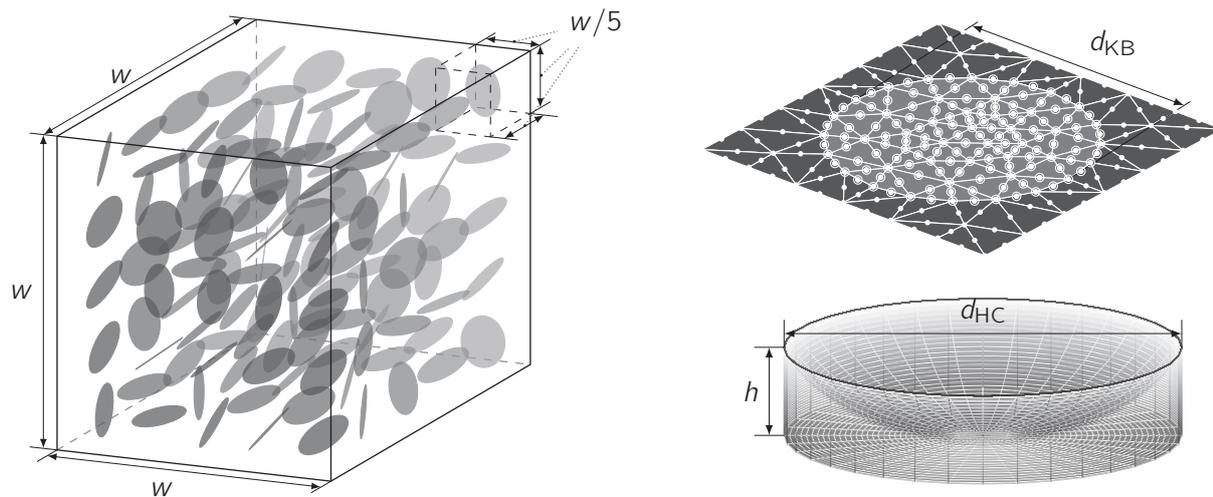


Abbildung 5.1.: Gesamtwürfel aus $5 \times 5 \times 5$ Einzelwürfeln mit zufällig orientierten, homogen verteilten Pfennigrissen (links), Element- und Knotendarstellung des FE-Netzes eines Kissing Bond (rechts, oben) und verzernte Darstellung eines im Modell verwendeten Hertzischen Kontakts. Die eingekreisten Punkte in der Mitte stellen die Rissknoten dar, d.h. es handelt sich jeweils um ein Paar im Ausgangszustand kongruenter Knoten.

so definierten $X''Y''$ -Ebene geschnitten und der Riss im Zentrum dieser Ebene generiert. In Abb. 5.2 sind die Drehwinkel sowie eine den Riss symbolisierende Kreisscheibe mit Flächennormale \mathbf{N} , parallel zur Z'' -Richtung, eingezeichnet. Alle Knoten, die außerhalb einer definierten Kreisscheibe mit Durchmesser d_{KB} um den Würfelmittelpunkt lagen, wurden danach miteinander *verschmolzen*, sodass sich lediglich die innerhalb des Kreises befindlichen Knoten voneinander weg bewegen konnten und der Riss atmen, d.h. sich öffnen, konnte. Eine Überschneidung der Rissknoten war dabei unzulässig (*Lagrange on contact normals*) bzw. wurde durch eine Nebenbedingung bestraft (*augmented Lagrange*). In Abb. 5.1 bilden die äußeren Knoten zwar näherungsweise ein Quadrat. Da die Risse jedoch zufällig orientiert sind, bildet die konvexe Hülle der äußeren Knoten im Allgemeinen einen beliebigen Würfelschnitt.

Tabelle 5.1.: Maße der in den Simulationen verwendeten Strukturen. Für einen besseren Überblick wurden auch die Formelzeichen angegeben.

Bezeichnung	Formelzeichen	Wert
Kantenlänge des Gesamtwürfels	w	5×5
Kantenlänge des Einzelwürfels	$w/5$	5
Rissdurchmesser des Kissing Bond	d_{KB}	3
Rissdurchmesser des Hertzischen Kontakts (HC)	d_{HC}	$0,96(w/5) = 4,8$
Höhe der kleinen Zylinder zur HC-Modellierung	h	$\frac{\sqrt{3}}{100}(w/5) = 8,66 \cdot 10^{-2}$

Aufgrund der Rauheit der Rissoberfläche realer Mikrorisse ist weniger von sprungartigem Auf- und Zuklappen als vielmehr von einer stetigen Öffnung und Schließung derselben auszugehen. Es liegt nahe, die Rauheit effektiv durch die Einführung Hertzischer Kontakte (Abb. 5.1, rechts unten) zu erfassen. Wie im Falle der flachen Risse wurde zur Modellierung der Hertzischen Kontakte der Einzelwürfel zunächst mittels einer beliebig orientierten, durch den Mittelpunkt verlaufenden Ebene geschnitten. Danach wurde aus dem Würfel ein ebenfalls im Mittelpunkt des Würfels zentrierter Zylinder mit der Höhe h und dem Durchmesser d_{HC} ausgeschnitten, dessen Deckflächen parallel zur Schnittebene

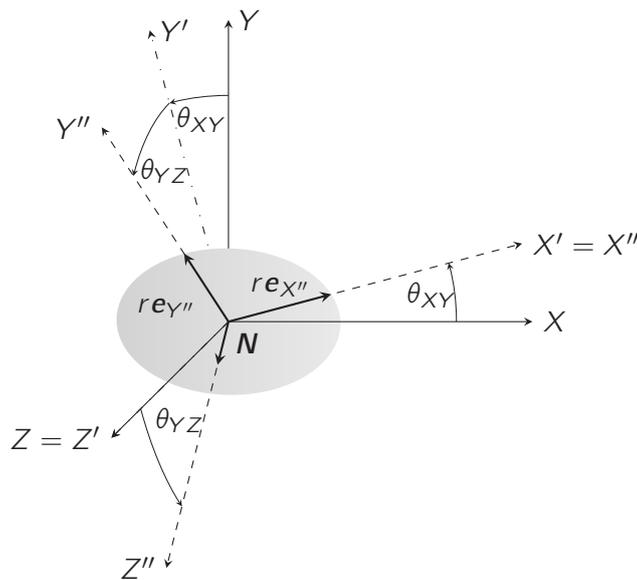


Abbildung 5.2.: Konvention für die Drehung des Koordinatensystems in ANSYS ©. Zunächst wird diese mit dem Winkel θ_{XY} um die (lokale) Z-Achse gedreht, danach folgt die Drehung um die neue X-Achse X' mit dem Winkel θ_{YZ} . Die neue Arbeitsfläche, die zugleich die Schnittebene für den Würfelschnitt definiert, liegt dann in der $X''Y''$ -Ebene. Beispielhaft wurde ein in dieser Ebene liegender Riss mit Radius r eingezeichnet.

orientiert waren. In diesen Hohlraum wurde anschließend wieder ein Kugelsegment eingefügt, dessen Basiskreis gleich einer der Deckflächen des Zylinders war. Die Höhe des Kugelsegments musste aufgrund programmbedingter Einschränkungen etwas kleiner als h gewählt werden, was zu einer kleinen Lücke zwischen Kugelspitze (Kontaktfläche) und gegenüberliegender Deckfläche (Zielfläche) führte (siehe unten).

Im Gegensatz zum Kissing Bond ändert sich die Auflagefläche beim Zusammendrücken des Kontaktes stetig, sodass sich die Steifigkeit des Gesamtsystem asymptotisch der des Grundmaterials annähert. Der im Falle von Kissing Bonds erwartete Knick in der Spannung-Dehnung-Kurve sollte hier also weniger stark ausgeprägt sein.

Tabelle 5.2.: SOEC und TOEC des in den Simulationen verwandten Matrixmaterials. Satz 1 wurde in den ersten Simulationen ohne Gitternichtlinearität verwendet und wird im Folgenden auch als linearer Satz bezeichnet.

Satz	λ [GPA]	μ [GPA]	l [GPA]	m [GPA]	n [GPA]	ν_1 [GPA]	ν_2 [GPA]	ν_3 [GPA]
1	115,4	76,9	-	-	-	-	-	-
2	123,0	80,0	-527,0	-605,0	-479,0	-323,0	-365,5	-119,8

Im Simulationsmodell befand sich eine Ecke des Gesamtwürfels im Ursprung, etwa die hintere linke Ecke der Unterseite in Abb. 5.1. Das Koordinatensystem wurde entsprechend Abb. 5.3 (rechts) gewählt. Die Koordinatenachsebenen, d.h. die Ebenen $x_1 = 0$, $x_2 = 0$ und $x_3 = 0$ stellen Symmetrieebenen dar, sodass in den Simulationen lediglich ein Achtel eines größeren Gesamtsystems berechnet wurde (Abb. 5.3, links). In den Simulationen mit einer freien und einer fixierten Seite wurde die Fläche $X_3 = w$ geklemmt und die Fläche $X_2 = w$ als freie Oberfläche modelliert (Abb. 5.3, rechts). Darüber hinaus wurden auch Simulationen mit zwei freien Oberflächen bzw. zwei geklemmten Oberflächen

5 Änderung der elastischen Konstanten

durchgeführt oder zwei Seiten simultan mit der Seite $X_1 = w$ verschoben. An letzterer wurde jedoch stets die Verschiebung in mehreren Lastschritten von Druck ($u_1 < 0$) bis Zug ($u_1 > 0$) vorgegeben. Die Symmetrieebenen sind in allen Simulationen dieselben. Außerdem wird üblicherweise die Seite $X_1 = w$ verschoben. Diese Randbedingungen werden im Folgenden als *übliche Randbedingungen* bezeichnet. Wenn also von zwei freien Seiten die Rede ist, so sind damit die Seiten $X_2 = X_3 = w$ gemeint. Die Koordinatenebenen sind dabei fixiert und die Verschiebung wird bei $X_1 = w$ vorgegeben.

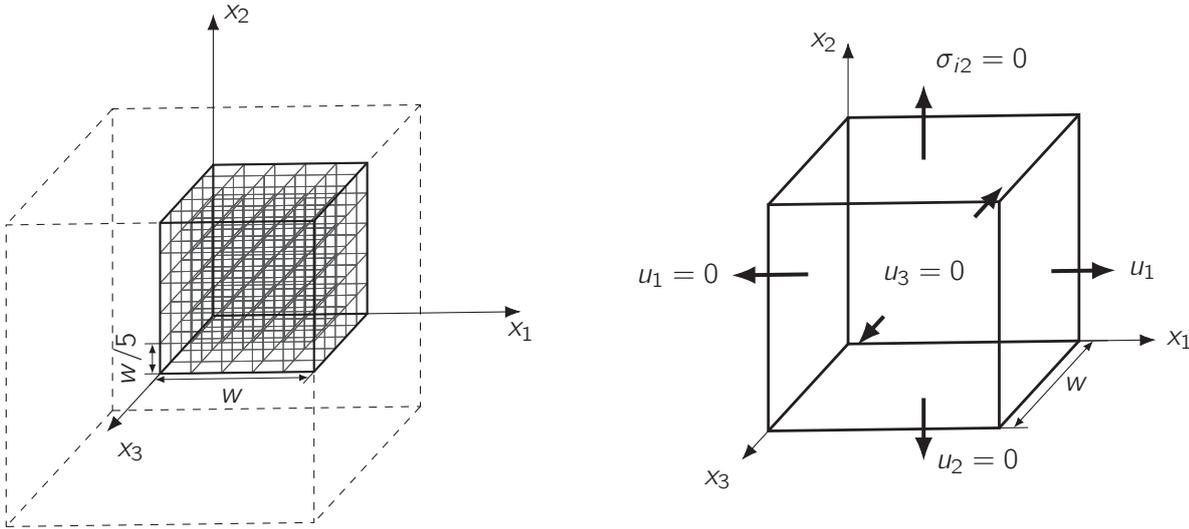


Abbildung 5.3.: Geometrie für das FE-Modell, bestehend aus 125 Einzelwürfeln (links), wobei aufgrund der Symmetrieebenen (rechts) nur ein Achtel des eigentlichen Würfels simuliert wurde. Die Verschiebung wurde auf einer Seite ($X_1 = w$) vorgegeben. Von den verbleibenden zwei Seiten wurde hier beispielhaft eine geklemmt und die andere als freie Oberfläche modelliert.

Die zur Bestimmung der Hauptdehnungen nötigen Verschiebungsgradienten berechnen sich in dieser Geometrie zu $\delta_{iJ}u_{i,J} = u_i(x_i = w)/w =: \bar{u}_i/w$. Da die Risse homogen im Körper verteilt sind und das makroskopische Verhalten als isotrop angenommen werden kann, treten bei der hier beschriebenen Belastung im Mittel keine Scherungen auf. Unter diesen Voraussetzungen vereinfacht sich der Deformationsgradient zu

$$F_{kL} = \frac{1}{w} \begin{pmatrix} u_1|_{x_1=w} + w & 0 & 0 \\ 0 & u_2|_{x_2=w} + w & 0 \\ 0 & 0 & u_3|_{x_3=w} + w \end{pmatrix}_{kL} \stackrel{\text{Abb.5.3}}{=} \frac{1}{w} \begin{pmatrix} \bar{u}_1 + w & 0 & 0 \\ 0 & \bar{u}_2 + w & 0 \\ 0 & 0 & w \end{pmatrix}_{kL}, \quad (5.1)$$

wobei die Verschiebung in x_3 -Richtung für die in Abb. 5.3 beschriebenen Randbedingungen natürlich verschwindet und die Funktionaldeterminante so die einfache Form

$$J = w^{-3} (u_1|_{x_1=w} + w) (u_2|_{x_2=w} + w) (u_3|_{x_3=w} + w) \stackrel{\text{Abb.5.3}}{=} w^{-2} (u_1|_{x_1=w} + w) (u_2|_{x_2=w} + w) \quad (5.2)$$

erhält. Für freie und feste Randbedingungen ändern sich die genannten Tensoren und Determinanten entsprechend.

Zur Auswertung der Spannung wurden zunächst alle Elemente ausgewählt, die an die betrachtete Würfelseite angrenzten. Für jedes dieser Elemente wurden dann die Cauchyspannungen σ_{ij} bestimmt, mit dem jeweiligen Volumen des Elements gewichtet und durch das Gesamtvolumen aller ausgewählten Elemente geteilt. Damit sollen Spannungsspitzen, die vor allem an den Rissufern zu erwarten sind,

nach Möglichkeit nicht so stark ins Gewicht fallen und das makroskopische Verhalten weniger beeinflussen. Hier ist zu beachten, dass die Kontaktelemente in ANSYS[®] ein endliches Elementvolumen - ihren Flächeninhalt - besitzen, für die Spannung aber den Wert 0 liefern. Die Zielelemente geben dagegen keinen Spannungswert zurück. Diese Tatsache sollte man vor der Bildung des Durchschnitts berücksichtigen, um falsche Mittelwerte auszuschließen.

Einbindung der Gitternichtlinearität

Bisher haben wir angenommen, dass das nichtlineare Verhalten des gerissenen Gesamtsystems lediglich von den Rissen selbst induziert wird. In realen Werkstoffen kann das Matrixmaterial jedoch selbst physikalische Nichtlinearitäten aufweisen. Dazu nehmen wir an, dass sich das Verhalten des Matrixmaterials durch ein hyperelastisches Potential beschreiben lässt und die elastischen Eigenschaften richtungsunabhängig sind. Das Dehnungspotential hängt in diesem Fall nur noch von drei Invarianten des Dehnungstensors ab und ist nach Murnaghan [Mur51] als

$$\begin{aligned}\Phi(I_E, II_E, III_E) &= \frac{1}{2}(\lambda + 2\mu) I_E^2 - 2\mu II_E + \frac{1}{3}(l + 2m) I_E^3 - 2m I_E II_E + n III_E \\ &= \frac{1}{4} \left[\frac{1}{2}(\lambda + 2\mu)(I_C - 3)^2 - 2\mu(II_C - 2I_C + 3) \right] \\ &\quad \frac{1}{8} \left[+ \frac{1}{3}(l + 2m)(I_C - 3)^3 - 2m(I_C - 3)(II_C - 2I_C + 3) + n(III_C - II_C + I_C - 1) \right]\end{aligned}\tag{5.3}$$

gegeben. Hier bezeichnen I_E , II_E und III_E die Invarianten des Green-Lagrange-Tensors. In ANSYS[®] wird ein spezieller Satz skaliertener Invarianten zur Berechnung des Potentials benutzt. Dies sind die deviatorischen Invarianten $\bar{I}_C := J^{-2/3} I_C$ und $\bar{II}_C := J^{-4/3} II_C$ sowie das Volumenverhältnis $J := \sqrt{III_C}$, wobei I_C , II_C und III_C die Invarianten des rechten Cauchy-Green-Tensors bezeichnen. Der Spannungstensor kann nun aus Ableitungen des Energiefunktionals nach den Invarianten dargestellt werden. Diese müssen vorher analytisch berechnet und ANSYS[®] als sogenanntes *User Programmable Feature* (UPF) in Form einer Fortran-Routine bereitgestellt werden. Die nötigen Ableitungen und der Quellcode der Routine `UserHyper.f` sind in Abschnitt A.9 des Anhangs dargestellt.

5.2. Simulationsergebnisse

Ziel der numerischen Simulationen ist die Bestimmung effektiver elastischer Konstanten für Systeme aus Rissen, eingebettet in eine lineare oder nichtlineare Matrix. Das Hauptaugenmerk gilt daher den Spannungs-Dehnungsrelationen, aus deren Verlauf sich die Konstanten zweiter und dritter Ordnung ableiten lassen. Ein typisches Ergebnis der Spannungs-Dehnungsrelation für einen Würfel mit zwei freien Seiten ist in Abb. 5.4 zu sehen. Mithilfe der Ausgleichsgerade ist auf der linken Seite bereits eine leichte Krümmung zu erkennen. Da das Matrixmaterial selbst ohne Gitternichtlinearität modelliert wurde und die Kurven auch im Bereich unterhalb einer Dehnung von fünf Prozent eine deutliche Krümmung zeigen (Abb. 5.4, rechts), geometrisch Linearisierung in diesem Bereich damit zulässig ist, kann die beobachtete Nichtlinearität nur den Rissen zugeordnet werden. Da die Abweichung von der Geraden in Abb. 5.4 gering ist, wurde auf der rechten Seite der Abbildung die Ausgleichsgerade (schwarz) von den Spannungs-Dehnungskurven der einzelnen Realisierungen abgezogen und die Differenz dargestellt.

Die Asymmetrie der Kurven bzgl. des Ursprungs ist darauf zurückzuführen, dass sich die Risse im Druckbereich überwiegend schließen, im Zugbereich überwiegend öffnen. Dieses Verhalten kann nicht

5 Änderung der elastischen Konstanten

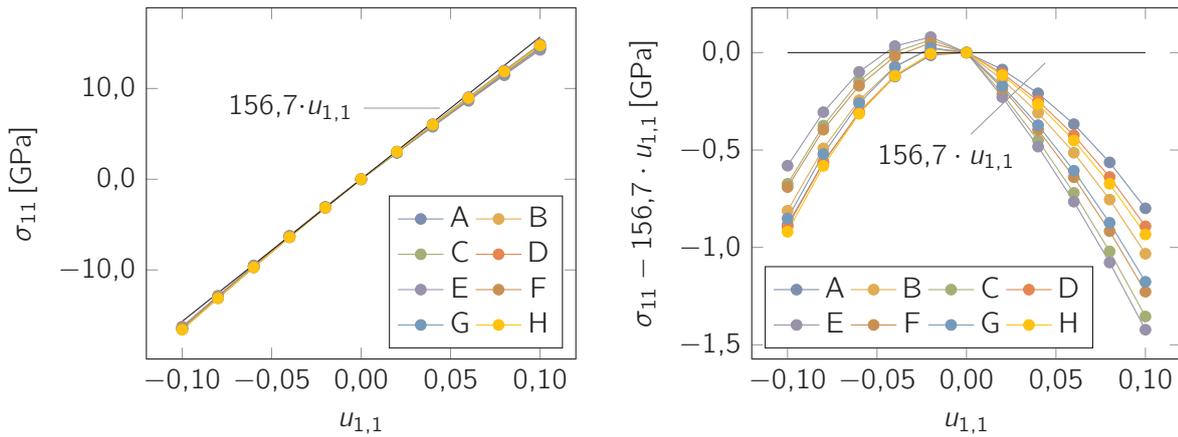


Abbildung 5.4.: Spannungs-Dehnungskurven für einen Würfel mit homogen verteilten, zufällig orientierten Hertzschen Kontakten und zwei freien Seiten als Randbedingung (neben den üblichen RBen). Die Ergebnisse sind für acht verschiedene Realisierungen der isotropen Orientierungsdichteverteilung (orientation distribution function, ODF) mit linearer (links) und mitgeführter Ordinate dargestellt. Der mittlere Anstieg für die Mitführung wurde dabei aus Konfiguration A bestimmt.

auf alle Risse verallgemeinert werden, da die Risse sich aufgrund der freien Randbedingungen in bestimmten Orientierungen auch im Druckbereich öffnen bzw. im Zugbereich schließen können. Weiterhin ist zu beachten, dass die Risse hier als Hertzsche Kontakte modelliert wurden. Der von akustischen Kontaktnichtlinearitäten (contact acoustic nonlinearity, CAN) bekannte typische Klappmechanismus für flache Risse [SKB02] kommt hier nicht zum Tragen. Vielmehr verschmiert der zu erwartenden Knick am Ursprung (vgl. Abb. 5.5) zu einer starken Krümmung. Die Differenzierbarkeit der Kurve am Ursprung rechtfertigt daher die Annahme eines polynomiellen Zusammenhangs zwischen Spannung und Dehnung (Hyperelastizität) und die Berechnung effektiver elastischer Konstanten für das Gesamtsystem im folgenden Abschnitt.

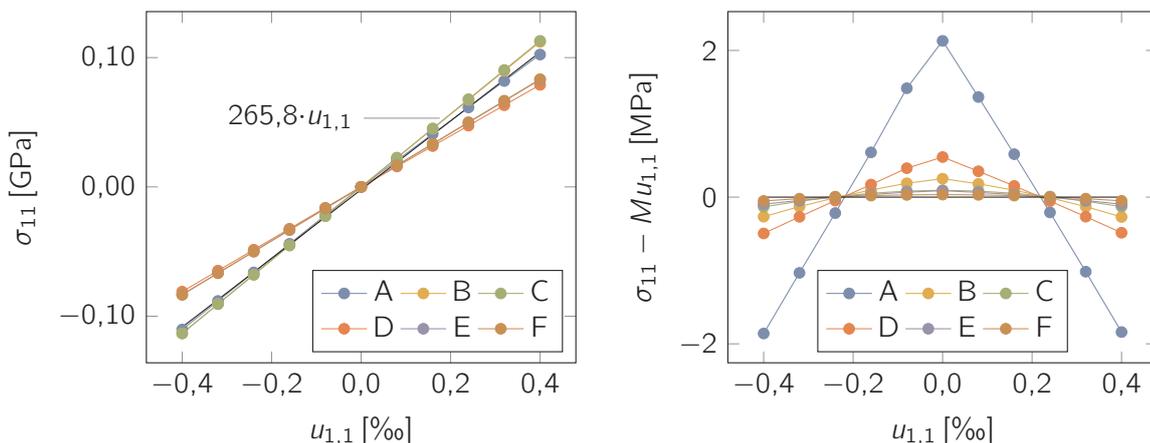


Abbildung 5.5.: Unbearbeitete (links) und skalierte Simulationsergebnisse für zufällig orientierte Kissing Bonds. Als Randbedingungen wurden neben den üblichen Einschränkungen zwei freie Seiten bzw. zwei feste Seiten gewählt.

Im Fall der flachen Risse sehen wir wie erwartet den bereits erwähnten Knick am Übergang von Druck zu Zug. Besonders gut ist dieser zu erkennen, wenn man die jeweilige Ausgleichsgerade $u_{1,1} \mapsto M u_{1,1}$ mit dem mittleren Anstieg M (entspricht dem Longitudinalmodul für den Fall fester Wände und

verschwindender Rissdichte) von den Spannungs-Dehnungskurven abzieht (Abb. 5.5, rechts). In den Konfigurationen A, B und C wurden neben den üblichen Randbedingungen zwei feste Wände gewählt. Die Konfigurationen E, D und F umfassten dagegen zwei freie Wände. Die Rissdichte sank jeweils in alphabetischer Reihenfolge. In beiden Sätzen zeigt die vollbesetzte Matrix die stärksten Abweichungen vom Mittelwert. Diese Abweichungen – und damit die Stärke des Knicks – nehmen mit abnehmender Rissdichte ab. Die stärkste absolute Abweichung ist jedoch für den Fall fester Seiten zu beobachten.

5.3. Bestimmung der elastischen Konstanten aus den Simulationsergebnissen

Um die Konstanten zweiter und dritter Ordnung nun aus den Simulationsdaten extrahieren zu können, müssen die im numerischen Experiment erhaltenen Spannungs-Dehnungskurven in die Ausdrücke für den PK1- oder PK2-Tensor eingesetzt werden. Beide Formulierungen beziehen sich auf die Materialkonfiguration, d.h. auf den Ausgangszustand des Materials. Die in den Simulationen erhaltenen Spannungen beziehen sich jedoch stets auf die Momentankonfiguration. Diese Cauchy-Spannungen müssen daher vor der weiteren Verwendung mithilfe von Gleichung (2.21) auf die entsprechenden Konfigurationen umgerechnet werden.

Aus dem hyperelastischen Materialmodell, d.h. aus den Ableitungen des entsprechenden Energiefunktional nach den Lagrangschen Dehnungen im risslosen Medium (5.35), folgt

$$T_I = \begin{pmatrix} \mathbb{1}_{IL}\lambda + \delta_{IL}\mu \\ \mathbb{1}_{IL}\frac{1}{2}(\nu_1 + 2\nu_2) + \delta_{IL}(2\nu_2 + 4\nu_3) \\ \mathbb{1}_{IL}\nu_1 + (\mathbb{1}_{IL} - \delta_{IL})2\nu_2 \end{pmatrix}_K \begin{pmatrix} E_1 & E_1^2 & E_2E_3 \\ E_2 & E_2^2 & E_1E_2 \\ E_3 & E_3^2 & E_1E_3 \end{pmatrix}_{LK} \quad (5.4)$$

für den PK2-Tensor in verkürzter Schreibweise, wobei mit $\mathbb{1}$ die Einsmatrix gemeint ist. Die erste Komponente lautet somit

$$T_1 = \begin{pmatrix} \lambda + 2\mu & \lambda & \lambda \\ \frac{1}{2}(\nu_1 + 6\nu_2 + 8\nu_3) & \frac{1}{2}(\nu_1 + 2\nu_2) & \frac{1}{2}(\nu_1 + 2\nu_2) \\ \nu_1 & \nu_1 + 2\nu_2 & \nu_1 + 2\nu_2 \end{pmatrix}_{KL} \begin{pmatrix} E_1 & E_1^2 & E_2E_3 \\ E_2 & E_2^2 & E_1E_2 \\ E_3 & E_3^2 & E_1E_3 \end{pmatrix}_{LK}. \quad (5.5)$$

Durch Vertauschung der Indizes bekommen wir analog die anderen beiden Hauptspannungskomponenten. Die doppelte Summation in Gleichung (5.5) bedeutet dabei nichts anderes als die Spur des Produktes der beiden Matrizen. Es genügt also die n -te Zeile mit der n -ten Spalte zu multiplizieren und die erhaltenen Ausdrücke zu summieren.

Als Zeile der Koeffizientenmatrix für die zu bestimmenden Materialparameter ergibt sich

$$T_{IJ} = \begin{pmatrix} I_E \delta_{IJ} \\ 2E_{IJ} \\ (I_E^2/2) \delta_{IJ} \\ (I_E^2 - 2I_E) \delta_{IJ} + 2I_E E_{IJ} \\ -4I_E \delta_{IJ} + 4I_E E_{IJ} + (\epsilon_{IKM} \epsilon_{JLN} + \epsilon_{JKM} \epsilon_{ILN}) E_{KL} E_{MN} \end{pmatrix}_A \begin{pmatrix} \lambda \\ \mu \\ \nu_1 \\ \nu_2 \\ \nu_3 \end{pmatrix}_A, \quad (5.6)$$

in welcher auch die Scherungen mit berücksichtigt sind. Da diese in den Simulationen außen vor blieben bzw. nicht ausgewertet wurden, vereinfacht sich Gl. (5.6) und man erhält das einfache Gleichungssystem

$$\begin{pmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I_E & 2E_1 & I_E^2/2 & I_E^2 - 2I_E + 2I_E E_1 & -4I_E + 4I_E E_1 + 4E_2 E_3 \\ I_E & 2E_2 & I_E^2/2 & I_E^2 - 2I_E + 2I_E E_2 & -4I_E + 4I_E E_2 + 4E_1 E_3 \\ I_E & 2E_3 & I_E^2/2 & I_E^2 - 2I_E + 2I_E E_3 & -4I_E + 4I_E E_3 + 4E_1 E_2 \end{pmatrix}_A \begin{pmatrix} \lambda \\ \mu \\ \nu_1 \\ \nu_2 \\ \nu_3 \end{pmatrix}_A \quad (5.7)$$

5 Änderung der elastischen Konstanten

für die Normalspannungskomponenten des PK2-Tensors. Je nach gewählten Randbedingungen vereinfacht sich dieses Gleichungssystem nun noch weiter.

Zwei freie Oberflächen

Wählen wir etwa zwei freie Oberflächen und belasten den Würfel in X_1 -Richtung, so erhalten wir unter idealen Voraussetzungen, d.h. für einen isotropen und homogenen Körper,

$$\begin{pmatrix} T_1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I_E & 2E_1 & I_E^2/2 & I_E^2 - 2I_E + 2I_E E_1 & -4I_E + 4I_E E_1 + 4E_2^2 \\ I_E & 2E_2 & I_E^2/2 & I_E^2 - 2I_E + 2I_E E_2 & -4I_E + 4I_E E_2 + 4E_1 E_2 \end{pmatrix}_A \begin{pmatrix} \lambda \\ \mu \\ \nu_1 \\ \nu_2 \\ \nu_3 \end{pmatrix}_A, \quad (5.8)$$

da die Dehnungen in X_2 - und X_3 -Richtung gleich sein müssen. Da die Simulation in mehreren Lastschritten durchgeführt wurden, ist es möglich, die Ableitungen der Spannungen bzgl. der vorgegebenen Dehnung E_1 zu bilden. Da auch die Dehnung E_2 über die Querkontraktion mit der Dehnung in X_1 -Richtung zusammenhängt, können wir diese ebenfalls nach E_1 entwickeln und ableiten. Die so gewonnenen Ableitungen werden dann an der Stelle $E_1 = 0$ ausgewertet und wir erhalten im Fall zweier freier Seiten

$$\begin{pmatrix} T_1' \\ T_1'' \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 + 2E_2' & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 2E_2'' & 0 & (1 + 2E_2')^2 & 6 + 8E_2' + 4E_2'^2 & 8 \\ 1 + 2E_2' & 2E_2' & 0 & 0 & 0 \\ 2E_2'' & 2E_2'' & (1 + 2E_2')^2 & 2 + 4E_2' + 12E_2'^2 & 8E_2'^2 \end{pmatrix}_A \begin{pmatrix} \lambda \\ \mu \\ \nu_1 \\ \nu_2 \\ \nu_3 \end{pmatrix}_A, \quad (5.9)$$

wobei ν Striche ($\nu = 1, 2$) jeweils die ν -te Ableitung nach der einzigen unabhängigen Variablen E_1 an der Stelle $E_1 = 0$ bezeichnen. Die Anzahl der erhaltenen Gleichungen ist somit unabhängig von der Anzahl der Lastschritte, d.h. wir erhalten für zwei freie Seiten lediglich vier Gleichungen für fünf unbekannte Parameter. Wir können also nur vier der Parameter bestimmen.

Die Auswertung der SOEC und TOEC, die sich durch direktes Einsetzen in Gleichung (5.8) gewinnen lassen, ist jeweils in den ersten beiden Zeilen von Tab. 5.3 zu finden. Man erhält zwei Gleichungen pro Lastschritt, sodass sich die gesuchten elastischen Konstanten über eine Ausgleichsrechnung bestimmen lassen. Drei Strategien wurden dazu verfolgt: Bei der ersten wurde das komplette Gleichungssystem simultan gelöst. Bei der zweiten Methode lösten wir den linearen Anteil des überbestimmten Gleichungssystems zunächst nach den SOEC auf, setzten diese dann in das verbleibende System ein und lösten es nach den TOEC. Die jeweils letzte Zeile in der Tabelle zeigt die Ergebnisse der Rechnung mittels Ableitung aus Gl. (5.9). Um die Ableitung zu bilden, wurden die Datensätze als Funktion des freien Parameters $u_{1,1}$ dargestellt und mittels eines Polynoms approximiert. Die Ergebnisse zeigen, dass sowohl λ über alle drei Methoden hinweg nur innerhalb der Standardabweichung schwankt und daher als gleich angenommen werden kann. Die Standardabweichung bezeichnet dabei die Streuung der Konstanten vom Mittelwert derselben für unterschiedliche Realisierungen der zufällig verteilten Rissorientierungen. Die Werte des Schermoduls μ stimmen lediglich für die stufenweise direkte Methode und die Ableitungsmethode innerhalb Standardabweichung überein. Diese Unstimmigkeit setzt sich auch in den abgeleiteten Größen E-Modul und dem Poisson-Verhältnis fort. Nichtsdestotrotz sind die Abweichungen im Vergleich zu den Schwankungen der TOEC gering. Hier liegt überhaupt keine Übereinstimmung innerhalb der angegebenen Abweichungen vor. Die direkten Methoden liefern sogar positive Werte für die Konstanten ν_1 , was im Vergleich mit den gemessenen Werten in Kap. 3 sowie mit Literaturwerten für ähnliche Materialien als nicht sinnvoll erscheint. Das Ableitungsverfahren liefert zwar keinen Vorzeichenwechsel. Die Richtigkeit der Ergebnisse muss aber anhand der

Tabelle 5.3.: Ergebnisse der Auswertung der SOEC und TOEC für 5×5×5-Würfel mit zwei freien Oberflächen.

Methode	λ [GPa]	μ [GPa]	E [GPa]	ν
direkt, voll	71,6±2,7	63,1±0,5	159,7±1,6	0,266±0,004
direkt, zweistufig	73,2±2,5	61,0±0,6	155,3±1,8	0,273±0,003
Ableitung	72,2±2,4	60,2±0,6	153,2±1,9	0,273±0,003

Methode	ν_1 [GPa]	ν_2 [GPa]	ν_3 [GPa]
direkt, voll	1.220,5±19,7	-284,8±6,8	-9,9±2,7
direkt, zweistufig	938,7±7,7	-248,0±4,7	-19,8±2,0
Ableitung	-13,5±0,6	-122,9±3,6	-56,7±1,6

Validierung der Simulationen mit bekannter physikalischer Nichtlinearität des Matrixmaterials angezweifelt werden, da die TOEC für zwei freie Oberflächen auch dort nicht bestimmt werden konnten. Ungewöhnlich ist außerdem, dass der Absolutwert des Parameters ν_1 hier eine Größenordnung kleiner ist als der von ν_2 . Da hier ein eisenähnliches Material zur Simulation verwendet wurde, würde man für die nichtlinearen Konstanten zunächst auch eisenähnliche Werte erwarten. Sowohl die von Seeger und Buck bestimmten Parameter [SB60] als auch die bei Landolt und Börnstein [LB79] tabellierten Parameter ergeben für die Gitternichtlinearität stets einen um eine Größenordnung größeren Absolutwert für ν_1 im Vergleich zu ν_2 . Dabei ist natürlich festzuhalten, dass sich das Matrixmaterial hier linear verhält, die Nichtlinearität daher nur aus der Öffnung und Schließung der involvierten Risse induziert wird und die so erzeugte Nichtlinearität sich durchaus anders verhalten kann.

Fazit ist, dass sich die Konstanten dritter Ordnung in dieser Konfiguration mit den direkten Methoden nicht bestimmen lassen. Die Ableitungsmethode liefert dabei bisher die besten Ergebnisse, die jedoch weiter zu untersuchen sind.

Eine freie Oberfläche

Für eine freie Oberfläche (hier in X_2 -Richtung) ändert sich das Gleichungssystem entsprechend und wir erhalten

$$\begin{pmatrix} T'_1 \\ 0 \\ T'_3 \\ T''_1 \\ 0 \\ T''_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E'_2 + 1 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ E'_2 + 1 & 2E'_2 & 0 & 0 & 0 \\ E'_2 + 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ E''_2 & 0 & \frac{1}{2}(2E'^2_2 + 4E'_2) + 1 & 2E'^2_2 + 4E'_2 + 6 & 8 \\ E''_2 & 2E''_2 & E'^2_2 + \frac{1}{2}(4E'_2 + 2) & 6E'^2_2 + 4E'_2 + 2 & 8E'^2_2 \\ E''_2 & 0 & 2E'_2 + \frac{1}{2}(2E'^2_2 + 2) & 2E'^2_2 + 2 & 0 \end{pmatrix}_A \begin{pmatrix} \lambda \\ \mu \\ \nu_1 \\ \nu_2 \\ \nu_3 \end{pmatrix}_A \quad (5.10)$$

als Bestimmungssystem für SOEC und TOEC. Im Gegensatz zum Gleichungssystem, das sich aus den freien Randbedingungen ergab, ist dieses überbestimmt. Die Auswertungen für diesen Fall sind in Tab. 5.4 zusammengefasst.

Baut man das Ergebnis der obigen Simulation als Nebenbedingung in die bereits vorhandenen Bestimmungsalgorithmen für die Ergebnisse mit zwei freien Oberflächen ein, so ergeben sich die elastischen Konstanten in Tab. 5.5. In beiden Fällen ändern sich die SOEC um etwa 20 % bis 40 %, was einer Änderung der Longitudinalwellengeschwindigkeit von etwa 15 % entspricht. Die Phasengeschwindigkeit der Rayleighwelle ändert sich um weniger als 10 % [RKM17]. Die Änderungen der TOEC unterscheiden sich je nach Auswertemethode jedoch enorm. In den dazugehörigen Simulationen wurde das Matrixmaterial als linear angenommen, was die Validation der Algorithmen hinsichtlich der TOEC am

5 Änderung der elastischen Konstanten

Tabelle 5.4.: Auswertung der SOEC und TOEC für zufällig orientierte Hertzsche Kontakte bei einer freien und einer feste Oberfläche.

λ [GPa]	μ [GPa]	ν_1 [GPa]	ν_2 [GPa]	ν_3 [GPa]
$70,3 \pm 1,1$	$62 \pm 1,4$	$-520,4 \pm 66,1$	$-44 \pm 13,5$	$-52,7 \pm 25,1$

Tabelle 5.5.: Auswertung der SOEC und TOEC für zufällig orientierte Hertzsche Kontakte bei einer freien und einer festen Oberfläche unter Einbeziehung der Daten mit zwei freien Oberflächen.

λ [GPa]	μ [GPa]	ν_1 [GPa]	ν_2 [GPa]	ν_3 [GPa]
$68,8 \pm 1,1$	$62,1 \pm 0,7$	$470,7 \pm 76,7$	$-207,7 \pm 12,7$	$9,7 \pm 3,3$

Matrixmaterial zu diesem Zeitpunkt nicht ermöglicht. Dafür sei auf die Validation Hyperelastizitäts-routine `UserHyper.f` verwiesen.

Anhand von Ausdünnungsversuchen, deren Ergebnisse in Tab. 5.6 dargestellt sind, kann man jedoch sagen, dass die Auswerterroutine bei verschwindender Rissdichte tatsächlich die SOEC der Matrix liefert. Dabei ist zu beachten, dass in den Experimenten ohne Gitternichtlinearität der lineare Parametersatz aus Tab. 5.2 verwendet wurde, der sich aus der Wahl des E-Moduls $E = 200$ GPa und der Poissonzahl $\nu = 0,3$ ergibt.

Tabelle 5.6.: Auswertung der SOEC und TOEC für zufällig orientierte Hertzsche Kontakte bei einer freien und einer festen Oberfläche im Ausdünnungsversuch (linearer Satz aus Tab. 5.2).

Füllgrad	λ [GPa]	μ [GPa]	ν_1 [GPa]	ν_2 [GPa]	ν_3 [GPa]
1,000	$74,9 \pm 1,3$	$69,4 \pm 0,8$	$-641,7 \pm 20,6$	$-45,9 \pm 5,4$	$-88,4 \pm 2,6$
0,504	$93,2 \pm 1,0$	$72,8 \pm 0,5$	$-526,1 \pm 17,2$	$-45,5 \pm 3,0$	$-99,3 \pm 2,1$
0,184	$106,7 \pm 1,0$	$75,3 \pm 0,4$	$-431,4 \pm 15,7$	$-38,2 \pm 3,0$	$-110,5 \pm 1,4$
0,120	$109,5 \pm 1,1$	$75,8 \pm 0,4$	$-397,3 \pm 12,8$	$-38,4 \pm 1,2$	$-112,5 \pm 0,9$
0,064	$112,2 \pm 0,5$	$76,3 \pm 0,2$	$-368,6 \pm 13,2$	$-38,1 \pm 1,6$	$-114,0 \pm 0,6$
0,032	$113,9 \pm 0,3$	$76,6 \pm 0,1$	$-347,1 \pm 3,1$	$-38,3 \pm 0,6$	$-114,8 \pm 0,1$
0,016	$114,7 \pm 0,3$	$76,8 \pm 0,1$	$-336,9 \pm 4,5$	$-38,4 \pm 0,8$	$-115,1 \pm 0,3$
0,008	$115,0 \pm 0,2$	$76,9 \pm 0,1$	$-332,4 \pm 3,0$	$-38,4 \pm 0,4$	$-115,4 \pm 0,2$

5.3.1. Validierung der Auswertestrategien

Die Validierung des Codes erfolgte anhand der Simulation eines Würfels ohne Risse bei bekannter Gitternichtlinearität (Tab. 5.2). Neben den üblichen Randbedingungen war eine Seite stets frei und die verbleibende Seite entweder frei oder fest eingespannt. Nach einer Polynomapproximation der Spannungs-Dehnungskurven und Bildung der ersten und zweiten Ableitungen wurden die elastischen Konstanten auf folgenden Wegen berechnet:

ID1 Auswertung der Daten mit zwei freien Oberflächen;

ID2 Auswertung der Daten mit einer steifen Wand;

ID3 Einbeziehung der Daten mit zwei freien Oberflächen in ID2;

ID4 ID3 unter Beschränkung der Daten mit zwei freien Oberflächen auf die Berechnung der SOEC (nur erste Ableitungen);

ID5 Berechnung der SOEC aus ersten Ableitungen, Einsetzen der SOEC in zweite Ableitungen, Lösen nach TOEC.

Die Auswertung der Simulationen mit zwei freien Oberflächen nach ID1 lieferte dabei lediglich die SOEC verlässlich. Die Werte für ν_2 und ν_3 liegen zwar in der Nähe der Ausgangswerte, weichen aber dennoch um etwa 10 % ab. Der berechnete Wert für ν_1 dagegen ist sogar um eine Größenordnung kleiner als vorgegeben. Methode ID2 mit einer steifen Wand liefert dagegen fast die Ausgangswerte. Die beste Übereinstimmung wurde dabei für den Polynomgrad $n = 3$ erreicht und damit einen Grad höher, als für die Spannungs-Dehnungsrelation des Hyperelastizitätsmodell nötig. Die Einbeziehung der Daten mit zwei freien Oberflächen (ID3) in ID2 verschlechterte das Ergebnis wieder. Die Beschränkung der Daten mit zwei freien Oberflächen auf die Berechnung der SOEC in ID4 lieferte für $n = 3$ sehr gute Werte für die SOEC und die TOEC, bis auf ν_1 . Dieser wich auch dort um etwa 10 % vom Ausgangswert ab, sodass sich das Gesamtergebnis hier gegenüber ID2 ebenfalls verschlechterte. Die in ID5 vorgeschlagene schrittweise Berechnung lieferte wieder akzeptable Werte für die SOEC. Die Abweichungen für die TOEC waren jedoch für alle betrachteten Polynomgrade sehr hoch. Für die Berechnung der elastischen Konstanten aus den Simulationsergebnissen kann dieser Validierung zufolge die Strategie ID2 mit $n = 3$ gewählt werden.

Weitere Untersuchungen der Auswirkung des Grades der Fitpolynome auf die extrahierten SOEC ergaben jedoch eine Verbesserung dieser mit steigendem Polynomgrad n . In den folgenden Auswertungen wurde der Grad des Fitpolynoms daher möglichst hoch gewählt (abhängig von der jeweiligen Auswertung, d.h. von der Anzahl der einbezogenen Datenpunkte).

5.3.2. Padé-Approximation

Um der starken Krümmung der Spannungs-Dehnungskurven im Ursprung und deren Abflachung für betragsmäßig wachsende Dehnungen Rechnung zu tragen, erscheint es sinnvoll, die Kurven durch Padé-Approximationen anzunähern. Die erhaltenen Funktionen werden dann im Ursprung abgeleitet und in die unten stehenden Gleichungen eingesetzt.

Aufgrund der gewählten Randbedingungen in den Simulationen mit einer freien und einer geklemmten Oberfläche – zusätzlich zu den Koordinatenebenen – ist die Verschiebung in X_1 -Richtung u_1 bzw. die Hauptdehnung $u_{1,1}$ die einzige unabhängige Größe. Alle weiteren Dehnungs- und auch Spannungswerte können daher in Abhängigkeit von $u_{1,1}$ dargestellt werden. In den vorliegenden Simulationen wurde in X_1 -Richtung gezogen und die Würfelhöhe bei $X_3 = w$ festgehalten. Es können also die Spannungen σ_1 und σ_3 sowie die Verschiebung u_2 und somit der Verschiebungsgradient $u_{2,2}$ an der freien Oberfläche $X_2 = w$ bestimmt werden. Die erhaltenen Größen werden nun bezüglich des Verschiebungsgradienten approximiert. Dazu stellen wir diese als rationale Funktionen der Form

$$u_{1,1} \mapsto \frac{a_1 u_{1,1} + a_2 u_{1,1}^2}{1 + b_1 u_{1,1} + b_2 u_{1,1}^2} \quad (5.11)$$

dar und bestimmen die Koeffizienten a_1, a_2, b_1 und b_2 . Die so erhaltenen analytischen Ausdrücke erlauben es uns, die Funktionen abzuleiten. Die Ableitungen der Funktion (5.11) an der Stelle $u_{1,1} = 0$ lauten

$$(\cdot)' : u_{1,1} \mapsto a_1 \quad \text{und} \quad (\cdot)'' : u_{1,1} \mapsto 2(a_2 - a_1 b_1), \quad (5.12)$$

5 Änderung der elastischen Konstanten

Tabelle 5.7.: Gemittelte elastische Konstanten rissbehafteter, linearer Matrix, berechnet aus Ableitungsmethode mit vorheriger Padé-Approximation.

frac	λ [GPa]	μ [GPa]	ν_1 [GPa]	ν_2 [GPa]	ν_3 [GPa]
1,000	$74,7 \pm 1,3$	$69,5 \pm 0,8$	$-633,2 \pm 14,7$	$-52,6 \pm 3,7$	$-89,9 \pm 2,7$
0,504	$93,2 \pm 0,9$	$72,8 \pm 0,5$	$-515,1 \pm 15,2$	$-58,1 \pm 3,0$	$-94,9 \pm 2,8$
0,184	$106,6 \pm 1,0$	$75,3 \pm 0,4$	$-440,4 \pm 17,6$	$-39,5 \pm 3,4$	$-109,7 \pm 1,6$
0,120	$109,5 \pm 1,1$	$75,8 \pm 0,4$	$-403,9 \pm 14,7$	$-39,3 \pm 1,3$	$-111,9 \pm 1,0$
0,064	$112,1 \pm 0,6$	$76,3 \pm 0,2$	$-372,7 \pm 15,0$	$-38,4 \pm 1,8$	$-113,6 \pm 0,7$
0,032	$113,9 \pm 0,3$	$76,6 \pm 0,1$	$-348,8 \pm 3,5$	$-38,5 \pm 0,7$	$-114,5 \pm 0,2$
0,016	$114,7 \pm 0,3$	$76,8 \pm 0,1$	$-337,4 \pm 5,0$	$-38,4 \pm 0,9$	$-114,9 \pm 0,4$
0,008	$115,0 \pm 0,2$	$76,9 \pm 0,1$	$-332,5 \pm 3,5$	$-38,4 \pm 0,5$	$-115,2 \pm 0,2$

die wir nun zunächst in die erste Ableitung der Spannung nach dem Verschiebungsgradienten einsetzen. Für den PK1 erhalten wir das System

$$\begin{aligned}
 P'_{11} &= \lambda u'_{2,2} + \lambda + 2\mu \\
 0 &= (\lambda + 2\mu) u'_{2,2} + \lambda \\
 P'_{33} &= \lambda (u'_{2,2} + 1),
 \end{aligned} \tag{5.13}$$

aus dem sich die SOECs berechnen lassen. Dabei handelt es sich um ein überbestimmtes Gleichungssystem, dessen Lösung durch linearen Ausgleich zu bestimmen ist. Nachdem wir die SOECs bestimmt haben, können wir diese mitsamt den zweiten Ableitungen der abhängigen Größen in das System der zweiten Ableitungen des PK1

$$\begin{aligned}
 P''_{11} &= \lambda + 2\mu + \lambda (u'_{2,2}{}^2 + u''_{2,2}) + \nu_1 (u'_{2,2}{}^2 + 2u'_{2,2} + 1) + \nu_2 (2u'_{2,2}{}^2 + 4u'_{2,2} + 6) + 8\nu_3 \\
 0 &= (\lambda + 2\mu) (u'_{2,2}{}^2 + u''_{2,2}) + \lambda + \nu_1 (u'_{2,2}{}^2 + 2u'_{2,2} + 1) + \nu_2 (6u'_{2,2}{}^2 + 2(2u'_{2,2} + 1)) + 8\nu_3 u'_{2,2}{}^2 \\
 P''_{33} &= \lambda (u'_{2,2}{}^2 + u''_{2,2} + 1) + \nu_1 (u'_{2,2} + 1)^2 + 2\nu_2 (u'_{2,2}{}^2 + 1)
 \end{aligned} \tag{5.14}$$

einsetzen und erhalten schließlich noch die gesuchten TOECs.

Die Ergebnisse der Bestimmung der Konstanten aus den Simulationen ohne Vorspannung und ohne Gitternichtlinearität unter Benutzung der Ableitungsstrategie mit vorheriger Padé-Approximation der Datensätze sind in Tab. 5.7 zu finden.

Wie im Fall der einfachen Polynomapproximation sieht man auch hier, dass die Werte der SOEC für abnehmende Rissdichte gegen die elastischen Konstanten der Matrix streben und im Bereich der Standardabweichung beinahe die Matrixwerte erreichen. Auch die Ergebnisse der TOEC stimmen mit denen des Polynomfits im ausgedünnten Fall überein. Ebenso kann im vollbesetzten Würfel von einer guten Übereinstimmung im Bereich der großen Abweichungen gesprochen werden. Die hohen Variationen der Konstanten dritter Ordnung lässt darauf schließen, dass die genaue Konfiguration der Rissorientierungen bei der gewählten Anzahl von 125 Rissen noch einen signifikanten Einfluss auf das Gesamtsystem hat. Um diese These zu bestätigen, müssten noch mehr Konfigurationen gerechnet werden, was für die vollen 3D-Rechnungen jedoch einen enormen Mehraufwand bedeutete und hier nicht weiter verfolgt wurde. Vergleicht man die Werte der extrahierten TOEC beider Verfahren, so fällt auf, dass der größte relative Unterschied beider Verfahren in den Werten der Konstanten ν_1 und ν_2 besteht. Die über die einfache Standardabweichung definierten Konfidenzintervalle der jeweiligen

Mittelwerte überschneiden sich jedoch, sodass von einer Übereinstimmung gesprochen werden kann. Es ist daher keine signifikante Verbesserung der ermittelten elastischen Konstanten unter Zuhilfenahme der Padé-Approximation zu erwarten.

5.3.3. SOEC und TOEC im Ausdünnungsversuch mit Gitternichtlinearität

In den bisherigen Simulationen verhielt sich das Matrixmaterial stets linear. Mit zunehmender Ausdünnung sollten die ermittelten TOEC gegen die der Matrix streben, im linearen Fall also gegen Null. In den obigen Auswertungen war das bisher nicht der Fall, da bereits kleine numerische Abweichungen aufgrund der schlechten Kondition der Koeffizientenmatrix in (5.10) enorm verstärkt werden und somit zu unechten Konstanten dritter Ordnung führen können. Um die Zuverlässigkeit des Algorithmus hinsichtlich der Bestimmung der TOEC beurteilen zu können, wurde die Gitternichtlinearität des Matrixmaterials mitberücksichtigt. Im Ausdünnungsversuch müssen die TOEC dann gegen die der Matrix konvergieren. Die Auswertung dieser Simulationen ist in Tab. 5.9 zu finden.

Tabelle 5.9.: Gemittelte elastische Konstanten einer rissbehafteten nichtlinearen Matrix, berechnet aus der Ableitungsmethode mit vorheriger Polynomapproximation ($n = 10$).

Füllgrad	λ [GPa]	μ [GPa]	ν_1 [GPa]	ν_2 [GPa]	ν_3 [GPa]
1,000	$70,0 \pm 1,5$	$71,2 \pm 1,0$	$-1.240,2 \pm 108,7$	$-245,3 \pm 18,0$	$-135,1 \pm 7,7$
0,504	$93,5 \pm 1,4$	$75,2 \pm 0,7$	$-935,1 \pm 118,3$	$-300,2 \pm 15,8$	$-127,0 \pm 9,8$
0,184	$111,1 \pm 1,5$	$78,2 \pm 0,5$	$-667,3 \pm 115,0$	$-340,2 \pm 11,2$	$-123,4 \pm 5,7$
0,120	$114,8 \pm 1,6$	$78,7 \pm 0,5$	$-568,9 \pm 128,6$	$-350,1 \pm 4,0$	$-123,2 \pm 5,0$
0,064	$118,6 \pm 0,9$	$79,4 \pm 0,3$	$-464,7 \pm 88,2$	$-356,1 \pm 5,4$	$-121,7 \pm 3,1$
0,032	$120,8 \pm 0,4$	$79,7 \pm 0,1$	$-392,4 \pm 25,8$	$-361,6 \pm 1,6$	$-120,4 \pm 1,3$
0,016	$122,0 \pm 0,4$	$79,9 \pm 0,1$	$-347,3 \pm 23,6$	$-364,1 \pm 1,1$	$-119,4 \pm 0,9$
0,008	$122,5 \pm 0,4$	$79,9 \pm 0,1$	$-340,2 \pm 25,9$	$-365,0 \pm 0,8$	$-119,9 \pm 0,4$

Zunächst ist festzuhalten, dass die elastischen Konstanten beinahe die Matrixwerte erreichen. Man beachte, dass dies innerhalb der einfachen Standardabweichung auch für die Konstante ν_1 zutrifft. Die absolute Abweichung ist hier jedoch selbst für den stark ausgedünnten Fall noch sehr hoch im Vergleich zu den restlichen Konstanten. Der Algorithmus ist also in der Lage, die elastischen Konstanten aus den Simulationsdaten zu bestimmen.

Die SOEC im vollbesetzten Fall unterscheiden sich kaum von denen, die wir trotz leicht geänderter Konstanten zweiter Ordnung im linearen Fall ermittelt haben (Tab. 5.7). Der Einfluss der Risse auf die effektiven SOEC ist in dieser Auswertemethode folglich konstant. Die Absolutwerte der TOEC dagegen sind im Vergleich zum linearen Fall deutlich gestiegen. Die Konstante ν_1 hat sich in etwa verdoppelt, ν_2 fast verfünffacht.

5.3.4. Auswertung der Simulationen mit hydrostatischer Vorspannung

In unserem Simulationsmodell werden die Hertzschen Kontakte als Kugelschnitte realisiert. Programmbedingt können die entstehenden Kalotten im FE-Modell jedoch nicht bis an die jeweiligen Zielflächen herangeführt werden, sodass stets eine Lücke bleibt, die für alle Risse gleich groß ist (kürzester Abstand zwischen Kalotte und flacher Kontaktseite). Dies führt beim Schließen zu einem ähnlichen Verhalten wie im Fall beidseitig flacher Risse, wenn auch der Effekt durch die stetige Vergrößerung der Kontaktfläche von einem Punkt zu einem Kreis endlichen Radius hier nicht so groß ausfällt.

5 Änderung der elastischen Konstanten

Darüber hinaus können in realen Bauteilen stets auch Vorspannungen vorliegen, die den Kontaktstatus und die Kontaktlücken der Risse ändern.

Um die Lücken zwischen den Kontaktflächen initial zu schließen, wurde eine hydrostatische Vorspannung von 10 GPa auf eine lineare Matrix mit Hertzischen Kontakten aufgebracht. Für die Auswertung der elastischen Konstanten mussten die simulierten Spannungs- und Dehnungswerte auf die neue Konfiguration (Initialkonfiguration) bezogen werden. Hierzu wurde die Vorspannung zunächst von allen Spannungswerten abgezogen. Mithilfe der berechneten Verschiebungen am Vorspannungspunkt wurden dann die neuen Seitenlängen im Initialzustand berechnet. Schließlich wurden die initialen Verschiebungen von den momentanen Verschiebungen abgezogen und durch die Initiallängen dividiert, sodass wir letztendlich die Verschiebungsgradienten im Initialsystem bekommen. Mit den aus den initialen Verschiebungsgradienten folgenden Initialdehnungen und den Initialspannungen wurde schließlich das übliche Vorgehen zur Extraktion der elastischen Konstanten wiederholt. Die Mittelwerte über alle simulierten Konfigurationen sind in Tabelle 5.11 für die einzelnen Verdünnungsstufen aufgeführt.

Tabelle 5.11.: Gemittelte extrahierte elastische Konstanten aus den Ausdünnungssimulationen der Hertzischen Kontakte unter hydrostatischer Vorspannung ohne Gitternichtlinearität (linearer Satz in Tab. 5.2).

Füllgrad	λ [GPa]	μ [GPa]	ν_1 [GPa]	ν_2 [GPa]	ν_3 [GPa]
1,000	$97,4 \pm 0,3$	$60,7 \pm 0,3$	$-357,3 \pm 7,4$	$-47,8 \pm 1,2$	$-85,9 \pm 0,7$
0,504	$113,4 \pm 0,2$	$73,0 \pm 0,3$	$-367,0 \pm 6,5$	$-48,5 \pm 0,7$	$-105,2 \pm 0,6$
0,184	$114,7 \pm 0,2$	$75,4 \pm 0,2$	$-344,3 \pm 3,0$	$-41,8 \pm 0,9$	$-111,8 \pm 0,6$
0,120	$114,9 \pm 0,2$	$75,9 \pm 0,1$	$-339,8 \pm 2,9$	$-40,0 \pm 0,7$	$-113,5 \pm 0,4$
0,064	$115,1 \pm 0,1$	$76,4 \pm 0,1$	$-333,5 \pm 2,5$	$-39,5 \pm 1,2$	$-114,3 \pm 0,7$
0,032	$115,3 \pm 0,1$	$76,7 \pm 0,1$	$-330,4 \pm 4,1$	$-39,3 \pm 1,5$	$-114,5 \pm 0,6$
0,016	$115,3 \pm 0,1$	$76,8 \pm 0,1$	$-329,2 \pm 3,6$	$-38,5 \pm 1,6$	$-115,1 \pm 0,8$
0,008	$115,4 \pm 0,1$	$76,9 \pm 0,0$	$-326,8 \pm 3,1$	$-39,0 \pm 1,3$	$-115,1 \pm 0,7$

Die effektiven Konstanten zweiter Ordnung λ und μ streben mit zunehmender Ausdünnung gegen die Konstanten des Matrixmaterials. Angesichts der Tatsache, dass die Gitternichtlinearität in diesen Versuchen nicht berücksichtigt wurde, können wir dieses Ergebnis als plausibel annehmen. Die effektive Nichtlinearität ändert sich dagegen nur geringfügig. Es wäre zu erwarten, dass die TOEC ν_1 , ν_2 und ν_3 mit abnehmender Rissdichte gegen Null streben. Dies ist hier nicht der Fall und wiederum auf Instabilitäten des Auswertalgorithmus zurückzuführen.

Die Spannungs-Dehnungskurven weisen am Ursprung eine starke Krümmung auf, die zunächst näherungsweise auch als Knick interpretiert werden könnte. Die hydrostatische Vorspannung dient jedoch gerade dazu, den möglichen Knick abzurunden und die Ermittlung effektiver Konstanten somit wieder zu legitimieren. Wir wollen daher die Daten getrennt nach Zug und Druck betrachten, um eventuelle Unterschiede in den elastischen Konstanten beider Seiten genauer untersuchen zu können. Tabelle 5.13 zeigt das Ergebnis dieser getrennten Auswertung für zufällig orientierte Hertzische Kontakte.

Die Werte der SOEC stimmen hier für beide Seiten sehr gut überein, woraus sich schließen lässt, dass es sich bei der starken Krümmung im Ursprung der Spannungs-Dehnungs-Kurve *nicht* um einen Knick handeln kann. Der Sprung in den TOEC lässt aber vermuten, dass hier vielmehr die Ableitung eine Nichtdifferenzierbarkeit am Ursprung aufweist.

Zu bemerken ist auch der deutliche Sprung der SOEC von der Vollbesetzung zur ersten Verdünnungsstufe. Die Werte für den Füllgrad 0,504 erreichen hier bereits fast die Matrixwerte. Auch die TOEC erfahren die größte Änderung zur ersten Ausdünnung und ändern sich im Rahmen der angegebene-

Tabelle 5.13.: Auswertung der SOEC und TOEC für zufällig orientierte Hertzsche Kontakte unter Vorspannung. Die Auswertung erfolgte getrennt für Zug und Druck.

Füllgrad	links; [GPa]		rechts; [GPa]	
	λ	μ	λ	μ
1,000	$97,7 \pm 0,3$	$60,8 \pm 0,3$	$98,6 \pm 0,4$	$60,9 \pm 0,3$
0,504	$113,5 \pm 0,2$	$73,0 \pm 0,3$	$113,3 \pm 0,1$	$73,0 \pm 0,3$
0,184	$114,8 \pm 0,2$	$75,4 \pm 0,2$	$114,5 \pm 0,1$	$75,3 \pm 0,2$
0,120	$115,0 \pm 0,2$	$76,0 \pm 0,1$	$114,8 \pm 0,0$	$75,9 \pm 0,1$
0,064	$115,2 \pm 0,1$	$76,5 \pm 0,1$	$115,0 \pm 0,1$	$76,3 \pm 0,1$
0,032	$115,4 \pm 0,1$	$76,7 \pm 0,1$	$115,1 \pm 0,1$	$76,6 \pm 0,1$
0,016	$115,4 \pm 0,1$	$76,9 \pm 0,1$	$115,2 \pm 0,1$	$76,7 \pm 0,1$
0,008	$115,5 \pm 0,1$	$76,9 \pm 0,0$	$115,2 \pm 0,1$	$76,8 \pm 0,0$

Füllgrad	links; [GPa]			rechts; [GPa]		
	ν_1	ν_2	ν_3	ν_1	ν_2	ν_3
1,000	$-366,8 \pm 8,5$	$-44,3 \pm 1,5$	$-82,2 \pm 0,6$	$-400,0 \pm 41,1$	$-52,5 \pm 5,6$	$-87,3 \pm 1,3$
0,504	$-377,2 \pm 6,9$	$-47,2 \pm 2,4$	$-102,5 \pm 1,7$	$-342,4 \pm 17,6$	$-43,7 \pm 3,2$	$-104,8 \pm 0,8$
0,184	$-352,7 \pm 3,5$	$-40,5 \pm 1,9$	$-108,3 \pm 1,2$	$-333,0 \pm 11,4$	$-39,0 \pm 2,0$	$-109,3 \pm 0,4$
0,120	$-344,2 \pm 6,6$	$-40,3 \pm 2,0$	$-109,0 \pm 1,2$	$-338,4 \pm 13,2$	$-38,9 \pm 2,1$	$-110,6 \pm 0,6$
0,064	$-340,7 \pm 6,8$	$-38,3 \pm 2,4$	$-110,3 \pm 1,1$	$-331,3 \pm 10,0$	$-37,9 \pm 1,0$	$-111,2 \pm 0,4$
0,032	$-336,0 \pm 5,1$	$-37,1 \pm 2,8$	$-111,7 \pm 1,5$	$-331,1 \pm 8,0$	$-37,2 \pm 0,7$	$-111,7 \pm 0,2$
0,016	$-334,0 \pm 6,2$	$-37,4 \pm 2,3$	$-111,5 \pm 1,1$	$-328,9 \pm 3,0$	$-36,9 \pm 0,2$	$-111,8 \pm 0,1$
0,008	$-333,0 \pm 7,2$	$-36,3 \pm 2,6$	$-112,6 \pm 0,9$	$-328,4 \pm 2,9$	$-36,7 \pm 0,1$	$-112,0 \pm 0,0$

nen Abweichung kaum. Lediglich ν_1 schwankt im Druckbereich noch deutlich über die statistischen Abweichungen hinaus.

5.3.5. SOEC und TOEC im Ausdünnungsversuch mit Gitternichtlinearität und Vorspannung

In diesem Abschnitt soll daher der Einfluss statischer Vorspannungen am Beispiel hydrostatischen Druckes auf die elastischen Konstanten untersucht werden. Der vorgespannte Zustand wird dabei als Initialzustand bezeichnet, in welchem die Materialpunkte ξ_i um $u_j^{(i)}$ nach X_j verschoben sind (Abb. 3.1 aus Abschnitt 3.1). In einem zweiten Lastschritt werden die bereits beschriebenen Randbedingungen mit einer freien und einer festen Seite auf den Initialzustand angewandt. Dazu wird die im ersten Lastschritt erzeugte Vorspannung als Randbedingung bei $\xi_2 = w$ gewählt (in vorigen Experimenten die freie Seite). Bei $\xi_3 = w$ wird die Verschiebung $u_3^{(i)}$ ermittelt und dort, d.h. bei $X_3 = \xi_3 + u_3^{(i)}$, festgehalten, sodass $u_3 = 0$ gilt. Als letztes wird die Verschiebung u_1 bei $X_1 = w$ vorgegeben und der zweite Lastschritt damit ausgeführt. Die Risse sind hier wiederum homogen verteilt und das Grundmaterial weist die übliche Gitternichtlinearität mit den Gitterkonstanten aus Tab. 5.2 auf.

Um nun die elastischen Konstanten bezüglich des Initialzustands zu erhalten, entwickeln wir den PK2 im Momentanzustand $T_{\alpha\beta}^{(f)}$ an der Stelle $x_i = \delta_{ij}X_j$ und stellen dann den inkrementellen symmetrischen Spannungstensor $T_{\alpha\beta}$ mithilfe der üblichen Transformationen bezüglich des Initialzustands dar. Die so erhaltene Spannung wird in die von der Momentan- in die Initialkonfiguration transformierte Bewegungsgleichung eingesetzt und man bekommt den neuen Steifigkeitstensor (akustischer Tensor) im Initialsystem, der die gesuchten elastischen Konstanten an den entsprechenden Stellen enthält.

Für die Entwicklung des finalen PK2 bezüglich der inkrementellen Verschiebung am Ausgangszustand

5 Änderung der elastischen Konstanten

des zweiten Lastschrittes (Vorspannung) folgt zunächst

$$T_{\alpha\beta}^{(f)} = T_{\alpha\beta}^{(i)} + \left[\frac{\partial T_{\alpha\beta}^{(f)}}{\partial E_{\gamma\delta}^{(f)}} \frac{\partial E_{\gamma\delta}^{(f)}}{\partial F_{i\epsilon}} \right]_{x_i = X_I \delta_{II}} u_{i,\epsilon} + \mathcal{O}(u_{i,\epsilon}^2) \quad (5.15)$$

$$= T_{\alpha\beta}^{(i)} + \left(C_{\alpha\beta\gamma\delta} + C_{\alpha\beta\gamma\delta\mu\nu} E_{\mu\nu}^{(i)} \right) F_{I\delta} \delta_{II} u_{i,\gamma}. \quad (5.16)$$

Durch Subtraktion der Initialspannung $T_{\alpha\beta}^{(i)}$ erhalten wir sofort den inkrementellen PK2

$$T_{\alpha\beta} = \left(C_{\alpha\beta\gamma\delta} + C_{\alpha\beta\gamma\delta\mu\nu} E_{\mu\nu}^{(i)} \right) F_{I\delta} \delta_{II} u_{i,\gamma}, \quad (5.17)$$

der sich hier noch auf die Ausgangskonfiguration bezieht. Ersetzen wir in der integralen Beziehung zwischen der Cauchyspannung und den beiden PK-Tensoren aus Gl. (2.20) die Fläche A_0 einmal durch die Fläche im natürlichen Zustand und einmal durch diese im vorgespannten Zustand, so erhalten die Beziehungen zwischen der finalen Cauchyspannung und den PK2-Tensoren bzgl. der natürlichen Koordinaten und der initialen Koordinaten (vgl. [PSF84])

$$\sigma_{ij}^{(f)} = |F_{I\lambda}|^{-1} F_{i\alpha} F_{j\beta} T_{\alpha\beta}^{(f)} = |F_{IL}|^{-1} F_{iA} F_{jB} T_{AB}^{(f)}. \quad (5.18)$$

Analog ist die Beziehung zwischen Cauchyspannung und PK2 im initialen Zustand durch

$$\sigma_{IJ}^{(i)} = |F_{L\lambda}|^{-1} F_{I\alpha} F_{J\beta} T_{\alpha\beta}^{(i)} \quad (5.19)$$

gegeben, sodass wir mit $|F_{IL}| |F_{m\mu}|^{-1} = |F_{Mm}^{-1} F_{m\mu}|^{-1} = |F_{M\mu}|^{-1}$ sofort

$$T_{IJ} = T_{IJ}^{(f)} - \sigma_{IJ}^{(i)} = |F_{L\lambda}|^{-1} F_{I\alpha} F_{J\beta} T_{\alpha\beta} \quad (5.20)$$

als Relation zwischen den beiden Konfigurationen der inkrementellen PK2 erhalten. Einsetzen von Gl. (5.17) ergibt dann

$$T_{IJ} = |F_{R\rho}|^{-1} F_{I\alpha} F_{J\beta} \left(C_{\alpha\beta\gamma\delta} + C_{\alpha\beta\gamma\delta\mu\nu} E_{\mu\nu}^{(i)} \right) F_{K\delta} F_{L\gamma} \delta_{KK} u_{k,L}, \quad (5.21)$$

wobei zusätzlich die Ableitung der inkrementellen Verschiebung \mathbf{u} nach den Materialkoordinaten $\boldsymbol{\xi}$ durch die Ableitungen bezüglich der Initialkoordinaten \mathbf{X} ersetzt wurde (Faktor $F_{M\gamma}$). Für kleine Vordehnungen $\|u_{M,\gamma}^{(i)}\| \ll 1$ können wir alle hier auftretenden quadratischen Terme bzgl. der Vordehnung vernachlässigen. Mithilfe der Näherung $|F_{L\lambda}|^{-1} \approx 1 - \epsilon_{\mu\mu}^{(i)}$, der genäherten Gl. (3.6) $E_{\alpha\beta}^{(i)} \approx \epsilon_{\alpha\beta}^{(i)}$ sowie dem Wissen, dass $F_{I\alpha} = \delta_{I\alpha} + u_{I,\alpha}^{(i)}$, vereinfacht sich Gl. (5.21) zu

$$T_{IJ} = C_{IJKL} \delta_{KK} u_{k,L} = C_{IJKL} \epsilon_{KL} \quad (5.22)$$

mit

$$C_{IJKL} := \left(1 - \epsilon_{MM}^{(i)} \right) C_{IJKL}^0 + C_{IJKLMN}^0 \epsilon_{MN}^{(i)} \quad (5.23)$$

$$+ C_{IJKM}^0 u_{L,M}^{(i)} + C_{IJLM}^0 u_{K,M}^{(i)} + C_{IMKL}^0 u_{J,M}^{(i)} + C_{JMKL}^0 u_{I,M}^{(i)}. \quad (5.24)$$

Hierzu wurden auch die Ableitungen der Initialdehnungen bezüglich der natürlichen Koordinaten zu Ableitungen nach den Initialkoordinaten transformiert und die vereinfachte Schreibweise

$$C_{IJKL}^0 = \delta_{I\alpha} \delta_{J\beta} \delta_{K\gamma} \delta_{L\delta} C_{\alpha\beta\gamma\delta} \quad (5.25)$$

$$C_{IJKLMN}^0 = \delta_{I\alpha} \delta_{J\beta} \delta_{K\gamma} \delta_{L\delta} \delta_{M\mu} \delta_{N\nu} C_{\alpha\beta\gamma\delta\mu\nu} \quad (5.26)$$

5.3 Bestimmung der elastischen Konstanten aus den Simulationsergebnissen

für die SOEC und TOEC des Mediums im natürlichen Zustand eingeführt. Da die neuen elastischen Konstanten dieselben Symmetrieeigenschaften aufweisen wie ihre jungfräulichen Pendanten, konnten wir außerdem die Summation über die Verschiebungsgradienten durch eine Summation über die symmetrischen inkrementellen Dehnungen $2\epsilon_{KL} := \delta_{Kk}u_{k,L} + \delta_{Ll}u_{l,K}$ ersetzen.

Die Bewegungsgleichung in einem Körper unter Vorspannung kann nun mithilfe der Zustandsgleichung (5.22) aus der der Momentankonfiguration (x_i) in die Initialkonfiguration (X_I) transformiert werden und man bekommt als neuen Steifigkeitstensor die Huang-Steifigkeit aus Kap. 3 (Gl. (3.5)). Für einen isotropen Körper unter hydrostatischer Vorspannung bedeutet das, dass die neuen Lamé-Konstanten λ und μ an denselben Stellen des Steifigkeitstensors stehen wie die des unverspannten Materials in deren Steifigkeitstensor, sodass

$$\lambda = S_{1122}^{(i)} = \lambda_0 + (\lambda^0 + 3\nu_1^0 + 4\nu_2^0) \epsilon^{(i)} \quad (5.27)$$

$$\mu = S_{2323}^{(i)} = \mu_0 + (3\lambda^0 + 3\mu^0 + 3\nu_2^0 + 4\nu_3^0) \epsilon^{(i)} \quad (5.28)$$

gilt. Man sieht, dass die neuen Konstanten für verschwindende Vorspannung mit den ursprünglichen Lamé-Konstanten zusammenfallen. Da es sich um eine hydrostatische Vorspannung handelt, ist diese nur von einem skalaren Parameter – hier $\epsilon^{(i)}$ – abhängig.

Dasselbe Ergebnis erhält man mit der von Iwashimizu und Kobori hergeleiteten Gleichung für die effektiven elastischen Konstanten l_{imrq} im vorgespannten Medium [IK78].

Vergleichen wir diese Ergebnisse mit den Ergebnissen der Simulation eines Würfels ohne Risse unter einer hydrostatischen Vorspannung von 10 GPa, dessen hyperelastisches Verhalten sich mithilfe des nichtlinearen Parametersatzes aus Tab. 5.2 beschreiben lässt, so erhalten wir $\lambda = 147,8$ GPa und $\mu = 87,4$ GPa. Als analytische Voraussage erhält man die Konstanten $\lambda = 143,0$ GPa und $\mu = 88,4$ GPa. Die Abweichung im Schermodul von 1 GPa ist sehr gering. Der Unterschied von fast 5 GPa im Parameter λ zwischen Simulation und analytischer Vorhersage deutet jedoch auf eine Verletzung der Gültigkeit der getroffenen Annahmen hin.

Es stellte sich jedoch heraus, dass eine Druckspannung von 10 GPa das Öffnen der Risse durch die aufgebrachte Verschiebung im zweiten Lastschritt verhindert und der Effekt der Risse damit nahezu verschwindet. Die Ausdünnungsversuche wurden daher mit einer Vorspannung von 500 MPa wiederholt und die effektiven Konstanten berechnet. Die Ergebnisse sind in Tab. 5.14 dargestellt.

Tabelle 5.14.: SOEC und TOEC im Ausdünnungsversuch bei hydrostatischer Vorspannung von 500 MPa in nichtlinearer Matrix.

Füllgrad	λ [GPa]	μ [GPa]	ν_1 [GPa]	ν_2 [GPa]	ν_3 [GPa]
1,000	69,8	70,6	3.870,4	-1.806,7	265,2
0,064	120,4	80,0	7.988,2	-1.929,6	175,3
0,008	125,4	80,9	168,2	-36,2	-312,2

Im letzten Schritt entsprechen die SOEC hier nahezu den analytischen Vorhersagen $\lambda = 126,3$ GPa und $\mu = 81,4$ GPa. Obwohl sich auch die SOEC im vollbesetzten Fall wie auch in der linearen Matrix signifikant ändern, sind die Beträge der Konstanten dritter Ordnung ν_1 und ν_2 bei Vorspannung mehr als dreimal so groß wie im Fall ohne Vorspannung. Die Konstante ν_1 ist hier sogar positiv und ν_3 wechselt mit zunehmender Ausdünnung das Vorzeichen. Die Matrixwerte werden dabei nicht erreicht. Die TOEC ν_1 bleibt positiv und auch ν_2 ist um eine Größenordnung kleiner als der entsprechende Parameter des Matrixmaterials. Da die Auswertung der TOEC bei hoher Ausdünnung jedoch keine verlässlichen Werte mehr liefert, die SOEC dagegen beinahe die Matrixwerte erreichen, können die Werte der TOEC für den vollbesetzten Fall als plausibel angesehen werden.

5.3.6. Getrennte Auswertung für Zug- und Druckbereich

Im ersten Abschnitt über die Simulationsergebnisse wurde bereits erwähnt, dass die Spannungs-Dehnungskurven im Falle Hertzscher Kontakte keinen Knick aufweisen. Es stellt sich daher die Frage, ob die Kurven für diese Art von Kontakten tatsächlich glatt sind, oder ob sich die Nichtdifferenzierbarkeit lediglich zu höheren Ableitungen hin verschiebt. Um dieser Frage nachzugehen, wurden die Simulationsergebnisse abgeleitet und gemäß

$$(\sigma_{ij})^{[0,1]} := \frac{\sigma'_{ij} - \min_{u_{1,1}}(\sigma'_{ij})}{\max_{u_{1,1}}(\sigma'_{ij}) - \min_{u_{1,1}}(\sigma'_{ij})} \quad (5.29)$$

skaliert (siehe Abb. 5.6).

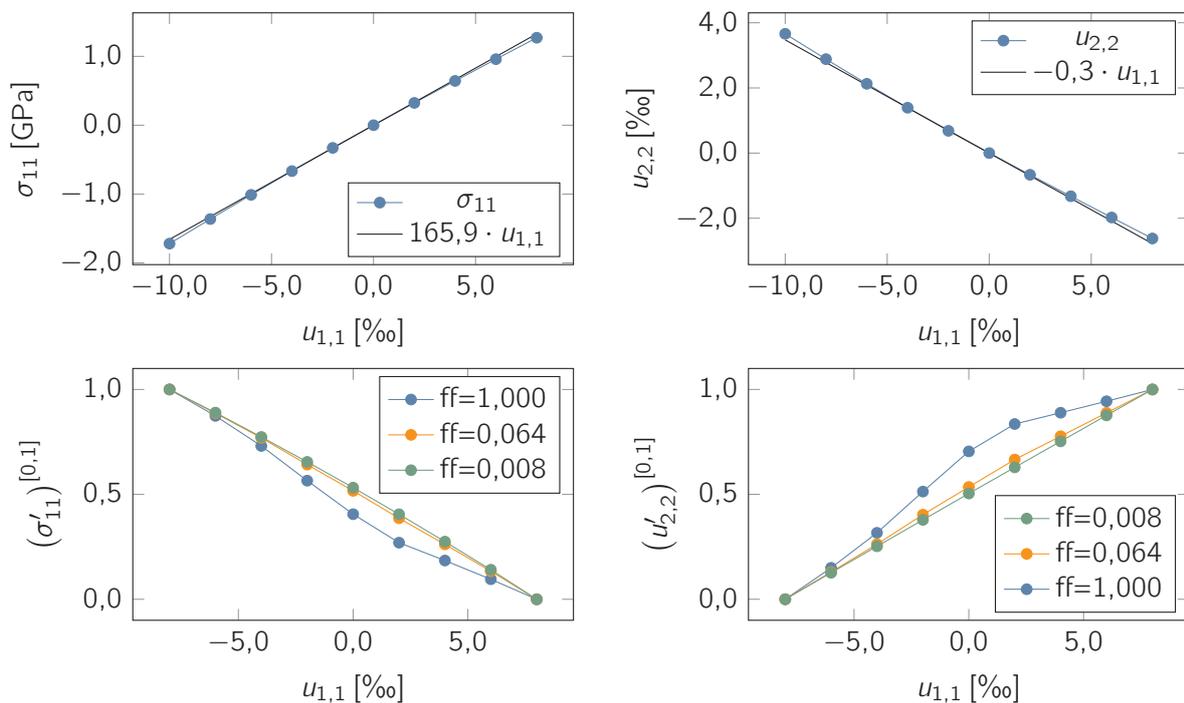


Abbildung 5.6.: Spannungs-Dehnungsrelation (oben links) und Dehnungs-Dehnungsrelation (oben rechts) sowie deren Ableitungen (unten) für zufällig orientierte Hertzsche Kontakte bei einer freien und einer festen Seite. Die Ableitungen wurden gemäß (5.29) skaliert. Der Füllfaktor bezeichnet den Anteil der Vollbesetzung ($1 \hat{=} 125$ Risse).

Beide Relationen zeigen wieder eine leichte Krümmung, die aufgrund der Querkontraktion im Falle der Dehnungs-Dehnungsrelation positiv ausfällt. Im unteren Teil der Abbildung ist eine deutliche bis sprunghafte Änderung des Anstieges von Kompression zu Dilatation zu erkennen, die entweder auf eine starke Krümmung oder sogar eine Nichtdifferenzierbarkeit am Ursprung schließen lässt. Der für die flachen Risse erwartete Knick hat sich also in die Ableitung verschoben. Das bedeutet jedoch, dass sich die zweite Ableitung an der Stelle $u_{1,1} = 0$ stark ändert oder sogar nicht stetig ist. Letzteres hätte zur Folge, dass sich die TOEC für Stauchung deutlich von denen bei Streckung unterscheiden. In den Tabellen 5.16 und 5.17 wurden die Datensätze daher für beide Seiten getrennt ausgewertet. Die Ergebnisse in Tab. 5.16 wurden dabei durch direktes Einsetzen in die Ausdrücke für den Spannungstensor gewonnen. Zur Bestimmung der Werte aus Tab. 5.17 wurden die Datensätze der einzelnen Konfigurationen und Verdünnungsstufen nach Druck und Zug getrennt und beide Seiten separat

5.3 Bestimmung der elastischen Konstanten aus den Simulationsergebnissen

Tabelle 5.16.: Ergebnisse der Simulationen ohne Vorspannung mit linearem Parametersatz aus Tab. 5.2, ausgewertet über die direkte Methode ohne vorherige Approximation der Datensätze und getrennt nach Kompression (links) und Dilatation. Das Gleichungssystem wurde einmal schrittweise (erst SOEC, dann TOEC, oben) und einmal simultan gelöst.

Füllgrad	links; [GPa]		rechts; [GPa]	
	λ	μ	λ	μ
1,000	97,7 ± 0,7	72,8 ± 0,6	63,3 ± 1,4	66,3 ± 0,9
0,504	110,5 ± 0,4	76,3 ± 0,4	82,3 ± 1,1	69,3 ± 0,6
0,184	119,5 ± 0,5	78,8 ± 0,2	96,5 ± 1,2	71,5 ± 0,4
0,120	121,3 ± 0,5	79,4 ± 0,2	99,5 ± 1,2	71,9 ± 0,4
0,064	123,0 ± 0,2	79,9 ± 0,2	102,3 ± 0,6	72,4 ± 0,2
0,032	124,0 ± 0,1	80,2 ± 0,1	104,1 ± 0,3	72,7 ± 0,1
0,016	124,4 ± 0,1	80,3 ± 0,1	105,0 ± 0,3	72,8 ± 0,1
0,008	124,7 ± 0,1	80,4 ± 0,1	105,4 ± 0,3	72,9 ± 0,1

Füllgrad	links; [GPa]			rechts; [GPa]		
	ν_1	ν_2	ν_3	ν_1	ν_2	ν_3
1,000	-685,9 ± 87,7	107,2 ± 20,4	-132,9 ± 9,4	78,0 ± 81,9	-56,9 ± 25,3	-36,7 ± 10,4
0,504	-597,1 ± 54,2	77,1 ± 12,4	-124,4 ± 5,7	-192,3 ± 62,6	7,9 ± 18,1	-71,9 ± 7,3
0,184	-551,3 ± 38,9	61,9 ± 8,4	-121,3 ± 3,9	-433,6 ± 37,3	57,6 ± 10,6	-98,4 ± 4,2
0,120	-539,0 ± 33,0	58,4 ± 7,1	-120,6 ± 3,3	-482,7 ± 41,0	66,6 ± 11,7	-103,3 ± 4,6
0,064	-538,7 ± 21,2	57,6 ± 4,7	-120,9 ± 2,2	-513,2 ± 26,6	70,8 ± 7,3	-106,1 ± 2,9
0,032	-536,1 ± 14,4	56,6 ± 3,2	-120,9 ± 1,5	-532,1 ± 12,4	73,2 ± 3,2	-107,7 ± 1,3
0,016	-539,1 ± 9,9	57,0 ± 2,1	-121,3 ± 1,0	-536,4 ± 9,4	73,2 ± 2,5	-108,0 ± 1,0
0,008	-538,0 ± 10,1	56,7 ± 2,2	-121,2 ± 1,0	-543,3 ± 9,2	74,4 ± 2,5	-108,6 ± 1,0

Füllgrad	links; [GPa]		rechts; [GPa]	
	λ	μ	λ	μ
1,000	76,3 ± 1,1	68,7 ± 0,7	66,1 ± 1,7	176,2 ± 83,3
0,504	94,1 ± 0,7	72,1 ± 0,5	87,6 ± 1,4	-99,0 ± 63,2
0,184	106,9 ± 0,8	74,7 ± 0,3	103,7 ± 1,4	-334,0 ± 37,3
0,120	109,5 ± 0,8	75,2 ± 0,3	107,1 ± 1,5	-382,4 ± 40,6
0,064	112,0 ± 0,4	75,7 ± 0,2	110,4 ± 0,8	-412,6 ± 26,7
0,032	113,5 ± 0,2	76,1 ± 0,1	112,5 ± 0,4	-431,8 ± 12,5
0,016	114,2 ± 0,2	76,2 ± 0,1	113,5 ± 0,3	-436,5 ± 9,3
0,008	114,5 ± 0,2	76,3 ± 0,1	114,0 ± 0,3	-443,1 ± 9,3

Füllgrad	links; [GPa]			rechts; [GPa]		
	ν_1	ν_2	ν_3	ν_1	ν_2	ν_3
1,000	-1.102,6 ± 100,4	-8,4 ± 25,2	-135,3 ± 9,3	-102,6 ± 27,9	68,4 ± 1,0	-36,9 ± 10,4
0,504	-646,1 ± 59,7	-46,4 ± 15,3	-125,3 ± 5,7	-53,6 ± 20,3	72,0 ± 0,7	-72,1 ± 7,3
0,184	-318,6 ± 38,3	-65,8 ± 10,8	-121,4 ± 3,9	-16,6 ± 12,2	74,6 ± 0,4	-98,6 ± 4,2
0,120	-238,7 ± 37,3	-71,0 ± 10,3	-120,5 ± 3,3	-10,1 ± 13,5	75,1 ± 0,5	-103,5 ± 4,7
0,064	-185,8 ± 21,8	-71,8 ± 6,0	-120,8 ± 2,2	-8,7 ± 8,4	75,7 ± 0,3	-106,3 ± 2,9
0,032	-149,2 ± 14,5	-72,9 ± 3,6	-120,7 ± 1,5	-7,9 ± 3,5	76,0 ± 0,1	-107,9 ± 1,3
0,016	-138,0 ± 7,8	-72,2 ± 2,5	-121,1 ± 1,0	-8,8 ± 2,8	76,2 ± 0,1	-108,1 ± 1,0
0,008	-127,3 ± 9,6	-72,9 ± 2,7	-121,0 ± 1,0	-7,9 ± 2,8	76,2 ± 0,1	-108,8 ± 1,0

5 Änderung der elastischen Konstanten

Padé-approximiert. Aus den links- und rechtsseitigen Ableitungen der gebrochenrationalen Funktionen am Ursprung wurden daraufhin die Konstanten dritter Ordnung bestimmt.

Tabelle 5.17.: Ergebnisse der Simulationen ohne Vorspannung mit linearem Parametersatz aus Tab. 5.2, ausgewertet über die Ableitungsmethode mit Padé-Approximation (Approximationskoeffizienten per Principal Axis-Methode) der Datensätze und getrennt nach Kompression (links) und Dilatation.

Füllgrad	links GPa		rechts GPa	
	λ	μ	λ	μ
1,000	$77,3 \pm 1,2$	$68,5 \pm 0,9$	$66,5 \pm 1,7$	$68,6 \pm 1,0$
0,504	$94,5 \pm 0,8$	$72,4 \pm 0,6$	$88,1 \pm 1,4$	$72,4 \pm 0,7$
0,184	$107,2 \pm 0,9$	$75,2 \pm 0,4$	$104,4 \pm 1,4$	$75,2 \pm 0,5$
0,120	$109,8 \pm 0,9$	$75,7 \pm 0,4$	$107,8 \pm 1,5$	$75,7 \pm 0,5$
0,064	$112,3 \pm 0,4$	$76,3 \pm 0,3$	$111,2 \pm 0,8$	$76,3 \pm 0,3$
0,032	$113,9 \pm 0,3$	$76,6 \pm 0,1$	$113,3 \pm 0,4$	$76,6 \pm 0,1$
0,016	$114,6 \pm 0,2$	$76,8 \pm 0,1$	$114,3 \pm 0,3$	$76,8 \pm 0,1$
0,008	$114,9 \pm 0,2$	$76,9 \pm 0,1$	$114,7 \pm 0,3$	$76,9 \pm 0,1$

Füllgrad	links GPa			rechts GPa		
	ν_1	ν_2	ν_3	ν_1	ν_2	ν_3
1,000	$4,4 \pm 52,0$	$-267,7 \pm 18,1$	$-23,1 \pm 4,7$	$-275,3 \pm 1,0$	$25,9 \pm 3,2$	$-101,1 \pm 1,5$
0,504	$-172,8 \pm 29,5$	$-163,3 \pm 8,2$	$-65,4 \pm 3,7$	$-277,7 \pm 1,2$	$-7,0 \pm 2,6$	$-105,3 \pm 1,1$
0,184	$-324,3 \pm 31,1$	$-77,8 \pm 10,3$	$-99,8 \pm 3,0$	$-275,9 \pm 2,3$	$-28,4 \pm 2,4$	$-110,6 \pm 0,8$
0,120	$-330,9 \pm 29,3$	$-64,7 \pm 8,1$	$-106,2 \pm 1,6$	$-273,1 \pm 1,9$	$-33,4 \pm 2,6$	$-111,6 \pm 0,8$
0,064	$-357,0 \pm 14,9$	$-49,8 \pm 3,9$	$-111,3 \pm 1,0$	$-270,2 \pm 0,7$	$-38,3 \pm 1,3$	$-112,7 \pm 0,4$
0,032	$-359,9 \pm 10,8$	$-42,3 \pm 2,7$	$-113,9 \pm 0,4$	$-268,5 \pm 1,1$	$-41,4 \pm 0,6$	$-113,2 \pm 0,3$
0,016	$-372,9 \pm 11,0$	$-37,4 \pm 2,9$	$-115,2 \pm 1,0$	$-266,9 \pm 2,1$	$-43,1 \pm 0,8$	$-113,5 \pm 0,3$
0,008	$-379,4 \pm 8,3$	$-34,9 \pm 2,4$	$-116,3 \pm 0,7$	$-265,6 \pm 1,3$	$-43,9 \pm 0,7$	$-113,6 \pm 0,1$

Den zweiten Ableitungen zufolge bestätigt sich die These eines Sprungs in der zweiten Ableitung. Sowohl die direkte Methode als auch die Ableitungsvariante mit Padé-Approximation zeigen einen deutlichen Unterschied zwischen den TOEC auf beiden Seiten. Allerdings unterscheiden sich auch die SOEC beider Seiten im vollbesetzten Fall in allen Methoden deutlich. Letzteres würde einen Sprung in den Spannungs-Dehnungskurven zur Folge haben, die in Abb. 5.6 jedoch nicht zu erkennen ist. Zu grobe Abstände in den Lastschritten können dabei die Ursache für eine Verschmierung eines möglichen Knickes im Ursprung sein. Um das auszuschließen, wurden die Rechnungen um den Nullpunkt herum verfeinert.

In Abb. 5.7 ist der Vergleich zweier Lastschrittgitter mit unterschiedlicher Lastabstände für ein lineares Material gezeigt. Die entsprechenden Spannungs-Dehnungskurven für eine nichtlineare Matrix sind in Abb. 5.8 gezeigt.

Die Ableitungen der simulierten Spannungs- und Dehnungs-Dehnungskurven weisen sowohl für das grobe als auch für das verfeinerte Gitter um den Nullpunkt herum einen Knick auf. Dessen Ausprägung ist in der skalierten Darstellung für beide Gitter nahezu identisch. Dabei wurde neben der Ordinate auch die Abszisse skaliert, da die Lastschritte in beiden Fällen symmetrisch um den Ruhezustand verteilt sind.

Der Sprung in den TOEC ist legitim, da er vom Knick in den Ableitungen gestützt wird. Beide Gitter weisen jedoch in den Ableitungen einen Knick auf, keinen Sprung. Die Werte der SOEC sollten daher auf beiden Seiten des Ursprungs dieselben sein. In Tab. 5.17 trifft das im vollbesetzten Fall nur auf den Schermodul μ zu. Der Sprung im Parameter λ dagegen ist höher als die mittlere Abweichung zwischen den einzelnen Konfigurationen. Erst nach der dritten Ausdünnung kann von einer Übereinstimmung

5.3 Bestimmung der elastischen Konstanten aus den Simulationsergebnissen

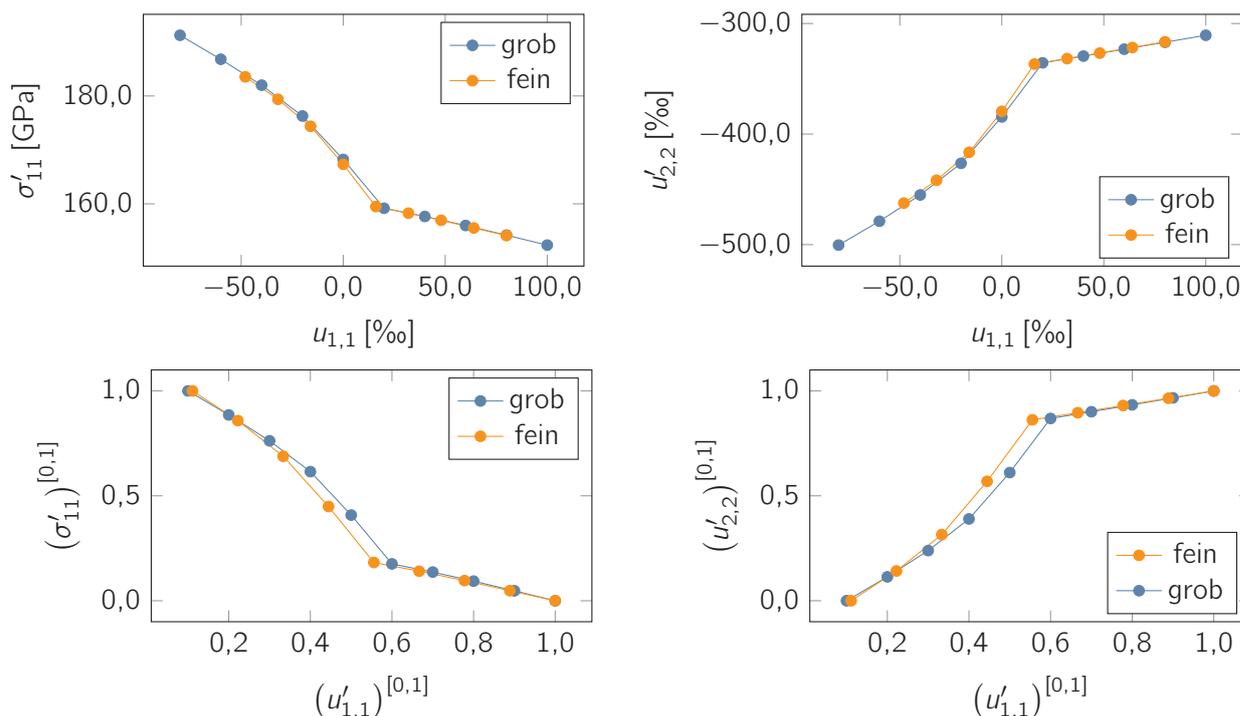


Abbildung 5.7.: Spannungs- (links) und Dehnungs-Dehnungskurven für homogen verteilte, zufällig orientierte Hertzsche Kontakte in einem Würfel mit einer freien und einer festen Seite, gerechnet für zwei äquidistante Lastschrittverteilungen unterschiedlicher Maximalauslenkung. Das Matrixmaterial verhielt sich linear (Tab. 5.2). Dargestellt sind die absoluten (oben) sowie die skalierten Werte.

der SOEC zwischen Zug- und Druckbereich gesprochen werden.

Obwohl die TOEC aufgrund der Nichtdifferenzierbarkeit der Ableitung der Spannungs-Dehnungskurve am Ursprung auf beiden Seiten verschiedene Werte erwarten lassen, so sind diese bei Vollbesetzung im Vergleich zu den bisherigen Ergebnissen unplausibel. Die Konstante ν_1 sticht besonders heraus, da ihr Betrag viel kleiner ist als der des Parameters ν_2 . Außerdem ist ν_1 positiv, was ebenfalls nicht zu den bisherigen Ergebnissen passt. Ab der ersten Verdünnung stimmen die Größenordnungen wieder mit den bekannten Relationen überein. Die Werte sind weiterhin auf beiden Seiten verschieden. Außerdem nehmen ihre Beträge links für ν_2 und rechts für ν_1 mit zunehmender Verdünnung monoton ab. Die verbleibenden Parameter nehmen dagegen zu, obwohl die Eigenschaften des Gesamtsystems mit zunehmender Ausdünnung die Eigenschaften der (linearen) Matrix annehmen sollten ($\nu_i = 0$ ($i = 1, 2, 3$)).

Im Gegensatz zur Ableitungsmethode mit Padé-Approximation wird die Monotonie der ermittelten TOEC bei der direkten Methode mit simultaner Lösung des Gleichungssystems für ν_1 gewahrt. Diese Änderung der Parameter ν_2 und ν_3 ist bei der direkten Methode dagegen vergleichsweise gering, was auf eine geringe Empfindlichkeit der Auswertung gegenüber letzterem hindeutet.

5 Änderung der elastischen Konstanten

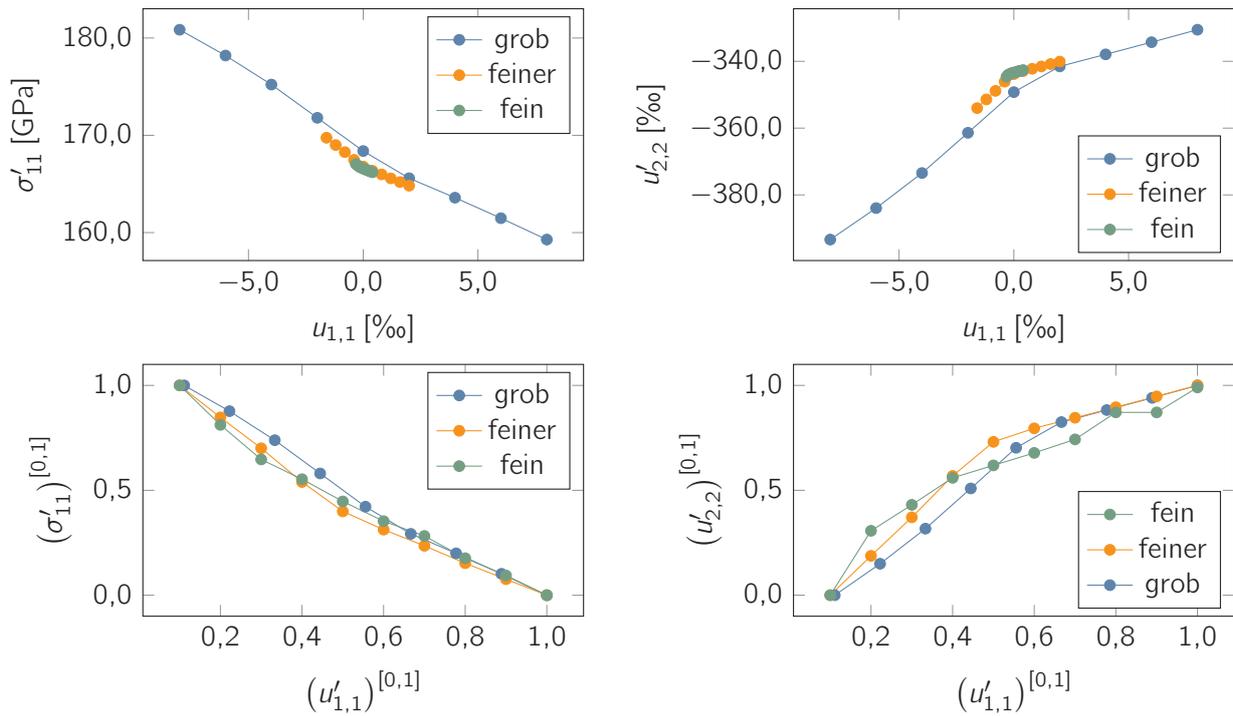


Abbildung 5.8.: Spannungs- (links) und Dehnungs-Dehnungskurven für homogen verteilte, zufällig orientierte Hertzsche Kontakte in einem Würfel mit einer freien und einer festen Seite, gerechnet für zwei äquidistante Lastschrittverteilungen unterschiedlicher Maximalauslenkung. Das Matrixmaterial ist nichtlinear (Tab. 5.2). Dargestellt sind die absoluten (oben) sowie die skalierten Werte.

5.4. Spannungs-Dehnungskurven homogener Rissorientierungen

In diesem Abschnitt soll der Einfluss der Ausrichtung der Risse auf das Verhalten des Gesamtmaterials untersucht werden. Im Speziellen werden dazu homogen ausgerichtete Risse betrachtet, deren Rissnormalen senkrecht oder parallel zur X_1 -Richtung (Verschiebungsrichtung) ausgerichtet sind. Als elastische Konstanten der Matrix wurde der nichtlineare Satz aus Tab. 5.2 gewählt. Der Einfluss der Ausrichtung wurde anhand der flachen Risse untersucht und die Resultate der verschiedenen Randbedingungen miteinander verglichen und das Vorwissen bei der Analyse der Hertzischen Kontakte angewandt.

Kissing Bonds

Für einen vollbesetzter Würfel mit homogen ausgerichteten flachen Rissen wurden Orientierungen senkrecht und parallel zur Verschiebungsrichtung betrachtet und simuliert. In beiden Ausrichtungen wurden die Spannungs-Dehnungskurven jeweils neben den üblichen Randbedingungen für zwei freie, eine freie und ein feste oder zwei feste Seiten berechnet. Die Ergebnisse sind in normierter Form in Abb. 5.9 dargestellt.

Sofern eine der Würfelseiten frei beweglich ist, kann man in der Ableitung der Spannungs-Dehnungskurve für senkrechte Risse keinen Sprung erkennen. Im Zugbereich sind die elastischen Konstanten dabei gleich denen der Matrix, da die Risse geschlossen bleiben und somit keine Änderung hervorrufen. Im Druckbereich öffnen sich die Risse aufgrund der Querkontraktion, können sich aber im Falle zweier freier Seiten ($\sigma_{22}(X_2 = w) = \sigma_{33}(X_3 = w) = 0$) in X_3 -Richtung entfalten, sodass der Effekt der Öffnung zumindest gedämpft wird. Im Falle einer festen Seite würde man daher aufgrund der Querkontraktion eine Öffnung der Risse bedingt durch die eingespannte Seite bei $X_3 = 2$ erwarten. Simulationen an Einzelrissen zeigen jedoch, dass sowohl bei zwei freien Seiten, als auch bei einer freien und einer festen Seite das Rissvolumen null bleibt, die Risse somit, unabhängig vom Vorzeichen der Spannung, geschlossen sind (siehe Abschnitt 5.5). Im Bereich der in diesen Simulationen verwendeten Maximaldehnung kann es also keinen Sprung in der Ableitung der Spannungs-Dehnungskurven unter den beschriebenen Randbedingungen geben. Bei fester Einspannung dagegen zeigt sich ein Sprung in der Spannungsableitung (Abb. 5.9, unten links), da sich die Risse im Zugbereich nun aufgrund der Querkontraktion öffnen. Im Druckbereich verhält sich das Gesamtsystem aufgrund der Einspannung wie das Matrixmaterial.

Sind die Risse parallel zur Verschiebungsrichtung ausgerichtet, so tritt der Sprung unter allen betrachteten Randbedingungen auf (Abb. 5.9, rechts). Die Sprunghöhe wächst dabei jedoch mit der Anzahl der festen Seiten (nicht gezeigt). Bei paralleler Ausrichtung der Risse zu einer Verschiebung beliebigen Ursprungs, etwa einer akustischen Welle, ist somit stets mit einem Klappmechanismus (CAN) und einer damit verbundenen nichtklassischen Nichtlinearität zu rechnen.

Hertzische Kontakte

Da der Einfluss der Risse auf die Spannungs-Dehnungskurven bei senkrechter Orientierung viel geringer ausfällt als bei paralleler Orientierung, wollen wir uns bei der Betrachtung der Hertzischen Kontakte auf den parallelen Fall beschränken. Aufgrund der Relevanz für Lamb-Wellen (S0-Mode) und des geringen Unterschiedes des qualitativen Verlaufs der Spannungs-Dehnungskurven für die verschiedenen Randbedingungen im Falle der parallel ausgerichteten Kissing Bonds, wird außerdem nur der Fall einer freien und einer festen Seite (neben den üblichen Randbedingungen) aufgezeigt.

Im Gegensatz zu den Kissing Bonds, weisen die Hertzischen Kontakte Knicke anstatt Sprünge in den Ableitungen der Spannungs-Dehnungskurven auf (Abb. 5.10). Dieses Verhalten zeigte sich bereits für zufällig orientierte Risse und verstärkt sich nun im Zuge der Gleichausrichtung. Wie auch im Falle

5 Änderung der elastischen Konstanten

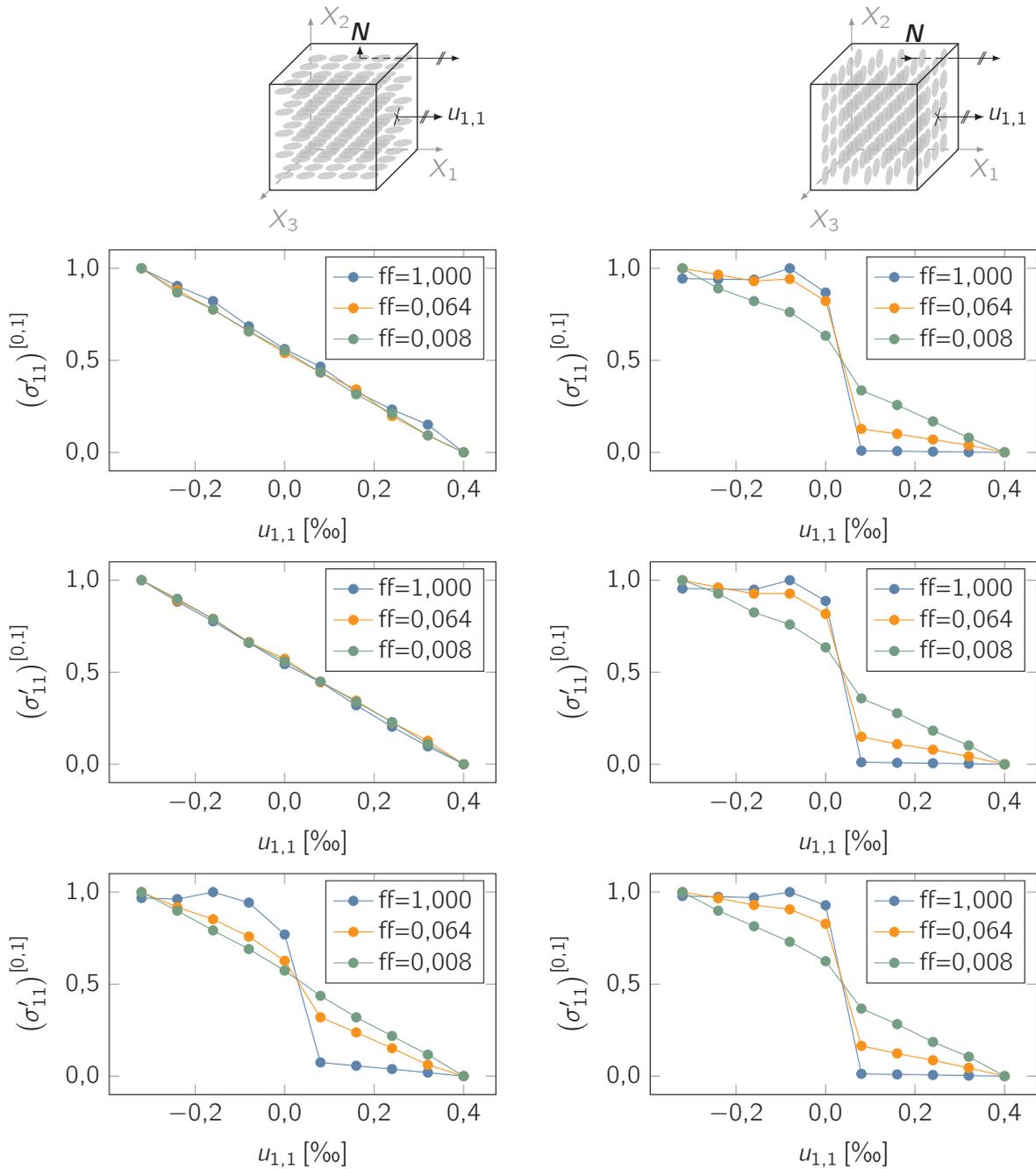


Abbildung 5.9.: Normierte Ableitungen der Spannungs-Dehnungskurven homogen senkrecht (links) und parallel ausgerichteter Kissing Bonds für zwei freie Seiten (oben), eine freie (Mitte) und zwei feste Seiten, neben den üblichen Randbedingungen.

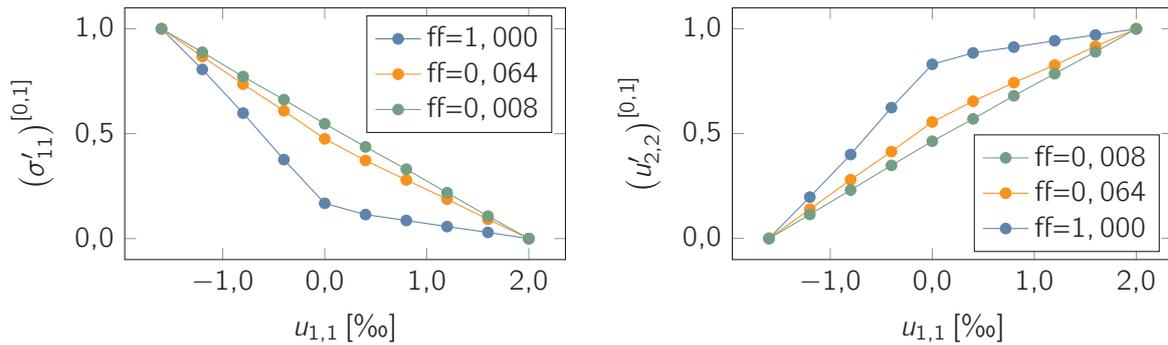


Abbildung 5.10.: Normierte Ableitungen der Spannungs-Dehnungskurve (links) und Dehnungs-Dehnungskurve homogener parallel ausgerichteter Hertzischer Kontakte für eine freie und eine feste Seite, neben den üblichen Randbedingungen.

der flachen Risse, ist die Steifigkeit des Systems im Druckbereich größer. Die Steifigkeit ändert sich jedoch stetig, da sich die Auflagefläche des Hertzischen Kontaktes mit zunehmender Druckspannung vergrößert und die Steifigkeit des Systems somit stetig gegen die Steifigkeit der Matrix strebt. Die Asymmetrie in den Kurven ergeben sich dabei offensichtlich aus der Tatsache, dass das Gesamtsystem im Zugbereich durch das Öffnen der Risse weicher reagiert als im Druckbereich.

Zusammenfassend ist zu erkennen, dass ein echter Unterschied im Verhalten der Kissing Bonds und der Hertzischen Kontakte besteht. Die Untersuchung an homogenen Rissen zeigt, dass es sich bei der Krümmung der Ableitung der Spannungs-Dehnungskurve im Falle Hertzischer Kontakte nicht um eine Verschmierung aufgrund isotroper Orientierungsverteilungen handelt, sondern um einen Effekt der Art der involvierten Risse. Diesen Unterschied gilt es im Folgenden auch in der Modellierung der Risse zu berücksichtigen.

5.5. Verhalten paralleler und senkrechter Einzelrisse

Anhand Simulationen von Einzelrisse soll deren Verhalten, insbesondere beim Übergang von Kompression zu Dilatation in diesem Abschnitt genauer untersucht werden. Einerseits sollen die numerischen Experimente genaueren Aufschluss darüber geben, ob das Vorhandensein eines Risses zu einem Knick in der Spannungs-Dehnungskurve führt oder ob dieser erst in den Ableitungen auftritt und inwiefern dieses Verhalten von der Art des Risses (Kissing Bond oder Hertzischer Kontakt) abhängt. Andererseits möchten wir wissen, wie sich das Rissvolumen, d.h. der Freiraum zwischen den Rissflächen in Abhängigkeit von der Spannung ändert. Mithilfe des gefundenen Zusammenhangs kann dann über geeignete Mittelungsverfahren auf eine effektive Spannungs-Dehnungsrelation des Gesamtkörpers mit homogen verteilten Rissen gleichverteilter Orientierungen geschlossen werden.

Aufgrund der Menge an Simulationen, wurden die Tabellen und Abbildungen der Ergebnisse zu den jeweiligen numerischen Einzelexperimenten in die Anhänge A.11 und A.12 verlegt.

Die Ergebnisse dienen im vorigen Abschnitt bereits zur Begründung dafür, dass bei senkrechter Rissorientierung kein Sprung in der Spannungs-Dehnungskurve für Kissing Bonds zu sehen ist, sofern sich eine der Würfelseiten frei bewegen kann. Erst bei Fixierung aller Würfelseiten tritt der Sprung auch bei senkrechter Orientierung auf. Der Grund dafür, dass sich der Riss nicht öffnet, liegt in der Tatsache, dass die Würfelseiten auf den Koordinatenebenen fixiert sind und der Riss sich somit z.B. im Falle einer festen Seite in Richtung der positiven X_2 -Achse ausbeulen kann. Sobald sich nun die Unterseite ausbeult, wird die Oberseite von dieser aufgrund der Spannungsfreiheit in X_2 -Richtung

5 Änderung der elastischen Konstanten

nicht getrennt und das Volumen bleibt Null. Im Abschnitt A.11 ist außerdem zu sehen, dass dieses Verhalten unabhängig von der gewählten Rissart ist.

Liegt der Riss weiterhin senkrecht zur Verschiebungsrichtung und sind alle Seiten bis auf die zu verschiebende fixiert, so ist deutlich ein Sprung in der Ableitung der Spannungs-Dehnungskurve für die flachen Risse zu erkennen. Der Hertzsche Kontakt zeigt unter denselben Umständen kein charakteristisches Verhalten. Es ist weder ein Knick noch eine signifikante Krümmung zu erkennen, d.h. das Verhalten des Hertzschen Kontakts ist unabhängig von den Randbedingungen. Dieselbe Beobachtung können wir für einen parallel zur Zugrichtung orientierten Hertzschen Kontakt anstellen. Das Verhalten hängt für diese Art von Riss im hiesigen Dehnungsbereich also lediglich von der Orientierung des Risses ab.

Der flache Riss weist bei paralleler Orientierung unter allen Randbedingungen einen Sprung in der Ableitung der Spannungs-Dehnungskurve auf. Dies ist das wohlbekannte Verhalten flacher Mikrorisse unter Einfluss einer Normalspannung. Außerdem sind die Ableitungen der Spannungs-Dehnungskurven in dieser Orientierung auf beiden Seiten des Ursprungs konstant, d.h. die effektive Steifigkeit des Gesamtsystems lässt sich hier mithilfe einer Stufenfunktion darstellen (vgl. [Pec15a]). Ist der flache Riss dagegen senkrecht zur Verschiebungsrichtung orientiert, so ist auf beiden Seiten des Ursprungs, insbesondere im Druckbereich, ein leichter Anstieg zu erkennen. Dies ließe auf eine Öffnung des Risses beim Drücken schließen. Die entsprechenden Auswertungen der Rissvolumina zeigen jedoch, dass dieser Effekt lediglich ein Nebeneffekt der verwandten Kontaktformulierung (augmented Lagrange) ist. Aufgrund der Einführung der Kontaktsteifigkeit und der damit verbundenen möglichen Interpenetration der Kontaktknotenpaare bei Anlegen einer Normalkraft ist das *absolute* Rissvolumen im Druckbereich nicht Null, d.h. die Knoten durchdringen sich und führen zu einer Aufweichung des Gesamtsystems. Da der Strafterm in der Kontaktformulierung dabei proportional zur Eindringtiefe ist, wird das System mit zunehmender Kontraktion steifer, sodass σ'_{11} mit $-u_{1,1}$ ansteigt, wie im entsprechenden Diagramm zu sehen.

Der Unterschied zwischen der strikten und relaxierten Kontaktformulierung ist insbesondere in den Auswertungen der Verschiebungen einzelner Kontaktpaare (Abb. A.8) zu beobachten. Die strikte Methode (rechte Seite) lässt keine Knotendurchdringung zu, d.h. die Knoten der Kontaktfläche können von dieser aus gesehen nicht hinter der Zielfläche liegen. Unter Einfluss einer Normalkraft (bzgl. der Kontakt- oder Zielfläche) auf das Knotenpaar verschiebt sich dieses gemeinsam. Der Riss bleibt geschlossen. Führt man lediglich Terme zur Bestrafung der Durchdringung ein, so können sich Knoten der einen Kontaktfläche auch hinter die Knoten der gegenüberliegenden Fläche verschieben und führen zur Überschneidung der Verschiebungskurven (Abb. A.8, links) im Druckbereich. Das hat zur Folge, dass sich ein *negatives Rissvolumen* ausbildet, dessen Absolutwert in den Volumen-Spannungsdiagrammen abgebildet ist. Ein solches negatives Rissvolumen ist für Hertzsche Kontakte nicht zu beobachten, da das Rissvolumen hier als Freiraum zwischen der Protuberanz und der Zielfläche definiert ist. Selbst bei Durchdringung im Kontaktbereich verschwindet das Gesamtvolumen des Hohlraumes nicht.

Zusammenfassend können wir feststellen, dass die Hertzschen Kontakte ein von den Randbedingungen unabhängiges Verhalten zeigen, dass lediglich von der Orientierung des Risses beeinflusst wird. Die Spannungs-Dehnungskurven sind gekrümmt und zeigen einen Knick in der Ableitung. Die flachen Risse dagegen weisen diesen Knick bereits in der Spannungs-Dehnungskurve selbst auf. Ihr Verhalten ist im Falle paralleler Orientierung unabhängig von den Randbedingungen. Für senkrecht zur Verschiebungsrichtung orientierte Risse ist das wohlbekannte *Klapper* (clapping mechanism) auch bei festen Seitenflächen zu beobachten. Die Steifigkeit des Gesamtsystems wird darüber hinaus von der gewählten Kontaktformulierung beeinflusst. Für die Penalty-Methode verhält sich das Riss-Matrix-System bei Druck weicher als bei der strikten Formulierung. Um die entstehenden Gleichungssysteme bei der Betrachtung mehrerer Risse jedoch lösen zu können, ist ein Ausweichen zur Strafformulierung nötig. Die entstehenden Fehler können hier allerdings durch geeignete Wahl der Kontaktsteifigkeit (siehe Abb. 5.13) minimiert werden.

5.6. Verbesserung der Auswertergebnisse durch simultane Randbedingungen

In den vorangegangenen Abschnitten wurde bereits angemerkt, dass die Berechnung der elastischen Konstanten aus den Ableitungsmatrizen nicht sehr stabil ist. Dies liegt an deren schlechter Kondition, welche wiederum von dem Auftreten der Dehnungsableitung in Richtung der freien Oberfläche nach dem aufgebrachtten Verschiebungsgradienten herrührt. Um den Auswerteprozess zu stabilisieren, ist es daher notwendig, die Dehnungsableitungen aus den Berechnungen zu eliminieren. Besonders einfache Formen der Matrizen bekommt man dabei, indem man den PK2-Tensor aus Gl. (5.4) bezüglich der Murnaghan-Konstanten \mathbf{C} ausdrückt. Da wir nach speziellen Randbedingungen und Verschiebungssituationen suchen wollen, in denen diese Konstanten möglichst einzeln vorkommen und sich damit leichter auswerten lassen, stellen wir den PK2-Tensor in verkürzter Schreibweise als

$$T_I = \begin{pmatrix} E_1 & E_2 + E_3 & E_1^2 & E_2^2 + 2E_1E_2 + E_3^2 + 2E_1E_3 & 2E_2E_3 \\ E_2 & E_1 + E_3 & E_2^2 & E_1^2 + 2E_2E_1 + E_3^2 + 2E_2E_3 & 2E_1E_3 \\ E_3 & E_1 + E_2 & E_3^2 & E_1^2 + 2E_3E_1 + E_2^2 + 2E_2E_3 & 2E_1E_2 \end{pmatrix}_{IK} \begin{pmatrix} C_{11} \\ C_{12} \\ 1/2 C_{111} \\ 1/2 C_{112} \\ 1/2 C_{123} \end{pmatrix}_K \quad (5.30)$$

dar. Es soll weiterhin nur ein freier Dehnungsparameter zulässig sein. Durch definiertes gleichzeitiges Drücken oder Schieben einer weiteren Würfelseite wird die Annahme nur eines freien Parameters nicht verletzt und ermöglicht zusätzliche Vereinfachungen. Mit Blick auf Gl. (5.30) und der Tatsache im Hinterkopf, dass zur Bildung der resultierenden Koeffizientenmatrizen die Ableitungen an der Stelle $E_1 = 0$ gebildet werden, sieht man zunächst, dass sich für zwei geklemmte Seiten ($E_2 = E_3 = 0$) besonders einfache Matrizen zur Bestimmung von C_{11} , C_{12} , C_{111} und C_{112} ergeben:

$$\begin{pmatrix} T'_1 \\ T'_2 \\ T''_1 \\ T''_2 \end{pmatrix}_I = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}_{IK} \begin{pmatrix} C_{11} \\ C_{12} \\ C_{111} \\ C_{112} \end{pmatrix}_K = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 6 & 8 \\ 0 & 0 & 1 & 2 & 0 \end{pmatrix}_{IK} \begin{pmatrix} \lambda \\ \mu \\ \nu_1 \\ \nu_2 \\ \nu_3 \end{pmatrix}_K \quad (5.31)$$

Die Steifigkeit $C_{123} = \nu_1$ kann in dieser Konfiguration nicht bestimmt werden, da deren Koeffizienten in Gl. (5.30) nur gemischte Terme in den Lagrange-Dehnungen enthalten. Diese Tatsache ist verständlich, da der Koeffizient C_{123} die Steifigkeit des Materials infolge einer Dehnung bei Vorhandensein senkrecht aufeinander stehender Vordehnungen senkrecht zur Dehnungsrichtung beschreibt. Eine der Dehnungen ist jedoch stets gleich Null. Den letzten, noch fehlenden Koeffizienten bekommen wir schließlich durch gleichzeitiges Drücken und/oder Schieben. Dabei wird wieder eine Seite festgehalten ($E_2 = 0$) und die anderen beiden Seiten werden mit dem gleichen Vorzeichen verschoben ($E_1 = E_3 = E$)

$$\begin{pmatrix} T'_1 \\ T'_2 \\ T''_1 \\ T''_2 \end{pmatrix}_I = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 2 \end{pmatrix}_{IK} \begin{pmatrix} C_{11} \\ C_{12} \\ C_{111} \\ C_{112} \\ C_{123} \end{pmatrix}_K = \begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 12 & 8 \\ 0 & 0 & 4 & 4 & 0 \end{pmatrix}_{IK} \begin{pmatrix} \lambda \\ \mu \\ \nu_1 \\ \nu_2 \\ \nu_3 \end{pmatrix}_K \quad (5.32)$$

5 Änderung der elastischen Konstanten

oder beide verbleibende Seiten mit dem gleichen Betrag jedoch verschiedenen Vorzeichen ($E_1 = -E_3 = E$), d.h.

$$\begin{pmatrix} T'_1 \\ T'_3 \\ T''_2 \\ T''_3 \end{pmatrix}_I = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & -2 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & 0 \end{pmatrix}_{IK} \begin{pmatrix} C_{11} \\ C_{12} \\ C_{111} \\ C_{112} \\ C_{123} \end{pmatrix}_K = \begin{pmatrix} 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4 & 8 \end{pmatrix}_{IK} \begin{pmatrix} \lambda \\ \mu \\ \nu_1 \\ \nu_2 \\ \nu_3 \end{pmatrix}_K. \quad (5.33)$$

Man beachte, dass in den ersten beiden Fällen stets alle relevanten elastischen Konstanten in beiden Formulierungen involviert sind. Halten wir dagegen eine Seite fest und verschieben die beiden anderen Seiten in Richtung der jeweiligen Flächennormale mit dem gleichen Betrag aber unterschiedlichem Vorzeichen, so weist die zweite Koeffizientenmatrix 0-Spalten für λ und ν_1 auf. Diese Parameter können also nicht aus diesem Versuch gewonnen werden. Das Gleichungssystem (5.33) reduziert sich damit zum überbestimmten System

$$\begin{pmatrix} T'_1 \\ T'_3 \\ T''_2 \\ T''_3 \end{pmatrix}_I = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 \\ 0 & 4 & 8 \end{pmatrix}_{IK} \begin{pmatrix} \mu \\ \nu_2 \\ \nu_3 \end{pmatrix}_K \quad (5.34)$$

für die verbleibenden Konstanten μ , ν_2 sowie ν_3 .

In den hiesigen Koeffizientenmatrizen treten weder Dehnungen noch deren Ableitungen auf, sodass sich die Kondition der kombinierten Ausgleichsmatrizen im Gegensatz zu denen bei Verschiebung nur einer Seite erheblich verbessert.

Die in den obigen Gleichungen auftretenden Ableitungen des PK2-Tensors nach dem freien Dehnungsparameter erhielten wir durch Ableiten kubischer Polynomapproximation der entsprechenden Spannungs-Dehnungskurven. Die Ergebnisse der Ausgleichsrechnungen der berechneten Konfigurationen finden sich in der Tab. 5.18. Simuliert wurden hier zufällig orientierte Hertzsche Kontakte.

Tabelle 5.18.: SOEC und TOEC bei Verwendung simultaner Randbedingungen.

Füllgrad	λ [GPa]	μ [GPa]	ν_1 [GPa]	ν_2 [GPa]	ν_3 [GPa]
1,000	$72,0 \pm 0,8$	$68,5 \pm 0,9$	$-134,8 \pm 9,7$	$-203,8 \pm 12,2$	$-73,3 \pm 6,5$
0,504	$94,9 \pm 0,8$	$73,8 \pm 0,6$	$-214,5 \pm 9,0$	$-265,7 \pm 15,1$	$-92,4 \pm 13,7$
0,184	$111,4 \pm 0,3$	$77,8 \pm 0,3$	$-276,9 \pm 12,8$	$-305,1 \pm 7,8$	$-107,0 \pm 1,2$
0,120	$115,5 \pm 0,5$	$78,5 \pm 0,3$	$-299,0 \pm 3,5$	$-326,3 \pm 9,6$	$-100,2 \pm 8,6$
0,064	$118,9 \pm 0,2$	$79,2 \pm 0,1$	$-367,4 \pm 41,6$	$-337,3 \pm 20,2$	$-92,8 \pm 12,5$
0,032	$120,9 \pm 0,2$	$79,7 \pm 0,1$	$-345,0 \pm 35,6$	$-343,0 \pm 15,8$	$-101,7 \pm 16,0$
0,016	$121,9 \pm 0,1$	$79,9 \pm 0,1$	$-373,8 \pm 0,9$	$-343,8 \pm 14,0$	$-103,0 \pm 12,1$
0,008	$122,4 \pm 0,1$	$79,9 \pm 0,1$	$-383,6 \pm 28,7$	$-337,9 \pm 6,9$	$-103,3 \pm 11,0$

Die SOEC erreichen hier im stark ausgedünnten Fall beinahe die Werte der Matrix. Die TOEC dagegen weichen auch hier über die Standardabweichung hinaus von den Materialparametern der Matrix ab. Da sich die Kondition der verwendeten Matrizen gegenüber der Auswertung mit den üblichen Randbedingungen stark verbessert hat, können numerische Fehler keine große Rolle spielen. Die starken Abweichungen können daher nur auf die Unterschiede zwischen den Orientierungen der Risse in den berechneten Konfigurationen zurückgeführt werden. Dafür spricht auch die Tatsache, dass sich

die Standardabweichung mit *abnehmender* Rissdichte vergrößert, nicht mit zunehmender Rissdichte, wie es bei der Auswertung mit den üblichen Randbedingungen der Fall ist. Diese Beobachtung scheint insofern plausibel, als die Orientierung der Einzelrisse im ausgedünnten Fall eine viel stärkere Rolle spielt als im vollbesetzten Fall, in dem sich das Gesamtmaterial nahezu isotrop verhält.

5.7. Materialmodelle für Medien mit Mikrorissen

In ungestörten, hyperelastischen Medien folgt aus der Ableitung der Dehnungsenergie das verallgemeinerte Hookesche Gesetz und wir erhalten für den PK2-Tensor

$$T_{IJ}^0 = C_{IJKL}^0 E_{KL}^0 + \frac{1}{2} C_{IJKLMN}^0 E_{KL}^0 E_{MN}^0, \quad (5.35)$$

mit den Green-Lagrangeschen Verzerrungen \mathbf{E}^0 und den elastischen Konstanten \mathbf{C}^0 des Matrixmaterials. Durch das Einbringen eines Risses in das ungestörte Medium wird der Körper zusätzlich gedehnt. Es stellt sich die Frage, ob es möglich ist, die Gesamtdehnung in einen ungestörten und einen rissinduzierten Anteil aufzuteilen.

Für kleine Verzerrungen können wir die rissinduzierte Dehnung $\mathring{\epsilon}_{KL}$ sofort als additiven Beitrag zur Dehnung im ungestörten Medium ϵ_{KL}^0 betrachten, die Gesamtdehnung ϵ_{KL} also als Summe [QC06]

$$\epsilon_{KL} = \epsilon_{KL}^0 + \mathring{\epsilon}_{KL}. \quad (5.36)$$

schreiben. Da die Gesamtdehnung die Saint-Venant-Bedingung (2.36) erfüllt, müssen bei hier ϵ_{KL}^0 und $\mathring{\epsilon}_{KL}$ ebenfalls kompatibel sein.

Johnson [Joh81] hingegen zerlegt die Green-Lagrange-Dehnung

$$E_{KL} = E_{KL}^e + E_{KL}^p \quad (5.37)$$

additiv in einen elastischen und einen plastischen Anteil. Dabei wird zusätzlich angenommen, dass der plastische Anteil ebenfalls symmetrisch ist, dieselben Invarianzen wie die Gesamtdehnung besitzt, gleich der Gesamtdehnung ist, sobald keine elastische Dehnung vorliegt, und seine Änderung ratenunabhängig ist. Diese Definition weicht bewusst von der multiplikativen Zerlegung des Deformationsgradienten gemäß

$$F_{kL} = F_{kL}^e F_{L'L}^p, \quad (5.38)$$

wie von Lee *et al.* in [LL67] vorgeschlagen, ab. Eine solche Komposition der Deformationsgradienten erlaubt keine additive Zerlegung der Dehnung, da eine Änderung des plastischen Zustandes \mathbf{F}^p unter elastischer Dehnung zu einer Änderung des finalen Zustands führt, der jedoch nicht gleich der reinen Änderung des plastischen Zustands ist. Durch die Einführung der Hencky-Dehnung [Wri01], die über den Logarithmus des Deformationsgradienten definiert ist, erhält man wieder eine additive Zerlegung der Gesamtdehnung (Henecky-Dehnung). Obwohl wir große Amplituden nicht per se ausschließen wollen, müssen die betrachteten Dehnungen unterhalb der Fließgrenze typischer Metalle liegen. Für die hier betrachteten Legierungen bedeutet das, dass die Abweichung zwischen Hencky-Dehnung und Green-Lagrange-Dehnung gering sind und eine additive Zerlegung des Verschiebungsgradienten möglich ist. Weiterhin sollen alle Verschiebungen nach dem Entfernen der äußeren Kräfte verschwinden, sodass auch die Gesamtdehnung Null wird. Mithilfe der Definition der Lagrange-Dehnungen kann der

5 Änderung der elastischen Konstanten

PK2-Tensor im risslosen Medium (5.35) somit als

$$\begin{aligned}
T_{IJ}^0 &= C_{IJKL}^0 \frac{1}{2} (u_{k,L} \delta_{kK} + u_{I,K} \delta_{IL}) - C_{IJKL}^0 \frac{1}{2} (\dot{u}_{k,L} \delta_{kK} + \dot{u}_{I,K} \delta_{IL}) \\
&+ C_{IJKL}^0 \frac{1}{2} u_{r,K} u_{r,L} + C_{IJKL}^0 \frac{1}{2} \dot{u}_{r,K} \dot{u}_{r,L} - C_{IJKL}^0 \dot{u}_{r,K} u_{r,L} \\
&+ C_{IJKLMN}^0 \frac{1}{8} (u_{k,L} \delta_{kK} + u_{I,K} \delta_{IL}) (u_{m,N} \delta_{mM} + u_{n,M} \delta_{nN}) \\
&+ C_{IJKLMN}^0 \frac{1}{8} (\dot{u}_{k,L} \delta_{kK} + \dot{u}_{I,K} \delta_{IL}) (\dot{u}_{m,N} \delta_{mM} + \dot{u}_{n,M} \delta_{nN}) \\
&- C_{IJKLMN}^0 \frac{1}{4} (\dot{u}_{k,L} \delta_{kK} + \dot{u}_{I,K} \delta_{IL}) (u_{m,N} \delta_{mM} + u_{n,M} \delta_{nN})
\end{aligned} \tag{5.39}$$

geschrieben werden. Nun benötigen wir einen Ausdruck für die unbekanntenen, rissinduzierten Verschiebungsgradienten $\dot{u}_{k,L}$, um sie aus obiger Gleichung eliminieren zu können.

Sowohl in den Simulationen mit homogenen Rissorientierungen als auch in den Versuchen zum Verhalten der Einzelrisse ist zu sehen, dass beide Rissarten (Kissing Bond und Hertzscher Kontakt) einen Knick oder zumindest eine starke Krümmung im Ursprung aufweisen. Durch geeignete Anpassungen des Energiefunktionalen soll hier jeweils ein hyperelastisches Materialmodell für beide Arten von Rissen betrachtet werden. Diese werden in den folgenden Abschnitten näher beschrieben und für die vorliegenden Daten ausgewertet. Darüber hinaus werden mikro-mechanische Modelle vorgeschlagen und die darin vorkommenden Modellparameter an die simulierten Spannungs-Dehnungskurven angepasst.

5.7.1. Hertzsche Kontakte

Dazu entwickeln wir die Green-Lagrange-Dehnung eines einzelnen Risses $d\overset{\circ}{E}_{KL}$ nach der Spannung – dem PK2-Tensor – im risseigenen Koordinatensystem (\mathbf{e}'_I)

$$d\overset{\circ}{E}'_{33} = \tilde{\alpha} \frac{T'_{33}}{E} + \frac{\tilde{\beta}}{2} \left(\frac{T'_{33}}{E} \right)^2, \tag{5.40}$$

wobei wir angenommen haben, dass durch den Riss im wesentlichen eine Dehnung in der Rissnormalenrichtung (X'_3 -Richtung, siehe Abb. 5.11) erzeugt wird. Weiterhin nehmen wir an, dass eventuell auftretende Scherdehnungen im Rissystem vernachlässigt werden können und bekommen wegen

$$d\overset{\circ}{E}'_{33} = d\overset{\circ}{u}'_{3,3} + \frac{1}{2} \left(d\overset{\circ}{u}'_{3,3} \right)^2 \tag{5.41}$$

die Entwicklung des gesuchten Verschiebungsgradienten $d\overset{\circ}{u}'_{3,3}$ nach den Spannungen im Rissystem

$$d\overset{\circ}{u}'_{3,3} = \alpha \frac{T'_{33}}{E} + \frac{\beta}{2} \left(\frac{T'_{33}}{E} \right)^2 + \mathcal{O} \left(\left(\frac{T'_{33}}{E} \right)^3 \right). \tag{5.42}$$

Die durch den Riss hervorgerufene Deformation muss nun ins ursprüngliche System (\mathbf{e}_I) transformiert werden. Mit den in Abb. 5.11 definierten Winkeln folgt für die Transformationsmatrix \mathbf{a}

$$\mathbf{a}^T =: R_{X_3}(\theta) R_{X_2}(\phi) = \begin{pmatrix} \cos(\theta) \cos(\phi) & -\sin(\theta) & \cos(\theta) \sin(\phi) \\ \sin(\theta) \cos(\phi) & \cos(\theta) & \sin(\theta) \sin(\phi) \\ -\sin(\phi) & 0 & \cos(\phi) \end{pmatrix}, \tag{5.43}$$

wobei R_{X_2} und R_{X_3} die gewöhnlichen Drehungen um die X_2 - bzw. X_3 -Achse darstellen (siehe Gl. (A.5) im Anhang) und die Winkel θ und ϕ in Abb. 5.11 definiert sind.

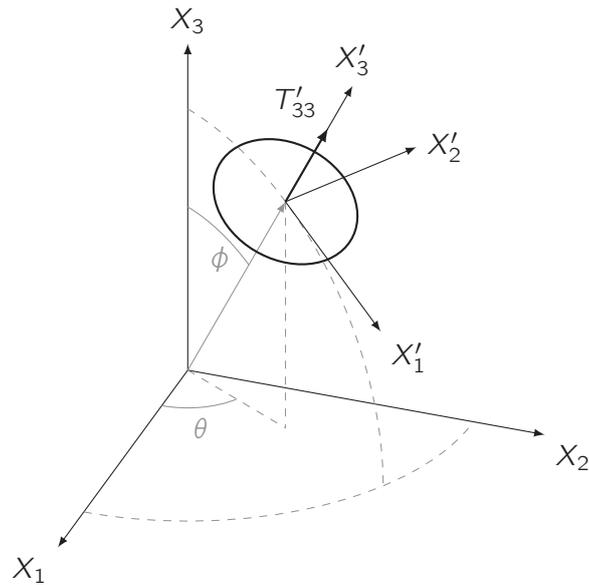


Abbildung 5.11.: Ursprüngliches (e_i) und in die Rissoberfläche gedrehtes, affines Koordinatensystem (e'_i).

Mit den ebenfalls im Anhang gegebenen Tensortransformationen und Gl. (5.42) folgt sofort

$$\begin{aligned} d\hat{u}_{i,J} &= a_{3i}a_{3J} \left\{ \frac{\alpha}{E} a_{3K}a_{3L}T_{KL} + \frac{\beta}{2E^2} a_{3K}a_{3L}T_{KL}a_{3M}a_{3N}T_{MN} \right\} \\ &=: \frac{\alpha}{E} \delta_{ii} g_{IJKL} T_{KL} + \frac{\beta}{2E^2} \delta_{ii} g_{IJKLMN} T_{KL} T_{MN} \end{aligned} \quad (5.44)$$

für den Verschiebungsgradienten eines einzelnen Risses. Die Tensoren

$$g_{I_1 \dots I_N} := a_{3I_1} \cdots a_{3I_N} \quad (5.45)$$

sind dabei offensichtlich invariant gegenüber beliebigen Vertauschungen der Indizes. Um den gesamten rissinduzierten Verschiebungsgradienten zu erhalten, ist die Einzelverschiebung bei gegebener Rissdichte über das gesamte Testvolumen zu integrieren. Bei homogener Spannungsverteilung müssen dazu lediglich die Tensoren \mathbf{g} integriert werden, deren Integrale

$$G_{IJKL} := \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} g_{IJKL}(\phi, \theta) N(\phi, \theta) \sin \phi \, d\phi \, d\theta \quad (5.46)$$

dieselben Symmetrieeigenschaften besitzen. Die durch die Gesamtheit aller Risse induzierte Dehnung ist damit durch

$$\dot{\epsilon}_{IJ} = \frac{\alpha}{E} G_{IJKL} T_{KL} + \frac{\beta}{2E^2} G_{IJKLMN} T_{KL} T_{MN} \quad (5.47)$$

gegeben. Dieser Tensor ist symmetrisch und kann so für weitere Rechnungen auch in der verkürzten Notation angegeben werden.

Beispiel 5.1 (isotrope Rissverteilung). Im Falle einer isotropen Rissverteilung (Verteilungsfunktion $N(\phi, \theta) \equiv 1$) ist dies besonders einfach. Die Integration der vier- und sechsstufigen Tensoren ergibt

5 Änderung der elastischen Konstanten

hier

$$\begin{aligned}
 G_{IJKL} &= \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} g_{IJKL} \sin \phi \, d\phi \, d\theta = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} a_{3I} a_{3J} a_{3K} a_{3L} \sin \phi \, d\phi \, d\theta \\
 &= \frac{2\pi}{15} \begin{pmatrix} 3 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 3 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}_{AB} v_{IJA} v_{KLB} \\
 &=: G_{AB} v_{IJA} v_{KLB}
 \end{aligned} \tag{5.48}$$

und

$$\begin{aligned}
 G_{IJKLMN} &= \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} g_{IJKLMN} \sin \phi \, d\phi \, d\theta = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} a_{3I} a_{3J} a_{3K} a_{3L} a_{3M} a_{3N} \sin \phi \, d\phi \, d\theta \\
 &= \frac{2\pi}{105} \left\{ \begin{aligned} &\delta_{I1} \delta_{J1} \begin{pmatrix} 15 & 3 & 3 & 0 & 0 & 0 \\ 3 & 3 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 3 & 1 & 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}_{AB} &+ \delta_{I2} \delta_{J2} \begin{pmatrix} 3 & 3 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 3 & 15 & 3 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 3 & 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}_{AB} \\ &+ \delta_{I3} \delta_{J3} \begin{pmatrix} 3 & 1 & 3 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 3 & 3 & 0 & 0 & 0 \\ 3 & 3 & 15 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}_{AB} &+ \delta_{I2} \delta_{J3} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3 & 0 & 0 \\ 1 & 3 & 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}_{AB} \\ &+ \delta_{I1} \delta_{J3} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 3 & 1 & 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}_{AB} &+ \delta_{I1} \delta_{J2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 3 & 3 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}_{AB} \end{aligned} \right\} v_{KLA} v_{MNB} \\
 &=: G_{ABC} v_{IJA} v_{KLB} v_{MNC}
 \end{aligned} \tag{5.49}$$

mit

$$\delta_{IKJL} := \frac{1}{2} (\delta_{IK} \delta_{JL} + \delta_{IL} \delta_{JK}). \tag{5.50}$$

und dem in Gl. (2.48) definierten Verkürzer v_{IJA} . ▲

Nimmt man an, dass die Risse den größten Beitrag zur Gesamtnichtlinearität leisten und vernachlässigt die Gitternichtlinearität sowie alle bzgl. des Dehnungsgradienten quadratischen Terme in Gl. (5.39), so folgt für den PK2

$$\begin{aligned}
 T_{IJ} &= C_{IJKL}^0 \frac{1}{2} (u_{k,L} \delta_{kK} + u_{I,K} \delta_{IL}) - C_{IJKL}^0 \frac{1}{2} (\dot{u}_{k,L} \delta_{kK} + \dot{u}_{I,K} \delta_{IL}) \\
 &= C_{IJKL}^0 \epsilon_{KL} - C_{IJKL}^0 \frac{\alpha}{E} G_{KLMN} T_{MN} - C_{IJKL}^0 \frac{\beta}{2E^2} G_{KLMNOP} T_{MN} T_{OP},
 \end{aligned} \tag{5.51}$$

wobei $\mathring{u}_{k,L}$ den Gesamtverschiebungsgradienten, d.h. das entsprechende Integral über alle $d\mathring{u}_{k,L}$ darstellt. Die Symmetrieeigenschaften der G -Tensoren erlauben die Verwendung der Voigtschen Notation

$$\begin{aligned} T_{AVIJA} &= C_{AB}^0 v_{IJA} v_{KLB} \mathring{E}_C v_{KLC} \\ &\quad - C_{AB}^0 v_{IJA} v_{KLB} \frac{\alpha}{E} [G_{CD} v_{KLC} v_{MND}] [T_E v_{MNE}] \\ &\quad - C_{AB}^0 v_{IJA} v_{KLB} \frac{\beta}{2E^2} [G_{CDE} v_{KLC} v_{MND} v_{OPE}] [T_F v_{MNF}] [T_G v_{OPG}] \end{aligned} \quad (5.52)$$

bzw.

$$T_A = C_{AB}^0 E_B - C_{AB}^0 \bar{G}_{BC} T_C - \frac{1}{2} C_{AB}^0 \bar{G}_{BCD} T_C T_D, \quad (5.53)$$

wobei

$$\begin{aligned} \bar{G}_{AB} &:= \left(\frac{\alpha}{E} \right) D_{AE} D_{BF} G_{EF}, \\ \bar{G}_{ABC} &:= \left(\frac{\beta}{E^2} \right) D_{AE} D_{BF} D_{CG} G_{EFG}, \end{aligned}$$

die Matrix D aus dem Produkt zweier Verkürzer \mathbf{v} entsprechend

$$D_{AB} = v_{MNA} v_{MNB} = \text{diag}(1, 1, 1, 2, 2, 2)_{AB}$$

hervorgeht und (E_A) der üblichen Kurzschreibweise für die Dehnung entspricht. Diese Gleichung lässt sich iterativ nach dem PK2-Tensor T auflösen. Mit

$$\tilde{M}_{AB} = I_{AB} + C_{AC}^0 \bar{G}_{CB} \quad (5.54)$$

und $M = \tilde{M}^{-1}$ gilt für die erste Iterierte

$$T_A^1 = M_{AB} C_{BC}^0 E_C \quad (5.55)$$

und schließlich

$$\begin{aligned} T_A^2 &= M_{AB} C_{BC}^0 E_C - \frac{1}{2} M_{AS} C_{SB}^0 \bar{G}_{BDE} [M_{DO} C_{OP}^0 E_P] [M_{EQ} C_{QR}^0 E_R] \\ &=: C_{AB} E_B + \frac{1}{2} C_{ABC} E_B E_C \end{aligned} \quad (5.56)$$

mit den geänderten SOEC

$$C_{AB} = M_{AC} C_{BC}^0 \quad (5.57)$$

und den daraus resultierenden TOEC

$$C_{ABC} = -\bar{G}_{DEF} C_{AD} C_{BE} C_{CF}. \quad (5.58)$$

Man erkennt sofort, dass die rissinduzierte Nichtlinearität unter Vernachlässigung der Gitternichtlinearität einen Satz effektiver TOEC im gestörten System induziert, die invariant gegenüber beliebiger Vertauschung der Voigtschen Indizes sind.

Einbeziehung der Gitternichtlinearität

Bisher haben wir angenommen, dass die Nichtlinearität lediglich von den Rissen induziert wird. Nun soll die Gitternichtlinearität des Matrixmaterials zusätzlich beachtet und die resultierenden geänderten Konstanten zweiter und dritter Ordnung berechnet werden. Ausgangspunkt ist wieder die Entwicklung des PK2 nach den Lagrangen Dehnungen im Materialsystem in Gl. (5.35), wobei wieder die Gesamtdehnung im rissbehafteten System als hinreichend klein vorausgesetzt und entsprechend additiv in einen rissinduzierten und einen risslosen Anteil zerlegt wird. Im Gegensatz zum Fall ohne Gitternichtlinearität werden die quadratischen Terme in Gl. (5.39) mit berücksichtigt und die Gitternichtlinearität auf diese Weise mit einbezogen.

Setzen wir den oben hergeleiteten Ausdruck für die rissinduzierte Dehnung in die Entwicklung des PK2 aus Gl. (5.39) ein, so bekommen wir eine sowohl bzgl. der Spannungen als auch bzgl. der Dehnungen nichtlineare Gleichung, die sich durch Iteration nach den Spannungen im Materialsystem auflösen lässt und damit die geänderten elastischen Konstanten liefert. Um wieder mit symmetrischen Dehnungen arbeiten zu können, nehmen wir an, dass die rissinduzierten Verschiebungsgradienten durch ihren symmetrischen Anteil ersetzt werden können.

Der sowohl bezüglich der Spannung als auch bezüglich der Dehnung lineare Anteil der nichtlinearen Relation ist gleich der im Fall ohne Gitternichtlinearität, sodass sich für die erste Iterierte des Spannungstensors wieder Gl. (5.55) ergibt und die darin enthaltenen geänderten SOEC diejenigen aus Gl. (5.57) sind. Der finale Ausdruck für den PK2-Tensor folgt nun einfach durch Einsetzen der ersten Iterierten in die rechte Seite der oben genannten nichtlinearen impliziten Gleichung für die Spannung. Ausgehend von der Spannungs-Dehnungsrelation im unveränderten Medium erhalten wir mithilfe der additiven Dehnungszerlegung wieder Gleichung (5.39), die unter der Annahme symmetrischer Verschiebungsgradienten

$$\begin{aligned}
 T_{IJ} = & C_{IJKL}^0 \epsilon_{KL} - C_{IJKL}^0 \dot{\epsilon}_{KL} \\
 & + C_{IJKL}^0 \epsilon_{RK} \epsilon_{RL} + C_{IJKL}^0 \dot{\epsilon}_{RK} \dot{\epsilon}_{RL} - 2C_{IJKL}^0 \dot{\epsilon}_{RK} \epsilon_{RL} \\
 & + \frac{1}{2} C_{IJKLMN}^0 \epsilon_{KL} \epsilon_{MN} + \frac{1}{2} C_{IJKLMN}^0 \dot{\epsilon}_{KL} \dot{\epsilon}_{MN} - C_{IJKLMN}^0 \dot{\epsilon}_{KL} \epsilon_{MN}
 \end{aligned} \tag{5.59}$$

lautet. Die Symmetrieeigenschaften der involvierten Tensoren erlauben es uns nun wieder, die Indizes zu verkürzen und den PK2 als

$$T_I = C_{IJ}^0 \epsilon_J - C_{IJ}^0 \dot{\epsilon}_J + C_{IL}^0 R_{LJK} \epsilon_J \epsilon_K + C_{IL}^0 R_{LJK} \dot{\epsilon}_J \dot{\epsilon}_K - 2C_{IL}^0 R_{LJK} \dot{\epsilon}_J \epsilon_K \tag{5.60}$$

$$+ \frac{1}{2} C_{IJK}^0 \epsilon_J \epsilon_K + \frac{1}{2} C_{IJK}^0 \dot{\epsilon}_J \dot{\epsilon}_K - C_{IJK}^0 \dot{\epsilon}_J \epsilon_K \tag{5.61}$$

mit

$$R_{LJK} = v_{kIL} v_{krM} v_{lrN} D_{MJ}^{-1} D_{NK}^{-1} \tag{5.62}$$

darzustellen. Durch die Substitution der Entwicklung

$$\dot{\epsilon}_A = \bar{G}_{AB} T_B + \frac{1}{2} \bar{G}_{ABC} T_B T_C \tag{5.63}$$

der rissinduzierten Dehnung in verkürzter Notation erhalten wir eine sowohl in den Dehnungen als auch

in den Spannungen nichtlineare Gleichung

$$T_I = C_{IJ}^0 \epsilon_J - C_{IJ}^0 \left(\bar{G}_{JB} T_B + \frac{1}{2} \bar{G}_{JBC} T_B T_C \right) + C_{IL}^0 R_{LJK} \epsilon_J \epsilon_K \quad (5.64)$$

$$+ C_{IL}^0 R_{LJK} \left(\bar{G}_{JB} T_B + \frac{1}{2} \bar{G}_{JBC} T_B T_C \right) \left(\bar{G}_{KB} T_B + \frac{1}{2} \bar{G}_{KBC} T_B T_C \right) \quad (5.65)$$

$$- 2C_{IL}^0 R_{LJK} \left(\bar{G}_{JB} T_B + \frac{1}{2} \bar{G}_{JBC} T_B T_C \right) \epsilon_K \quad (5.66)$$

$$+ \frac{1}{2} C_{IJK}^0 \epsilon_J \epsilon_K + \frac{1}{2} C_{IJK}^0 \left(\bar{G}_{JB} T_B + \frac{1}{2} \bar{G}_{JBC} T_B T_C \right) \left(\bar{G}_{KB} T_B + \frac{1}{2} \bar{G}_{KBC} T_B T_C \right) \quad (5.67)$$

$$- C_{IJK}^0 \left(\bar{G}_{JB} T_B + \frac{1}{2} \bar{G}_{JBC} T_B T_C \right) \epsilon_K \quad (5.68)$$

$$= C_{IJ}^0 \epsilon_J - C_{IB}^0 \bar{G}_{BJ} T_J + \frac{1}{2} \left(H_{IJK}^{(1,1)} \epsilon_J \epsilon_K + H_{IJK}^{(2,2)} T_J T_K + H_{IJK}^{(1,2)} \epsilon_J T_K \right) + \mathcal{O}(T^3) \quad (5.69)$$

mit

$$H_{IJK}^{(1,1)} := 2C_{IL}^0 R_{LJK} + C_{LJK}^0 \quad (5.70)$$

$$H_{IJK}^{(2,2)} := -C_{IB}^0 \bar{G}_{BJK} + (2C_{IL}^0 R_{LBC} + C_{IBC}^0) \bar{G}_{BJ} \bar{G}_{CK} \quad (5.71)$$

$$H_{IJK}^{(1,2)} := -4C_{IL}^0 R_{LBJ} \bar{G}_{BK} - 2C_{IBJ}^0 \bar{G}_{BK}, \quad (5.72)$$

die es wiederum iterativ zu lösen gilt. Der sowohl in den Spannungen als auch in den Dehnungen lineare Teil ergibt wieder die gleiche Relation wie im Fall ohne Gitternichtlinearität, sodass die Konstanten zweiter Ordnung wieder diejenigen aus Gl. (5.57) sind. Ersetzt man nun die Spannungen in den nichtlinearen Termen durch die eben berechnete erste Iterierte, so erhalten wir die neuen TOEC

$$\begin{aligned} C_{ABC} &= M_{AI} \left[H_{IBC}^{(1,1)} + H_{IBK}^{(1,2)} C_{KC} + H_{IKM}^{(2,2)} C_{KB} C_{MC} \right] \\ &= \hat{C}_{ABC} + M_{AI} \left[H_{IBC}^{(1,1)} + H_{IBK}^{(1,2)} C_{KC} + \tilde{H}_{IKM}^{(2,2)} C_{KB} C_{MC} \right] \end{aligned} \quad (5.73)$$

mit $\tilde{H}_{IJK}^{(2,2)} := H_{IJK}^{(2,2)} + C_{IB}^0 \bar{G}_{BJK}$. Es sei bemerkt, dass die neuen TOEC unter Vernachlässigung der Gitternichtlinearität nicht gleich ebendiesen unter Einbeziehung der Gitternichtlinearität an der Stelle $(C_{ABC}^0) = 0$ sind. Es bleibt zusätzlich ein Term, der die Ausdrücke (R_{IJK}) enthält und auf die quadratischen Terme in den Green-Lagrange-Dehnungen zurückzuführen ist.

Auswertung

Die Ergebnisse der Parameter α und β des mikro-mechanischen Modells, ausgewertet für einen Datensatz mit vorhandener Nichtlinearität sind in Tab. 5.20 zu finden. Diese Werte wurden wieder mithilfe der Ableitungsmethode ermittelt, d.h. die simulierten Spannungs-Dehnungskurven wurden polynomiell approximiert und am Ursprung abgeleitet. Die erhaltenen Werte wurden dann in die Ableitung des PK2 im gerissenen Medium (mit den neuen Konstanten (C_{AB}) und (C_{ABC})) eingesetzt und die unbekannt Parameter über einen Ausgleich berechnet.

Mithilfe der Modellparameter können wir nun die effektiven elastischen Konstanten im gerissenen System berechnen. Wie in Tab. 5.21 zu sehen, ist die rissinduzierte Änderung der SOEC infolge von Rissen sehr gering, diesem Modell zufolge fast vernachlässigbar. Die Änderung des Parameters λ im vollbesetzten Fall gegenüber dem entsprechenden Lamé-Parameter der Materix ist kleiner als 5‰ und die Änderung des Schermoduls sogar unter 1‰.

Andererseits ist im selben Vergleich eine enorme Änderung der TOEC zu verzeichnen. Werden beide Modellparameter beachtet, so ergibt sich der linke Satz der TOEC in Tab. 5.22. Im vollbesetzten Fall

5 Änderung der elastischen Konstanten

Tabelle 5.20.: Modellparameter des mikro-mechanischen Modells für Hertzsche Kontakte.

Füllgrad	$\alpha [10^{-6}\text{GPa}^{-1}]$	$\beta [10^{-6}\text{GPa}^{-2}]$
1,000	$0,154 \pm 0,032$	$8,785 \pm 1,715$
0,504	$0,059 \pm 0,009$	$4,252 \pm 0,418$
0,184	$0,049 \pm 0,006$	$4,191 \pm 0,774$
0,120	$0,041 \pm 0,008$	$4,308 \pm 1,383$
0,064	$0,042 \pm 0,013$	$4,306 \pm 1,508$
0,032	$0,037 \pm 0,015$	$4,433 \pm 1,291$
0,016	$0,042 \pm 0,026$	$3,440 \pm 2,435$
0,008	$0,042 \pm 0,023$	$4,166 \pm 3,718$
0,000	—	—

Tabelle 5.21.: Effektive SOEC des Gesamtsystems mit Hertzschen Kontakten.

Füllgrad	$\lambda [\text{GPa}]$	$\mu [\text{GPa}]$
1,000	122,43	79,97
0,504	122,89	79,99
0,184	122,97	80,00
0,120	122,98	80,00
0,064	122,99	80,00
0,032	123,00	80,00
0,016	123,00	80,00
0,008	123,00	80,00
0,000	123,00	80,00

hat sich die Konstante l gegenüber dem Matrixmaterial mehr als versechsfacht. Auch die Zunahme von über 50 % für die Konstante m ist signifikant. Bemerkenswert ist der geringe Einfluss des Parameters α auf die TOEC. Für $\alpha = 0$ und $\beta \neq 0$ ändern sich die TOEC kaum (mittlerer Satz). Den größten Einfluss auf die TOEC im gerissenen System hat hier tatsächlich β . Das scheint intuitiv plausibel, da das mikro-mechanische Modell der relativen Volumenänderung eben diesen Parameter als Koeffizienten des quadratischen Anteils vorsieht. Die Abhängigkeit der neuen Konstanten von den Modellparametern ist jedoch nicht trivial, und die praktische Unabhängigkeit von α nicht von vornherein klar.

Tabelle 5.22.: Effektive TOEC des Gesamtsystems mit Hertzschen Kontakten.

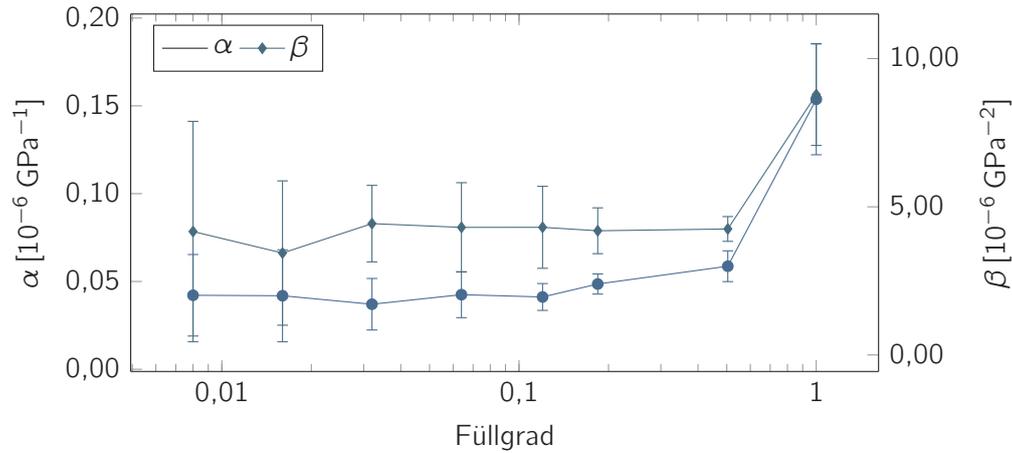
Füllgrad	$\alpha \neq 0, \beta \neq 0, [\text{GPa}]$			$\alpha = 0, \beta \neq 0, [\text{GPa}]$			$\alpha \neq 0, \beta = 0, [\text{GPa}]$		
	l	m	n	l	m	n	l	m	n
1,000	-3.480,7	-961,1	-654,2	-3.518,4	-964,0	-650,4	-519,6	-603,5	-483,1
0,504	-1.253,9	-692,2	-521,6	-1.256,7	-692,6	-520,8	-525,6	-604,7	-479,8
0,184	-789,0	-636,4	-494,3	-789,6	-636,5	-494,0	-526,6	-604,9	-479,2
0,120	-702,7	-626,1	-489,2	-703,0	-626,1	-489,1	-526,8	-605,0	-479,1
0,064	-620,7	-616,2	-484,4	-620,8	-616,3	-484,4	-526,9	-605,0	-479,1
0,032	-575,2	-610,8	-481,8	-575,3	-610,8	-481,8	-526,9	-605,0	-479,0
0,016	-545,7	-607,2	-480,1	-545,7	-607,2	-480,1	-527,0	-605,0	-479,0
0,008	-538,3	-606,4	-479,7	-538,3	-606,4	-479,7	-527,0	-605,0	-479,0
0,000	-527,0	-605,0	-479,0	-527,0	-605,0	-479,0	-527,0	-605,0	-479,0

In Abb. 5.12 sind die Modellparameter α und β noch einmal über dem Füllgrad aufgetragen. Die Fehlerbalken implizieren eine gute Übereinstimmung der bestimmten Parameter über alle Verdünnungsstufen hinweg. Lediglich die Konstanten im vollbesetzte Fall liegen etwas höher als der Durchschnitt, wobei sich die Fehlerbalken dennoch überschneiden. Diese könnte bereits ein Effekt der Interaktion der Risse untereinander sein, die wir in unseren Annahmen stets ausgeschlossen haben.

5.7.2. Kissing Bonds

Die für die Einzelrisse und homogenen Orientierungen beobachteten Sprünge in den Ableitungen der Spannungs-Dehnungskurven im Falle flacher Rissoberflächen legen nahe, ein Energiefunktional zu verwenden, das einmal stetig bezüglich der Lagrangeschen Dehnungen differenzierbar ist. Das von

Abbildung 5.12.: Modellparameter des mikro-mechanischen Modells für Hertzsche Kontakte.



Lyakhovsky und Myasnikov vorgeschlagenen Potential [LM84]

$$\Phi^{\text{KB}} = \frac{\lambda}{2} I_1^2 + \mu I_2 + \kappa^{\text{KB}} I_1 \sqrt{I_2} \quad (5.74)$$

erfüllt diese Bedingung, denn für den PK2 ergibt sich durch Differenziation

$$T_I^{\text{KB}} = \lambda I_1 \mathbb{1}_I + 2\mu E_I + \kappa^{\text{KB}} \left(\sqrt{I_2} \mathbb{1}_I + \frac{I_1}{\sqrt{I_2}} E_I \right) \quad (5.75)$$

und damit eine Funktion, die im Allgemeinen einen Knick im Ursprung aufweist. Nehmen wir im Folgenden an, das Modell beschreibe das Verhalten der flachen Risse in unseren numerischen Experimenten. Wie in den vorangegangenen Abschnitten wollen wir auch hier die noch unbekannt Materialparameter bestimmen. Ableitung nach E_1 , dem freien Parameter in den Simulationen, ergibt

$$T_I^{\text{KB}'} = \lambda I_1' \mathbb{1}_I + 2\mu E_I' + \frac{\kappa^{\text{KB}}}{\sqrt{I_2}} \left\{ \frac{I_2'}{2} \mathbb{1}_I + I_1' E_I - \frac{I_1}{I_2} \frac{I_2'}{2} E_I + I_1 E_I' \right\}, \quad (5.76)$$

wobei der Strich die Ableitung an der Stelle $E_1 = 0$ darstellt und der Koeffizient vor κ^{KB} damit als Grenzwert zu verstehen ist. Die Ableitungen der Invarianten lauten

$$\frac{\partial I_1}{\partial E_1} = 1 + \frac{\partial E_2}{\partial E_1} + \frac{\partial E_3}{\partial E_1}, \quad \frac{1}{2} \frac{\partial I_2}{\partial E_1} = E_1 + E_2 \frac{\partial E_2}{\partial E_1} + E_3 \frac{\partial E_3}{\partial E_1}, \quad (5.77)$$

d.h. die Ableitung der Invariante I_2 verschwindet bei $E_1 = 0$, woraus sich die Beschränktheit des letzten Terms in Gl. (5.76) ergibt. Die genaue Schranke bekommen wir, indem wir den Grenzwert des Koeffizienten betrachten. Da es sich um flache Risse handelt und wir mit dem Materialmodell bereits einen Knick in der Spannungs-Dehnungs-Kurve implizieren, nehmen wir an, dass der Proportionalitätsfaktor zwischen E_1 und E_2 ebenfalls vom Signum der Dehnung in X_1 -Richtung abhängt, d.h. es

5 Änderung der elastischen Konstanten

gelte $E_2 = \tau_{\pm} E_1$. Im Falle einer steifen Wand in X_3 -Richtung gilt dann

$$\lim_{E_1 \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{I_2}} \frac{1}{2} \frac{\partial I_2}{\partial E_1} = \lim_{E_1 \rightarrow 0} \frac{E_1 + E_2 \frac{\partial E_2}{\partial E_1}}{\sqrt{E_1^2 + E_2^2}} = \begin{cases} \sqrt{1 + \tau_+^2} & E_1 \rightarrow 0+ \\ -\sqrt{1 + \tau_-^2} & E_1 \rightarrow 0- \end{cases} \quad (5.78)$$

$$\lim_{E_1 \rightarrow 0} \frac{I_1'}{\sqrt{I_2}} E_1 = I_1' \lim_{E_1 \rightarrow 0} \frac{E_1}{\sqrt{1 + \tau_{\pm}^2 |E_1|}} = \begin{cases} \frac{1 + \tau_+}{\sqrt{1 + \tau_+^2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \tau_+ \end{pmatrix}_I & E_1 \rightarrow 0+ \\ -\frac{1 + \tau_-}{\sqrt{1 + \tau_-^2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \tau_- \end{pmatrix}_I & E_1 \rightarrow 0- \end{cases} \quad (5.79)$$

$$\lim_{E_1 \rightarrow 0} \frac{I_1}{I_2} \frac{E_1}{\sqrt{I_2}} \frac{1}{2} \frac{\partial I_2}{\partial E_1} = \lim_{E_1 \rightarrow 0} \frac{(E_1 + E_2) \left(E_1 + E_2 \frac{\partial E_2}{\partial E_1} \right) E_1}{(E_1^2 + E_2^2) \sqrt{1 + \tau_{\pm}^2 |E_1|}} = \begin{cases} \frac{1 + \tau_+}{\sqrt{1 + \tau_+^2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \tau_+ \end{pmatrix}_I & E_1 \rightarrow 0+ \\ -\frac{1 + \tau_-}{\sqrt{1 + \tau_-^2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \tau_- \end{pmatrix}_I & E_1 \rightarrow 0- \end{cases} \quad (5.80)$$

$$\lim_{E_1 \rightarrow 0} \frac{I_1}{\sqrt{I_2}} E_1' = \lim_{E_1 \rightarrow 0} \frac{(1 + \tau_{\pm}) E_1}{\sqrt{1 + \tau_{\pm}^2 |E_1|}} E_1' = \begin{cases} \frac{1 + \tau_+}{\sqrt{1 + \tau_+^2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \tau_+ \end{pmatrix}_I & E_1 \rightarrow 0+ \\ -\frac{1 + \tau_-}{\sqrt{1 + \tau_-^2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \tau_- \end{pmatrix}_I & E_1 \rightarrow 0- \end{cases} \quad (5.81)$$

für die relevanten Grenzwerte in der Ableitung des PK2. Letztere vereinfacht sich so zu

$$T_I^{\text{KB}'} = \lambda (1 + \tau_{\pm}) \mathbb{1}_I + 2\mu (\delta_{I1} + \tau_{\pm} \delta_{I2}) \pm \frac{\kappa^{\text{KB}}}{\sqrt{1 + \tau_{\pm}^2}} \left\{ (1 + \tau_{\pm}^2) \mathbb{1}_I + (1 + \tau_{\pm}) \delta_{I1} + (\tau_{\pm} + \tau_{\pm}^2) \delta_{I2} \right\}, \quad (5.82)$$

und weist für $\tau_{\pm} \neq 0$ einen Sprung im Ursprung auf. Den unbekannt Parameter τ_{\pm} bestimmen wir hier direkt aus dem Verhältnis der Dehnungen E_1 und E_2 und setzen ihn, entsprechend dem Vorzeichen der Dehnung, in die Ableitung des PK2 nach E_1 ein, sodass sich zwei Gleichungssysteme für Zug und Druck ergeben. Aus der Kombination dieser beiden Systeme können wir dann über lineare Regression die verbleibenden drei Parameter λ , μ und κ^{KB} berechnen. Die Ergebnisse der Auswertungen der Parameter κ^{KB} sind in Tab. 5.23 zusammengefasst.

Alternativ kann man über die Spannungsfreiheit $T_2 = 0$ der Oberfläche bei $X_2 = w$

$$0 = \lambda (1 + \tau_{\pm}) E_1 + 2\mu \tau_{\pm} E_1 + \kappa^{\text{KB}} \left(\sqrt{1 + \tau_{\pm}^2} |E_1| + \frac{1 + \tau_{\pm}}{\sqrt{1 + \tau_{\pm}^2}} \tau_{\pm} \text{sign } E_1 \right) \quad (5.83)$$

eine Bedingung für den Proportionalitätsfaktor τ_{\pm} herleiten, die sich zur quartischen Gleichung

$$(1 + \tau_{\pm}^2) (\lambda (1 + \tau_{\pm}) E_1 + 2\mu \tau_{\pm} E_1)^2 = \kappa^{\text{KB}2} \left\{ (1 + \tau_{\pm}^2) |E_1| + (1 + \tau_{\pm}) \tau_{\pm} \text{sign } E_1 \right\}^2 \quad (5.84)$$

umformen lässt, und durch entsprechende Linearisierung in das Gesamtsystem zur Lösung nach den verbleibenden Parametern einbinden. Dieses Vorgehen scheint wesentlich aufwendiger und wurde hier zunächst nicht verfolgt.

Tabelle 5.23.: Extrahierte Konstanten für zufällig orientierte Kissing Bonds unter Annahme des mithilfe des Knickpotentials in Gl. (5.74) beschriebenen Materialverhaltens. Die zwei frei wählbaren Randbedingungen waren einerseits zwei freie Seiten ($\kappa_{\text{frei}}^{\text{KB}}$) und andererseits zwei feste Seiten ($\kappa_{\text{fest}}^{\text{KB}}$).

Füllgrad	$N\kappa_{\text{frei}}^{\text{KB}}$ [GPa]	$N\kappa_{\text{fest}}^{\text{KB}}$ [GPa]	$\kappa_{\text{frei}}^{\text{KB}}$ [GPa]	$\kappa_{\text{fest}}^{\text{KB}}$ [GPa]
1,000	-2,131	-4,775	-2,131	-4,775
0,064	-0,166	-0,392	-2,592	-6,120
0,008	0,018	-0,022	2,283	-2,773

Homogen ausgerichtete Kissing Bonds

Der Potentialansatz (5.74) setzt makroskopisch isotropes Verhalten des Gesamtkörpers voraus. Im Falle homogen ausgerichteter Risse gilt diese Annahme natürlich nicht mehr und das Modell muss entsprechend angepasst werden. Betrachten wir dazu einen in X_1 -Richtung ausgerichteten Riss, auf den eine Normalspannung T_1 wirke (verkürzte Schreibweise). Für die rissinduzierte Dehnung $\hat{\epsilon}$ setzen wir wieder

$$\hat{\epsilon}_{IJ} = \int_S \Delta V N n_I n_J d\Omega \quad (5.85)$$

an, wobei N wieder die Rissorientierungsverteilung darstellt und so gewählt ist, dass nur Risse in X_1 -Richtung auftreten können. Die Rissvolumenänderung soll hier durch das einfache Modell

$$\frac{\Delta V}{V} = \alpha_0 T_1 + \alpha_1 |T_1| \quad (5.86)$$

beschrieben werden, wobei das Bezugsvolumen V in der Rissorientierungsverteilung N enthalten ist und die rissinduzierte Dehnung sich schließlich zu

$$\hat{\epsilon}_{IJ} = (\alpha_0 T_1 + \alpha_1 |T_1|) \delta_{I1} \delta_{J1} \quad (5.87)$$

ergibt. Setzen wir diesen Ausdruck wie im ersten Abschnitt dieses Kapitels in den PK2-Tensor ein, so erhalten wir für hinreichend kleine Dehnungen

$$T_{IJ} = C_{IJKL}^0 (\epsilon_{KL} - \hat{\epsilon}_{KL}) + \frac{1}{2} C_{IJKLMN}^0 (\epsilon_{KL} - \hat{\epsilon}_{KL}) (\epsilon_{MN} - \hat{\epsilon}_{MN}), \quad (5.88)$$

sofern die Gitternichtlinearität des Matrixmaterials mit einbezogen wird. Setzen wir das einfache Modell für die rissinduzierte Dehnung aus Gl. (5.87) in Gl. (5.88) ein, bekommen wir die implizite Gleichung

$$\begin{aligned} T_{IJ} = & C_{IJKL}^0 \epsilon_{KL} + \frac{1}{2} C_{IJKLMN}^0 \epsilon_{KL} \epsilon_{MN} - (C_{IJ11}^0 + C_{IJKL11}^0 \epsilon_{KL}) (\alpha_0 T_{11} + \alpha_1 |T_{11}|) \\ & + \frac{1}{2} C_{IJ1111}^0 (\alpha_0 T_{11} + \alpha_1 |T_{11}|)^2. \end{aligned} \quad (5.89)$$

Die erste Komponente T_{11} der Normalspannung lautet in diesem Fall

$$\begin{aligned} T_{11} = & C_{1111}^0 \epsilon_{11} + C_{1122}^0 (\epsilon_{22} + \epsilon_{33}) \\ & + \frac{1}{2} \{ C_{111111}^0 \epsilon_{11}^2 + C_{111122}^0 [\epsilon_{22}^2 + \epsilon_{33}^2 + 2\epsilon_{11} (\epsilon_{22} + \epsilon_{33})] + 2C_{112233}^0 \epsilon_{22} \epsilon_{33} \\ & + 4C_{112323}^0 \epsilon_{23}^2 + 4C_{111313}^0 (\epsilon_{12} + \epsilon_{13}) \} \\ & - [C_{1111}^0 + C_{111111}^0 \epsilon_{11} + C_{111122}^0 (\epsilon_{22} + \epsilon_{33})] (\alpha_0 T_{11} + \alpha_1 |T_{11}|) \\ & + \frac{1}{2} C_{111111}^0 (\alpha_0 T_{11} + \alpha_1 |T_{11}|)^2 \end{aligned} \quad (5.90)$$

5 Änderung der elastischen Konstanten

und vereinfacht sich unter Vernachlässigung von Scherungen zu

$$T_1 = C_{11}^0 \epsilon_1 + C_{12}^0 (\epsilon_2 + \epsilon_3) + \frac{1}{2} \{ C_{111}^0 \epsilon_1^2 + C_{112}^0 [\epsilon_2^2 + \epsilon_3^2 + 2\epsilon_1 (\epsilon_2 + \epsilon_3)] + 2C_{123}^0 \epsilon_2 \epsilon_3 \} - [C_{11}^0 + C_{111}^0 \epsilon_1 + C_{112}^0 (\epsilon_2 + \epsilon_3)] (\alpha_0 T_1 + \alpha_1 |T_1|) + \frac{1}{2} C_{111}^0 (\alpha_0 T_1 + \alpha_1 |T_1|)^2. \quad (5.91)$$

Da alle Rissnormalen in die X_1 -Richtung zeigen, sind die Konstanten bei der Kontraktion mit der rissinduzierten Dehnung bzgl. eines Index fest. Der Koeffizient vor dem Term, der die Rissvolumenänderung beschreibt, ändert sich daher in Bezug auf die erste Spannungskomponente. Alle weiteren Terme beinhalten lediglich Indexverschiebungen. Die zweite Normalspannungskomponente lautet damit

$$T_2 = C_{11}^0 \epsilon_2 + C_{12}^0 (\epsilon_1 + \epsilon_3) + \frac{1}{2} \{ C_{111}^0 \epsilon_2^2 + C_{112}^0 [\epsilon_1^2 + \epsilon_3^2 + 2\epsilon_2 (\epsilon_1 + \epsilon_3)] + 2C_{123}^0 \epsilon_1 \epsilon_3 \} - [C_{12}^0 + C_{112}^0 (\epsilon_1 + \epsilon_2) + C_{123}^0 \epsilon_3] (\alpha_0 T_1 + \alpha_1 |T_1|) + \frac{1}{2} C_{112}^0 (\alpha_0 T_1 + \alpha_1 |T_1|)^2 \quad (5.92)$$

und die dritte folgt, wie eben beschrieben, durch eine einfache Vertauschung der entsprechenden Indizes.

In niedrigster Ordnung und verkürzter Schreibweise ergibt sich für die erste Normalspannungskomponente

$$T_1 = [(\lambda + 2\mu) \epsilon_1 + \lambda (\epsilon_2 + \epsilon_3)] \begin{cases} [1 + (\lambda + 2\mu) (\alpha_0 + \alpha_1)]^{-1} & T_1 \geq 0, \\ [1 + (\lambda + 2\mu) (\alpha_0 - \alpha_1)]^{-1} & \text{sonst.} \end{cases} \quad (5.93)$$

Unter den Annahmen, dass $\|\alpha_1\| \leq \alpha_0$ und $\alpha_0 > 0$, ist der Nenner in dieser Gleichung stets positiv und das Vorzeichen der Spannung hängt lediglich vom Zähler

$$(\lambda + 2\mu) \epsilon_1 + \lambda (\epsilon_2 + \epsilon_3) \quad (5.94)$$

oder äquivalent vom Dehnungsparameter

$$\epsilon_0 := \epsilon_1 + \frac{\lambda}{\lambda + 2\mu} (\epsilon_2 + \epsilon_3) = \epsilon_1 + \frac{\nu}{1 - \nu} (\epsilon_2 + \epsilon_3) \quad (5.95)$$

ab, sodass wir Gl. (5.93) auch als

$$T_1 = [(\lambda + 2\mu) \epsilon_1 + \lambda (\epsilon_2 + \epsilon_3)] \beta (\epsilon_0) = \beta (\epsilon_0) (\lambda + 2\mu) \epsilon_0 \quad (5.96)$$

mit

$$\beta (\epsilon_0) := [1 + (\lambda + 2\mu) (\alpha_0 + \text{sign}(\epsilon_0) \alpha_1)]^{-1} \quad (5.97)$$

schreiben können. Der Parameter β hängt also lediglich vom Vorzeichen der Dehnung ϵ_0 ab und stellt somit das Verhältnis der links- und rechtsseitigen Steifigkeit des Materials in Bezug auf das rissfreie Ausgangsmedium dar. Mithilfe dieser Darstellung lautet die zweite Komponente des PK2 nun

$$T_2 = [(\lambda + 2\mu) \epsilon_2 + \lambda (\epsilon_1 + \epsilon_3)] - \lambda \epsilon_0 (1 - \beta (\epsilon_0)) \quad (5.98)$$

und durch Vertauschung der Indizes erhalten wir analog die Komponente T_3 .

Die unbekannt Modellparameter α_0 und α_1 wurden, wie bereits bei der Bestimmung der elastischen Konstanten, über die Ableitung der hergeleiteten Spannungs-Dehnungsrelationen nach dem freien Parameter ϵ_1 abgeleitet und die simulierten Werte in die Relationen eingesetzt. Eine einfache Ausgleichsrechnung liefert dann die gesuchten Parameter.

Das Material im vollbesetzten Fall bei homogener Ausrichtung der Risse muss sich genauso verhalten, wie ein einzelner Riss in einem entsprechend skalierten Würfel. Aus den Simulationen zu den Einzelrissen können die Modellparameter mithilfe des Rissvolumens direkt aus Gl. 5.86 gewonnen werden. Das Rissvolumen der flachen Risse ist hier ganz einfach über das Volumen der konvexen Hülle der Rissknoten definiert. Die Ergebnisse der Auswertung über dieses Gleichungssystem sowie über die Auswertung der Volumenänderung finden sich in Tab. 5.25. Darüber hinaus wird in der Tabelle der Unterschied zwischen den beiden Kontaktformulierungen (*augmented Lagrange* und *Lagrange on contact normals*) deutlich.

Tabelle 5.25.: Extrahierte Parameter α_0 und α_1 aus neuem Potentialansatz für einen parallel zur Zug- und Druckrichtung orientierten, flachen Riss bei zwei festen Würfelseiten. Ausgewertet wurden die Parameter zum einen über die Volumenänderung und zum anderen über die Spannungs-Dehnungs-Relation (Gleichungen (5.96) und (5.98)) für die erweiterte Lagrangesche (*augmented Lagrange*, KB) und die Lagrangesche (*Lagrange on contact normals*, KBL) Kontaktformulierungen.

Methode	Randbedingung	α_0 [% GPa^{-1}]	α_1 [% GPa^{-1}]	β_-	β_+
GLS	fest (KB)	0,5280	0,3504	0,9521	0,8009
GLS	fest (KBL)	0,4392	0,4392	1,0000	0,8009
Volumen	fest (KB)	0,3254	0,4890	1,0486	0,8127
Volumen	fest (KBL)	0,4072	0,4072	1,0000	0,8127

Wie zu erwarten, liefert die strikte Kontaktformulierung (*Lagrange on contact normals*, KBL) bessere Resultate als die Strafformulierung (*augmented Lagrange*, KB), da beide Modellparameter innerhalb der Genauigkeit identisch sind. Im Druckbereich schließen sich alle Risse und das Gesamtsystem nimmt die elastischen Eigenschaften der Matrix an. Die Parameter α_0 und α_1 müssen daher so beschaffen sein, dass sich die rissinduzierte Dehnung im Druckbereich gerade aufhebt. Sowohl die Ableitungsmethode als auch die direkte Auswertung des mikro-mechanischen Modells erfüllen im Falle der strikten Formulierung diese Bedingung, liefern jedoch etwas unterschiedliche Werte. Gründe dafür können in einer unzureichenden Diskretisierung der Rissoberflächen und damit verbundenen Bestimmung des Rissvolumens liegen. Auf der anderen Seite können numerische Fehler bei der Approximation der Spannungs-Dehnungskurven und der Bestimmung deren Ableitungen auf beiden Seiten der Gleichgewichtslage eine Rolle spielen.

Die Strafmethode lässt dagegen eine gewisse Durchdringung der Rissknotenpaare zu, sodass der Knotenabstand negativ wird (bezogen auf die Flächennormale). Durch Einführung einer Federkraft wird ein solches Durchdringen jedoch proportional zum Abstand der entsprechenden Knoten bestraft. Das resultierende algebraische Problem wird auf diese Weise relaxiert. Das Gesamtsystem aus Riss und Matrixmaterial verhält sich jedoch weicher und verfälscht somit das Ergebnis. Aus diesem Grund sind die Werte für α_0 und α_1 in den Zeilen mit KBL verschieden. Die strikte Formulierung wäre somit zwar für alle Probleme wünschenswert. Die entstehenden Gleichungssysteme lassen sich jedoch im Allgemeinen nur schwer lösen und führen so zu Konvergenzproblemen. Für alle Simulationen, bis auf die Einzelrissversuche, wurde daher die Strafformulierung gewählt.

Die Durchdringung, genauer der Knotenabstand, in der Strafformulierung ist direkt proportional zur Kontaktsteifigkeit, die die Federkonstante der eingeführten Federn beschreibt. Über die Erhöhung der Kontaktsteifigkeit sollten die Ergebnisse daher gegen diejenigen aus der Lagrangeschen Methode streben. Einen quantitativen Einblick erlangen wir zum Beispiel über die Simulation eines Würfels mit den üblichen Randbedingungen und festen Seitenflächen, der lediglich einen Riss enthält. Dessen Rissnormale war parallel zur Druckrichtung orientiert. Die theoretischen Werte der Spannung lassen sich hier bei gegebener Dehnung besonders leicht berechnen. Der Würfel wurde hier um $\epsilon_1 = 10^{-4}$

5 Änderung der elastischen Konstanten

gedehnt und die resultierenden Spannungswerte über der jeweiligen Kontaktsteifigkeit in Abb. 5.13 aufgetragen. Die horizontale Linie stellt dabei den theoretisch berechneten Wert im risslosen Medium dar, der mit zunehmender Kontaktsteifigkeit asymptotisch angestrebt wird.

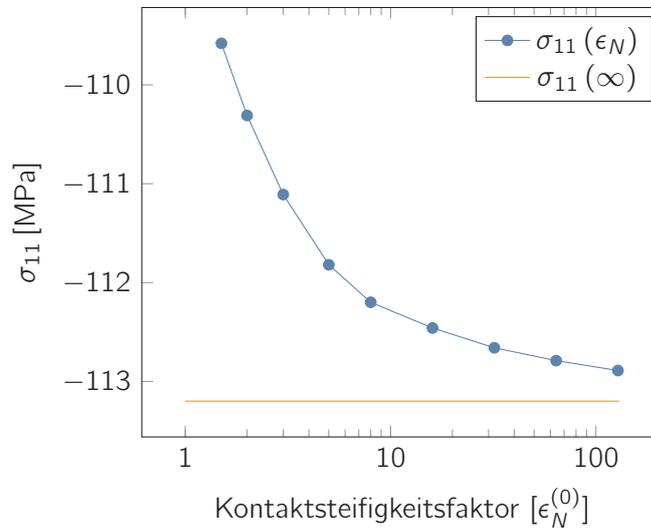


Abbildung 5.13.: Simulierter Spannungswert für $\epsilon_1 = 10^{-4}$ bei $\lambda = 123$ GPa und $\mu = 80$ GPa. Im gesamten Würfelvolumen befand sich ein Riss, dessen Rissnormale parallel zur Druckrichtung verlief.

Die homogene Ausrichtung der Risse erzeugt eine Vorzugsrichtung der Steifigkeit des Gesamtmediums. Aus den Ausdrücken (5.96) und (5.98) für die Normalspannungskomponenten des neuen PK2 folgt für die Komponenten der neuen Steifigkeitsmatrix

$$C_{11} = (\lambda + 2\mu)\beta(\epsilon_0), \quad C_{12} = C_{13} = \lambda\beta(\epsilon_0), \quad (5.99)$$

$$C_{23} = \lambda \left(1 - [1 - \beta(\epsilon_0)] \frac{\lambda}{\lambda + 2\mu} \right), \quad C_{22} = C_{33} = C_{23} + 2\mu. \quad (5.100)$$

Da dieses Modell alle Scherspannungen vernachlässigt, sind die Scherkomponenten der Steifigkeitsmatrix gleich denen des Ausgangsmaterials. Fügt man der rissinduzierten Dehnung in Gleichung (5.87) noch Scherdehnungen der Form

$$\frac{\kappa}{2} (T_5 + T_6) \{ \delta_{11}\delta_{22} + \delta_{12}\delta_{21} + \delta_{11}\delta_{33} + \delta_{13}\delta_{31} \} \quad (5.101)$$

hinzu, so bekommt man

$$C_{55} = C_{66} = (1 + \kappa\mu)^{-1} \mu \approx \mu(1 - \kappa\mu), \quad C_{44} = \mu \quad (5.102)$$

als Scherkomponenten der neuen Steifigkeitsmatrix. Es ist nun leicht zu erkennen, dass sich das Gesamtmaterial unter diesen Umständen transversal isotrop verhält, wobei die Isotropieebene in der X_2X_3 -Ebene liegt.

Die Änderung der Parameter α_0 und α_1 mit zunehmender Ausdünnung der Risse ist in Tabelle 5.26 dargestellt. Wie zu erwarten, sinkt der Betrag beider Parameter mit abnehmender Rissdichte. Außerdem gibt es weiterhin keinen signifikanten Unterschied zwischen den hier betrachteten Randbedingungen. Auffällig ist lediglich, dass beide Parameter in der letzten Stufe für freie Randbedingungen in etwa gleich groß sind. Man beachte, dass sich in diesem Fall nur noch ein Riss im gesamten Medium befindet und Stabilität der Ergebnisse damit höchstens noch hinsichtlich ihrer Größenordnung zu erwarten ist. Darüber hinaus ist für freie Seitenflächen die Voraussetzung $|\alpha_1| < \alpha_0$ verletzt und das Ergebnis damit außerhalb des zulässigen Bereichs.

Tabelle 5.26.: Extrahierte Parameter α_0 und α_1 aus neuem Potentialansatz für homogen orientierte Risse, ausgewertet für mehrere Verdünnungsstufen.

Füllgrad	fest [% GPa^{-1}]		frei [% GPa^{-1}]		fest		frei	
	α_0	α_1	α_0	α_1	β_-	β_+	β_-	β_+
1,000	0,5276	0,3504	0,5331	0,3579	0,9523	0,8010	0,9527	0,7986
0,504	0,5189	0,3439	0,5242	0,3534	0,9528	0,8037	0,9539	0,8011
0,184	0,4965	0,3243	0,5064	0,3465	0,9535	0,8115	0,9567	0,8056
0,120	0,4962	0,3231	0,5115	0,3592	0,9533	0,8118	0,9587	0,8023
0,064	0,4917	0,3174	0,5087	0,3807	0,9530	0,8137	0,9650	0,7989
0,032	0,4866	0,3198	0,5154	0,4274	0,9549	0,8142	0,9757	0,7894
0,016	0,4795	0,3147	0,5102	0,5234	0,9554	0,8165	1,0037	0,7737
0,008	0,5001	0,3248	0,5115	0,7172	0,9527	0,8107	1,0619	0,7420

Die Abhängigkeit der Parameter vom Füllgrad ist in Abb. 5.14 doppellogarithmisch dargestellt, da exponentiell ausgedünnt wurde. In der linearen Darstellung (hier nicht abgebildet) ist bereits zu vermuten, dass die Parameter linear vom Füllgrad abhängen. Eine solche Abhängigkeit müsste sich in der doppellogarithmischen Darstellung dadurch widerspiegeln, dass der Anstieg der Kurven gleich eins ist. Tatsächlich weicht der Anstieg für alle Parameter bis auf α_1^{frei} um höchstens 5 % von eins ab, sodass die Annahme der Linearität für diese drei Größen durchaus gerechtfertigt ist. Die Abhängigkeit des Parameters α_1^{frei} dagegen strebt mit zunehmender Ausdünnung gegen eine Wurzelfunktion.

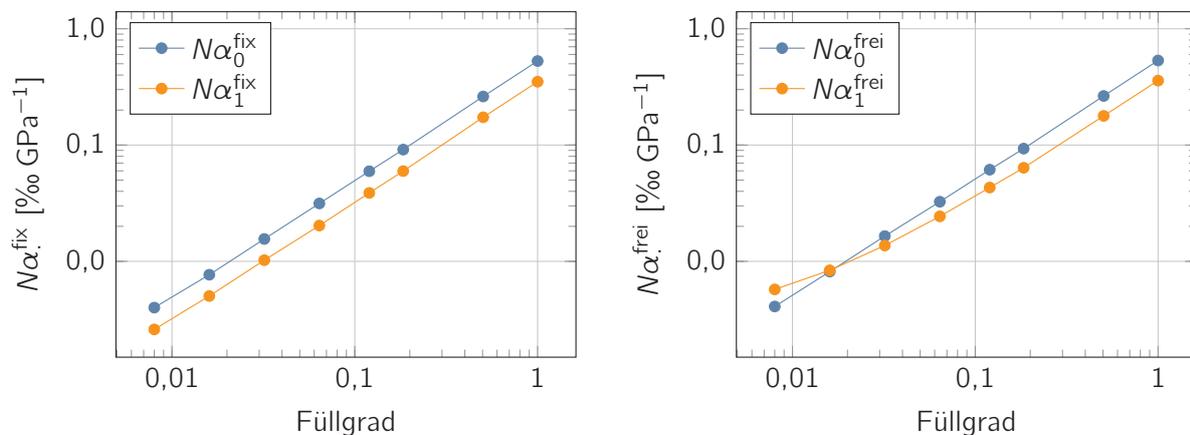


Abbildung 5.14.: Darstellung der Parameter aus Tab. 5.26 bzgl. des Füllgrades in unskaliert, d.h. vom Füllgrad abhängiger Form, für feste (links) und freie Randbedingungen.

2D Orientierungsverteilung

Als weiteren Spezialfall wollen wir eine ODF \hat{P} betrachten, die lediglich Mikrorisse zulässt, deren Rissnormalen sich in einer Ebene befinden. Sei diese Ebene die X_1 - X_3 -Ebene und $N_1 = \cos \phi$, $N_2 = 0$, $N_3 = \sin \phi$. Um die Rechnungen etwas übersichtlicher zu halten, beschränken wir uns hier auf den linearen Anteil der Green-Lagrangeschen Dehnung und vernachlässigen die Gitternichtlinearität. Die Zerlegung der Gesamtdehnung $\epsilon = \overset{\circ}{\epsilon} + \epsilon^0$ wird mit der Steifigkeit der Matrix kontrahiert und wir

5 Änderung der elastischen Konstanten

erhalten

$$C_{11}^0 \epsilon_1 + C_{12}^0 (\epsilon_2 + \epsilon_3) = T_1 + C_{11}^0 \{ \alpha_0 (\hat{a}_{11} T_1 + \hat{a}_{13} T_3) + \alpha_1 N g_1 (T_1, T_3) \} + C_{12}^0 \{ \alpha_0 (\hat{a}_{31} T_1 + \hat{a}_{33} T_3) + \alpha_1 N g_3 (T_1, T_3) \} \quad (5.103)$$

$$C_{11}^0 \epsilon_2 + C_{12}^0 (\epsilon_1 + \epsilon_3) = T_2 + C_{12}^0 \{ \alpha_0 (\hat{a}_{11} T_1 + \hat{a}_{13} T_3) + \alpha_1 N g_1 (T_1, T_3) + \alpha_0 (\hat{a}_{31} T_1 + \hat{a}_{33} T_3) + \alpha_1 N g_3 (T_1, T_3) \} \quad (5.104)$$

$$C_{11}^0 \epsilon_3 + C_{12}^0 (\epsilon_1 + \epsilon_2) = T_3 + C_{11}^0 \{ \alpha_0 (\hat{a}_{31} T_1 + \hat{a}_{33} T_3) + \alpha_1 N g_3 (T_1, T_3) \} + C_{12}^0 \{ \alpha_0 (\hat{a}_{11} T_1 + \hat{a}_{13} T_3) + \alpha_1 N g_1 (T_1, T_3) \} \quad (5.105)$$

wobei

$$\hat{a}_{11} = N \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos^4 \phi \hat{P}(\phi) d\phi \quad (5.106)$$

$$\hat{a}_{33} = N \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \sin^4 \phi \hat{P}(\phi) d\phi \quad (5.107)$$

$$\hat{a}_{13} = \hat{a}_{31} = N \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos^2 \phi \sin^2 \phi \hat{P}(\phi) d\phi \quad (5.108)$$

als Momente der Verteilung \hat{P} mit der Eigenschaft

$$\hat{a}_{11} + \hat{a}_{33} + \hat{a}_{13} + \hat{a}_{31} = N \quad (5.109)$$

aufgefasst werden können. Für identisch verteilte Orientierungen ist $\hat{P}(\phi) = 1/\pi$ und die Funktionen g_1 und g_3 , die Integrale über den Winkel ϕ darstellen, können explizit über

$$g_1 (T_1, T_3) = \frac{\text{sign}(T_1)}{8\pi} (3T_1 + T_3) \begin{cases} \pi & T_1 T_3 \geq 0, \\ 4\tilde{g}_1 (T_1, T_3) & T_1 T_3 < 0, \end{cases} \quad (5.110)$$

$$\tilde{g}_1 (T_1, T_3) := \pi/4 - \arctan \sqrt{-\frac{T_3}{T_1}} + \text{sign}(T_1) \frac{\sqrt{-T_1 T_3}}{T_1 - T_3} \frac{3T_1 - T_3}{3T_1 + T_3}$$

angegeben werden, wobei $g_3 (T_1, T_3) = g_1 (T_3, T_1)$ gilt. Für die Herleitung des zweiten Falls sei auf Anhang A.10 verwiesen.

Werden neben den üblichen Randbedingungen zwei freie oder zwei feste Seiten als ergänzende Bedingungen gewählt, so haben die Hauptspannungen T_1 und T_3 stets dasselbe Vorzeichen und wir können obiges Gleichungssystem in diesem Fall als

$$C_{IJ}^0 \epsilon_J = (\delta + \Delta)_{IJ} T_J \quad (5.111)$$

mit

$$\Delta_{IJ} = \frac{N}{8} \begin{pmatrix} (\alpha_0 \pm \alpha_1) C_1 & 0 & (\alpha_0 \pm \alpha_1) C_2 \\ 4\lambda (\alpha_0 \pm \alpha_1) & 0 & 4\lambda (\alpha_0 \pm \alpha_1) \\ (\alpha_0 \pm \alpha_1) C_2 & 0 & (\alpha_0 \pm \alpha_1) C_1 \end{pmatrix}_{IJ} \quad (5.112)$$

schreiben, wobei wir die einfachen Formen der ODF für eine isotrope 2D-Verteilung und die Abkürzungen

$$C_1 := 3C_{11}^0 + C_{12}^0, \quad C_2 := C_{11}^0 + 3C_{12}^0 \quad (5.113)$$

Tabelle 5.27.: Modellparameter für 2D-verteilte Kissing Bonds. Neben den üblichen Randbedingungen wurden zwei freie oder zwei feste Seiten benutzt.

Füllgrad	fest [$\% \text{GPa}^{-1}$]		frei [$\% \text{GPa}^{-1}$]		fest [$\% \text{GPa}^{-1}$]		frei [$\% \text{GPa}^{-1}$]	
	$N\alpha_0^{\text{fest}}$	$N\alpha_1^{\text{fest}}$	$N\alpha_0^{\text{frei}}$	$N\alpha_1^{\text{frei}}$	α_0^{fest}	α_1^{fest}	α_0^{frei}	α_1^{frei}
1,000	0,8480	0,5470	0,6335	0,2831	0,8480	0,5470	0,6335	0,2831
0,064	0,0512	0,0326	0,0425	0,0291	0,7997	0,5088	0,6636	0,4541
0,008	0,0072	0,0047	0,0080	0,0159	0,8944	0,5927	1,0053	1,9880

benutzt haben.

Die ermittelten Parameter für diese 2D-Verteilung sind in Tab. 5.27 aufgeführt. Die unskalierten Parameter nehmen mit zunehmender Ausdünnung ab. An den skalierten, eigentlichen Parametern ist jedoch zu sehen, dass nur für feste Seiten die extrahierten Parameter stabil bleiben. Sobald sich die Oberflächen frei bewegen können, sind lediglich die ersten beiden Stufen konsistent. Die ermittelten Parameter für den letzten Verdünnungsschritt vergrößern sich sogar noch. Dieses Ergebnis muss angezweifelt werden, da sich nur noch einer von 125 Rissen im System befindet und numerische Fehler bereits eine größere Rolle spielen können als der Einfluss des Risses selbst.

Sieht man auf die üblichen Randbedingungen, so scheint der Fall unterschiedlicher Vorzeichen der Hauptspannungen unmöglich. Diese Situation kann jedoch hergestellt werden, indem an zwei Seiten gleichzeitig gedrückt und/oder gezogen wird. In den entsprechenden Simulationen wurde die verbleibende Seite dazu fixiert und die Verschiebung mit gleichem Absolutwert angesetzt. Es folgt, dass

$$g_1(T_1, -T_1) = \frac{\text{sign}(\epsilon_1)}{\pi} T_1, \quad (5.114)$$

da die Vorzeichen der Spannung und Dehnung in X_1 -Richtung dieselben sind. Die Form der Gl. (5.111) bleibt weiterhin unverändert, wobei Δ nun durch

$$\Delta_{IJ} = \frac{N}{2\pi} \begin{pmatrix} \alpha_0\pi\mu \pm 4\alpha_1(\lambda + \mu) & 0 & 0 \\ \pm 4\alpha_1\lambda & 0 & 0 \\ -\alpha_0\pi\mu \pm 4\alpha_1(\lambda + \mu) & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.115)$$

gegeben ist. Die Auflösung des resultierenden Gleichungssystems nach den Komponenten des PK2 ergibt schließlich die gesuchte Spannungs-Dehnungsrelation. Die Modellparameter wurden wie gewöhnlich über die Ableitungsmethode berechnet und sind in Tab. 5.28 dargestellt.

Tabelle 5.28.: Modellparameter für 2D-verteilte Kissing Bonds mit simultanen Randbedingungen. Neben den üblichen Randbedingungen war dabei eine der verbleibenden Seiten fest, während die andere zusammen mit der üblichen Verschiebungsseite mit entgegengesetztem Vorzeichen verschoben wurde. Der Faktor für die Kontaktsteifigkeit wurde möglichst hoch gewählt ($\text{FKN} = 128$).

Füllgrad	$N\alpha_0^{\text{fest}}$ [$\% \text{GPa}^{-1}$]	$N\alpha_1^{\text{fest}}$ [$\% \text{GPa}^{-1}$]	α_0^{fest} [$\% \text{GPa}^{-1}$]	α_1^{fest} [$\% \text{GPa}^{-1}$]
1,000	1,0806	0,3725	1,0806	0,3725
0,064	0,0962	0,0248	1,5035	0,3872
0,008	-5,2331	-0,0001	-654,1299	-0,0138

Die ermittelten Parameter α_1 für die ersten beiden Stufen zeigen hier eine recht gute Übereinstimmung. Der Parameter α_0 konnte nicht mehr sicher vorhergesagt werden, bleibt für die ersten beiden

5 Änderung der elastischen Konstanten

Stufen aber zumindest in derselben Größenordnung. Die letzte Zeile stellt wieder die Situation für einen einzigen Riss dar. Das Vorzeichen von α_0 kehrt sich um, der Betrag ändert sich um zwei Größenordnungen. Im Vergleich zu den mit üblichen Randbedingungen ermittelten Werten in Tab. 5.27 fällt auf, dass sich die Werte für α_0 vergrößert haben, der Betrag von α_1 dagegen in allen Stufen kleiner vorhergesagt wurde. Angesichts der Tatsache, dass wir dem mikromechanischen Modell zufolge $\alpha_0 = \alpha_1$ erwarten, sind die üblichen Randbedingungen und deren Auswertung hier den simultanen vorzuziehen.

6. Nichtlineare Oberflächenwellen

In den vorherigen Kapiteln haben wir die Überlagerung von Wellen betrachtet, deren Amplituden verschiedene Größenordnungen aufweisen, wobei die statischen Vorspannungen in diesem Kontext als Wellen unendlich langer Wellenlänge aufgefasst werden. In diesem Kapitel soll nun die Wechselwirkung von Wellen gleicher, endlicher Amplituden betrachtet werden. Der Terminus *endlich* bezeichnet dabei Wellen großer Amplituden. Diese großen Amplituden sind notwendig, um die erwarteten nichtlinearen Effekte wie etwa die Entstehung höherer Harmonischer aus der Grundwelle oder die Erzeugung von Mischfrequenzen beobachten zu können.

Zur Unterscheidung der verschiedenen Größenordnungen ist es sinnvoll, das Verschiebungsfeld bzgl. eines Störungsparameter ϵ zu entwickeln

$$u_i(X_I, t) = \epsilon u_i^{(1)}(X_I, X^{(\epsilon)}, t) + \epsilon^2 u_i^{(2)}(X_I, X^{(\epsilon)}, t) + \mathcal{O}(\epsilon^3), \quad (6.1)$$

wobei ϵ von der Größenordnung einer typischen Dehnung ist. Da die nichtlinearen Effekte klein sind und sich die Änderungen der involvierten Wellenprofile auf einer gegenüber der Wellenlänge der Eingangswellen viel größeren Längenskala abspielen, wurden hier eine gestreckte Variable $X^{(\epsilon)} := \epsilon X_1$ eingeführt. Wir setzen nun den Ansatz (6.1) in die Ableitung der potentiellen Energiedichte (2.14) nach den Verschiebungsgradienten ein und erhalten den PK1-Tensor

$$P_{iJ} = S_{iJ} + \epsilon \left\{ S_{iJkL} u_{k,L}^{(1)} \right\} + \epsilon^2 \left\{ S_{iJk1} u_{k,\epsilon}^{(1)} + S_{iJkL} u_{k,L}^{(2)} + \frac{1}{2} S_{iJkLmN} u_{k,L}^{(1)} u_{m,N}^{(1)} \right\} + \mathcal{O}(\epsilon^3), \quad (6.2)$$

wobei

$$u_{k,\epsilon}^{(n)} := \frac{\partial}{\partial X^{(\epsilon)}} u_k^{(n)} \quad (6.3)$$

die Ableitung nach der gestreckten Variable bezeichnet. Betrachten wir wieder eine freie Oberfläche an der Stelle $X_3 = 0$, so verschwindet der PK1-Tensor projiziert auf die Oberflächennormale $N_L = (0, 0, 1)_L$ an dieser Stelle, sodass

$$P_{i3}|_{X_3=0} = 0 \quad (6.4)$$

gilt. Die obigen Randbedingungen müssen in allen Ordnungen separat erfüllt werden, d.h.

$$0 = S_{i3}|_{X_3=0} \quad (6.5a)$$

$$0 = S_{i3kL} u_{k,L}^{(1)} \Big|_{X_3=0} \quad (6.5b)$$

$$0 = \left\{ S_{i3k1} u_{k,\epsilon}^{(1)} + S_{i3kL} u_{k,L}^{(2)} + \frac{1}{2} S_{i3kLmN} u_{k,L}^{(1)} u_{m,N}^{(1)} \right\} \Big|_{X_3=0}. \quad (6.5c)$$

Analog zu den Randbedingungen muss auch die Bewegungsgleichung (2.28) nach Einsetzen des Ansatzes (6.1) in den jeweiligen Ordnungen separat erfüllt werden und wir erhalten

$$0 = S_{iJ,J} \quad (6.6a)$$

$$\rho \ddot{u}_i^{(1)} = \frac{\partial}{\partial X_J} S_{iJkL} u_{k,L}^{(1)} \quad (6.6b)$$

$$\rho \ddot{u}_i^{(2)} = \left(S_{i1kL} \frac{\partial}{\partial X_L} + \frac{\partial}{\partial X_J} S_{iJk1} \right) u_{k,\epsilon}^{(1)} + \frac{\partial}{\partial X_J} \left(S_{iJkL} u_{k,L}^{(2)} + \frac{1}{2} S_{iJkLmN} u_{k,L}^{(1)} u_{m,N}^{(1)} \right) \quad (6.6c)$$

als Gleichungssystem für die noch unbekanntten Verschiebungen $\mathbf{u}^{(1)}$ und $\mathbf{u}^{(2)}$. Der Vollständigkeit halber wurde auch die Gleichung nullter Ordnung angegeben, die lediglich das statische Gleichgewicht der Vorspannungen beschreibt. Für homogene Medien entfallen offensichtlich alle Ableitungen der S -Tensoren und wir bekommen in zweiter Ordnung [May95, Gl. 5.3]. Da uns hier aber der Einfluss einer gewissen Tiefenabhängigkeit der elastischen Konstanten interessiert, nehmen wir an, dass

$$\rho(X_3) = \rho_0 + \Delta\rho(X_3), \quad (6.7)$$

$$S_{iJkL}(X_3) = S_{iJkL}^0 + \Delta S_{iJkL}(X_3), \quad (6.8)$$

$$S_{iJkLmN}(X_3) = S_{iJkLmN}^0 + \Delta S_{iJkLmN}(X_3), \quad (6.9)$$

wobei die Funktionen $\Delta\rho$ und $\Delta\mathbf{S}$ als Störungen der elastischen Parameter ρ_0 und \mathbf{S}^0 des ungestörten Mediums aufzufassen sind. Die Gleichungen (6.6) mit den entsprechenden Randbedingungen (6.5) bilden den Ausgangspunkt für die folgenden Betrachtungen.

6.1. Langwellige S0 Lamb-Wellen

Wir betrachten im Folgenden eine homogene Platte mit freien Oberflächen, deren Normalen parallel zur X_3 -Achse stehen. Die Platte enthalte eine räumlich homogene Verteilung von Mikro-Rissen, deren Orientierungen gemäß der Funktion $P(\phi, \theta)$ verteilt seien. Die Symmetrieachsen fallen dabei mit den Koordinatenachsen zusammen. Das entsprechende Koordinatensystem für diesen Abschnitt ist in Abb. 6.1 gezeigt.

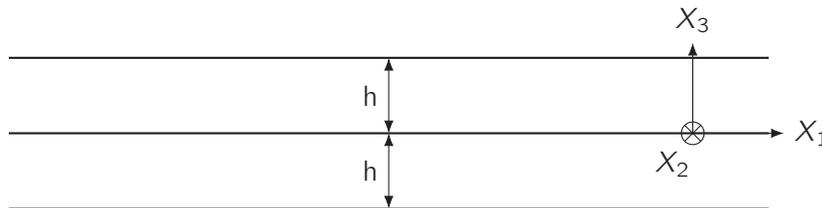


Abbildung 6.1.: Koordinatensystem für Lamb-Wellenausbreitung in einer Platte der Dicke $2h$.

Vor Kurzem wurde vorgeschlagen, den Zweig (branch) niedrigster Ordnung symmetrischer Lamb-Wellen zur Erzeugung zweiter Harmonischer zu verwenden, da die Dispersion dessen bei hinreichend großer Wellenlänge verschwindet [WZXT14, ZLC⁺17, MZXZ17]. In [ZLC⁺17] wird darauf hingewiesen, dass langwellige S0-Moden vorwiegend aus Longitudinalanteilen bestehen. Für das Verschiebungsfeld kann man in dieser Näherung

$$u_1(X_1, X_3, t) = e^{ikX_1} \left[s_0 + s_2 (kX_3)^2 + \mathcal{O}((kX_3)^4) \right] \quad (6.10a)$$

$$u_3(X_1, X_3, t) = e^{ikX_1} \left[s_1 kX_3 + s_3 (kX_3)^3 + \mathcal{O}((kX_3)^5) \right] \quad (6.10b)$$

ansetzten, wobei $-h < X_3 < h$. Um Dispersion zu vermeiden, betrachten wir den Grenzfall $kh \ll 1$ und behalten nur die führenden Terme in der Entwicklung (6.10). Da die Oberflächen spannungsfrei sein sollen, müssen wir zusätzlich $T_{33} = T_{13} = 0$ bei $X_3 = \pm h$ fordern. Aus Gl. (6.10) folgt, dass die Spannungskomponenten T_{33} und T_{13} in nullter Ordnung bzgl. kh in der gesamten Platte verschwinden und $\rho\omega^2 u_3$ von erster Ordnung in kh ist [Tie69]. Die Bewegungsgleichung vereinfacht sich zu

$$\rho\omega^2 u_1 + \frac{\partial}{\partial X_1} T_{11} = 0, \quad (6.11)$$

die lediglich die X_1 -Komponenten der Verschiebung, der Dehnung und der Spannung enthält. Aus der Spannungsfreiheit in X_3 -Richtung und $u_2 = 0$ folgt $\epsilon_{22} = 0$. Mithilfe der Randbedingungen erhalten wir

$$T_{11} = C_{11}^0 \left[1 - \left(\frac{C_{12}^0}{C_{11}^0} \right)^2 \right] \epsilon_{11} \quad (6.12)$$

als effektive eindimensionale Spannungs-Dehnungsrelation für das Medium ohne Risse. Eingesetzt in (6.11) erhalten wir den wohlbekanntten Ausdruck für die Phasengeschwindigkeit c_{S0} der S0-Mode [Tie69, Kuz14]

$$\rho c_{S0}^2 = C_{11}^0 \left[1 - \left(\frac{C_{12}^0}{C_{11}^0} \right)^2 \right] \quad (6.13)$$

im Grenzfall niedriger Frequenzen. In Kapitel 5 wurde das Verhalten von Medien mit Rissen mehrerer Orientierungsverteilungen unter verschiedenen Randbedingungen statisch simuliert. Die Spannungskomponente T_{11} wurde als Funktion der Dehnung ϵ_{11} (genauer $u_{1,1}$) unter anderem mit einer festen und einer freien Seite modelliert (neben den üblichen Randbedingungen). Diese Simulationen liefern die effektive Spannungs-Dehnungsrelation, die wir in der Bewegungsgleichung (6.11) benutzen möchten, um nichtlineare Effekte auf die Ausbreitung der S0-Mode im langwelligen Grenzfall zu untersuchen. Im Falle von Kissing Bonds ist die Spannungs-Dehnungsrelation von der Form

$$T_{11} = \tau_0 \epsilon_{11} + \tau_1 |\epsilon_{11}| \quad (6.14)$$

mit dne Koeffizienten τ_0 und τ_1 , die von der Rissdichte und der Orientierungsverteilung abhängen (siehe vorheriges Kapitel).

Die zweite Art von Mikrorissen, die wir hier untersuchen, stellen Hertzsche Kontakte dar, deren effektive Spannungs-Dehnungsrelation im homogen ausgerichteten Fall, parallel zur X_1 -Richtung, von der Form

$$T_{11} = \tilde{\tau}_L \epsilon_{11} + \epsilon_{11} (\tilde{\tau}_0 \epsilon_{11} + \tilde{\tau}_1 |\epsilon_{11}|) \quad (6.15)$$

ist. Anders als Gl. (6.14) weist Gl. (6.15) keinen Sprung am Ursprung auf, sondern ist dort einmal stetig differenzierbar. Die drei Parameter hängen wieder von der Konzentration der Risse ab und können auch von der speziellen Form der Risse beeinflusst werden.

Um nichtlineare Effekte dieser zwei Typen von Mikrorissen auf die S0-Mode untersuchen zu können werden die Gleichungen (6.14) und (6.15) in (6.11) eingesetzt. Dazu zerlegen wir

$$T_{11} = \tau_{L0} \epsilon_{11} + \Delta T_{11} \quad (6.16)$$

wobei τ_{L0} den Parameter τ_0 für verschwindende Rissdichte darstellt, d.h.

$$\tau_{L0} = C_{11}^0 \left[1 - \left(\frac{C_{12}^0}{C_{11}^0} \right)^2 \right] = \rho c_{S0}^2. \quad (6.17)$$

Im Sinne der Störungstheorie setzen wir die aus dem Verschiebungsfeld $u_1(x_1, t) = |A| \sin \xi$ der S0-Welle im risslosen Medium generierte Dehnung $\epsilon_{11}(x_1, t) = |A| k \cos \xi$ mit $\xi := k(x_1 - c_{S0}t)$ in das Spannungsinkrement ΔT_{11} ein. Diese ist eine 2π -periodische Funktion von ξ und kann daher in eine Fourier-Reihe

$$\Delta T_{11}(\xi) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \Delta \tilde{T}^{(n)} e^{in\xi} \quad (6.18)$$

mit den Koeffizienten

$$\Delta \tilde{T}^{(n)} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-in\xi} \Delta T_{11}(\xi) d\xi = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} \cos(n\xi) \Delta T_{11}(\xi) d\xi. \quad (6.19)$$

entwickelt werden. Die nichtverschwindenden Koeffizienten führen nun zur Erzeugung höherer Harmonischer $u_1^{(n)}$ der S0-Welle

$$u_1^{(n)} = X_1 A'_n e^{in\xi}, \quad (6.20)$$

die linear mit der Ausbreitungsdistanz anwachsen. Für $n = \pm 1$ kann das zur Veränderung der Phasengeschwindigkeit der Grundschwingung führen und für $n = 0$ zu einer akustischen Gleichrichtung, d.h. zu einem konstanten Term im Verschiebungsfeld. Die Koeffizienten

$$A'_n = -\frac{1}{2\rho c_{S0}^2} \Delta \tilde{T}^{(n)} \quad (6.21)$$

können dann mithilfe der Parameter in den effektiven Spannungs-Dehnungsrelationen (6.14) und (6.15) für die flachen und Hertzschen Kontakte bestimmt werden.

Kissing Bonds

Ein Resultat des Knickes in der Spannungs-Dehnungsrelation ist, dass alle geraden Harmonischen der Grundwelle mit Wellenvektor k linear mit der Ausbreitungsdistanz und mit der Wachstumsrate $A'_n \propto |A| k$ anwachsen. Für die zweite Harmonische ergibt sich etwa

$$A'_2 = -\frac{\tau_1}{3\pi\rho c_{S0}^2} |A| k. \quad (6.22)$$

Ein Knick in der Spannungs-Dehnungsrelation hat zwar keinen direkten Einfluss auf die erste Harmonische, führt aber zu akustischer Gleichrichtung.

Hertzsche Kontakte

Im Falle Hertzscher Kontakte sind nur die ungeraden Harmonischen von der Nichtlinearität betroffen. Eine akustische Gleichrichtung ist in diesem Fall nicht zu erwarten. Die dritte Harmonische wächst linear in Abhängigkeit vom zurückgelegten Weg mit der Wachstumsrate

$$A'_3 = -\frac{\tilde{\tau}_1}{120\pi\rho c_{S0}^2} (|A| k)^2, \quad (6.23)$$

die im Gegensatz zur zweiten Harmonischen bei flachen Rissen proportional zum Quadrat der Amplitude der Grundschwingung ist. Die Phasengeschwindigkeit der langwelligen S0-Mode erfährt eine Verschiebung

$$\Delta c_{S0} = -\frac{\tilde{\tau}_1}{6\pi\rho c_{S0}^2} |A| k, \quad (6.24)$$

die proportional zur Amplitude der Grundwelle ist. Dieser Umstand ist den in [GLNS17] betrachteten Nichtlinearitäten sehr ähnlich.

6.2. Einfluss tiefenabhängiger SOEC auf lineare Dispersion

Zur Untersuchung des Einflusses eines Tiefenprofils der elastischen Konstanten auf den linearen Teil der Gleichungen (6.6), nehmen wir eine Lösung des gestörten Problems (6.6b) in Form einer Oberflächenwelle

$$u_i^{(1)} := U_i^{(1)}(X_3|k) \exp[i(kX_1 - \omega_1 t)] \quad (6.25)$$

unter der Randbedingung (6.5b) mit tiefenabhängigen Materialparametern \mathbf{S} und ρ und projizieren diese auf eine Lösung

$$u_i^{(0)} := U_i^{(0)}(X_3|k) \exp[i(kX_1 - \omega_0 t)] \quad (6.26)$$

des ungestörten Problems mit ortsunabhängigen Parametern \mathbf{S}^0 und ρ_0 , d.h. wir setzen $u_i^{(1)}$ in die Bewegungsgleichung ein, multiplizieren mit $U_i^{(0)*}$ und integrieren bzgl. X_3 über die gesamte Tiefe. Mithilfe der linearen Randbedingungen (6.5b) ergibt die Projektion wegen

$$\int_{-\infty}^0 U_i^{(0)*} \mathcal{D}_J S_{ijkl} \mathcal{D}_L U_k^{(1)} dX_3 = - \int_{-\infty}^0 [\mathcal{D}_J U_i^{(0)}]^* S_{ijkl} \mathcal{D}_L U_k^{(1)} dX_3 \quad (6.27)$$

zunächst

$$\begin{aligned} & -\omega_1^2 \int_{-\infty}^0 \rho U_i^{(0)*} U_i^{(1)} dX_3 \\ & = - \int_{-\infty}^0 [\mathcal{D}_J U_i^{(0)}]^* \Delta S_{ijkl}(X_3) \mathcal{D}_L U_k^{(1)} dX_3 - \omega_0^2 \rho_0 \int_{-\infty}^0 U_k^{(0)*} U_k^{(1)} dX_3, \end{aligned} \quad (6.28)$$

wobei wieder partiell integriert, die Randbedingung verwendet und für die weitere Vereinfachung die Bewegungsgleichung selbst benutzt wurde. Hier und im Folgenden wird stets ein verlustfreies Medium ($\rho^* = \rho$, $\mathbf{S}^* = \mathbf{S}$) vorausgesetzt. Wir nehmen weiterhin an, dass die Änderung der Materialparameter klein sei, d.h.

$$\|\Delta\rho\|/\|\rho_0\| \ll 1, \quad \|\Delta S_{ijkl}\|/\|S_{ijkl}^0\| \ll 1. \quad (6.29)$$

Die induzierte Frequenzänderung ist in diesem Fall gering, sodass wir aus (6.28) in erster Näherung bzgl. der Störgrößen

$$\delta\omega = N^{-1} \left\{ \int_{-\infty}^0 [\mathcal{D}_J w_i]^* \Delta S_{ijkl} \mathcal{D}_L w_k dX_3 - \omega_0^2 \int_{-\infty}^0 \Delta\rho w_i^* w_i dX_3 \right\}, \quad (6.30)$$

mit

$$N = 2\omega_0 \rho_0 \int_{-\infty}^0 U_i^{(0)*} U_i^{(0)} dX_3 \quad (6.31)$$

für die Frequenzverschiebung erhalten, wobei die Materialparameter unter dem Integral tiefenabhängig sein können. Die Störung der Rayleighwelle wird hier durch die Änderung der SOEC und der Dichte verursacht, sodass sich die Wellenzahl, im Gegensatz zur dehnungsinduzierten Frequenzverschiebung, hier nicht ändert. Die relative Phasengeschwindigkeitsänderung $\delta c/c$ ist somit gleich der relativen Frequenzänderung $\delta\omega/\omega$.

6.3. Einfluss gradierter Materialparameter auf die Evolution der zweiten Harmonischen

In diesem Abschnitt soll der Einfluss räumlich inhomogener Materialparameter auf die Frequenzabhängigkeit des ANP untersucht werden. Es sei

$$u_i^{(1)}(X_I, t) := \sum_{n=1,2} A(X^{(\epsilon)}|k_n) U_i^{(1)}(X_3|k_n) \exp[i(k_n X_1 - n\omega t)] \quad (6.32)$$

eine Lösung der linearen Gleichung (6.6b) mit entsprechender Dispersionsrelation $k_n := k(n\omega)$. Setzen wir diese Lösung in die rechte Seite von (6.6c) ein, so wird klar, dass der Term zweiter Ordnung in der asymptotischen Entwicklung (6.1) einen Anteil

$$u_i^{(2)}(X_I, t) = U_i^{(2)}(X_3|2k_1) \exp[2i(k_1 X_1 - \omega t)] \quad (6.33)$$

enthält, der auf die quadratische Inhomogenität in der Bewegungsgleichung (6.6c) zurückzuführen ist und das Verschiebungsfeld der erzeugten zweiten Harmonischen beschreibt.

Setzen wir nun die Ansätze (6.32) und (6.33) in die Bewegungsgleichung (6.6c) ein und projizieren auf eine Lösung

$$\tilde{u}_i^{(1)}(X_I, t) = U_i^{(1)}(X_3|k_2) \exp[i(k_2 X_1 - 2\omega t)] \quad (6.34)$$

der Gleichung (6.6b) mit doppelter Frequenz, die die Dispersionsrelation erfüllt, so erhalten wir

$$\begin{aligned} & \left\{ 4\omega^2 \int_{-\infty}^0 \rho [U_i^{(1,2)}]^* U_i^{(2)} dX_3 + \int_{-\infty}^0 [\mathcal{D}_J(k_2) U_i^{(1,2)}]^* S_{iJKL} \mathcal{D}_L(k_2) U_k^{(2)} dX_3 \right\} \exp[-i\Delta K X^{(\epsilon)}] \\ &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^0 [\mathcal{D}_J(k_2) U_i^{(1,2)}]^* S_{iJKLMN} [\mathcal{D}_L(k_1) U_k^{(1,1)}] [\mathcal{D}_N(k_1) U_m^{(1,1)}] dX_3 A_1^2 \exp[-i\Delta K X^{(\epsilon)}] \\ & \quad - \int_{-\infty}^0 \left([U_i^{(1,2)}]^* S_{i1kL} \mathcal{D}_L(k_2) U_k^{(1,2)} - [\mathcal{D}_J(k_2) U_i^{(1,2)}]^* S_{iJk1} U_k^{(1,2)} \right) dX_3 \frac{\partial A_2}{\partial X^{(\epsilon)}}, \end{aligned} \quad (6.35)$$

da die Summe der durch die partielle Integration entstandenen Randterme infolge der Randbedingung (6.5c) verschwindet. Aus Gründen der Übersichtlichkeit wurden hier die Funktionen

$$U_i^{(1,n)} : X_3 \mapsto U_i^{(1)}(X_3|k_n) \quad \text{und} \quad A_n : X^{(\epsilon)} \mapsto A(X^{(\epsilon)}, k_n) \quad (6.36)$$

und die Phasenverschiebung $\Delta K := 2k_1 - k_2$ eingeführt. Unter der Annahme geringer Dispersionseffekte ist dieser Term nahezu konstant und erlaubt eine Näherung der ihn enthaltenden Exponentialfunktion. Durch eine weitere partielle Integration der linken Seite entfällt das Verschiebungsfeld $U_k^{(2)}$ mithilfe der linearen Bewegungsgleichung (6.6b) nebst entsprechender Randbedingung, sodass wir

$$i \frac{\partial}{\partial X^{(\epsilon)}} A_2 = \beta(k_1) (k_1 A_1)^2 \exp[-i\Delta K X^{(\epsilon)}] \quad (6.37)$$

als Evolutionsgleichung für die Amplitude A_2 der zweiten Harmonischen erhalten. Hierbei stellt

$$\beta(k_1) := [k_1^2 c_G(k_2) N(k_2)]^{-1} \frac{1}{2} \int_{-\infty}^0 S_{iJKLMN} [\mathcal{D}_J(k_2) U_i^{(1,2)}]^* [\mathcal{D}_L(k_1) U_k^{(1,1)}] [\mathcal{D}_N(k_1) U_m^{(1,1)}] dX_3 \quad (6.38)$$

6.3 Einfluss gradierter Materialparameter auf die Evolution der zweiten Harmonischen

den akustischen Nichtlinearitätsparameter (ANP) dar und $c_G(k_2)$ die Gruppengeschwindigkeit aus Gl. (2.100) der Mode mit Wellenzahl k_2 , wobei der Nenner hier aufgrund der Dispersion

$$N(k_2) = 2\omega(k_2) \int_{-\infty}^0 \rho \left[U_i^{(1,2)} \right]^* U_i^{(1,2)} dX_3 \quad (6.39)$$

lautet. Entsprechende Anpassungen gelten für die Gruppengeschwindigkeit und es sei wieder ein verlustfreies Medium ($\mathbf{S} = \mathbf{S}^*$, $\rho = \rho^*$) vorausgesetzt. In einem dispersionsfreien Medium gilt $\omega = ck_1$, womit der ANP von der Wellenzahl unabhängig ist. Er ist außerdem dimensionslos.

Die erhaltene Evolutionsgleichung enthält das Verschiebungsprofil der Rayleighwelle im gestörten Material. Wird dieses durch das Profil im ungestörten Material ersetzt, bekommt man die Werte für den ANP in Tabelle 6.1, die somit ein Maß für die klassische Gitternichtlinearität der ungestörten Medien darstellen.

Tabelle 6.1.: ANP für die Superlegierungen IN718 und Ti6246 mit den in dieser Arbeit experimentell bestimmten Werten der SOEC und TOEC.

β^{In718}/i	β^{Ti6246}/i
-0,1285	-0,1507

Wellenmischexperiment

In der Verallgemeinerung der Erzeugung der zweiten Harmonischen auf Wellenmischexperimente nehmen wir analog an, dass sich das Verschiebungsfeld der Mischwelle aus einem linearen, die Dispersionsrelation erfüllenden Teil mit Frequenz $\omega_1 + \omega_{1'}$ und einem nichtlinearen Teil zusammensetzt, der durch die quadratische Inhomogenität in Gleichung (6.6c) motiviert wird. Einsetzen des Ansatzes in diese Gleichung liefert

$$\begin{aligned} & \left\{ 4\omega^2 \int_{-\infty}^0 \rho \left[U_i^{(1,2)} \right]^* U_i^{(1+1')} dX_3 + \int_{-\infty}^0 \left[\mathcal{D}_J(k_2) U_i^{(1,2)} \right]^* S_{iJKL} \mathcal{D}_L(k_2) U_k^{(1+1')} dX_3 \right\} e^{-i\Delta K X(\epsilon)} \\ &= f \int_{-\infty}^0 \left[\mathcal{D}_J(k_2) U_i^{(1,2)} \right]^* S_{iJKLmN} \left[\mathcal{D}_L(k_1) U_k^{(1,1)} \right] \left[\mathcal{D}_N(k_{1'}) U_m^{(1,1')} \right] dX_3 A_1^2 e^{-i\Delta K X(\epsilon)} \\ & \quad - \int_{-\infty}^0 \left(\left[U_i^{(1,2)} \right]^* S_{i1kL} \mathcal{D}_L(k_2) U_k^{(1,2)} - \left[\mathcal{D}_J(k_2) U_i^{(1,2)} \right]^* S_{iJK1} U_k^{(1,2)} \right) dX_3 \frac{\partial A_2}{\partial X(\epsilon)} \end{aligned} \quad (6.40)$$

mit dem verallgemeinerten Phasenverschiebungsfaktor $\Delta K := k_1 + k_{1'} - k_2$, der wieder die Fehlanpassung aufgrund von Dispersion angibt. Der Vorfaktor

$$f = \begin{cases} 1/2, & \text{2. Harmonische,} \\ 1, & \text{sonst} \end{cases} \quad (6.41)$$

ist nötig, da sich das lineare Feld aus den beiden Eingangswellen zusammensetzt und das Produkt beider Verschiebungsfelder somit beim Einsetzen doppelt auftaucht. Im Falle der Erzeugung der zweiten Harmonischen gibt es dagegen nur eine Eingangswelle, sodass sich dieser Faktor halbiert. Nach kurzer Rechnung erhalten wir

$$\beta(k_1, k_{1'}) := [N(k_2)]^{-1} f \int_{-\infty}^0 S_{iJKLmN} \left[\mathcal{D}_J(k_2) U_i^{(1,2)} \right]^* \left[\mathcal{D}_L(k_1) U_k^{(1,1)} \right] \left[\mathcal{D}_N(k_{1'}) U_m^{(1,1')} \right] dX_3, \quad (6.42)$$

als ANP der Mischwelle, der aufgrund der Dispersionsrelation lediglich von den beiden Eingangsfrequenzen k_1 und k_1' abhängt.

6.4. Ausbreitung von Rayleighwellen in Medien mit Rissen

Eine Rayleighwelle, die sich durch ein Medium mit Mikrorissen bewegt, wird einerseits von der Gitternichtlinearität des Matrixmaterials über die Konstanten dritter Ordnung im Tensor entsprechenden \mathbf{S} -Tensor beeinflusst. Darüber hinaus führen die Risse selbst zu einer Nichtlinearität, die aus dem Öffnen und Schließen derselben und der daraus resultierenden effektiven Steifigkeitsänderung hervorgeht. Diese kleine Änderung führt zu einer Störung des Spannungstensors und damit zu einer leicht geänderten rechten Seite der Bewegungsgleichung. Der Einfluss dieser Spannungsänderungen auf die Ausbreitung der zweiten Harmonischen sowie von Mischfrequenzen soll hier im Folgenden untersucht werden.

Mithilfe des neuen Ansatzes für die relative Volumenänderung für Medien mit ausgerichteten Rissen in Gl. (5.86) und den daraus resultierenden neuen Konstanten zweiter Ordnung in Gl. (5.99) und (5.102) lässt sich erkennen, dass der Anteil der rissinduzierten Normalspannungen

$$\begin{aligned}\Delta T_{11} &= \bar{\beta}(\epsilon_0) (\lambda + 2\mu) \epsilon_0 \\ \Delta T_{22} &= \Delta T_{33} = \bar{\beta}(\epsilon_0) \lambda \epsilon_0\end{aligned}\quad (6.43)$$

mit $\bar{\beta}(\epsilon_0) = \beta(\epsilon_0) - 1$ beträgt. Man beachte dabei die Definition der ϵ_0 aus Gl. (5.95), die diese Anteile nichtlinear bzgl. der Dehnungen werden lässt. Die Änderungen der Scherspannungen

$$\Delta T_{1\zeta} = \kappa \mu^2 2\epsilon_{1,\zeta} \quad (\zeta = 2, 3) \quad (6.44)$$

$$\Delta T_{23} = 0 \quad (6.45)$$

dagegen sind linear in den Dehnungen und beeinflussen somit lediglich die Grundwelle. Diese Tatsache ist einfacher zu erkennen, wenn wir den rissinduzierten Spannungsanteil dem PK1-Tensor in der Bewegungsgleichung hinzu addieren.

Zur Herleitung einer Evolutionsgleichung für die Amplitude der zweiten Harmonischen wird wieder die Projektionsmethode auf die Bewegungsgleichung mit dem geänderten Spannungstensor

$$P_{iJ} = S_{iJKL} u_{k,L} + \frac{1}{2} S_{iJKLMN} u_{k,L} u_{m,N} + \delta_{il} \Delta T_{lJ} \quad (6.46)$$

angewendet. Gleichung (6.6c) erhält damit einen zusätzlichen Term auf der rechten Seite

$$\rho \ddot{u}_i^{(2)} - \frac{\partial}{\partial X_J} S_{iJKL} u_{k,L}^{(2)} = \left(S_{i1kL} \frac{\partial}{\partial X_L} + \frac{\partial}{\partial X_J} S_{iJk1} \right) u_{k,\epsilon}^{(1)} + \frac{\partial}{\partial X_J} \left(\frac{1}{2} S_{iJKLMN} u_{k,L}^{(1)} u_{m,N}^{(1)} + \delta_{il} \Delta T_{lJ} \right) \quad (6.47)$$

und wird nun auf eine Lösung der linearen Gleichung mit Wellenzahl $2k$ projiziert. Zweifache partielle Integration liefert mit den entsprechend angepassten Randbedingungen die Gleichung

$$i c_G \frac{\partial}{\partial X^{(\epsilon)}} A_2 = \left\{ \beta (k A_1)^2 + \tilde{\gamma} \right\} \exp \left(-i \Delta K X^{(\epsilon)} \right) \quad (6.48)$$

deren zweiter Term auf der rechten Seite

$$\tilde{\gamma} := N^{-1} \int_{-\infty}^0 \delta_{il} [\mathcal{D}_J(2k) w_i(X_3|2k)]^* \Delta \hat{T}_{lJ}^{(2)}(k X_3) dX_3 \quad (6.49)$$

nun den Einfluss der Risse auf die Ausbreitung der zweiten Harmonischen beschreibt. Dabei haben wir angenommen, dass sich das Spannungskrement in eine Fourierreihe

$$\Delta T_{11}(\theta) = \sum_n \Delta \hat{T}_{11}^{(n)} e^{in\theta} \quad (6.50)$$

entwickeln lässt, sodass nach der Projektion auf die lineare Lösung lediglich der Koeffizient

$$\Delta \hat{T}_{11}^{(2)} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \Delta T_{11}(\theta) e^{-in\theta} d\theta \Big|_{n=2} \quad (6.51)$$

dieser Reihe den nichtlinearen Einfluss der Risse widerspiegelt. Für das Verschiebungsfeld einer Rayleighwelle in einem isotropen Medium lautet dieser Koeffizient

$$\Delta \hat{T}_{11}^{(2)}(Z) = \frac{1}{3\pi} k|A_1| (\lambda + 2\mu) f_0(Z) (\beta_{-\text{sign}(f_0(Z))} - \beta_{\text{sign}(f_0(Z))}), \quad (6.52)$$

wobei

$$\frac{1}{2} f_0(Z) := \left(\frac{\lambda}{\lambda + 2\mu} \alpha_L^2 - 1 \right) e^{\alpha_L Z} + \left(1 - \frac{\lambda}{\lambda + 2\mu} \right) \sqrt{\alpha_L \alpha_T} e^{\alpha_T Z} \quad (6.53)$$

und die komplexe Amplitude im linearen Verschiebungsfeld gemäß $A = |A|e^{i\phi}$ zerlegt wurde. Im Falle einer homogenen Rissverteilung ist der Rissparameter β_{\pm} tiefenunabhängig, sodass sich der rissinduzierte Anteil zu

$$\tilde{\gamma} = i \frac{k|A_1|}{N} \frac{\lambda + 2\mu}{3\pi} (\beta_- - \beta_+) \int_{-\infty}^0 f_0(2Z) f_0(Z) \text{sign}(f_0(Z)) dZ. \quad (6.54)$$

$$=: k|A_1| \gamma_{\text{ANP}} \quad (6.55)$$

berechnet. Hierbei wurde der rissinduzierte Nichtlinearitätsparameter γ_{ANP} eingeführt, dessen Werte für die aus den Simulationen extrahierten Modellparameter $\alpha_{0,1}$ in Tab. 6.2 aufgeführt sind. Im Gegensatz zur klassischen Nichtlinearität, ist der Einfluss der Risse auf die zweite Harmonische somit linear bzgl. der dimensionslosen Amplitude $k|A_1|$. Selbst im Falle sehr großer Amplituden von $\epsilon \approx 10^{-2}$ ist der Einfluss der Risse vergleichbar mit dem der Gitternichtlinearität.

Tabelle 6.2.: Rissinduzierte Nichtlinearität, berechnet aus den Parametern in Tabelle 5.26 für feste und freie Randbedingungen.

Füllgrad	$\Im \gamma_{\text{ANP}}^{\text{fest}}$ [m/s]	$\Im \gamma_{\text{ANP}}^{\text{frei}}$ [m/s]	$\Im \gamma_{\text{ANP}}^{\text{fest}}/N$ [m/s]	$\Im \gamma_{\text{ANP}}^{\text{frei}}/N$ [m/s]
1,000	-4,9686	-5,0622	-4,9686	-5,0622
0,504	-2,7954	-2,8688	-4,8948	-5,0187
0,184	-1,0522	-1,1230	-4,6640	-4,9629
0,120	-0,6955	-0,7726	-4,6469	-5,1355
0,064	-0,3701	-0,4437	-4,5749	-5,4554
0,032	-0,1881	-0,2513	-4,6216	-6,1184
0,016	-0,0930	-0,1546	-4,5629	-7,5535
0,008	-0,0481	-0,1061	-4,6627	-10,4978

Der rissinduzierte ANP ist für eine homogene Verteilung von Mikrorissen unabhängig von der Wellenzahl. Im Falle einer in X_3 -Richtung inhomogenen Verteilung dagegen wird der Integrand in Gl. (6.54) noch mit der Profildfunktion der Rissverteilung multipliziert und man erhält eine von ebendieser Verteilung abhängige Frequenzabhängigkeit des rissinduzierten ANP.

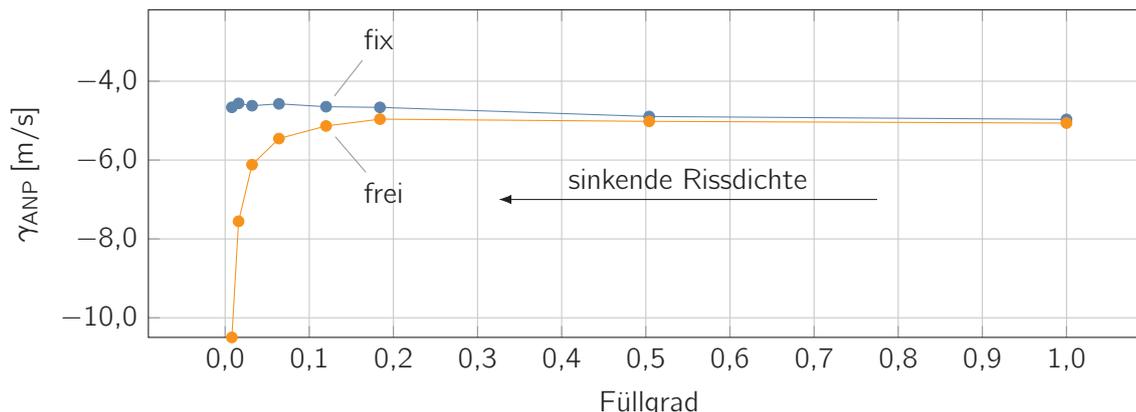


Abbildung 6.2.: Werte der rissinduzierten Nichtlinearität aus Tab. 6.2

Um in der Lage zu sein, störende Harmonische in Messaufbauten zu umgehen, ist die Verwendung beliebiger Mischfrequenzen sehr nützlich. Es soll daher noch die Abhängigkeit der Erzeugung von Mischfrequenzen bei kollinearen Mischung zweier Eingangswellen unterschiedlicher Wellenzahlen betrachtet werden. Sei dazu das Verschiebungsfeld der Überlagerung beider Eingangswellen durch

$$u_i^{(1)}(X_1, t) = \sum_{j=1,2} A_j e^{i(k_j X_1 - \omega t)} w_i(X_3 | k_j) + c.c. \quad (6.56)$$

mit der komplexen Amplitude $A_j = |A_j| e^{i\phi}$ gegeben. Nehmen wir an, beide Wellenzahlen k_1 und k_2 seien jeweils ein ganzzahliges Vielfaches l_1 und l_2 einer Wellenzahl k . Dann ist das Spannungsinkrement ΔT_{11} wegen Gl. (6.43) eine 2π -periodische Funktion bzgl. $\theta_0 := kX_1 - \omega(k)t$. Der Dehnungsparameter ϵ_0 aus Gl. (5.95) lautet mit diesen Definitionen

$$\epsilon_0(\theta_0, Z) = k \sum_{j=1,2} |A_j| l_j f_0(l_j Z) \sin(l_j \theta_0 + \phi_j), \quad (6.57)$$

sodass für die Fourierkoeffizienten des Spannungsinkrements ΔT_{11} nun

$$\Delta \hat{T}_{11}^{(n)} = \frac{\lambda + 2\mu}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-in\theta_0} \bar{\beta}[\epsilon_0(\theta_0, \cdot)] \epsilon_0(\theta_0, \cdot) d\theta_0 \quad (6.58)$$

gilt. Aufgrund der Periodizität von ϵ_0 bzgl. θ und der Zerlegung

$$\bar{\beta}(\epsilon_0) = \beta_{\text{sign}(\epsilon_0)} = \frac{1}{2}(\beta_+ + \beta_-) + \frac{1}{2} \text{sign}(\epsilon_0)(\beta_+ - \beta_-) \quad (6.59)$$

können wir den Fourierkoeffizienten aus Gl. (6.58) weiter zu

$$\Delta \hat{T}_{11}^{(n)} = \frac{1}{2}(\beta_+ - \beta_-) \frac{\lambda + 2\mu}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-in\theta_0} |\epsilon_0(\theta_0, \cdot)| d\theta_0 \quad (6.60)$$

vereinfachen. Das Integral lässt sich also semianalytisch berechnen, da wir die Stammfunktion kennen und diese lediglich an den Nullstellen von ϵ_0 auswerten sowie mit dem jeweiligen Vorzeichen von ϵ_0 multiplizieren müssen. Für $n \neq l_j$ ($j = 1, 2$) folgt

$$\Delta \hat{T}_{11}^{(n)}(Z) = (\beta_+ - \beta_-) \frac{\lambda + 2\mu}{8\pi} k \sum_{l=0}^{R(X_3)} \text{sign}[\epsilon_0(\cdot, Z)|_{(\theta_l^t, \theta_l^u)}] \sum_{j=1,2} |A_j| l_j f_0(l_j Z) \cdot \quad (6.61)$$

$$\cdot \left[\frac{1}{n - l_j} \left(e^{i(l_j - n)\theta_l^u + i\phi_j} - e^{i(l_j - n)\theta_l^t + i\phi_j} \right) - \frac{1}{n + l_j} \left(e^{-i(l_j + n)\theta_l^u - i\phi_j} - e^{-i(l_j + n)\theta_l^t - i\phi_j} \right) \right], \quad (6.62)$$

wobei $R(X_3)$ die Anzahl der (inneren) Nullstellen von ϵ_0 im Intervall $(-\pi, \pi)$ an der Stelle X_3 bezeichnet, die zur Auswertung dieses Ausdrucks zuvor numerisch bestimmt werden müssen. Da weiterhin keine Dispersion vorliegt, wurde die dimensionslose Größe kX_3 auch hier durch Z ersetzt. Der rissinduzierte Nichtlinearitätsparameter lautet in diesem Fall

$$\tilde{\gamma} = N^{-1} \int_{-\infty}^0 [\mathcal{D}_J(k_3) w_l(X_3|k_3)]^* \Delta \hat{T}_{IJ}^{(l_3)}(kX_3) dX_3 \quad (6.63)$$

$$= \frac{ik_3}{2N} \int_{-\infty}^0 f_0(l_3 Z) k^{-1} \Delta \hat{T}_{11}^{(l_3)}(Z) dZ \quad (6.64)$$

$$= k |A_1| \frac{l_3}{2N} \frac{\beta_+ - \beta_-}{2} \frac{\lambda + 2\mu}{2\pi} \int_{-\infty}^0 f_0(l_3 Z) \int_{-\pi}^{\pi} e^{-il_3\theta_0} \frac{|\epsilon_0(\theta_0, Z)|}{k |A_1|} d\theta_0 dZ \quad (6.65)$$

mit der Mischwellenzahl $k_3 := l_3 k$ und dem Vielfachen $l_3 = l_1 \pm l_2$, je nachdem ob Summen- oder Differenzfrequenzen betrachtet werden sollen. Der Quotient im inneren Integranden ist unabhängig von der Wellenzahl k und der Amplitude $|A_1|$. Lediglich das Verhältnis dieser Größen beider Eingangswellen spielt hier eine Rolle. Zur Validierung des Ergebnisses in Gleichung (6.63) betrachten wir zwei sich in gleicher Richtung ausbreitende Wellen gleicher Amplitude und Frequenz und die resultierende additive Mischwelle. Die erhaltenen Werte für den rissinduzierten ANP sind genau doppelt so groß wie die Werte in Tab. 6.2. Dies ist intuitiv klar, da es hier, im Gegensatz zu Erzeugung der zweiten Harmonischen, zwei Eingangswellen gibt.

Eine Voraussetzung dieser Rechnung war, dass beide Wellenzahlen ein ganzzahliges Vielfaches einer gemeinsamen Wellenzahl k sind. Für beliebige reelle Verhältnisse l_2/l_1 ist der Dehnungsparameter nicht 2π -periodisch und die Bestimmung der Fourierkoeffizienten nicht ohne Änderung möglich. Wir können annehmen, dass $l_1 = 1$ ist und $l_2 \in \mathbb{Q}$ damit ein beliebiges rationales Verhältnis darstellt. Da die rationalen Zahlen dicht in den reellen Zahlen liegen, ist das praktisch keine Einschränkung. Aufgrund der Wahl des Parameters l_2 existieren Zahlen $p \in \mathbb{Z}$ und $q \in \mathbb{N}$ mit $l_2 = p/q$. Nun können wir den Dehnungsparameter in der Form

$$\epsilon_0(\theta_0, Z) = \hat{k} \sum_{j=1,2} |A_j| \hat{l}_j f_0(\hat{l}_j \hat{Z}) \sin(\hat{l}_j \hat{\theta}_0 + \phi_j) \quad (6.66)$$

$$= \epsilon_0(q\hat{\theta}_0, q\hat{Z} | l_j) \quad (6.67)$$

$$=: \hat{\epsilon}_0(\hat{\theta}_0, \hat{Z} | \hat{l}_j), \quad (6.68)$$

mit $\hat{k} = k/q$, $\hat{l}_j = ql_j$, $\hat{Z} = Z/q$ und $\hat{\theta}_0 = \theta_0/q$ schreiben, wobei der neue Dehnungsparameter $\hat{\epsilon}_0$ nun 2π -periodisch bezüglich $\hat{\theta}_0$ ist. Mit dieser Definition kann man die Fourierkoeffizienten des Spannungsinkrements nun über

$$\Delta \hat{T}_{11}^{(\hat{n})} = \frac{1}{2} (\beta_+ - \beta_-) \frac{\lambda + 2\mu}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-i\hat{n}\hat{\theta}_0} |\hat{\epsilon}_0(\hat{\theta}_0, \cdot | \hat{l}_j)| d\hat{\theta}_0 \quad (6.69)$$

$$= \frac{1}{2} (\beta_+ - \beta_-) \frac{\lambda + 2\mu}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-i(\hat{n}/q)q\hat{\theta}_0} |\epsilon_0(q\hat{\theta}_0, \cdot | l_j)| d\hat{\theta}_0 \quad (6.70)$$

$$= \frac{1}{2} (\beta_+ - \beta_-) \frac{\lambda + 2\mu}{2\pi q} \int_{-q\pi}^{q\pi} e^{-in\zeta} |\epsilon_0(\zeta, \cdot | l_j)| d\zeta \quad (6.71)$$

berechnen.

Am Beispiel von In718 wurde die Abhängigkeit des rissinduzierten ANP vom Mischungsverhältnis zweier Wellen mit Wellenzahlen $k_1 = k$ und $k_2 = l_2 k$ untersucht. Die Ergebnisse für verschiedene Ausdünnungsstufen in Abhängigkeit vom Frequenzverhältnis l_2/l_1 sind in Abb. 6.3 dargestellt. Als Modellparameter wurden die unskalierten Werte für α_0 und α_1 bei festen Randbedingungen gewählt,

6 Nichtlineare Oberflächenwellen

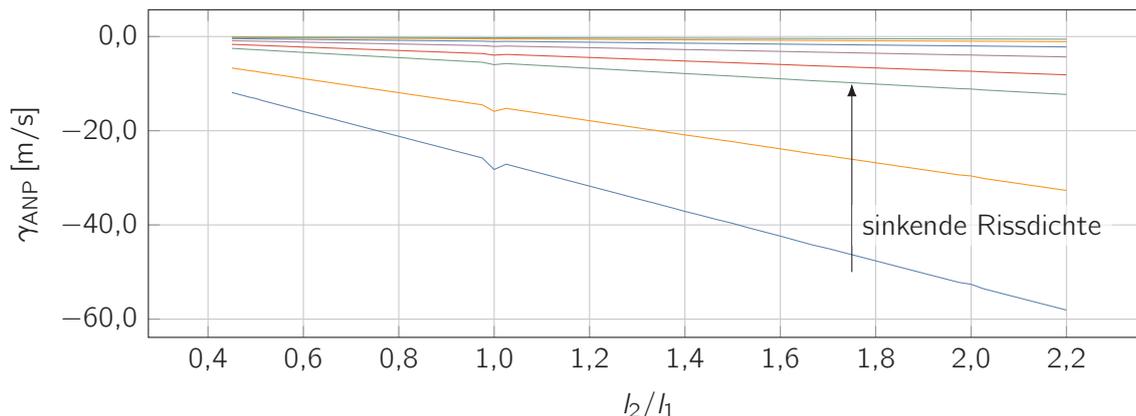


Abbildung 6.3.: Rissinduzierter ANP γ_{ANP} für In718 und verschiedene Verdünnungsstufen, aufgetragen als Funktion des Frequenzverhältnisses l_2/l_1 . Die Modellparameter wurden α_0 und α_1 bei festen Randbedingungen gewählt.

um den Einfluss der Rissdichte auf den rissinduzierten ANP untersuchen zu können. Der Ausreißer bei $l_1 = l_2$ zeigt sich in allen Verdünnungsstufen und ist eine Eigenschaft der Integration über θ . Er ist unabhängig von den jeweils gewählten Eingangsamplituden der Rechnung (ganzzahlig). Da die Frequenzen in diesem Fall genau übereinstimmen, ist der Absolutwert des Integrals über eine Periodendauer hier maximal bzgl. aller Frequenzverhältnisse (Resonanz).

Es stellt sich heraus, dass die Variation von γ_{ANP} bzgl. des Frequenzverhältnisses mit zunehmender Ausdünnung abnimmt. Der mittlere Anstieg dieser Kurven kann also als Maß für die Rissdichte herangezogen werden. Man beachte, dass die Rissdichte hier jeweils homogen ist. In der linearen Dispersion der Rayleighwellengeschwindigkeit würde man hier lediglich eine Verschiebung der ganzen Kurve sehen, was für praktische Zwecke ungünstig ist. Eine Messung des Anstiegs ist dagegen einfacher und vor Allem unabhängig von messbedingten, absoluten Verschiebungen der Kurven.

6.5. Bestimmung der TOEC aus ANP-Messungen

Im Falle eines homogenen Mediums ist der ANP unabhängig von der Wellenzahl, sofern eine Skalierung gewählt wurde, in der die Profildfunktionen \mathbf{w} unabhängig von k sind. Bestimmte Vorbehandlungen des Materials können jedoch Defekte - etwa Mikrorisse - einbringen, die eine vertikale Änderung der Materialeigenschaften hervorrufen. Ist die Wellenlänge der Rayleighwelle und damit deren typische Eindringtiefe in etwa von der Größenordnung des Störungsbereichs, so können aus der Frequenzabhängigkeit des ANP Rückschlüsse auf das Profil der Defekte und damit auf die Materialeigenschaften gezogen werden.

Wir möchten uns zunächst auf den Fall beschränken, in dem der Einfluss der Mikrorisse auf die SOEC vernachlässigbar ist, der Einfluss auf die nichtlinearen Eigenschaften dagegen substantiell. Weiterhin möchten wir für den Rest dieser Arbeit annehmen, dass zwar die Dichte der Risse mit dem Abstand zur Oberfläche variieren kann, nicht aber deren Orientierungsverteilung. Wir nehmen an, die TOEC im Parameter S_{ijklmn} in Gl. (6.38) ändern sich gleichgradig gemäß

$$C_{ijklmn}(X_3) = \rho(X_3) C_{ijklmn}^0, \quad (6.72)$$

wobei C_{ijklmn}^0 die als bekannt vorausgesetzten TOEC an der Oberfläche des Materials sind und das Profil ρ aus Messungen des ANP zu bestimmen ist. Wir betrachten die Änderung als kleine Störung

gegenüber dem homogenen Material, sodass wir mithilfe des Verschiebungsfeldes aus Gleichung (2.89)

$$\beta(k) = M^{(0)} + \sum_{r,r',r''=L,T} M_{r,r',r''}^{(1)} \int_0^\infty p(\zeta/k) \exp[-(2\alpha_r + \alpha_{r'} + \alpha_{r''})\zeta] d\zeta \quad (6.73)$$

für den ANP bei Erzeugung der zweiten Harmonischen aus Gleichung (6.38) bekommen. Der erste Summand

$$M^{(0)} := (c\bar{N})^{-1} (C_{IJLN}\delta_{il}\delta_{km} + C_{KLJN}\delta_{kk}\delta_{im} + C_{MNJL}\delta_{mM}\delta_{ik}) \quad (6.74)$$

$$\sum_{r,r',r''=L,T} D_{Jr}^* b_{ir}^* D_{Lr'} b_{kr'} D_{Nr''} b_{mr''} (2\alpha_r + \alpha_{r'} + \alpha_{r''})^{-1} \quad (6.75)$$

ist frequenzunabhängig und hängt lediglich von den linearen Materialparametern ab. Die Matrizen \mathbf{D} sind wieder die aus dem Ableitungsoperator hervorgehenden Abbildungen aus Gl. (4.10). Der zweite Summand enthält den Tensor

$$M_{r,r',r''}^{(1)} := (c\bar{N})^{-1} \delta_{il}\delta_{kk}\delta_{mM} C_{IJKLMN} D_{J(r)}^* b_{i(r)}^* D_{L(r')} b_{k(r')} D_{N(r'')} b_{m(r'')}, \quad (6.76)$$

der somit eine Linearkombination der TOEC an der Oberfläche des betrachteten Materials darstellt. Man erkennt sofort, dass $M_{r,r',r''}^{(1)} = M_{r,r'',r'}^{(1)}$. Außerdem lässt sich zeigen, dass im isotropen Fall $D_{12}b_{12} = -D_{32}b_{32}$ und damit $M_{222}^{(1)} = 0$ gilt (vgl. [Eck99]).

Es stellt sich nun die Frage nach der Möglichkeit, das Tiefenprofil p und damit das Verhältnis der drei isotropen TOEC l , m und n aus frequenzabhängigen Messungen des ANP von Rayleighwellen zu bestimmen. Die absoluten Größen können dann aus Messungen des ANP mit hinreichend hoher Frequenz erfolgen, sodass p über die Eindringtiefe der Rayleighwelle hinweg in etwa konstant ist.

Zur Lösung dieses Problems wollen wir das noch unbekannte Profil p nach Laguerre-Funktionen ϕ_n entwickeln, da diese eine vollständige und orthonormale Menge auf dem Intervall $(0, \infty)$ bilden. Es sei also

$$p(X_3) = p_n \phi_n(\kappa X_3) \quad (6.77)$$

mit einem Konvergenzparameter κ , den Laguerre-Funktionen $\phi_n(\xi) = e^{-\xi/2} L_n(\xi)$ und den dazugehörigen Laguerre-Polynomen

$$L_n(\xi) = \sum_{l=0}^n \binom{n}{l} \frac{(-1)^l}{l!} \xi^l = \sum_{l=0}^n a_l^n \xi^l, \quad (6.78)$$

wobei die evidenten Abkürzung a_l^n eingeführt wurde. Setzen wir nun Gl. (6.77) in die explizite Gl. (6.73) für den ANP ein, so erhalten wir Integrale über exponentiell gewichtete Laguerre-Polynome. Mit der Abkürzung $\xi := (\kappa/k)\zeta$ erhalten wir eine Linearkombination von Ausdrücken der Form

$$\int_0^\infty \xi^l e^{-A_{r,r',r''}(k)\xi} d\zeta = \frac{k}{\kappa} (-1)^l \frac{d^l}{dA_{r,r',r''}(k)^l} \int_0^\infty e^{-A_{r,r',r''}(k)\xi} d\xi = \frac{k}{\kappa} \frac{l!}{A_{r,r',r''}(k)^{l+1}}, \quad (6.79)$$

wobei $A_{r,r',r''}(k) := (k/\kappa)(2\alpha_r + \alpha_{r'} + \alpha_{r''}) + 1/2$. Eingesetzt in Gl. (6.73) bekommen wir für den ANP nun

$$\beta(k) = M^{(0)} + \sum_{r,r',r''=L,T} M_{r,r',r''}^{(1)} p_n \frac{k}{\kappa} \sum_{l=0}^n a_l^n \frac{l!}{A_{r,r',r''}(k)^{l+1}} \quad (6.80)$$

und im Falle diskreter Messungen an den Stellen k_s ($s = 1, \dots, K$) ein Gleichungssystem für die unbekanntenen Koeffizienten p_n

$$M_{sn} p_n = b_s \quad (6.81)$$

6 Nichtlineare Oberflächenwellen

mit der Koeffizientenmatrix

$$M_{sn} := \sum_{r,r',r''=L,T} M_{r,r',r''}^{(1)} \frac{k_s}{\kappa} \sum_{l=0}^n \binom{n}{l} (-1)^l [(k_s/\kappa)(2\alpha_r + \alpha_{r'} + \alpha_{r''}) + 1/2]^{-(l+1)} \quad (6.82)$$

und

$$b_s := \beta(k_s) - \mathbb{1}_s M^{(0)}, \quad (6.83)$$

als rechte Seite. Um ein unterbestimmtes Gleichungssystem zu verhindern, sollte die Anzahl der involvierten Laguerre-Polynome N größer oder zumindest gleich der Messpunkte K sein. Die Koeffizienten p_n können dann mithilfe des Ausgleichsproblems

$$\frac{1}{2} (M_{sn} p_n - b_s)^2 \rightarrow \min \quad (6.84)$$

bestimmt werden und wir erhalten

$$\mathbf{p} = (\mathbf{M}^T \mathbf{M})^{-1} \mathbf{M}^T \mathbf{b} \quad (6.85)$$

als Lösung für die Profilkoeffizienten.

Wir wollen die Methode nun zunächst am Beispiel einer homogenen Schicht der Dicke d auf einem homogenen Substrat testen. Die TOEC der Schicht seien C_{IJKLMN}^0 , die des Substrats seien $f C_{IJKLMN}^0$ mit einem Faktor $f > 0$. Das Profil p kann damit als Stufenfunktion $\Theta_{f;d}$ mit

$$\Theta_{f;d}(X_3) := \Theta(X_3) - f \Theta(X_3 - d) \quad (6.86)$$

beschrieben werden, wobei Θ die gewöhnliche Heaviside-Funktion darstellt. Der ANP aus Gleichung (6.73) lautet in diesem Fall

$$\beta(k) = M^{(0)} + \sum_{r,r',r''=L,T} M_{r,r',r''}^{(1)} \frac{1 - f e^{-(2\alpha_r + \alpha_{r'} + \alpha_{r''})kd}}{2\alpha_r + \alpha_{r'} + \alpha_{r''}} \quad (6.87)$$

und ist für verschiedene Verhältnisse f in Abb. 6.4 dargestellt. Für $f = 0$ sind die TOEC der Schicht gleich der des Substrats und es liegt keine Dispersion des ANP vor. Der Wert des ANP ist folglich gleich dem bereits berechneten Wert für ein homogenes Medium (vgl. Tab. 6.1).

Am Beispiel der Funktion $\Theta_{0,9;2}$ wurde die Inversionsmethode mithilfe synthetischer Daten (vgl. Abb. 6.4) für die Dispersion des ANP durchgeführt. Die anhand der Vorwärtsrechnung gewonnenen Daten wurden in die rechte Seite \mathbf{b} der Gl. (6.85) eingesetzt, die Matrix \mathbf{M} für denselben Frequenzbereich ausgewertet. Entsprechend Abb. 6.4 wurden die Wellenzahlen logarithmisch äquidistant ($K = 81$) im Bereich von 0,01 bis 100 gewählt und das entstehende Gleichungssystem gelöst. Die anhand der Koeffizienten rekonstruierten Funktionen sind in Abb. 6.5 für unterschiedliche Anzahlen N von Laguerre-Polynomen dargestellt.

Der Anpassungsparameter wurde auf $\kappa = 1$ gesetzt, da das Tiefenprofil damit gut abgebildet werden kann. Im Allgemeinen muss dieser Parameter entsprechend der Schichtdicke bzw. der charakteristischen Länge des Tiefenprofils gewählt werden. Ein guter Anhaltspunkt für die Wahl von κ ist dabei die auf die reale Dicke skalierte Wendestelle im Dispersionsdiagramm des ANP.

Eine Erhöhung der Anzahl an Laguerre-Polynomen von $N = 5$ auf $N = 20$ erhöht die Krümmung an der Stelle $d = 2$, und verbessert somit die Abbildung der sich dort befindlichen Stufe. Eine weitere Erhöhung von N verschlechtert das Ergebnis wieder. Das beste Ergebnis bzgl. des quadratischen Mittels der Abweichungen wird hier laut Tab. 6.3 für $N = 9$ erreicht.

Für $N = 40$ oszilliert die Lösung so stark, dass die Rekonstruktion des Profils bereits unbrauchbar wird. Den Mittelwert der Oszillationen könnte man im Bereich von $X_3 = 0$ bis $X_3 = 2$ noch als Näherung für

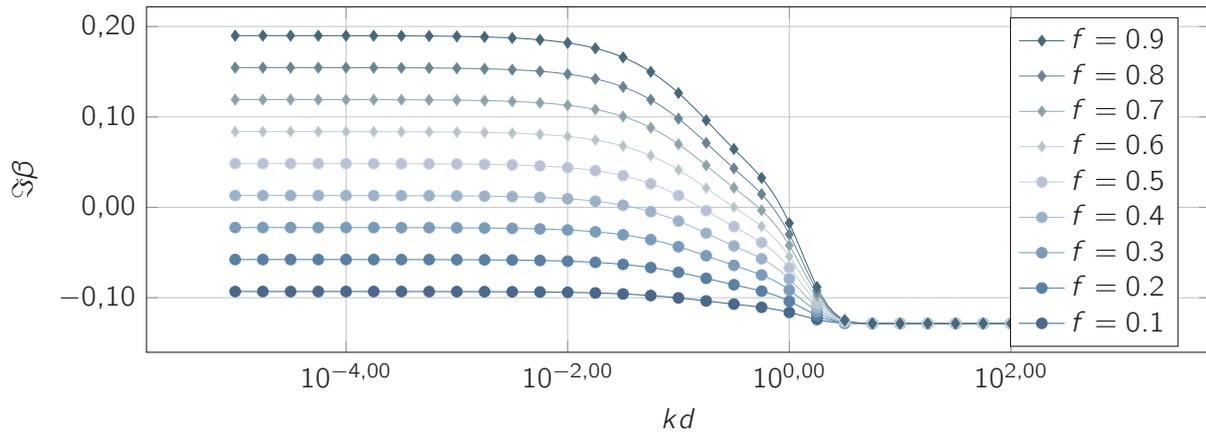


Abbildung 6.4.: Imaginärteil des ANP aus Gl. (6.73) für eine homogene Schicht aus In718 mit TOEC C_{IJKLMN}^0 auf einem homogenen Substrat mit TOEC fC_{IJKLMN}^0 in Abhängigkeit von der dimensionslosen Frequenz kd .

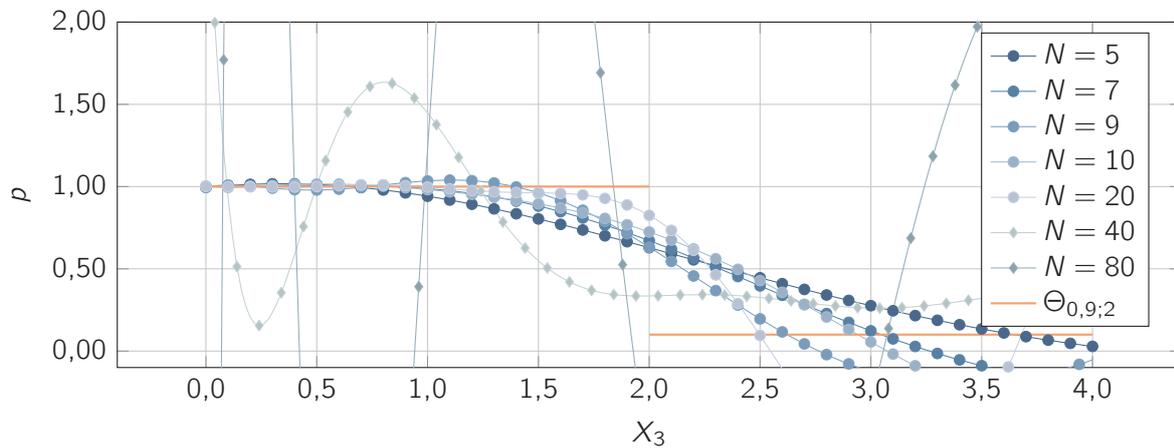


Abbildung 6.5.: Ergebnisse der Inversion synthetischer ANP-Dispersionsdaten für das Eingangsprofil $\Theta_{0,9;2}$. Gezeigt sind Resultate für unterschiedliche Anzahlen N von Laguerre-Polynomen. Als Anpassungsparameter wurde $\kappa = 1$ gewählt.

das Profil annehmen. Eine weitere näherungsweise Verdoppelung der Anzahl der involvierten Laguerre-Polynome lässt die Lösung allerdings auch über den Bereich der Stufe hinaus so stark oszillieren, dass keine Information über das eigentliche Profil mehr gewonnen werden kann.

Der Grund dafür liegt in der schlechten Kondition der Matrix $\mathbf{M}^T \mathbf{M}$, die für $N = 9$ bzgl. der Zeilensummennorm schon bei etwa 10^6 liegt. Für $N = 20$ ist diese bereits größer als 10^{14} und bei $N = 40$ erreicht die Konditionszahl beinahe 10^{20} . Kleinere Fehler in der rechten Seite, insbesondere auch durch die Vorwärtsrechnung entstandene Rundungsfehler, werden dadurch massiv verstärkt. Für die Inversion realer, fehlerbehafteter Messdaten ist eine Erhöhung von N daher nicht zielführend. Vielmehr sollte eine Abwägung zwischen Stabilität und Genauigkeit stattfinden.

Ein weiterer Grund für die sich verschlechternden Approximationseigenschaften der rekonstruierten Funktion liegt darin, dass die Heaviside-Funktion mithilfe stetiger Funktionen genähert werden soll. Wenn wir wissen, dass die gesuchte Funktion in etwa einer Sprungfunktion entspricht, dann können wir dieses Wissen nutzen, um unser Problem zu regularisieren. Nehmen wir also anstelle des Laguerre-Ansatzes die Funktion $\Theta_{f;d}$ als Ansatz für die gesuchte Profilfunktion, so müssen wir lediglich die

Tabelle 6.3.: Quadratisches Mittel des Fehlers der Inversion für N Laguerre-Polynome gegenüber der Eingangsfunktion p .

N	5,0	7,0	9,0	10,0	20,0	40,0	80,0
RMS-Fehler	0,2	0,2	0,2	0,3	0,4	0,4	3,5

zwei unbekannt Parameter f und d bestimmen. Gleichung (6.73) lautet mit diesem Ansatz

$$\beta(k) = M^{(0)} + \sum_{r,r',r''=L,T} M_{r,r',r''}^{(1)} \frac{1 - f \exp[-(2\alpha_r + \alpha_{r'} + \alpha_{r''}) kd]}{2\alpha_r + \alpha_{r'} + \alpha_{r''}}, \quad (6.88)$$

in der die unbekannte Dicke im Argument der Exponentialfunktion steckt. Die Lösung kann hier also nicht direkt bestimmt werden, sondern muss mithilfe eines Iterationsverfahrens genähert werden. Mit dem Levenberg-Marquardt-Verfahren (LM-Verfahren) etwa reichen bei geeigneter Wahl der Frequenzen bereits zwei Messungen aus, um die richtigen Parameter zu bestimmen. Dabei wird die nichtlineare Zielfunktion bzgl. der unbekannt Parameter linearisiert und in ein lineares Ausgleichsproblem (vgl. Gl. (6.85)) für das Inkrement der aktuellen Parameterschätzung überführt. Das Besondere am LM-Verfahren ist nun, dass nicht die Matrix $\mathbf{M}^T \mathbf{M}$ invertiert wird, sondern eine gedämpfte Variante $\mathbf{M}^T \mathbf{M} + \lambda \mathbf{I}$. Der Parameter λ wird dabei, wenn nötig, in jeder Iteration angepasst [EHN00].

7. Zusammenfassung

Die primäre Motivation dieser Arbeit besteht in der Suche nach einer zerstörungsfreien Bestimmung von Eigenspannungen, insbesondere oberflächen behandelter Superlegierungen. Dazu wurde die frequenzabhängige Phasengeschwindigkeitsänderung geführter Wellen betrachtet, die über den akustoelastischen Effekt mit den mechanischen Spannungen im Material verknüpft ist. Die quantitative Relation wird dabei mithilfe der akustoelastischen Konstanten hergestellt, die ihrerseits mit den Konstanten dritter Ordnung (TOEC) in der Entwicklung der Formänderungsenergie eines hyperelastischen Materials nach den Dehnungen verknüpft sind.

In Zugversuchen wurden dazu die Phasengeschwindigkeiten longitudinaler und transversaler Volumenwellen spannungsabhängig ermittelt und aus den Änderungen die akustoelastischen Konstanten sowie die TOEC erstmals für die Superlegierungen In718 und Ti6246 berechnet. Dabei ist zu sehen, dass sich die Materialparameter für In718 sehr homogen verhalten, die Werte für Ti6246 dagegen sehr stark streuen. Aufgrund der geringen Abweichungen in der Bestimmung der TOEC für In718 lässt dies im Falle der Titanlegierung auf eine starke Heterogenität des Materials schließen. Die ermittelten Werte liegen in der Größenordnung der TOEC in den linearen Eigenschaften vergleichbarer Materialien.

Mithilfe eines Modells für die Frequenzverschiebung einer Rayleighwelle in einem bzgl. der Oberfläche vertikal inhomogenen Spannungsfeld (Vorwärtsrechnung) wurde ein Inversionsmodell zur Bestimmung des unbekanntes Spannungstiefenprofils aus gegebenen Dispersionskurven entwickelt. Die Ergebnisse der Vorwärtsrechnung stimmten dabei mit Ergebnissen anderer aus der Literatur bekannten Modelle überein. Der Inversionsalgorithmus wurde mit den zuvor bestimmten Konstanten zweiter Ordnung (SOEC) und TOEC auf Dispersionskurven verschieden stark kugelgestrahlter Proben aus den oben genannten Legierungen angewandt. Dabei stellte sich heraus, dass die Änderung der Phasengeschwindigkeit der Rayleighwellen infolge vertikal inhomogener Eigenspannungen weit unterhalb der Änderung in den Dispersionskurven liegt. Eine Anpassung der TOEC löste diese Diskrepanz zwar auf, wäre jedoch nur praktikabel, solange alle anderen Materialeigenschaften konstant blieben. Im Allgemeinen ist diese Annahme nicht gültig, da sich aufgrund äußerer Lasten die Materialeigenschaften des Untersuchungsobjekts ändern und Defekte entstehen können. Ein prototypisches Beispiel solcher Defekte bilden Mikrorisse, deren Einfluss auf die Dispersion von Oberflächenwellen im zweiten Teil der Arbeit untersucht wurde. Zum einen wurden dabei die Änderungen der effektiven elastischen Konstanten des rissbehafteten Gesamtsystems anhand von 3D-Simulationen und aus der Literatur bekannter und hier erweiterter mikro-mechanischer Modelle studiert. Zum anderen wurde die nichtlineare Wechselwirkung zwischen Oberflächenwellen und Mikrorissverteilung untersucht, um über die Änderung in den Ausbreitungseigenschaften einen Zugang zur Rissverteilung zu gewinnen.

Die FEM-Simulationen wurden an homogenen Würfeln durchgeführt, die eine gleichmäßige Verteilung zufällig orientierter bzw. ausgerichteter Risse enthielten. Im Gegensatz zu sonstigen Modellrechnungen aus der Literatur handelte es sich um ein echtes dreidimensionales Modell, sodass keinerlei Annahmen zur Gestalt und dem Verhalten der Risse in der sonst verbleibenden Richtung getroffen werden mussten. Neben verschiedenen Randbedingungen des Modells wurden vor allem zwei unterschiedliche Rissarten untersucht: flache Risse und gekrümmte Risse. Die gekrümmten Risse wurden durch Hertzsche Kontakte realisiert und dienten dabei der Modellierung einer effektiven Rauigkeit der Rissoberflächen. Es handelte sich um quasistatische Berechnungen der Spannungsverteilung. Dynamische Effekte wurden in den Simulationen nicht betrachtet. Um die Gitternichtlinearität des Matrixmaterials berücksichtigen zu können, wurde eine Zusatzbibliothek zum hier verwendeten proprietären Löser

7 Zusammenfassung

implementiert und deren Funktionsweise validiert.

Bereits für zufällig orientierte Risse ist ein genereller Unterschied im Verhalten beider Rissarten festzustellen. Im Falle der flachen Risse sind die ermittelten Spannungs-Dehnungsrelationen am Ursprung nicht differenzierbar. Bei Hertzischen Kontakten ist dagegen anstatt des Knickes eine starke Krümmung am Ursprung zu erkennen, die in der Ableitung der Spannungs-Dehnungsrelation zu einer Nichtdifferenzierbarkeit am Ursprung führt. Nähere Untersuchungen an einzelnen Rissen konnten dieses Verhalten bestätigen. Die Bestimmung effektiver elastischer Konstanten ist daher nur für Hertzische Kontakte sinnvoll, aufgrund des Knickes in der Ableitung jedoch auch nur für die Konstanten zweiter Ordnung. Dies konnte nachgewiesen werden, indem die elastischen Konstanten getrennt für Zug- und Druckbereich ausgewertet wurden. Die Gegenwart zufällig verteilter Vorspannungen im Körper kann dabei zur Glättung der Nichtdifferenzierbarkeit führen und erlaubt somit wieder eine Bestimmung der elastischen Konstanten sowohl zweiter als auch dritter Ordnung – sogar im Falle flacher Risse.

Die berechneten rissinduzierten TOECs für ein lineares, eisenähnliches Matrixmaterial entsprechen dabei in etwa der Gitternichtlinearität einkristallinen Eisens. Anhand der Verläufe der Spannungs-Dehnungskurven wurden aus der Literatur bekannte Modelle für das mikromechanische sowie das makroskopische Verhalten herangezogen und erweitert bzw. angepasst. Die Modellparameter der analytischen Modelle wurden wiederum anhand der Spannungs-Dehnungsrelationen bestimmt. Die erwähnten Unterschiede bzgl. des Materialverhaltens beider Rissarten führten hier zur Verwendung unterschiedlicher Modelle.

Schließlich wurde im letzten Kapitel auf die nichtlineare Wechselwirkung zwischen geführten Wellen und Mikrorissen eingegangen. Eine wichtige Annahme dabei war, dass die charakteristische Größe der Mikrorisse, etwa der Durchmesser der Rissflächen bei den flachen Rissen, klein gegenüber der Wellenlänge der betrachteten Mode ist. Die flachen Risse führten hier zu einer nichtklassischen Nichtlinearität. Das bedeutet, dass sowohl im Falle der langwelligen S0-Mode bei Platten als auch der Rayleighwelle, die zweite Harmonische linear mit dem Produkt aus Amplitude und Wellenzahl der Grundschiwingung anwächst, im Gegensatz zum quadratischen Anwachsen bei klassischer Nichtlinearität. Die langwellige S0-Mode zeigte außerdem ein Anwachsen aller geraden Harmonischen für die flachen Kontakte, wogegen die Hertzischen Kontakte zum Wachstum ungerader Harmonischer führte. Bei flachen Rissen führt die Erzeugung von Harmonischen somit zur Ausbildung eines Gleichanteils (akustische Rektifizierung).

Zur Untersuchung des Einflusses linearer Materialparameter auf die Phasengeschwindigkeitsänderung von Rayleighwellen wurde ein Ausdruck für die Frequenzverschiebung (und damit Dispersionskurven) infolge einer vertikal inhomogenen Verteilung der SOEC hergeleitet, um Aussagen über den Einfluss linearer Verfestigungseigenschaften auf die Dispersion treffen zu können. Der Einfluss sowohl gradierter SOEC als auch TOEC auf die Frequenzabhängigkeit des Nichtlinearitätsparameters (ANP) für Rayleighwellen konnte außerdem mithilfe der Projektionsmethode untersucht werden. Anhand von Mischfrequenzen können darüber hinaus Folgerungen über das Tiefenprofil aus Wellenmischexperimenten gezogen werden.

Sofern die Änderung der SOEC nicht zu stark sind und die lineare Dispersion damit vernachlässigbar bleibt, wird das Wachstum der zweiten Harmonischen dabei nicht behindert, da eine Phasenanpassung der Harmonischen unabhängig von der Frequenz möglich ist. Über eine Fourierreihenentwicklung des rissinduzierten Spannungsbeitrages für flache Risse konnte hier ein Ausdruck für den rissinduzierten ANP berechnet werden, der den Einfluss von Mikrorissen auf die Entstehung höherer Harmonischer von Rayleighwellen unmittelbar quantifiziert. Die diesen Parameter definierende Evolutionsgleichung, die neben dem rissinduzierten Anteil auch den klassischen ANP der Gitternichtlinearität enthält, lässt erkennen, dass die rissinduzierte Nichtlinearität dabei, wie im Falle der S0-Mode, proportional zur Amplitude der Grundschiwingung ist. Es handelt sich also auch hier um eine nichtklassische Nichtlinearität. Weiterhin stellte sich heraus, dass sich die Abhängigkeit des rissinduzierten ANP vom Mischfrequenzverhältnis sehr gut als Indikator für die Rissdichte eignet, sogar im Fall einer homogenen Rissverteilung,

da hier der Anstieg der Kurve charakteristisch für die Rissdichte ist. Damit ist die Bestimmung des ANP zur Ermittlung der Rissdichteverteilung besser geeignet als die Messung der Rayleighwellengeschwindigkeit, die lediglich Absolutwerte liefert und damit anfälliger gegenüber den Messbedingungen ist.

Abschließend wurde noch eine Inversionsmethode zur Berechnung der Tiefenabhängigkeit der elastischen Konstanten aus den frequenzabhängigen Messungen des ANP hergeleitet. Unter der Annahme, dass sich alle Konstanten in derselben funktionalen Abhängigkeit ändern, wurde das unbekannte Tiefenprofil nach Laguerre-Funktionen entwickelt. Die Koeffizienten sind dann lediglich von Werten der elastischen Konstanten an der Oberfläche abhängig, die sich durch Messungen mit hinreichend hoher Frequenz bestimmen lassen. Die Funktionsweise der Rückrechnung wurde anhand eines Beispiels dargestellt und der Einfluss der Anzahl der involvierten Laguerre-Funktionen untersucht. Die Ergebnisse zeigen, dass es dabei ein Optimum gibt. Eine zu niedrige Anzahl an Ansatzfunktionen bildet das tatsächliche Profil nur ungenügend ab. Eine zu hohe Anzahl führt dagegen zu starken Oszillationen und damit ebenfalls zu einer unzulässigen Lösung. Eine Inversion ist also generell möglich, insbesondere in Kombination mit Dispersionsmessungen und Modellrechnungen.

Die vorliegende Arbeit kann keinen Anspruch auf Vollständigkeit bezüglich der Entwicklung eines Verfahrens zur zerstörungsfreien Bestimmung mechanischer Spannungen erheben. Sie widmet sich jedoch einzelnen Aspekten, wie der Bestimmung der Konstanten dritter Ordnung, der Entwicklung von Inversionsalgorithmen sowie der Untersuchung des Einflusses konkurrierender Effekte, hier Mikrorisse, auf die Materialeigenschaften selbst sowie auf die gewählte Messgröße und leistet über die Vereinigung dieser Teilaspekte einen Beitrag auf dem langen Weg hin zur akustoelastischen Eigenspannungsbestimmung.

A. Anhang

A.1. Beziehungen zwischen den elastischen Konstanten

Zur Herleitung der Beziehungen zwischen den symmetrischen und unsymmetrischen Steifigkeitstensen zweite und dritter Ordnung setzen wir zunächst die Ausdrücke für die Lagrange-Dehnungen in Gl. (2.10) ein und bekommen

$$\begin{aligned}
 \Phi(\mathbf{X}, u_{i,J}) = & \Phi_0 \\
 & + C_{IJ} \frac{1}{2} (\delta_{pI} u_{p,J} + \delta_{pJ} u_{p,I} + u_{p,I} u_{p,J}) \\
 & + \frac{1}{2!} C_{IJKL} \frac{1}{2} (\delta_{pI} u_{p,J} + \delta_{pJ} u_{p,I} + u_{p,I} u_{p,J}) \frac{1}{2} (\delta_{qK} u_{q,L} + \delta_{qL} u_{q,K} + u_{q,K} u_{q,L}) \\
 & + \frac{1}{3!} C_{IJKLMN} \frac{1}{2} (\delta_{pI} u_{p,J} + \delta_{pJ} u_{p,I}) \frac{1}{2} (\delta_{qK} u_{q,L} + \delta_{qL} u_{q,K}) \frac{1}{2} (\delta_{rM} u_{r,N} + \delta_{rN} u_{r,M}) \\
 & + \mathcal{O}(u_{i,J}^4).
 \end{aligned} \tag{A.1}$$

Aufgrund der Symmetrie von (C_{IJ}) folgt sofort, dass

$$S_{iJ} = \delta_{iI} C_{IJ}. \tag{A.2}$$

In zweiter Ordnung gilt aufgrund der Symmetrie des Tensors vierter Stufe und wegen

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{2} S_{iJKL} u_{i,J} u_{k,L} & \stackrel{!}{=} \frac{1}{2} C_{IJ} u_{p,I} u_{p,J} + \frac{1}{2} C_{IJKL} \frac{1}{2} (\delta_{pI} u_{p,J} + \delta_{pJ} u_{p,I}) \frac{1}{2} (\delta_{qK} u_{q,L} + \delta_{qL} u_{q,K}), \\
 & = \frac{1}{2} (C_{JL} \delta_{ik} + C_{IJKL} \delta_{iI} \delta_{kK}) u_{i,J} u_{k,L},
 \end{aligned}$$

dass

$$S_{iJKL} = C_{JL} \delta_{ik} + C_{IJKL} \delta_{iI} \delta_{kK}. \tag{A.3}$$

Schließlich bringt ein Vergleich der Koeffizienten dritter Ordnung

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{3} S_{iJKLMN} u_{i,J} u_{k,L} u_{m,N} \\
 & \stackrel{!}{=} C_{IJKL} \frac{1}{4} [(\delta_{pI} u_{p,J} + \delta_{pJ} u_{p,I}) u_{q,K} u_{q,L} + (\delta_{qK} u_{q,L} + \delta_{qL} u_{q,K}) u_{p,I} u_{p,J}] \\
 & \quad + \frac{1}{3} C_{IJKLMN} \frac{1}{2} (\delta_{pI} u_{p,J} + \delta_{pJ} u_{p,I}) \frac{1}{2} (\delta_{qK} u_{q,L} + \delta_{qL} u_{q,K}) \frac{1}{2} (\delta_{rM} u_{r,N} + \delta_{rN} u_{r,M}) \\
 & = \frac{1}{3} (C_{IJLN} \delta_{iI} \delta_{km} u_{i,J} u_{k,L} u_{m,N} + C_{KLJN} \delta_{kK} \delta_{im} u_{i,J} u_{k,L} u_{m,N} + C_{MNJL} \delta_{mM} \delta_{ik} u_{i,J} u_{k,L} u_{m,N}) \\
 & \quad + \frac{1}{3} C_{IJKLMN} \delta_{iI} \delta_{kK} \delta_{mM} u_{i,J} u_{k,L} u_{m,N}
 \end{aligned}$$

und damit

$$S_{iJKLMN} = C_{IJKLMN} \delta_{iI} \delta_{kK} \delta_{mM} + C_{IJLN} \delta_{iI} \delta_{km} + C_{KLJN} \delta_{kK} \delta_{im} + C_{MNJL} \delta_{mM} \delta_{ik}. \tag{A.4}$$

A.2. SOEC-Umrechnung

Tabelle A.1.: Beziehungen zwischen SOEC im isotropen Fall mit $X := \sqrt{9\lambda^2 + Y^2 + 2\lambda Y}$ und $Z := \sqrt{9M^2 - 10MY + Y^2}$.

	B (Kompressionsmodul)	Y (Elastizitätsmodul)	λ (erster Laméscher Parameter)
$\{B, Y\}$	–	–	$\frac{3B(3B-Y)}{9B-Y}$
$\{B, \lambda\}$	–	$\frac{9B(B-\lambda)}{3B-\lambda}$	–
$\{B, \mu\}$	–	$\frac{9B\mu}{3B+\mu}$	$B - \frac{2\mu}{3}$
$\{B, \nu\}$	–	$B(3-6\nu)$	$\frac{3B\nu}{\nu+1}$
$\{B, M\}$	–	$-\frac{9B(B-M)}{3B+M}$	$\frac{1}{2}(3B-M)$
$\{Y, \lambda\}$	$\frac{1}{6}(3\lambda - X + Y)$	–	–
$\{Y, \mu\}$	$-\frac{\mu Y}{3(Y-3\mu)}$	–	$-\frac{\mu(Y-2\mu)}{Y-3\mu}$
$\{Y, \nu\}$	$\frac{Y}{3-6\nu}$	–	$-\frac{\nu Y}{2\nu^2+\nu-1}$
$\{Y, M\}$	$\frac{1}{6}(Z + 3M - Y)$	–	$\frac{1}{4}(Z + M - Y)$
$\{\lambda, \mu\}$	$\lambda + \frac{2\mu}{3}$	$\frac{\mu(3\lambda+2\mu)}{\lambda+\mu}$	–
$\{\lambda, \nu\}$	$\frac{\lambda(\nu+1)}{3\nu}$	$\lambda(-2\nu + \frac{1}{\nu} - 1)$	–
$\{\lambda, M\}$	$\frac{1}{3}(2\lambda + M)$	$\frac{(M-\lambda)(2\lambda+M)}{\lambda+M}$	–
$\{\mu, \nu\}$	$\frac{2\mu(\nu+1)}{3-6\nu}$	$2\mu(\nu+1)$	$\frac{2\mu\nu}{1-2\nu}$
$\{\mu, M\}$	$M - \frac{4\mu}{3}$	$\frac{\mu(3M-4\mu)}{M-\mu}$	$M - 2\mu$
$\{\nu, M\}$	$\frac{(\nu+1)M}{3-3\nu}$	$\frac{(\nu+1)(2\nu-1)M}{\nu-1}$	$-\frac{\nu M}{\nu-1}$

	μ (Schubmodul)	ν (Poissonzahl)	M (Longitudinalmodul)
$\{B, Y\}$	$\frac{3BY}{9B-Y}$	$\frac{1}{2} - \frac{Y}{6B}$	$\frac{3B(3B+Y)}{9B-Y}$
$\{B, \lambda\}$	$\frac{3(B-\lambda)}{2}$	$\frac{\lambda}{3B-\lambda}$	$3B - 2\lambda$
$\{B, \mu\}$	–	$\frac{3B-2\mu}{6B+2\mu}$	$B + \frac{4\mu}{3}$
$\{B, \nu\}$	$\frac{B(3-6\nu)}{2(\nu+1)}$	–	$-\frac{3B(\nu-1)}{\nu+1}$
$\{B, M\}$	$-\frac{3}{4}(B-M)$	$\frac{3B-M}{3B+M}$	–
$\{Y, \lambda\}$	$\frac{1}{4}(-3\lambda - X + Y)$	$\frac{2\lambda}{\lambda-X+Y}$	$\frac{1}{2}(-\lambda - X + Y)$
$\{Y, \mu\}$	–	$\frac{Y}{2\mu} - 1$	$\frac{\mu(Y-4\mu)}{Y-3\mu}$
$\{Y, \nu\}$	$\frac{Y}{2\nu+2}$	–	$\frac{(\nu-1)Y}{2\nu^2+\nu-1}$
$\{Y, M\}$	$\frac{1}{8}(-Z + 3M + Y)$	$\frac{Z+M-Y}{Z+5M-Y}$	–
$\{\lambda, \mu\}$	–	$\frac{\lambda}{2(\lambda+\mu)}$	$\lambda + 2\mu$
$\{\lambda, \nu\}$	$\frac{1}{2}\lambda(\frac{1}{\nu} - 2)$	–	$\lambda(\frac{1}{\nu} - 1)$
$\{\lambda, M\}$	$\frac{M-\lambda}{2}$	$\frac{\lambda}{\lambda+M}$	–
$\{\mu, \nu\}$	–	–	$\frac{2\mu(\nu-1)}{2\nu-1}$
$\{\mu, M\}$	–	$\frac{M-2\mu}{2M-2\mu}$	–
$\{\nu, M\}$	$\frac{M-2\nu M}{2-2\nu}$	–	–

A.3. TOEC-Umrechnungen

Tabelle A.2.: Beziehungen zwischen den verschiedenen Definitionen der TOEC im isotropen Fall.

	(l, m, n)	(A, B, C)	(ν_1, ν_2, ν_3)	(a, b, c)	(a_3, a_4, a_5)
l	l	$B + C$	$\frac{\nu_1}{2} + \nu_2$	$a + b$	$a_3 + 3a_4$
m	m	$\frac{A}{2} + B$	$\nu_2 + 2\nu_3$	$b + \frac{c}{2}$	$-\frac{a_3}{2}$
n	n	A	$4\nu_3$	c	a_5
A	n	A	$4\nu_3$	c	a_5
B	$m - \frac{n}{2}$	B	ν_2	b	$-\frac{a_3}{2} - \frac{a_5}{2}$
C	$l - m + \frac{n}{2}$	C	$\frac{\nu_1}{2}$	a	$\frac{3a_3}{2} + 3a_4 + \frac{a_5}{2}$
ν_1	$2l - 2m + n$	$2C$	ν_1	$2a$	$3a_3 + 6a_4 + a_5$
ν_2	$m - \frac{n}{2}$	B	ν_2	b	$-\frac{a_3}{2} - \frac{a_5}{2}$
ν_3	$\frac{n}{4}$	$\frac{A}{4}$	ν_3	$\frac{c}{4}$	$\frac{a_5}{4}$
a	$l - m + \frac{n}{2}$	C	$\frac{\nu_1}{2}$	a	$\frac{3a_3}{2} + 3a_4 + \frac{a_5}{2}$
b	$m - \frac{n}{2}$	B	ν_2	b	$-\frac{a_3}{2} - \frac{a_5}{2}$
c	n	A	$4\nu_3$	c	a_5
a_3	$-2m$	$-A - 2B$	$-2\nu_2 - 4\nu_3$	$-2b - c$	a_3
a_4	$\frac{l}{3} + \frac{2m}{3}$	$\frac{A}{3} + B + \frac{C}{3}$	$\frac{\nu_1}{6} + \nu_2 + \frac{4\nu_3}{3}$	$\frac{a}{3} + b + \frac{c}{3}$	a_4
a_5	n	A	$4\nu_3$	c	a_5

A.4. Tensortransformation

Drehungen um den Winkel θ bzgl. der X_1 -, X_2 - oder X_3 -Achse erfolgen mittels der Drehmatrizen $R_{X_M}(\theta)$ ($M = 1, 2, 3$), die aufgrund der Antisymmetrie des Levi-Civita-Tensors ϵ

$$R_{X_M}(\theta) = \cos \theta \delta_{IJ} + (1 - \cos \theta) (\mathbf{e}_M)_I (\mathbf{e}_M)_J - \epsilon_{IJK} (\mathbf{e}_M)_K \sin \theta \quad (\text{A.5})$$

geschrieben werden können. Diese drehen ihre Operanden stets bzgl. der ursprünglichen Achsen. Möchte man aber um die jeweils aktuellen Achsen drehen, so kehrt sich die Reihenfolge der Anwendung auf den jeweiligen Vektor um. Eine Drehung um die X_3 -Achse erfolgt mit $R_{X_3}(\theta)$. Eine anschließende Drehung um den Winkel ϕ um die neue X_2 -Achse X'_2 erfolgt dann durch $R_{X'_2}(\phi)$, wobei

$$R_{X'_2}(\phi) = R_{X_3}(\theta) R_{X_2}(\phi) [R_{X_3}(\theta)]^{-1}. \quad (\text{A.6})$$

Eine weitere Drehung um ψ um die neue X_3 -Achse X''_3 (Roe-Konvention) ist dann möglich durch

$$R_{X''_3}(\psi) = R_{X'_2}(\phi) R_{X_3}(\theta) R_{X_3}(\psi) [R_{X_3}(\theta)]^{-1} [R_{X'_2}(\phi)]^{-1} = R_{X_3}(\theta) R_{X_2}(\phi) R_{X_3}(\psi). \quad (\text{A.7})$$

Die für unsere Betrachtungen interessante Drehung des KOS um θ um die X_3 -Achse und um ϕ um die so erhaltene X'_2 -Achse ist somit durch

$$R_{X_3}(\theta) R_{X_2}(\phi) = \begin{pmatrix} \cos(\theta) \cos(\phi) & -\sin(\theta) & \cos(\theta) \sin(\phi) \\ \sin(\theta) \cos(\phi) & \cos(\theta) & \sin(\theta) \sin(\phi) \\ -\sin(\phi) & 0 & \cos(\phi) \end{pmatrix}. \quad (\text{A.8})$$

Anhang

gegeben, sodass zwischen den Koordinatenachsen beider Systeme

$$\mathbf{e}'_I = e'_{KI} = e_{KJ} [R_{X_3}(\theta)R_{X_2}(\phi)]_{JI} =: \mathbf{e}_J (a^T)_{JI} = \mathbf{e}_J a_{IJ} \quad (\text{A.9})$$

gilt.

Einen gegebenen Tensor (T_{IJ}) können wir nun in beiden Koordinatensystemen darstellen. Genauer muss der Tensor unabhängig vom gewählten KOS sein. Für einen Tensor zweiter Stufe \mathbf{T} muss also

$$\mathbf{T} = T_{IJ} \mathbf{e}_I \otimes \mathbf{e}_J = T'_{IJ} \mathbf{e}'_I \otimes \mathbf{e}'_J \quad (\text{A.10})$$

bzw.

$$\mathbf{T} = T_{IJ} e_{KI} e_{LJ} = T'_{MN} e'_{KM} e'_{LN} = T'_{MN} e_{KI} a_{MI} e_{LJ} a_{NJ} = a_{MI} a_{NJ} T'_{MN} e_{KI} e_{LJ} \quad (\text{A.11})$$

und daher

$$T'_{MN} = a_{MI} a_{NJ} T_{IJ} \quad (\text{A.12})$$

gelten. Mit

$$T_{IJ} = C_{IJKL} E_{K,L} \quad (\text{A.13})$$

folgt sofort

$$T'_{MN} = a_{MI} a_{NJ} T_{IJ} = a_{MI} a_{NJ} C_{IJKL} E_{K,L} = a_{MI} a_{NJ} C_{IJKL} b_{KO} b_{LP} E'_{O,P} \stackrel{!}{=} C'_{MNOP} E'_{O,P}. \quad (\text{A.14})$$

Da sowohl \mathbf{c} als auch \mathbf{c}' Tensoren sind und sich damit wie ebensolche transformieren, muss

$$C'_{MNOP} = a_{MI} a_{NJ} b_{KO} b_{LP} C_{IJKL} \stackrel{!}{=} a_{MI} a_{NJ} a_{OK} a_{PL} C_{IJKL}, \quad (\text{A.15})$$

woraus $\mathbf{b} = \mathbf{a}^T$ und damit auch

$$E'_{O,P} = a_{OK} a_{PL} E_{K,L} \quad (\text{A.16})$$

folgt.

A.5. Nützliche Identitäten für Tensoren

Die Inverse \mathbf{a}^{-1} eines Tensors zweiter Stufe \mathbf{a} kann als

$$(\mathbf{a}^{-1})_{ij} = (\det \mathbf{a})^{-1} (\text{cof } \mathbf{a})_{ji} = \left(\frac{1}{6} \epsilon_{uvw} \epsilon_{rst} a_{ur} a_{vs} a_{wt} \right)^{-1} \frac{1}{2} \epsilon_{jkm} \epsilon_{iln} a_{kl} a_{mn} \quad (\text{A.17})$$

geschrieben werden. Aus der letzten Gleichheit folgt mit dem Satz von Schwarz und der Antisymmetrie des Levi-Civita-Tensors

$$\begin{aligned} (\text{cof } \nabla \mathbf{u})_{ijj} &= \epsilon_{ikm} \epsilon_{jln} u_{k,lj} u_{m,n} \\ &= \epsilon_{ikm} \epsilon_{jln} \frac{1}{2} (u_{k,lj} + u_{k,jl}) u_{m,n} \\ &= \epsilon_{ikm} \epsilon_{jln} \frac{1}{2} (u_{k,lj} - u_{k,lj}) u_{m,n} \\ &= 0 \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

für die Divergenz des Kofaktors eines Gradientenfeldes. Aus dieser Identität wird dann die Divergenzstruktur der Determinante eines Gradientenfeldes ersichtlich. Wegen (A.17) gilt nämlich

$$(\det \nabla \mathbf{u}) \delta_{ij} = u_{i,k} (\text{cof } \nabla \mathbf{u})_{jk} = (u_i (\text{cof } \nabla \mathbf{u})_{jk})_{,k}. \quad (\text{A.19})$$

A.6. Invarianten des Dehnungstensors

In einem isotropen Körper hängt die elastische Dehnungsenergie lediglich von drei Invarianten des Dehnungstensors \mathbf{E} ab. Eine übliche Definition benutzt die Koeffizienten des charakteristischen Polynoms

$$I_{\mathbf{E}} := \text{tr}(\mathbf{E}) = E_{II}, \quad (\text{A.20})$$

$$II_{\mathbf{E}} := \frac{1}{2} (\text{tr}^2(\mathbf{E}) - \text{tr}(\mathbf{E}^2)) = \frac{1}{2} (E_{II}E_{JJ} - E_{IJ}E_{IJ}), \quad (\text{A.21})$$

$$III_{\mathbf{E}} := \det(\mathbf{E}) = \frac{1}{6} \epsilon_{IKM} \epsilon_{JLN} E_{IJ} E_{KL} E_{MN} \quad (\text{A.22})$$

des Green-Lagrange-Tensors. Liegt der Dehnungstensor in kanonischer Form vor ($E_{IJ} = 0 (I \neq J)$), so vereinfachen sich die Ausdrücke zu

$$I_{\mathbf{E}} = E_{11} + E_{22} + E_{33}, \quad (\text{A.23})$$

$$II_{\mathbf{E}} = E_{11}E_{22} + E_{11}E_{33} + E_{22}E_{33}, \quad (\text{A.24})$$

$$III_{\mathbf{E}} = E_{11}E_{22}E_{33}. \quad (\text{A.25})$$

Eine ebenfalls übliche Definition bietet sich über die Spur der Potenzen

$$I_i := \text{tr}(\mathbf{E}^i), \quad (\text{A.26})$$

womit für die Beziehung der Invarianten

$$I_{\mathbf{E}} = I_1 \quad (\text{A.27})$$

$$II_{\mathbf{E}} = \frac{1}{2} (I_1^2 - I_2) \quad (\text{A.28})$$

$$III_{\mathbf{E}} = \frac{1}{6} (2I_3 - 3I_2I_1 + I_1^3) \quad (\text{A.29})$$

folgt. Die Ableitungen nach den Lagrange-Dehnungen berechnen sich so zu

$$\frac{\partial I_{\mathbf{E}}}{\partial E_{IJ}} = (\mathbf{I})_{IJ} = \delta_{IJ} \quad (\text{A.30})$$

$$\frac{\partial II_{\mathbf{E}}}{\partial E_{IJ}} = (I_{\mathbf{E}}\mathbf{I} - \mathbf{E})_{IJ} = I_{\mathbf{E}}\delta_{IJ} - E_{IJ} \quad (\text{A.31})$$

$$\frac{\partial III_{\mathbf{E}}}{\partial E_{IJ}} = \frac{1}{2} (\text{cof } \mathbf{E} + \text{cof}^T \mathbf{E})_{IJ} = \frac{1}{4} (\epsilon_{IKM} \epsilon_{JLN} + \epsilon_{JKM} \epsilon_{ILN}) E_{KL} E_{MN} \quad (\text{A.32})$$

Die Ableitung der Determinante folgt aus der Darstellung der Adjunkten (Transponierte des Kofaktors) mithilfe des Satzes von Cayley-Hamilton

$$\mathbf{E}^2 - I_{\mathbf{E}}\mathbf{E} + II_{\mathbf{E}}\mathbf{I} = \text{cof}^T \mathbf{E}, \quad (\text{A.33})$$

der daraus resultierenden Tatsache, dass die Ableitung der Adjunkten von \mathbf{E} nach \mathbf{E} verschwindet und dem Laplaceschen Darstellungssatz

$$\det \mathbf{E} = (\text{cof } \mathbf{E})_{(i)j} E_{(i)j} \quad (\text{A.34})$$

für die Determinante von \mathbf{E} , wobei i einen beliebigen Zeilenindex von \mathbf{E} bezeichnet, über den nicht summiert wird.

A.7. Alternative Definitionen des Dehnungsenergiefunktionals

Die Dehnungsenergiegedichte eines als hyperelastisch angenommenen Körpers lässt sich als Summe

$$\Phi = \Phi_1 + \Phi_2 + \Phi_3 \quad (\text{A.35})$$

schreiben, wobei der Summand erster Ordnung Φ_1 in Medien ohne Vorspannungen entfällt und der zweite Summand mithilfe der Lamé-Konstanten als

$$\Phi_2 = \frac{1}{2} (\lambda + 2\mu) I_E^2 - 2\mu II_E = \frac{1}{2} \lambda I_1^2 + \mu I_2 \quad (\text{A.36})$$

angegeben werden kann. Die Summanden dritter Ordnung können auf verschiedene Weise definiert werden. Einige dieser Möglichkeiten sind in Tab. A.3 aufgelistet. Durch einen Koeffizientenvergleich ergibt sich daraus die Umrechnungstabelle für die TOEC in isotropen Medien (Tab. A.2).

Tabelle A.3.: Summanden dritter Ordnung bzgl. der Dehnung im Energiefunktional mit mutmaßlicher Ersterwähnung.

Φ_3	Referenz
$(1/3)(I + 2m) I_E^3 - 2m II_E + n III_E$	[HK53]
$(1/3) C I_1^3 + B I_1 I_2 + (1/3) A I_3$	[Zab92]
$a_3 I_E II_E + a_4 I_E^3 + a_5 III_E$	[TR60]
$(1/3) a I_1^3 + b I_1 I_2 + (1/3) c I_3$	[GM00]
$(1/6) I_1^3 \nu_1 + I_1 I_2 \nu_2 + (4/3) I_3 \nu_3$	[May95]

A.8. Kompressionsrate in isotropen Medien

Die Kompressionsrate ρ/ρ_0 berechnet sich wegen $\rho_0 = J\rho$ ($J = \det \mathbf{F}$) und

$$J^2 = \det(\mathbf{F}^T \mathbf{F}) = \det(2\mathbf{E} + \mathbf{I}) = 8 \det(\mathbf{E} - (-1/2)\mathbf{I}) = 1 + 2I_E + 4II_E + 8III_E \quad (\text{A.37})$$

zu

$$\frac{\rho}{\rho_0} = (1 + 2I_E + 4II_E + 8III_E)^{-\frac{1}{2}} =: A^{-\frac{1}{2}}. \quad (\text{A.38})$$

Für kleine Dehnungen $E_{IJ} \ll 1$ lässt sich dieses Verhältnis nach den Dehnungen entwickeln. Wegen $E_{IJ} \approx \delta_{Ii} \delta_{Jj} \epsilon_{ij}$ gilt

$$\frac{\rho}{\rho_0} = 1 - \frac{1}{2} A^{-\frac{3}{2}} \left. \frac{\partial A}{\partial \epsilon_{ij}} \right|_{\epsilon=0} \epsilon_{ij} + \frac{1}{2!} \left(-\frac{1}{2} \right) \left(-\frac{3}{2} A^{-\frac{5}{2}} \frac{\partial A}{\partial \epsilon_{ij}} \frac{\partial A}{\partial \epsilon_{kl}} + A^{-\frac{3}{2}} \frac{\partial A}{\partial \epsilon_{ij} \partial \epsilon_{kl}} \right) \Big|_{\epsilon=0} \epsilon_{ij} \epsilon_{kl} + \mathcal{O}(\epsilon^3)$$

Mit

$$\begin{aligned} \frac{\partial I_\epsilon}{\partial \epsilon_{ij}} &= \delta_{ij}, & \frac{\partial II_\epsilon}{\partial \epsilon_{ij}} &= I_1 \delta_{ij} - \epsilon_{ij}, \\ \frac{\partial III_\epsilon}{\partial \epsilon_{ij} \epsilon_{kl}} &= \delta_{ij} \delta_{kl} - \frac{1}{2} (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}), & \frac{\partial III_\epsilon}{\partial \epsilon_{ij}} \Big|_{\epsilon=0} \epsilon_{ij} &= \frac{\partial III_\epsilon}{\partial \epsilon_{ij} \epsilon_{kl}} \Big|_{\epsilon=0} \epsilon_{ij} \epsilon_{kl} = 0 \end{aligned}$$

folgt zunächst

$$A|_{\epsilon=0} = 1, \quad \left. \frac{\partial A}{\partial \epsilon_{ij}} \right|_{\epsilon=0} \epsilon_{ij} = 2I_\epsilon, \quad \left. \frac{\partial A}{\partial \epsilon_{ij}\epsilon_{kl}} \right|_{\epsilon=0} \epsilon_{ij}\epsilon_{kl} = 2II_\epsilon$$

und damit in zweiter Näherung

$$\frac{\rho}{\rho_0} \approx 1 - I_\epsilon + \left(\frac{3}{2} I_\epsilon^2 - 2II_\epsilon \right). \quad (\text{A.39})$$

A.9. Dehnungsenergiefunktional für UPF-Implementierung in ANSYS[©]

In ANSYS[©] wird ein spezieller Satz skalierten Invarianten zur Berechnung des Potentials benutzt. Dies sind die deviatorischen Invarianten $\bar{I}_C := J^{-2/3} I_C$ und $\bar{II}_C := J^{-4/3} II_C$ sowie das Volumenverhältnis $J := \sqrt{III_C}$, wobei I_C , II_C und III_C die Invarianten des rechten Cauchy-Green-Tensors bezeichnen. Die Formänderungsenergie für ein isotropes, hyperelastisches Material ist nach Murnaghan [Mur51] als

$$\begin{aligned} \Phi(I_E, II_E, III_E) &= \frac{1}{2} (\lambda + 2\mu) I_E^2 - 2\mu II_E + \frac{1}{3} (l + 2m) I_E^3 - 2m I_E II_E + n III_E \\ &= \frac{1}{4} \left[\frac{1}{2} (\lambda + 2\mu) (I_C - 3)^2 - 2\mu (II_C - 2I_C + 3) \right] \\ &\quad + \frac{1}{8} \left[+ \frac{1}{3} (l + 2m) (I_C - 3)^3 - 2m (I_C - 3) (II_C - 2I_C + 3) \right. \\ &\quad \left. + n (III_C - II_C + I_C - 1) \right] \end{aligned} \quad (\text{A.40})$$

gegeben. Hier bezeichnen I_E , II_E und III_E die Invarianten des Green-Lagrange-Tensors. Die Ableitung von Φ nach den von ANSYS[©] benutzten deviatorischen Größen lautet mithilfe der Kettenregel (Summenkonvention)

$$\begin{aligned} \frac{d\Phi}{d(\bar{I}_C, \bar{II}_C, J)_i} &= \frac{\partial\Phi}{\partial(I_C, II_C, III_C)_k} \frac{d(I_C, II_C, III_C)_k}{d(\bar{I}_C, \bar{II}_C, J)_i} \\ \frac{d^2\Phi}{d(\bar{I}_C, \bar{II}_C, J)_i d(\bar{I}_C, \bar{II}_C, J)_j} &= \frac{\partial^2\Phi}{\partial(I_C, II_C, III_C)_k \partial(I_C, II_C, III_C)_l} \frac{d(I_C, II_C, III_C)_l}{d(\bar{I}_C, \bar{II}_C, J)_j} \frac{d(I_C, II_C, III_C)_k}{d(\bar{I}_C, \bar{II}_C, J)_i} \\ &\quad + \frac{\partial\Phi}{\partial(I_C, II_C, III_C)_k} \frac{d^2(I_C, II_C, III_C)_k}{d(\bar{I}_C, \bar{II}_C, J)_i d(\bar{I}_C, \bar{II}_C, J)_j}, \end{aligned} \quad (\text{A.41})$$

sodass wir lediglich noch die einfachen Ableitungen auf der rechten Seite benötigen. Mithilfe der Identitäten

$$C_{IJ}C_{IJ} = I_C^2 - 2II_C \quad (\text{A.42})$$

und

$$\begin{aligned} II_C &= C_{11}C_{22} - C_{12}C_{21} + C_{11}C_{33} - C_{13}C_{31} + C_{22}C_{33} - C_{23}C_{32} \\ &= \epsilon_{IJK}C_{1I}C_{2J} + \epsilon_{I2K}C_{1I}C_{3K} + \epsilon_{1JK}C_{2J}C_{3K} \end{aligned} \quad (\text{A.43})$$

erhalten wir zunächst

$$\begin{aligned} 2I_E &= 2E_{II} \\ &= C_{II} - \delta_{II} \\ &= I_C - 3, \end{aligned} \tag{A.44}$$

$$\begin{aligned} 4II_E &= \frac{1}{2} \left[(I_C - 3)^2 - (C_{IJ} - \delta_{IJ})(C_{IJ} - \delta_{IJ}) \right] \\ &= \frac{1}{2} \left[(I_C - 3)^2 - (I_C^2 - 2II_C - 2I_C + 3) \right] \\ &= II_C - 2I_C + 3, \end{aligned} \tag{A.45}$$

$$\begin{aligned} 8III_E &= \epsilon_{IJK} (C_{1I} - \delta_{1I})(C_{2J} - \delta_{2J})(C_{3K} - \delta_{3K}) \\ &= III_C - II_C + I_C - 1. \end{aligned} \tag{A.46}$$

als Beziehung zwischen den Invarianten der beiden Tensoren. Die Ableitungen der rechten Seite von Gl. (A.41) lauten nun

$$\frac{\partial \Phi}{\partial I_C} = \frac{1}{8} (2mI_C^2 + I(I_C - 3)^2 + (2\lambda + 4\mu - 4m)I_C - 2mII_C - 6\lambda - 4\mu + n) \tag{A.47}$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial II_C} = -\frac{1}{8} (4\mu + n + 2m(I_C - 3)) \tag{A.48}$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial III_C} = \frac{n}{8} \tag{A.49}$$

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial I_C^2} = \frac{1}{8} (4mI_C + 2I(I_C - 3) + 2\lambda + 4\mu - 4m) \tag{A.50}$$

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial I_C \partial II_C} = -\frac{1}{4} m \tag{A.51}$$

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial I_C \partial III_C} = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial II_C^2} = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial II_C \partial III_C} = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial III_C^2} = 0 \tag{A.52}$$

und

$$\frac{d(I_C, II_C, III_C)_k}{d(\bar{I}_C, \bar{II}_C, J)_i} = \frac{1}{3J^{1/3}} \begin{pmatrix} 3J & 0 & 2\bar{I}_C \\ 0 & 3J^{5/3} & 4\bar{II}_C J^{2/3} \\ 0 & 0 & 6J^{4/3} \end{pmatrix}_{ki} \tag{A.53}$$

$$\frac{d^2(I_C, II_C, III_C)_k}{d(\bar{I}_C, \bar{II}_C, J)_i d(\bar{I}_C, \bar{II}_C, J)_j} = \frac{1}{9J^{4/3}} \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 6J \\ 0 & 0 & -2\bar{I}_C \end{pmatrix}_{ij} \\ \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 12J^{5/3} \\ 0 & 0 & 4\bar{II}_C J^{2/3} \end{pmatrix}_{ij} \\ \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 18J^{4/3} \end{pmatrix}_{ij} \end{pmatrix}_k. \tag{A.54}$$

Quellcode - UserHyper.f

```

C*****
C Marek Rjelka 2016
C ftn95 UserHyper.f /64 /CFPP
C see ANSYS-help @ help/ans_thry/thy_mat5.html
C*****
      subroutine UserHyper(
&          prophy, incomp, nprophy, invar,
&          potential, pInvDer)
C*****
C
C   *** hyperelastic routine for isotropic metal
C
C   input arguments
C   =====
C   prophy      (dp,ar(*),i)   material property array
C   lm          = prophy(1)
C   mu          = prophy(2)
C   l           = prophy(3)
C   m           = prophy(4)
C   n           = prophy(5)
C   nprophy     (int,sc,i)     # of material constants (5)
C   invar       dp,ar(3)       invariants
C
C   output arguments
C   =====
C   incomp      (log,sc,i)     fully incomp. or compressible
C   potential   dp,sc          value of potential
C   pInvDer     dp,ar(10)     der of potential wrt i1,i2,j
C                               1 - der of potential wrt i1
C                               2 - der of potential wrt i2
C                               3 - der of potential wrt i1i1
C                               4 - der of potential wrt i1i2
C                               5 - der of potential wrt i2i2
C                               6 - der of potential wrt i1j
C                               7 - der of potential wrt i2j
C                               8 - der of potential wrt j
C                               9 - der of potential wrt jj
C
C*****
C
C --- parameters
C
#include "impcom.inc"
      DOUBLE PRECISION ZERO, ONE, TWO, THREE, FOUR, FIVE, SIX, EIGHT,
& HALF, THIRD, TOLER
      INTEGER wrinqr

```

Anhang

```

PARAMETER      (ZERO = 0.d0,
&              ONE   = 1.0d0,
&              HALF  = 0.5d0,
&              TWO   = 2.d0,
&              THREE = 3.d0,
&              FOUR  = 4.d0,
&              FIVE  = 5.d0,
&              SIX   = 6.d0,
&              EIGHT = 8.d0,
&              TOLER = 1.0d-12)
PARAMETER      (THIRD = ONE/THREE)
EXTERNAL       erhandler, wrinqr

C
C --- argument list
C
INTEGER        nprophy
DOUBLE PRECISION prophy(*), invar(*),
&              potential, pInvDer(*)
LOGICAL        incomp

C
C --- local variables
C
INTEGER        iott
DOUBLE PRECISION i1, i2, jj,
&              mu, lm, DpErr(3)
&              mu, lm, l, m, n, DpErr(5),
&              sf, i1CG, i2CG, i3CG, i1GL, i2GL, i3GL,
&              dWdIC1, dWdIC2, dWdIC3, dWdIC1IC1, dWdIC1IC2,
&              dIC1di1, dIC1di2, dIC1djj, dIC2di1, dIC2di2,
&              dIC2djj, dIC3di1, dIC3di2, dIC3djj,
&              dIC1di1jj, dIC1djjjj, dIC2di2jj, dIC2djjjj,
&              dIC3djjjj,
&              tmpfac
LOGICAL        verbose

C --- # incompressible?
incomp = .FALSE.

C --- set of properties
lm      = dble(prophy(1))
mu      = dble(prophy(2))
l       = -527
m       = -605
n       = -479
if ( nprophy .gt. 2 ) then
  l      = dble(prophy(3))
  m      = dble(prophy(4))
  n      = dble(prophy(5))
endif
verbose = .false.

```

```

if ( nprophy .gt. 5 ) then
  verbose = 1 .eq. prophy(6)
endif

C --- \bar I_1
  i1 = invar(1)
C --- \bar I_2
  i2 = invar(2)
C --- J = \bar I_3 = I_3^{1/2}
  jj = invar(3)

C --- scale factor
  sf = jj**(TWO/THREE)
C --- first invariant of left Cauchy-Green tensor
  i1CG = sf*i1
C --- second invariant of left Cauchy-Green tensor
  i2CG = sf*sf*i2
C --- third invariant of left Cauchy-Green tensor
  i3CG = jj**TWO
C --- first invariant of Green-Lagrange strain
  i1GL = (i1CG - THREE)/TWO
C --- second invariant of Green-Lagrange strain
  i2GL = (i2CG - TWO*i1CG + THREE)/FOUR
C --- third invariant of Green-Lagrange strain
  i3GL = (i3CG - i2CG + i1CG - ONE)/EIGHT
C --- value of strain energy potential
  potential = HALF*(lm+TWO*mu)*i1GL**TWO - TWO*mu*i2GL
&          + THIRD*(1 + TWO*m)*i1GL**THREE
&          - TWO*m*i1GL*i2GL + n*i3GL

C --- (partial) derivatives of potential wrt. inv. of CG tensor i.CG
  dWdIC1 = ONE/EIGHT*(TWO*m*i1CG**TWO + l*(i1CG - THREE)**TWO
& + (TWO*lm + FOUR*mu - FOUR*m)*i1CG - TWO*m*i2CG - SIX*lm
& - FOUR*mu + n)
  dWdIC2 = -ONE/EIGHT*(FOUR*mu + n + TWO*m*(i1CG - THREE))
  dWdIC3 = n/EIGHT
  dWdIC1IC1 = ONE/EIGHT*(FOUR*m*i1CG + TWO*l*(i1CG - THREE)
& + TWO*lm + FOUR*mu - FOUR*m)
  dWdIC1IC2 = -ONE/FOUR*m

C --- (partial) derivatives of CG invariants wrt. scaled invariants
  tmpfac = THREE*jj**(ONE/THREE)
  tmpfac = ONE/tmpfac

  dIC1di1 = tmpfac*THREE*jj
  dIC1di2 = ZERO
  dIC1djj = tmpfac*TWO*i1
  dIC2di1 = ZERO
C      dIC2di2 = tmpfac*THREE*jj

```

Anhang

```

    dIC2di2 = tmpfac*THREE*jj**(FIVE/THREE)
C    dIC2djj = tmpfac*TWO*i2
    dIC2djj = tmpfac*FOUR*i2*jj**(TWO/THREE)
    dIC3di1 = ZERO
    dIC3di2 = ZERO
    dIC3djj = tmpfac*SIX*jj**(FOUR/THREE)

    tmpfac = tmpfac/(THREE*jj)
    dIC1di1jj = tmpfac*SIX*jj
    dIC1djxxx = -tmpfac*TWO*i1
C    dIC2di2jj = tmpfac*SIX*jj
    dIC2di2jj = tmpfac*1.2d1*jj**(FIVE/THREE)
C    dIC2djxxx = -tmpfac*TWO*i2
    dIC2djxxx = tmpfac*FOUR*i2*jj**(TWO/THREE)
    dIC3djxxx = tmpfac*1.8d1*jj**(FOUR/THREE)

C --- derivative dW/d(\bar I_1)
    pInvDer(1) = dIC1di1*dWdIC1 + dIC2di1*dWdIC2 + dIC3di1*dWdIC3
C --- derivative dW/d(\bar I_2)
    pInvDer(2) = dIC1di2*dWdIC1 + dIC2di2*dWdIC2 + dIC3di2*dWdIC3
C --- derivative dW/dJ
    pInvDer(8) = dIC1djj*dWdIC1 + dIC2djj*dWdIC2 + dIC3djj*dWdIC3

C --- derivative dW/d(\bar I_1) d(\bar I_1)
    pInvDer(3) = dIC1di1*dIC2di1*dWdIC1IC2
    &          + dIC1di1*(dIC1di1*dWdIC1IC1 + dIC2di1*dWdIC1IC2)
C --- derivative dW/d(\bar I_1) d(\bar I_2)
    pInvDer(4) = dIC1di1*dIC2di2*dWdIC1IC2
    &          + dIC1di2*(dIC1di1*dWdIC1IC1 + dIC2di1*dWdIC1IC2)
C --- derivative dW/d(\bar I_2) d(\bar I_2)
    pInvDer(5) = dIC1di2*dIC2di2*dWdIC1IC2
    &          + dIC1di2*(dIC1di2*dWdIC1IC1 + dIC2di2*dWdIC1IC2)
C --- derivative dW/d(\bar I_1) d(J)
    pInvDer(6) = dIC1di1jj*dWdIC1 + dIC1di1*dIC2djj*dWdIC1IC2
    &          + dIC1djj*(dIC1di1*dWdIC1IC1 + dIC2di1*dWdIC1IC2)
C --- derivative dW/d(\bar I_2) d(J)
    pInvDer(7) = dIC1di2*dIC2djj*dWdIC1IC2
    &          + dIC1djj*(dIC1di2*dWdIC1IC1 + dIC2di2*dWdIC1IC2)
    &          + dIC2di2jj*dWdIC2
C --- derivative dW/d(J) d(J)
    pInvDer(9) = dIC1djxxx*dWdIC1 + dIC1djj*dIC2djj*dWdIC1IC2
    &          + dIC1djj*(dIC1djj*dWdIC1IC1 + dIC2djj*dWdIC1IC2)
    &          + dIC2djxxx*dWdIC2 + dIC3djxxx*dWdIC3

RETURN
END

```

A.10. Berechnung der Integrale für eben ausgerichtete Mikrorisse

Es sei

$$g(T_1, T_3) := \int_{-\pi/2}^{\pi/2} |T_1 \cos^2 \phi + T_3 \sin^2 \phi| \cos^2 \phi \hat{P}(\phi) d\phi. \quad (\text{A.55})$$

Wir wollen hier lediglich den Fall $T_1 T_3 < 0$ für eine homogene Verteilung zufällig orientierter Risse betrachten, d.h. $\hat{P}(\phi) = 1/\pi$. Dann gilt

$$g(T_1, T_3) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} |T_1 \cos^2 \phi + T_3 \sin^2 \phi| \cos^2 \phi d\phi \quad (\text{A.56})$$

$$= \frac{2}{\pi} \text{sign}(T_1) \left\{ \int_0^{\arctan(|T_1|/|T_3|)} (T_1 \cos^2 \phi + T_3 \sin^2 \phi) \cos^2 \phi d\phi \right. \quad (\text{A.57})$$

$$\left. - \int_{\arctan(|T_1|/|T_3|)}^{\pi/2} (T_1 \cos^2 \phi + T_3 \sin^2 \phi) \cos^2 \phi d\phi \right\} \quad (\text{A.58})$$

$$= \frac{1}{8\pi} \text{sign}(T_1) \left\{ (3T_1 + T_3) \left[4 \arctan \sqrt{\frac{|T_1|}{|T_3|}} - \pi \right] \right. \quad (\text{A.59})$$

$$\left. + 8T_1 \sin \left(2 \arctan \sqrt{\frac{|T_1|}{|T_3|}} \right) + (T_1 - T_3) \sin \left(4 \arctan \sqrt{\frac{|T_1|}{|T_3|}} \right) \right\} \quad (\text{A.60})$$

$$= \frac{1}{2\pi} \text{sign}(T_1) \left\{ (3T_1 + T_3) \left[\frac{\sqrt{|T_1^3 T_3|}}{(|T_1| + |T_3|)^2} + \arctan \sqrt{\frac{|T_1|}{|T_3|}} - \pi/4 \right] \right. \quad (\text{A.61})$$

$$\left. + (5T_1 - T_3) \frac{\sqrt{|T_1 T_3^3|}}{(|T_1| + |T_3|)^2} \right\} \quad (\text{A.62})$$

$$= \frac{\text{sign}(T_1)}{\pi} \left\{ \frac{1}{2} (3T_1 + T_3) \left[\frac{\sqrt{|T_1 T_3|}}{|T_1| + |T_3|} + \pi/4 - \arctan \sqrt{\frac{|T_3|}{|T_1|}} \right] \right. \quad (\text{A.63})$$

$$\left. + (T_1 - T_3) \frac{\sqrt{|T_1 T_3^3|}}{(|T_1| + |T_3|)^2} \right\}, \quad (\text{A.64})$$

wobei

$$\sin(2x) = \frac{2 \tan x}{1 + \tan^2 x}, \quad (\text{A.65})$$

$$\tan(2x) = \frac{2 \tan x}{1 - \tan^2 x}, \quad (\text{A.66})$$

$$\arctan(x) = \text{sign}(x) \frac{\pi}{2} - \arctan\left(\frac{1}{x}\right) \quad (\text{A.67})$$

benutzt wurden.

A.11. Spannungs-Dehnungskurven senkrechter und paralleler Einzelrisse

Auf den folgenden Seiten sind die Ergebnisse der Simulationen an einzelnen parallel und senkrecht ausgerichteten Rissen in einer nichtlinearen Matrix für beide Arten von Rissen dargestellt.

Rissnormale senkrecht zur Zugrichtung - zwei Seiten fixiert

Tabelle A.4.: Cauchy'sche Normalspannungskomponenten σ_{11} und σ_{33} bei senkrechter Rissorientierung und fixierten Würfelseiten für einen Hertzischen Kontakt (links) und einen Kissing Bond (rechts).

$u_{1,1}$ [‰]	σ_{11} [MPa]	σ_{22} [MPa]	σ'_{11} [GPa]	σ'_{22} [GPa]	$u_{1,1}$ [‰]	σ_{11} [MPa]	σ_{22} [MPa]	σ'_{11} [GPa]	σ'_{22} [GPa]
-0,40	-102,1	-24,0			-0,40	-113,4	-49,3		
-0,32	-81,6	-19,2	255,5	60,1	-0,32	-90,7	-39,4	283,9	123,4
-0,24	-61,2	-14,4	255,4	60,1	-0,24	-68,0	-29,6	283,7	123,3
-0,16	-40,8	-9,6	255,2	60,0	-0,16	-45,3	-19,7	283,5	123,2
-0,08	-20,4	-4,8	255,0	60,0	-0,08	-22,6	-9,8	283,3	123,1
0,00	0,0	0,0	254,9	59,9	0,00	0,0	0,0	283,1	123,0
0,08	20,4	4,8	254,7	59,9	0,08	21,8	7,9	272,3	98,5
0,16	40,7	9,6	254,5	59,8	0,16	43,5	15,8	272,1	98,4
0,24	61,1	14,4	254,4	59,8	0,24	65,3	23,6	271,9	98,3
0,32	81,4	19,1	254,2	59,7	0,32	87,0	31,5	271,7	98,3
0,40	101,8	23,9	254,0	59,7	0,40	108,8	39,3	271,5	98,2

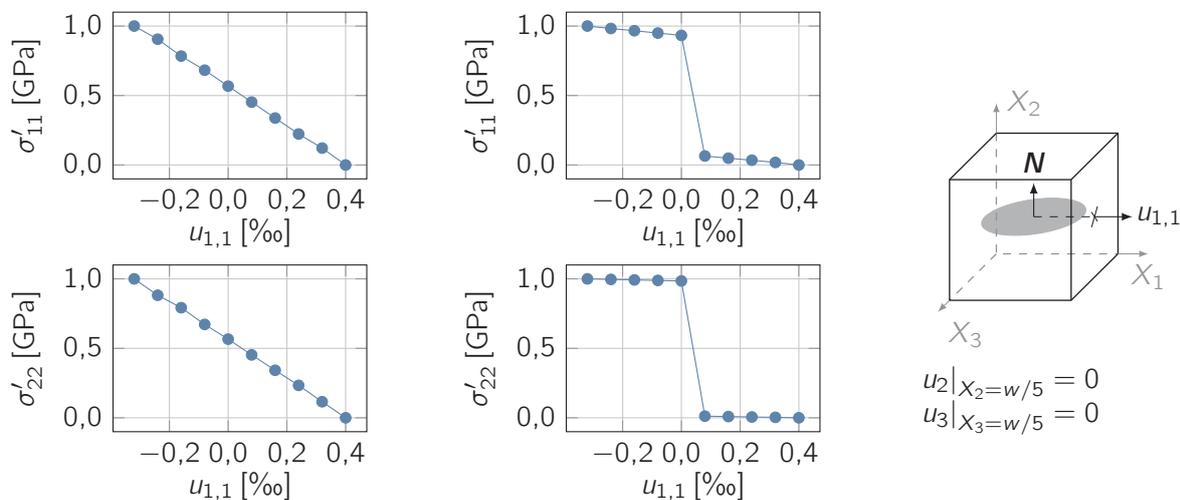


Abbildung A.1.: Normierte Ableitungen der Normalspannungskomponenten aus Tab. A.4 für den Hertzischen Kontakt (links) und den Kissing Bond (rechts).

Rissnormale senkrecht zur Zugrichtung - zwei Seiten frei

Tabelle A.5.: Verschiebungsgradienten $u_{2,2}$ und Cauchy'sche Normalspannungskomponenten σ_{11} bei senkrechter Rissorientierung und freien Würfelseiten für einen Hertzschen Kontakt (links) und einen Kissing Bond (rechts).

$u_{1,1}$ [‰]	$u_{2,2}$ [‰]	σ_{11} [MPa]	$u'_{2,2}$	σ'_{11} [GPa]	$u_{1,1}$ [‰]	$u_{2,2}$ [‰]	σ_{11} [MPa]	$u'_{2,2}$	σ'_{11} [GPa]
-0,40	0,12	-83,3			-0,40	0,12	-83,5		
-0,32	0,10	-66,6	-0,302	208,4	-0,32	0,10	-66,8	-0,304	208,9
-0,24	0,07	-49,9	-0,301	208,3	-0,24	0,07	-50,1	-0,303	208,8
-0,16	0,05	-33,3	-0,301	208,2	-0,16	0,05	-33,4	-0,303	208,7
-0,08	0,02	-16,6	-0,301	208,1	-0,08	0,02	-16,7	-0,303	208,6
0,00	0,00	0,0	-0,301	208,0	0,00	0,00	0,0	-0,303	208,5
0,08	-0,02	16,6	-0,301	207,9	0,08	-0,02	16,7	-0,303	208,4
0,16	-0,05	33,3	-0,301	207,8	0,16	-0,05	33,3	-0,303	208,3
0,24	-0,07	49,9	-0,300	207,8	0,24	-0,07	50,0	-0,303	208,3
0,32	-0,10	66,5	-0,300	207,7	0,32	-0,10	66,7	-0,302	208,2
0,40	-0,12	83,1	-0,300	207,6	0,40	-0,12	83,3	-0,302	208,1

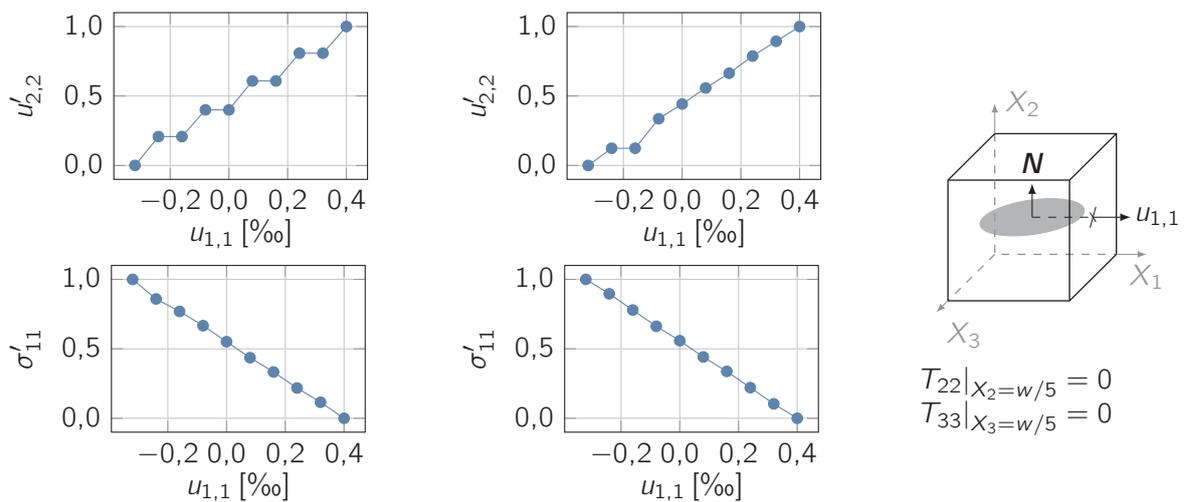


Abbildung A.2.: Normierte Ableitungen des Verschiebungsgradienten und der Normalspannungskomponente aus Tab.A.5 für den Hertzschen Kontakt (links) und den Kissing Bond (rechts).

Risnormale senkrecht zur Zugrichtung - eine Seite frei, eine fixiert

Tabelle A.6.: Verschiebungsgradienten $u_{2,2}$ und Cauchy'sche Normalspannungskomponente σ_{11} , σ_{33} bei senkrechter Rissorientierung und einer freien sowie einer festen Würfelseite für einen Hertzchen Kontakt (links) und einen Kissing Bond (rechts).

$u_{1,1}$ [‰]	$u_{2,2}$ [‰]	σ_{11} [MPa]	σ_{33} [MPa]	σ'_{11} [GPa]	$u_{1,1}$ [‰]	$u_{2,2}$ [‰]	σ_{11} [MPa]	σ_{33} [MPa]	σ'_{11} [GPa]
-0,40	0,17	-91,7	-27,8		-0,40	0,17	-91,9	-27,9	
-0,32	0,14	-73,3	-22,2	229,5	-0,32	0,14	-73,5	-22,3	230,1
-0,24	0,10	-55,0	-16,6	229,3	-0,24	0,10	-55,1	-16,7	230,0
-0,16	0,07	-36,6	-11,1	229,2	-0,16	0,07	-36,7	-11,1	229,8
-0,08	0,03	-18,3	-5,5	229,1	-0,08	0,03	-18,4	-5,6	229,7
0,00	0,00	0,0	0,0	229,0	0,00	0,00	0,0	0,0	229,6
0,08	-0,03	18,3	5,5	228,9	0,08	-0,03	18,4	5,6	229,5
0,16	-0,07	36,6	11,1	228,7	0,16	-0,07	36,7	11,1	229,4
0,24	-0,10	54,9	16,6	228,6	0,24	-0,10	55,0	16,7	229,2
0,32	-0,14	73,2	22,1	228,5	0,32	-0,14	73,4	22,2	229,1
0,40	-0,17	91,5	27,7	228,4	0,40	-0,17	91,7	27,8	229,0

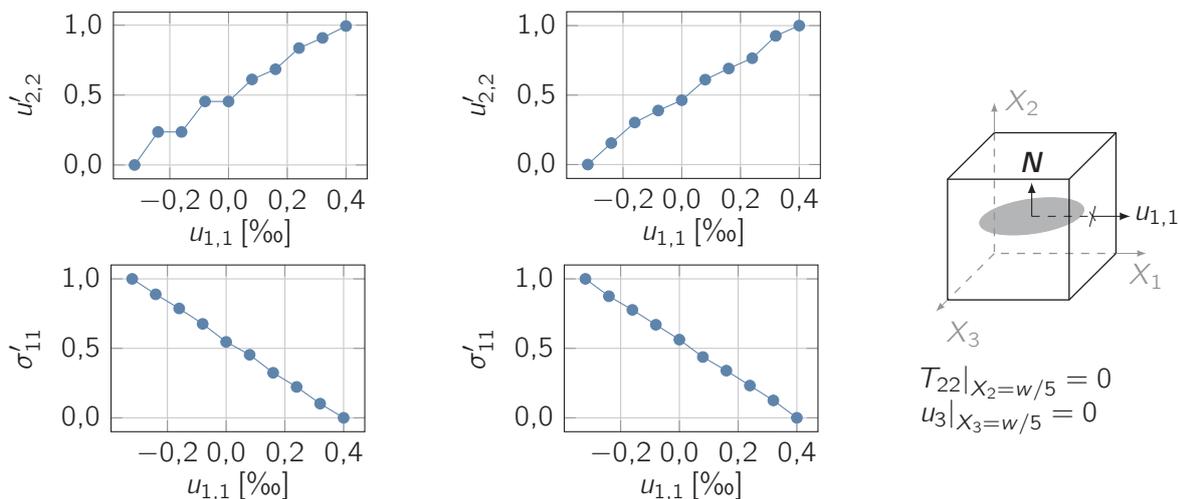


Abbildung A.3.: Normierte Ableitung des Verschiebungsgradienten und einer Normalspannungskomponente aus Tab. A.6 für den Hertzchen Kontakt (links) und den Kissing Bond (rechts).

Rissnormale parallel zur Zugrichtung - zwei Seiten fixiert

Tabelle A.7.: Cauchy'sche Normalspannungskomponenten σ_{11} und σ_{33} bei paralleler Rissorientierung und fixierten Würfelseiten für einen Hertzischen Kontakt (links) und einen Kissing Bond (rechts).

$u_{1,1}$ [‰]	σ_{11} [MPa]	σ_{22} [MPa]	σ'_{11} [GPa]	σ'_{22} [GPa]	$u_{1,1}$ [‰]	σ_{11} [MPa]	σ_{22} [MPa]	σ'_{11} [GPa]	σ'_{22} [GPa]
-0,40	-55,8	-24,1			-0,40	-113,4	-49,3		
-0,32	-44,5	-19,2	141,5	61,1	-0,32	-90,7	-39,4	283,9	123,4
-0,24	-33,3	-14,4	139,3	60,1	-0,24	-68,0	-29,6	283,7	123,3
-0,16	-22,2	-9,6	138,9	60,0	-0,16	-45,3	-19,7	283,5	123,2
-0,08	-11,1	-4,8	138,9	59,9	-0,08	-22,6	-9,8	283,3	123,1
0,00	0,0	0,0	138,8	59,9	0,00	0,0	0,0	283,1	123,0
0,08	11,1	4,8	138,7	59,8	0,08	18,1	7,9	226,6	98,5
0,16	22,2	9,6	138,6	59,8	0,16	36,2	15,8	226,4	98,4
0,24	33,3	14,4	138,5	59,8	0,24	54,3	23,6	226,3	98,3
0,32	44,3	19,1	138,4	59,7	0,32	72,4	31,5	226,1	98,3
0,40	55,4	23,9	138,3	59,7	0,40	90,5	39,3	226,0	98,2

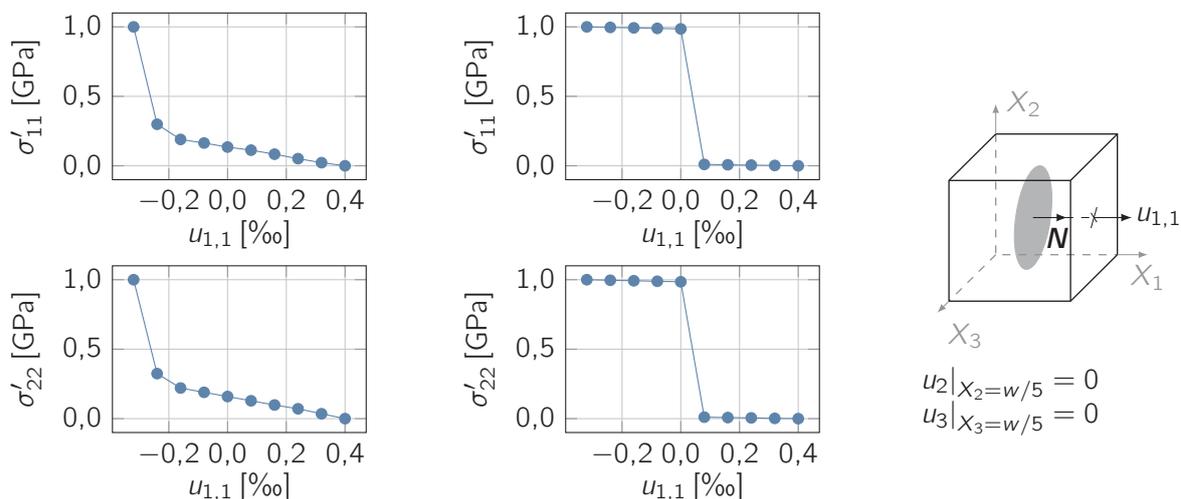


Abbildung A.4.: Normierte Ableitungen der normierten Normalspannungskomponenten aus Tab. A.7 für den Hertzischen Kontakt (links) und den Kissing Bond (rechts).

Risnormale parallel zur Zugrichtung - zwei Seiten frei

Tabelle A.8.: Verschiebungsgradienten $u_{2,2}$ und Cauchy'sche Normalspannungskomponente σ_{11} bei paralleler Rissorientierung und freien Würfelseiten für einen Hertzschen Kontakt (links) und einen Kissing Bond (rechts).

$u_{1,1}$ [‰]	$u_{2,2}$ [‰]	σ_{11} [MPa]	$u'_{2,2}$	σ'_{11} [GPa]	$u_{1,1}$ [‰]	$u_{2,2}$ [‰]	σ_{11} [MPa]	$u'_{2,2}$	σ'_{11} [GPa]
-0,40	0,07	-45,6			-0,40	0,12	-83,5		
-0,32	0,05	-36,5	-0,166	114,9	-0,32	0,10	-66,8	-0,304	208,9
-0,24	0,04	-27,3	-0,164	114,0	-0,24	0,07	-50,1	-0,303	208,8
-0,16	0,03	-18,2	-0,164	113,9	-0,16	0,05	-33,4	-0,303	208,7
-0,08	0,01	-9,1	-0,164	113,9	-0,08	0,02	-16,7	-0,303	208,6
0,00	0,00	0,0	-0,164	113,8	0,00	0,00	0,0	-0,303	208,5
0,08	-0,01	9,1	-0,164	113,8	0,08	-0,02	14,0	-0,252	175,5
0,16	-0,03	18,2	-0,164	113,8	0,16	-0,04	28,1	-0,252	175,4
0,24	-0,04	27,3	-0,164	113,7	0,24	-0,06	42,1	-0,252	175,3
0,32	-0,05	36,4	-0,164	113,7	0,32	-0,08	56,1	-0,252	175,3
0,40	-0,07	45,5	-0,164	113,6	0,40	-0,10	70,1	-0,252	175,2

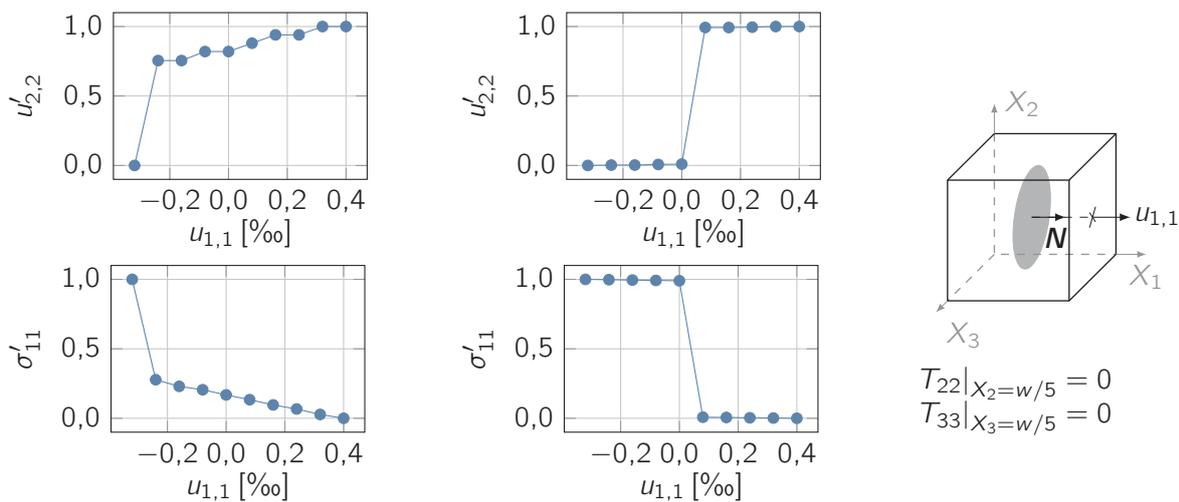


Abbildung A.5.: Normierte Ableitungen des Verschiebungsgradienten und der Normalspannungskomponente aus Tab.A.8 für den Hertzschen Kontakt (links) und den Kissing Bond (rechts).

Rissnormale parallel zur Zugrichtung - eine Seite frei, eine fixiert

Tabelle A.9.: Verschiebungsgradienten $u_{2,2}$ und Cauchy'sche Normalspannungskomponenten σ_{11} , σ_{33} bei paralleler Rissorientierung und einer freien sowie einer festen Würfelseite für einen Hertzchen Kontakt (links) und einen Kissing Bond (rechts).

$u_{1,1}$ [‰]	$u_{2,2}$ [‰]	σ_{11} [MPa]	σ_{33} [MPa]	σ'_{11} [GPa]	$u_{1,1}$ [‰]	$u_{2,2}$ [‰]	σ_{11} [MPa]	σ_{33} [MPa]	σ'_{11} [GPa]
-0,40	0,09	-49,0	-14,7		-0,40	0,17	-91,9	-27,9	
-0,32	0,07	-39,1	-11,8	123,6	-0,32	0,14	-73,5	-22,3	230,1
-0,24	0,06	-29,3	-8,8	122,3	-0,24	0,10	-55,1	-16,7	230,0
-0,16	0,04	-19,5	-5,9	122,3	-0,16	0,07	-36,7	-11,1	229,8
-0,08	0,02	-9,8	-2,9	122,2	-0,08	0,03	-18,4	-5,6	229,7
0,00	0,00	0,0	0,0	122,1	0,00	0,00	0,0	0,0	229,6
0,08	-0,02	9,8	2,9	122,1	0,08	-0,03	15,2	4,6	190,5
0,16	-0,04	19,5	5,9	122,0	0,16	-0,06	30,5	9,2	190,4
0,24	-0,05	29,3	8,8	122,0	0,24	-0,09	45,7	13,8	190,4
0,32	-0,07	39,0	11,7	121,9	0,32	-0,11	60,9	18,5	190,3
0,40	-0,09	48,8	14,7	121,8	0,40	-0,14	76,1	23,1	190,2

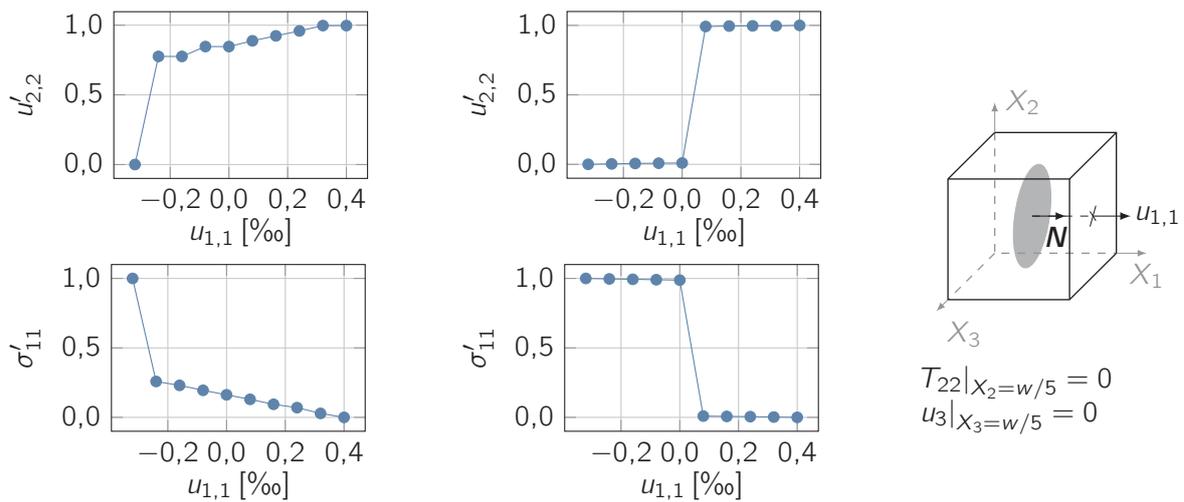


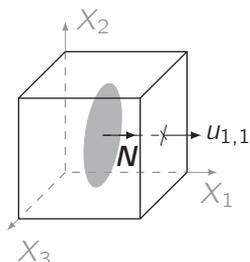
Abbildung A.6.: Normierte Ableitungen des Verschiebungsgradienten und der Normalspannungskomponenten aus Tab. A.9 für den Hertzchen Kontakt (links) und den Kissing Bond (rechts).

A.12. Volumen-Dehnungskurven senkrechter und paralleler Einzelrisse

Auf den folgenden Seiten sind die Änderungen der Rissvolumina einzelner parallel und senkrecht ausgerichteter Risse in einer nichtlinearen Matrix dargestellt. Die Darstellung beschränkt sich im Falle eines senkrechten Risses auf Kissing Bonds.

Änderung des Rissvolumens mit Spannung parallel zur Rissnormalen

Kissing Bond



- Knotenkoordinaten (Materialsystem) und Verschiebungen einzelner Lastschritte in ANSYS[®] ausgelesen
- Import in Mathematica, Bildung konvexer Hülle mittels ConvexHullMesh
- Berechnung des Volumens der konvexen Hülle mittels RegionMeasure
- bei Hertzschem Kontakt muss das Maß der konvexen Gesamthülle um das Volumen der konvexen Hülle der *Kuppelknoten* reduziert werden, da das Rissvolumen konkav ist

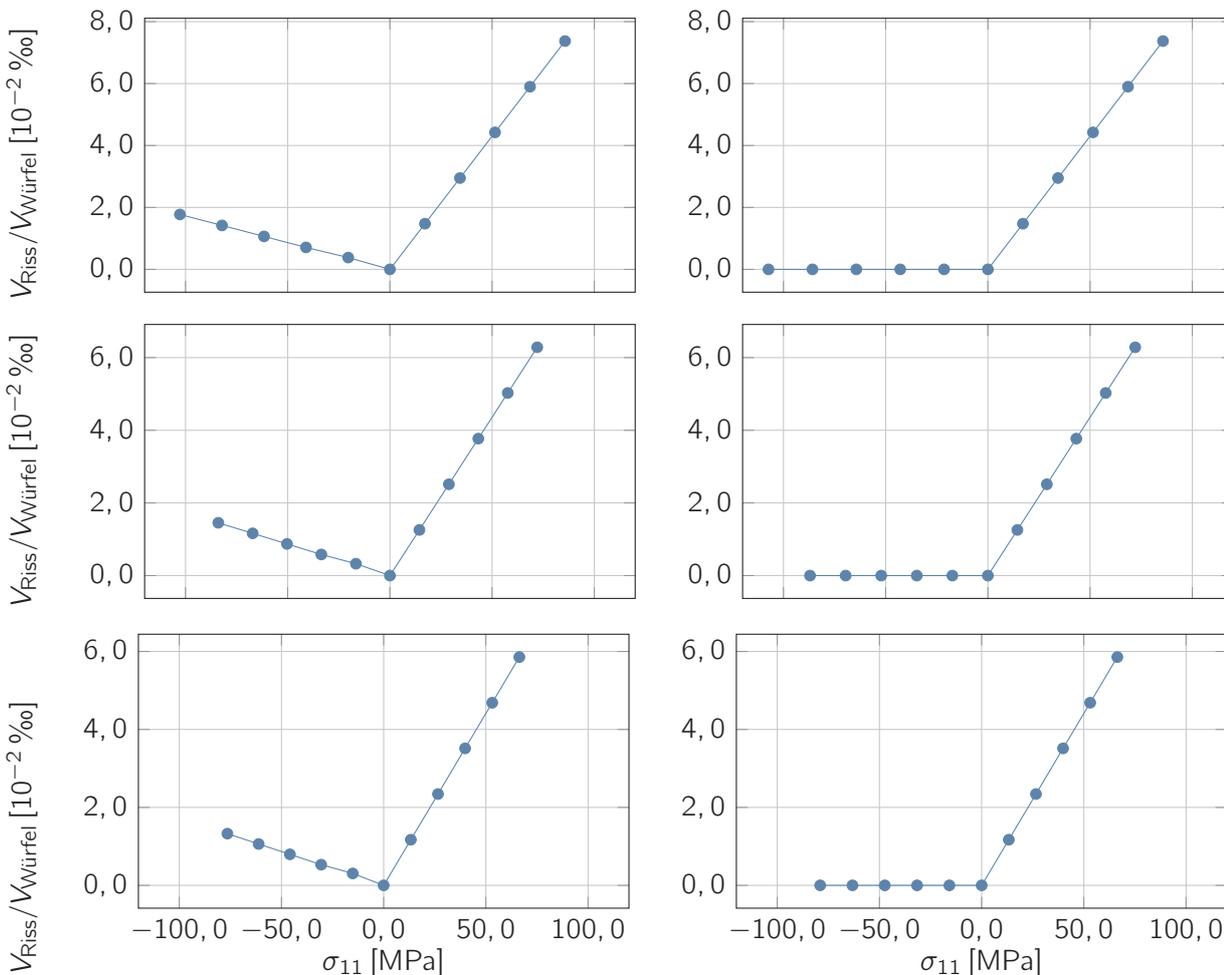


Abbildung A.7.: Änderung des Rissvolumens eines Kissing Bond mit Augmented-Lagrange- (links) und Lagrange-Formulierung für zwei feste Seiten (oben), eine feste Seite (Mitte) und zwei freie Seiten.

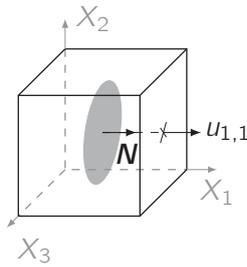


Tabelle A.10.: Änderung des Rissvolumens bei Verwendung eines Kissing Bonds, parallel zur Verschiebungsrichtung.

	zwei Seiten fest				eine Seite fest				zwei Seiten frei			
	LS	σ_{11} [GPa]	V_{Riss} [a.u.]	$V_{\text{Riss}}/V_{\text{Würfel}}$	LS	σ_{11} [GPa]	V_{Riss} [a.u.]	$V_{\text{Riss}}/V_{\text{Würfel}}$	LS	σ_{11} [GPa]	V_{Riss} [a.u.]	$V_{\text{Riss}}/V_{\text{Würfel}}$
	1	-0,1027	0,00222	$1,77 \cdot 10^{-5}$	1	-0,0840	0,00182	$1,45 \cdot 10^{-5}$	1	-0,0765	0,00166	$1,33 \cdot 10^{-5}$
	2	-0,0822	0,00177	$1,42 \cdot 10^{-5}$	2	-0,0671	0,00145	$1,16 \cdot 10^{-5}$	2	-0,0612	0,00133	$1,06 \cdot 10^{-5}$
	3	-0,0616	0,00133	$1,06 \cdot 10^{-5}$	3	-0,0503	0,00109	$8,72 \cdot 10^{-6}$	3	-0,0459	0,00099	$7,96 \cdot 10^{-6}$
	4	-0,0410	0,00089	$7,09 \cdot 10^{-6}$	4	-0,0336	0,00073	$5,81 \cdot 10^{-6}$	4	-0,0306	0,00066	$5,30 \cdot 10^{-6}$
	5	-0,0204	0,00048	$3,81 \cdot 10^{-6}$	5	-0,0166	0,00041	$3,27 \cdot 10^{-6}$	5	-0,0151	0,00038	$3,05 \cdot 10^{-6}$
	6	0,0000	0,00000	0	6	0,0000	0,00000	0	6	0,0000	0,00000	0
	7	0,0172	0,00184	$1,47 \cdot 10^{-5}$	7	0,0144	0,00157	$1,26 \cdot 10^{-5}$	7	0,0133	0,00146	$1,17 \cdot 10^{-5}$
	8	0,0343	0,00369	$2,95 \cdot 10^{-5}$	8	0,0288	0,00314	$2,51 \cdot 10^{-5}$	8	0,0266	0,00293	$2,34 \cdot 10^{-5}$
	9	0,0514	0,00553	$4,42 \cdot 10^{-5}$	9	0,0433	0,00471	$3,77 \cdot 10^{-5}$	9	0,0398	0,00439	$3,51 \cdot 10^{-5}$
	10	0,0686	0,00737	$5,90 \cdot 10^{-5}$	10	0,0577	0,00628	$5,03 \cdot 10^{-5}$	10	0,0531	0,00586	$4,68 \cdot 10^{-5}$
	11	0,0857	0,00922	$7,37 \cdot 10^{-5}$	11	0,0721	0,00785	$6,28 \cdot 10^{-5}$	11	0,0664	0,00732	$5,86 \cdot 10^{-5}$

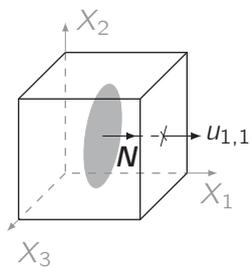
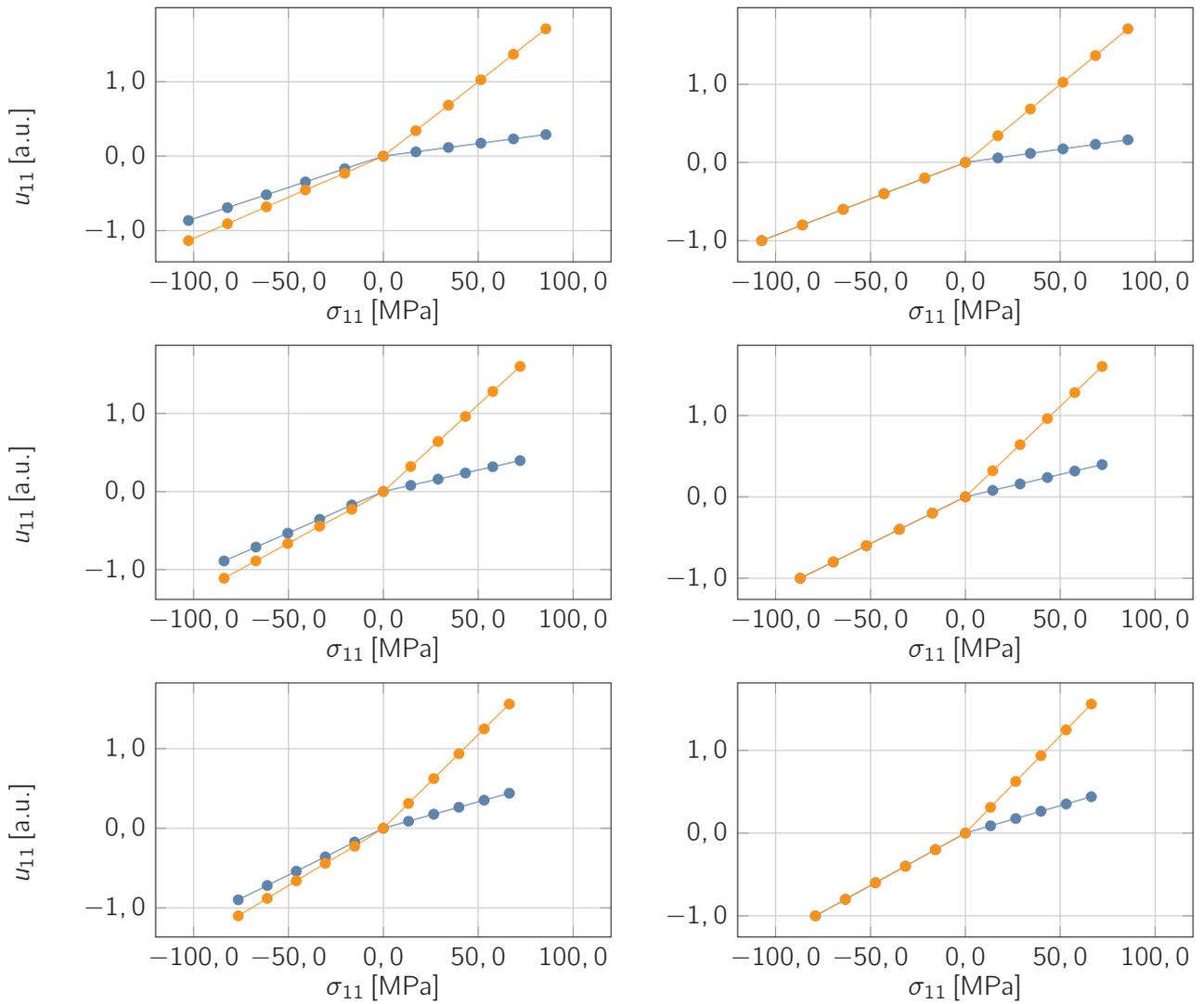
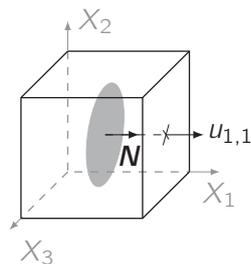


Abbildung A.8.: Verhalten eines kongruenten Knotenpaares für einen Kissing Bond mit Augmented-Lagrange- (links) und Lagrange-Formulierung für zwei feste Seiten (oben), eine feste Seite (Mitte) und zwei freie Seiten.

Herzcher Kontakt



- Knotenkoordinaten (Materialsystem) und Verschiebungen einzelner Lastschritte in ANSYS[®] ausgelesen
- Import in Mathematica, Bildung konvexer Hülle mittels `ConvexHullMesh`
- Berechnung des Volumens der konvexen Hülle mittels `RegionMeasure`
- Maß der konvexen Gesamthülle wurde um das Volumen der konvexen Hülle der *Kuppelknoten* reduziert werden, da das Rissvolumen konkav ist

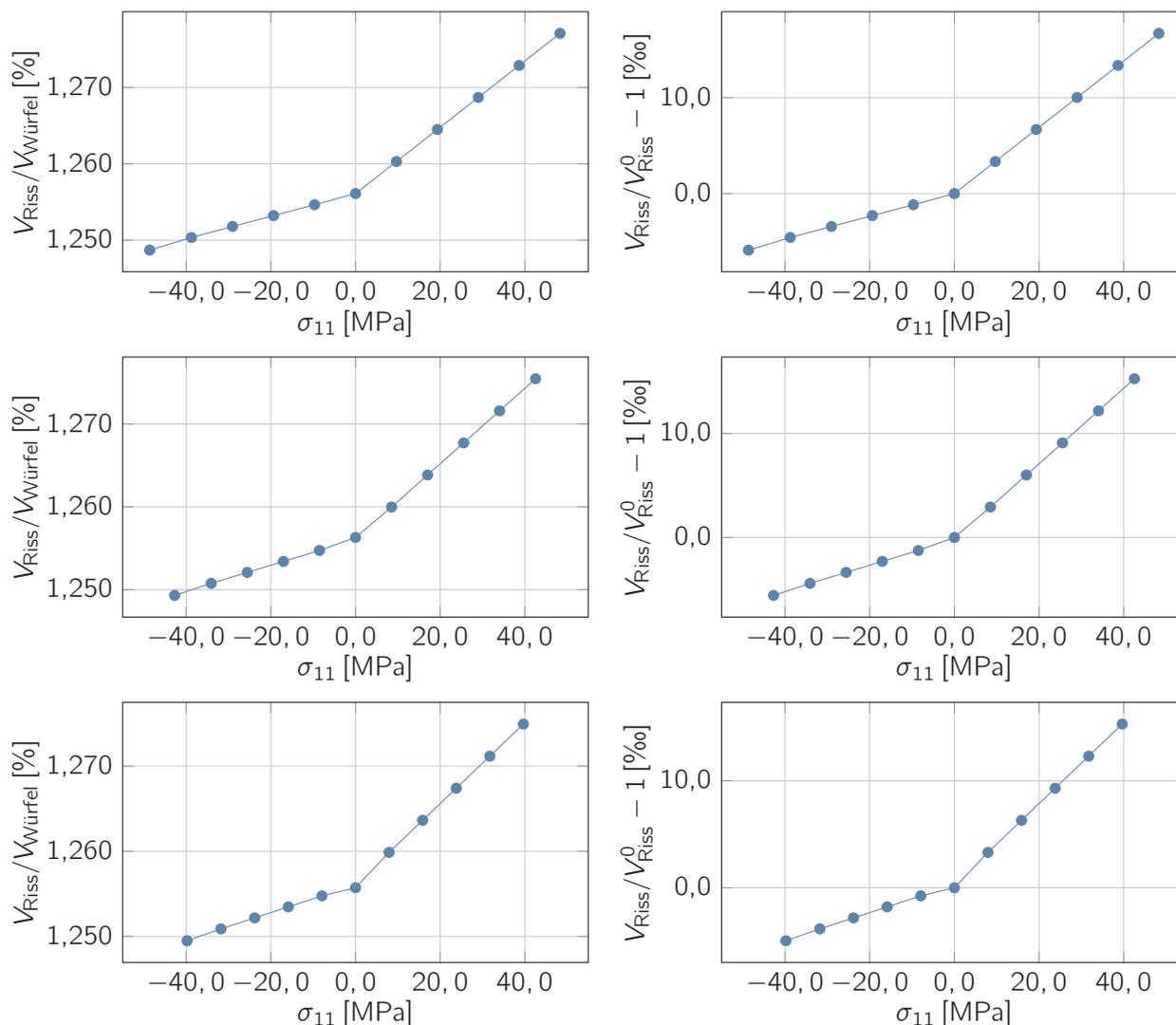


Abbildung A.9.: Rissvolumen eines Hertzischen Kontakts bezogen auf das Gesamtvolumen des Würfels (links) und die Änderung desselben bezogen auf das Rissvolumen im entspannten Zustand. Dargestellt sind die Ergebnisse für zwei feste Seiten (oben), eine feste Seite (Mitte) und zwei freie Seiten.

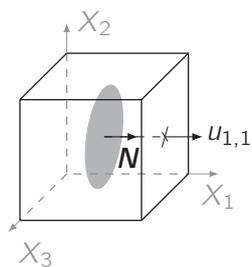
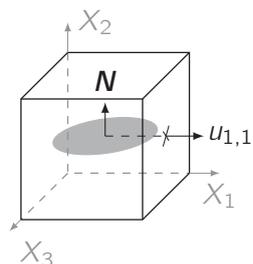


Tabelle A.11.: Änderung des Rissvolumens bei Verwendung eines Hertzchen Kontakts, parallel zur Verschiebungsrichtung.

	LS	σ_{11} [MPa]	V_{Riss} [a.u.]	$V_{Riss}/V_{W\u00fcrfel}$ [%]	$V_{Riss}/V_{Riss}^0 - 1$ [‰]
zwei feste Seiten	1	-48,6	1,56086	1,249	-5,900
	2	-38,8	1,56293	1,250	-4,583
	3	-29,1	1,56474	1,252	-3,432
	4	-19,4	1,56651	1,253	-2,300
	5	-9,7	1,56829	1,255	-1,166
	6	0,0	1,57013	1,256	0,000
	7	9,7	1,57537	1,260	3,342
	8	19,3	1,58062	1,264	6,685
	9	29,0	1,58587	1,269	10,027
	10	38,7	1,59112	1,273	13,370
	11	48,3	1,59637	1,277	16,714
eine feste Seite	1	-42,7	1,56162	1,249	-5,573
	2	-34,1	1,56345	1,251	-4,411
	3	-25,6	1,56510	1,252	-3,356
	4	-17,0	1,56676	1,253	-2,302
	5	-8,5	1,56842	1,255	-1,247
	6	0,0	1,57038	1,256	0,000
	7	8,5	1,57497	1,260	2,925
	8	17,0	1,57981	1,264	6,010
	9	25,5	1,58466	1,268	9,094
	10	34,0	1,58950	1,272	12,180
	11	42,5	1,59435	1,275	15,265
zwei freie Seiten	1	-39,8	1,56186	1,249	-4,957
	2	-31,8	1,56360	1,251	-3,848
	3	-23,8	1,56522	1,252	-2,818
	4	-15,9	1,56684	1,253	-1,787
	5	-7,9	1,56846	1,255	-0,757
	6	0,0	1,56964	1,256	0,000
	7	7,9	1,57484	1,260	3,307
	8	15,9	1,57955	1,264	6,308
	9	23,8	1,58426	1,267	9,309
	10	31,7	1,58897	1,271	12,311
	11	39,7	1,59368	1,275	15,313

Änderung des Rissvolumens mit Spannung senkrecht zur Rissnormalen



- nur Kissing Bonds betrachtet
- Randbedingungen: zwei fest, zwei frei, fest und frei
- Volumenbestimmung über Maß der konvexen Hülle der Rissknoten

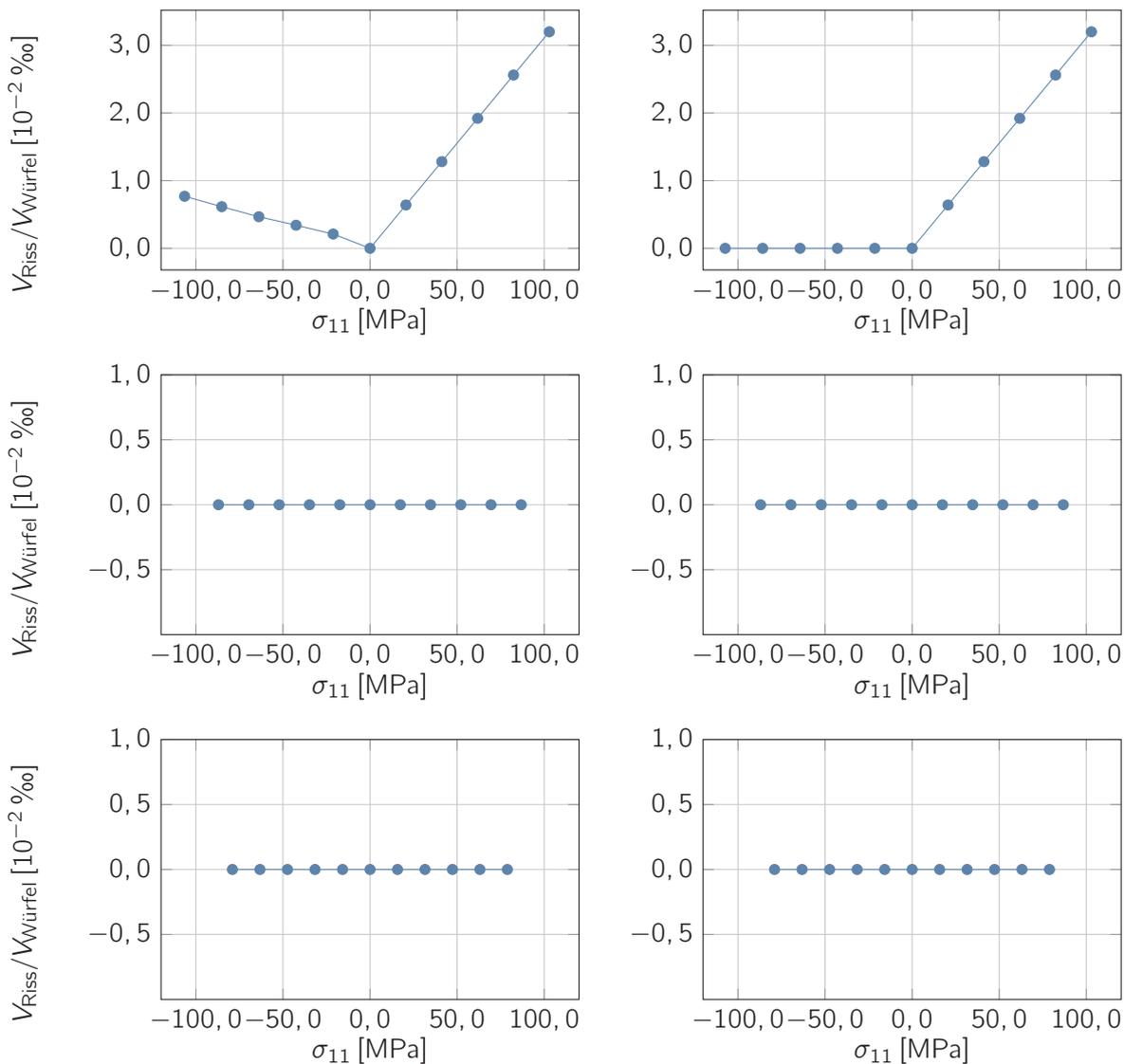


Abbildung A.10.: Änderung des Rissvolumens eines Kissing Bond mit Augmented-Lagrange- (links) und Lagrange-Formulierung für zwei feste Seiten (oben) eine feste Seite (Mitte) und zwei freie Seiten. Die Rissnormale steht dabei senkrecht zur Zug- und Druckrichtung.

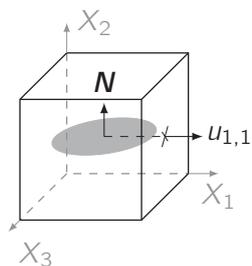


Tabelle A.12.: Änderung des Rissvolumens bei Verwendung eines Kissing Bonds, senkrecht zur Verschiebungsrichtung.

	zwei Seiten fest				eine Seite fest				zwei Seiten frei			
	LS	σ_{11} [GPa]	V_{Riss} [a.u.]	$V_{Riss}/V_{W\u00fcrfel}$	LS	σ_{11} [GPa]	V_{Riss} [a.u.]	$V_{Riss}/V_{W\u00fcrfel}$	LS	σ_{11} [GPa]	V_{Riss} [a.u.]	$V_{Riss}/V_{W\u00fcrfel}$
	1	-0,1065	0,00096	$7,69 \cdot 10^{-6}$	1	-0,0870	0,00000	0	1	-0,0790	0,00000	0
	2	-0,0851	0,00077	$6,15 \cdot 10^{-6}$	2	-0,0696	0,00000	0	2	-0,0632	0,00000	0
	3	-0,0638	0,00058	$4,67 \cdot 10^{-6}$	3	-0,0522	0,00000	0	3	-0,0474	0,00000	0
	4	-0,0425	0,00043	$3,41 \cdot 10^{-6}$	4	-0,0348	0,00000	0	4	-0,0316	0,00000	0
	5	-0,0212	0,00026	$2,11 \cdot 10^{-6}$	5	-0,0174	0,00000	0	5	-0,0158	0,00000	0
	6	0,0000	0,00000	0	6	0,0000	0,00000	0	6	0,0000	0,00000	0
	7	0,0206	0,00080	$6,41 \cdot 10^{-6}$	7	0,0174	0,00000	0	7	0,0158	0,00000	0
	8	0,0412	0,00160	$1,28 \cdot 10^{-5}$	8	0,0347	0,00000	0	8	0,0316	0,00000	0
	9	0,0618	0,00240	$1,92 \cdot 10^{-5}$	9	0,0521	0,00000	0	9	0,0473	0,00000	0
	10	0,0824	0,00320	$2,56 \cdot 10^{-5}$	10	0,0694	0,00000	0	10	0,0631	0,00000	0
	11	0,1029	0,00400	$3,20 \cdot 10^{-5}$	11	0,0868	0,00000	0	11	0,0788	0,00000	0

Literaturverzeichnis

- [Ach73] J. Achenbach. *Wave propagation in elastic solids*, volume 16. North-Holland Amsterdam, 1973.
- [ARJQ11] N. Apetre, M. Ruzzene, L. Jacobs, and J. Qu. Measurement of the Rayleigh wave polarization using 1D Laser vibrometry. *NDT & E International*, 44(3):247 – 253, 2011.
- [AS84] D. Allen and C. Sayers. The measurement of residual stress in textured steel using an ultrasonic velocity combinations technique. *Ultrasonics*, 22(4):179 – 188, 1984.
- [AST13] ASTM. Standard Test Method for Determining Residual Stresses by the Hole-Drilling Strain-Gage Method. Technical Report ASTM E837-13a, ASTM International, West Conshohocken, PA, 2013.
- [Aul90] B. Auld. *Acoustic fields and waves in solids - Vol. II*, volume II. RE Krieger, 2nd edition, 1990.
- [BF65] M. A. Breazeale and J. Ford. Ultrasonic Studies of the Nonlinear Behavior of Solids. *Journal of Applied Physics*, 36(11):3486–3490, 1965.
- [BKK⁺11] M. Barth, M. Kuettner, B. Koehler, J. Bamberg, and H.-U. Baron. Universal Ultrasonic Goniometer for Rayleigh- and Surface Skimming Longitudinal Wave Dispersion Measurements. In D. O. Thompson and D. E. Chimenti, editors, *Review of Progress in Quantitative Nondestructive Evaluation*, volume 1430, pages 1873–1880. AIP, 2011.
- [Blu89] J. A. Blume. Compatibility conditions for a left Cauchy-Green strain field. *Journal of Elasticity*, 21(3):271–308, 1989.
- [BO76] B. Budiansky and R. J. O'Connell. Elastic moduli of a cracked solid. *International Journal of Solids and Structures*, 12(2):81–97, 1976.
- [Boy99] B. Boyce. Steps to modern thermoelastic stress analysis. In *ATEM Conference Japan, Stess Photonics Inc, Madison, USA*, 1999.
- [BPZ⁺83] M. Breazeale, J. Philip, A. Zarembowitch, M. Fischer, and Y. Gesland. Acoustical measurement of solid state non-linearity: Application to CsCdF₃ and KZnF₃. *Journal of Sound and Vibration*, 88(1):133 – 140, 1983.
- [Bre66] M. A. Breazeale. Corrected Values for the Ultrasonic Discontinuity Distance in Nonlinear Solids. *Journal of Applied Physics*, 37(8):3332–3332, 1966.
- [Bru65] K. Brugger. Generalized Grüneisen Parameters in the Anisotropic Debye Model. *Phys. Rev.*, 137:A1826–A1827, Mar 1965.
- [BT63] M. A. Breazeale and D. O. Thompson. Finite-Amplitude Ultrasonic Waves in Aluminum. *Applied Physics Letters*, 3(5):77–78, 1963.

- [Can04] J. H. Cantrell. Substructural organization, dislocation plasticity and harmonic generation in cyclically stressed wavy slip metals. *Proceedings Of The Royal Society Of London, Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 460(2043):757–780, 2004.
- [Can06] J. H. Cantrell. Dependence of microelastic-plastic nonlinearity of martensitic stainless steel on fatigue damage accumulation. *Journal of Applied Physics*, 100(6):063508, 2006.
- [Can09] J. H. Cantrell. Ultrasonic harmonic generation from fatigue-induced dislocation substructures in planar slip metals and assessment of remaining fatigue life. *Journal of Applied Physics*, 106(9):093516, 2009.
- [CC11] W. D. Cash and W. Cai. Dislocation contribution to acoustic nonlinearity: The effect of orientation-dependent line energy. *Journal of Applied Physics*, 109(1):014915, 2011.
- [CC12] W. D. Cash and W. Cai. Contribution of dislocation dipole structures to the acoustic nonlinearity. *Journal of Applied Physics*, 111(7):074906, 2012.
- [CH64] J. D. Childress and C. G. Hambrick. Interactions Between Elastic Waves in an Isotropic Solid. *Phys. Rev.*, 136:A411–A418, Oct 1964.
- [CPCD17] J. Cheng, J. N. Potter, A. J. Croxford, and B. W. Drinkwater. Monitoring fatigue crack growth using nonlinear ultrasonic phased array imaging. *Smart Materials and Structures*, 26(5):055006, 2017.
- [CRBEA99] J. Chu, J. Rigsbee, G. Banas, and H. Elsayed-Ali. Laser-shock processing effects on surface microstructure and mechanical properties of low carbon steel. *Materials Science and Engineering: A*, 260(1-2):260 – 268, 1999.
- [Cre67] D. Crecraft. The measurement of applied and residual stresses in metals using ultrasonic waves. *Journal of Sound and Vibration*, 5(1):173 – 192, 1967.
- [CY87] Y. Cho and K. Yamanouchi. Nonlinear, elastic, piezoelectric, electrostrictive, and dielectric constants of lithium niobate. *Journal of Applied Physics*, 61(3):875–887, 1987.
- [CY01] J. H. Cantrell and W. T. Yost. Nonlinear ultrasonic characterization of fatigue microstructures. *International Journal of Fatigue*, 23, Supplement 1(0):487 – 490, 2001.
- [CY13] J. H. Cantrell and W. T. Yost. Acoustic nonlinearity and cumulative plastic shear strain in cyclically loaded metals. *Journal of Applied Physics*, 113(15):–, 2013.
- [DANL12] A. Demčenko, R. Akkerman, P. Nagy, and R. Loendersloot. Non-collinear wave mixing for non-linear ultrasonic detection of physical ageing in PVC. *NDT & E International*, 49(0):34 – 39, 2012.
- [DDR+06] D. Devos, M. Duquennoy, E. Roméro, F. Jenot, D. Locheignies, M. Ouafouh, and M. Ourak. Ultrasonic evaluation of residual stresses in flat glass tempering by an original double interferometric detection. *Ultrasonics*, 44:e923–e927, 2006.
- [Dem12] A. Demčenko. Non-Collinear Wave Mixing for a Bulk Wave Phase Velocity Measurement in an Isotropic Solid. personal delivery, oct 2012.
- [DH96] J. Ditri and D. Hongerholt. Stress distribution determination in isotropic materials via inversion of ultrasonic Rayleigh wave dispersion data. *International Journal of Solids and Structures*, 33(17):2437–2451, 1996.

- [Dit97] J. J. Ditri. Determination of nonuniform stresses in an isotropic elastic half space from measurements of the dispersion of surface waves. *Journal of The Mechanics and Physics Of Solids*, 45(1):51 – 66, 1997.
- [DKK14] A. Demčenko, V. Koissin, and V. Korneev. Noncollinear wave mixing for measurement of dynamic processes in polymers: Physical ageing in thermoplastics and epoxy cure. *Ultrasonics*, 54(2):684 – 693, 2014.
- [DZLL16] F. Dai, J. Zhou, J. Lu, and X. Luo. A technique to decrease surface roughness in overlapping laser shock peening. *Applied Surface Science*, 370:501–507, may 2016.
- [EB76] D. M. Egle and D. E. Bray. Measurement of acoustoelastic and third-order elastic constants for rail steel. *The Journal of the Acoustical Society of America*, 60(3):741–744, 1976.
- [Eck99] C. Eckl. *Akustische Wellen auf Festkörperoberflächen: Nichtlineare Effekte und Wechselwirkung mit zweidimensionalen Elektronensystemen*. PhD thesis, University of Regensburg, 1999.
- [EHN00] H. W. Engl, M. Hanke, and A. Neubauer. *Regularization of inverse problems*, volume 375. Springer Science & Business Media, 2000.
- [EM83a] A. G. Eguiluz and A. A. Maradudin. Effective boundary conditions for a semi-infinite elastic medium bounded by a rough planar stress-free surface. *Phys. Rev. B*, 28:711–727, Jul 1983.
- [EM83b] A. G. Eguiluz and A. A. Maradudin. Frequency shift and attenuation length of a Rayleigh wave due to surface roughness. *Phys. Rev. B*, 28:728–747, Jul 1983.
- [GB68] W. B. Gauster and M. A. Breazeale. Ultrasonic Measurement of the Nonlinearity Parameters of Copper Single Crystals. *Phys. Rev.*, 168:655–661, Apr 1968.
- [GLNS17] V. E. Gusev, A. M. Lomonosov, C. Ni, and Z. Shen. Self-action of propagating and standing Lamb waves in the plates exhibiting hysteretic nonlinearity: Nonlinear zero-group velocity modes. *Ultrasonics*, 80:34–46, 2017.
- [GM00] A. Guz' and F. Makhort. The physical fundamentals of the ultrasonic nondestructive stress analysis of solids. *International Applied Mechanics*, 36(9):1119–1149, 2000.
- [Gre64] W. A. Green. The growth of plane discontinuities propagating into a homogeneously deformed elastic material. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 16(2):79–88, Jan 1964.
- [Gre65] W. A. Green. The growth of plane discontinuities propagating into a homogeneously deformed elastic material. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 19(1):20–23, Jan 1965.
- [HBB04] W. Hassan, M. Blodgett, and S. Bondok. Numerical Analysis of the Rayleigh Wave Dispersion Due to Surface Roughness. In *AIP Conference Proceedings*, volume 700, page 262, 2004.
- [HCE65] A. Hikata, B. B. Chick, and C. Elbaum. Dislocation Contribution to the Second Harmonic Generation of Ultrasonic Waves. *Journal of Applied Physics*, 36(1):229–236, 1965.

Literaturverzeichnis

- [HFH81] M. Hirao, H. Fukuoka, and K. Hori. Acoustoelastic effect of Rayleigh surface wave in isotropic material. *Journal of Applied Mechanics*, 48(1):119–124, 1981.
- [Hig05] O. Higounenc. Correlation of shot peening parameters to surface characteristic. In *Proc. 9th Int Conf on Shot Peening (ICSP-9)*, 01 2005.
- [Hir82] M. Hirao. *Ultrasonic surface waves related to quantitative nondestructive evaluation*. PhD thesis, Department of Mechanical Engineering, Faculty of Engineering Science, Osaka University, 1982.
- [HK53] D. Hughes and J. Kelly. Second-order elastic deformation of solids. *Physical Review*, 92(5):1145–1149, 1953.
- [HK82] D. Husson and G. Kino. A perturbation theory for acoustoelastic effects. *Journal of Applied Physics*, 53(11):7250–7258, 1982.
- [HKJ⁺06] J. Herrmann, J.-Y. Kim, L. J. Jacobs, J. Qu, J. W. Littles, and M. F. Savage. Assessment of material damage in a nickel-base superalloy using nonlinear Rayleigh surface waves. *Journal of Applied Physics*, 99(12):124913, 2006.
- [HKSF81] M. Hirao, M. Kyukawa, Y. Sotani, and H. Fukuoka. Rayleigh wave propagation in a solid with a cold-worked surface layer. *Journal of Nondestructive Evaluation*, 2:43–49, 1981.
- [HP82] F. S. Henyey and N. Pomphrey. Self-consistent elastic moduli of a cracked solid. *Geophysical Research Letters*, 9(8):903–906, aug 1982.
- [HR61] M. Hayes and R. Rivlin. Surface waves in deformed elastic materials. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 8:358–380, 1961.
- [HSTF81] M. Hirao, Y. Sotani, K. Takami, and H. Fukuoka. Love wave propagation in a solid with a cold-worked surface layer. *Journal of Nondestructive Evaluation*, 2:51–55, 1981.
- [Hus85] D. Husson. A perturbation theory for the acoustoelastic effect of surface waves. *Journal of Applied Physics*, 57(5):1562–1568, 1985.
- [IK78] Y. Iwashimizu and O. Kobori. The Rayleigh wave in a finitely deformed isotropic elastic material. *The Journal of the Acoustical Society of America*, 64(3):910–916, 1978.
- [Int05] International Atomic Energy Agency. *Measurement of Residual Stress in Materials Using Neutrons*. INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY, Vienna, 2005. IAEA-TECDOC-CD-1457.
- [JJQ⁺04] M. Junge, L. J. Jacobs, J. Qu, J. Jarzynski, and V. L. Saponara. The Measurement of Applied Stresses Using the Polarization of Rayleigh Surface Waves. *Zababakhin Scientific Talks - 2005*, 700(1):1187–1191, 2004.
- [JK63] G. L. Jones and D. R. Kobett. Interaction of elastic waves in an isotropic solid. *The Journal of the Acoustical society of America*, 35(1):5–10, 1963.
- [Joh81] G. C. Johnson. Acoustoelastic theory for elastic–plastic materials. *The Journal of the Acoustical Society of America*, 70(2):591–595, 1981.
- [Joh83] G. C. Johnson. The effect of plastic deformation on the acoustoelastic response of metals. *Journal of Applied Mechanics*, 50(3):689–691, September 1983.

- [JQJ06] M. Junge, J. Qu, and L. J. Jacobs. Relationship between Rayleigh wave polarization and state of stress. *Ultrasonics*, 44(3):233 – 237, 2006.
- [Jun03] M. Junge. Measurement of Applied Stresses Using the Polarization of Rayleigh Surface Waves. Master’s thesis, School of Civil and Environmental Engineering, Georgia Institute of Technology, August 2003.
- [Kac92] M. Kachanov. Effective elastic properties of cracked solids: Critical review of some basic concepts. *Applied Mechanics Reviews*, 45(8):304–335, August 1992.
- [Kal83] N. Kalyanasundaram. Nonlinear mixing of surface acoustic waves propagating in opposite directions. *The Journal of the Acoustical Society of America*, 73(6):1956–1965, 1983.
- [KAT15] C. M. Kube, A. Arguelles, and J. A. Turner. On the acoustoelasticity of polycrystalline materials. *The Journal of the Acoustical Society of America*, 138(3):1498–1507, 2015.
- [KBBB10] B. Koehler, M. Barth, J. Bamberg, and H.-U. Baron. Rayleigh wave velocity dispersion for characterization of surface treated aero engine alloys. In *European Conference on Non-Destructive Testing*, 2010.
- [KBS+09] B. Koehler, M. Barth, F. Schubert, J. Bamberg, and H.-U. Baron. Characterization of surface treated aero engine alloys by Rayleigh wave velocity dispersion. *Zababakhin Scientific Talks - 2005*, 1211(1):253–260, 2009.
- [KD14] V. A. Korneev and A. Demčenko. Possible second-order nonlinear interactions of plane waves in an elastic solid. *The Journal of the Acoustical Society of America*, 135(2):591–598, 2014.
- [KDW+96] K. Karch, T. Dietrich, W. Windl, P. Pavone, A. P. Mayer, and D. Strauch. Contribution of quantum and thermal fluctuations to the elastic moduli and dielectric constants of covalent semiconductors. *Phys. Rev. B*, 53:7259–7266, Mar 1996.
- [KIK15] A. Korobov, M. Izosimova, A. Kokshaiskii, and A. Agafonov. Elastic waves in a wedge of aluminum alloy with permanent residual deformations. *AIP Conference Proceedings*, 1685(1):080005, 2015.
- [KJQL06] J.-Y. Kim, L. J. Jacobs, J. Qu, and J. W. Littles. Experimental characterization of fatigue damage in a nickel-base superalloy using nonlinear ultrasonic waves. *The Journal of the Acoustical Society of America*, 120(3):1266–1273, 2006.
- [KNM98] V. Korneev, K. Nihei, and L. Myer. Nonlinear interaction of plane elastic waves. Technical report, Lawrence Berkeley National Lab., CA (United States), 1998.
- [KQJ+06] J.-Y. Kim, J. Qu, L. Jacobs, J. Littles, and M. Savage. Acoustic Nonlinearity Parameter Due to Microplasticity. *Journal of Nondestructive Evaluation*, 25:28–36, 2006.
- [KS95] V. Kosachev and A. Shchegrov. Dispersion and Attenuation of Surface Acoustic Waves of Various Polarizations on a Stress-Free Randomly Rough Surface of Solid. *Annals of Physics*, 240(2):225–265, jun 1995.
- [KT15] C. M. Kube and J. A. Turner. Voigt, reuss, hill, and self-consistent techniques for modeling ultrasonic scattering. In *Review of Progress in Quantitative Nondestructive Evaluation*. AIP Publishing, 2015.

Literaturverzeichnis

- [Kuz14] S. V. Kuznetsov. Lamb waves in anisotropic plates (review). *Acoustical Physics*, 60(1):95–103, Jan 2014.
- [LB79] Landolt-Börnstein. *Numerical Data and Functional Relationships in Technology*, volume III/11. 1979.
- [LKJQ11] M. Liu, J.-Y. Kim, L. Jacobs, and J. Qu. Experimental study of nonlinear Rayleigh wave propagation in shot-peened aluminum plates—Feasibility of measuring residual stress. *NDT & E International*, 44(1):67 – 74, 2011.
- [LL67] E. H. Lee and D. T. Liu. Finite-Strain Elastic-Plastic Theory with Application to Plane-Wave Analysis. *Journal of Applied Physics*, 38(1):19–27, 1967.
- [LM84] V. Lyakhovskiy and V. Myasnikov. On the behavior of elastic cracked solid. *Phys. Solid Earth*, 10:71–75, 1984.
- [Lub97] V. Lubarda. New estimates of the third-order elastic constants for isotropic aggregates of cubic crystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 45(4):471–490, apr 1997.
- [Mal00] P. G. Malischewsky. Comment to "A new formula for the velocity of Rayleigh waves" by D. Nkemzi [Wave Motion 26 (1997) 199–205]. *Wave Motion*, 31(1):93 – 96, 2000.
- [May95] A. P. Mayer. Surface acoustic waves in nonlinear elastic media. *Physics Reports*, 256(4-5):237 – 366, 1995.
- [MCE+12] N. Mujica, M. T. Cerda, R. Espinoza, J. Lisoni, and F. Lund. Ultrasound as a probe of dislocation density in aluminum. *Acta Materialia*, 60(16):5828 – 5837, 2012.
- [MKJQ11] K. H. Matlack, J.-Y. Kim, L. J. Jacobs, and J. Qu. Feasibility of using nonlinear guided waves to measure acoustic nonlinearity of aluminum. In T. Kundu, editor, *Health Monitoring of Structural and Biological Systems*, volume 7984, page 79840L. SPIE, 2011.
- [MKJQ14] K. Matlack, J.-Y. Kim, L. Jacobs, and J. Qu. Review of Second Harmonic Generation Measurement Techniques for Material State Determination in Metals. *Journal of Nondestructive Evaluation*, 34(1):273, 2014.
- [ML94] A. P. Mayer and M. Lehner. Effect of random surface and interface roughness on the propagation of surface acoustic waves. *Waves in Random Media*, 4(3):321–335, 1994.
- [MM90] A. Maradudin and A. Mayer. Surface Acoustic Waves on Nonlinear Substrates. In A. Boardman, M. Bertolotti, and T. Twardowski, editors, *Nonlinear Waves in Solid State Physics*, volume 247 of *NATO ASI Series*, pages 113–161. Springer US, 1990.
- [MMS63] J. Melngailis, A. A. Maradudin, and A. Seeger. Diffraction of Light by Ultrasound in Anharmonic Crystals. *Phys. Rev.*, 131:1972–1975, Sep 1963.
- [Mur37] F. D. Murnaghan. Finite Deformations of an Elastic Solid. *American Journal of Mathematics*, 59(2):235–260, 1937.
- [Mur51] F. D. Murnaghan. *Finite deformation of an elastic solid*. Wiley, New York, 1951.
- [MW84] A. P. Mayer and R. K. Wehner. Calculation of Grüneisen Constants in Si. *Physica Status Solidi B*, 126(1):91–103, 1984.

- [MWMB72] A. A. Maradudin, R. F. Wallis, D. L. Mills, and R. L. Ballard. Vibrational edge modes in finite crystals. *Phys. Rev. B*, 6:1106–1111, Aug 1972.
- [MZXX17] C. Ma, W. Zhu, Y. Xiang, and H. Zhang. Numerical and experimental investigations of nonlinear S0 Lamb mode for detection of fatigue damage. In *Proceedings of the 2017 IEEE International Ultrasonics Symposium, Washington, D.C.*, pages 1–4. IEEE, 2017.
- [Nag98] P. B. Nagy. Fatigue damage assessment by nonlinear ultrasonic materials characterization. *Ultrasonics*, 36(1–5):375 – 381, 1998.
- [Nor91] A. Norris. Symmetry conditions for third order elastic moduli and implications in nonlinear wave theory. *Journal of Elasticity*, 25(3):247–257, 1991.
- [NS79] R. Normandin and G. I. Stegeman. Surface-wave generation by nonlinear mixing of bulk waves. *Journal of Applied Physics*, 50(1):87–90, 1979.
- [NS97] V. Nazarov and A. Sutin. Nonlinear elastic constants of solids with cracks. *Journal of the Acoustical Society of America*, 102(6):3349–3354, 1997.
- [NYS73] Y. Nakagawa, K. Yamanouchi, and K. Shibayama. Third-order elastic constants of lithium niobate. *Journal of Applied Physics*, 44(9):3969–3974, 1973.
- [OB74] R. J. O'Connell and B. Budiansky. Seismic velocities in dry and saturated cracked solids. *Journal of Geophysical Research*, 79(35):5412–5426, dec 1974.
- [OKDG07] T. Ohtani, K. Kawashima, M. Drew, and P. Guagliardi. Nonlinear acoustic evaluation of creep damage in boiler heat exchange tubes. *Japanese Journal of Applied Physics*, 46(7S):4577, 2007.
- [OKQJ16] T. Oberhardt, J.-Y. Kim, J. Qu, and L. J. Jacobs. A contact mechanics based model for partially-closed randomly distributed surface microcracks and their effect on acoustic nonlinearity in rayleigh surface waves. *AIP Conference Proceedings*, 1706:020024–1–11, 2016.
- [Pec98] C. Pecorari. On the effect of a residual stress field on the dispersion of a Rayleigh wave propagating on a cracked surface. *The Journal of the Acoustical Society of America*, 103(1):616–617, 1998.
- [Pec15a] C. Pecorari. Modeling non-collinear mixing by distributions of clapping microcracks. *Wave Motion*, 59:69–80, dec 2015.
- [Pec15b] C. Pecorari. Modeling the elasto-acoustic hysteretic nonlinearity of dry berea sandstone. *Wave Motion*, 52(Supplement C):66 – 80, 2015.
- [PKQJ09] C. Pruell, J.-Y. Kim, J. Qu, and L. J. Jacobs. Evaluation of fatigue damage using nonlinear guided waves. *Smart Materials and Structures*, 18(3):035003, 2009.
- [PMM92] D. Parker, A. Mayer, and A. Maradudin. The projection method for nonlinear surface acoustic waves. *Wave Motion*, 16(2):151–162, 1992.
- [Pre86] P. S. Prevey. X-ray diffraction residual stress techniques. *ASM International, ASM Handbook.*, 10:380–392, 1986.
- [PS76] T. C. Padmore and G. I. Stegeman. Surface-wave nonlinearities: Nonlinear bulk-wave generation by two oppositely directed collinear surface waves. *Journal of Applied Physics*, 47(4):1209–1228, 1976.

- [PSF84] Y. Pao, W. Sachse, and H. Fukuoka. Acoustoelasticity and Ultrasonic Measurement of Residual Stresses. *Physical Acoustics*, 17:61 – 143, 1984.
- [QC06] J. Qu and M. Cherkaoui. *Fundamentals of Micromechanics of Solids*. John Wiley & Sons, Inc., 2006.
- [RBMK05] P. Rajagopal, K. Balasubramaniam, S. Maddu, and C. Krishnamurthy. A new approach to inversion of surface wave dispersion relation for determination of depth distribution of non-uniform stresses in elastic materials. *International Journal of Solids and Structures*, 42(3-4):789–803, 2005.
- [RBR⁺11] M. Rjelka, M. Barth, S. Reinert, B. Koehler, J. Bamberg, and H.-U. Baron. Third Order Elastic Constants and Rayleigh Wave Dispersion of Shot-Peened Aero-Engine Materials. In D. O. Thompson and D. E. Chimenti, editors, *Review of Progress in Quantitative Nondestructive Evaluation*, volume 1430, pages 1430–1436. AIP, 2011.
- [RBR⁺13] M. Rjelka, M. Barth, S. Reinert, B. Koehler, J. Bamberg, H.-U. Baron, and R. Hessert. Third Order Elastic Constants and Rayleigh Wave Dispersion of Shot Peened Aero-Engine Materials. *Materials Science Forum*, 768-769:201–208, 2013.
- [Ric77] J. M. Richardson. Estimation of surface layer structure from Rayleigh wave dispersion: Dense data case. *Journal of Applied Physics*, 48(2):498–512, 1977.
- [RKM17] M. Rjelka, B. Koehler, and A. Mayer. Extraction of depth profiles of third-order elastic constants in cracked media. In *43rd Annual Review of Progress in Quantitative Nondestructive Evaluation*. AIP Publishing, 2017.
- [RLF68] F. R. Rollins, T. C. Lim, and G. W. Farnell. Ultrasonic reflectivity and surface wave phenomena on surfaces of copper single crystals. *Applied Physics Letters*, 12(7):236–238, 1968.
- [RN02] A. M. Ruiz and P. B. Nagy. Diffraction correction for precision surface acoustic wave velocity measurements. *The Journal of the Acoustical Society of America*, 112(3):835–842, sep 2002.
- [RN03] A. Ruiz and P. Nagy. SAW dispersion measurements for ultrasonic characterization of surface-treated metals. *Instrumentation Measurement and Metrology*, 3:59–85, 2003.
- [Rol65] F. R. Rollins. Ultrasonic reflectivity at a liquid-solid interface near the angle of incidence for total reflection. *Applied Physics Letters*, 7(8):212–214, 1965.
- [RT77] J. M. Richardson and B. R. Tittmann. Estimation of surface layer structure from Rayleigh wave dispersion. II. Sparse-data case—analytical theory. *Journal of Applied Physics*, 48(12):5111–5121, 1977.
- [Say82] C. M. Sayers. Ultrasonic velocities in anisotropic polycrystalline aggregates. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 15(11):2157, 1982.
- [SB60] A. Seeger and O. Buck. Die experimentelle Ermittlung der elastischen Konstanten höherer Ordnung. *Z. Naturforsch.*, 15 a:1056–1067, 1960.
- [SDRN10] Z. Shen, Y. Duan, X. Ren, and X. Ni. Surface Roughness of Laser-Shock-Peened Aluminum Alloys and Its Effect on the Dispersion of Surface Acoustic Waves. *Japanese Journal of Applied Physics*, 49:042701–1–042701–5, 2010.

- [SK91] C. Sayers and M. Kachanov. A simple technique for finding effective elastic constants of cracked solids for arbitrary crack orientation statistics. *International Journal of Solids and Structures*, 27(6):671 – 680, 1991.
- [SKB02] I. Solodov, N. Krohn, and G. Busse. CAN: an example of nonclassical acoustic nonlinearity in solids. *Ultrasonics*, 40(1–8):621 – 625, 2002.
- [SKB10] I. Solodov, N. Krohn, and G. Busse. Nonlinear Ultrasonic NDT for Early Defect Recognition and Imaging. In *10th European Conference on Non-Destructive Testing*, 2010.
- [SKQ⁺08] G. Shui, J.-Y. Kim, J. Qu, Y.-S. Wang, and L. J. Jacobs. A new technique for measuring the acoustic nonlinearity of materials using Rayleigh waves. *NDT & E International*, 41(5):326 – 329, 2008.
- [SLL⁺07] Y. Shen, C. Lee, C. C. H. Lo, N. Nakagawa, and A. M. Frishman. Conductivity profile determination by eddy current for shot-peened superalloy surfaces toward residual stress assessment. *Journal of Applied Physics*, 101(1):014907, jan 2007.
- [Smi63] R. Smith. Stress-induced anisotropy in solids - The acousto-elastic effect. *Ultrasonics*, 1(3):135–147, 1963.
- [SMMR05] S. Sathish, T. J. Moran, R. W. Martin, and R. Reibel. Residual stress measurement with focused acoustic waves and direct comparison with X-ray diffraction stress measurements. *Materials Science and Engineering: A*, 399(1–2):84–91, 2005.
- [Sne61] I. N. Sneddon. *Fourier series*. Routledge and Paul, London, 1961.
- [SRP96] B. R. Sridhar, K. Ramachandra, and K. A. Padmanabhan. Effects of cyclic stressing, heat treatment and shot-peening pressure on the residual stress distribution in two titanium alloys. *Journal of Materials Science*, 31(16):4381–4385, 1996.
- [SW94] V. Smyshlyaev and J. Willis. Linear and nonlinear scattering of elastic waves by microcracks. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 42(4):585–610, 1994.
- [SW11] G. Shui and Y. Wang. Characterization of surface damage of a solid plate under tensile loading using nonlinear Rayleigh waves. *Theoretical and Applied Mechanics Letters*, 1(5):051005, 2011.
- [Sza75] T. Szabo. Obtaining subsurface profiles from surface-acoustic-wave velocity dispersion. *Journal of Applied Physics*, 46(4):1448–1454, 1975.
- [TART87] B. Tittmann, L. Ahlberg, J. M. Richardson, and R. Thompson. Determination of physical property gradients from measured surface wave dispersion. *IEEE Transactions on Ultrasonics, Ferroelectrics, and Frequency Control*, 34(5):500–507, 1987.
- [TB61] R. Toupin and B. Bernstein. Sound Waves in Deformed Perfectly Elastic Materials. Acoustoelastic Effect. *Journal of The Acoustical Society Of America*, 33(2):216–225, 1961.
- [TB64] R. N. Thurston and K. Brugger. Third-Order Elastic Constants and the Velocity of Small Amplitude Elastic Waves in Homogeneously Stressed Media. *Phys. Rev.*, 133:A1604–A1610, Mar 1964.

- [TBFB95] E. Tanala, G. Bourse, M. Fremiot, and J. D. Belleval. Determination of near surface residual stresses on welded joints using ultrasonic methods. *NDT & E International*, 28(2):83 – 88, 1995.
- [Tie69] H. F. Tiersten. *Linear Piezoelectric Plate Vibrations*. Springer US, 1969.
- [TR60] R. Toupin and R. Rivlin. Dimensional changes in crystals caused by dislocations. *Journal of Mathematical Physics*, 1:8, 1960.
- [TT73] B. Tittmann and R. Thompson. Measurement of physical property gradients with elastic surface wave dispersion. In *Symposium on Nondestructive Evaluation*, volume 9, pages 20–28, 1973.
- [VB82] N. P. Vlannes and A. Bers. Nonlinear coupled mode theory for surface acoustic waves. *Journal of Applied Physics*, 53(1):372–384, 1982.
- [Vla82] N. P. Vlannes. Experimental study of nonlinear interactions for noncollinear surface acoustic waves. *Journal of Applied Physics*, 53(1):385–396, 1982.
- [WKQJ12] S. V. Walker, J.-Y. Kim, J. Qu, and L. J. Jacobs. Fatigue damage evaluation in A36 steel using nonlinear Rayleigh surface waves. *NDT & E International*, 48(0):10 – 15, 2012.
- [WL09] H. Wang and M. Li. Ab initio calculations of second-, third-, and fourth-order elastic constants for single crystals. *Phys. Rev. B*, 79:224102, Jun 2009.
- [Wri01] P. Wriggers. *Nichtlineare Finite-Element-Methoden*. Springer Berlin Heidelberg, 2001.
- [WZXT14] X. Wan, Q. Zhang, G. Xu, and P. W. Tse. Numerical simulation of nonlinear lamb waves used in a thin plate for detecting buried micro-cracks. *Sensors (Basel, Switzerland)*, 14(5):8528–8546, April 2014.
- [Zab92] E. A. Zabolotskaya. Nonlinear propagation of plane and circular Rayleigh waves in isotropic solids. *The Journal of the Acoustical Society of America*, 91(5):2569–2575, 1992.
- [ZKS89] L. K. Zarembo, V. A. Krasil'nikov, and I. E. Shkol'nik. Nonlinear acoustics in a problem of diagnosing the strength of solids. *Strength of Materials*, 21:1544–1551, 1989.
- [ZLC⁺17] Y. Zhao, F. Li, P. Cao, Y. Liu, J. Zhang, S. Fu, J. Zhang, and N. Hu. Generation mechanism of nonlinear ultrasonic Lamb waves in thin plates with randomly distributed micro-cracks. *Ultrasonics*, 79(Supplement C):60 – 67, 2017.
- [ZQJQ15] Y. Zhao, Y. Qiu, L. J. Jacobs, and J. Qu. Frequency-Dependent Tensile and Compressive Effective Moduli of Elastic Solids With Randomly Distributed Two-Dimensional Microcracks. *Journal of Applied Mechanics*, 82(8):081006–1–13, 2015.
- [ZQJQ16a] Y. Zhao, Y. Qiu, L. Jacobs, and J. Qu. Frequency-dependent tensile and compressive effective moduli of elastic solids with distributed penny-shaped microcracks. *Acta Mechanica*, 227(2):399–419, 2016.
- [ZQJQ16b] Y. Zhao, Y. Qiu, L. J. Jacobs, and J. Qu. A micromechanics model for the acoustic nonlinearity parameter in solids with distributed microcracks. *AIP Conference Proceedings*, 1706:060001–1–9, 2016.

- [ZXzXjL17] W. Zhu, Y. Xiang, F. zhen Xuan, and C. jun Liu. Creep damage evaluation of p92 steels using nonlinear lamb waves. In *Proceedings of the 2017 IEEE International Ultrasonics Symposium, Washington, D.C.*, 2017.

Danksagung

Zum Schluss möchte ich mich noch bei all denjenigen bedanken, die mich auf dem Weg zu dieser Arbeit begleitet, geleitet und verleitet haben.

Hier ist zu aller erst Dr. Bernd Köhler zu nennen, der mich in dieses im wahrsten Sinne des Wortes „spannende“ Gebiet einführte, mich fachlich durch sein fundiertes Wissen im Bereich Ultraschall betreute, immer ein offenes Ohr für Diskussionen hatte – und immer noch hat – und ein Gutachten für diese Arbeit erstellte.

Frau Prof. Dr. Elfgard Kühnicke danke ich hiermit für die Betreuung seitens der TU Dresden, die Übernahme des Erstgutachtens und die interessanten Kontakte, die ich während der Seminare knüpfen konnte.

Mein besonderer Dank geht an Prof. Dr. Andreas Mayer für die exzellente fachliche Betreuung, die Einführung in die essentiellen Konzepte für die Untersuchung nichtlinearer Wechselwirkungen akustischer Wellen mit Festkörpern, das stets offene Ohr und Hilfestellung sowie die Erstellung eines Gutachtens. Ebenso möchte ich mich bei Lena Mayer bedanken, die uns während unserer Treffen stets bestens bewirtete und mit ihrer fachlichen Kompetenz ebenso für Diskussionen zur Verfügung stand.

Die Arbeit entstand während meiner Zeit am Fraunhofer IKTS (ehemals IZFP) unter Führung von Prof. Mayendorf und Dr. Wunderlich, in den Abteilungen von Dr. Bernd Köhler, Dr. Jörg Opitz und Prof. Dr. Henning Heuer, sowie in den Gruppen von Dr. Bernd Köhler und Dr. Constanze Tschöpe, denen ich an dieser Stelle für die Schaffung der nötigen Rahmenbedingungen danken möchte.

Zu diesen Rahmenbedingungen zählen vor allem auch die nötigen Werkzeuge und Maschinen, weshalb ich mich Dr. Mike Röllig, Stefan Münch, Dr. Robert Schwerz, René Metasch und Georg Lautenschläger für die Betreuung und Möglichkeit der Arbeit an der Zugmaschine, sowie die Bereitstellung der Simulationsumgebung (ANSYS, Fortran-Compiler) danken möchte. Hier schließt sich nahtlos die Gruppe um Prof. Ziegenhorn und Holger Sparr von BTU Cottbus an, die mir, als es eng um die Lizenzen wurde, weitere Kapazitäten für Simulationen zur Verfügung stellten.

Für meinen kurzen Gastaufenthalt an der BTU Cottbus in Senftenberg möchte ich Prof. Jacob Spallek, Frau Iris Mrosk und den anderen Kollegen für die liebevolle Aufnahme und die Bereitstellung eines Arbeitsplatzes während der Endphase meiner Dissertation danken. Am Ende dieser Phase stand schließlich das Korrekturlesen, das ich meinen Lektoren Maria, Edgar, Vincent, Jacob und Lena Spallek, Jadwiga und Fabian Kaulfürst, Thomas Windisch und Hanka Rjelka verdanke.

Ohne etwas Abwechslung im Büroalltag wäre das (Arbeits-)Leben jedoch nur halb so schön. Ich danke daher meinen lieben Kollegen und Exkollegen, die mich über die Jahre hinweg begleitet haben, mit denen ich einiges zusammen er- und durchlebt habe und die nicht zuletzt mit fachlicher Kompetenz zu dieser Arbeit beigetragen haben: Martin Barth, Dr. Andreas Gommlich, Raffael Hipp, Sven Reinert, Dr. Thomas Windisch, Boscij Pawlik, Christian Schirrmann, Zsolt Bor, Julia Fischer, Malgorzata „Gosia“ Kopycinska-Müller.

Abschließend möchte ich meinen Eltern, Martina und Hubertus Rölke, nicht nur für Unterstützung während der gesamten Promotionsphase danken, sondern auch dafür, mir diesen Weg mit all den nötigen Grundlagen ermöglicht zu haben. Und ohne die Unterstützung, den gelegentlichen Nachdruck und die Geduld meiner Frau Hanka wäre dieses Unterfangen wohl auch nicht möglich gewesen. Wutrobný dżak!