

Generierung von Orientierungsverteilungen für RVE-Simulationsrechnungen

T. Böhlke, A. Bertram
Institut für Mechanik
Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg
D-39016 Magdeburg, Postfach 4120

1 Einleitung

Der Zusammenhang zwischen makroskopischen und mesoskopischen Materialeigenschaften metallischer polykristalliner Werkstoffe ist für die optimale Gestaltung von Umformprozessen und Materialeigenschaften von Interesse und kann an repräsentativen Volumenelementen (RVE) untersucht werden. In einem RVE wird die Struktur des Werkstoffes auf der Mesoskala, deren charakteristische Länge durch die mittlere Korngröße gegeben ist, modelliert und die Veränderung der Struktur unter makroskopischen Deformationen und Beanspruchungen berechnet. Entweder ist die veränderte Mesostruktur selbst das Ziel der Untersuchung (z.B. bei Texturberechnungen) oder man schließt durch Mittelung von der veränderten Mesostruktur auf das makroskopische Materialverhalten [11, 13, 15].

Unter den für das Makroverhalten wichtigen Mesostrukturgrößen ist die Verteilungsfunktion der Kristallitorientierungen [7] von zentraler Bedeutung und kann im Gegensatz zu den Verteilungsfunktionen der Korngrenzflächen und Kornkanten selbst bei starken Vereinfachungen nicht vernachlässigt werden. Für die Durchführung von RVE-Rechnungen sind somit diskrete Anfangsorientierungsverteilungen der Kristallite notwendig, die eine bestimmte Repräsentativität im Sinne des makroskopischen Materialverhaltens sicherstellen.

Im folgenden wird der Begriff der Repräsentativität mit dem makroskopischen elastischen Verhalten verknüpft, das als repräsentativ gelten soll, wenn es isotrop ist. Im Sinne einer geringen Rechenzeit ist die minimale Anzahl von Kristalliten von Interesse, die die Isotropie exakt oder im Rahmen einer zu definierenden Genauigkeit sicherstellt.

In der vorliegenden Arbeit wird eine Isotropiebedingung für Aggregate kubischer Einkristalle aus Darstellungssätzen der Elastizitätstensoren unter der Voraussetzung eines homogenen Deformations- oder Spannungsfeldes abgeleitet. Für den zwei- und dreidimensionalen Fall werden exakte Lösungen angegeben. Weiterhin wird untersucht, wie die Isotropiebedingung durch Zufallsverteilungen und Verteilungen auf der Grundlage anderer Generierungs-Algorithmen approximiert wird.

Im Rahmen der Untersuchung werden folgende Annahmen getroffen

1. Betrachtet werden metallische Poly- und Einkristalle, so daß eine physikalische und geometrische Linearisierung im elastischen Bereich zulässig ist.
2. Die betrachteten Einkristalle haben eine kubische Kristallsymmetrie (z.B.: Ag, Al, Au, Cu, α -Fe, Ni).
3. Es werden werden Polykristalle untersucht, deren Materialverhalten uniform ist.
4. Die Interaktion der Körner und der Einfluß der Verteilungsfunktionen der Korngrenzflächen und der Kornkanten auf die Symmetrie des makroskopischen elastischen Verhaltens werden vernachlässigt.

Notation: Tensoren 1. und 2.Stufe werden durch kleine bzw. große lateinische Buchstaben in Fettdruck, Tensoren 3. und 4.Stufe werden durch kleine bzw. große griechische Buchstaben in Fettdruck symbolisiert. Alle Tensorkomponenten werden bezüglich einer Orthonormalbasis formuliert. Das dyadische Produkt zweier Tensoren wird notiert durch $a \otimes b$ oder $A \otimes B$. Das Skalarprodukt zwischen Tensoren wird durch einen Punkt gekennzeichnet: $a \cdot b := a_i b_i$, $A \cdot B := A_{ij} B_{ij}$ usw. Weiterhin gilt $(Ab)_i := A_{ij} b_j$ und $(\Xi[A])_{ij} := \Xi_{ijkl} A_{kl}$. Der Begriff der Norm eines Tensors wird mit der Frobenius-Norm verknüpft: $\|T\| := (T \cdot T)^{1/2}$ oder $\|\Xi\| := (\Xi \cdot \Xi)^{1/2}$. Die Transposition ist erklärt durch $A^T a \cdot b = a \cdot Ab \forall a, b$ und $\Xi^T[A] \cdot B = A \cdot \Xi[B] \forall A, B$. *Sym* und *Orth* bezeichnen die Mengen der symmetrischen und orthogonalen Tensoren 2.Stufe.

2 Elastische Eigenschaften polykristalliner Materialien

Lineare elastische Gesetze. Bei den betrachteten Materialien ist eine physikalische und geometrische Linearisierung der Spannungs-Verzerrungs-Relation möglich. Damit entfällt eine Differenzierung bei den Spannungs- und Verzerrungs-Maßen. Die Spannung T wird mit der Verzerrung E über den Steifigkeitstensor Ξ bzw. den Nachgiebigkeitstensor Π verknüpft

$$T = \Xi[E], \quad E = \Pi[T]. \quad (1)$$

Π ist die Inverse von Ξ auf dem Raum der symmetrischen Tensoren 4.Stufe. Aus dem zweiten Hauptsatz der Thermodynamik folgt für thermoelastische Materialien die Existenz eines positivwertigen Potentials für die Spannungen bzw. Verzerrungen [16, 21]. Dies impliziert für den linear-elastischen Fall, daß beide Tetraden symmetrisch $\Xi = \Xi^T$ und positiv definit sind $E \cdot \Xi[E] > 0 \forall E \neq 0 \in \text{Sym}$. Wegen der Symmetrie der Verzerrungs- bzw. Spannungsgrößen kann ohne Beschränkung der Allgemeinheit von der rechten Subsymmetrie $\Xi[E] = \Xi[E^T] \forall E$ ausgegangen werden, woraus mit der Hauptsymmetrie die linke Subsymmetrie $\Xi[E] = \Xi[E]^T \forall E$ gefolgert werden kann.

Symmetriegruppe. Die Symmetriegruppe S eines linear elastischen Festkörpers setzt sich aus allen orthogonalen Abbildungen H zusammen, für die gilt

$$H^T \Xi[E] H = \Xi[H^T E H], \quad H^T \Pi[T] H = \Pi[H^T T H], \quad \forall H \in S \subseteq \text{Orth}. \quad (2)$$

Im Falle der kubischen Kristallsymmetrie besteht die Symmetriegruppe aus 48 orthogonalen Abbildungen, von denen jeweils 24 eigentlich und uneigentlich orthogonal sind. Die eigentlich orthogonalen Elemente werden im folgenden bezüglich der orthonormierten Kistallgitterbasis \mathbf{g}_i angegeben [21]: 1. die Identität, 2. Rotationen der Ordnung 2 um die Achsen $(\mathbf{g}_i \pm \mathbf{g}_j)/\sqrt{2}$, ($i < j$), 3. Rotationen der Ordnung 3 um die Achsen $(\mathbf{g}_1 \pm \mathbf{g}_2 \pm \mathbf{g}_3)/\sqrt{3}$, sowie ihre Potenzen der Ordnung 2, 4. Rotationen der Ordnung 4 um die Achsen \mathbf{g}_i ($i = 1, 2, 3$) sowie ihre Potenzen der Ordnung 2 und 3. Der Drehwinkel der Rotationen ist aus der Ordnung k mit $\vartheta = 2\pi/k$ zu berechnen. Die Symmetriegruppe des isotropen elastischen Verhaltens ist gleich der orthogonalen Gruppe.

Spektral- und Projektordarstellung der Materialtetraden. Aufgrund der oben genannten Eigenschaften existiert für die Elastizitätstensoren eine Spektraldarstellung mit positiven Eigenwerten

$$\Xi = \sum_{\alpha=1}^6 \lambda_{\alpha} M_{\alpha} \otimes M_{\alpha}, \quad \Pi = \sum_{\alpha=1}^6 \frac{1}{\lambda_{\alpha}} M_{\alpha} \otimes M_{\alpha}, \quad M_{\alpha} \in \text{Sym}, \quad \lambda_{\alpha} > 0. \quad (3)$$

Im Falle einer triklinen, monoklinen oder orthotropen Kristallsymmetrie sind alle Eigenwerte einfach und die orthonormierten Eigenrichtungen M_{α} eindeutig. Bei allen anderen Kristallklassen treten mehrfache Eigenwerte auf [9, 8]. Summiert man die dyadischen Produkte der Eigenrichtungen mit gleichem Eigenwert, erhält man eine Projektordarstellung der Tetraden

$$\Xi = \sum_{\alpha=1}^{\beta} \lambda_{\alpha} \Lambda_{\alpha}, \quad \Pi = \sum_{\alpha=1}^{\beta} \frac{1}{\lambda_{\alpha}} \Lambda_{\alpha}. \quad (4)$$

Liegen nur einfache Eigenwerte vor ($\beta = 6$), sind die Spektral- und Projektordarstellung identisch. Die Projektoren Λ_{α} sind idempotent $\Lambda_{\alpha} \Lambda_{\alpha} = \Lambda_{\alpha}$ (keine Summation) und biorthogonal $\Lambda_{\alpha} \Lambda_{\beta} = 0$ ($\alpha \neq \beta$). Im Falle der kubischen Kristallsymmetrie liegen drei unterschiedliche Eigenwerte vor ($\beta = 3$) und die Projektordarstellung hat die Form [3, 4]

$$\begin{aligned} \Lambda_1 &= \frac{1}{3} \mathbf{I} \otimes \mathbf{I}, & \lambda_1 &= \Xi_{1111} + 2\Xi_{1122}, \\ \Lambda_2 &= \Sigma - \Lambda_1, & \lambda_2 &= \Xi_{1111} - \Xi_{1122}, \\ \Lambda_3 &= \mathbf{I}^S - \Sigma, & \lambda_3 &= 2\Xi_{1212}. \end{aligned} \quad (5)$$

\mathbf{I} bezeichnet die Identität zweiter Stufe, \mathbf{I}^S die symmetrische Identität vierter Stufe. Der anisotrope Anteil Σ der Projektoren berechnet sich aus der Gitterbasis \mathbf{g}_i mit

$$\Sigma = \sum_{i=1}^3 \mathbf{g}_i \otimes \mathbf{g}_i \otimes \mathbf{g}_i \otimes \mathbf{g}_i. \quad (6)$$

Ist das elastische Verhalten isotrop, gilt die vereinfachte Darstellung

$$\begin{aligned} \Lambda_1 &= \frac{1}{3} \mathbf{I} \otimes \mathbf{I}, & \lambda_1 &= \Xi_{1111} + 2\Xi_{1122}, \\ \Lambda_2 &= \mathbf{I}^S - \Lambda_1, & \lambda_2 &= \Xi_{1111} - \Xi_{1122} = 2\Xi_{1212}. \end{aligned} \quad (7)$$

Abschätzung der elastischen Eigenschaften des Aggregats. Eine einfache Abschätzung der im allgemeinen anisotropen elastischen Eigenschaften eines polykristallinen Materials ist durch die Annahme konstanter Verzerrungen [20] oder konstanter Spannungen [19] im Aggregat möglich. Die makroskopischen Steifigkeits-

und Nachgiebigkeitstensoren ergeben sich als Volumenmittelwerte der entsprechenden Einkristallgrößen (Indizes: V =Voigt, R =Reuss, E =Einkristall)

$$\Xi^V = \frac{1}{V} \int_V \Xi^E dV, \quad \Pi^R = \frac{1}{V} \int_V \Pi^E dV. \quad (8)$$

Eine Abschätzung unter der Zusatzannahme gleichverteilter Kristallorientierungen wird durch Einführung der Orientierungsverteilungsdichte f über $dV/V = fdg$ möglich. Für das Volumenelement dg des Orientierungsraumes gilt bei Verwendung von Eulerwinkeln z.B. $dg = \sin(\Phi)d\Phi d\varphi_1 d\varphi_2 / 8\pi^2$ [7]. Im Falle gleichverteilter Orientierungen gilt $f = 1$. Damit folgt für die nun isotropen Tetraden (I =isotrop)

$$\Xi^{VI} = \frac{1}{8\pi^2} \int_g \Xi^E \sin(\Phi) d\Phi d\varphi_1 d\varphi_2, \quad \Pi^{RI} = \frac{1}{8\pi^2} \int_g \Pi^E \sin(\Phi) d\Phi d\varphi_1 d\varphi_2. \quad (9)$$

Die anisotropen und isotropen Abschätzungen nach Voigt und Reuss ergeben strikte Grenzen für die Verzerrungsenergiegedichte des Aggregates [12, 18, 14], d.h. mit $\Xi^R := \Pi^{R-1}$ und $\Xi^{RI} := \Pi^{RI-1}$ gilt (A =Aggregat)

$$E \cdot \Xi^R[E] < E \cdot \Xi^A[E] < E \cdot \Xi^V[E], \quad (10)$$

und

$$E \cdot \Xi^{RI}[E] < E \cdot \Xi^A[E] < E \cdot \Xi^V[E]. \quad (11)$$

Für die zwei resultierenden elastischen Konstanten $\lambda_{1,2}$ in Gl. (7) folgt nach Auswertung von Gl. (9)

$$\begin{aligned} \lambda_1^{VI} &= \frac{1}{3} \Xi_{ijji}^E, & \lambda_1^{RI-1} &= \frac{1}{3} \Pi_{ijji}^E, \\ \lambda_2^{VI} &= \frac{1}{15} (3\Xi_{ijji}^E - \Xi_{iijj}^E), & \lambda_2^{RI-1} &= \frac{1}{15} (3\Pi_{ijji}^E - \Pi_{iijj}^E). \end{aligned} \quad (12)$$

Für kubische Materialien ergibt sich speziell

$$\begin{aligned} \lambda_1^{VI} &= \Xi_{1111}^E + 2\Xi_{1122}^E, & \lambda_1^{RI-1} &= \Pi_{1111}^E + 2\Pi_{1122}^E, \\ \lambda_2^{VI} &= \frac{2}{5} (\Xi_{1111}^E - \Xi_{1122}^E + 3\Xi_{1212}^E), & \lambda_2^{RI-1} &= \frac{2}{5} (\Pi_{1111}^E - \Pi_{1122}^E + 3\Pi_{1212}^E). \end{aligned} \quad (13)$$

Deutung der isotropen Mittelwerte als Lösungen eines Extremalproblems. Für die isotropen Näherungen nach Gl. (9) kann die folgende ergänzende Interpretation gegeben werden. Berechnet man die isotropen Tetraden Ξ^I , die die Frobenius-Normen $\|\Xi^E - \Xi^I\|$ oder $\|\Xi^V - \Xi^I\|$ minimieren, so ergeben sich bei Anwendung des Darstellungssatzes (7) in beiden Fällen die isotropen Mittelwerte nach Voigt

$$\|\Xi^{E,V} - \lambda_1 \Lambda_1 - \lambda_2 \Lambda_2\| \rightarrow \min \Rightarrow \lambda_1 = \Xi^{E,V} \cdot \Lambda_1 \equiv \lambda_1^{VI}, \quad \lambda_2 = \frac{1}{5} \Xi^{E,V} \cdot \Lambda_2 \equiv \lambda_2^{VI}. \quad (14)$$

Für die Nachgiebigkeiten gelten entsprechende Gleichungen. D.h., die isotropen Mittelwerte nach Voigt und Reuss repräsentieren die isotropen elastischen Gesetze mit dem geringsten Abstand zu den einfachen Volumenmittelwerten (8), wobei der Abstand zwischen Tetraden mit der Frobenius-Norm definiert wurde. Diese Interpretation motiviert im folgenden die Verwendung der Frobenius-Norm bei der Berechnung skalarwertiger Anisotropiemaße.

Der Abstand zwischen der Voigt- und der Reuss-Näherung im Sinne der Frobenius-Norm hängt vom Grad der Anisotropie der Kristallite ab. Es gilt

$$\frac{\|\Xi^{VI} - \Xi^{RI}\|}{\Xi_{111}^E - \Xi_{112}^E} = \frac{6\sqrt{5}(A-1)^2}{5(2A+3)}, \quad A := \frac{2\Xi_{1212}^E}{\Xi_{111}^E - \Xi_{112}^E}. \quad (15)$$

Da die reale Verzerrungsenergiedichte durch die Näherungen von Voigt und Reuss eingegrenzt wird, sind diese bei schwach anisotropen Metallen (z.B. Aluminium) genauer als bei stark anisotropen (z.B. Kupfer).

Isotropiebedingung. Für kubische Materialien läßt sich der Volumenmittelwert (8) bei Verwendung von Gl. (5), (7) und (13) folgendermaßen additiv in einen isotropen und einen anisotropen Anteil zerlegen [6, 5]

$$\Xi^V = \Xi^{VI} + \|\Xi^E - \Xi^{VI}\| \Delta, \quad \Pi^R = \Pi^{RI} + \|\Pi^E - \Pi^{RI}\| \Delta, \quad (16)$$

wobei Δ gegeben ist durch

$$\Delta = \frac{\sqrt{30}}{30} \left(\mathbf{I} \otimes \mathbf{I} + 2\mathbf{I}^S - \frac{5}{V} \int_V \Sigma(\mathbf{g}_i) dV \right). \quad (17)$$

Der Abstand zwischen den anisotropen und isotropen Näherungen ist nach Gl. (16) zum einen über $\|\Xi^E - \Xi^{VI}\|$ bzw. $\|\Pi^E - \Pi^{RI}\|$ von der Anisotropie der Einkristalle zum anderen über Δ von der Orientierungsverteilung abhängig. Im Rahmen der Voraussetzungen lautet eine Isotropiebedingung $\Delta = 0$ bzw.

$$\frac{1}{V} \int_V \sum_{k=1}^3 \mathbf{g}_k \otimes \mathbf{g}_k \otimes \mathbf{g}_k \otimes \mathbf{g}_k dV = \frac{1}{5} (\mathbf{I} \otimes \mathbf{I} + 2\mathbf{I}^S), \quad (18)$$

oder mit der orthogonalen Abbildung $\mathbf{Q} = \mathbf{g}_i \otimes \mathbf{e}_i$ in Indexnotation

$$\frac{1}{V} \int_V \sum_{k=1}^3 Q_{ik} Q_{jk} Q_{mk} Q_{nk} dV = \frac{1}{5} (\delta_{ij} \delta_{mn} + \delta_{im} \delta_{jn} + \delta_{in} \delta_{jm}). \quad (19)$$

Die rechte Seite von Gl. (18) und (19) ist ein Sonderfall des allgemeinen isotropen Tensors 4.Stufe. Die Norm von $\|\Delta\|$ liegt in Abhängigkeit von der Orientierungsverteilung im Intervall $[0, 1]$. Es gilt $\|\Delta\| = 0$ für eine uniforme Orientierungsverteilung und $\|\Delta\| = 1$ für einen Einkristall. Da die Norm $\|\Delta\|$ dimensionslos ist und allein von der Orientierungsverteilung im Aggregat abhängt, kann sie als Anisotropieparameter innerhalb der Klasse der einphasigen Aggregate kubischer Einkristalle aufgefaßt werden. Eine additive Zerlegung der makroskopischen Steifigkeitstensen entsprechend (16) ist für einphasige Polykristalle unabhängig von der Kristallklasse der Kristallite möglich. Ξ^{VI} und Π^{VI} sind in diesem Fall nach Gl. (12) zu berechnen. Gl. (16) dient als Definitionsgleichung für Δ . Im allgemeinen hängt der Tensor Δ dann aber nicht nur von der Orientierungsverteilung im Aggregat ab.

Abweichung vom isotropen Verhalten. Bei Verwendung der Frobenius-Norm für Tensoren 2. und 4.Stufe läßt sich die Abweichung vom isotropen elastischen Verhalten durch die Steifigkeits- und Nachgiebigkeitstensen quantifizieren durch

$$\frac{\|\Xi^V - \Xi^{VI}\|}{\|\Xi^{VI}\|} = f_1 \|\Delta\|, \quad (20)$$

$$\frac{\|\Pi^R - \Pi^{RI}\|}{\|\Pi^{RI}\|} = f_2 \|\Delta\|. \quad (21)$$

Für die Faktoren f_1 und f_2 gilt

$$f_1 := \frac{\|\Xi^E - \Xi^{VI}\|}{\|\Xi^{VI}\|} = \frac{\|\Xi^E - \Xi^{VI}\|}{\sqrt{(3K^V)^2 + 5(2G^V)^2}}, \quad (22)$$

$$f_2 := \frac{\|\Pi^E - \Pi^{RI}\|}{\|\Pi^{RI}\|} = \frac{\|\Pi^E - \Pi^{RI}\|}{\sqrt{(3K^R)^{-2} + 5(2G^R)^{-2}}}. \quad (23)$$

Für die elastischen Konstanten gilt: $3K^V = \lambda_1^{VI}$ und $2G^V = \lambda_2^{VI}$. Die Mittelwerte nach Reuss ergeben sich analog. Die Differenz der Einkristall-Steifigkeitstetrate zur isotropen Näherung berechnet sich nach

$$\|\Xi^E - \Xi^{VI}\| = \frac{\sqrt{30}}{5} (2\Xi_{1212} - (\Xi_{1111} - \Xi_{1122})). \quad (24)$$

3 Isotrope Verteilungen

Isotropiebedingung (zweidimensional). In diesem Kapitel werden exakte Lösungen der diskretisierten Gleichung $\Delta = 0$ vorgestellt. Die Diskretisierung erfolgt im Sinne der Annahme, daß keine Orientierungsgradienten in den Körnern des Aggregates vorliegen. D.h., daß Volumenmittelwerte der Form $\int_V \psi dV/V$ als gewichtete Summe $\sum_{\alpha=1}^N v^\alpha \psi^\alpha$ zu berechnen sind. Die $v^\alpha := V^\alpha/V$ bezeichnen die Volumenanteile der Kristallorientierungen und unterliegen der Nebenbedingung $\sum_{\alpha=1}^N v^\alpha = 1$. Der Parameter N bezeichnet die Anzahl der Kristallorientierungen. Zum besseren Verständnis wird zuerst der zweidimensionale Fall diskutiert.

Die Ableitung der Isotropiebedingung für den zweidimensionalen Fall erfolgt analog zum letzten Kapitel. Es ist dabei zu beachten, daß sowohl die Eigenwerte als auch die Projektoren zu modifizieren sind. Die zur Gleichung (19) analoge Isotropiebedingung lautet

$$\frac{1}{V} \int_V \sum_{k=1}^2 Q_{ik}^\alpha Q_{jk}^\alpha Q_{mk}^\alpha Q_{nk}^\alpha dV = \frac{1}{4} (\delta_{ij}\delta_{mn} + \delta_{im}\delta_{jn} + \delta_{in}\delta_{jm}) \quad (i, j, m, n = 1, 2). \quad (25)$$

Der Unterschied zur Gl. (19) besteht im Faktor der rechten Seite. Die die Kristallorientierungen bestimmenden Q^α ($\alpha = 1..N$) sind Rotationen in einer Ebene, so daß die Lösung dieser Gleichung durch einen Winkel als Funktion zweier Ortskoordinaten beschrieben wird. Nach der Diskretisierung lautet die Gleichung

$$\sum_{\alpha=1}^N v^\alpha \sum_{k=1}^2 Q_{ik}^\alpha Q_{jk}^\alpha Q_{mk}^\alpha Q_{nk}^\alpha = \frac{1}{4} (\delta_{ij}\delta_{mn} + \delta_{im}\delta_{jn} + \delta_{in}\delta_{jm}). \quad (26)$$

Für $N = 2$ und $v^1 = v^2 = 1/2$ lautet eine Lösung von Gl. (26) $\{Q^1, Q^2 Q^1\}$ mit $Q^1 \in Orth$ beliebig und $Q^2 = \cos(\pi/4)(e_1 \otimes e_1 + e_2 \otimes e_2) + \sin(\pi/4)(e_2 \otimes e_1 - e_1 \otimes e_2) \in Orth$ ($e_i \cdot e_j = \delta_{ij}$). Es handelt sich um zwei um 45° gegeneinander verdrehte Kristallite.

Isotropiebedingung (dreidimensional). Nach der Diskretisierung lautet Gl. (19)

$$\sum_{\alpha=1}^N v^\alpha \sum_{k=1}^3 Q_{ik}^\alpha Q_{jk}^\alpha Q_{mk}^\alpha Q_{nk}^\alpha = \frac{1}{5} (\delta_{ij}\delta_{mn} + \delta_{im}\delta_{jn} + \delta_{in}\delta_{jm}) \quad (i, j, m, n = 1, 2, 3). \quad (27)$$

Die Q^α ($\alpha = 1..N$) sind Rotationen im dreidimensionalen Raum, so daß die Lösung dieser Gleichung durch $3N$ Parameter beschrieben wird. Lösungen der Gl. (19) wurden zuerst von Gaffke und Heiligers [10, 2] bestimmt. Eine Lösung für $N = 12$ und $v^{1..12} = 1/12$ läßt sich wie folgt konstruieren. Die Rotationen $Q^1 \dots Q^{12}$, die die Laborbasis e_i in die Gitterbasis g_i abbilden, berechnen sich durch die Hintereinanderschaltung $Q^\alpha = \tilde{H}^\alpha Q^0$, wobei die \tilde{H}^α Elemente der Symmetriegruppe kubischer Materialien sind. \tilde{H}^1 ist die Identität, die $\tilde{H}^{2..4}$ sind Rotationen der Ordnung 2 um die Achsen e_i ($i = 1, 2, 3$), die $\tilde{H}^{5..12}$ sind Rotationen der Ordnung 3 um die Achsen $(e_1 \pm e_2 \pm e_3)/\sqrt{3}$, sowie ihre Potenzen der Ordnung 2. Für Q^0 gilt

$$Q^0 = \begin{pmatrix} y_1^2 + y_2^2 - y_3^2 - y_4^2 & -2y_1y_4 + 2y_2y_3 & 2y_1y_3 + 2y_2y_4 \\ 2y_1y_4 + 2y_2y_3 & y_1^2 - y_2^2 + y_3^2 - y_4^2 & -2y_1y_2 + 2y_3y_4 \\ -2y_1y_3 + 2y_2y_4 & 2y_1y_2 + 2y_3y_4 & y_1^2 - y_2^2 - y_3^2 + y_4^2 \end{pmatrix}, \quad (28)$$

mit

$$y_1 = 0, \quad y_2 = \sqrt{z}, \quad y_3 = \sqrt{\frac{1-z}{2}}, \quad y_4 = y_3, \quad z = \frac{1}{2} - \sqrt{\frac{4}{81} - \frac{1}{30}}. \quad (29)$$

4 Quasi-isotrope Verteilungen

Einordnung der Arbeit. Es gibt unterschiedliche Zugänge zur Generierung von Orientierungsverteilungen für RVE-Simulationsrechnungen. Die oben diskutierten Isotropiebedingungen wurden unter der Voraussetzung eines homogenen Deformations- oder Spannungsfeldes aus Darstellungssätzen der Elastizitätstensoren abgeleitet. Beide Annahmen führen für Aggregate kubischer Einkristalle zur gleichen Isotropiebedingung, die allein von der Orientierungsverteilung abhängt. Wie gezeigt wurde, existieren exakte Lösungen mit verhältnismäßig geringen Orientierungszahlen (2-d: $N = 2$, 3-d: $N = 12$). Im folgenden wird untersucht, wie die oben abgeleitete Isotropiebedingung durch Zufallsverteilungen und Verteilungen auf der Grundlage anderer Generierungs-Algorithmen approximiert wird.

In [17] wird eine Übersicht in der Literatur verwendeter Orientierungsverteilungen gegeben, die auf Annahmen beruhen, die im wesentlichen geometrisch motiviert sind. Müller klassifiziert die Verteilungen in Zufallsverteilungen und Verteilungen, die aus Eulerraum-Diskretisierungen oder aus der Forderung gleicher Orientierungsabstände folgen. Er schlägt zusätzlich eine sogenannte Kugelteilungsstrategie vor und vergleicht diese ausführlich mit Ergebnissen von Eulerraum-Diskretisierungen in bezug auf die Isotropie des elastisch-plastischen Übergangsverhaltens. In [22] wird eine weitergehende Untersuchung durchgeführt und eine sogenannte Kreisteilungsstrategie vorgeschlagen. In der vorliegenden Arbeit wird davon ausgegangen, daß vor einer Isotropie des inelastischen Verhaltens, die des elastischen Verhaltens sichergestellt werden soll. Diese Forderung ist dadurch motiviert, daß reale Werkstoffe vor dem Durchlaufen von Umformprozessen in der Regel elastisch isotrop sind. Ist die Symmetrie des elastisch-inelastischen Übergangsverhaltens von Interesse, ist zu untersuchen, ab welcher Annäherung an das isotrope elastische Verhalten die Abweichung vom isotropen inelastischen Verhalten akzeptabel ist.

Darstellung von Kristallitorientierungen. Die orthogonale Abbildung Q , die die Rotation der Laborbasis e_i in die Gitterbasis g_i beschreibt, kann z.B. durch Eulerwinkel

$\{\varphi_1, \Phi, \varphi_2\}$ oder einen Drehwinkel und eine Drehachse $\{\vartheta, \mathbf{n}\}$ dargestellt werden [7, 1, 21]

$$\mathbf{Q} = \dot{\mathbf{Q}}(\varphi_1, \Phi, \varphi_2) \quad (30)$$

$$= \exp(\vartheta \boldsymbol{\varepsilon}[\mathbf{n}]) = \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} + \cos(\vartheta)(\mathbf{I} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) - \sin(\vartheta) \boldsymbol{\varepsilon}[\mathbf{n}]. \quad (31)$$

Die Symmetriegruppe \mathcal{S} des elastischen Verhaltens induziert mit $\mathbf{H}^\alpha \in \mathcal{S}$ gleichwertige Rotationen $\mathbf{Q}^\alpha = \mathbf{Q} \mathbf{H}^\alpha$ [7]. Die Relativdrehung zwischen zwei Kristallorientierungen ist gegeben durch $\mathbf{R}_{AB} = \mathbf{Q}_A \mathbf{Q}_B^{-1}$. Die Menge aller gleichwertigen Relativdrehungen ist gegeben durch $\mathbf{R}_{AB}^\alpha = \mathbf{R}_{AB} \mathbf{H}^\alpha$.

Abstände zwischen Orientierungen. Abstände zwischen Orientierungen sind null für äquivalente und positiv für nicht-äquivalente Orientierungen. Bunge [7] definiert als Abstand d^B zwischen zwei Orientierungen den kleinsten Winkel ϑ aller gleichwertigen Relativdrehungen

$$d^B := \min\{\vartheta^\alpha \mid \alpha = 1..24\}, \quad 2 \cos(\vartheta^\alpha) = \text{tr}(\mathbf{R}_{AB}^\alpha) - 1. \quad (32)$$

Ein weiteres Abstandsmaß läßt sich definieren über

$$d^G := \arccos(\max\{\mathbf{R}_{AB} \cdot \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \mid i, j = 1, 2, 3\}). \quad (33)$$

Für d^G kann die folgende Interpretation gegeben werden. Eine Orientierung \mathbf{g}_i induziert sechs Spurpunkte auf der Einheitskugel im \mathcal{R}^3 . Das Abstandsmaß d^G gibt den minimalen Abstand der Spurpunkte zweier unterschiedlicher Orientierungen auf der Einheitskugel an. Außerdem ist eine Deutung als Funktion der Max-Norm der Relativdrehung möglich. Die Kristallsymmetrie wird durch die Definition von d^G berücksichtigt. Ein weiteres Abstandsmaß ergibt aus der oben abgeleiteten Isotropiebedingung zu

$$d^D := 1 - \|\Delta\|_{N=2}. \quad (34)$$

Zufallsverteilungen. Soll ein Satz gleichverteilter Zufallszahlen im \mathcal{R}^3 in gleichverteilte Orientierungen umgerechnet werden, ist zu beachten, daß die Jakobideterminante der Transformation verträglich mit dem Volumenelement des Orientierungsraumes ist. Wählt man Eulerwinkel $(\varphi_{1,2} \in [0, 2\pi], \varphi_3 \equiv \Phi \in [0, \pi])$ [7] zur Parametrisierung des Orientierungsraumes, muß gelten

$$dx_1 dx_2 dx_3 \equiv \det \left(\frac{\partial x_i}{\partial \varphi_j} \right) d\varphi_1 d\varphi_2 d\varphi_3 \stackrel{!}{=} dg. \quad (35)$$

Eine Transformationsvorschrift, die diese Bedingung erfüllt, lautet

$$x_1 = \frac{\sqrt{2}}{4\pi} \varphi_1, \quad x_2 = \frac{\sqrt{2}}{4\pi} \varphi_2, \quad x_3 = -\cos(\varphi_3), \quad x_{1,2} \in [0, \sqrt{2}/2], \quad x_3 \in [-1, 1]. \quad (36)$$

Modifizierte Zufallsverteilungen. Es wird im folgenden gezeigt, daß die durch einen Satz gleichverteilter Kristallorientierungen induzierte elastische Anisotropie verringert werden kann, wenn Zufallsorientierungen verworfen werden, die einen Mindestabstand $d_{\min}^{B,G,D}$ zu anderen Orientierungen unterschreiten. Tabelle 1 gibt den Mittelwert und die Standardabweichung von $\|\Delta\|$ für 100 Orientierungen an. Die Mindestabstände wurden so gewählt, daß mindestens 100 Zufallsorientierungen gefunden werden konnten. Für die Verteilungen EULER-128 und KUGEL-96 [17] und KREIS-104 [22] gilt zum Vergleich

Tabelle 1. Mittelwert und Standardabweichung von $\|\Delta\|$ für 100 Orientierungen

	$d_{\min}^{B,C,D} = 0^\circ$	$d_{\min}^B = 15.5^\circ$	$d_{\min}^C = 5.5^\circ$	$d_{\min}^D = 0.06$
$\ \Delta\ $	0.0976;0.0309	0.0859;0.0234	0.0264;0.0068	0.02558;0.0044

Tabelle 2. Mittelwert und Standardabweichung von $\|\Delta\|$ für 10, 100 und 1000 Orientierungen

	$d_{\min}^D = 0.2600$	$d_{\min}^D = 0.0600$	$d_{\min}^D = 0.0125$
$\ \Delta\ $	0.1024;0.0243	0.0256;0.0044	0.0081;0.0017

$\|\Delta\|_{EU128} = 0.49$, $\|\Delta\|_{KV96} = 0.15$ und $\|\Delta\|_{KR104} = 0.25$. Es zeigt sich, daß der Abstand d^B zu einer geringen und die Abstände $d^{C,D}$ zu einer wesentlichen Verbesserung der Verteilungseigenschaften führt (ca. 75% für $N = 100$). Zum Maß d^B ist anzumerken, daß es für $d^B \neq 0$ im Gegensatz zu d^G Spurpunkte auf der Einheitskugel nicht trennt. Tabelle 2 gibt die Mittelwerte und Standardabweichungen von $\|\Delta\|$ für 10, 100 und 1000 Orientierungen für entsprechend gewählte Mindestabstände d^D an. Diese Mittelwerte lassen sich durch folgende Funktion approximieren, die die Bedingungen $\|\Delta\|_{N=1} = 1$ und $\|\Delta\|_{N=\infty} = 0$ erfüllt

$$\|\Delta\| \approx \exp\left(-k_1 \ln^{k_2}(N)\right), \quad k_1 = \frac{5}{4}, \quad k_2 = \frac{7}{10}. \quad (37)$$

Die Gleichungen (20), (21) und (37) ermöglichen eine materialspezifische Abschätzung der Orientierungszahlen, die für eine Approximation des isotropen Materialverhaltens im Rahmen einer bestimmten Genauigkeit notwendig sind. So gilt für Aluminium $f_1^{Al} = 0.043$, $f_2^{Al} = 0.098$ und Kupfer $f_1^{Cu} = 0.237$, $f_2^{Cu} = 0.570$. D.h. z.B., daß die Abweichung vom isotropen Zustand nach (20) und (21) bei gleicher Orientierungsverteilung für Kupfer 5.5 bis 5.8 mal größer ist als bei Aluminium. Bei Verwendung modifizierter Zufallsverteilungen benötigt man bei einer zulässigen Abweichung nach (20) von 1% ca. 4 Al- und 44 Cu-Kristallite, bei einer zulässigen Abweichung von 0.1% ca. 125 Al- und 3770 Cu-Kristallite.

5 Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit wird für Aggregate kubischer Einkristalle eine Isotropiebedingung im Sinne der Symmetrie des elastischen Verhaltens formuliert. Zur Ableitung dieser Bedingung für die Kristallorientierungen wurde angenommen, daß das elastische Verhalten linear und von kubischer Kristallsymmetrie ist. Weiterhin wurde vorausgesetzt, daß der Einfluß der Interaktion der Körner auf die makroskopische Materialsymmetrie vernachlässigbar sei, was den Annahmen eines konstanten Deformations- oder Spannungsfeldes entspricht.

Es werden exakte Lösungen angegeben, die eine elastische Isotropie für das zweidimensionale Problem mit zwei Orientierungen und für das dreidimensionale Problem mit zwölf Orientierungen sicherstellen.

Es wird die Generierung von Zufallsorientierungsverteilungen durch gleichverteilte Zufallszahlen und deren Modifikation zur Verringerung der Anisotropie diskutiert. Dazu

werden unterschiedliche Maße zur Beschreibung von Abständen zwischen Orientierungen eingeführt. Ausgehend von der Approximation der Norm der die Anisotropie des Aggregates bestimmenden Tetrade Δ als Funktion der Orientierungszahl werden materialspezifische Angaben zur Abweichung vom isotrop-elastischen Aggregatverhalten möglich.

In dieser Arbeit wird die Symmetrie des elastischen Verhaltens als grundlegend angesehen. Ist die Symmetrie des elastisch-inelastischen Übergangsverhaltens von Interesse, ist zu untersuchen, ab welcher Annäherung an das isotrope elastische Verhalten die Abweichung vom isotropen inelastischen Verhalten akzeptabel ist.

Eine Untersuchung mittels der Methode der Finiten Elemente würde die Berücksichtigung der Interaktion der Körner ermöglichen, erscheint aber nur sinnvoll, wenn Angaben zu den Verteilungsfunktionen der Kornkanten und Korngrenzflächen vorliegen und durch die Elementierung berücksichtigt werden können.

Literatur

- [1] R. Becker and S. Panchanadeeswaran. Crystal rotations represented as Rodrigues vectors. *Textures and Microstructures*, 10:167–194, 1989.
- [2] A. Bertram, T. Böhlke, N. Gaffke, and B. Heiligers. Remarks on the classical bounds for the strain energy density by Voigt und Reuss. *in preparation*, 1998.
- [3] A. Bertram and J. Olschewski. Formulation of anisotropic linear viscoelastic constitutive laws by a projection method. In A. Freed and K. Walker, editors, *High temperature constitutive modelling: Theory and Application*, pages 129–137. ASME, 1991. MD-Vol. 26, AMD-Vol. 121.
- [4] A. Bertram and J. Olschewski. Zur Formulierung anisotroper linear anelastischer Stoffgleichungen mit Hilfe einer Projektionsmethode. *Z. angew. Math. Mech.*, 73(4-5):T401–T403, 1993.
- [5] T. Böhlke and A. Bertram. An isotropy condition for discrete sets of cubic single crystals. *submitted to ZAMM*, 1998.
- [6] T. Böhlke and A. Bertram. Simulation of texture development and induced anisotropy of polycrystals. In *Proceedings of ICES'98*, 1998.
- [7] H. Bunge. *Texture Analysis in Material Science*. Cuviller Verlag Göttingen, 1993.
- [8] S. Cowin. Eigentensors of linear anisotropic elastic materials. *Q. J. Mech. appl. Math.*, 43:15–41, 1990.
- [9] S. Cowin and M. Mehrabadi. On the identification of material symmetry for anisotropic elastic materials. *Q. J. Mech. appl. Math.*, 40:451–476, 1987.
- [10] N. Gaffke and B. Heiligers. *Mitteilungen*, 1998. Institut f. Mathematische Stochastik. Universität Magdeburg.

- [11] P. Germain, Q. Nguyen, and P. Suquet. Continuum thermodynamics. *J. Appl. Mech.*, 50:1010–1020, 1983.
- [12] R. Hill. The elastic behaviour of a crystalline aggregate. *Proc. Phys. Soc. Lond.*, A 65:349–354, 1952.
- [13] R. Hill. On constitutive macro-variables for herogeneous solids at finite strain. *Proc. R. Soc. Lond.*, A326:131–147, 1972.
- [14] F. Hosford. *The Behaviour of Crystals and Textured Polycrystals*. Oxford University Press, 1993.
- [15] A. Krawietz. *Materialtheorie*. Springer-Verlag, 1986.
- [16] I. Müller. *Thermodynamics*. Pitman Advanced Publishing Program, 1985.
- [17] M. Müller. Plastische Anisotropie polykristalliner Materialien als Folge der Texturteilung. In *Fortschr.-Ber. VDI Reihe 18 Nr. 137*. VDI-Verlag, 1993.
- [18] S. Nemat-Nasser and M. Hori. *Micromechanics: Overall Properties of Heterogeneous Materials*, volume 37 of *North-Holland series in applied mathematics and mechanics*. Elsevier Science Publishers B.V, 1993.
- [19] A. Reuss. Berechnung der Fließgrenze von Mischkristallen auf Grund der Plastizitätsbedingung für Einkristalle. *Z. Angew. Math. Mech.*, 9:49–58, 1929.
- [20] W. Voigt. Über die Beziehung zwischen den beiden Elastizitätskonstanten isotroper Körper. *Wied. Ann.*, 38:573–587, 1889.
- [21] M. Šilhavý. *The Mechanics and Thermodynamics of Continuous Media*. Springer, 1997.
- [22] N. Wellerdick-Wojtasik. Theoretische und experimentelle Untersuchungen über die Fließflächenentwicklung bei großen Scherdeformationen. In *Fortschr.-Ber. VDI Reihe 18 Nr. 215*. VDI-Verlag, 1997.

Workshop:

Numerische Methoden der Plastomechanik

Neustadt a. Rbge.

22. - 24. Juni 1998

Leitung: Prof. Dr.-Ing. D. Besdo

Herausgeber:

Institut für Mechanik der Universität Hannover

©1998 Institut für Mechanik
Universität Hannover



Alle Rechte vorbehalten. Auch die fotomechanische Vervielfältigung (Fotokopie, Mikrokopie) bedarf der vorherigen Zustimmung des Herausgebers.