

Kristallografische Textur und kontinuumsmechanische Modellbildung

Habilitationsschrift

von Dr.-Ing. Thomas Böhlke

geb. am 04.10.1968 in Berlin

zur Verleihung des akademischen Grades

Doktor Ingenieur habilitus

(Dr.-Ing. habil.)

genehmigt von der Fakultät für Maschinenbau
der Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg am 13.12.2006

Gutachter

Prof. Dr.-Ing. A. Bertram

Prof. Dr.-Ing. Peter Haupt

Prof. Dr. rer. nat. Bob Svendsen

Inhaltsverzeichnis

| | | |
|----------|--|-----------|
| 1 | Zusammenfassung | 3 |
| 2 | Einleitung | 4 |
| 3 | Grundlagen der Homogenisierung mechanischer Eigenschaften | 7 |
| 3.1 | Homogenisierung kinematischer und dynamischer Größen | 7 |
| 3.2 | Lokale und statistische Beschreibung von Mikrostrukturen | 8 |
| 3.3 | Kristallografische Textur | 9 |
| 3.4 | Diskussion eigener Arbeiten | 11 |
| 3.4.1 | Böhlke, T.: Application of the maximum entropy method in texture analysis, Computational Materials Science, 32, 276–283, 2005 | 11 |
| 3.4.2 | Böhlke, T.; Haus, U.-U.; Schulze, V.: Crystallographic texture approximation by quadratic programming, Acta Materialia, 54, 1359–1368, 2006. | 12 |
| 4 | Homogenisierung elastischer Eigenschaften | 13 |
| 4.1 | Obere und untere Schranken für die effektiven elastischen Eigenschaften | 13 |
| 4.2 | Approximationen der effektiven elastischen Eigenschaften | 16 |
| 5 | Homogenisierung viskoplastischer Eigenschaften | 17 |
| 5.1 | Obere und untere Schranken der effektiven viskoplastischen Eigenschaften | 17 |
| 5.2 | Approximationen der effektiven elastisch-(visko)plastischen Eigenschaften | 18 |
| 5.3 | Diskussion eigener Arbeiten | 20 |
| 5.3.1 | Böhlke, T.: The Voigt bound of the stress potential of isotropic viscoplastic fcc polycrystals, Archive of Mechanics, 56, 6, 423–443, 2004. | 20 |
| 5.3.2 | Böhlke, T.; Bertram, A.; Krempl, E.: Modeling of deformation induced anisotropy in free-end torsion, Int. J. Plast., 19, 1867–1884, 2003. | 20 |
| 5.3.3 | Böhlke, T.: Texture simulation based on tensorial Fourier coefficients, Erscheint in: Comp. Struct., 2006. | 21 |
| 5.3.4 | Böhlke, T.; Risy, G.; Bertram, A.: Finite element simulation of metal forming operations with texture based material models, Modelling Simulation in Materials Science Engineering, 14, 365–387, 2006. | 22 |
| 6 | Schlussfolgerungen | 23 |
| | Literatur | 24 |

1 Zusammenfassung

Für die Berechnung des mechanischen Verhaltens technischer Strukturen ist es von zunehmender Bedeutung, die Mikrostruktur in die Modellierung des Werkstoffverhaltens einzubeziehen. Im Vergleich zu phänomenologischen Materialmodellen geben mikromechanisch fundierte Modelle bessere Vorhersagen für das reale Bauteilverhalten. Die vorliegende Arbeit gibt einen Überblick zum Stand der Forschung auf dem Gebiet der Homogenisierung der mechanischen Eigenschaften polykristalliner Werkstoffe. Der Schwerpunkt der Ausführungen liegt auf der Berücksichtigung der kristallografischen Textur im Rahmen einer kontinuumsmechanischen Modellierung. Die Berücksichtigung kristallographischer Strukturen ist z.B. bei der Simulation von Umformprozessen von Bedeutung. Die Grundlagen der mathematischen Beschreibung von kristallografischen Texturen werden zusammengefasst. Außerdem werden unterschiedlichen Zugänge für die Einbeziehung dieser Texturen in die Bauteilberechnung dargestellt. Eigene Arbeiten werden im Kontext der aktuellen Forschung diskutiert.

For the description of the mechanical behavior of technical structures it is of increasing importance to use micromechanically based material models. Compared to phenomenological material models micromechanically based material models give better predictions for the real structural behavior. This work presents a short overview on the state of the art in the field of the homogenization of mechanical properties of polycrystalline metals. The focus is on the incorporation of the crystallographic texture in the continuum mechanical modeling. This is of importance for the simulation of metal forming operations. The foundations of the mathematical description of crystallographic textures are summarized and different approaches are represented. Works of the author are discussed in the context of the current research.

2 Einleitung

Auf Grund des Zwangs zur Reduktion der Entwicklungszeiten für technische Produkte steigt die Bedeutung der virtuellen Produktabsicherung im Maschinenbau. Dies impliziert wachsende Anforderungen an die Prognosegüte von Simulationen und damit an die Modellierung von Material- und Struktureigenschaften. Die Industrie ist daher dringend darauf angewiesen, dass die komplexen mechanischen, physikalischen, chemischen und biologischen Vorgänge verstanden und berechenbar gemacht werden, die für die Modellierung und Simulation des Werkstoffverhaltens wichtig sind.

Bei der Berechnung des mechanischen Verhaltens von technischen Strukturen und Werkstoffen werden unterschiedliche mathematische Näherungsmethoden verwendet. Typische Beispiele sind die Finite-Element-Methode (Hughes, 1987; Crisfield, 1991; Bathe, 1996; Simo und Hughes, 1997; Zienkiewicz und Taylor, 2000; Belytschko et al., 2000; Wriggers, 2000), die Finite-Volumen-Methode (Versteeg und Malalasekera, 1995) und die Randelemente-Methode (Wrobel, 2002a,b). Die genannten Methoden werden zur Lösung von Anfangswert-, Randwert- oder Anfangs-Randwertproblemen verwendet.

Im Maschinenbau ist die Finite-Element-Methode bei der Bauteilauslegung seit einigen Jahren die wichtigste Simulationsmethode. Die Finite-Element-Methode basiert auf der Raum- und Zeit-Diskretisierung der schwachen Formulierung der kontinuumsmechanischen oder kontinuumsthermodynamischen Bilanzgleichungen. Diese Bilanzgleichungen, die selbst materialunabhängig sind, werden durch die materialabhängige Spezifikation des Spannungstensors und im thermodynamischen Fall der inneren Energie und des Wärmeflussvektors der numerischen Behandlung zugänglich gemacht. In einfachen Fällen sind diese materialabhängigen Größen Funktionen der kinematischen Variablen. Beim linear elastischen Material ist der Spannungstensor beispielsweise eine lineare Funktion des symmetrischen Anteils des Verschiebungsgradienten (Hooke'sches Gesetz). Grundlegende Darstellungen der Kontinuumsmechanik finden sich in den folgenden Arbeiten: Truesdell und Noll (1965); Cristescu und Suliciu (1982); Müller (1985); Krawietz (1986); Maugin (1992); Šilhavý (1997); Haupt (2000); Holzapfel (2000); Liu, I.-S. (2002); Bertram (2005).

Bei der Modellierung des Materialverhaltens realer Werkstoffe reicht eine solche funktionelle Abhängigkeit der dynamischen Größen von den kinematischen Größen meistens nicht aus. Als Beispiel sei das elastisch-(visko)plastische Materialverhalten genannt. Bei diesem ist die momentane Spannung keine Funktion der momentanen Deformation sondern ein Funktional des Deformationsprozesses (Krawietz, 1986; Haupt, 2000; Bertram, 2005). Diese Wegabhängigkeit der Spannungen wird häufig auf der Basis innerer oder versteckter Variablen modelliert (Coleman und Gurtin, 1967; Rice, 1971; Lubliner, 1973; Hackl, 1997), die den Zustand des Materials und dessen Vorgeschichte beschreiben sollen. Bei einem elastisch-(visko)plastischen Material

sind die inneren Variablen im einfachsten Fall durch den plastischen Anteil des Verzerrungstensors und durch die akkumulierte plastische Vergleichsdehnung gegeben. Für die inneren Variablen werden materialspezifische gewöhnliche Differentialgleichungen oder Algebro-Differentialgleichungen formuliert (Krawietz, 1986; Haupt, 2000; Bertram, 2005).

Die Verwendung von Differentialgleichungen zur Beschreibung des Materialzustandes erschwert die Lösung des diskretisierten Feldproblems erheblich. Zum einen steigt der Rechenaufwand durch die Notwendigkeit der numerischen Zeitintegration der inneren Variablen. Zum anderen sind bei der Linearisierung der dynamischen Größen in den kinematischen auf Grund der Anwendung eines Zeitintegrationsverfahrens neben materialspezifischen auch algorithmische Abhängigkeiten zu beachten. Diese Problematik wird unter dem Begriff algorithmisch konsistente Linearisierung zusammengefasst (Simo und Hughes, 1997).

Das mechanische Verhalten mehrphasiger und defektbehafteter Werkstoffe ist auf Grund der Interaktion der Phasen und Defekte außerordentlich schwer zu modellieren und zu simulieren. Phänomenologische Ansätze sind oft nicht geeignet, das komplexe Materialverhalten dieser Materialien qualitativ richtig zu beschreiben. Mischungstheorien sind nur bei einem geringen Unterschied der lokalen Materialeigenschaften in der Lage, für den Ingenieur akzeptable Vorhersagen des effektiven Materialverhaltens zu liefern. Da phänomenologische Konzepte der Kontinuumsmechanik zunehmend an ihre Grenzen stoßen, werden in den letzten Jahren die mikrostrukturellen Eigenschaften technischer Materialien mehr und mehr in kontinuumsmechanische Betrachtungen einbezogen (Beran, 1968; Krawietz, 1986; Adams und Olson, 1998; Nemat-Nasser und Hori, 1999; Gambin, 2001; Torquato, 2002; Lubarda, 2002).

In dieser Arbeit wird die Homogenisierung der mechanischen Eigenschaften mikrostrukturierter polykristalliner Werkstoffe diskutiert, wobei der Schwerpunkt auf der Beschreibung kristallografischer Texturen im Rahmen einer kontinuumsmechanischen Modellierung liegt. Unter effektiven mechanischen Eigenschaften sind hier die elastischen und die (visko)plastischen Eigenschaften des Materials zu verstehen. Unter Homogenisierung versteht man im Allgemeinen die Berechnung des konstitutiven Zusammenhangs von makroskopischen Feldgrößen - wie z.B. Spannung und Verzerrung - in Abhängigkeit von Mikrostruktur und Materialeigenschaften auf der Mikroebene, die als gegeben vorausgesetzt werden.

Im Rahmen der genannten Materialklasse fasst man unter dem Begriff Mikrostruktur meistens folgende Eigenschaften des Gefüges zusammen: Orientierungsverteilung des Kristallgitters (Bunge, 1965; Roe, 1965; Bunge, 1993; Kocks et al., 1998), die Gefügemorphologie (Adams et al., 1994; Adams und Olson, 1998), Verfestigungszustand der Körner (Mecking, 2001; Kocks und Mecking, 2003; Böhlke et al., 2005, 2006b).

Weitere Charakteristika der Mikrostruktur können z.B. durch die Verteilung von Rissen, Poren, Lunkern und Einschlüssen gegeben sein. Der Begriff Mikroebene bezieht sich auf die Ebene der Körner. Eine charakteristische Länge dieser Ebene ist der mittlere Korndurchmesser. Die Bezeichnung dieser Gefügebene ist nicht eindeutig. Sie wird oftmals auch als Mesoebene bezeichnet. Die Bezeichnung Mikroebene wird dann für die Ebene verwendet, auf der sich die Interaktion einzelner Versetzungen vollzieht. Unter Makroebene wird generell die Ebene verstanden, auf der die Bauteilberechnungen im Maschinenbau vorgenommen werden.

Die Einbeziehung der Mikrostruktur kann generell auf zwei Arten erfolgen. Im einfacheren Fall geht man davon aus, dass sich die Mikrostruktur während des Deformationsprozesses nicht oder nur in vernachlässigbarer Weise ändert. In der Regel ist aber der Einfluss der makroskopischen Deformationsgeschichte auf die Mikrostruktur nicht zu vernachlässigen und die Evolution der Mikrostruktur muss modelliert werden. Die Mikrostruktur ist dann ebenfalls ein Funktional des Deformationsprozesses. Sie kann in vielen Fällen durch innere Variablen beschrieben werden, wobei diese Variablen eine mikromechanische Interpretation haben sollten, um mikrostrukturelle Aspekte des Werkstoffes abbilden zu können.

Um die beiden Zugänge der Beschreibung des Materialverhaltens mit Hilfe von inneren Variablen voneinander abgrenzen zu können, kann als Unterscheidungsmerkmal dienen, ob die Einführung der inneren Variablen im Wesentlichen phänomenologischen oder mikromechanischen Argumenten folgt. Eine scharfe Trennung ist aber im Allgemeinen nicht möglich, da auch die einfachste Plastizitätstheorie Veränderungen der Versetzungsstruktur und damit der Mikrostruktur beschreibt und eine mikromechanisch fundierte Theorie in der Regel nicht ohne phänomenologische Argumente auskommt.

Im Folgenden wird Stand der Forschung in drei speziellen Teilgebieten der Mikro-Makro-Problematik dargestellt. Eigene Beiträge, die sich diesen Teilgebieten zuordnen lassen, werden jeweils im Kontext diskutiert. Das erste Teilgebiet ist die mathematische Beschreibung von Mikrostrukturen, wobei der Schwerpunkt auf der statistischen Beschreibung liegt. Das zweite Teilgebiet umfasst die Homogenisierung der Eigenschaften heterogener, linear elastischer Materialien. Das dritte Teilgebiet ist die Homogenisierung viskoplastischer Materialeigenschaften. Die Arbeit schließt mit einer Zusammenfassung der momentanen Trends in der Forschung.

3 Grundlagen der Homogenisierung mechanischer Eigenschaften

3.1 Homogenisierung kinematischer und dynamischer Größen

Im Folgenden werden quasistatische mechanische Prozesse auf der Makroebene und auf der Mikroebene betrachtet. Es wird davon ausgegangen, dass die Kontinuumstheorie einfacher Stoffe zur Beschreibung des Materialverhaltens auf der Makroebene und auf der Mikroebene verwendet werden kann. Dies ist bei den meisten Ingenieur Anwendungen der Fall. Das Ziel der Homogenisierungsmethoden im Rahmen der Kontinuumsmechanik besteht darin, die makroskopischen Spannungs- und Verformungsmaße in Abhängigkeit von der Mikrostruktur und vom mikroskopischen mechanischen Verhalten zu verknüpfen. Dies setzt voraus, dass die makroskopischen Spannungs- und Verformungsmaße definiert werden. Das wird im Folgenden für den Sonderfall inhomogener Materialien ohne Risse und Poren diskutiert, wobei zudem Phasenübergänge ausgeschlossen werden.

Die meisten Homogenisierungsmethoden basieren auf dem Satz von Hill (Hill, 1972, 1985), der besagt, dass der Volumenmittelwert der Spannungsleistung gleich dem Skalarprodukt der Volumenmittelwerte von Spannungstensor und Verzerrungsgeschwindigkeitstensor ist. Der Volumenmittelwert wird für ein Repräsentatives Volumenelement (RVE) berechnet. Ein RVE ist entweder ein statistisch repräsentatives Volumen der Mikrostruktur oder - bei einer periodischen Mikrostruktur - das periodische Elementargebiet. Die Bedeutung des Satzes liegt darin begründet, dass die mittlere Spannungsleistung im Aggregat exakt aus den Mittelwerten des Spannungstensors und des Verzerrungsgeschwindigkeitstensors berechnet werden kann. Der Satz von Hill gilt unabhängig vom konkreten Materialverhalten, wenn eine der folgenden Aussagen erfüllt ist (Krawietz, 1986; Nemat-Nasser und Hori, 1999; Torquato, 2002; Lubarda, 2002): a) Die Deformation auf dem Rand des RVEs ist gleich der mittleren Deformation, d.h. die Verschiebungsfuktuationen auf dem Rand des RVEs sind null. b) Die Spannungsfuktuationen (Spannungsvektor) auf dem Rand des RVEs sind null. c) Die Verschiebungsfuktuationen auf dem Rand des RVEs sind periodisch und die Spannungsfuktuationen sind antiperiodisch. d) Der Satz gilt für ergodische Materialien im Grenzfall eines unendlich großen Volumens.

Der Satz von Hill impliziert, dass die Fluktuation des Spannungstensors und der Verzerrungsgeschwindigkeit im Mittel orthogonal zueinander sind. Für ein linear elastisches Material folgt aus diesem Satz, dass die zweifache makroskopische Formänderungsenergie exakt durch das Skalarprodukt der Volumentmittelwerte von Spannungstensor und infinitesimalen Verzerrungstensor gegeben ist.

Auf Grund dieser Leistungsäquivalenz werden unter den oben genannten Voraussetzun-

gen die Volumenmittelwerte des Cauchy'schen Spannungstensors und des infinitesimalen Verzerrungstensors als effektive Spannungs- und Dehnungsmaße betrachtet. Im Fall großer Verformungen ist zu beachten, dass die Art der Mittelwertbildung und die zu mittelnden Größen verändert werden müssen. Als effektive Spannung wird meistens die über das anfängliche Volumen des Körpers gemittelte erste Piola-Kirchhoff'sche Spannung verwendet. Als effektives Deformationsmaß dient der ebenfalls in der Bezugsplatzierung über das Volumen gemittelte Deformationsgradient. Von grundsätzlicher Bedeutung ist die Eigenschaft, dass die zuvor genannten Mittelwerte aus den Randdaten des RVEs berechnet werden können (Torquato, 2002; Lubarda, 2002). Dadurch können die effektiven Größen als observabel betrachtet werden.

3.2 Lokale und statistische Beschreibung von Mikrostrukturen

Neben der Definition der effektiven dynamischen und kinematischen Größen ist die mathematische Beschreibung der Mikrostruktur von grundsätzlicher Bedeutung. Dabei sind zweierlei Dinge zu leisten. Zum einen muss die Mikrostruktur lokal beschrieben werden, zum anderen muss ausgehend von der lokalen Beschreibung eine statistische Beschreibung der Mikrostruktur gegeben werden.

Die lokale Beschreibung der Mikrostruktur erfolgt mit Hilfe einer Indikatorfunktion. Bei mehrphasigen Werkstoffen wird jeder Phase eine Indikatorfunktion zugeordnet. Diese hat dort den Wert eins, wo das entsprechende Material vorliegt, und ist ansonsten null (Torquato, 2002). Bei einphasigen aber polykristallinen Materialien ordnet man jeder Kristallorientierung eine Indikatorfunktion zu (Etingof und Adams, 1993; Adams und Olson, 1998), worauf im folgenden Abschnitt genauer eingegangen wird.

Um zu einer statistischen Beschreibung der Mikrostruktur zu kommen, führt man Mittelwerte der Indikatorfunktion ein. Die Mittelwerte der Indikatorfunktion entsprechen den Volumenfraktionen des zur Indikatorfunktion gehörenden Materials oder der zugehörigen Kristallorientierung. Durch die Mittelwerte der Indikatorfunktion ist die einfachste Beschreibung der Mikrostruktur, die basierend auf Volumenmittelwerten, gegeben. Da bei der Berechnung der Volumenfraktionen die morphologische Information verlorengelht, sind Abschätzungen des effektiven Materialverhaltens, die allein auf dieser Volumenbeschreibung basieren, von geringer Genauigkeit und nur in Sonderfällen verwendbar. Trotz ihrer geringen Genauigkeit werden diese Mischungstheorien wegen ihrer Einfachheit häufig verwendet. Typische Beispiele für diese Mischungstheorien sind die Abschätzung der linear elastischen Eigenschaften nach Voigt (1910) und Reuss (1929) sowie die näherungsweise Bestimmung der starr-viskoplastischen Eigenschaften nach Taylor (1938) und Hutchinson (1976).

Die höheren Momente der Indikatorfunktionen ergeben die

N-Punkt-Korrelationsfunktionen der Phasen oder Kristallorientierungen an (Beran, 1968; Torquato, 2002). Diese Momente enthalten die morphologische Information des Gefüges. Je mehr höhere Momente berücksichtigt werden, desto genauer wird die Gefügestruktur beschrieben. Liegen nur experimentelle Informationen für die Volumenfraktionen der Phasenanteile oder Orientierungen vor, so können höhere Korrelationsfunktionen unter Zuhilfenahme spezieller Annahmen mittels der Volumeninformation geschätzt werden (Etingof und Adams, 1993).

Ausgehend von den N-Punkt-Korrelationsfunktionen können für die Homogenisierungsmethoden grundlegende Begriffe eingeführt werden (Torquato, 2002). Von einer statistisch homogenen Mikrostruktur spricht man, wenn die Korrelationsfunktionen translationsinvariant sind. Eine statistische Isotropie liegt vor, wenn die Korrelationsfunktionen außerdem rotationsinvariant sind. Über das Abklingverhalten höherer Korrelationsfunktionen lassen sich Korrelationslängen definieren. Im Folgenden wird schwerpunktmäßig auf die Beschreibung der Orientierungsverteilung von Einkristallen in einem einphasigen Polykristall, d.h. auf die kristallografische Textur, eingegangen.

3.3 Kristallografische Textur

Einphasige polykristalline Materialien unterscheiden sich auf der Mikroebene zwischen den materiellen Punkten durch die Kristallorientierung und durch den Verfestigungszustand. Nach einer Wärmebehandlung des Gefüges kann oft von einem homogenen Verfestigungszustand im Aggregat ausgegangen werden. In diesem Fall ist die Verteilung der Kristallorientierungen neben den Einkristalleigenschaften die entscheidende Mikrostrukturgröße, mit deren Hilfe das makroskopische Materialverhalten vorhergesagt werden soll. Wenn die höheren Korrelationsfunktionen der Kristallorientierung näherungsweise isotrop sind, dann repräsentiert die Orientierungsverteilungsfunktion (OVF), d.h. die 1-Punkt-Korrelationsfunktion, den für das effektive Materialverhalten dominanten Anteil der Mikrostruktur.

Die Orientierung eines Einkristalls im Euklidischen Raum kann durch die Angabe eines Referenzkristalls und eines eigentlich orthogonalen Tensors festgelegt werden. Die Orientierung des Kristalls berechnet man durch Rotation des Referenzkristalls mit dem orthogonalen Tensor. In vielen Fällen wird die Kristallorientierung mit dem orthogonalen Tensor identifiziert. Orthogonale Tensoren besitzen im dreidimensionalen Raum drei Freiheitsgrade, die den drei Rotationsfreiheitsgraden eines starren Körpers im dreidimensionalen Raum entsprechen. Es werden unterschiedliche Parametrisierungen von orthogonalen Tensoren in der Literatur verwendet. Ein Vergleich der Parametrisierungen wird von Becker und Panchanadeeswaran (1989) gegeben. Häufig werden Eulerwinkel eingeführt. Anwendung finden auch die Rodrigues-Darstellung, die Quaternionen-Darstellung

und die Darstellung mittels Drehachse und Drehwinkel.

Die Parametrisierung der Kristallorientierungen überträgt sich auf den Raum der orthogonalen Tensoren. Um zu einer Volumenbeschreibung der Verteilung von Kristallorientierungen zu kommen und damit zur Orientierungsverteilungsfunktion geht man folgendermaßen vor: Zunächst wird der Raum der orthogonalen Tensoren - kurz der Orientierungsraum - basierend auf einer speziellen Parametrisierung in Boxen eingeteilt. Wird jeder Box eine Indikatorfunktion zugeordnet, so lässt sich jede Mikrostruktur eines homogen verfestigten, einphasigen Polykristalls mathematisch durch diese ortsabhängigen Indikatorfunktionen beschreiben. Integriert man die Indikatorfunktion über das RVE, so erhält man die Volumenfraktion der zugehörigen Kristallorientierung. Nach einem Grenzübergang der Zahl der Boxen nach Unendlich erhält man die Orientierungsverteilungsfunktion OVF (Etingof und Adams, 1993; Adams und Olson, 1998). Ein analoges Vorgehen bei der Bestimmung der höheren Momente führt zur Definition der N-Punkt-Korrelationsfunktionen der Kristallorientierung. Die 2-Punkt-Korrelationsfunktion heißt in der Literatur auch Orientierungs-Kohärenzfunktion (Adams et al., 1987; Adams und Olson, 1998). Ein Überblick zu den unterschiedlichen Techniken der experimentellen Bestimmung der Korrelationsfunktionen geben z.B. die Arbeiten von Kocks et al. (1998) und Adams und Olson (1998).

Die OVF ist auf dem Orientierungsraum definiert und spezifiziert den Volumenanteil der Kristalle mit einer speziellen Orientierung. Die OVF ist die Wahrscheinlichkeitsdichte der Kristallorientierungen. In Folge dieser Eigenschaft ist die OVF nicht-negativ und normiert, d.h. das Integral der OVF über den Orientierungsraum ist eins. Da die Kristallorientierungen in der Literatur unterschiedlich parametrisiert werden, werden auch unterschiedliche Parametrisierungen der OVF verwendet. Ein Vergleich der Parametrisierungen wird von Kocks et al. (1998) gegeben.

Auf der OVF basiert die einfachste Beschreibung der Mikrostruktur von Polykristallen. Informationen zur Morphologie des Gefüges sind in der OVF nicht enthalten. Dennoch können viele Mikro-Makro-Wechselwirkungen zumindest qualitativ mit Hilfe der OVF beschrieben werden. Mit der OVF lassen sich Orientierungsmittelwerte oder Erwartungswerte von physikalischen Größen berechnen. Diese Orientierungsmittelwerte werden dadurch berechnet, dass man die zu mittelnde physikalische Größe analog zum Orientierungsraum und zur OVF parametrisiert und dann mit Hilfe der OVF durch Integration über den Orientierungsraum den Mittelwert der Größe berechnet. Ein solcher Orientierungsmittelwert entspricht einem Volumenmittelwert über das RVE. Der Vorteil der Verwendung eines Orientierungsmittelwertes im Vergleich zur Verwendung eines Volumenmittelwertes besteht darin, dass man im zweiten Fall die genaue Gefügestruktur, d.h. die vollständige morphologische Information, benötigt.

Die OVF enthält sowohl die Information bezüglich der Probensymmetrie als auch

die bezüglich der Kristallsymmetrie (Bunge, 1993). Dies gilt natürlich nur für die Symmetrien, die im Rahmen einer Volumenbeschreibung der Mikrostruktur detektierbar sind. Im Falle eines Aggregates mit orthotroper Probensymmetrie, das aus Einkristallen mit kubischer Symmetrie besteht, liegen vier Symmetrietransformationen bezüglich der Probensymmetrie und 24 Symmetrietransformationen bezüglich der Kristallsymmetrie vor. Symmetrietransformationen reduzieren den Bereich des Orientierungsraums, auf dem die OVF zu deren vollständiger Bestimmung bekannt sein muss. Dieser Bereich heißt Elementargebiet. Im eben genannten Fall umfasst das Elementargebiet $1/96$ des Orientierungsraums (Hansen et al., 1978).

3.4 Diskussion eigener Arbeiten

3.4.1 Böhlke, T.: Application of the maximum entropy method in texture analysis, *Computational Materials Science*, **32**, 276–283, 2005

Es existieren unterschiedliche Darstellungen der OVF. Die klassische Darstellung basiert auf generalisierten sphärischen Funktionen und wurde von Bunge (1965) und Roe (1965) eingeführt. Später führten Adams et al. (1992) und Guidi et al. (1992) eine tensorielle Fourierreihen-Darstellung der OVF ein (siehe auch, Zheng und Fu, 2001a,b). Beide Darstellungen sind mathematisch äquivalent. Der Vorteil der tensoriellen Darstellung liegt darin, dass sie „koordinatenfrei“ ist. Deshalb können die tensoriellen Texturkoeffizienten als mikromechanisch definierte innere Variablen, die die statistischen Momente der Orientierungsverteilung repräsentieren, Eingang in eine kontinuumsmechanische Modellierung finden (Böhlke und Bertram, 2001b, 2003; Böhlke et al., 2003). Diese Art von Strukturensoren unterscheidet sich grundsätzlich von der üblichen Art von Struktur- oder Anisotropieensoren, die durch die Theorie der isotropen Tensorfunktionen motiviert ist (Boehler, 1987; Boehler et al., 1994b,a; Zheng, 1994; Svendsen, 1994). Der Vorteil der mikromechanisch definierten Momentensensoren besteht neben der klaren Definition und Interpretierbarkeit darin, dass sie die durch die Mikrostruktur induzierte makroskopische materielle Symmetrie auf natürliche Weise reflektieren. Im Falle einer kubischen Kristallsymmetrie ist der erste nicht verschwindende tensorielle Texturkoeffizient von vierter Stufe (Böhlke, 2005a). Dieser Tensor kann alle durch Tensoren vierter Stufe darstellbaren Symmetrien wiedergeben. Im triklinen Fall hat der Tensor auf Grund seiner Irreduzibilität neun unabhängige Komponenten. Im Falle nicht trivialer Symmetrietransformationen reduziert sich die Zahl der unabhängigen Komponenten. Im isotropen Fall ist der Tensor null (Böhlke, 2005a).

Ein Problem, das bei der Verwendung beider Darstellungsformen der OVF auftritt, ist das der Schätzung der OVF auf der Grundlage einer endlichen Anzahl von Texturkoeffizienten. Dieses Problem wurde im Rahmen einer tensoriellen Darstellung

der OVF von Böhlke (2005a) untersucht. Die Schätzung der OVF muss konsistent in dem Sinne sein, dass sie nicht-negativ und normiert ist. Die Bedingung der Nicht-Negativität schließt aus, dass die Fourierreihe nach einer endlichen Anzahl von Reihengliedern abgebrochen wird. Das Problem, eine Verteilungsfunktion basierend auf einer endlichen Anzahl von Momenten der Verteilung zu schätzen, wird üblicherweise Momenten-Problem genannt (Wu, 1997). Die Schätzung der Verteilungsfunktion im oben genannten Sinne ist nicht eindeutig. Eine Möglichkeit, die Abschätzung eindeutig zu machen, besteht darin, die informationstheoretische Entropie zu maximieren. Die Methode der Entropie-Maximierung wurde von Jaynes (1957a,b) in die Statistische Mechanik eingeführt. Ein Überblick zu dieser Methode wird von Wu (1997) gegeben. In der Arbeit von Böhlke (2005a) werden die Grundlagen einer tensoriellen Darstellung der OVF für den Sonderfall einer kubischen Kristallsymmetrie zusammengefasst. Das Momentenproblem wird formuliert und im Kontext einer tensoriellen Darstellung der OVF gelöst. Die Methode wird numerisch umgesetzt und an Hand einer Fasertextur exemplifiziert.

3.4.2 Böhlke, T.; Haus, U.-U.; Schulze, V.: Crystallographic texture approximation by quadratic programming, Acta Materialia, 54, 1359–1368, 2006.

Neben den beiden eben diskutierten Darstellungsformen der OVF mittels Reihen hat sich eine weitere bewährt. Viele kristallografische Texturen lassen sich durch eine relativ kleine Anzahl von Texturkomponenten darstellen (Wasserman und Grewen, 1962; Bunge, 1993; Kocks et al., 1998). Eine Texturkomponente ist eine Kristallorientierung, für die die OVF ein lokales Maximum aufweist. In der Nachbarschaft dieses Maximums fällt der Wert der Orientierungsdichte in isotroper oder anisotroper Weise ab. In der Literatur werden unterschiedliche Modellfunktionen zur Beschreibung der zu einer Texturkomponente gehörigen OVF verwendet. Eine häufig genutzte Modellfunktion ist die Mises-Fisher-Verteilungsfunktion (Mardia und Jupp, 2000), die sich dadurch auszeichnet, dass sie eine Zentralverteilung ist und unter allen Zentralverteilungen mit dem gleichen Orientierungsmittelwert die maximale Entropie hat. Die Mises-Fisher-Verteilungsfunktion entspricht in gewisser Hinsicht einer Normalverteilung im Euklidischen Raum (Schaeben, 1992, 1994). Von Matthies (1980) wurde die Mises-Fisher-Verteilung im Rahmen der Analyse kristallografischer Texturen eingeführt (siehe auch Matthies et al., 1988). Eschner (1993) und Eschner und Fundenberger (1997) diskutieren die Verwendung von anisotropen Verteilungsfunktionen. Ein Überblick zu Verteilungsfunktionen auf Orientierungsräumen unterschiedlichen Typs lässt sich in der Arbeit von Mardia und Jupp (2000) finden.

Sowohl für das Verständnis von Mikrostrukturen als auch für deren Berücksichtigung in kontinuumsmechanischen Modellen ist eine Approximation der OVF mit Hilfe von Texturkomponenten oder Einzelkomponenten wichtig. Dieses Problem wurde detailliert

von Kocks et al. (1991) und Toth und Van Houtte (1992) untersucht. Der Ansatz von Kocks et al. (1991) basiert auf der Verwendung von Zufallsorientierungen, denen durch ein iteratives Verfahren Gewichte zugeordnet werden. In der Arbeit von Toth und Van Houtte (1992) werden zwei Approximationsmethoden diskutiert und verglichen. Eine Methode (STAT-Methode) basiert auf der Verwendung einer kumulativen Verteilungsfunktion. Die zweite Methode (LOD-Methode) basiert auf einem regelmäßigen Gitter auf dem Orientierungsraum und einem Transfer der Intensität der OVF an Gitterpunkten nach einem Algorithmus, der dazu führt, dass die OVF durch eine geringe Anzahl von Texturkomponenten approximiert wird. Die Autoren zeigen, dass die LOD-Methode besser geeignet ist für stark texturierte Materialien und die STAT-Methode für schwach texturierte. Andere Methoden zur Identifikation von Texturkomponenten wurden von Helming et al. (1994), Delannay et al. (2000), Cho et al. (2004) und Tarasiuk et al. (2004) diskutiert. Allen oben genannten Zugängen ist gemeinsam, dass die Güte der Approximation nicht oder nur indirekt dargestellt werden kann.

Die Arbeit von Böhlke et al. (2006a) widmet sich dem Problem der Identifikation der zur Approximation einer OVF notwendigen Anzahl von Texturkomponenten und der Angabe von Fehlerschranken. Die Approximation der OVF wird dabei durch Superposition einer endlichen - nach Möglichkeit kleinen - Anzahl von Texturkomponenten gewonnen, die den Orientierungsraum gleichmäßig belegen und unterschiedliche Gewichte besitzen. Die Approximation der Textur wird somit auf die Bestimmung der nicht-negativen Gewichte verlegt. Nach einer Definition des Abstandes zwischen der experimentellen OVF und der Modell-OVF wird das zugehörige Optimierungsproblem formuliert. Als Nebenbedingung ist die Nicht-Negativität und die Normierung der Gewichte zu gewährleisten. Der erste Typ der Nebenbedingung entspricht einer Ungleichungsnebenbedingung. Es wird gezeigt, dass dieses Problem äquivalent zu einem gemischt-ganzzahligen quadratischen Optimierungsproblem (Mixed Integer Quadratic Programming Problem) ist. Es wird mittels einer kommerziellen Optimierungssoftware für drei experimentelle Texturen gelöst. Das Neue an dem Zugang ist die Verfügbarkeit von Fehlerschranken der Approximation als Funktion der Anzahl der zugelassenen Texturkomponenten.

4 Homogenisierung elastischer Eigenschaften

4.1 Obere und untere Schranken für die effektiven elastischen Eigenschaften

Das generalisierte Hooke'sche Gesetz (Gurtin, 1972; Forte und Vianello, 1996) ist eine physikalisch lineare Relation zwischen dem Cauchy'schen Spannungstensor und dem infinitesimalen Verzerrungstensor. Es beschreibt das anisotrope und das isotrope linear

elastische Verhalten von Festkörpern bei kleinen Verformungen. Für das Hooke'sche Gesetz sind unterschiedliche Notationen - sowohl tensorielle als auch vektorielle - eingeführt worden (Voigt, 1889; Federov, 1968; Cowin, 1989). In der Arbeit von Böhlke und Brüggemann (2001) werden unterschiedliche Darstellungen des Hooke'schen Gesetzes diskutiert, wobei insbesondere auf die grafische Darstellung von Anisotropien eingegangen wird. Das Hooke'sche Gesetz ist eine der ältesten und am besten verstandenen konstitutiven Gleichungen der Kontinuumsmechanik. Es wird zur Berechnung des elastischen Verhaltens technischer Strukturen in vielen Bereichen des Maschinenbaus und des Bauingenieurwesens eingesetzt. In den meisten Fällen wird die isotrope Variante angewendet. In den letzten Jahrzehnten werden aber auch zunehmend anisotrope Varianten des Hooke'schen Gesetzes in Berechnungen einbezogen.

Polykristalline metallische Materialien haben in der Regel effektive elastische Eigenschaften, die sich von denen der Kristallite unterscheiden. So kann z.B. das Verhalten der Kristallite stark anisotrop, das Verhalten des Aggregates aber isotrop sein. Dies ist der Fall, wenn alle Korrelationsfunktionen der Kristallorientierung isotrop sind. Will man die effektiven elastischen Eigenschaften des Polykristalls aus den elastischen Eigenschaften der Kristallite berechnen, so muss man die Mikrostruktur in die Betrachtung einbeziehen und die elastischen Eigenschaften homogenisieren. Die Homogenisierung elastischer Eigenschaften ist im Vergleich zu der anderer mechanischer Eigenschaften auf Grund der Linearität des Problems mathematisch am weitesten durchdrungen und am besten verstanden. In diesem Abschnitt werden die unterschiedlichen Zugänge bei der Homogenisierung elastischer Eigenschaften diskutiert und verglichen. Zuerst wird dabei auf die Berechnung von Schranken für das effektive elastische Verhalten eingegangen.

Schranken für die linear elastischen Eigenschaften können hergeleitet werden, sofern das elastische Verhalten hyperelastisch ist. Ausgehend von dem Prinzip der maximalen elastischen Formänderungsenergie für heterogene Materialien (Torquato, 2002) kann eine obere Schranke für die elastische Formänderungsenergie konstruiert werden. Diese erhält man für den Sonderfall, dass die in dem Prinzip verwendete Testfunktion der effektiven Deformation gleichgesetzt wird. Dies ist die einfachste Wahl für die Testfunktion, deren Volumenmittelwert gleich der mittleren Deformation sein muss. Der effektive Steifigkeitstensor ergibt sich als Volumenmittelwert der Steifigkeiten im Aggregat. Diese Näherung wurde zuerst von Voigt (1910) verwendet. Solche Volumenmittelwerte können, wie oben ausgeführt wurde, in Mittelwerte über den Orientierungsraum umgerechnet werden, für deren Berechnung allein die OVF benötigt wird. Es ist anzumerken, dass diese Schranke für die elastische Formänderungsenergie gilt und nicht zwangsläufig für die Steifigkeiten. Schranken für einige elastischen Konstanten können aus dieser energetischen Bedingung abgeleitet werden. Im Falle eines isotropen elastischen Verhaltens erhält man obere Schranken für den effektiven Kompressionsmodul und den effektiven Schermodul.

Analog lässt sich ausgehend von dem Prinzip der maximalen elastischen Komplementärenergie für heterogene Materialien (Torquato, 2002) eine obere Schranke für die Komplementärenergie konstruieren. Der oberen Schranke für die Komplementärenergie entspricht eine untere Schranke der Formänderungsenergie. Die obere Schranke für die Komplementärenergie erhält man für den Sonderfall, dass die bei der Formulierung des Prinzips verwendete Testfunktion mit der effektiven Spannung gleichgesetzt wird. Dies ist die einfachste Wahl für die Testfunktion, deren Volumenmittelwert gleich der mittleren Spannung sein muss. Der effektive Nachgiebigkeitstensor ergibt sich als Volumenmittelwert der Nachgiebigkeiten im Aggregat. Diese Näherung wurde zuerst von Reuss (1929) verwendet. Dieser Volumenmittelwert kann ebenfalls in einen Mittelwert über den Orientierungsraum umgerechnet werden.

Die Schranken nach Voigt und Reuss sind die einfachsten Schranken für die effektiven elastischen Eigenschaften, da sie allein auf der Verwendung der 1-Punkt-Korrelationsfunktion der Mikrostruktur beruhen. Unterscheiden sich die elastischen Eigenschaften auf der Mikroebene signifikant von Ort zu Ort, dann liegen die beiden Schranken sehr weit auseinander. Ist der Phasenkontrast dagegen gering, so ergeben die Schranken brauchbare Abschätzungen des effektiven Verhaltens. Will man das reale effektive elastische Verhalten weiter einschränken, dann sind die höheren Korrelationsfunktionen zu verwenden.

Genauere Schranken für das effektive elastische Verhalten sind die Hashin-Shtrikman(HS)-Schranken (Hashin und Shtrikman, 1962a,b), die von Willis (1977, 1983) theoretisch fundiert wurden. Sie werden aus dem HS-Variationsprinzip abgeleitet, das für die Spannungspolarisation formuliert wird und das auf der Einführung eines homogenen Vergleichsmaterials beruht. Im Gegensatz zu den Schranken von Voigt und von Reuss basieren diese Schranken auf der Lösung eines Randwertproblems. Diese Lösung wird mit Hilfe Greenscher Funktionen und der Eshelby-Lösung hergestellt (Eshelby, 1957; Mura, 1987). Durch geeignete Wahl der Steifigkeit des Vergleichsmaterials erhält man jeweils eine obere oder eine untere Schranke für die effektiven elastischen Eigenschaften. Die HS-Schranken beziehen nur die 2-Punkt-Korrelationsfunktion ein. Diese Funktion wird mit Hilfe der 1-Punkt-Korrelationsfunktion geschätzt, so dass zur Berechnung der HS-Schranken nur die Volumenfraktionen der Mikrostruktur bekannt sein müssen. Diese Abschätzung basiert auf der Annahme, dass die über das Abklingverhalten der 2-Punkt-Korrelationsfunktion definierte Korrelationslänge null ist.

In ähnlicher Weise lassen sich höhere Schranken konstruieren, die z.B. die 3-Punkt-Korrelationsfunktion in die Berechnung einbeziehen. Die Berechnung dieser Schranken ist außerordentlich kompliziert. Deren Verwendung kann aber notwendig sein, wenn der Phasenkontrast so groß ist, dass die HS-Schranken weit auseinander liegen. Der Vorteil der Berechnung von Schranken liegt darin, dass ausgehend von der

zur Verfügung stehenden mikrostrukturellen Information, Angaben zum Streubereich des realen elastischen Materialverhaltens gemacht werden. Die Einbeziehung von weiteren Information zur Mikrostruktur erlaubt prinzipiell die weitere Eingrenzung dieses Bereiches.

4.2 Approximationen der effektiven elastischen Eigenschaften

Neben der eben diskutierten Klasse der Schranken für das elastische Verhalten gibt es eine Vielzahl von Approximationsmethoden für die effektiven elastischen Eigenschaften. Der prinzipielle Nachteil dieser Approximationen gegenüber den Schranken liegt darin, dass sie auf speziellen Annahmen beruhen, deren Güte sich erst nach Vergleich mit experimentellen Daten oder den oben diskutierten Schranken erweist. Im Folgenden werden diese Approximationen kurz zusammengestellt und deren wesentliche Merkmale genannt.

Die einfachsten Approximationen basieren auf der Kombination der Voigt- und der Reuss-Schranke. Hill (1952) schlägt hierzu sowohl den arithmetischen als auch den geometrischen Mittelwert vor. Um zu einer eindeutigen Abschätzung der effektiven elastischen Eigenschaften zu kommen, schlagen Aleksandrov und Aisenberg (1966) die Verwendung eines geometrischen Mittelwertes vor. Von Böhlke und Bertram (2001a) wurde gezeigt, dass die geometrische Mittelwertbildung im Falle von Aggregaten kubischer Einkristalle nicht zu einer Verletzung der Voigt- und der Reuss-Schranke führt.

Neben diese simplen Abschätzungen basieren eine Reihe von Abschätzungen auf der Eshelby-Lösung (Eshelby, 1957; Mura, 1987). Die Approximation für sogenannte dünne Verteilungen einer Phase in einem Matrixmaterial gibt gute Abschätzungen der effektiven elastischen Eigenschaften für kleine Volumenfraktionen des Einschlusses (Maxwell, 1873). Diese Approximation verletzt aber für große Volumenfraktionen die Voigt- und die Reuss-Schranke. Auch die Approximation von Mori und Tanaka (1973) basiert auf der Eshelby-Lösung. Im Gegensatz zu der Abschätzung für dünne Verteilungen ergibt diese auch für den Grenzfall der Volumenfraktion des Einschlusses gleich eins sinnvolle Ergebnisse. Neben den eben genannten Approximationen basiert auch die Klasse der selbst-konsistenten Approximationen (Hershey, 1954a; Kröner, 1958; Kneer, 1965; Hill, 1965; Kröner, 1967) auf der Eshelby-Lösung. Bei den selbst-konsistenten Approximationen ist der effektive Steifigkeitstensor durch eine nichtlineare tensorwertige Gleichung gegeben. Bei dem Differentialschema (Bruggeman, 1935; Boucher, 1974) leitet man - ausgehend von den Gleichungen der dünnen Verteilung von Einschlüssen - eine Differentialgleichung für die effektiven elastischen Eigenschaften ab. Die Definition der effektiven elastischen Eigenschaften mittels Differentialgleichungen erschwert allerdings deren Bestimmung erheblich.

Neben analytischen und halbanalytischen Abschätzungen der elastischen Eigenschaften werden zunehmend numerische Methoden eingesetzt. Die Finite-Element-Methode wird insbesondere bei der numerischen Berechnung der effektiven Eigenschaften von repräsentativen Volumenelementen eingesetzt (Barbe et al., 2001a,b; Kanit et al., 2003; Cailletaud et al., 2003). Der Vorteil dieses Zugangs besteht darin, dass sich auch reale Mikrostrukturen diskretisieren lassen und deren elastisches Verhalten bestimmt werden kann. Zu beachten ist neben der Güte der numerischen Approximation vor allem, ob die Größe des Gefügeausschnittes und die verwendeten Randbedingungen zuverlässige Aussagen über die effektiven Eigenschaften erlauben.

5 Homogenisierung viskoplastischer Eigenschaften

5.1 Obere und untere Schranken der effektiven viskoplastischen Eigenschaften

Für die Berechnung des mechanischen Verhaltens von Bauteilen ist es in der Regel nicht ausreichend, nur das elastische Teilverhalten zu berücksichtigen. Es kann sogar der Fall eintreten, dass das elastische Verhalten von untergeordnetem Interesse ist und gegenüber dem (visko)plastischen Verhalten vernachlässigt werden kann (Hutchinson, 1976; Banabic et al., 2000). Man spricht dann von einem starr-plastischen oder einem starr-viskoplastischen Materialverhalten.

Polykristalline metallische Materialien haben in der Regel effektive viskoplastische Eigenschaften, die sich einerseits von den Eigenschaften der Kristallite unterscheiden (Asaro, 1983a,b; Asaro und Needleman, 1985), sich andererseits aber auch nicht durch klassische phänomenologische Ansätze (Hosford, 1993; Skrzypek, 1993; Banabic et al., 2000) beschreiben lassen. Dies ist z.B. bei texturierten Materialien der Fall, deren Verformungsverhalten für viele technische Anwendungen von Interesse ist. In solch einem Fall ist man auf die Anwendung von Homogenisierungsmethoden angewiesen, die das (visko)plastische Verhalten auf der Grundlage der Materialeigenschaften auf der Mikroebene und der Mikrostruktur im Bauteil abschätzen. In diesem Abschnitt wird auf die Homogenisierung eines starr-(visko)plastischen Verhaltens eingegangen. Die Homogenisierung eines elasto-(visko)plastischen Materialverhaltens wird im nächsten Abschnitt diskutiert.

Schranken für das im Allgemeinen nichtlineare effektive starr-viskoplastische Materialverhalten können hergeleitet werden, sofern der Zusammenhang von Dehnratespannung über konvexe Potentiale gegeben ist (siehe, z.B., Willis, 1989; Ponte Castañeda, 1991, 1992; Nemat-Nasser und Hori, 1999; Ponte Castañeda und Suquet, 1998). In

diesem Fall ist die Dehnrates als Ableitung des Dehnratespotentials nach den Spannungen und die Spannung als Ableitung des Spannungspotentials nach der Dehnrates gegeben (Hutchinson, 1976; Böhlke, 2004). Das Dehnratespotential und das Spannungspotential lassen sich mittels einer Legendre-Fenchel-Transformation ineinander überführen. Ausgehend von den lokalen Gleichgewichts- und Kompatibilitätsbedingungen und unter Verwendung der oben diskutierten Definitionen der makroskopischen Spannungen und Verzerrungsgeschwindigkeiten lassen sich Extremalprinzipien formulieren, die die Konstruktion oberer Schranken für das Spannungspotential und das Dehnratespotential erlauben (Hutchinson, 1976; Böhlke, 2004). Das starr-plastische Verhalten ergibt sich als Grenzfall des starr-viskoplastischen Materialverhaltens. Die bei der Homogenisierung des elastischen Verhaltens diskutierten Prinzipien der maximalen Formänderungs- und Komplementärenergie ergeben sich formal aus diesen eben genannten Extremalprinzipien, wenn man die Dehnrates durch die Dehnung ersetzt und quadratische Potentiale verwendet.

Die bei der Formulierung der Extremalprinzipien verwendeten Testfunktionen erlauben analog zur Homogenisierung des elastischen Verhaltens die Konstruktion von einfachen Sonderfällen. Setzt man die Testfunktion für die lokale Dehnrates gleich der mittleren Verzerrungsgeschwindigkeit, dann erhält man eine obere Schranke für das Spannungspotential. Setzt man die Testfunktion für die lokale Spannung gleich der mittleren Spannung, dann erhält man eine obere Schranke für das Spannungspotential. Diese beiden Spezifizierungen ergeben die einfachsten Schranken für das effektive viskoplastische Verhalten. Die Schranken, die auch elementare Schranken genannt werden, basieren allein auf der 1-Punkt-Korrelationsfunktion, d.h. für deren Berechnung ist im Falle texturierter Materialien nur die Kenntnis der OVF notwendig. Sie entsprechen den bei der Homogenisierung der elastischen Eigenschaften diskutierten Schranken von Voigt und von Reuss. Die beiden Schranken werden in der Plastizität im Wesentlichen mit den Namen Taylor (1938) und Sachs (1928) verbunden. Die Berechnung genauerer Schranken wird z.B. in den Arbeiten von Dendievel et al. (1991), Willis (1994) sowie deBotton und Castañeda (1994) diskutiert. Die Arbeit von Ponte Castañeda und Suquet (1998) gibt einen Überblick zu den unterschiedlichen Zugängen.

5.2 Approximationen der effektiven elastisch-(visko)plastischen Eigenschaften

Die Schranken, die auf der Einbeziehung höherer Korrelationsfunktionen beruhen, sagen für den geschwindigkeitsunabhängigen Grenzfall oft makroskopische plastische Eigenschaften voraus, die näherungsweise denen der Taylor-Schranke entsprechen. Um zu besseren Abschätzungen zu gelangen, wurden selbst-konsistente Abschätzungen für starr-viskoplastische Materialien entwickelt (deBotton und Castañeda, 1994; Ponte

Castañeda und Nebozhyn, 1997). Dabei wurde gezeigt (Nebozhyn et al., 2001), dass diese Approximationstechniken für stark anisotrope Materialien deutlich bessere Vorhersagen des effektiven Verhaltens ergeben. Für die auf Grund der hohen Anzahl von Gleitsystemen nur schwach anisotropen kubisch-flächenzentrierten und kubisch-raumzentrierten Materialien ergibt sich aber keine wesentliche Verbesserung der Vorhersagen im Vergleich zur Voigt-Taylor-Schranke. Dieser Befund ist der Grund dafür, dass in vielen Fällen das Taylor-Modell Anwendung findet (Taylor, 1938; Van Houtte, 1988; Mathur und Dawson, 1989; Kalidindi et al., 1992; Bronkhorst et al., 1992; Miehe et al., 1999). Neben dem Taylor-Modell finden selbst-konsistente Homogenisierungsmethoden bei der Beschreibung des effektiven elastisch-plastischen Verhaltens häufig Anwendung, da Schranken analog zum starr-viskoplastischen Fall nicht konstruiert werden können (Hutchinson, 1970, 1976; Berveiller und Zaoui, 1979; Berveiller et al., 1981; Molinari et al., 1987; Molinari und Toth, 1994; Lipinski und Berveiller, 1989; Lipinski et al., 1995; Lebensohn und Canova, 1997).

Neben analytischen und halbanalytischen Abschätzungen der elasto-plastischen Eigenschaften werden - wie bei der Untersuchung des elastischen Verhaltens - zunehmend numerische Methoden eingesetzt. Hierfür sind repräsentative Volumenelemente basierend auf Finiten Elementen besonders geeignet (Barbe et al., 2001a,b; Kanit et al., 2003; Cailletaud et al., 2003). Die Bibliografie von Mackerle (2002) gibt eine Übersicht zu den in den Jahren 1998 - 2000 erschienenen wissenschaftlichen Publikationen, die sich der numerischen Behandlung einkristalliner und polykristalliner Werkstoffe widmen. Die Bibliografie umfasst mehr als 300 Einträge. Dadurch wird deutlich, welchen Umfang die momentane Forschungsaktivitäten weltweit haben, die sich mit heterogenen Werkstoffen beschäftigen.

Mittlerweile existieren verschiedene Software-Tools, die es erlauben, Schliffbilder mittels der Finite-Element-Methode zu diskretisieren und zu berechnen. Es ist zu erwarten, dass es in den Materialwissenschaften und in der Mechanik in den nächsten Jahren zu einem Standard-Verfahren wird, auf diese Weise Mikrostrukturen und die zugehörigen Aggregateigenschaften zu untersuchen. Dies ist dann ein vielversprechender Zugang, wenn im Sinne vorgegebener makroskopischer Eigenschaften optimale Mikrostrukturen gesucht werden (Adams et al., 2001, 2004). Für solche Fragestellungen erscheinen rein numerische Zugänge alternativlos.

5.3 Diskussion eigener Arbeiten

5.3.1 Böhlke, T.: The Voigt bound of the stress potential of isotropic viscoplastic fcc polycrystals, *Archive of Mechanics*, **56**, 6, 423–443, 2004.

In der Arbeit Böhlke (2004) wird ein altes Problem der Elastoplastizität aufgegriffen: Wie lautet die Fließbedingung eines isotropen polykristallinen plastisch-inkompressiblen Festkörpers. Die Fragstellung wird für den Sonderfall eines isotropen Aggregates bestehend aus kubisch-flächenzentrierten Einkristallen untersucht. Diese Problemstellung wurde in einem allgemeineren Kontext von Tresca (1868), Guest (1900), Huber (1904), Mises (1913) und Hencky (1924) bearbeitet. Tresca und Guest formulierten ein Fließkriterium, das auf der Definition einer oberen Schranke für die Schubspannungen beruht. Huber, Mises und Hencky führten die Grenze des elastischen Bereiches im Sinne einer Norm des Spannungsdeviators ein. Das ist im elastisch isotropen Fall einer oberen Grenze der elastischen Distorsionsenergie äquivalent. Experimentelle Befunde belegen, dass die Fließorte von Metallen der oben definierten Materialklasse gerade zwischen diesen beiden Kriterien liegen. Es existiert eine Reihe neuerer Vorschläge für die Formulierung isotroper Fließfunktionen (Hershey, 1954b; Davies, 1961; Schmidt, 1932; Karafillis und Boyce, 1993). Phänomenologische anisotrope Fließfunktionen wurden zuerst von Mises (1928) und Hill (1948) vorgeschlagen.

Das wesentliche Ergebnis der Arbeit von Böhlke (2004) ist die numerische Berechnung der Voigt-Taylor-Schranke für das starr-viskoplastische Fließverhalten von k.-f.-z.-Polykristallen. Diese wird für alle Dehnratentypen bestimmt, die aus der Variation der Eigenwertverhältnisse der Verzerrungsgeschwindigkeit hervorgehen können. Die Tatsache, dass selbst-konsistente Abschätzungen bei dieser Materialklasse in der Nähe der Voigt-Taylor-Schranke liegen (Nebozhyn et al., 2001), rechtfertigt die Anwendung dieser Schranke. Die numerischen Ergebnisse zeigen, dass die Fließrichtung im Allgemeinen zwar koaxial aber nicht proportional zum Spannungsdeviator ist. Es wurde ein einfacher analytischer Ausdruck vorgeschlagen, der die numerischen Befunde für alle Eigenwertverhältnisse und Dehnraten reproduziert.

5.3.2 Böhlke, T.; Bertram, A.; Krempl, E.: Modeling of deformation induced anisotropy in free-end torsion, *Int. J. Plast.*, **19**, 1867–1884, 2003.

In der Arbeit von Böhlke et al. (2003) wird ein quasi-phänomenologischer Zugang bei der Modellierung textur-induzierter Anisotropien verfolgt. Zuerst wird - ausgehend von der kristallografischen Textur - ein Strukturtensor identifiziert, der das anisotrope makroskopische elastische Verhalten dominiert. Das ist der tensorielle Texturkoeffizient

vierter Stufe, der bei der Berechnung der Voigt- und der Reuss-Schranke in Erscheinung tritt (Bunge, 1993). Motiviert durch das von Mises und Hill vorgeschlagene anisotrope Fließkriterium wird unter Verwendung dieses Texturkoeffizienten vierter Stufe eine quadratische Fließbedingung formuliert. Die zeitliche Änderung des Texturkoeffizienten wird mittels einer phänomenologischen Evolutionsgleichung modelliert. Der Unterschied zu den von Mises und Hill vorgeschlagenen Fließkriterien besteht darin, dass sich der Anisotropietensor während des Deformationsprozesses infolge der Texturentwicklung verändern kann. Dieser Umstand macht es möglich, dass ein anfänglich isotropes Materialverhalten infolge der aufgeprägten Deformationsprozesse anisotrop wird. Der Typ der Anisotropie hängt vom Deformationsprozess ab.

Mit Hilfe dieses quasi-phänomenologischen Zugangs, der mikromechanische Argumente mit einer phänomenologischen Modellierung verknüpft, ist es möglich, den zyklischen Swift-Effekt (Swift, 1947; Gil-Sevillano et al., 1975; Billington, 1976; Montheillet et al., 1985; Harren et al., 1989) eines anfänglich isotropen polykristallinen Materials zu erklären. Der Nachteil eines solchen Zugangs liegt darin, dass die Modellierung der mikromechanisch definierten Variablen phänomenologisch und nicht mikromechanisch erfolgt. Das impliziert grundsätzliche Unsicherheiten bei der Modellierung und Schwierigkeiten bei der Identifikation der Entwicklungsgleichung. Die Arbeit zeigt also zum einen, dass mikromechanisch und statistisch definierte Variablen mit einer makroskopischen kontinuumsmechanischen Modellierung kombiniert werden können, zum anderen wird deutlich, dass die Evolution der mikromechanisch definierten Variablen auch mikromechanisch modelliert werden sollte.

5.3.3 Böhlke, T.: Texture simulation based on tensorial Fourier coefficients, Erscheint in: Comp. Struct., 2006.

Ausgehend von den Ergebnissen der im letzten Abschnitt diskutierten Arbeit wurde von Böhlke (2005b, 2006) die Möglichkeit der strengen Ableitung der Evolutionsgleichung der tensoriellen Texturkoeffizienten untersucht. Es wurde gezeigt, dass unter der Annahme eines starr-viskoplastischen Verhaltens und unter Zuhilfenahme der Taylor-Hypothese die Evolutionsgleichungen aller Texturkoeffizienten explizit ableitbar sind. Ausgehend von diesem Ergebnis ließe sich nun prinzipiell die Evolution der tensoriellen Texturkoeffizienten im Rahmen der Taylor-Hypothese berechnen. Die Evolutionsgleichungen der Texturkoeffizienten haben aber folgende Eigenschaft, die eine effektive numerische Implementierung der Evolutionsgleichungen erschweren: Die Evolutionsgleichung eines tensoriellen Texturkoeffizienten hängt von der vollständigen OVF ab. Damit müssen z.B. zur Berechnung der zeitlichen Änderung des Koeffizienten vierter Stufe alle Koeffizienten höherer Ordnung bekannt sein. Da dieses unmöglich ist, muss die OVF mit Hilfe der führenden Texturkoeffizienten geschätzt werden.

Von Böhlke et al. (2006b) wird nun gezeigt, dass diese Schätzung ungenau ist, wenn die Fourierreihe abgebrochen wird. Neben dem Problem der dadurch nicht gesicherten Nicht-Negativität führt ein solcher Abbruch bei Verwendung einer kleinen Anzahl von Koeffizienten dazu, dass die Intensitäten der OVF unterschätzt werden und in Folge dessen die Absättigung der Textur nicht mehr beschrieben werden kann. Es wurde weiterhin gezeigt, dass dieses Problem durch Anwendung der Maximum-Entropie-Methode umgangen werden kann. Es ist dann möglich, bei Verwendung der ersten zwei bis drei Texturkoeffizienten typische Anisotropie-Effekte und die zeitliche Entwicklung der OVF abzubilden. Neben dem positiven Ergebnis, dass die Evolutionsgleichungen ableitbar sind und eine numerische Behandlung mit Standardmethoden möglich ist, bleibt festzustellen, dass die Notwendigkeit der Anwendung der Maximum-Entropie-Methode einen erheblichen numerischen Aufwand impliziert, da nichtlineare Gleichungen gelöst werden müssen, deren Koeffizienten Integrale über den Orientierungsraum sind. Die direkte Einbeziehung von statistischen Momenten der Orientierungsverteilung ist also prinzipiell möglich und hilfreich. Die Simulation der Texturentwicklung unter Verwendung von Einzelorientierungen ist aber weiterhin eine effektive Alternative.

5.3.4 Böhlke, T.; Risy, G.; Bertram, A.: Finite element simulation of metal forming operations with texture based material models, *Modelling Simulation in Materials Science Engineering*, 14, 365–387, 2006.

Die im vorangegangenen Abschnitt dargelegten Ergebnisse implizieren, dass Textursimulationen basierend auf Einzelorientierungen weiterhin nicht obsolet sind, sondern dass es durchaus Sinn macht, die zugehörigen Simulationstechniken zu verbessern (Raabe et al., 2002; Raabe und Roters, 2004). Textursimulationen auf der Grundlage von Einzelorientierungen haben folgenden Nachteil: Will man eine Textur kristallografisch adäquat abbilden, so muss man sehr viele diskrete Einzelorientierungen verwenden. Das führt zu einer sehr großen Zahl von Differentialgleichungen, die in jedem Integrationspunkt der Finiten Elemente numerisch gelöst werden muss. Bei der Verwendung von mehreren hundert Einkristallen pro Integrationspunkt führt das zu Rechenzeiten, die industrielle Anwendungen momentan ausschließen. Verwendet man nur wenige Kristallorientierungen, so wird die Anisotropie des makroskopischen plastischen Verhaltens stark überschätzt. Von Böhlke et al. (2006b) werden nun zwei unterschiedliche Zugänge verfolgt, dieses Problem zu lösen.

Der erste Zugang basiert auf einer starr-viskoplastischen Modellierung. Die OVF wird durch eine Anzahl von Mises-Fisher-Verteilungsfunktionen modelliert. Die sich für eine gegebene Verzerrungsgeschwindigkeit einstellende Spannung wird durch Integration der Einkristallspannungen über den Orientierungsraum ermittelt. Der Vorteil dieses Zugangs liegt darin, dass die OVF direkt in die kontinuumsmechanische Modellierung einbezogen

wird. Der Nachteil besteht darin, dass die numerische Integration auf Grund der starken Gradienten der zu integrierenden Funktionen aufwendig ist und damit wiederum recht lange Rechenzeiten anfallen können. Weiterhin lassen sich Rückfederungseffekte auf Grund der starr-viskoplastischen Modellierung nicht abbilden. Es ist aber prinzipiell möglich, aus einer geringen Anzahl von Texturkomponenten bestehende Orientierungsverteilungen zu reproduzieren. Die Überschätzung der makroskopischen Anisotropie kann umgangen werden, indem die den Texturkomponenten zugeordneten Halbwertsbreiten im Vergleich zur experimentellen OVF etwas vergrößert werden.

Der zweite Zugang basiert - wie der klassische von Taylor (1938) - auf diskreten Kristallorientierungen und verwendet elasto-viskoplastische Materialgleichungen. Die Berücksichtigung einer geringen Anzahl von Einzelorientierungen ohne Überschätzung der Anisotropie des effektiven Verhaltens wird im Gegensatz zu bisherigen Simulationstechniken dadurch möglich gemacht, dass eine isotrope Texturkomponente, die mit einem Mises'schen Materialansatz modelliert wird, in die Berechnung einbezogen wird. Über den Volumenanteil dieser isotropen Komponente lässt sich die Anisotropie auf einen realistischen Betrag skalieren. Die Untersuchungen zeigen, dass es eine einfache Relation zwischen dem isotropen Hintergrund einer OVF und der Volumenfraktion der isotropen Komponente gibt. Dieser pragmatische Zugang erlaubt numerisch effiziente Bauteilberechnungen. Die beiden diskutierten Zugänge wurden erfolgreich zur Berechnung der Richtungsabhängigkeit der Fließspannung und des R-Wertes in der Blechebene und zur Bestimmung der Zipfelbildung bei Tiefziehprozessen angewendet.

6 Schlussfolgerungen

Wegen der zunehmenden Bedeutung der virtuellen Prozessabsicherung im Maschinenbau wird sich der Trend zur skalenübergreifenden Modellierung von Materialeigenschaften in den nächsten Jahren verstärken. Da selbst verbesserte Möglichkeiten der Rechentechnik nicht dazu führen werden, dass die relevanten Problemstellungen mit den bisher etablierten Homogenisierungsmethoden ausreichend genau bearbeitet werden können, wird es sowohl im theoretischen als auch im numerischen Sinne notwendig sein, diese Methoden weiter zu entwickeln. Dazu ist eine interdisziplinäre Vorgehensweise von Mathematik, Mechanik, Werkstoffwissenschaften sowie konstruktiv und produktionstechnisch ausgerichteten Zweigen des Maschinenbaus notwendig. Die Mechanik wird in viel stärkerem Maße Begrifflichkeiten aus den Bereichen Medizin, Biologie und Chemie aufnehmen müssen als bisher.

Die messtechnische Erfassung der dreidimensionalen Gefügemorphologie und deren Einbeziehung in die numerische Berechnung der effektiven Materialeigenschaften wird in den nächsten Jahren Schwerpunkt der Untersuchungen sein. Dabei kommt der

Koppelung der für unterschiedliche Skalen konzipierten Homogenisierungsmethoden eine besondere Rolle zu. Die Parallelisierung der Berechnungsverfahren ist die Voraussetzung für die Durchführung solcher aufwendiger Simulationen. Von Bedeutung wird außerdem die Optimierung von Mikrostrukturen im Hinblick auf spezielle makroskopische Eigenschaften sein. Untersuchungen dieser Art führen zwangsläufig zu der Fragestellung, wie eine als optimal erkannte Mikrostruktur hergestellt werden kann und ob diese Mikrostruktur stabil ist. Als Ideal kann das numerische Versuchslabor angesehen werden, in dem - ausgehend von mikrostrukturellen und mikromechanischen Informationen - die effektiven Eigenschaften in einer Form abgeschätzt werden, die eine numerisch effiziente Anwendung dieser Abschätzungen bei Bauteilberechnungen ermöglicht.

Literatur

- Adams, B., Boehler, J., Guidi, M., Onat, E., 1992. Group theory and representation of microstructure and mechanical behavior of polycrystals. *J. Mech. Phys. Solids* 40 (4), 723–737.
- Adams, B., Henrie, A., Henrie, B., Lyon, M., Kalidindi, S., Garmestani, H., 2001. Microstructure-sensitive design of a compliant beam. *J. Mech. Phys. Solids* 49, 1639–1663.
- Adams, B., Lyon, M., Henrie, B., 2004. Microstructures by design: linear problems in elastic-plastic design. *Int. J. Plast.* 20, 1577–1602.
- Adams, B., Mason, T., Olson, T., Sam, D., 1994. Theory of grain boundary structure effects on mechanical behavior. *Materials Science Forum* 157-162, 1731–1738.
- Adams, B., Morris, P., Wang, T., Willden, K., Wright, S., 1987. Description of orientation coherence in polycrystalline materials. *Acta Metall.* 35 (12), 2935–2946.
- Adams, B., Olson, T., 1998. The mesostructure-properties linkage in polycrystals. *Progr. Mat. Sci.* 43, 1–88.
- Aleksandrov, K., Aisenberg, L., 1966. A method of calculating the physical constants of polycrystalline materials. *Soviet Physics - Doklady* 11, 323–325.
- Asaro, R. J., 1983a. Crystal plasticity. *J. Appl. Mech.* 50, 921–934.
- Asaro, R. J., 1983b. Micromechanics of crystals and polycrystals. In: Hutchinson, J. W., Wu, Y. T. (Eds.), *Advances in Applied Mechanics*. Vol. 23. Academic Press.
- Asaro, R. J., Needleman, A., 1985. Overview no. 42: Texture development and strain hardening in rate-dependent polycrystals. *Acta Metall.* 33, 923–953.

- Banabic, D., Bunge, H.-J., Pöhlandt, K., Tekkaya, A., 2000. Formability of Metallic Materials. Springer.
- Barbe, F., Decker, L., Jeulin, D., Cailletaud, G., 2001a. Intergrannular and intragranular behavior of polycrystalline aggregates: Part1: F.E. Model. *Int. J. Plast.* 17, 513–536.
- Barbe, F., Decker, L., Jeulin, D., Cailletaud, G., 2001b. Intergrannular and intragranular behavior of polycrystalline aggregates: Part1: Results. *Int. J. Plast.* 17, 537–563.
- Bathe, K.-J., 1996. Finite element procedures. Englewood Cliffs, NJ : Prentice Hall.
- Becker, R., Panchanadeeswaran, S., 1989. Crystal rotations represented by Rodrigues vectors. *Textures and Microstruct.* 10, 167–194.
- Belytschko, T., Liu, W., Moran, B., 2000. Nonlinear Finite Elements for Continua and Structures. Wiley.
- Beran, M., 1968. Statistical Continuum Theories. Interscience Publishers.
- Bertram, A., 2005. Elasticity and Plasticity of Large Deformations. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg.
- Berveiller, M., Hihl, A., Zaoui, A., 1981. Self-consistent schemes for the plasticity of polycrystalline and multiphase materials. In: *Deformation of Polycrystals*. pp. 145–156, roskilde: RisøNational Laboratory.
- Berveiller, M., Zaoui, A., 1979. An extension of the self-consistent scheme to plastically flowing polycrystals. *J. Mech. Phys. Solids* .
- Billington, E., 1976. Non-linear mechanical response of various metals: II Permanent length changes in twisted tubes. *J. Phys. D10* , 533–552.
- Boehler, J., 1987. Applications of Tensor Functions in Solid Mechanics. In: *CISM Courses and Lectures*. Springer, Wien.
- Boehler, J., Demmerle, S., Koss, S., 1994a. A new direct testing machine for anisotropic materials. *Exp. Mech.* 34 (1), 1–9.
- Boehler, J., Kirillov, A., Onat, E., 1994b. On the polynomial invariants of the elasticity tensor. *J. Elast.* 34, 97–110.
- Böhlke, T., 2004. The Voigt bound of the stress potential of isotropic viscoplastic fcc polycrystals. *Archive of Mechanics* 56 (6), 423–443.
- Böhlke, T., 2005a. Application of the maximum entropy method in texture analysis. *Comp. Mat. Sc.* 32, 276–283.

- Böhlke, T., 2005b. Modeling the crystallographic texture induced anisotropy based on tensorial fourier coefficients. In: Topping, B., Mota Soares, C. (Eds.), Proceedings of the Seventh International Conference on Computational Structures Technology. Civil-Comp Press, Stirling, Scotland.
- Böhlke, T., 2006. Texture simulation based on tensorial fourier coefficients. To appear in: *Comp. Struct.* .
- Böhlke, T., Bertram, A., 2001a. Bounds for the geometric mean of 4th-order elasticity tensors with cubic symmetry. *Z. angew. Math. Mech.* 81 (S2), S333–S334.
- Böhlke, T., Bertram, A., 2001b. The evolution of Hooke's law due to texture development in polycrystals. *Int. J. Solids Struct.* 38 (52), 9437–9459.
- Böhlke, T., Bertram, A., 2003. Crystallographic texture induced anisotropy in copper: An approach based on a tensorial fourier expansion of the codf. *J. Phys. IV* 105, 167–174.
- Böhlke, T., Bertram, A., Krempl, E., 2003. Modeling of deformation induced anisotropy in free-end torsion. *Int. J. Plast.* 19, 1867–1884.
- Böhlke, T., Brüggemann, C., 2001. Graphical representation of the generalized Hooke's law. *Technische Mechanik* 21 (2), 145–158.
- Böhlke, T., Haus, U.-U., Schulze, V., 2006a. Crystallographic texture approximation by quadratic programming. *Acta Mat.* 54.
- Böhlke, T., Risy, G., Bertram, A., 2005. A texture component model for anisotropic polycrystal plasticity. *Comp. Mat. Sc.* 32, 284–293.
- Böhlke, T., Risy, G., Bertram, A., 2006b. Finite element simulation of metal forming operations with texture based material models. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 14, 365–387.
- Boucher, S., 1974. On the effective moduli of isotropic two-phase elastic composites. *J. Composite Mater.* 8, 82–89.
- Bronkhorst, C., Kalidindi, S., Anand, L., 1992. Polycrystalline plasticity and the evolution of crystallographic texture in fcc metals. *R. Soc. Lond. A341*, 443–477.
- Bruggeman, D., 1935. Berechnung verschiedener physikalischer konstanten von heterogenen substanzen. *Ann. Phys. (Leipzig)* .
- Bunge, H.-J., 1965. Zur Darstellung allgemeiner Texturen. *Z. Metallkde.* 56, 872–874.
- Bunge, H.-J., 1993. *Texture Analysis in Material Science*. Cuviller Verlag Göttingen.

- Cailletaud, G., Forest, S., Jeulin, D., Feyel, F., Galliet, I., Monoury, V., Quilici, S., 2003. Some elements of microstructural mechanics. *Comp. Mat. Sci.* 27, 351–374.
- Cho, J.-H., Rollett, A. D., Oh, K. H., 2004. Determination of volume fractions of texture components with standard distributions in euler space. *Metall. and Mater. Trans. A* 35 A (1075–1086).
- Coleman, B., Gurtin, M., 1967. Thermodynamics with internal state variables. *J. Chem. Phys.* 47 (2), 597–613.
- Cowin, S., 1989. Properties of the anisotropic elasticity tensor. *Q. J. Mech. appl. Math.* 42, 249–266.
- Crisfield, M., 1991. *Non-linear finite element analysis of solids and structures*. Wiley.
- Cristescu, N., Suliciu, I., 1982. *Viscoplasticity*. Martinus Nijhoff, The Hague .
- Davies, E., 1961. The bailey flow rule and associated yield surface. *Trans. ASME E28* (2), 310.
- deBotton, G., Castañeda, P., 1994. Variational estimates for the creep behavior of polycrystals. *Proc. R. Soc. Lond.* A448, 121–142.
- Delannay, R., Van Houtte, P., Van Bael, A., Vanderschueren, D., 2000. Application of a texture parameter model to study planar anisotropy of rolled steel sheets. *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* 8, 413–422.
- Dendievel, R., Bonnet, G., Willies, J., 1991. Bounds for the creep behavior of polycrystalline materials. In: Dvorak, G. (Ed.), *IUTAM Symposium: Inelastic Deformations of Composite Materials*. Springer-Verlag, New-York.
- Eschner, T., 1993. Texture analysis by means of model functions. *Textures and Microstructures* 21, 139–146.
- Eschner, T., Fundenberger, J., 1997. Application of anisotropic texture components. *Text. Microstruct.* 28, 181–195.
- Eshelby, J., 1957. The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion and related problems. *Proc. R. Soc. London* A241, 376–396.
- Etingof, P., Adams, B., 1993. Representation of polycrystalline microstructure by n-point correlation tensors. *Textures and Microstructures* 21, 17–37.
- Federov, F., 1968. *Theory of Elastic Waves in Crystals*. Plenum Press, New York.
- Forte, S., Vianello, M., 1996. Symmetry classes for elasticity tensors. *J. Elast.* 43, 81–108.

- Gambin, W., 2001. *Plasticity and Textures*. Kluwer Academic Publishers.
- Gil-Sevillano, J., Van Houtte, P., Aernoudt, E., 1975. Deutung der Schertexturen mit Hilfe der Taylor-Analyse. *Z. Metallkunde* 66, 367.
- Guest, J., 1900. On the strength of ductile materials under combined stress. *Phil. Mag.* 50, 69–132.
- Guidi, M., Adams, B., Onat, E., 1992. Tensorial representation of the orientation distribution function in cubic polycrystals. *Textures Microstruct.* 19, 147–167.
- Gurtin, M., 1972. *The Linear Theory of Elasticity*. Vol. VIa/2 of *Encyclopedia of Physics*. Springer.
- Hackl, K., 1997. Generalized standard media and variational principles in classical and finite strain elastoplasticity. *J. Mech. Phys. Solids* 45 (5), 667–688.
- Hansen, J., Pospiech, J. Lcke, K., 1978. *Tables for Texture Analysis of Cubic Crystals*. Springer, Berlin.
- Harren, S., Lowe, T., Asaro, R., Needleman, A., 1989. Analysis of large-strain shear in rate-dependent face-centered cubic polycrystals: Correlation of micro- and macro-mechanics. *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A* A328, 443–500.
- Hashin, Z., Shtrikman, S., 1962a. On some variational principles in anisotropic and non-homogeneous elasticity. *J. Mech. Phys. Solids* 10, 335–342.
- Hashin, Z., Shtrikman, S., 1962b. A variational approach to the theory of the elastic behaviour of polycrystals. *J. Mech. Phys. Solids* 10, 343–352.
- Haupt, P., 2000. *Continuum Mechanics and Theory of Materials*. Springer.
- Helming, K., Schwarzer, R., Rauschenbach, B., Geier, S. and, L. B., Wenk, H.-R., Ullemaier, K. Heinitz, J., 1994. Texture estimates by means of components. *Z. Metallk.* 85, 545–553.
- Hencky, H., 1924. Zur Theorie plastischer Deformationen und der hierdurch im Material hervorgerufenen Nachspannungen. *ZAMM* 4, 323–334.
- Hershey, A., 1954a. The elasticity of an isotropic aggregate of anisotropic crystals. *J. Appl. Mech.* 21, 236–241.
- Hershey, A., 1954b. The plasticity of an isotropic aggregate of anisotropic face-centered cubic crystals. *J. Appl. Mech.* 3, 241–249.

- Hill, R., 1948. A theory of yielding and plastic flow of anisotropic materials. *Proc. Phys. Soc. Lond. A* 193, 281–297.
- Hill, R., 1952. The elastic behaviour of a crystalline aggregate. *Proc. Phys. Soc. Lond. A* 65, 349–354.
- Hill, R., 1965. Continuum micro-mechanics of elastoplastic polycrystals. *J. Mech. Phys. Solids* 13, 89–101.
- Hill, R., 1972. On constitutive macro-variables for heterogeneous solids at finite strain. *Proc. R. Soc. Lond. A* 326, 131–147.
- Hill, R., 1985. On the micro-to-macro transition in constitutive analysis of elastoplastic response at finite strain. *Proc. Camb. Phil. Soc.* 98, 579–590.
- Holzappel, G., 2000. *Nonlinear solid mechanics: a continuum approach for engineering.* Wiley.
- Hosford, F., 1993. *The Behaviour of Crystals and Textured Polycrystals.* Oxford University Press.
- Huber, M., 1904. Właściwa praca odkształcenia jako miara wyężenia materiału. *Czas. Techn.* 22, 34–40, 49–50, 61–62, 80–81.
- Hughes, T., 1987. *The finite element method : linear static and dynamic finite element analysis.* Englewood Cliffs, NJ : Prentice-Hall.
- Hutchinson, J., 1970. Elastic-plastic behavior of polycrystalline metals and composites. *Proc. R. Soc. London, Ser. A* 319, 247–272.
- Hutchinson, J., 1976. Bounds and self-consistent estimates for creep of polycrystalline materials. *Proc. R. Soc. Lon. A* 348, 101–127.
- Jaynes, E., 1957a. Information theory and statistical mechanics. *Phys. Rev.* 106, 620–630.
- Jaynes, E., 1957b. Information theory and statistical mechanics ii. *Phys. Rev.* 108, 171–190.
- Kalidindi, S., Bronkhorst, C., Anand, L., 1992. Crystallographic texture evolution in bulk deformation processing of fcc metals. *J. Mech. Phys. Solids* 40 (3), 537–569.
- Kanit, T., Forest, S., Galliet, I., Mounoury, V., Jeulin, D., 2003. Determination of the size of the representative volume element for random composites: statistical and numerical approach. *Int. J. Solids Struct.* 40, 3647–3679.

- Karafilis, A., Boyce, M., 1993. A general anisotropic yield criterion using bounds and a transformation weighting tensor. *J. Mech. Phys. Solids* 41 (12), 1859–1886.
- Kneer, G., 1965. Über die Berechnung der Elastizitätsmoduln vielkristalliner Aggregate mit Textur. *Phys. Stat. Sol.* 9, 825–838.
- Kocks, U., Kallend, J., Biondo, A., 1991. Accurate representation of general textures by a set of weighted grains. *Text. Microstruct.* 14-18, 199–204, iCOTOM 9, Special Issue.
- Kocks, U., Mecking, H., 2003. Physics and phenomenology of strain hardening: The FCC case. *Progr. Mat. Sci.* 48, 171–273.
- Kocks, U., Tome, C., Wenk, H., 1998. *Texture and Anisotropy: Preferred Orientations in Polycrystals and Their Effect on Materials Properties*. Cambridge Univ. Pr.
- Krawietz, A., 1986. *Materialtheorie*. Springer-Verlag.
- Kröner, E., 1958. Berechnung der elastischen Konstanten der Vielkristalls aus den Konstanten des Einkristalls. *Z. Phys.* 151, 504–518.
- Kröner, E., 1967. Elastic moduli of perfectly disordered composite materials. *J. Mech. Phys. Solids* 15 (319).
- Lebensohn, R., Canova, G., 1997. A self-consistent approach for modelling texture development of two phase polycrystals: application to titanium alloys. *Acta mater.* 45 (9), 3687–9694.
- Lipinski, P., Berveiller, M., 1989. Elastoplasticity of micro-inhomogeneous metals at large strains. *Int. J. Plast.* 5, 149–172.
- Lipinski, P., Berveiller, M., Reubrez, E., Morreale, J., 1995. Transition theories of elastic-plastic deformation of metallic polycrystals. *Archive of Applied Mechanics* 65, 291–311.
- Liu, I.-S., 2002. *Continuum Mechanics*. Springer.
- Lubarda, V., 2002. *Elastoplasticity Theory*. CRC Press.
- Lublimer, J., 1973. On the structure of the rate equations of materials with internal variables. *Acta Mechanica* 17, 109–119.
- Mackerle, J., 2002. Crystals and polycrystals: FEM and BEM material modelling. A bibliography (1998-2000). *Finite Elements in Analysis and Design* 38, 461–475.
- Mardia, K., Jupp, P., 2000. *Directional Statistics*. John Wiley & Sons, Ltd.
- Mathur, K., Dawson, P., 1989. On modeling the development of crystallographic texture in bulk forming processes. *Int. J. Plast.* 5, 67–94.

- Matthies, S., 1980. Standard functions in texture analysis. *Phys. Stat. Sol. B* 101, K111–K115.
- Matthies, S., Muller, J., Vinel, G., 1988. On the normal distribution in the orientation space. *Textures and Microstructures* 10, 77–96.
- Maugin, G., 1992. *The thermomechanics of plasticity and fracture*. Cambridge Univ. Press.
- Maxwell, J., 1873. *Treatise on electricity and magnetism*. Clarendon Press, Oxford.
- Mecking, H., 2001. Work hardening of single-phase polycrystals. In: *Encyclopedia of Materials: Science and Technology*. Elsevier Science Ltd., pp. 9785–9795.
- Miehe, C., Schröder, J., Schotte, J., 1999. Computational homogenization in finite plasticity. Simulation of texture development in polycrystalline materials. *Comp. Meth. Appl. Mech. Engng.* 171, 387–418.
- Mises, R., 1913. *Mechanik der festen Körper im plastisch deformablen Zustand*. Göttingen Nachrichten, *Math. Phys.* 4 (1), 582–592.
- Mises, R., 1928. *Mechanik der plastischen Formänderung bei Kristallen*. *Z. angew. Math. Mech.* 8 (3), 161–185.
- Molinari, A., Canova, G., Ahzi, S., 1987. A self consistent approach of the large deformation polycrystal viscoplasticity. *Acta metall.* 35, 2983.
- Molinari, A., Toth, L., 1994. Tuning a self consistent viscoplastic model by finite element results - I. Modeling. *Acta Metall Mater.* 42, 2453.
- Montheillet, F., Gilormini, P., Jonas, J., 1985. Relation between axial stresses and texture development during torsion testing: A simplified theory. *Acta Metall.* 33 (4), 705–717.
- Mori, T., Tanaka, K., 1973. Average stress and average elastic energy of materials with misfitting inclusions. *Acta Metall.* 231, 571–574.
- Müller, I., 1985. *Thermodynamics*. Pitman Advanced Publishing Program.
- Mura, T., 1987. *Micromechanics of Defects in Solids*. Kluwer Academic Publishers.
- Nebozhyn, M., Gilormini, P., Castañeda, P., 2001. Variational self-consistent estimates for cubic viscoplastic polycrystals: the effect of grain anisotropy and shape. *J. Mech. Phys. Solids* 49, 313–340.
- Nemat-Nasser, S., Hori, M., 1999. *Micromechanics: Overall Properties of Heterogeneous Materials*, 2nd Edition. Elsevier.

- Ponte Castañeda, P., 1991. The effective mechanical properties of nonlinear isotropic composites. *J. Mech. Phys. Solids* 39, 45–71.
- Ponte Castañeda, P., 1992. New variational principles in plasticity and their application to composite materials. *J. Mech. Phys. Solids* 40 (8), 1757–1788.
- Ponte Castañeda, P., Nebozhyn, M., 1997. Variational estimates of the self-consistent type for some model nonlinear polycrystals. *Proc. R. Soc. Lond. A* 453, 2715–2724.
- Ponte Castañeda, P., Suquet, P., 1998. Nonlinear composites. *Advances in Applied Mechanics* 34, 171–302.
- Raabe, D., Klose, P., Engl, B., Imlau, K.-P., Friedel, F., Roters, F., 2002. Concepts for integrating plastic anisotropy into metal forming simulations. *Advanced Engineering Materials* 4 (4), 169–180.
- Raabe, D., Roters, F., 2004. Using texture components in crystal plasticity finite element simulations. *Int. J. Plast* 20, 339–361.
- Reuss, A., 1929. Berechnung der Fließgrenze von Mischkristallen auf Grund der Plastizitätsbedingung für Einkristalle. *Z. Angew. Math. Mech.* 9, 49–58.
- Rice, J., 1971. Inelastic constitutive relations for solids: An internal variable theory and its application to metal plasticity. *J. Mech. Phys. Solids* 19, 433–455.
- Roe, R., 1965. Description of crystalline orientation of polycrystalline materials. III. General solution to pole figure inversion. *J. Appl. Phys.* 36, 2024–2031.
- Sachs, G., 1928. Zur Ableitung einer Fließbedingung. *Z. Verein dt. Ing.* 72, 734–736.
- Schaeben, H., 1992. “Normal” orientation distribution. *Textures and Microstructures* 19, 197–202.
- Schaeben, H., 1994. Diskrete mathematische Methoden zur Berechnung und Interpretation von kristallographischen Orientierungsdichten. DGM Informationsgesellschaft mbH.
- Schmidt, R., 1932. Über den Zusammenhang von Spannungen und Formänderungen im Verfestigungsgebiet. *Ing.-Arch.* 3, 215–235.
- Simo, J., Hughes, T., 1997. *Computational Inelasticity*. Springer.
- Skrzypek, J., 1993. *Plasticity and Creep*. CRC Press.
- Svendsen, B., 1994. On the representation of constitutive relations using structure tensors. *Int. J. Eng. Sci.* 32, 1889–1892.

- Swift, H., 1947. Length changes in metals under torsional overstrain. *Engineering* 163, 253–257.
- Tarasiuk, J., Wierzbanski, K., Bacroix, B., 2004. Texture decomposition into gaussian-shaped functions: classical and genetic algorithm methods. *Comp. Mat. Sci.* 29, 179–186.
- Taylor, G., 1938. Plastic strain in metals. *J. Inst. Metals* 62, 307–324.
- Torquato, S., 2002. *Random Heterogeneous Materials: Microstructures and Macroscopic Properties*. Springer.
- Toth, L., Van Houtte, P., 1992. Discretization techniques for orientation distribution functions. *Text. Microstruct.* 19, 229–244.
- Tresca, H., 1868. Mémoire sur l'écoulement des corps solides. *Mémoires Par Divers Savants*. 18 (1968), 733, 20 (1972), 75–135.
- Truesdell, C., Noll, W., 1965. *The Non-Linear Field Theories of Mechanics*. Vol. III/3 of *Encyclopedia of Physics*. Springer.
- Van Houtte, P., 1988. A comprehensive mathematical formulation of an extended Taylor-Bishop-Hill model featuring relaxed constraints, the Renouard-Winterberger theory and a strain rate sensitive model. *Textures Microstruct.* 8/9, 313–350.
- Versteeg, H. K., Malalasekera, W., 1995. *An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method*. Longman Scientific & Technical.
- Voigt, W., 1889. Über die Beziehung zwischen den beiden Elastizitätskonstanten isotroper Körper. *Wied. Ann.* 38, 573–587.
- Voigt, W., 1910. *Lehrbuch der Kristallphysik*. Teubner Leipzig.
- Šilhavý, M., 1997. *The Mechanics and Thermodynamics of Continuous Media*. Springer.
- Wasserman, G., Grewen, J., 1962. *Texturen metallischer Werkstoffe*. Springer.
- Willis, J., 1977. Bounds and self-consistent estimates for the overall of anisotropic composites. *J. Mech. Phys. Solids* 25, 185–202.
- Willis, J., 1983. The overall response of composite materials. *ASME J. Appl. Mech.* 50, 1202–1209.
- Willis, J., 1989. The structure of overall constitutive relations of nonlinear composites. *IMA Journal of Applied Mathematics* 43, 231–242.
- Willis, J., 1994. Upper and lower bounds for nonlinear composite behavior. *Mater. Sci. Engng. A* 175, 7–14.

- Wriggers, P., 2000. Nichtlineare Finite-Element-Methoden. Springer.
- Wrobel, L., 2002a. The boundary element method. Vol.1: Applications in thermo-fluids and acoustics. Wiley.
- Wrobel, L., 2002b. The boundary element method. Vol.2: Applications in solids and structures. Wiley.
- Wu, N., 1997. The Maximum Entropy Method. Springer Series in Information Sciences. Springer.
- Zheng, Q.-S., 1994. Theory of representation for tensor functions- a unified invariant approach to constitutive equations. *Appl.Mech. Rev.* 47 (11), 545–587.
- Zheng, Q.-S., Fu, Y.-B., 2001a. Orientation distribution functions for microstructures of heterogeneous materials: I Directional distribution functions and irreducible tensors. *Appl. Math. Mech.* 22 (8), 865–884.
- Zheng, Q.-S., Fu, Y.-B., 2001b. Orientation distribution functions for microstructures of heterogeneous materials: II Crystal distribution functions and irreducible tensors restricted by various material symmetries. *Appl. Math. Mech.* 22 (8), 885–903.
- Zienkiewicz, O., Taylor, R., 2000. The finite element method, 5th Edition. Butterworth-Heinemann.