

Variationen über ein Thema der Energieminimierung und deren analytische Klammer

Dr. rer. nat. habil. Patrizio Neff

FB Mathematik, TU DARMSTADT

Vorstellungsvortrag Carl-Friedrich-Gauß-Fakultät

Technische Universität Braunschweig, 11. Juni 2007

Überblick

- Elastische **Energieminimierung** - Motivation
- **Energieminimierung** und anisotrope Polykonvexität
- **Energieminimierung** im 3D-Cosserat Modell
- **Energieminimierung** für dünne Strukturen: Membrane und Schalen
- **Energieminimierung** in Plastizitätsmodellen
- **Energieminimierung** auf $SO(3)$ und Anwendungen

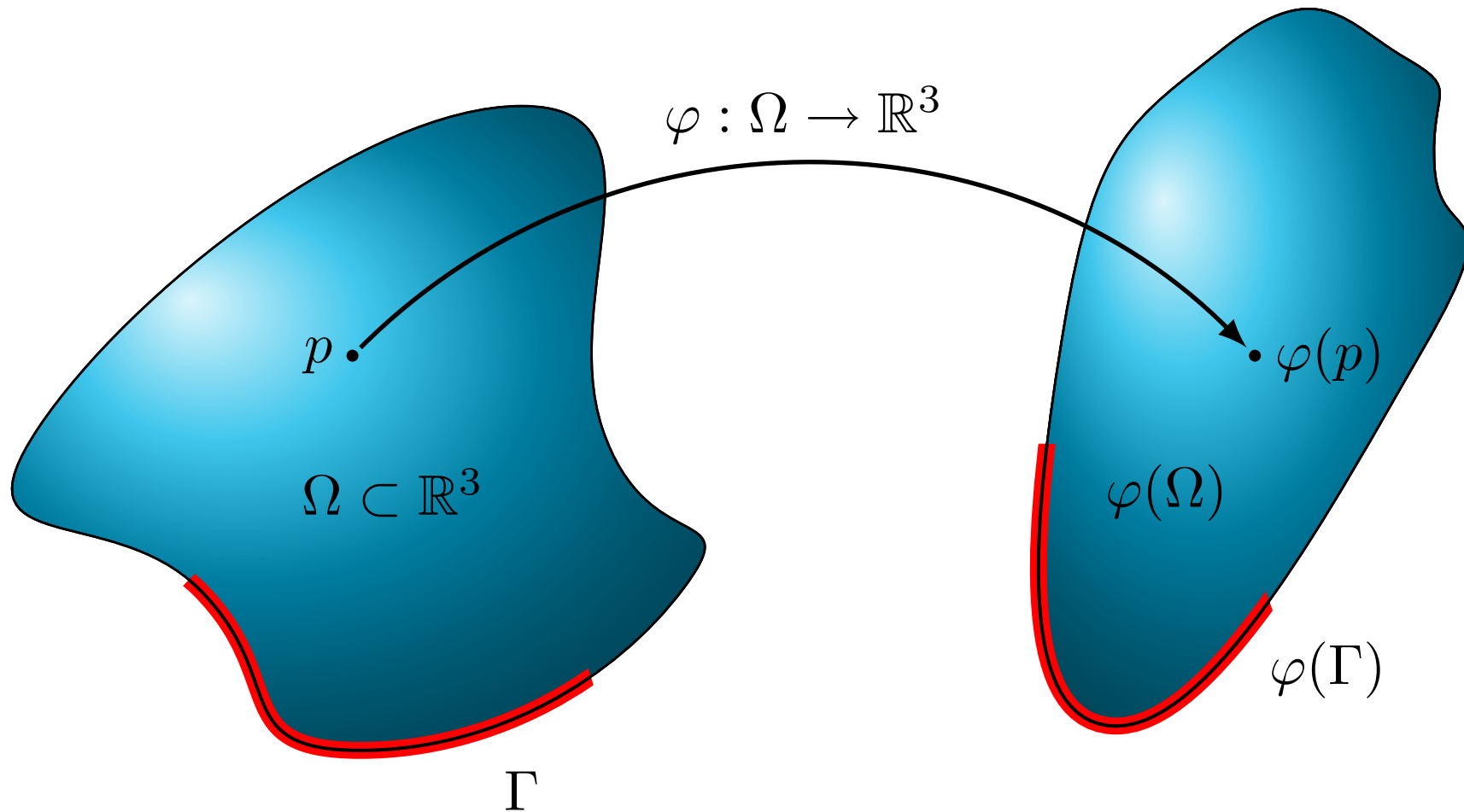
Motivation

- Komplexe Prozesse aus Technik und Wissenschaft: Medizin - Elastizität von Arterienwänden, Flugzeugbau - dünne Bleche, Umformtechnik - Plastizität von Stahl,...
- Modellierung mit nichtlinearen partiellen Differentialgleichungen
- Analysis: Eigenschaften der Gleichungen? Existenz? Wohlgestelltheit? Regularität?
- FEM-Simulation? Konvergenzaussagen für Algorithmen (schnell, robust, konvergent, ...)?
- Fundamentales Prinzip der **Energieminimierung** liefert einen direkten und häufig den einzigen Zugang

Klassisches elastisches Minimierungsproblem

Minimiere die elastische Gesamtenergie des Körpers. **Deformationsgradient**
 $F = \nabla \varphi$.

$$\int_{\Omega} W(\nabla \varphi(x)) \, dV \mapsto \min. \varphi, \quad \varphi(\Gamma) = g_d$$



Direkte Methoden der Variationsrechnung

Deformation $\varphi : \Omega \subset \mathbb{R}^3 \mapsto \mathbb{R}^3$. Finde Energieminimum zu:

$$\int_{\Omega} W(\nabla \varphi) \, dV \mapsto \min . \varphi , \quad + \text{bc} ,$$

$$W(F) \geq c^+ \|F\|^q, \quad q > n \quad \text{Koerzivitat .}$$

Betrachte **Minimalfolgen** $\varphi_k : \lim_k \int_{\Omega} W(\nabla \varphi_k) \, dV = \inf_{\tilde{\varphi}} \int_{\Omega} W(\nabla \tilde{\varphi}) \, dV$.

Minimalfolge φ_k beschrankt in $W^{1,q}(\Omega)$ wegen Koerzivitat und Randbedingungen.

Wahle schwach konvergente Teilfolgen $\varphi_k \rightharpoonup \varphi$.

Falls W **schwach unterhalbstetig**

$$\int_{\Omega} W(\nabla \varphi) \, dV \leq \liminf \int_{\Omega} W(\nabla \varphi_k) \, dV = \inf_{\tilde{\varphi}} \int_{\Omega} W(\nabla \tilde{\varphi}) \, dV .$$

Dann ist φ ein Energieminimum.

Hinreichend fur schwache Unterhalbstetigkeit von W ist z.B. **Konvexitat** und **Polykonvexitat**.

Polykonvexität

Deformation $\varphi : \Omega \subset \mathbb{R}^3 \mapsto \mathbb{R}^3$. Formulierung als elastische **Energieminimierung**:

$$\int_{\Omega} W(\nabla \varphi) \, dV \mapsto \min . \varphi ,$$

Erster globaler Existenzsatz für nichtlinear elastisches Materialverhalten basierend auf Polykonvexität eingeführt von J. Ball. Idee: Minimalfolgen, schwache Konvergenz und Unterhalbstetigkeit

Polykonvexität: Freie Energie $W(F) = P(F, \text{Cof } F, \det[F])$ mit P **konvex**. W ist Rahmen-Indifferent $\forall Q \in \text{SO}(3) : W(QF) = W(F)$. Daher $W(F) = \Psi(C)$ und spannungsfreie Referenzkonfiguration $D_F W(F)|_{F=\mathbb{I}} = 0$.

Isotropie $\forall Q \in \text{SO}(3) : W(F) = W(FQ) \Rightarrow \Psi(Q^T C Q) = \Psi(C)$, d.h. **keine Vorzugsrichtungen** im Material.

Viele isotrope freie Energien sind polykonvex, z. B. Ogden-type, Neo-Hooke, Mooney-Rivlin und weitere Energien in **Hartmann/N. Int.J.Solids Struct.02**

Polykonvexität ist nicht von vornherein auf Isotropie beschränkt.

Transversal Isotrope Polykonvexität

Transversal isotrope Materialien haben eine **ausgezeichnete Richtung** $a \in \mathbb{R}^3$, z.B. Holz (Faserrichtung) oder Gummi mit Stahleinlage. Freie Energie erfüllt nur $\forall Q \in \mathcal{G} : \Psi(C) = \Psi(Q^T C Q)$.

Materielle Symmetrie-Gruppe $\mathcal{G} : Q \in \text{SO}(3) : Qa = a$.

J.Ball: "Some open problems in elasticity (2002)", Problem 2/18: "Are there ways to verifying polyconvexity and quasiconvexity for a useful class of anisotropic stored-energy functions?"

Ziel: Erweiterung der Ballschen Methoden auf transversale Isotropie, d.h. kombiniere Invarianz, materielle Symmetrie, spannungsfreie Referenzkonfiguration und Polykonvexität von $W(F) = \Psi(C)$. Je drei von vier Bedingungen leicht!

Idee: Jede freie Energie Funktion Ψ , die links- und rechtsinvariant unter einer materiellen Symmetriegruppe $\mathcal{G}$ ist, kann als isotrope Tensorfunktion in einem erweiterten Satz von Argumenten dargestellt werden, welche die Symmetrie abbilden. Einführen von **Strukturtenoren** $M = a \otimes a$ und $\Psi(C) = \hat{\Psi}(C, M)$ ist **isotrop** in $X = (C, M)$.

Transversal Isotrope Polykonvexität

Jede isotrope Tensorfunktion $\hat{\Psi}$ kann mithilfe endlich vieler Invarianten dargestellt werden (Hilbert-Theorem).

Hauptinvarianten $I_1(C) = \text{tr}[C]$, $I_2(C) = \text{tr}[\text{Cof } C]$, $I_3(C) = \det[C]$ und wesentliche **gemischte Invarianten** $I_4 = \text{tr}[CM]$, $I_5 = \text{tr}[(\text{Cof } C)M]$. Schreibe

$$W(F) = \Psi(C) = \hat{\Psi}(I_1, I_2, I_3, I_4, I_5) = P(F, \text{Cof } F, \det[F])$$

Konstruktion weiterer Invarianten, die polykonvex sind mit erweitertem Cayley-Hamilton Theorem.

Schröder/N. Int.J.Solids Struct.03,04,05....., Ph.D.-Thesis Balzani 06, Anwendung auf Arterienwände, DFG-Stelle V. Ebbing 06-09 **kubische Symmetrie**, CISM-Kurs 07.

movie

Das **Biot**-Elastizitätsmodell

Deformation $\varphi \in W^{1,2}(\Omega, \mathbb{R}^3)$, φ nicht notwendig stetig:

$$I(\varphi) = \int_{\Omega} W(U) \, dV \mapsto \min . \text{ w.r.t. } \varphi, \quad \varphi|_{\Gamma} = g_d$$

$$W(U) = \mu \|U - \mathbb{1}\|^2 = \frac{\mu}{4} \|U^T + U - 2 \mathbb{1}\|^2$$

$$1\text{dim} : (|\varphi'| - 1)^2 \quad \textbf{konvex} \text{ für } \varphi' \geq 0$$

$$U = \textcolor{red}{R}(F)^T F = \sqrt{F^T F} \quad \textbf{symmetrischer} \text{ Verzerrungstensor}$$

$$\textcolor{red}{R}(\nabla\varphi) = \text{polar}(\nabla\varphi) \quad \textbf{Kontinuumsrotation}$$

$$F = \textcolor{red}{R} U \quad \text{Polarzerlegung}$$

nichtlinear, **geometrisch exakt, nicht Legendre-Hadamard elliptisch, Kontinuumsrotationen** $R(F)$ verantwortlich für **Materialversagen (unkontrollierte Mikrostrukturbildung)**, **keine math. Resultate** für **Biot**-Modell. **Keine Größeneffekte.**

Der Cosserat Ansatz

- Idee: **relaxiere** die Nebenbedingung für die Rotationen $R(\nabla\varphi)$, die die **Kontinuumsrotationen** $\text{polar}(\nabla\varphi)$ waren. Erlaube **unabhängige Rotationen** $R \in \text{SO}(3)$ (Gebrüder Cosserat 1906, motiviert durch "**triedre caché**" der **Flächentheorie**).
- Ersetze $U = \sqrt{F^T F} = R^T F$ durch $\bar{U} = R^T F$.
- Änderung der Rotationen von Punkt zu Punkt kostet Energie: **Krümmung**: $W_{\text{curv}}(D_x R) = \mu L_c^p \|D_x R\|^p$. **Größeneffekte**!
- Suche **unabhängige** Felder (φ, R) im Minimierungsproblem. $R \in \text{SO}(3)$ **nichtlineare Mannigfaltigkeit**.
- Geeignet für Material mit granularer Substruktur (**individuelle Rotationen von Partikeln**), Spin, Magnetisierung, **Liquid Crystals**, Homogenisierung, **mikropolare Fluide, Turbulenz**, Stabilitätsprobleme, **Regularisierung**.

Das 3D-Cosserat Modell

$\varphi : \Omega \subset \mathbb{R}^3 \mapsto \mathbb{R}^3$, $R : \Omega \subset \mathbb{R}^3 \mapsto \text{SO}(3)$ **orthonormaler Rahmen**. Simultane Minimierung bzgl. (φ, R) :

$$\int_{\Omega} W(\nabla \varphi, R) + \mu L_c^q \|\text{Curl } R\|^q dV \mapsto \min. (\varphi, R)$$

$$W(\nabla \varphi, R) = \frac{\mu}{4} \|R^T \nabla \varphi + \nabla \varphi^T R - 2\mathbb{1}\|^2 + \mu_c \|\text{skew}(R^T \nabla \varphi - \mathbb{1})\|^2$$

bc-on φ , no bc for $R \Rightarrow$

Geometrisch exakt. Modellierung: Mikromorph, **N./Forest J.Elast.07**, Existenz von Minimierern: **N. PRSE06**, Krümmung: **N./Münch ESAIM:COCV07**

Cosserat Modell erlaubt es, niedrigere Energieniveaus zu erreichen (Relaxation):

Ph.D-Thesis I. Münch, Karlsruhe: Bodenversagen $\Rightarrow$

Verkürzung durch Verdrehung $\Rightarrow$

Ph.D-Thesis S. Vanis, Essen: $R \rightsquigarrow P \in \text{GL}^+(3)$ FETI-DP für Mikromorphe Modelle (Klawonn/Neff) $\Rightarrow$

Existenz von Minima zu 3D-Cosserat

Idealisierte Situation: Betrachte Minimalfolgen

$(\varphi_k, \mathbf{R}_k) \in H^1(\Omega) \times C(\overline{\Omega}, \text{SO}(3))$ zu $\int_{\Omega} \|\mathbf{R}_k^T \nabla \varphi - \mathbb{1}\|^2 + \|\nabla \mathbf{R}_k\|^4 \, dV$.

Wegen $\|\mathbf{R}^T F - \mathbb{1}\|^2 = \|\mathbf{R}^T F\|^2 - 2\langle \mathbf{R}^T F, \mathbb{1} \rangle + 3 = \|F\|^2 - 2\langle \mathbf{R}, F \rangle + 3 \geq \|F\|^2 - 2\sqrt{3}\|F\| + 3$ ist lokale Abschätzung für $\|\nabla \varphi_k\|^2$ klar. Außerdem $\|\mathbf{R}_k\|^4 + \|\nabla \mathbf{R}_k\|^4 = 9 + \|\nabla \mathbf{R}_k\|^4$, also $\mathbf{R}_k \in W^{1,4}(\Omega)$ beschränkt. Wähle Teilfolgen

$$\varphi_k \rightarrow \varphi \in L^2(\Omega), \quad \nabla \varphi_k \rightharpoonup \nabla \varphi \in L^2(\Omega)$$

$$\mathbf{R}_k \rightarrow \mathbf{R} \in C^0(\overline{\Omega}, \text{SO}(3)) \quad \text{Sobolev-Einbettung } W^{1,4} \subset C(\overline{\Omega})$$

$$\nabla \mathbf{R}_k \rightharpoonup \nabla \mathbf{R} \in L^4(\Omega), \quad \mathbf{R}_k^T \nabla \varphi_k \rightharpoonup \mathbf{R}^T \nabla \varphi \in L^2(\Omega).$$

Konvexität der Normen liefert schwache Unterhalbstetigkeit

$$\int_{\Omega} \|\mathbf{R}^T \nabla \varphi - \mathbb{1}\|^2 + \|\nabla \mathbf{R}\|^4 \, dV \leq \liminf \int_{\Omega} \|\mathbf{R}_k^T \nabla \varphi_k - \mathbb{1}\|^2 + \|\nabla \mathbf{R}_k\|^4 \, dV$$

Übertragen? $(\mu_c = 0) \|\mathbf{R}^T \nabla \varphi + \nabla \varphi^T \mathbf{R} - 2\mathbb{1}\|^2$ statt $(\mu_c = \mu) \|\mathbf{R}^T \nabla \varphi - \mathbb{1}\|^2$
und $\|\text{Curl } \mathbf{R}\|^4$ statt $\|\nabla \mathbf{R}\|^4$?

Erweiterte 1. Kornsche Ungleichung

Satz [N. PRSE02]

Sei $F_p, F_p^{-1} \in C^1(\overline{\Omega}, GL^+(3))$ gegeben mit $\det[F_p(x)] \geq c > 0$. Außerdem gelte für die **Dislokationsdichte** $\text{Curl } F_p \in C^1(\overline{\Omega}, \mathbb{M}^{3 \times 3})$. Dann gilt

$$\exists c^+ > 0 \quad \forall \phi \in H^1(\Omega), \phi|_{\Gamma} = 0 :$$

$$\|\nabla \phi F_p^{-1}(x) + F_p^{-T}(x) \nabla \phi^T\|_{L^2(\Omega)}^2 \geq c^+ \|\phi\|_{H^{1,2}(\Omega)}^2 .$$

Verbesserung: $F_p \in C^0(\overline{\Omega})$. Momentaner Stand legt nahe, dass $F_p \in L^\infty(\Omega)$, $\text{Curl } F_p \in L^2(\Omega)$ reicht. Gegenbeispiel für $F_p \in L^\infty(\Omega)$.

Trivial für $F_p = \nabla \Psi_p$, $\Psi_p \in W^{1,\infty}(\Omega)$ invertierbar (Transformation der Variablen).

Für Rotationen: $R = F_p$, $R^{-1} = R^T$, $\det[R] = 1$.

Klassische 1. Kornsche Ungleichung:

$$\exists c^+ > 0 \quad \forall \phi \in H^1(\Omega), \phi|_{\Gamma} = 0 : \quad \|\nabla \phi + \nabla \phi^T\|_{L^2(\Omega)}^2 \geq c^+ \|\phi\|_{H^{1,2}(\Omega)}^2 .$$

Beweisskizze $\Rightarrow$

Rigiditätsabschätzungen

Qualitative Version mit Bezug zu bekannten geometrischen Rigiditätsabschätzungen und Starrheitsaussagen (John, Sverak, Müller, Friesecke)

Satz [N./Münch ESAIM:COCV07]

$$\forall \mathbf{R} \in C^1(\mathbb{R}^3, \mathrm{SO}(3)) : \quad \|\mathrm{Curl} \mathbf{R}\|^2 \geq \frac{1}{2} \|\nabla \mathbf{R}\|^2.$$

Keine Integration! Spezialfall: $\mathbf{R} = \nabla \varphi$ und $\mathrm{Curl} \nabla \varphi = 0$ liefert $\varphi(x) = \mathbf{R} \cdot x + b$.

Bekanntes "lineares" Resultat: $\mathbf{R} = \mathbb{1} + \mathbf{A} + \dots$, $\mathbf{A}^T + \mathbf{A} = 0$, d.h. $\mathbf{A} \in \mathfrak{so}(3)$

$$\forall \mathbf{A} \in C^1(\mathbb{R}^3, \mathfrak{so}(3)) : \quad \|\mathrm{Curl} \mathbf{A}\|^2 \geq \frac{1}{2} \|\nabla \mathbf{A}\|^2.$$

Implizit benutzt in Beweis der klassischen Kornschen Ungleichung:

$$\|\nabla \phi^T + \nabla \phi\|_{\Omega}^2 = 0 \Rightarrow \nabla \phi = \mathbf{A} \in \mathfrak{so}(3) \Rightarrow 0 = \mathrm{Curl} \nabla \phi = \mathrm{Curl} \mathbf{A} \Rightarrow \nabla \mathbf{A} = 0.$$

Konstante schiefsymmetrische Matrizen $\mathbf{A}$ mit Randbedingungen erledigen!

Eine Viskose-Membran

$m : \omega \subset \mathbb{R}^2 \mapsto \mathbb{R}^3$ Deformation der Membran, $R : \omega \subset \mathbb{R}^2 \mapsto \text{SO}(3)$
viskoelastisch nachgeführtes **orthonormales Dreibein** (**Hysteresis**)

$$\int_{\omega} h W(\nabla m(x, y), R(x, y)) \, dS \mapsto \min . m \text{ bei gegeb. } R$$

$$W(\nabla m, R) = \frac{\mu}{4} \| R^T (\nabla m | R_3) + (\nabla m | R_3)^T R - 2 \mathbb{1} \|^2$$

$$\frac{d}{dt} R = \frac{1}{\eta} \text{skew} \left((\nabla m | R_3) R^T \right) \cdot R \quad + \text{ initial/bc}$$

Geometrisch exakt $\Rightarrow$, Modellierung: **N. ZAMP05**, lokale Existenz/Eindeutigkeit:
N. MMAS05. Im **Relaxations-Limes** $\eta = 0$ formal $R = \text{polar}(\nabla m | \vec{n}_m)$, löse
intrinsisches Problem der Flächentheorie

$$\int_{\omega} h \mu \left\| \underbrace{\sqrt{\nabla m^T \nabla m}}_{1. \text{ Fundamentalform}} - \mathbb{1}_2 \right\|^2 \, dS \quad \text{nicht LH-elliptisch in } m .$$

Quasikonvexifizierung würde zu Null-Widerstand gegen Kompression führen (Le
Dret). Hier: **viskose Regularisierung des Verlustes der Elliptizität**. Bild:
Geometrie eines Membran-Tischtuches $\Rightarrow$

Die Cosserat-Schale

$m : \omega \subset \mathbb{R}^2 \mapsto \mathbb{R}^3$ Deformation der Schalenmittelfläche, $R : \omega \subset \mathbb{R}^2 \mapsto \text{SO}(3)$
orthonormales Dreibein (Direktor-Triade)

$$\int_{\omega} h W(\nabla m(x, y), R(x, y)) + h \mu L_c^q \| \text{Curl } R \|^q dS \mapsto \min . (m, R)$$

$$W(\nabla m, R) = \mu \| \text{sym}((R_1 | R_2)^T \nabla m - \mathbb{1}_2) \|^2 \\ + \mu_c \| \text{skew } R^T (\nabla m | R_3) \|^2 + \kappa \mu \left(\langle m_x, R_3 \rangle^2 + \langle m_y, R_3 \rangle^2 \right)$$

wobei

$$\frac{\mu}{4} \| R^T (\nabla m | R_3) + (\nabla m | R_3)^T R - 2 \mathbb{1} \|^2 = \mu \| \text{sym}((R_1 | R_2)^T \nabla m - \mathbb{1}_2) \|^2 + \mu \left(\langle m_x, R_3 \rangle^2 + \langle m_y, R_3 \rangle^2 \right) .$$

Geometrisch exaktes Reissner-Mindlin Modell. **N. Cont.Mech.Thermo04**,
 Existenz $\mu_c > 0$ **N. Cont.Mech.Thermo04**. Existenz $\mu_c = 0$: **N. M3AS07**
Kornsche Ungleichung für Schalen $\Rightarrow$

Implementierung und Anwendung auf dünne Filme: **N./Schröder/Gruttmann07**

Beachte: $m \in H^1(\omega, \mathbb{R}^3)$, **erlaubt Kavitation.**

Die Γ -Limit "Membran" Schale

J.Ball: "Some open problems in elasticity (2002)", Problem 18/18: "Give a rigorous derivation of models of rods, plates and shells, showing that their solutions well approximate appropriate solutions to three-dimensional elasticity for small values of the thickness parameter h ."

Rigoreuse Herleitung als Γ -Limit des 3D-Cosserat Modells: Deformation der Mittelfläche $m : \omega \subset \mathbb{R}^2 \mapsto \mathbb{R}^3$ und **angeheftetes orthonormales Dreibein** der Schale $R : \omega \subset \mathbb{R}^2 \mapsto \text{SO}(3)$:

$$I_0(m, R) = \int_{\omega} h W^{\text{hm}}(\nabla m, R) + h \mu L_c^p \| \text{Curl } R \|^p d\omega \mapsto \min . (m, R)$$

$$m|_{\gamma_0} = g_d(x, y, 0), \quad \text{einfach gelagert}$$

$$R|_{\gamma_0} \quad \text{frei: Neumann Bedingung}$$

Keine Biegeterme, die mit h^3 skalieren, daher minimale Regularität: Mittelfläche m muss nicht differenzierbar sein.

N./Chelminski05, subm. to Int. Free Bound.

Die **homogenisierte** reduzierte Energiedichte

$$\begin{aligned}
 W^{\text{hm}}(\nabla m, R) &= \underbrace{\mu \|\text{sym}((R_1 | R_2)^T \nabla m - \mathbb{1}_2)\|^2}_{\text{"intrinsische" Scherverzerrungsenergie}} + \underbrace{\mu_c \|\text{skew}((R_1 | R_2)^T \nabla m)\|^2}_{\text{"intrinsische" Drillenergie}} \\
 &+ \underbrace{2\mu \frac{\mu_c}{\mu + \mu_c} \left(\langle m_x, R_3 \rangle^2 + \langle m_y, R_3 \rangle^2 \right)}_{\text{transversale Scherenergie}} \\
 &+ \frac{\mu\lambda}{2\mu + \lambda} \underbrace{\text{tr} [\text{sym}((R_1 | R_2)^T \nabla m - \mathbb{1}_2)]^2}_{\text{Dickenänderungsenergie}}.
 \end{aligned}$$

$$2\mu \mu_c / (\mu + \mu_c) = \mathcal{H}(\mu, \mu_c), \quad \mu\lambda / (2\mu + \lambda) = 1/2 \mathcal{H}(\mu, \lambda/2).$$

$\mathcal{H}$ harmonisches Mittel.

Nicht koerziv falls $\mu_c = 0$, fehlende "transversale Scherenergie". Verlust der Koerzivität hat nichts mit dem Drill-Term zu tun.

Vergleich: **Formale Schale**/ Γ -Limit

Gesucht $m : \omega \mapsto \mathbb{R}^3$, $R \in \text{SO}(3)$:

$$I(m, R) = \int_{\omega} h W(\nabla m, R) + h \mu L_c^p \|\text{Curl } R\|^p + \frac{h^3}{12} W_{\text{bend}}(\mathfrak{R}_b) d\omega \mapsto \min . (m, R)$$

$$W = \mu \|\text{sym } Z\|^2 + \mu_c \|\text{skew } Z\|^2 + \frac{\mu \lambda}{2\mu + \lambda} \text{tr} [Z]^2 \\ + G^* \left(\langle m_x, R_3 \rangle^2 + \langle m_y, R_3 \rangle^2 \right)$$

$$G^* = \begin{cases} \frac{2\mu\mu_c}{\mu+\mu_c} & \Gamma\text{-Limit: harmonisches Mittel (Reuss)} \\ \kappa \frac{(\mu+\mu_c)}{2} & \text{formal: arithmetisches Mittel (Voigt)} \end{cases}$$

$$Z := (R_1 | R_2)^T \nabla m - \mathbb{1}_2 \in \mathbb{M}^{2 \times 2}$$

Γ -Limes Ergebnis ist eine erste rigorose Begründung für klassische Reissner-Mindlin Modelle!

Linearisierung und Reissner-Mindlin $\Rightarrow$

Finite Plastizität

Deformation φ . Plastische Variable $F_p \in \text{SL}(3)$. **Multiplikative Aufspaltung** des Deformationsgradienten $\nabla\varphi = F = F_e F_p$.

$$\int_{\Omega} W(\nabla\varphi F_p^{-1}) \, dV \mapsto \min. \varphi \text{ bei gegebenem } F_p$$

$$W(F_e) = \frac{\mu}{4} \|F_e^T F_e - \mathbb{1}\|^2, \quad F_e = \nabla\varphi F_p^{-1}$$

$$\underbrace{F_p^{-1} \frac{d}{dt} F_p}_{\text{Lie-Ableitung auf SL}(3)} = \partial\chi(\Sigma(F_e)), \quad \Sigma_E = F_e^T DW(F_e), \quad \text{Gradienten-Fluß}$$

Lie-Ableitung auf $\text{SL}(3)$

Simo, Ortiz, Miehe, Mielke, Reese, ... nicht Wohlgestellt (Mikrostrukturbildung).

$F_p(x) \neq \nabla\Psi_p(x)$: **Eigenspannungen**.

N. Cont.Mech.Thermo03: $F_e = \mathbb{1} + e$, $e \ll 1 \Rightarrow$

$W(F_e) \approx \mu \|\text{sym } F_e - \mathbb{1}\|^2 = \frac{\mu}{4} \|\nabla\varphi F_p^{-1} + F_p^{-T} \nabla\varphi^T - 2\mathbb{1}\|^2$. Erstmals lokale Existenz/Eindeutigkeit in **N. Quart.Appl.Math04**

Vergleichende Numerik (multigrid): **N./Wieners Comput.Visual.Science03** $\Rightarrow$

Finite Gradienten-Plastizität

Multiplikative Aufspaltung $\nabla\varphi = F = F_e F_p$ und **Dislokations-Energie** $\|\text{Curl } F_p\|^2$, misst Abweichung $F_p(x) \neq \nabla\Psi_p(x)$.

$$\int_{\Omega} W(\nabla\varphi F_p^{-1}) + \frac{L_c^2}{2} \|\text{Curl } F_p\|^2 dV \mapsto \min. \varphi \text{ bei gegeb. } F_p$$

$$W(F_e) = \frac{\mu}{4} \|F_e^T F_e - \mathbb{1}\|^2$$

$$F_p^{-1} \frac{d}{dt} F_p = \partial\chi(\Sigma_E + \underbrace{L_c^2 \text{Curl Curl } F_p}_{\text{backstress}}), \quad \Sigma_E = F_e^T DW(F_e)$$

Gurtin, Fleck/Hutchinson, Svendsen, Steinmann,...

Bis jetzt keine analytischen Resultate bekannt.

Ph.D-Thesis A. Sydow, DFG-Stelle Wieners/Neff U Karlsruhe

Geometrisch linear: Entwicklung: $F = \mathbb{1} + \nabla u$, $F_p = \mathbb{1} + p$, $F_e = \mathbb{1} + e$ mit $\nabla u, p, e \ll 1 \Rightarrow$ additive Aufspaltung $\nabla u = e + p$:

Infinitesimale Gradienten-Plastizität

Geometrisch linear: Verschiebung u , **nicht-symmetrische** plastische Verzerrung p . Additive Aufspaltung $\nabla u = e + p$

$$\int_{\Omega} W(\text{sym}(\nabla u - p)) + \frac{L_c^2}{2} \|\text{Curl } p\|^2 dV \mapsto \min . u \text{ bei gegeb. } p$$

$$W(\text{sym } e) = \mu \|\text{sym } e\|^2$$

$$\frac{d}{dt} p = \partial \mathcal{X}(\text{sym } e + L_c^2 \text{Curl Curl } p)$$

Vergleichbare Modelle von Kröner, Gurtin, Fleck/Hutchinson, Reddy,...

Ratenunabhängig: globale Existenz/Eindeutigkeit: **N./Chelminski/Alber07**, subm.

Formulierung als **quasi-variationelle Ungleichung** (Reddy, Brokate, ...) mit Bilinearform

$$a((u_1, p_1), (u_2, p_2)) = \langle \text{sym}(\nabla u_1 - p_1), \text{sym}(\nabla u_2 - p_2) \rangle + \langle \text{Curl } p_1, \text{Curl } p_2 \rangle$$

Infinitesimale Cosserat Plastizität

Verschiebung u , **infinitesimale Mikrorotation** $A \in \mathfrak{so}(3)$, symmetrische plastische Verzerrung $p \in \text{Sym}(3)$. Additive Aufspaltung $\nabla u = e + p + A$, $\text{tr}[p] = 0$

$$\int_{\Omega} W(\nabla u - p - A) + \frac{L_c^2}{2} \|\text{Curl } A\|^2 dV \mapsto \min. (u, A) \text{ bei gegeb. } p$$

$$W(e) = \mu \|\text{sym } \nabla u - p\|^2 + \frac{\lambda}{2} \text{tr}[\nabla u]^2 + \mu_c \|\text{skew } \nabla u - A\|^2$$

$$\frac{d}{dt} p = \partial \chi(\text{sym } e)$$

Modellierung Finit: **N. Int.J.Eng.Sci06**, globale Existenz/Eindeutigkeit (quasistatisch) **N./Chelminski PRSE05**, (dynamisch) **N./Chelminski Appl.Math.Opt.07**, **N./Chelminski 06**, eingereicht bei **Quart.Appl.Math.**

Non-smooth Newton (Ulbrich). Implementierung (multigrid) und Fehlerabschätzungen: **N./Chelminski/Müller/Wieners M3AS06**, **Ph.D-Thesis W. Müller, Wieners/Neff** U Karlsruhe $\Rightarrow$ Regularität für einen impliziten Zeitschritt: **N./Knees $\Rightarrow$**

Glattheit der Lösungen von quasilinearen Rang-1 elliptischen PDE-Systemen

Satz [N./Knees07]

Sei $\mathcal{M}(x, F) : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{M}^{3 \times 3} \mapsto \mathbb{M}^{3 \times 3}$, glatt in x und global Lipschitz in F mit

$$\forall \xi, \eta \in \mathbb{R}^3 : \quad \langle \mathcal{M}(x, F + \xi \otimes \eta) - \mathcal{M}(x, F), \xi \otimes \eta \rangle \geq C^+ \|\xi\|^2 \|\eta\|^2$$

$$\int_{\Omega} \langle \mathcal{M}(x, \nabla u_1) - \mathcal{M}(x, \nabla u_2), \nabla(u_1 - u_2) \rangle + \lambda \|u_1 - u_2\|^2 dV \geq C^+ \|u_1 - u_2\|_{H^1}^2 .$$

Dann hat das quasilineare PDE-System für $u : \Omega \subset \mathbb{R}^3 \mapsto \mathbb{R}^3$

$$\int_{\Omega} \langle \mathcal{M}(x, \nabla u), \nabla v \rangle dV = \int_{\Omega} \langle f, v \rangle dV \quad \forall v \in H_0^1(\Omega, \mathbb{R}^3), \quad u|_{\partial\Omega} = g ,$$

eine eindeutige Lösung $u \in H^1(\Omega)$. **Falls $f, g, \partial\Omega$ hinreichend glatt sind, dann gilt sogar $u \in H^2(\Omega)$. Bekannt ist:** $\mathcal{M}$ glatt und gleichmäßige Monotonie:

$$\forall H \in \mathbb{M}^{3 \times 3} : \quad \langle \mathcal{M}(x, F + H) - \mathcal{M}(x, F), H \rangle \geq C^+ \|H\|^2. \text{ Idee: innere}$$

Variationen $\Delta_h v = v \circ \tau_h - v$, $\tau_h(x) = x + \eta_c(x) h$, $\Delta^h v = v - v \circ \tau_h^{-1}$. Testen mit $\Delta^h(\Delta_h u(x))$ statt klassisch $\delta_h u = (u(x+h) - u(x))/h$.

Diplomarbeit: Lokale Minimierung auf $\text{SO}(3)$

A. Fischle, Darmstadt. Sei $F \in \text{GL}^+(3)$ gegeben.

$$\text{dist}^2(F, \text{SO}(3)) := \inf_{R \in \text{SO}(3)} \|R^T F - \mathbb{1}\|^2 = \|\sqrt{F^T F} - \mathbb{1}\|^2 \Rightarrow R = \text{polar}(F).$$

Bekannte Optimalität der Polarzerlegung!

Allgemeiner gewichteter Fall (oben $\mu = \mu_c$)

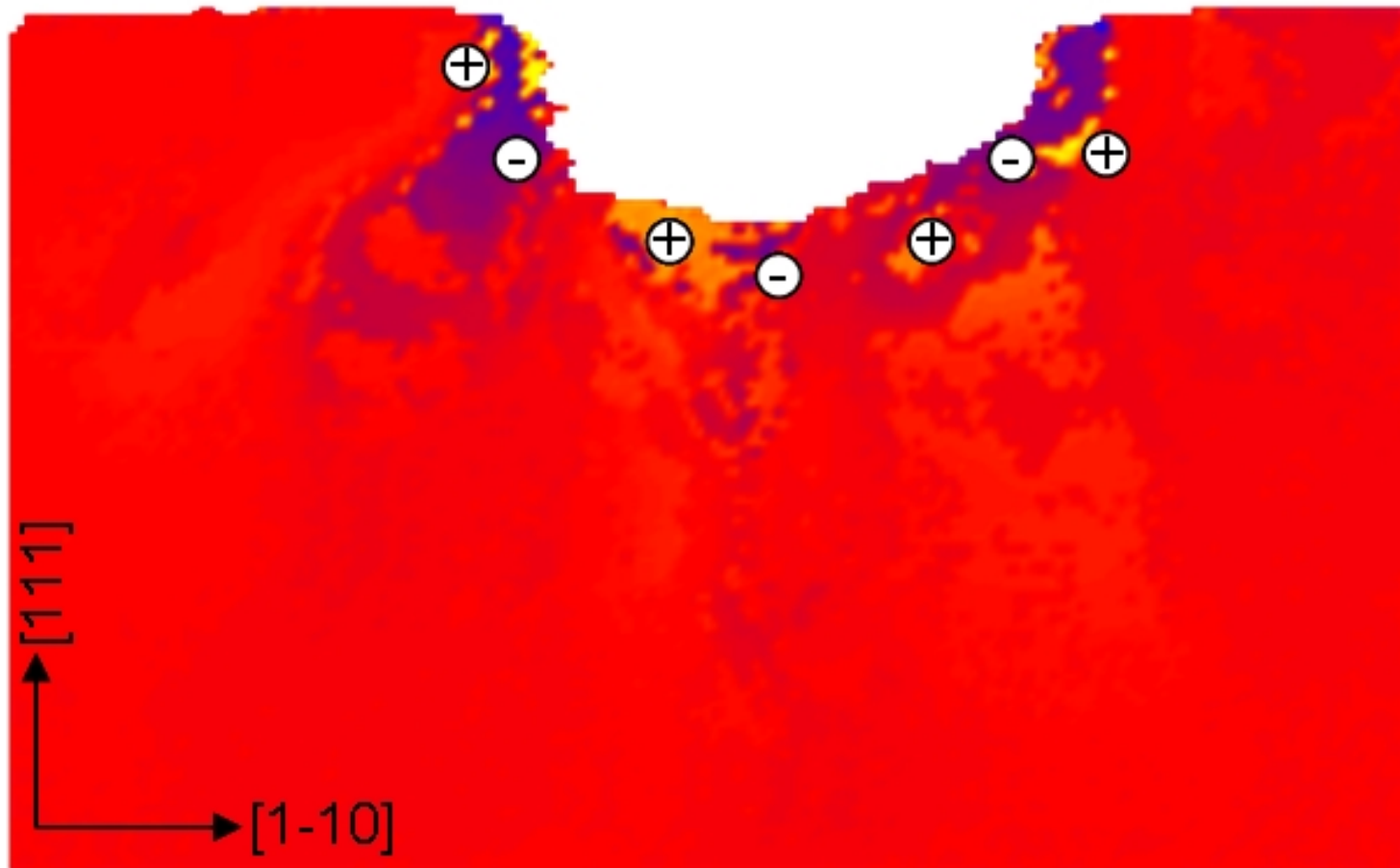
$$\inf_{R \in \text{SO}(3)} \mu \|\text{sym}(R^T F - \mathbb{1})\|^2 + \mu_c \|\text{skew}(R^T F - \mathbb{1})\|^2.$$

Explizite Formel für **optimale Rotationen** falls $0 \leq \mu_c < \mu$. Alle Lösungen für $0 < \mu_c < \mu$ können aus Lösungen zu $\mu_c = 0$ gewonnen werden! **Polarzerlegung** ist **singulärer Grenzwert** für $\mu_c \rightarrow \mu$. Parametrisierung der $\text{SO}(3)$ mit Quaternionen und Berechnung mit Computeralgebra-Systemen.

Entspricht 3D-Cosserat Modell ohne Krümmungsterm! Anwendung auf Nano-Indent Experiment:

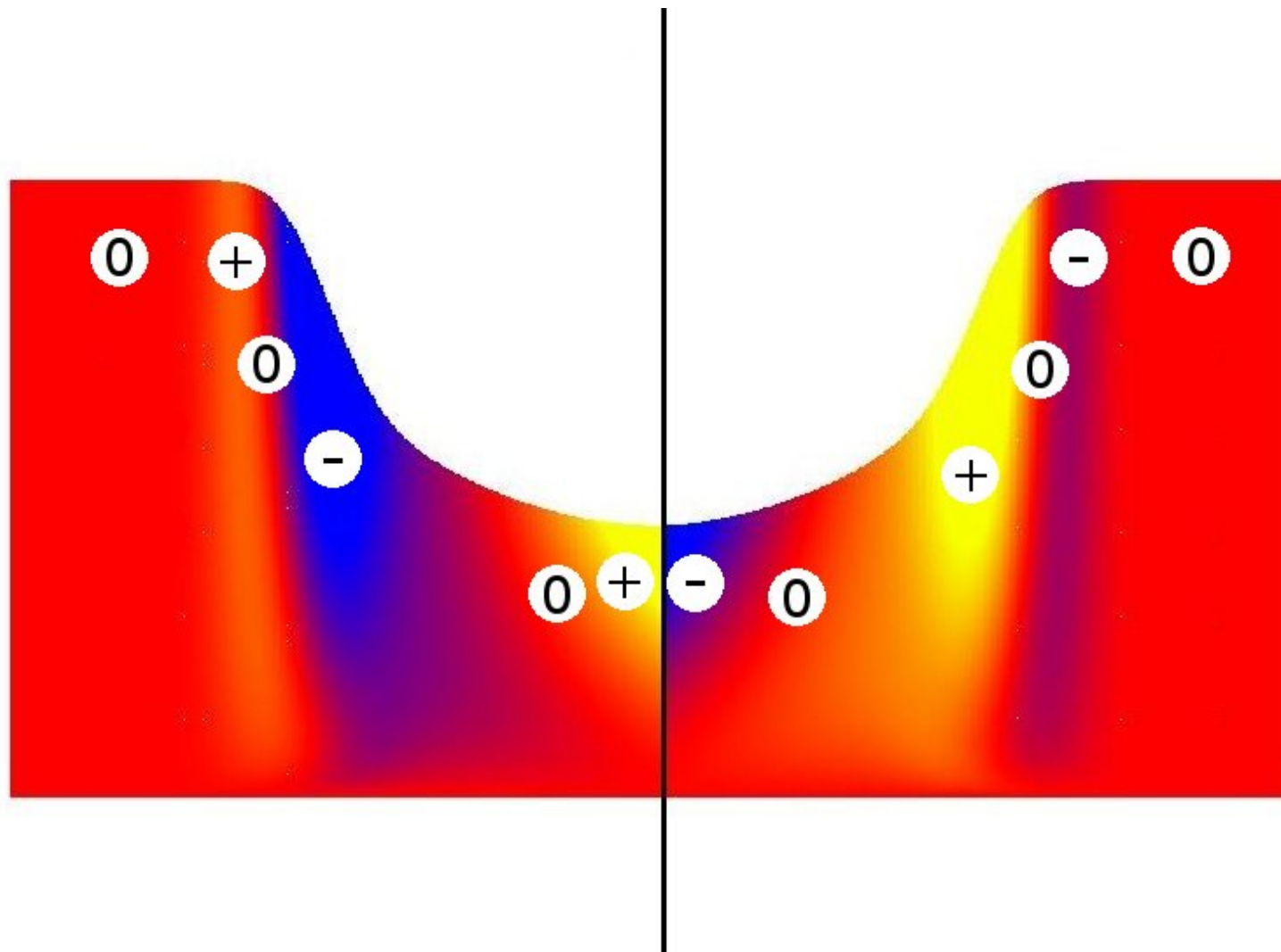
Rotationen im Nano-Indent Experiment

Nano-Indent Experiment im Kupfer-Einkristall von Raabe et al. (MPI für Eisenforschung, Düsseldorf). **Rotationen des Atomgitters:**



Optimale Cosserat Rotationen im Nano-Indent Experiment

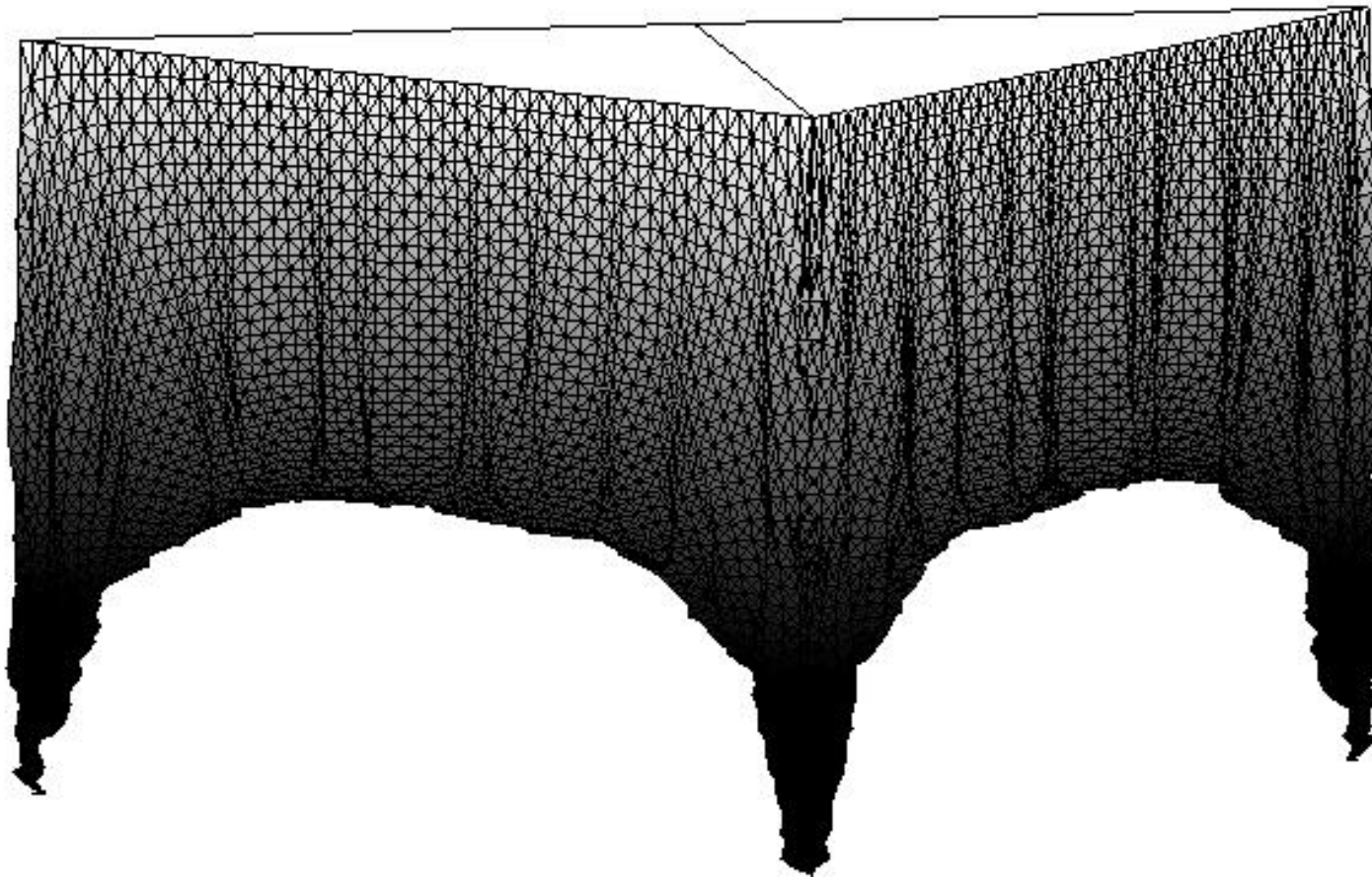
Synthetisch angesetzte Deformation, **optimale Cosserat Rotationen** für $\mu_c = 0$.
Animation mit Mathematica von A. Fischle TU Darmstadt



Herzlichen Dank für Ihre Einladung!

Faltenbildung am Tischtuch

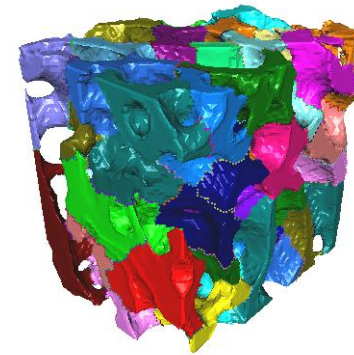
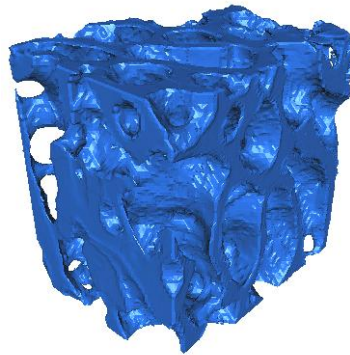
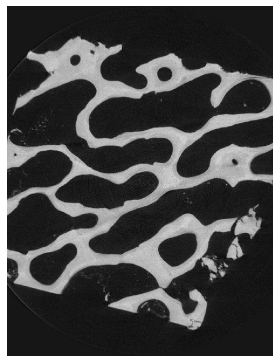
Rechnungen mit K. Weinberg, TU Berlin [N./Weinberg07](#) zurück $\Rightarrow$



FETI

FETI-DP Finite Element Tearing and Interconnecting-Dual Primal Methoden für mikromorphe Materialien.

Simulation von Knochen mit A. Klawonn (Essen) zurück $\Rightarrow$



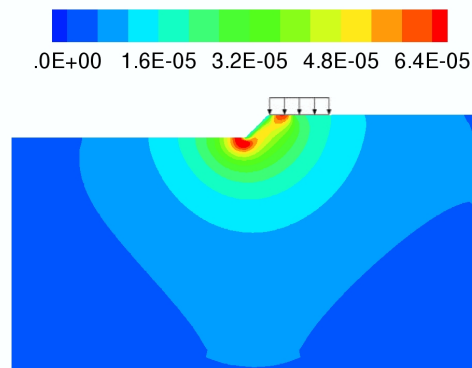
Cow bone. Left to right: Cutting plane Xray tomography; Finite Element Discretization with 620 d.o.f. partitioned into 96 domains

CPU's	1	2	4	8	16
Zeit	524s	312s	170s	90s	46s

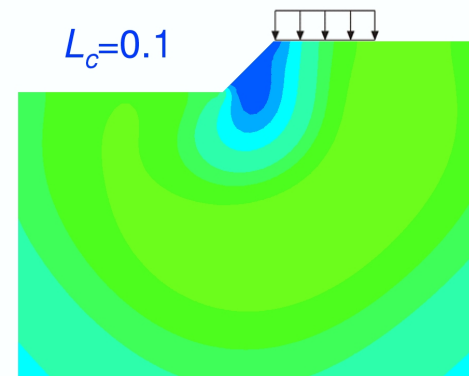
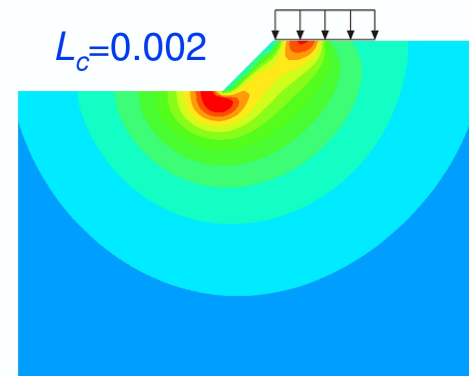
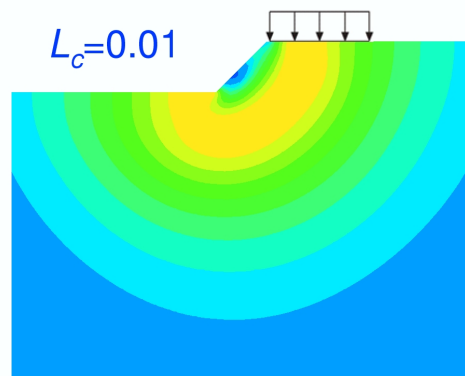
8 dual Opteron (2.2 GHz) Cluster mit je 8 GB RAM

Dislocation density $\text{curl}[\mathbf{R}]$ measures the probability of ground failure

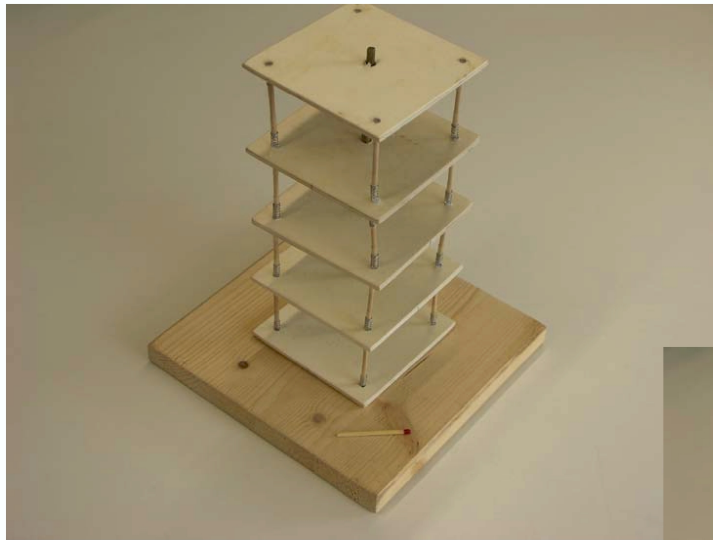
An acclivity in cohesionless ground fails through a straight sliding surface parallel and near to the slope



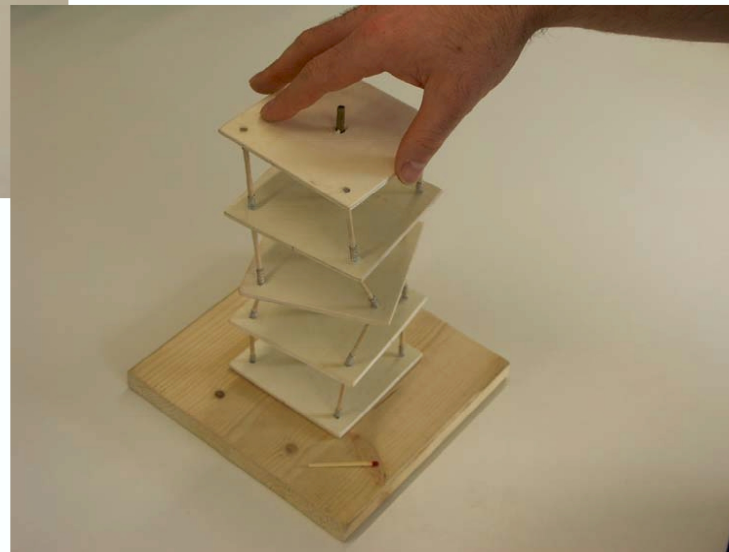
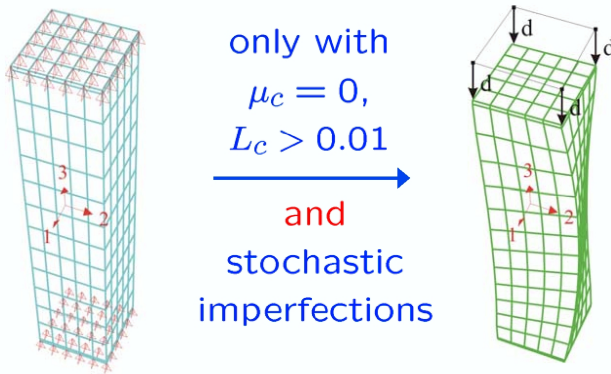
An acclivity in cohesive ground fails through a slip circle with some distance to the slope



Verkürzung durch Drehung: **nicht beobachtbar in klassischer Elastizität!**



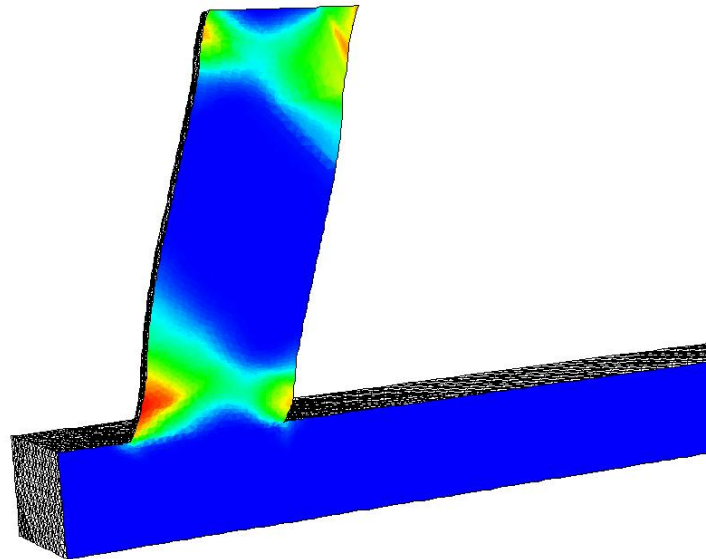
Simple model to motivate shortening through twist



zurück $\Rightarrow$

Multigrid Finite Plastizität

Rechnungen mit C. Wieners. Numerik (multigrid): **N./Wieners**
Comput.Visual.Science03 zurück $\Rightarrow$

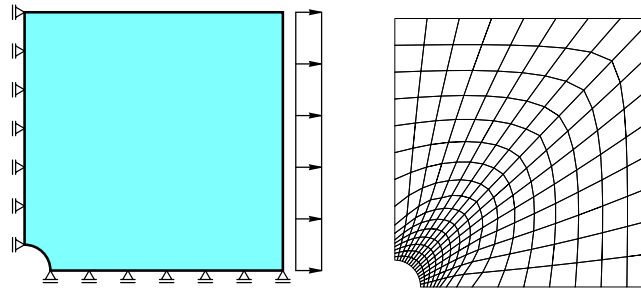


Cosserat Regularisierung des Scherversagens

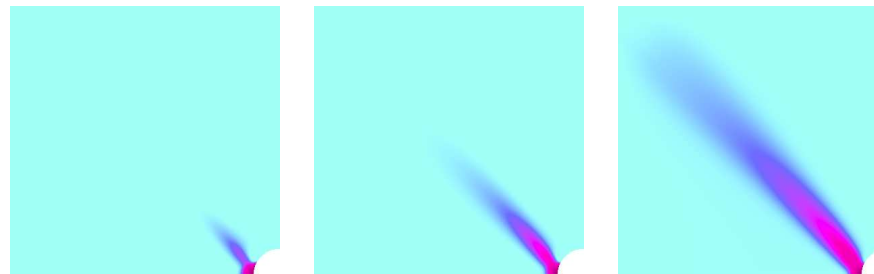
Elasto-plastische Platte mit Loch unter Zug. Implementierung (multigrid, > 3 Mio dof) und Fehlerabschätzung: **N./Chelminski/Müller/Wiener M3AS06**

$$L_c \approx 0.02$$

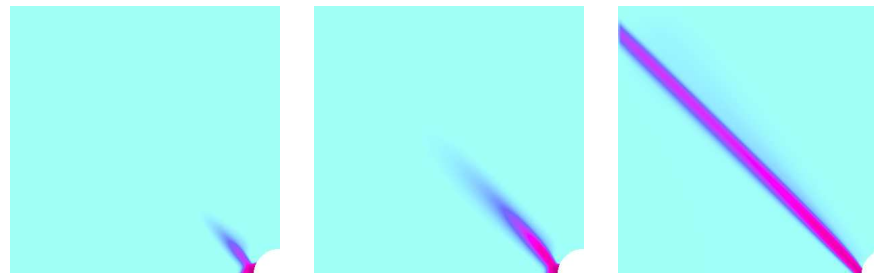
$$\ell(t, v) = 100t \int_0^{10} \mathbf{v}(x_1, 10) dx_1$$



Cosserat Model ($\mu_c = \mu$)



Prandtl-Reuß ($\mu_c = 0$)



$t = 4.00$

$t = 4.40$

$t = 4.69$

no difference for $t < 4.50$

zurück $\Rightarrow$

Asymptotische Berechnung der Polarzerlegung

Satz [N. ZAMP05] zurück $\Rightarrow$

Sei $F \in GL^+(3)$ konstant in der Zeit, gegeben. Betrachte

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}R(t) &= \text{skew}(F R^T(t)) \cdot R(t), \\ R(0) &= R_0 \in SO(3).\end{aligned}$$

Dann ist $R(t) \in SO(3)$ und

$$\lim_{t \rightarrow \infty} R(t) = R_\infty = \text{polar}(F), \quad F = R U = \text{polar}(F) U$$

Linearisierung

$m(x, y) = (x, y, 0)^T + v(x, y)$, $R = \mathbb{1} + A + \dots$, $A \in \mathfrak{so}(3)$. Reduktion erster Ordnung der **Cosserat** Schale ($\kappa = 1$, $p > 2$)

$$\begin{aligned} \int_{\omega} h \left(\mu \|\operatorname{sym}((\nabla v|A_3))\|^2 + \mu_c \|\operatorname{skew}((\nabla v|A_3) - A)\|^2 \right. \\ \left. + \frac{\mu\lambda}{2\mu + \lambda} \operatorname{tr} [(\nabla v|A_3)]^2 \right) + \frac{h^3}{12} \left(\mu \|\operatorname{sym}((\nabla A_3|0))\|^2 \right. \\ \left. + \mu_c \|\operatorname{skew}((\nabla A_3|0))\|^2 + \frac{\mu\lambda}{2\mu + \lambda} \operatorname{tr} [(\nabla A_3|0)]^2 \right) d\omega \\ \mapsto \min . \text{ w.r.t. } (v, A) \end{aligned}$$

$p > 2$: **Cosserat**-Krümmungsenergie $h \mu L_c^p \|\operatorname{Curl} R\|^p$ "überlebt" die Linearisierung nicht.

$\mu_c = 0$: infinitesimale Rotationen in der T-Ebene "überleben" die Linearisierung nicht: klass. **Reissner-Mindlin** Modell, $-A_3 = (\theta_1, \theta_2, 0)^T$. Infinitesimaler "**Direktor**" $\theta \in \mathbb{R}^2$. zurück $\Rightarrow$

Die infinitesimale, lineare **Reissner-Mindlin** Platte

Verschiebung $v : \omega \mapsto \mathbb{R}^3$, infinitesimaler "**Direktor**" $\theta : \omega \mapsto \mathbb{R}^2$

$$\int_{\omega} h \left(\mu \|\operatorname{sym} \nabla(v_1, v_2)\|^2 + \underbrace{\kappa \frac{\mu}{2} \|\nabla v_3 - \theta\|^2}_{\text{transversale Scherenergie}} + \frac{\mu\lambda}{2\mu + \lambda} \operatorname{tr} [\operatorname{sym} \nabla(v_1, v_2)]^2 \right) \\ + \frac{h^3}{12} \left(\mu \|\operatorname{sym} \nabla \theta\|^2 + \frac{\mu\lambda}{2\mu + \lambda} \operatorname{tr} [\operatorname{sym} \nabla \theta]^2 \right) d\omega \mapsto \min . \text{ w.r.t. } (v, \theta) \\ v|_{\gamma_0} = u^d(x, y, 0) \quad \text{einfach gelagert} \\ - \theta|_{\gamma_0} = (u_{1,z}^d, u_{2,z}^d)^T$$

zurück $\Rightarrow$

Glattheit der Lösungen von quasilinearen Rang-1 elliptischen PDE-Systemen

Satz [N./Knees07]

Sei $\mathcal{M}(x, F) : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{M}^{3 \times 3} \mapsto \mathbb{M}^{3 \times 3}$, glatt in x und global Lipschitz in F mit

$$\forall \xi, \eta \in \mathbb{R}^3 : \quad \langle \mathcal{M}(x, F + \xi \otimes \eta) - \mathcal{M}(x, F), \xi \otimes \eta \rangle \geq C^+ \|\xi\|^2 \|\eta\|^2$$

$$\int_{\Omega} \langle \mathcal{M}(x, \nabla u_1) - \mathcal{M}(x, \nabla u_2), \nabla(u_1 - u_2) \rangle + \lambda \|u_1 - u_2\|^2 dV \geq C^+ \|u_1 - u_2\|_{H^1}^2 .$$

Dann hat das quasilineare PDE-System für $u : \Omega \subset \mathbb{R}^3 \mapsto \mathbb{R}^3$

$$\int_{\Omega} \langle \mathcal{M}(x, \nabla u), \nabla v \rangle dV = \int_{\Omega} \langle f, v \rangle dV \quad \forall v \in H_0^1(\Omega, \mathbb{R}^3), \quad u|_{\partial\Omega} = g ,$$

eine eindeutige Lösung $u \in H^1(\Omega)$. **Falls $f, g, \partial\Omega$ hinreichend glatt sind, dann gilt sogar $u \in H^2(\Omega)$. Bekannt ist:** $\mathcal{M}$ glatt und gleichmäßige Monotonie:

$$\forall H \in \mathbb{M}^{3 \times 3} : \quad \langle \mathcal{M}(x, F + H) - \mathcal{M}(x, F), H \rangle \geq C^+ \|H\|^2. \text{ Idee: innere}$$

Variationen $\Delta_h v = v \circ \tau_h - v$, $\tau_h(x) = x + \eta_c(x) h$, $\Delta^h v = v - v \circ \tau_h^{-1}$. Testen mit $\Delta^h(\Delta_h u(x))$ statt klassisch $\delta_h u = (u(x+h) - u(x))/h$. **zurück $\Rightarrow$**

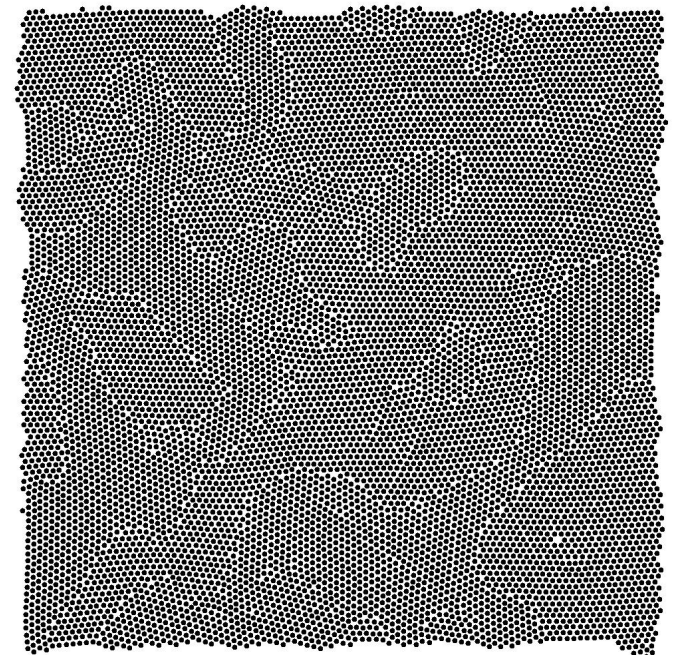
Atomistische Sichtweise

**J.Ball: "Some open problems in elasticity (2002)", Problem 15/18:
"Establish the status of elasticity theory with respect to atomistic models."**

Idee: Simuliere direkt die Wechselwirkung von Atomen im Kristallgitter basierend auf empirischen Potentialen (z.B. Lennard-Jones). Sogenannte **Cauchy-Born Regel** (auf homogene Belastung reagiert das Atomgitter homogen) ist zu restriktiv!

Daher: studiere kleine Auslenkung aus einer Konfiguration mit Versetzungen (immer noch ein Einkristall). Diese Konfiguration realisiert ein **lokales Minimum** des atomaren Potentials.

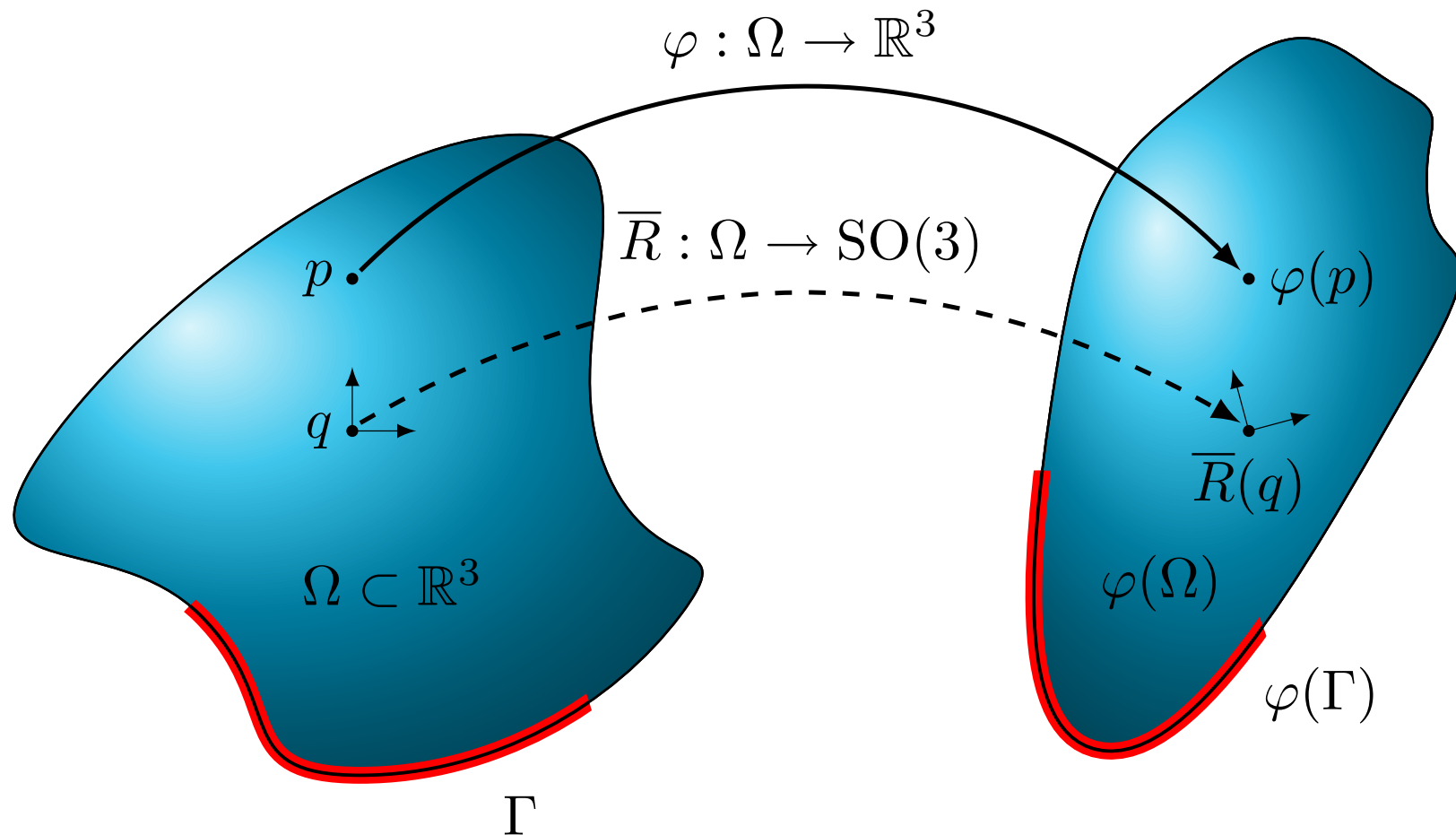
Unter Belastung wandern Versetzungen (reversibel!) und dissipieren Energie. **Obwohl Versetzungen wandern kein Plastizitätsmodell!**



Simultanes Minimierungsproblem im Cosserat-Modell

Minimiere die elastische Gesamtenergie des Körpers. zurück $\Rightarrow$

$$\int_{\Omega} W(\nabla \varphi(x), \bar{R}(x)) \, dV \mapsto \min. (\varphi, \bar{R}), \quad \varphi(\Gamma) = g_d$$



Beweisskizze Kornsche Ungleichung

Gårdingsche Ungleichung: F_p invertierbar und glatt, es gibt $\lambda > 0$:

$$\|\nabla \phi F_p^{-1} + F_p^{-T} \nabla \phi^T\|_{L^2(\Omega)}^2 + \lambda \|\phi\|_{L^2(\Omega)}^2 \geq c^+ \|\phi\|_{H^{1,2}(\Omega)}^2.$$

Zu zeigen $\|\nabla \phi F_p^{-1} + F_p^{-T} \nabla \phi^T\|_{L^2(\Omega)}^2 = 0 \Rightarrow \phi = 0$, dann Kompaktheitsschluss.

Sei $\phi \in C_0^\infty(\Omega, \Gamma) \cap H^{1,2}(\Omega)$.

$$\nabla \phi F_p^{-1} = A \in L^2(\Omega, \mathfrak{so}(3)) \Rightarrow \nabla \phi = A F_p \Rightarrow$$

$$0 = \text{Curl } \nabla \phi = L_{F_p} \cdot \nabla A + A \text{Curl } F_p, L_{F_p} \text{ invertierbar, falls } \det[F_p] \neq 0 \Rightarrow$$

$$\nabla A = -L_{F_p}^{-1} \cdot [A \text{Curl } F_p] \Rightarrow A \in W^{1,2}(\Omega)$$

$$\phi|_\Gamma = 0 \Rightarrow 0 = \nabla \phi \cdot \tau_i = A(F_p \cdot \tau_i), i = 1, 2 \Rightarrow \text{rank}(A)|_\Gamma \leq 1 \Rightarrow A|_\Gamma = 0$$

$$\nabla A = -L_{F_p}^{-1} \cdot [A \text{Curl } F_p], A|_\Gamma = 0, \text{ PDE 1. Ord., linear} \Rightarrow A \equiv 0$$

$$A \equiv 0 \Rightarrow \nabla \phi = A F_p = 0 \Rightarrow \nabla \phi = 0 \Rightarrow \phi = 0.$$

zurück $\Rightarrow$

Erweiterte 1. Kornsche Ungleichung für Schalen

Satz [N. M3AS07]

Sei $\omega \subset \mathbb{R}^2$ ein glatt berandetes Gebiet und $\gamma_0 \subset \partial\omega$ habe volles 1-dimensionales Hausdorff-Maß. Außerdem sei $F_p, F_p^{-1} \in W^{1,2+\delta}(\overline{\omega}, GL(3))$. Dann gilt

$$\exists c^+ > 0 \quad \forall m \in H^1(\omega), m|_{\gamma_0} = 0 :$$

$$\|(\nabla m|0) F_p^{-1}(x) + F_p^{-T}(x) (\nabla m|0)^T\|_{L^2(\omega)}^2 \geq c^+ \|m\|_{H^1(\omega)}^2 .$$

Anwenden auf die Energie

$$\begin{aligned} & \frac{1}{4} \|R^T (\nabla m|R_3) + (\nabla m|R_3)^T R - 2 \mathbb{1}\|^2 \\ & \sim \|\text{sym}((R_1|R_2)^T \nabla m - \mathbb{1}_2)\|^2 + \left(\langle m_x, R_3 \rangle^2 + \langle m_y, R_3 \rangle^2 \right) \\ & \sim \|R^T (\nabla m|0) + (\nabla m|0)^T R\|^2 + \text{Terme niedriger Ordnung} \end{aligned}$$

zurück $\Rightarrow$