

Cosserat-Rotationen minimaler Energie und Synthetische Reproduktion einer Nano-Einkerbung

Andreas Fischle und Patrizio Neff

TU Darmstadt

20. Juni 2007



Übersicht

Abschnitt

- 1 Begriffe der finiten Kontinuumsmechanik
- 2 Das finite Cosserat-Modell
- 3 Minimierung der Cosserat-Scherenergie
- 4 Synthetische Reproduktion einer Nano-Einkerbung

Lie-Gruppen: Definition

Definition (Lie-Gruppe)

Eine Gruppe G , deren zugrunde liegende Menge gleichzeitig eine glatte, reelle Mannigfaltigkeit ist, heisst reelle Lie-Gruppe, wenn sowohl

① $\mu : G \times G \rightarrow G$, die Produktabbildung, als auch

② $\iota : G \rightarrow G$, die Inversion,

glatte Abbildungen im Sinne von Mannigfaltigkeiten sind.

Beispiel (Matrizengruppen)

Eine reelle Lie-Gruppe, die als Menge in

$$\mathrm{GL}(n, \mathbb{R}) := \{M \in \mathbb{M}(n, \mathbb{R}) : \det[M] \neq 0\}$$

enthalten ist und deren Produkt- und Inversionsabbildung mit den induzierten übereinstimmen, wird reelle Matrizen­gruppe genannt.

Beispiel: Die Kreisgruppe als Matrizengruppe

$\mathbb{S}^1 \subset \mathbb{C}$ ist eine Lie-Gruppe

- $\mathbb{S}^1 := \{z \in \mathbb{C} : |z| = 1\}$
- Untergruppe der Einheitengruppe $\mathbb{C} \setminus \{0\}$
- Reelle Unter-Mannigfaltigkeit des reellen Vektorraumes $\mathbb{C}$,
 $\dim(\mathbb{S}^1) = 1$
- Die Restriktionen der Multiplikation und Inversion von $\mathbb{C} \setminus \{0\}$ auf $\mathbb{S}^1$ sind glatte Abbildungen

Einbettung in $GL(2, \mathbb{R})$

- $\mathbb{C} \cong \text{span} \left(\left\{ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right\} \right), \quad x + iy \mapsto \begin{pmatrix} x & -y \\ y & x \end{pmatrix} \in GL^+(2, \mathbb{R}) \cup \{0\}$
- Ist ein Isomorphismus zwischen Zahlkörpern
- $z \in \mathbb{S}^1 \iff z = e^{i\vartheta} = \cos(\vartheta) + i \sin(\vartheta) \mapsto \begin{pmatrix} \cos(\vartheta) & -\sin(\vartheta) \\ \sin(\vartheta) & \cos(\vartheta) \end{pmatrix} \in SO(2)$

Felder und Konzepte der Kontinuumsmechanik

Deformation einer Konfiguration

- Referenzkonfiguration: $\Omega \subset \mathbb{R}^3$
- Deformation: $\varphi : \Omega \rightarrow \Omega_{\text{cur}}, \varphi \in \text{Diff}^+(\Omega, \Omega_{\text{cur}})$
- Deformationsgradient: $F := \nabla \varphi \in \text{GL}^+(3, \mathbb{R})$, punktweise

Theorem (Rechts-Polarzerlegung des Deformationsgradienten F)

$\forall F \in \text{GL}^+(3, \mathbb{R}). \exists! (R, U) \in \text{SO}(3) \times \text{PSym}(3, \mathbb{R})$ mit $F = RU$.
Weiterhin gilt $R^T F = U = \sqrt{F^T F}$ und $R = F U^{-1}$.

Bezeichnungen

- R , bzw. $\text{polar}(F)$: polare Rotation, bzw. Kontinuumsrotation
- U : rechter Biot-Dehnungstensor

Hyperelastische Kontinuumsmechanik

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

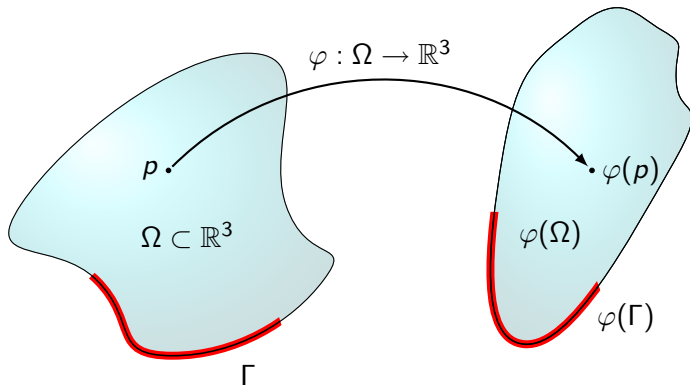


Abbildung: Schematische Darstellung eines Randwertproblems im Rahmen der klassischen finiten Hyperelastizität.

Der Biot-Dehnungstensor U

Hauptachsentransformation von $U \in \text{PSym}(3, \mathbb{R})$

- $\exists Q \in \text{SO}(3, \mathbb{R})$, so dass $U = Q \text{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3) Q^T$ und $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \sigma_3 > 0$
- Koordinatenwechsel: $Q^T U Q = D$ und $Q^T F Q = \tilde{R} D$, mit $D = \text{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ und $\tilde{R} = Q^T \text{polar}(F) Q \in \text{SO}(3)$

Q ist nicht eindeutig bestimmt!

Grund: Selbst wenn die σ_i paarweise verschieden sind, so sind nur die entsprechenden Eigenräume eindeutig festgelegt. Diese haben aber a priori keine ausgezeichnete Orientierung.

Bezeichnungen

- Hauptdehnungsrichtungen: Eigenräume von U
- Hauptdehnungen: Eigenwerte von U , bzw. Singulärwerte σ_i von F

Rechts-Polarzerlegung: $F = RU$

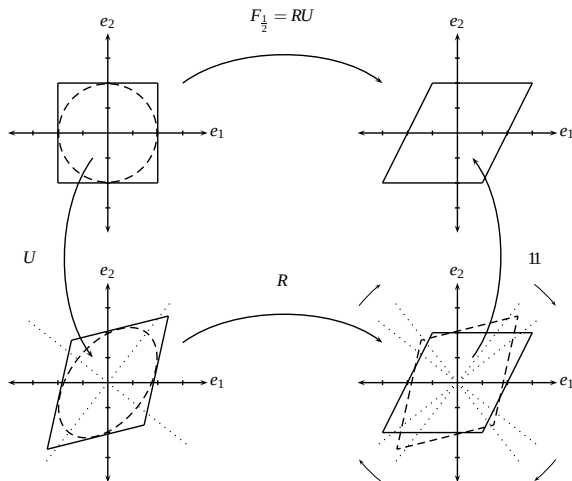


Abbildung: Polarzerlegung der ebenen Scherung $F_{1/2} := \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

Übersicht

Abschnitt

- 1 Begriffe der finiten Kontinuumsmechanik
- 2 Das finite Cosserat-Modell**
- 3 Minimierung der Cosserat-Scherenergie
- 4 Synthetische Reproduktion einer Nano-Einkerbung

Geschichte

Ursprünge (ca. 1900)

- E. und F. Cosserat: *Théorie des Corps Déformables*
- Echter Drehfreiheitsgrad: *Mikrorotationen* $\bar{R} \in SO(3)$
- Direktormodell, d.h., man betrachtet ausgezeichnete Richtungen
- Cosserats zeigen $W(F, \bar{R}, D_x \bar{R}) = W(\bar{R}^T F, \bar{R}^T D_x \bar{R})$ aus Invarianzgründen
- Keine konstitutiven Annahmen

Renaissance Mikropolarer Modelle (ab 1960)

- Kröner, Toupin, Mindlin, Eringen: Theorie mikropolarer Medien
- Anwendungen: Schalentheorie, granulare Medien, Flüssigkristalle
- Regularisieren - für gewisse Parameterbereiche - klassische Modelle (klassisch $\hat{=}$ ohne zusätzliche Drehfreiheitsgrade)

Die Felder des finiten Cosserat-Modells

Mikrorotationen als zusätzlicher Freiheitsgrad

- Feld von Rotationen $\bar{R} \in SO(3)$ als echter zweiter Freiheitsgrad
- Spezialfall einer mikromorphen Theorie: $SO(3) < GL(3, \mathbb{R})$
- Physikalische Interpretation der Mikrorotationen problematisch: Gitterrotationen, Dislokationen, granulare Effekte?
- Experimentelle Lage ist erbärmlich ...

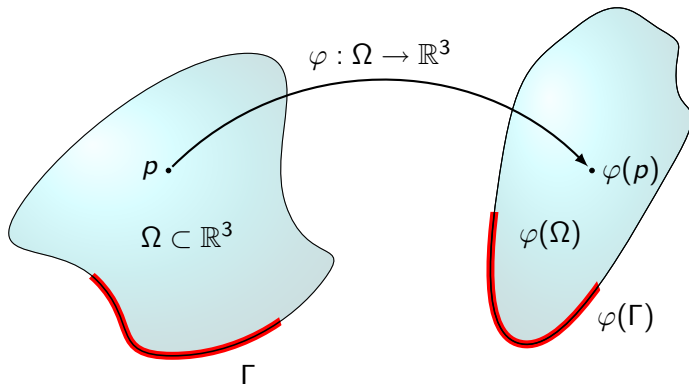
Bezeichnungen der Felder

- 1 Mikrorotationstensor: $\bar{R}$
- 2 Mikrodehnungstensor: $\bar{U} := \bar{R}^T F$, wobei $F := \nabla \varphi$, $\bar{U} \notin \text{Sym}(3, \mathbb{R})$
- 3 Cosserat-Krümmung:

$$\bar{R}^T D_x \bar{R} := (\bar{R}^T \nabla(\bar{R}.e_1), \bar{R}^T \nabla(\bar{R}.e_2), \bar{R}^T \nabla(\bar{R}.e_3))$$

Cosserat-Modell

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



Cosserat-Modell

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

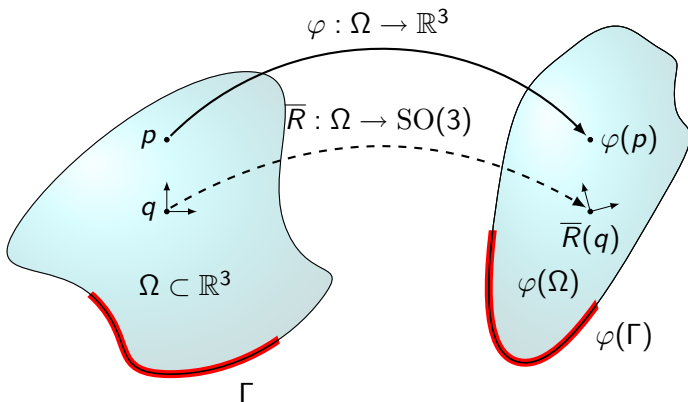


Abbildung: Schematische Darstellung eines Randwertproblems im Rahmen der finiten Cosserat-Theorie.

Das finite Cosserat-Modell: Hyperelastische Formulierung

Variationelles Problem

$$\mathcal{I}(\varphi, \bar{R}) := \int_{\Omega} W_{\text{mp}}(F(x), \bar{R}(x)) + W_{\text{curv}}(\bar{R}(x), D_x \bar{R}(x)) \, dV \mapsto \min. \text{ bzgl. } (\varphi, \bar{R})$$

Definition der Energieanteile: Isotroper Fall

$$W_{\text{mp}}(\bar{U}) := W_{\text{shear}}(\bar{U}) + W_{\text{vol}}(\det[\bar{U}])$$

$$W_{\text{shear}}(\bar{U}) := \mu \left\| \text{sym}(\bar{U} - \mathbb{1}) \right\|^2 + \mu_c \left\| \text{skew}(\bar{U} - \mathbb{1}) \right\|^2$$

$$W_{\text{vol}}(\det[\bar{U}]) := \frac{\lambda}{4} \left((\det[\bar{U}] - 1)^2 + (\det[\bar{U}]^{-1} - 1)^2 \right)$$

$$W_{\text{curv}}(\bar{R}, D_x \bar{R}) := 2 \frac{\mu}{q} (1 + L_c^2 \|\bar{R}^T D_x \bar{R}^2\|)^{\frac{q}{2}}$$

Bezeichnungen

$$\bar{U} = \bar{R}^T F, \quad F = \nabla \varphi, \quad D_x \bar{R} := \left(\nabla(\bar{R} \cdot e_1), \nabla(\bar{R} \cdot e_2), \nabla(\bar{R} \cdot e_3) \right)$$

Das finite Cosserat-Modell: Hyperelastische Formulierung

Variationelles Problem ohne Krümmungsenergie $\hat{=} L_c = 0$

$$\mathcal{I}(\varphi, \bar{R}) := \int_{\Omega} W_{\text{mp}}(F(x), \bar{R}(x)) + \cancel{W_{\text{curv}}(\bar{R}(x), D_x \bar{R}(x))} \, dV \mapsto \text{min. bzgl. } \bar{R}$$

Definition der Energieanteile: Isotroper Fall

$$W_{\text{mp}}(\bar{U}) := W_{\text{shear}}(\bar{U}) + W_{\text{vol}}(\det[\bar{U}])$$

$$W_{\text{shear}}(\bar{U}) := \mu \left\| \text{sym}(\bar{U} - \mathbb{1}) \right\|^2 + \mu_c \left\| \text{skew}(\bar{U} - \mathbb{1}) \right\|^2$$

$$W_{\text{vol}}(\det[\bar{U}]) := \frac{\lambda}{4} \left((\det[\bar{U}] - 1)^2 + (\det[\bar{U}]^{-1} - 1)^2 \right)$$

$$W_{\text{curv}}(\bar{R}, D_x \bar{R}) := 2 \frac{\mu}{q} (1 + L_c^2 \|\bar{R}^T D_x \bar{R}^2\|)^{\frac{q}{2}} \quad \leftarrow \text{konstant für } L_c = 0$$

Bezeichnungen

$$\bar{U} = \bar{R}^T F, \quad F = \nabla \varphi, \quad D_x \bar{R} := (\nabla(\bar{R} \cdot e_1), \nabla(\bar{R} \cdot e_2), \nabla(\bar{R} \cdot e_3))$$

Das finite Cosserat-Modell: Hyperelastische Formulierung

Variationelles Problem ohne Krümmungsenergie $\hat{=} L_c = 0$

$$\mathcal{I}(\varphi, \bar{R}) := \int_{\Omega} W_{\text{shear}}(F, \bar{R}) + W_{\text{vol}}(F, \bar{R}) \, dV \mapsto \text{min. bzgl. } \bar{R}$$

Definition der Energieanteile: Isotroper Fall

$$W_{\text{mp}}(\bar{U}) := W_{\text{shear}}(\bar{U}) + W_{\text{vol}}(\det[\bar{U}])$$

$$W_{\text{shear}}(\bar{U}) := \mu \left\| \text{sym}(\bar{U} - \mathbb{1}) \right\|^2 + \mu_c \left\| \text{skew}(\bar{U} - \mathbb{1}) \right\|^2$$

$$W_{\text{vol}}(\det[\bar{U}]) := \frac{\lambda}{4} \left((\det[\bar{U}] - 1)^2 + (\det[\bar{U}]^{-1} - 1)^2 \right) \quad \leftarrow \text{konstant bzgl. } \bar{R}$$

$$W_{\text{curv}}(\bar{R}, D_x \bar{R}) := 2 \frac{\mu}{q} (1 + L_c^2 \|\bar{R}^T D_x \bar{R}^2\|)^{\frac{q}{2}} \quad \leftarrow \text{konstant für } L_c = 0$$

Bezeichnungen

$$\bar{U} = \bar{R}^T F, \quad F = \nabla \varphi, \quad D_x \bar{R} := (\nabla(\bar{R} \cdot e_1), \nabla(\bar{R} \cdot e_2), \nabla(\bar{R} \cdot e_3))$$

Das finite Cosserat-Modell: Hyperelastische Formulierung

Variationelles Problem mit $L_c = 0$ und ~~W_{vol}~~

$$\mathcal{I}(\varphi, \bar{R}) := \int_{\Omega} W_{\text{shear}}(F, \bar{R}) + \cancel{W_{\text{vol}}(F, \bar{R})} dV \mapsto \text{min. bzgl. } \bar{R}$$

Definition der Energieanteile: Isotroper Fall

$$W_{\text{mp}}(\bar{U}) := W_{\text{shear}}(\bar{U}) + W_{\text{vol}}(\det[\bar{U}])$$

$$W_{\text{shear}}(\bar{U}) := \mu \left\| \text{sym}(\bar{U} - \mathbf{1}) \right\|^2 + \mu_c \left\| \text{skew}(\bar{U} - \mathbf{1}) \right\|^2$$

$$W_{\text{vol}}(\det[\bar{U}]) := \frac{\lambda}{4} \left((\det[\bar{U}] - 1)^2 + (\det[\bar{U}]^{-1} - 1)^2 \right) \quad \leftarrow \text{konstant bzgl. } \bar{R}$$

$$W_{\text{curv}}(\bar{R}, D_x \bar{R}) := 2 \frac{\mu}{q} (1 + L_c^2 \|\bar{R}^T D_x \bar{R}^2\|)^{\frac{q}{2}} \quad \leftarrow \text{konstant für } L_c = 0$$

Bezeichnungen

$$\bar{U} = \bar{R}^T F, \quad F = \nabla \varphi, \quad D_x \bar{R} := (\nabla(\bar{R} \cdot e_1), \nabla(\bar{R} \cdot e_2), \nabla(\bar{R} \cdot e_3))$$

Das finite Cosserat-Modell: Hyperelastische Formulierung

Variationelles Problem mit $L_c = 0$ und ~~W_{vol}~~

$$\mathcal{I}(\varphi, \bar{R}) := \int_{\Omega} \mu \left\| \text{sym}(\bar{R}^T F - \mathbb{1}) \right\|^2 + \mu_c \left\| \text{skew}(\bar{R}^T F - \mathbb{1}) \right\|^2 dV \mapsto \text{min. bzgl. } \bar{R}$$

Definition der Energieanteile: Isotroper Fall

$$W_{\text{mp}}(\bar{U}) := W_{\text{shear}}(\bar{U}) + W_{\text{vol}}(\det[\bar{U}])$$

$$W_{\text{shear}}(\bar{U}) := \mu \left\| \text{sym}(\bar{U} - \mathbb{1}) \right\|^2 + \mu_c \left\| \text{skew}(\bar{U} - \mathbb{1}) \right\|^2$$

$$W_{\text{vol}}(\det[\bar{U}]) := \frac{\lambda}{4} \left((\det[\bar{U}] - 1)^2 + (\det[\bar{U}]^{-1} - 1)^2 \right) \quad \leftarrow \text{konstant bzgl. } \bar{R}$$

$$W_{\text{curv}}(\bar{R}, D_x \bar{R}) := 2 \frac{\mu}{q} (1 + L_c^2 \|\bar{R}^T D_x \bar{R}^2\|)^{\frac{q}{2}} \quad \leftarrow \text{konstant für } L_c = 0$$

Bezeichnungen

$$\bar{U} = \bar{R}^T F, \quad F = \nabla \varphi, \quad D_x \bar{R} := \left(\nabla(\bar{R} \cdot e_1), \nabla(\bar{R} \cdot e_2), \nabla(\bar{R} \cdot e_3) \right)$$

Relaxiertes Biot-Modell

Variationelle Formulierung des Biot-Modells

$$\mathcal{I}(\varphi) = \int_{\Omega} W_{\text{Biot}}(U) \, dV \mapsto \min. \text{ bzgl. } \varphi$$

$$W_{\text{Biot}}(U) := \mu \|U - \mathbb{1}\|^2 + W_{\text{vol}}(\det[U])$$

Relaxierte Biot-Energie: $R \in \text{SO}(3)$ als unabhängiges Feld

$$W_{\text{Relax}}(F, R) := \mu \left\| \text{sym}(R^T F - \mathbb{1}) \right\|^2 + \mu_c \left\| \text{skew}(R^T F - \mathbb{1}) \right\|^2 \\ + W_{\text{vol}}(\det[R^T F])$$

Im Fall $\mu = \mu_c$ gilt:

$$W_{\text{Relax}}(F, \text{polar}(F)) = W_{\text{Biot}}(\text{polar}(F)^T F) = W_{\text{Biot}}(U)$$

Relaxiertes Biot-Modell

Variationelle Formulierung des Biot-Modells

$$\mathcal{I}(\varphi) = \int_{\Omega} W_{\text{Biot}}(U) \, dV \mapsto \min. \text{ bzgl. } \varphi$$

$$W_{\text{Biot}}(U) := \mu \|U - \mathbb{1}\|^2 + W_{\text{vol}}(\det[U])$$

Relaxierte Biot-Energie: $R \in \text{SO}(3)$ als unabhängiges Feld

$$W_{\text{Relax}}(F, R) := \mu \left\| \text{sym}(R^T F - \mathbb{1}) \right\|^2 + \mu_c \left\| \text{skew}(R^T F - \mathbb{1}) \right\|^2 \\ + \cancel{W_{\text{vol}}(\det[R^T F])} \quad \leftarrow \text{konstant bzgl. } R$$

Im Fall $\mu = \mu_c$ gilt:

$$W_{\text{Relax}}(F, \text{polar}(F)) = W_{\text{Biot}}(\text{polar}(F)^T F) = W_{\text{Biot}}(U)$$

Minimierung bezüglich $SO(3)$: Warum?

Konvergenzprobleme bei der numerischen Minimierung (FEM) bzgl. des Rotationsfeldes $\bar{R}$ mit sehr kleinem L_c

Idee (Neff): Bestimme pktw. analytisches Minimum von $W_{\text{shear}}(F, \bar{R})$ bzgl. $\bar{R}$ ($\hat{=} L_c = 0$) um gute Startwerte für Abstieg im vollen Problem ($L_c > 0$) zu erhalten.

Verständnis der Cosserat-Scherenergie $W_{\text{shear}}(F, \bar{R})$

- Kopplungsmechanismus zwischen den Feldern $\bar{R}$ und F , bzw.
- Wie stellen sich die Cosserat-Rotationen $\bar{R}$ in Abwesenheit der Cosserat-Krümmung ein?
- Welche Rolle spielen dabei die Parameter μ und μ_c ?

Welche Form hat $W_{\text{red}}(F) := \inf_{\bar{R} \in SO(3)} W_{\text{shear}}(F, \bar{R})$?

Hat die reduzierte Energie bessere analytische Eigenschaften als z.B. $\|U - \mathbb{1}\|^2$?

Übersicht

Abschnitt

- 1 Begriffe der finiten Kontinuumsmechanik
- 2 Das finite Cosserat-Modell
- 3 Minimierung der Cosserat-Scherenergie**
- 4 Synthetische Reproduktion einer Nano-Einkerbung

Diplomarbeit bei Neff: Minimierung auf $SO(3)$

Aufgabe: Bestimme explizit

$$\operatorname{argmin}_{\bar{R} \in SO(3)} \mu \left\| \operatorname{sym}(\bar{R}^T F - \mathbb{1}) \right\|^2 + \mu_c \left\| \operatorname{skew}(\bar{R}^T F - \mathbb{1}) \right\|^2$$

für beliebige $0 \leq \mu_c \leq \mu$ und gegebenes $F \in GL^+(3, \mathbb{R})$.

Ergebnisse

- Die globalen Minima und ihre explizite Darstellung: $\operatorname{rpolar}^\pm(F)$
- Ansatzweises geometrisches Verständnis der Minimierer als Funktion von F
- Die Minimierer sind numerisch (z.T. unabhängig) verifiziert
- Konvergenz der FEM-Implementationen hat sich durch explizite Startwerte verbessert
- Auch die ausreduzierte Energie $W_{\text{red}}(F)$ ist bekannt

Lineare Cosserat-Theorie: Infinitesimal ist trivial

Cosserat-Modell: Linear isotrop

Annahme: $F \approx \mathbb{1} + \nabla u$ und $\bar{R} \approx \mathbb{1} + \bar{A}$, mit $\bar{A} \in \mathfrak{so}(3)$

$$\mathcal{I}(u, \bar{A}) = \int_{\Omega} W_{\text{mp}}^{\text{lin}}(\nabla u, \bar{A}) + \mu L_c^2 \|D_x \bar{A}\|^2 dV \mapsto \min. \text{ bzgl. } (u, \bar{A})$$

$$W_{\text{mp}}^{\text{lin}}(\nabla u, \bar{A}) := \mu \|\text{sym}(\nabla u - \bar{A})\|^2 + \mu_c \|\text{skew}(\nabla u - \bar{A})\|^2 + \frac{\lambda}{2} \text{tr} [\nabla u - \bar{A}]^2$$

Für $\mu > 0$, $\mu_c > 0$ und $L_c = 0$ gilt im linear isotropen Fall

- $\text{skew}(\nabla u) = \underset{\bar{A} \in \mathfrak{so}(3)}{\text{argmin}} \mu \|\text{sym}(\nabla u)\|^2 + \mu_c \|\text{skew}(\nabla u - \bar{A})\|^2 + \frac{\lambda}{2} \text{tr} [\nabla u]^2$
- $\text{polar}(F) = \text{polar}(\mathbb{1} + \nabla u) = \text{skew}(\nabla u) + \text{Terme höherer Ordnung}$

In den degenerierten Fällen ergibt sich generell

- $\mu_c = 0$: Verschiebung u und infinitesimales Drehfeld $\bar{A}$ entkoppeln
- $L_c = 0$: Symmetrie des Cauchy-Spannungstensor $\sigma := D_{\nabla u} W_{\text{mp}}^{\text{lin}}$

Existenz globaler Minima

Man sieht leicht

- $W_{\text{shear}}(F, \bar{R})$ ist ein Polynom und daher bezüglich $\bar{R}$ zweimal stetig differenzierbar
- $SO(3)$ ist kompakte Teilmenge von $M(3, \mathbb{R})$
- $SO(3)$ ist eine Mannigfaltigkeit ohne Rand (wie z.B. $S^1 \subset \mathbb{R}^2$)

Daraus folgt

- Existenz globaler Minima
- Die globalen Minima liegen mit Sicherheit nicht auf dem Rand
- Lokale Minima können durch Ableiten bestimmt werden
- Die globalen Minima erhalten wir durch Abschätzen der lokalen Minima untereinander

Minima skalarwertiger Funktionen auf $SO(3)$

Der Rechenweg: Kurvendiskussion

- 1 Berechne $D_R W_{\text{shear}}(F, R)$ und $D_R^2 W_{\text{shear}}(F, R)$
- 2 Charakterisiere die kritischen Rotationen $R_{\text{crit}}: D_R W_{\text{shear}}|_{R_{\text{crit}}} = 0$
- 3 Bestimme lokal minimale Äste $R_{\text{min}}: D_R^2 W_{\text{shear}}|_{R_{\text{min}}}$ ist positiv definit
- 4 Schliesse auf die "Minimalitätsgebiete" der Äste im Parameterraum, d.h. auf die Mengen $\{F \in GL^+(3, \mathbb{R}) : R_{\text{min}}(F) \text{ ist definiert und lokal minimal}\}$
- 5 Schätze für gegebenes F alle lokalen Minima auf ihren Existenzgebieten gegeneinander ab

Minima skalarwertiger Funktionen auf $SO(3)$

Der Rechenweg: Kurvendiskussion

- 1 Berechne $D_R W_{\text{shear}}(F, R)$ und $D_R^2 W_{\text{shear}}(F, R)$
- 2 Charakterisiere die kritischen Rotationen $R_{\text{crit}}: D_R W_{\text{shear}}|_{R_{\text{crit}}} = 0$
- 3 Bestimme lokal minimale Äste $R_{\text{min}}: D_R^2 W_{\text{shear}}|_{R_{\text{min}}}$ ist positiv definit
- 4 Schliesse auf die "Minimalitätsgebiete" der Äste im Parameterraum, d.h. auf die Mengen $\{F \in GL^+(3, \mathbb{R}) : R_{\text{min}}(F) \text{ ist definiert und lokal minimal}\}$
- 5 Schätze für gegebenes F alle lokalen Minima auf ihren Existenzgebieten gegeneinander ab

Leichter gesagt als getan ...

- Nullstellenmenge der 1. Ableitung ist algebraische Varietät
- Welche Darstellung der kritischen Rotationen R_{min} ist geeignet?
- Mathematica[®] liefert inkl. degenerierter Fälle viele kritische Äste

Reduktion der Dimension

Dimensionsbetrachtung

Die Energie W_{shear} ist explizit über die Matrixdarstellung von $SO(3) \subset \mathbb{M}(3, \mathbb{R})$ definiert. Wir betrachten hier also eine Funktion

$$W : \underbrace{\mathbb{M}(3, \mathbb{R})}_F \times \underbrace{\mathbb{M}(3, \mathbb{R})}_R \times \underbrace{\mathbb{R} \times \mathbb{R}}_{(\mu, \mu_c)} \cong \mathbb{R}^{20} \rightarrow \mathbb{R}$$

unter der Nebenbedingung $R^T R = \mathbb{1}, \det[R] = 1$.

Nutze aus:

- Isotropie von sym, skew und $\|\cdot\|^2 \implies$ Nur $\sigma_i(F)$ sind relevant
- Es reicht die 3 Spezialfälle $(\mu, \mu_c) \in \{(1, 0), (0, 1), (1, 1)\}$ zu betrachten
- Parametrisierung der Rotation R durch Einheits-Quaternionen $q \in \mathbb{H}, |q| = 1$

$$\widehat{W} : \underbrace{\mathbb{R}^3}_{(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3) \triangleq F} \times \underbrace{\mathbb{H}}_{(w, x, y, z) \triangleq R} \cong \mathbb{R}^7 \rightarrow \mathbb{R}$$

Erfolgreiche Methoden I : Mathematische Vereinfachungen

Koordinaten und Symmetrie

- Koordinatenwechsel in Hauptdehnungsrichtungen: $Q^T U Q = D$
- Lösung des Problems “relativ” zur Polarzerlegung

Darstellungen von Rotationen: $SO(3)$ und $\mathbb{H}$

- Einheits-Quaternionen brachten den Erfolg
- Bei der zweiten Ableitung führte eine Mischung von Darstellungen zum Erfolg
- Reformulierung der Minimierungsaufgabe auf $\mathbb{S}^3$ als Minimierung auf $\mathbb{R}^4$ per Lagrange-Multiplikatoren

Erfolgreiche Methoden II: Einsatz von Mathematica[®]

Symbolische Berechnungen

- Symbolische Berechnung formal kritischer Einheitsquaternionen per CAD (Cylindrical Algebraic Decomposition): 130 Lösungen
- Parametrisierung der *reellen* Existenzbereiche
- Reduktion von Ungleichungssystemen über $\mathbb{R}$

Numerische Verifikation

- Numerischer Vergleich der von den kritischen Rotationen realisierten Energien
- Numerische Bestimmung einer Zellzerlegung des Singulärwerttraumes in Minimalitätsgebiete
- Geometrische Analyse und Visualisierung der Minima
- Experimentelle Verifikation von Teilergebnissen durch “brute force random sampling” auf $SO(3)$

Kritische Punkte: Ein algebraisches Problem

Löse bzgl. $(w, x, y, z, \lambda) \in \mathbb{R}^5$, mit Parametern $\sigma_i \in \mathbb{R}_0^+$

$$0 = w^2 + x^2 + y^2 + z^2 - 1$$

$$0 = 4\sigma_2^2 wx^2 + 4\sigma_3^2 wx^2 - 8\sigma_2\sigma_3 wx^2 + 4\sigma_1^2 wy^2 + 4\sigma_3^2 wy^2 \\ - 8\sigma_1\sigma_3 wy^2 + 4\sigma_1^2 wz^2 + 4\sigma_2^2 wz^2 - 8\sigma_1\sigma_2 wz^2 - 2\lambda w$$

$$0 = 16\sigma_2^2 x^3 + 16\sigma_3^2 x^3 - 8\sigma_2^2 x - 8\sigma_3^2 x + 4\sigma_2^2 w^2 x + 4\sigma_3^2 w^2 x - 8\sigma_2\sigma_3 w^2 x + 4\sigma_1^2 y^2 x \\ + 4\sigma_2^2 y^2 x + 16\sigma_3^2 y^2 x + 8\sigma_1\sigma_2 y^2 x + 4\sigma_1^2 z^2 x + 16\sigma_2^2 z^2 x + 4\sigma_3^2 z^2 x + 8\sigma_1\sigma_3 z^2 x - 2\lambda x + 8\sigma_2 x + 8\sigma_3 x$$

$$0 = 16\sigma_1^2 y^3 + 16\sigma_3^2 y^3 - 8\sigma_1^2 y - 8\sigma_3^2 y + 4\sigma_1^2 w^2 y + 4\sigma_3^2 w^2 y - 8\sigma_1\sigma_3 w^2 y + 4\sigma_1^2 x^2 y \\ + 4\sigma_2^2 x^2 y + 16\sigma_3^2 x^2 y + 8\sigma_1\sigma_2 x^2 y + 16\sigma_1^2 z^2 y + 4\sigma_2^2 z^2 y + 4\sigma_3^2 z^2 y + 8\sigma_2\sigma_3 z^2 y - 2\lambda y + 8\sigma_1 y + 8\sigma_3 y$$

$$0 = 16\sigma_1^2 z^3 + 16\sigma_2^2 z^3 - 8\sigma_1^2 z - 8\sigma_2^2 z + 4\sigma_1^2 w^2 z + 4\sigma_2^2 w^2 z - 8\sigma_1\sigma_2 w^2 z + 4\sigma_1^2 x^2 z + 16\sigma_2^2 x^2 z \\ + 4\sigma_3^2 x^2 z + 8\sigma_1\sigma_3 x^2 z + 16\sigma_1^2 y^2 z + 4\sigma_2^2 y^2 z + 4\sigma_3^2 y^2 z + 8\sigma_2\sigma_3 y^2 z - 2\lambda z + 8\sigma_1 z + 8\sigma_2 z$$

Bezeichnungen

- $(w, x, y, z) \in \mathbb{R}^4 \hat{=} w + ix + jy + kz \in \mathbb{H}$
- Singulärwerte von F: $\text{spec}(U) = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$, $\sigma_1 > \sigma_2 > \sigma_3$
- λ erzwingt Nebenbedingung: $(w, x, y, z) \in \mathbb{S}^3$

Zweite Ableitungen auf Lie-Gruppen: Typisierung

Differential auf Mannigfaltigkeiten: Tangentialbündel

- G eine Lie-Gruppe (auch Mfk), TG das zugehörige Tangentialbündel
- $W : G \rightarrow \mathbb{R}$, $W \in C^2(G, \mathbb{R})$
- $DW : TG \rightarrow T\mathbb{R}$
- $D^2W : TTG \rightarrow TT\mathbb{R}$

Ausnutzen der Gruppenstruktur: $TG \cong G \times \mathfrak{g}$ (sog. Linkstrivialisierung)

- $DW : G \times \underbrace{\mathfrak{g}}_{\text{linear}} \rightarrow T\mathbb{R} \hat{=} \mathbb{R}$
- $D^2W : G \times \underbrace{\mathfrak{g} \times \mathfrak{g}}_{\text{bilinear}} \hat{=} G \times \underbrace{\mathbb{R}^{\dim \mathfrak{g}} \times \mathbb{R}^{\dim \mathfrak{g}}}_{\text{bilinear}} \rightarrow TT\mathbb{R} \hat{=} \mathbb{R}$
- $\forall g \in G$ liefert $D^2W \Big|_g$ die Matrixdarstellung einer Bilinearform auf $\mathbb{R}^{\dim \mathfrak{g}}$

Die zweite Ableitung $W_{(1,0)}(F, R)$ und $\Theta(F)$

Überprüfe positive Definitheit von

$$\text{sym}(D_R^2 W_{1,0}) : \underbrace{\text{GL}^+(3, \mathbb{R})}_{F \triangleq (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)} \times \underbrace{\text{SO}(3)}_{R_{\text{crit}} \triangleq (w, x, y, z) \in \mathbb{S}^3} \triangleq \Theta(F, R_{\text{crit}}) := \begin{pmatrix} \Theta_{11} & \Theta_{12} & \Theta_{13} \\ \Theta_{21} & \Theta_{22} & \Theta_{23} \\ \Theta_{31} & \Theta_{32} & \Theta_{33} \end{pmatrix}$$

Die zweite Ableitung $W_{(1,0)}(F, R)$ und $\Theta(F)$

Überprüfe positive Definitheit von

$$\text{sym}(D_R^2 W_{1,0}) : \underbrace{\text{GL}^+(3, \mathbb{R})}_{F \hat{=} (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)} \times \underbrace{\text{SO}(3)}_{R_{\text{crit}} \hat{=} (w, x, y, z) \in \mathbb{S}^3} \hat{=} \Theta(F, R_{\text{crit}}) := \begin{pmatrix} \Theta_{11} & \Theta_{12} & \Theta_{13} \\ \Theta_{21} & \Theta_{22} & \Theta_{23} \\ \Theta_{31} & \Theta_{32} & \Theta_{33} \end{pmatrix}$$

Diagonale

$$\begin{aligned} 2\Theta_{11} &= 4\sigma_2 - 2\sigma_2^2 + 4\sigma_3 - 4\sigma_2\sigma_3 - 2\sigma_2^2 + 8(\sigma_2 + \sigma_3)(-1 + 2\sigma_2 + 2\sigma_3)x^2 - 16(\sigma_2 + \sigma_3)^2x^4 \\ &\quad + 8\sigma_3(-1 + \sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3)y^2 - 8(\sigma_2 + \sigma_3)(\sigma_1 + \sigma_2 + 3\sigma_3)x^2y^2 - 8\sigma_3(\sigma_1 + \sigma_3)y^4 \\ &\quad + 16(\sigma_2 - \sigma_3)(\sigma_2 + \sigma_3)wxyz + 8\sigma_2(-1 + \sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3)z^2 \\ &\quad - 8(\sigma_2 + \sigma_3)(\sigma_1 + 3\sigma_2 + \sigma_3)x^2z^2 + 8(\sigma_2^2 - 4\sigma_2\sigma_3 + \sigma_3^2 - \sigma_1(\sigma_2 + \sigma_3))y^2z^2 \\ &\quad - 8\sigma_2(\sigma_1 + \sigma_2)z^4 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} 2\Theta_{22} &= 4\sigma_1 - 2\sigma_1^2 + 4\sigma_3 - 4\sigma_1\sigma_3 - 2\sigma_1^2 + 8\sigma_3(-1 + \sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3)x^2 - 8\sigma_3(\sigma_2 + \sigma_3)x^4 \\ &\quad + 8(\sigma_1 + \sigma_3)(-1 + 2\sigma_1 + 2\sigma_3)y^2 - 8(\sigma_1 + \sigma_3)(\sigma_1 + \sigma_2 + 3\sigma_3)x^2y^2 - 16(\sigma_1 + \sigma_3)^2y^4 \\ &\quad - 16(\sigma_1 - \sigma_3)(\sigma_1 + \sigma_3)wxyz + 8\sigma_1(-1 + \sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3)z^2 \\ &\quad + 8(\sigma_1^2 + \sigma_1(-\sigma_2 + \sigma_3) - \sigma_1(\sigma_2 + 4\sigma_3))x^2z^2 - 8(\sigma_1 + \sigma_3)(3\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3)y^2z^2 \\ &\quad - 8\sigma_1(\sigma_1 + \sigma_2)z^4 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} 2\Theta_{33} &= 4\sigma_1 - 2\sigma_1^2 + 4\sigma_2 - 4\sigma_1\sigma_2 - 2\sigma_2^2 + 8\sigma_2(-1 + \sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3)x^2 - 8\sigma_2(\sigma_2 + \sigma_3)x^4 \\ &\quad + 8\sigma_1(-1 + \sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3)y^2 + 8(\sigma_1^2 - 4\sigma_1\sigma_2 + \sigma_2^2 - (\sigma_1 + \sigma_2)\sigma_3)x^2y^2 - 8\sigma_1(\sigma_1 + \sigma_3)y^4 \\ &\quad + 16(\sigma_1 - \sigma_2)(\sigma_1 + \sigma_2)wxyz + 8(\sigma_1 + \sigma_2)(-1 + 2\sigma_1 + 2\sigma_3)z^2 \\ &\quad - 8(\sigma_1 + \sigma_2)(\sigma_1 + 3\sigma_2 + \sigma_3)x^2z^2 - 8(\sigma_1 + \sigma_2)(3\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3)y^2z^2 \\ &\quad - 16(\sigma_1 + \sigma_2)^2z^4 \end{aligned}$$

Äussere Einträge (Symmetrisch)

$$\begin{aligned} \Theta_{12} = \Theta_{21} &= (\sigma_1^2 - 2\sigma_2 + (\sigma_2 + 2\sigma_3)^2 + \sigma_1(-2 + 6\sigma_2 + 4\sigma_3))xy - 2(\sigma_2 + \sigma_3)(3\sigma_1 + \sigma_2 + 2\sigma_3)x^2y \\ &\quad - 2(\sigma_1 + \sigma_3)(\sigma_1 + 3\sigma_2 + 2\sigma_3)xy^3 + (\sigma_1 - \sigma_2)(-2 + \sigma_1 + \sigma_2 + 2\sigma_3)wz \\ &\quad - 2(3\sigma_1 - \sigma_2 - 2\sigma_3)(\sigma_2 + \sigma_3)wx^2z - 2(\sigma_1 + \sigma_3)(\sigma_1 - 3\sigma_2 + 2\sigma_3)wy^2z \\ &\quad - 2(\sigma_1^2 + 6\sigma_1\sigma_2 + \sigma_2^2 + 4\sigma_3^2)xyz - 2(\sigma_1 - \sigma_2)(\sigma_1 + \sigma_2)wz^3 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Theta_{13} = \Theta_{31} &= -(\sigma_1 - \sigma_3)(-2 + \sigma_1 + 2\sigma_2 + \sigma_3)wy + 2(3\sigma_1 - 2\sigma_2 - \sigma_3)(\sigma_2 + \sigma_3)wx^2y \\ &\quad + 2(\sigma_1 - \sigma_3)(\sigma_1 + \sigma_3)wy^3 + (\sigma_1^2 - 2\sigma_3 + (2\sigma_2 + \sigma_3)^2 + \sigma_1(-2 + 4\sigma_2 + 6\sigma_3))xz \\ &\quad - 2(\sigma_2 + \sigma_3)(3\sigma_1 + 2\sigma_2 + \sigma_3)x^2z - 2(\sigma_1^2 + 4\sigma_2^2 + 6\sigma_1\sigma_2 + \sigma_3^2)xy^2z \\ &\quad + 2(\sigma_1 + \sigma_2)(\sigma_1 + 2\sigma_2 - 3\sigma_3)wyz - 2(\sigma_1 + \sigma_2)(\sigma_1 + 2\sigma_2 + 3\sigma_3)xz^3 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Theta_{23} = \Theta_{32} &= (\sigma_2 - \sigma_3)(-2 + 2\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3)wx - 2(\sigma_2 - \sigma_3)(\sigma_2 + \sigma_3)wx^3 \\ &\quad + 2(\sigma_1 + \sigma_3)(2\sigma_1 - 3\sigma_2 + \sigma_3)wxy^2 + ((2\sigma_1 + \sigma_2)^2 + 4\sigma_1\sigma_2 + 6\sigma_2\sigma_3 + \sigma_3^2 - 2(\sigma_2 + \sigma_3))yz \\ &\quad - 2(4\sigma_1^2 + \sigma_2^2 + 6\sigma_2\sigma_3 + \sigma_3^2)x^2yz - 2(\sigma_1 + \sigma_3)(2\sigma_1 + 3\sigma_2 + \sigma_3)y^3z \\ &\quad - 2(\sigma_1 + \sigma_2)(2\sigma_1 + \sigma_2 - 3\sigma_3)wxz^2 - 2(\sigma_1 + \sigma_2)(2\sigma_1 + \sigma_2 + 3\sigma_3)yz^3 \end{aligned}$$

Rekonstruktion der globalen Minima aus einem Spezialfall

Theorem

Seien $0 < \mu_c < \mu$, $F \in GL^+(3, \mathbb{R})$, sowie $\sigma_1 > \sigma_2 > \sigma_3 > 0$ die geordneten Singulärwerte von F , bzw. die Hauptdehnungen von U . Sei weiterhin $Q \in SO(3)$ o.B.d.A. derart gewählt, dass $Q^T U Q = D = \text{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ und somit auch $Q^T \bar{R}^T F Q = \tilde{R} D$, für ein $\tilde{R} \in SO(3)$. Die globalen Minima

$$\text{rpolar}_{\mu, \mu_c}(F) \in \underset{\bar{R} \in SO(3)}{\text{argmin}} \mu \left\| \text{sym}(\bar{R}^T F - \mathbb{1}) \right\|^2 + \mu_c \left\| \text{skew}(\bar{R}^T F - \mathbb{1}) \right\|^2$$

lassen sich für jedes erlaubte Q eindeutig aus

$$\underset{\tilde{R} \in SO(3)}{\text{argmin}} \left\| \text{sym}(\tilde{R} \text{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3) - \mathbb{1}) \right\|^2$$

errechnen.

Konsequenzen

Rekonstruktion der globalen Minima aus einem Spezialfall

Theorem

Seien $0 < \mu_c < \mu$, $F \in GL^+(3, \mathbb{R})$, sowie $\sigma_1 > \sigma_2 > \sigma_3 > 0$ die geordneten Singulärwerte von F , bzw. die Hauptdehnungen von U . Sei weiterhin $Q \in SO(3)$ o.B.d.A. derart gewählt, dass $Q^T U Q = D = \text{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ und somit auch $Q^T \bar{R}^T F Q = \tilde{R} D$, für ein $\tilde{R} \in SO(3)$. Die globalen Minima

$$\text{rpolar}_{\mu, \mu_c}(F) \in \underset{\bar{R} \in SO(3)}{\text{argmin}} \mu \left\| \text{sym}(\bar{R}^T F - \mathbb{1}) \right\|^2 + \mu_c \left\| \text{skew}(\bar{R}^T F - \mathbb{1}) \right\|^2$$

lassen sich für jedes erlaubte Q eindeutig aus

$$\underset{\tilde{R} \in SO(3)}{\text{argmin}} \left\| \text{sym}(\tilde{R} \text{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3) - \mathbb{1}) \right\|^2$$

errechnen.

Konsequenzen

- Es reicht den Fall $\mu = 1$ und $\mu_c = 0$ zu betrachten

Rekonstruktion der globalen Minima aus einem Spezialfall

Theorem

Seien $0 < \mu_c < \mu$, $F \in GL^+(3, \mathbb{R})$, sowie $\sigma_1 > \sigma_2 > \sigma_3 > 0$ die geordneten Singulärwerte von F , bzw. die Hauptdehnungen von U . Sei weiterhin $Q \in SO(3)$ o.B.d.A. derart gewählt, dass $Q^T U Q = D = \text{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ und somit auch $Q^T \bar{R}^T F Q = \tilde{R} D$, für ein $\tilde{R} \in SO(3)$. Die globalen Minima

$$\text{rpolar}_{\mu, \mu_c}(F) \in \underset{\bar{R} \in SO(3)}{\text{argmin}} \mu \left\| \text{sym}(\bar{R}^T F - \mathbb{1}) \right\|^2 + \mu_c \left\| \text{skew}(\bar{R}^T F - \mathbb{1}) \right\|^2$$

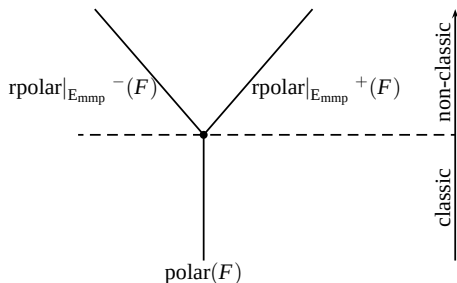
lassen sich für jedes erlaubte Q eindeutig aus

$$\underset{\tilde{R} \in SO(3)}{\text{argmin}} \left\| \text{sym}(\tilde{R} \text{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3) - \mathbb{1}) \right\|^2$$

errechnen.

Konsequenzen

- *Es reicht den Fall $\mu = 1$ und $\mu_c = 0$ zu betrachten*
- *Wir können uns auf diagonale Matrizen mit positiven Einträgen beschränken*

Bifurkationsdiagramm der Minimierer $\text{rpolar}^\pm$ 

Seien wiederum $\sigma_1 > \sigma_2 > \sigma_3 > 0$ die Singulärwerte von F .

Eigene Bezeichnungen

- $s_{\text{mmp}}(F) := \frac{1}{2}(\sigma_1 + \sigma_2)$ (maximale mittlere planare Dehnung)
- $E_{\text{mmp}} := \{F \in GL^+(3, \mathbb{R}) : s_{\text{mmp}}(F) > 1\}$

Die Ebene maximaler mittlerer Verdehnung

Relativdrehung von $\text{rpolar}^\pm$ zur Kontinuumsrotation

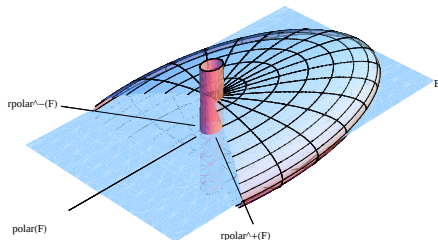


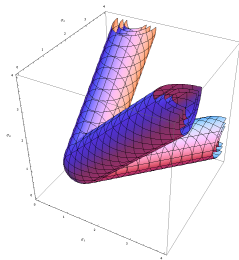
Abbildung: Dehnungsellipsoid von U mit Halbachsen $\sigma_1 = 3, \sigma_2 = 2$ und $\sigma_3 = 1$. Die Eigenvektoren zu σ_1 und σ_2 spannen die *Ebene E maximaler mittlerer Verdehnung* auf. Der Zylinder deutet die Drehachse, die roten Linien die Drehwinkel von $\text{rpolar}^\pm$ an.

$\text{rpolar}^\pm$ **relativ** zur Polarzerlegung

- Drehachse ist der Eigenvektor von U zum *kleinsten* Eigenwert σ_3
- Drehwinkel: $\alpha_{\text{rel}} = \pm \arccos\left(\frac{2}{\sigma_1 + \sigma_2}\right) = \pm \arccos\left(\frac{2}{5}\right) \approx \pm 66^\circ$

Die reduzierte Energie

Niveaulflächen von W_{red}



Eigenschaften

- Asymmetrie von Zug und Druck
- Weicher unter Zug
Beispiel: Beton
- Nicht Legendre-Hadamard elliptisch

$$W_{\text{red}}(F) := W_{\text{shear}}(F, \text{rpolar}^{\pm}(F))$$

Seien $\sigma_1 > \sigma_2 > \sigma_3 > 0$, die geordneten Singulärwerte von F .

$$W_{\text{red}}(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3) = \begin{cases} \frac{1}{2}(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + (\sigma_3 - 1)^2 & \sigma_1 + \sigma_2 > 2 \\ (\sigma_1 - 1)^2 + (\sigma_2 - 1)^2 + (\sigma_3 - 1)^2 & \text{sonst} \end{cases}$$

Übersicht

Abschnitt

- 1 Begriffe der finiten Kontinuumsmechanik
- 2 Das finite Cosserat-Modell
- 3 Minimierung der Cosserat-Scherenergie
- 4 Synthetische Reproduktion einer Nano-Einkerbung

3D EBSD einer Einkerbung: Raabe et al. (2006)

3D Electron Backscattering Diffraction

- Raabe et al.: Qualitative und quantitative experimentelle Untersuchung der durch Nano-Einkerbung in ein Kupfer-Einkristall verursachten Gitterrotationen
- Gemessen wird das in einer Oberflächenschicht reflektierte Beugungsmuster eines Elektronenstrahls

Interessante Ergebnisse

- Experimentelles Rotationsfeld stimmt nicht mit der Kontinuumsrotation $\text{polar}(F)$ überein (gegenläufige Rotationen)
- Idee (Neff): Stecken hier eventuell Cosserat-Rotationen dahinter? Vielleicht sogar Rotationsfelder vom Typ $\text{rpolar}^{\pm}$?
- Vergleichsmaterial bestand nur aus Darstellungen der Rotationsanteile in der Schnittebene

3D EBSD einer Einkerbung: Raabe et al. (2006)

3D Electron Backscattering Diffraction

- Raabe et al.: Qualitative und quantitative experimentelle Untersuchung der durch Nano-Einkerbung in ein Kupfer-Einkristall verursachten Gitterrotationen
- Gemessen wird das in einer Oberflächenschicht reflektierte Beugungsmuster eines Elektronenstrahls

Interessante Ergebnisse

- Experimentelles Rotationsfeld stimmt nicht mit der Kontinuumsrotation $\text{polar}(F)$ überein (gegenläufige Rotationen)
- Idee (Neff): Stecken hier eventuell Cosserat-Rotationen dahinter? Vielleicht sogar Rotationsfelder vom Typ $\text{rpolar}^{\pm}$?
- Vergleichsmaterial bestand nur aus Darstellungen der Rotationsanteile in der Schnittebene

⇒ Versuch die Einkerbung synthetisch zu reproduzieren

Planarer Spin eines Rotationsfeldes

Approximation von 3D- durch planare Rotationsfelder

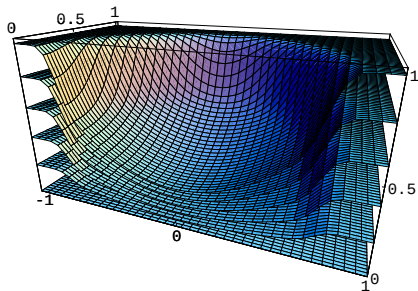
Gegeben ein 3D-Rotationsfeld $\bar{R}(x) : \Omega \rightarrow SO(3)$ und eine affine Schnittebene $E \subset \Omega$, wie berechnet man den beobachtbaren planaren Rotationsanteil $\bar{R}_E : E \rightarrow SO(2)$?

Eine mögliche Variante: Bestapproximation

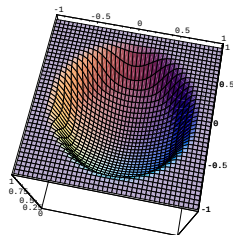
- Die Restriktion einer 3D-Rotation $\bar{R}$ auf eine Schnittebene E ist i.A. keine Rotation mit Drehachse $n \perp E$
- Daher berechne $\bar{R}_E$ als *punktweise Bestapproximation* von $\bar{R}|_E$ durch 3D-Rotationen mit fester Drehachse $n \perp E$
- Definiere Drehwinkel $\bar{\alpha} : SO(2) \rightarrow (-\pi, \pi]$
- Planarer Spin von $\bar{R}$ ist definiert als $\bar{\alpha}(\bar{R}_E)$.

Die Deformation φ_{nano}

Deformation der Koordinatenflächen



φ_{nano} im Profil



Einige Eigenschaften von φ_{nano}

- φ_{nano} wirkt nur von oben
- φ_{nano} ist (visuell) dem Profil der Einkerbung im Experiment von Raabe et al. nachempfunden

Deformation der Volumenelemente

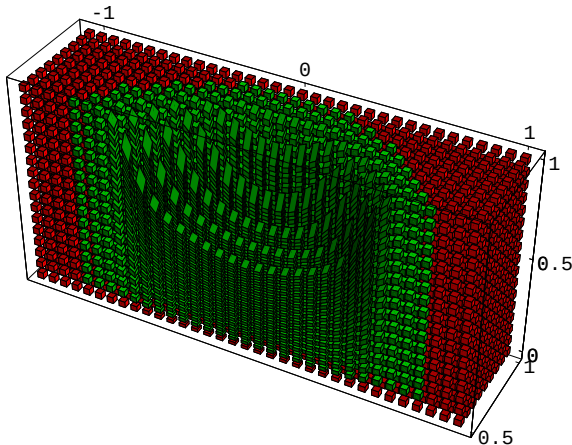
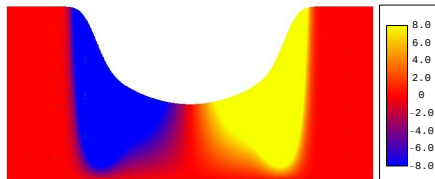


Abbildung: $\varphi_{\text{affin}}(x, h) := \varphi_{\text{nano}}(x) + F(x) \cdot h$ ausgewertet auf *infinitesimalen* Volumina. Im **äusseren** Gebiet ist die Polar- bzw. Kontinuumsrotation $\text{polar}(F(x))$ energieminimal. Im **inneren** Bereich der Einkerbung hingegen minimieren die beiden Lösungen $\text{rpolar}^{\pm}(F(x))$ die Energie $W_{1,0}(F, \bar{R})$.

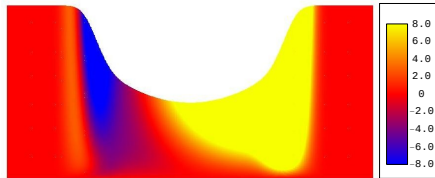
Die synthetisch berechnete Gitter-Missorientierung

Planarer Spin in
Ebene E : $y = \frac{1}{2}$

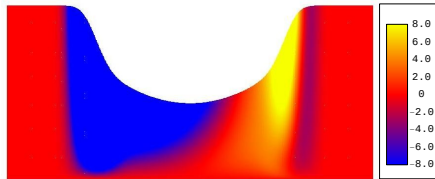
① $\bar{\alpha}_E(\text{polar}(F))$



② $\bar{\alpha}_E(\text{rpolar}^+(F))$

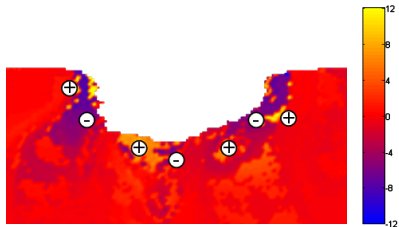


③ $\bar{\alpha}_E(\text{rpolar}^-(F))$



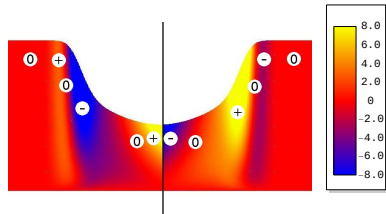
Planare Anteile von Gitterrotationen

Experiment



Von Raabe et al. experimentell ermittelte planare Gitterrotation bei Einkerbung in ein Kupfer-Einkristall.

Synthese



Entsprechende bestmögliche Approximation durch den planaren Spin eines aus rpolar^+ und rpolar^- stückweise zusammengesetzten Rotationsfeldes.

Ausblick: Kristalldefekte und Cosserat

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

- Atomistische Simulation: Simulation der elektrostatischen Wechselwirkung von Atomen im Kristallgitter.
- Ansatz: Empirische Potentiale wie z.B. Lennard-Jones (12, 6)
- Studiere kleine Auslenkungen einer Konfiguration **mit Versetzungen**.
 (Eine derartige Konfiguration ist weiterhin ein Einkristall!)

Offene Fragen

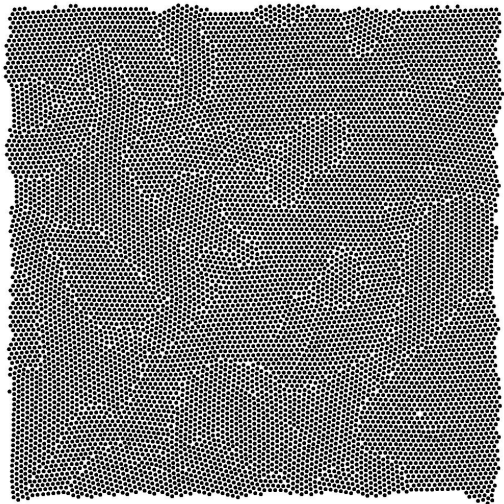
- Gültigkeit der Cauchy-Born Regel:
 homogene Belastung $\implies$ homogene Gitterdeformation (**Wirklich?**)
- Welcher Anteil der Deformation ist plastisch?
 Wanderung von Versetzungen unter Belastung ist teilweise reversibel.
- Gibt es evtl. Bezüge zu $rpolar^{\pm}$?
 Vergleiche mit atomistischen Simulationen ...

Atomistische Simulation: Erste Schritte in 2D

Simulation einer Abkühlung

Wir sehen

- Reguläre Gebiete: Kugelpackungen
- Korngrenzen
- Fehlstellen



Atomistik und Cosserat-Theorie

Wirbelfelder nahe des Kräftegleichgewichts

- Bei verschiedenen Simulationen traten immer wieder rausch-stabile Wirbelfelder auf [\[Video\]](#)
- Woher kommen diese Wirbelfelder?
- Gibt es einen Zusammenhang mit Drehfreiheitsgraden à la Cosserat?
- Idee: Numerische experimentelle Untersuchung der Deformation der irregulären Bereiche

Mathematica-Backend für Experimente

- Performance von Mathematica lässt Wünsche offen.
- Entwicklung eines externen Moduls für Mathematica: C++, Native Posix Threads, OpenGL, Mathlink
- Asynchrone Berechnung der Nearest-Neighbours (2te CPU)
- Bisher existiert nur ein Prototyp (ohne Mathlink-Anbindung)

Vielen Dank

- Ende -

Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit!