

Technische Universität Berlin

Fakultät V

Institut für Mechanik

Lehrstuhl für Kontinuumsmechanik und Materialtheorie - LKM

## **Bachelorarbeit**

# **Analyse eines Nanoindentationsexperimentes mittels Finite-Elementen-Methode.**

*Zur Erlangung des akademischen Grades Bachelor of Science (B.Sc.)*

Gutachter: Prof. Dr. Rer. nat Wolfgang H. Müller

Betreuer: M.Sc. B. Emek Abali

Vorgelegt von:

**Ghislain Gabin Noubissi M.**

Matrikel-Nr: 351 112  
Studiengang: Maschinenbau  
Email: [gnoubissi@yahoo.fr](mailto:gnoubissi@yahoo.fr)

Berlin, den 17. November 2011



## **Eidesstaatliche Erklärung**

Hiermit versichere ich, dass ich die Abschlussarbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt habe, alle Ausführungen, die anderen Schriften wörtlich oder sinngemäß entnommen wurden, kenntlich gemacht sind und die Arbeit in gleicher oder ähnlicher Fassung noch nicht Bestandteil einer Studien- oder Prüfungsleistung war.

Unterschrift der Verfasserin / des Verfassers



## **Danksagung**

An erster Stelle möchte ich mich bei allen bedanken, die mir bei der Erstellung dieser Bachelorarbeit geholfen haben.

Für anregende Gespräche, wertvolle Hinweise, konstruktive Kritik und noch einiges mehr, möchte ich mich bei folgenden Personen bedanken:

Prof. Dr. Ing. Wolfgang Müller, meinem Betreuer M. Sc. Emek Abali und dem ganzen Team des Lehrstuhls für Kontinuumsmechanik und Materialtheorie.

Außerdem möchte ich meiner Familie und meinen Freunden danken, die mich während dieser Zeit unterstützt haben.



## **Kurzfassung**

Gegenstand der vorliegenden Arbeit ist das aus einem experimentellen Nanoindentationstest auf das Material Sn-bi 30° gewonnene Kraft-Weg-Diagramm mit Hilfe eines freien Softwarepakets (FEniCS Project) zu simulieren.

Es wird gezeigt, wie die instrumentierte Eindringprüfung, Nanoindentation, genutzt werden kann, um Materialeigenschaften zu bestimmen. Die instrumentierte Eindringprüfung stellt eine Erweiterung der klassischen Härteprüfung dar, da hier Kraft, Zeit und Tiefe kontinuierlich gemessen und graphisch dargestellt werden (Krafteindringkurve) [Sterthaus, 2008]. Zur Auswertung der gemessenen Werte wird das am weitesten verbreitete Auswerteverfahren zur Bestimmung von Härte und E-Modul auf Grundlage der von Oliver and Pharr publizierten Methode vorgestellt.

Zur Realisierung der Simulation ist ein geeignetes Materialmodell auszuwählen, die Bewegungsgleichung aus Materialgesetzen herleiten, die Randbedingungen zu definieren, sowie die Geometrie und die Belastungsfunktion des Eindringkörpers zu formulieren und letztendlich das Ganze ins Programm zu implementieren. Die Ergebnisse sollen am Ende nicht das Experiment sondern das Materialmodell validieren.

Ein wichtiger Hintergrund dieser Arbeit ist dass, die Verformung des Materialmodells im Laufe des Eindringprozesses in materieller Konfiguration (Lagrange-Koordinaten) gefasst wird. Dies bietet Vorteile, die im Kapitel 4 vorgestellt werden.





## **Inhaltsverzeichnis**

<b>Eidesstaatliche Erklärung.....</b>	<b>3</b>
<b>Danksagung.....</b>	<b>5</b>
<b>Kurzfassung.....</b>	<b>7</b>
<b>Inhaltsverzeichnis.....</b>	<b>9</b>
<b>Abbildungsverzeichnis.....</b>	<b>11</b>
<b>1 Motivation und Einleitung.....</b>	<b>13</b>
<b>2 Theoretische Grundlagen .....</b>	<b>17</b>
2.1 Nanoindentation .....	17
2.2 Materialmodelle der Viskoelastizität.....	18
2.2.1 Kelvin-Modell .....	20
2.2.2 Maxwell-Modell .....	21
2.2.3 Zener-Modell .....	22
<b>3 Numerische Berechnung .....</b>	<b>25</b>
3.1 Formulierung der Bewegungsgleichung.....	25
3.2 Die variationale Form.....	27
3.3 Die Materialgleichung .....	30
3.4 Geometrie, Randbedingungen, Kraft und Kraftanbringungsfläche.....	31
<b>4 Implementierung .....</b>	<b>35</b>
4.1 FEniCS Project .....	35
4.2 Vernetzung .....	36
4.3 Code.....	37
<b>5 Ergebnisse .....</b>	<b>43</b>
5.1 Testergebnis 1.....	43

5.2 Testergebnis 2.....	44
5.3 Testergebnis 3.....	46
5.4 Testergebnis 4.....	47
5.5 Testergebnis 5.....	48
5.6 Testergebnis 6.....	49
5.7 Schlussfolgerung und Aussicht .....	50
<b>Literaturverzeichnis .....</b>	<b>51</b>

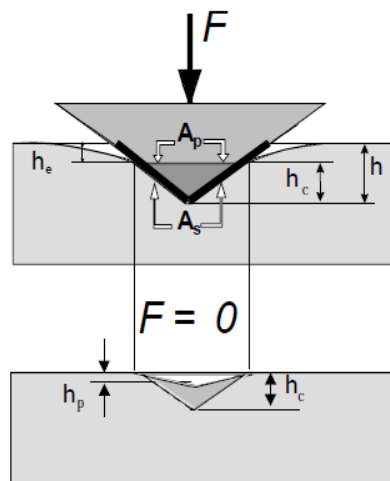
## Abbildungsverzeichnis

<b>Abbildung 1.1:</b> Prinzip der instrumentierten Eindringprüfung [Ullner].....	13
<b>Abbildung 1.2:</b> Krafteindringkurve eines Indentationstest am Kupfer.....	14
<b>Abbildung 1.3:</b> Zeitabhängiger Kraftverlauf des Experiments.....	14
<b>Abbildung 2.1:</b> Entwurf der Nanoindentation. ....	17
<b>Abbildung 2.2:</b> Bleibender Eindruck nach einer Eindringprüfung (Berkovich-Indenter).....	18
<b>Abbildung 2.3:</b> Hooke-Modell [Justine, 2008].....	19
<b>Abbildung 2.4:</b> Newton-Modell [Justine, 2008].....	19
<b>Abbildung 2.5:</b> Kelvin-Modell [Justine, 2008].....	20
<b>Abbildung 2.6:</b> Maxwell-Modell [Justine, 2008].....	21
<b>Abbildung 2.7:</b> Zener-Modell [Angepasst von Shahsavari and Ulm]. ....	22
<b>Abbildung 3.1:</b> Zener-Model mit volumetrischen (links) und deviatorischen (rechts) Materialverhalten [angepasst von: Shahsavari and Ulm].....	30
<b>Abbildung 3.2:</b> Randbedingungen der Materialproben. ....	33
<b>Abbildung 4.1:</b> Vernetztes Modell (Mesh) für die Probe 1 aus Tabelle 3.1.....	36
<b>Abbildung 4.2:</b> Nähere Schnittansicht des Meshes.....	37
<b>Abbildung 5.1:</b> Probe 1 am Beginn der Belastungsphase(a), am Beginn der Haltephase(b) und am Ende der Haltephase(c). ....	43
<b>Abbildung 5.2:</b> Krafteindringkurve für die Probe 1.....	44

<b>Abbildung 5.3:</b> Probe 2 am Anfang der Haltephase .....	45
<b>Abbildung 5.4:</b> Krafteindringkurve für die Probe 2.....	45
<b>Abbildung 5.5:</b> Krafteindringkurve für die Probe 3.....	46
<b>Abbildung 5.6:</b> Krafteindringkurve für die Probe 4.....	47
<b>Abbildung 5.7:</b> Krafteindringkurve für die Probe 5.....	48
<b>Abbildung 5.8:</b> Krafteindringkurve für die Probe 6.....	49

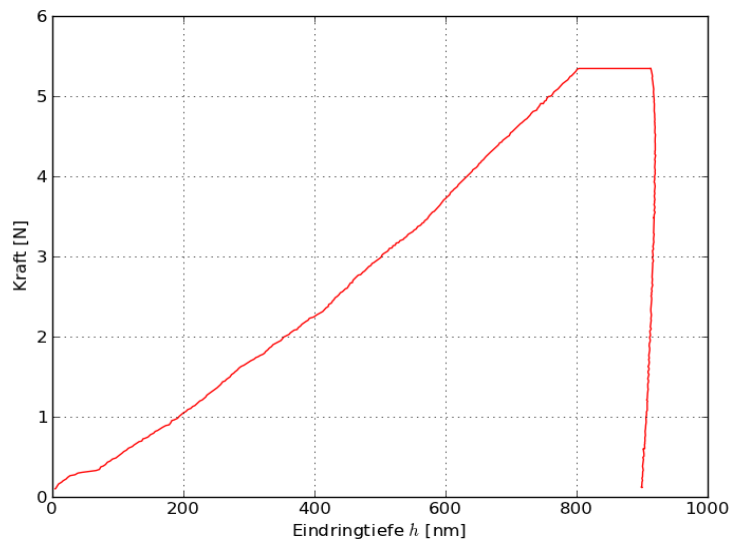
## 1 Motivation und Einleitung

Die vorliegende Arbeit befasst sich mit der FE-Analyse der Nanoindentation mit einem viskoelastischen Materialmodell. Das Hauptziel ist es, am Ende dieser Arbeit die aus einem Indentationstest gewonnenen Daten numerisch zu simulieren. Aus diesen Ergebnissen werden Entscheidungen zur Validierung des ausgewählten Materialmodells getroffen.



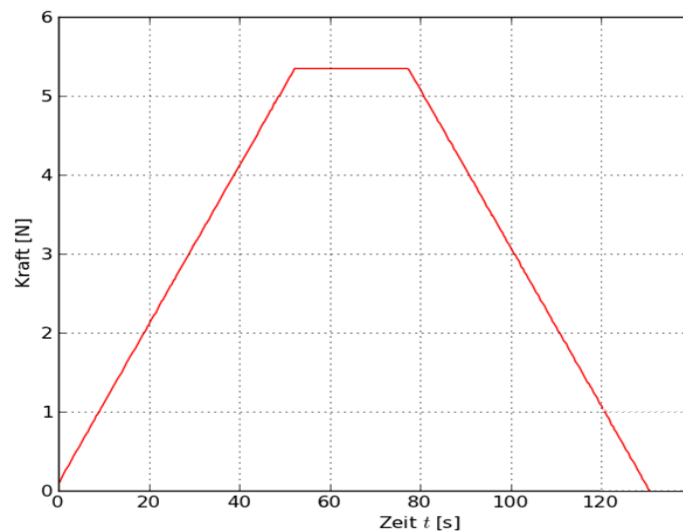
**Abbildung 1.1:** Prinzip der instrumentierten Eindringprüfung [Ullner]

Die Nanoindentation repräsentiert ein neues und höheres Niveau der Härteprüfung. Ein Eindringkörper spezieller Geometrie (Indenter) wird in den zu prüfenden Werkstoff eingedrückt (s. Abbildung 1.1). Prüfkraft, Weg und Zeit werden simultan gemessen. Als Ergebnis dieses Verfahrens ergibt sich ein Kraft-Weg-Diagramm (Krafteindringkurve), die die Kraft über die Eindringtiefe graphisch darstellt (s. Abbildung 1.2). Aus der Auswertung dieser Krafteindringkurve werden die Kontaktfläche zwischen Spitze und Probe und daraus die materialspezifischen Kennwerte wie der Elastizitätsmodul (E-Modul) und die Härte bestimmt.



**Abbildung 1.2:** Krafteindringkurve eines Indentationstest am Kupfer

Die Krafteindringkurve (s. Abbildungen 1.2 und 1.3) gehört zum Material Sn-bi 30° (30 Grad Celsius Raumtemperatur) mit der Dichte  $\rho = 9000 \cdot 10^{-18} \frac{10^3 \text{ kg}}{\mu\text{m}^3}$ . Es wird mit einer vorgegebenen Belastungsrate von 2 mN/s (Millinewton pro Sekunde) bis zum Erreichen einer maximalen Eindringtiefe von 800 nm (Nanometer) in das Material eingedrückt, dann wird zu einer Haltephase von 40 Sekunden kommen und anschließend wird wieder mit gleicher Rate vollständig entlastet.



**Abbildung 1.3:** Zeitabhängiger Kraftverlauf des Experiments

Am Anfang der Neunzigerjahre wurde ein Konzept zur Auswertung der aus Nanoindentationstests gemessenen Daten von Oliver und Pharr entwickelt [Oliver and Pharr, 1992]. Mit diesem Konzept können Materialkennwerte wie Härte und E-Modul bestimmt werden. Seitdem wird auch Nanoindentation in der Viskoelastizität zur Messung viskoser Parameter [Cheng and Al, 2000] angewendet.

Es wird in dieser Arbeit ein Material mit viskoelastischen Eigenschaften betrachtet. Von daher werden die Berechnungen an einem viskoelastischen Modell, das sogenannte Standard viskoelastische Modell oder auch Zener-Modell [Justine, 2008], durchgeführt. Dieses Modell ist ein dimensionales System Feder-Dämpfer-Elemente, das aus einer parallel geschalteten Maxwell-Kette (Reihenschaltung einer Feder mit einem Dämpfer) mit einer Feder besteht und gibt Anhaltspunkte zur Formulierung von Stoffgleichungen. Da wir zur Lösung der partiellen Differentialgleichung die Materialgleichung im dreidimensionalen Raum brauchen, ist die Differentialgleichung des Modells entsprechend zu erweitern.

Zum Erreichen dieser dimensionalen Materialgleichung ist entweder die Annahme zu treffen, dass der volumetrische Anteil des Spannungstensors elastisch ist und nur der deviatorische Anteil (viskoelastisch) zu berücksichtigen ist [Cheng, 2005], oder, dass die beiden Anteile voneinander unabhängig und zu beachten sind [Shahsavari and Ulm, 2009]. Diese letzte Annahme ist in den meisten Literaturen zu sehen und allgemeiner, deshalb wird sie auch in dieser Arbeit getroffen. Diese Betrachtung hat aber den Nachteil, dass sie doppelt so viele Materialkoeffizienten bringt.

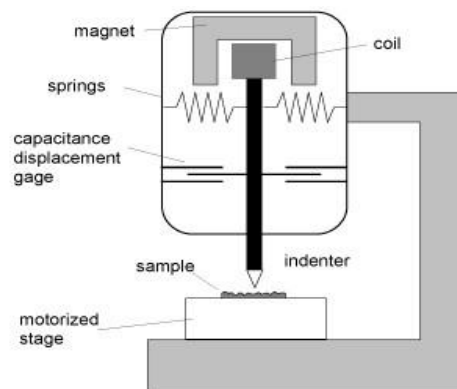




## 2 Theoretische Grundlagen

### 2.1 Nanoindentation

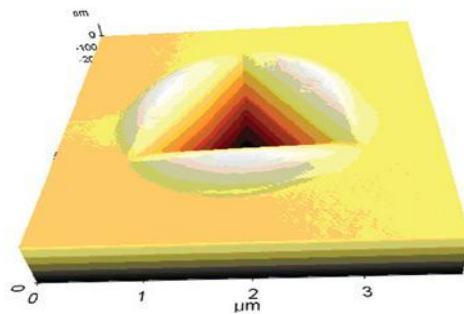
Die Nanoindentation ist ein Eindringverfahren zur Bestimmung materialspezifischer Kennwerte (z. B. E-Modul, Härte, Bruchfestigkeit). Eine sehr steile durch eine Kraft gesteuerte Diamantspitze dringt in eine Materialprobe ein (s. Abbildung 2.1) und hinterlässt einen bleibenden Eindruck im Material (s. Abbildung 2.2). Während diese Kraft erhöht wird, wird die Eindringtiefe gemessen. Die Nanoindentation stellt eine Form der instrumentierten Eindringprüfung jedoch mit Eindringtiefen in kleinen Längenskalen dar, wobei im Gegensatz zu den meisten anderen Verfahren werden zu jedem Zeitpunkt während der Belastungs- und der Entlastungsphase Kraft und Weg gemessen. Die Details der Vorgehensweise sind in [DIN 14577, 2002] geregelt. Anhand der gemessenen Daten wird ein Last-Eindringtiefen-Profil gewonnen, aus dem die Härte und der E-Modul der Schicht berechnet werden kann. Die Härte des Werkstoffes berechnet sich dann aus der maximalen Belastung bezogen auf die projizierte Eindrucksfläche des Indenters.



**Abbildung 2.1:** Entwurf der Nanoindentation.

Dieser Indenter kann aus beliebigen Formen (z. B. kegel- und kugelförmig, konisch etc.) und Werkstoffen (z. B. Diamant, Sinterhartmetall) sein. In unserem Fall handelt es sich um ein Berkovich-Indenter, welcher eine dreiseitige Diamantpyramide mit einem Winkel von  $65,3^\circ$  ist. Die genaue Größe dieses Wirkungsbereiches für verschiedene Materialien und Lasten wird für die weitere Datenauswertung benötigt.

Die Indentation kann entweder weg- oder kraftgesteuert sein. In diesem Fall handelt es sich um eine kraftgesteuerte Indentation, denn der Indenter dringt unter der Angabe einer bekannten Belastungsrate in die Materialprobe ein.



**Abbildung 2.2:** Bleibender Eindruck nach einer Eindringprüfung (Berkovich-Indenter).

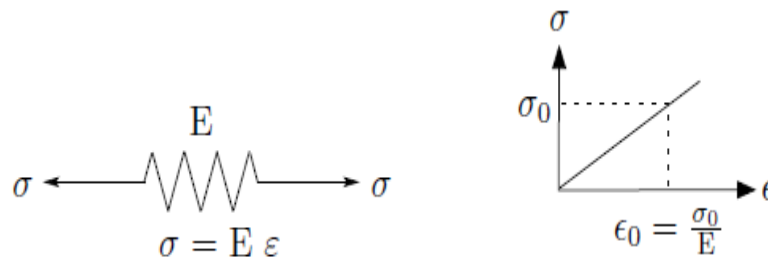
## 2.2 Materialmodelle der Viskoelastizität

Nach der phänomenologischen Vorgehensweise lässt sich eine elementare Materialmodellbildung ausgehend von experimentellen Beobachtungen entwickeln. Eine untersuchte Materialprobe wird als ein System angesehen, an dessen Eingang (Input) ein zeitlicher Verlauf, z.B. einer Weggröße, angelegt wird, und das an seinem Ausgang (Output) den Verlauf z.B. einer Kraftgröße ausgibt.

Die Materialmodelle der Mechanik stellen allgemeine mathematische Beziehungen zwischen Spannungs- und Deformationsprozessen in Form von Funktionalen her. In diesem Abschnitt werden die im Rahmen der Kontinuumsmechanik zwei entwickelten Materialmodelle der

Viskoelastizität vorgestellt. Diese Modelle bilden sich aus zwei wesentlichen rheologischen Elementen der Materialtheorie: die Feder und der Dämpfer.

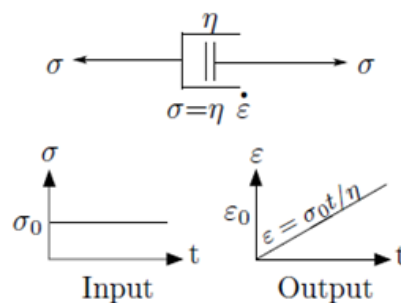
Die Feder stellt die ideale lineare Elastizität (s. Abbildung. 2.3) und ist die graphische Darstellung des Hooke-Modells, wobei man sich die Spannung als die Kraft und die Dehnung als die Länge vorstellen kann.  $E$  ist die Federsteifigkeit und heißt Elastizitätsmodul oder E-Modul. Das Hooke-Modell stellt eine lineare Spannungsdehnungsbeziehung dar. Die Spannung  $\sigma$  ist eine umkehrbar eindeutige Funktion der aktuellen Verzerrung  $\varepsilon$  und lautet:  $\sigma(t) = E \cdot \varepsilon(t)$ .



**Abbildung 2.3:** Hooke-Modell [Justine, 2008]

Der Dämpfer dient der Symbolisierung des Newton-Modells.  $\eta$  ist der Koeffizient der Viskosität und kann als die Dämpfungskonstante betrachtet werden. Das Newton-Modell (s. Abbildung 2.4) stellt ebenfalls eine lineare Beziehung aber hier zwischen der Spannung  $\sigma$  und der Dehnungsrate  $\dot{\varepsilon}$  dar. Wenn die gesteuerte Größe z. B. die Spannung mit  $\sigma(t) = \sigma_0(t)$  ist, wächst die Verzerrung  $\varepsilon$  linear über der Zeit und ihre Gleichung lautet

$$\varepsilon_0(t) = \frac{\sigma_0 \cdot t}{\eta} .$$

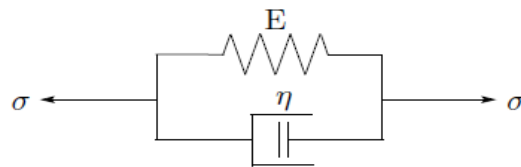


**Abbildung 2.4:** Newton-Modell [Justine, 2008]

Die rheologischen Modelle der Visokoelastizität ergeben sich aus der Kombination der zwei rheologischen Elementtypen: das Hooke-Modells und das Newton-Modell. In dieser Arbeit wurden hauptsächlich drei Materialmodelle untersucht, nämlich das Kelvin-Modell, das Maxwell-Modell und das Zener-Modell.

### 2.2.1 Kelvin-Modell

Es handelt sich um ein Modell, bei dem das Hooke- und das Newton-Modell parallel geschaltet sind (s. Abbildung 2.5). Dieses Modell eignet sich nur für die Beschreibung von Kriechvorgängen und wird deshalb auch weniger zur Betrachtung von viskoelastischen Materialien verwendet, die auch ein Relaxationsverhalten aufweisen.



**Abbildung 2.5:** Kelvin-Modell [Justine, 2008]

Bei einem Kelvin-Modell addieren sich die Teilspannungen  $\sigma_F$  und  $\sigma_D$  zur resultierenden Gesamtspannung  $\sigma$ :

$$\sigma = \sigma_F + \sigma_D = E\varepsilon_F + \eta\dot{\varepsilon}_D \quad (1-D) . \quad (2.1)$$

$\dot{\varepsilon}$  ist hier die Zeitableitung der Dehnung:  $\dot{\varepsilon} = \frac{d\varepsilon}{dt}$ .

Die Dehnungen  $\varepsilon_F$  und  $\varepsilon_D$  sind gleich und entsprechen der Gesamtdehnung des Modells:

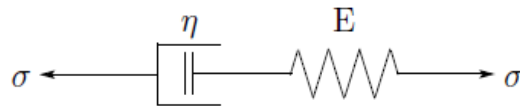
$$\varepsilon = \varepsilon_F = \varepsilon_D . \quad (2.2)$$

Die Differentialgleichung (2.1) des Kelvin-Modells lautet unter Beachtung der Gleichung (2.2) wie folgt:

$$\varepsilon(t) + \frac{\eta}{E} \dot{\varepsilon}(t) = \frac{1}{E} \sigma(t) . \quad (2.3)$$

### 2.2.2 Maxwell-Modell

Es handelt sich um ein Modell, bei dem das Hooke- und das Newton-Modell in Reihe geschaltet sind (s. Abbildung 2.6). Dieses Modell kann Relaxations- und Kriechverhalten beschreiben.



**Abbildung 2.6:** Maxwell-Modell [Justine, 2008]

Bei einem Maxwell-Modell sind die Spannungen  $\sigma_F$  und  $\sigma_D$  gleich und entsprechen der Gesamtspannung des Modells:

$$\sigma = \sigma_F = E\varepsilon_F = \sigma_D = \eta\dot{\varepsilon}_D . \quad (2.4)$$

Die Teildehnungen  $\varepsilon_F$  und  $\varepsilon_D$  dagegen addieren sich zur gesamten Dehnung  $\varepsilon$ :

$$\varepsilon = \varepsilon_F + \varepsilon_D \quad (1-D) . \quad (2.5)$$

$$\rightarrow \frac{d\varepsilon}{dt} = \frac{d\varepsilon_F}{dt} + \frac{d\varepsilon_D}{dt} = \frac{1}{E} \frac{d\sigma}{dt} + \frac{\sigma}{\eta} . \quad (2.6)$$

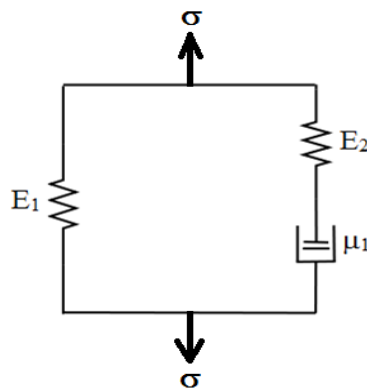
Die Differentialgleichung des Maxwell-Modells lautet:

$$\frac{\dot{\sigma}(t)}{E} + \frac{\sigma(t)}{\eta} = \dot{\varepsilon}(t) . \quad (2.7)$$

### 2.2.3 Zener-Modell

Die konstitutive Gleichung für das Zener-Modell setzt sich aus einem Maxwell-Modell und einem Hooke-Modell zusammen, die parallel geschaltet sind. In der Literatur wird viskoelastisches Materialverhalten oft mit dem Zener-Modell angenähert, da dieses Modell mehrere Vorteile hat: Das Modell besteht aus einer minimalen Anzahl von Elementen und lässt sich einfach mit mehreren Maxwell-Modellen weiterentwickeln, da alle Komponenten parallel geschaltet sind. Die Differentialgleichungen dieses Modells lassen sich so auflösen, dass sie entweder Kriechverhalten oder Relaxationsverhalten darstellen.

Das folgende Schema (s. Abbildung 2.7) stellt das Zener-Modell dar. Alle Elemente hier sind linear. Das Hooke-Modell bildet den Gleichgewichtsanteil der gesamten Spannung  $\sigma$ , auch Gleichgewichtsspannung  $\sigma_{eq}$  genannt. Die Maxwell-Kette bildet den geschwindigkeitsabhängigen Anteil oder Nichtgleichgewichtsanteil der Gesamtspannung und heißt Überspannung  $\sigma_{ov}$ .



**Abbildung 2.7:** Zener-Modell [Angepasst von Shahsavari and Ulm].

Bei einem Zener-Modell sind die Dehnungen des Hooke-Modells ( $\varepsilon_F$ ) und der Maxwell-Kette ( $\varepsilon_M$ ) gleich groß, während die einzelnen Spannungen in beiden Zweigen sich zur Gesamtspannung addieren.

$$\varepsilon = \varepsilon_F = \varepsilon_M . \quad (2.8)$$

$$\sigma = \sigma_F + \sigma_M . \quad (2.9)$$

Wobei:  $\sigma_F = E_1 \varepsilon$  und  $\sigma_M = E_2 \varepsilon_{MF} = \mu_1 \dot{\varepsilon}_{MD}$

$\varepsilon_{MF}$ : Dehnung des Hooke-Modells mit der Steifigkeit  $E_2$

$\varepsilon_{MD}$ : Dehnung des Newton-Modells mit der Dämpfungskonstante  $\mu_1$

$$\begin{aligned} \varepsilon_M = \varepsilon &= \varepsilon_{MF} + \varepsilon_{MD} , \\ \rightarrow \quad \dot{\varepsilon} &= \dot{\varepsilon}_{MF} + \dot{\varepsilon}_{MD} = \frac{\dot{\sigma}_M}{E_2} + \frac{\sigma_M}{\mu_1} , \\ \xrightarrow{\sigma_M = \sigma - \sigma_F} \quad \dot{\varepsilon} &= \frac{\dot{\sigma} - E_1 \dot{\varepsilon}}{E_2} + \frac{\sigma - E_1 \varepsilon}{\mu_1} . \end{aligned} \quad (2.10)$$

Die Differentialgleichung des Zener-Modells im 1-dimensionalen Fall lautet nun:

$$\dot{\sigma} + \frac{E_2}{\mu_1} \sigma = (E_1 + E_2) \dot{\varepsilon} + \frac{E_1 E_2}{\mu_1} \varepsilon . \quad (2.11)$$

Zum Lösen der Aufgabe ist die dimensionale Materialgleichung notwendig, deshalb wird die Gleichung (2.11) dementsprechend geschrieben (s. Unterkapitel 3.3).





### 3 Numerische Berechnung

#### 3.1 Formulierung der Bewegungsgleichung

Zur Berechnung der Verschiebungen auf der Oberfläche der Materialien wird für das Materialmodell eine Bewegungsgleichung aufgestellt, die einer partiellen Differentialgleichung entspricht. Zur Herleitung dieser Gleichung geht man von den Bilanzgleichungen für Masse und Impuls aus, welche als Naturgesetze angenommen werden [Müller, 2008].

In Lagrange'scher Darstellung sind die unabhängigen Variablen das Teilchen  $X$  und die Zeit  $t$  und die tatsächliche Anfangskonfiguration zum Zeitpunkt  $t = 0$  wird als Referenzkonfiguration gesetzt. Die Bewegungen eines materiellen Körpers werden dann durch die Bewegungen ihrer materiellen Punkte (Teilchen  $X$ ) beschrieben, d.h. durch ihre verallgemeinerten Koordinaten.

Gemeint ist:  $x$  ist in der Zeit  $t$  die Position des Teilchens, welches in der Referenzkonfiguration die Position  $X$  besetzt hat. Man schreibt:  
 $x = x(X, t); x_i = x_i(X_j, t) = x_i(X_1, X_2, X_3, t)$

Zur Veranschaulichung stellt man sich einen Beobachter vor, der fest mit einem Teilchen des betrachteten Kontinuums verbunden ist und sich mit diesem Teilchen mit bewegt. Dadurch beobachtet er die zeitliche Veränderung von physikalischen Größen wie z.B. Geschwindigkeit oder Temperatur für dieses Teilchen, Konvektion wird nicht als solche wahrgenommen.

Ein anderer Vorteil der Benutzung Lagrange'scher Koordinaten ist, dass Sie sich besser für einige Rechnungen eignen, bei denen Zeitableitungen zu bilden sind, weil das Gebiet  $V_0$  (die Anfangskonfiguration des Systems) zeitlich konstant ist und die Lösung der Massenbilanz

$\rho = \rho_0 \cdot J$  mit konstant gebliebener Massendichte  $\rho_0$  wird. Aus diesen Betrachtungen folgt, dass die partielle und die totale Zeitdifferentiation gleich sind:

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} . \quad (3.1)$$

Aber die Impulsbilanz ist in aktuellem Zustand angegeben und sieht folgendermaßen aus:

$$\frac{d}{dt} \int_B \rho v_i dV = \oint_{\partial B} \sigma_{ji} n_j da + \int_B \rho g_i dV . \quad (3.2)$$

Die Gleichung (3.2) ist in der Referenz- oder Lagrange-Konfiguration umzuformulieren, weil es sich für jede Materialpartikel die Verschiebungen berechnen lassen soll.

Zur Transformation der Impulsbilanz in materieller Konfiguration werden folgende Beziehungen [Müller, 2008] eingesetzt:

$$\begin{aligned} dV &= JdV_o , \\ \rho &= \frac{1}{J} \rho_0 , \\ da_j &= n_j da = (F^{-1})_{kj} JdA_k , \\ F_{kj} &= \frac{\partial x_k}{\partial X_j} , \\ (F^{-1})_{kj} &= \frac{\partial X_k}{\partial x_j} , \\ J &= \det(F_{kj}) . \end{aligned} \quad (3.3)$$

Nach dem Einsetzen der Gleichungen (3.3) in die Impulsbilanz (3.2) folgt die Gleichung (3.4). Der letzte Term fällt aus, weil die Verschiebungen des Modells unter der Kavitation schon drin enthalten sind.

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{B_0} \rho_0 v_i dV_0 &= \oint_{\partial B_0} \sigma_{ji} (F^{-1})_{kj} JdA_k + \underbrace{\int_{B_0} \rho_0 g_i dV_0}_{=0} , \\ \Rightarrow \int_{B_0} \rho_0 \dot{v}_i dV_0 &= \oint_{\partial B_0} \sigma_{ji} (F^{-1})_{kj} JN_k dA . \end{aligned} \quad (3.4)$$

Der Term  $\sigma_{ji}(F^{-1})_{kj}J$  entspricht dem ersten Piola-Kirchhoff-Spannungstensor und ist wie folgt zusammengefasst:

$$P_{ki} = \sigma_{ji}(F^{-1})_{kj}J. \quad (3.5)$$

Nach Einsetzen der Gleichung (3.1) und des Gauß'schen Integralsatzes in die Gleichung (3.4) folgt:

$$\rightarrow \int_{B_0} \left( \rho_0 \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} - \frac{\partial P_{ki}}{\partial X_k} \right) dV_0 = 0 \quad (3.6)$$

### 3.2 Die variationale Form

Um diese Aufgabe mittels FEniCS Project numerisch zu lösen, ist eine variationale Form dieser partiellen Differentialgleichung aufzustellen. Die variationale Form der Bewegungsgleichung entspricht der Form, die von den allgemeinen FE-Programmen verständlich ist. Zum Erzielen dieser Formulierung wird die Impulsbilanz (3.7) in materieller Konfiguration mit einer Testfunktion „ $w_i$ “ multipliziert:

$$\rightarrow \int_{B_0} \left( \rho_0 \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} w_i - \frac{\partial P_{ki}}{\partial X_k} w_i \right) dV_0 = 0. \quad (3.7)$$

Zur Berechnung der Zeitableitungen wird die Zeit unter Verwendung der Methode der finiten Differenzen diskretisiert:

$$\frac{\partial}{\partial t} u_i = \frac{u_i - u_i^0}{\Delta t}. \quad (3.8)$$

Wobei  $u_i$  der aktuellen Verschiebung,  $u_i^0$  der Verschiebung ein Zeitschritt davor und  $\Delta t$  einem Zeitschritt, welche genügend klein ausgewählt werden muss, entsprechen.

Die Gleichung (3.8) wird in die Gleichung (3.7) eingesetzt:

$$\int_{B_0} \left( \rho_0 \frac{(u_i - u_i^0) - (u_i^0 - u_i^{00})}{\Delta t^2} w_i - \frac{\partial P_{ki}}{\partial X_k} w_i \right) dV_o = 0 \quad . \quad (3.9)$$

Als Randbedingung auf dem oberen Teil des Materials, wo der Indenter drückt, ist die Kraft bekannt:  $t_i = \hat{t}_i(X_i, t)$ . Die Neumann-Randbedingung (s. Abbildung 3.2) muss erfüllt werden, daraus folgt:

$$\int_{\partial B_{wp}} (P_{ki} N_k - t_i) w_i ds = 0 \quad . \quad (3.10)$$

Durch das Einsetzen der Randbedingung in die variationale Form ergibt dann die folgende Gleichung:

$$\int_{B_0} \left( \rho_0 \frac{(u_i - u_i^0) - (u_i^0 - u_i^{00})}{\Delta t^2} w_i - \frac{\partial P_{ki}}{\partial X_k} w_i \right) dV_o + \int_{\partial B_{wp}} (P_{ki} N_k - t_i) w_i ds = 0 \quad . \quad (3.11)$$

Der Term:  $\int \frac{\partial P_{ki}}{\partial X_k} w_i dx$  ist identisch null für die ausgewählten linearen Elemente, weil sich in einem Element die Verschiebung linear ändern kann und die daraus folgenden Spannungen nur noch konstant im Ort sind. Genauer gesagt, der erste Piola-Kirchhoff Spannungstensor  $P_{ki}$  beinhaltet selbst schon eine Ortsableitung in der Materialgleichungsdefinition (cf. zum nächsten Unterkapitel):

$$P_{ki} = \sigma_{ji} (F^{-1})_{kj} J \quad . \quad (3.12)$$

Hier wird die zweite Ortsableitung angefragt, was nicht mit linearen Elementen lösbar ist. Dieses Problem kann mithilfe der Methode der partiellen Integration abgehoben werden:

$$\underbrace{\int \frac{\partial}{\partial X_k} (P_{ki} w_i) dx}_{\text{Gauß}} = \int \frac{\partial P_{ki}}{\partial X_k} w_i dx + \int P_{ki} \frac{\partial w_i}{\partial X_k} dx \quad ,$$

$$\int \frac{\partial}{\partial X_k} (P_{ki} w_i) dx = \oint (P_{ki} w_i) N_k ds \quad . \quad (3.13)$$

Wobei an dem ersten Term der Gauß-Integralsatz angewendet ist. Die Lösung an den Dirichlet-Rändern  $\partial V_D$  (s. Abbildung 3.2) ist vorgegeben, deshalb braucht man nicht die Testfunktion dort anwenden, daraus folgt:

$$w_i|_{\partial V_D} = 0: \int \frac{\partial}{\partial X_k} (P_{ki} w_i) dx = \underbrace{\oint_{\partial V_D} (P_{ki} w_i) N_k ds}_{=0} + \oint_{\partial V_N} (P_{ki} w_i) N_k ds \quad (3.14)$$

Die Neumann-Ränder  $\partial V_N$  entsprechen der Kraft, die auf dem oberen Teil des Materials ( $B_{top}$ ) wirkt:

$$\oint_{\partial V_N} (P_{ki} w_i) N_k ds = \oint_{\partial B_{top}} (P_{ki} w_i) N_k ds \quad (3.15)$$

Die Gleichung (3.15) wird die Gleichung (3.14) eingesetzt, welche wieder in die Gleichung (3.13) einzusetzen ist:

$$\begin{aligned} \oint_{\partial B_{top}} (P_{ki} w_i) N_k ds &= \int \frac{\partial P_{ki}}{\partial X_k} w_i dx + \int P_{ki} \frac{\partial w_i}{\partial X_k} dx, \\ \Rightarrow \int \frac{\partial P_{ki}}{\partial X_k} w_i dx &= \oint_{\partial B_{top}} (P_{ki} w_i) N_k ds - \int P_{ki} \frac{\partial w_i}{\partial X_k} dx. \end{aligned} \quad (3.16)$$

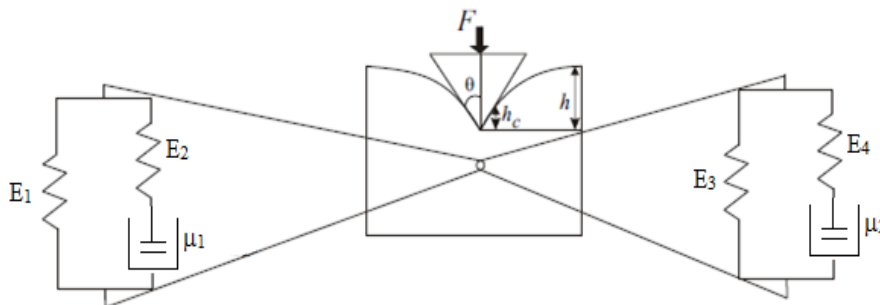
Mit der Gleichung (3.16) in die Gleichung (3.11) eingesetzt, folgt die endgültige variationale Form der Bewegungsgleichung:

$$\begin{aligned} \int_{B_0} \left( \rho_0 \frac{(u_i - u_i^0) - (u_i^0 - u_i^{00})}{\Delta t^2} w_i \right) dV_o - \oint_{\partial B_{top}} P_{ki} w_i N_k ds + \int P_{ki} \frac{\partial w_i}{\partial X_k} dx + \int_{\partial B_{top}} P_{ki} N_k w_i ds - \int_{\partial B_{top}} t_i w_i ds = 0, \\ \Rightarrow \int_{B_0} \left( \rho_0 \frac{(u_i - u_i^0) - (u_i^0 - u_i^{00})}{\Delta t^2} w_i + P_{ki} \frac{\partial w_i}{\partial X_k} \right) dV_o - \int_{\partial B_{top}} t_i w_i ds = 0. \end{aligned} \quad (3.17)$$

### 3.3 Die Materialgleichung

Eine wichtige Annahme wird hier getroffen: Der deviatorische und der volumetrische Spannungstensor sind nicht gekoppelt, d.h. sie sind unabhängig voneinander. Der gesamte Spannungstensor ist gleich der Summe des volumetrischen und des deviatorischen Spannungstensors (s. Abbildung 3.1):  $\sigma_{ji} = \sigma_{\underline{ji}} + \sigma_{\langle ji \rangle}$ .

Zum Herleiten der Materialgleichung im dreidimensionalen Raum kann entweder unter der Annahme, dass der volumetrische Spannungsanteil elastisch ist, nur den viskoelastischen deviatorischen Anteil untersuchen oder angenommen, dass volumetrische und deviatorische Spannungsanteile viskoelastisch sind, beide Anteile unabhängig voneinander untersuchen. Die letzte Methode ist in den meisten Literaturen zu sehen und somit allgemeiner, deshalb wird in dieser Arbeit angewendet. Der einzige Nachteil hier ist, dass es doppelt so viel Materialkoeffizienten (insgesamt 6) im Vergleich mit der ersten Methode zu bestimmen sind. Der volumetrische Spannungstensor  $\sigma_{\underline{ji}}$  tendiert dazu, das Volumen des Körpers zu ändern, während der deviatorische Spannungstensor  $\sigma_{\langle ji \rangle}$  ihn deformiert [Shahsavari and Ulm, 2009].



**Abbildung 3.1:** Zener-Model mit volumetrischen (links) und deviatorischen (rechts) Materialverhalten [angepasst von: Shahsavari and Ulm].

Wir wenden das Zener-Modell, dessen eindimensionale konstitutive Gleichung (Gleichung 2.11) im Unterkapitel 2.2.3 zu sehen ist, getrennt für den volumetrischen und deviatorischen Anteil im dreidimensionalen Fall an. Für den volumetrischen Anteil mit den folgenden

Parametern  $E_1$ ,  $E_2$  und  $\mu_1$  gilt die folgende Differentialgleichung in dreidimensionalem Raum:

$$\sigma_{\underline{ji}} = \frac{1}{3} \sigma_{kk} \delta_{ji} = \frac{\mu_1(E_1 + E_2)}{E_2} \dot{\varepsilon}_{\underline{ji}} + E_1 \varepsilon_{\underline{ji}} - \frac{\mu_1}{E_2} \dot{\sigma}_{\underline{ji}} . \quad (3.18)$$

Analog gilt die Differentialgleichung für den deviatorischen Anteil mit den Materialparametern  $E_3$ ,  $E_4$  und  $\mu_2$ :

$$\sigma_{\langle ji \rangle} = \frac{\mu_2(E_3 + E_4)}{E_4} \dot{\varepsilon}_{\langle ji \rangle} + E_3 \varepsilon_{\langle ji \rangle} - \frac{\mu_2}{E_4} \dot{\sigma}_{\langle ji \rangle} \quad (3.19)$$

Die Gesamtspannung bzw. die Gesamtdehnung für das Material setzt sich dann aus den volumetrischen und deviatorischen Anteilen zusammen:

$$\begin{aligned} \sigma_{ji} &= \sigma_{\underline{ji}} + \sigma_{\langle ji \rangle} , \\ \Rightarrow \sigma_{ji} &= \frac{\mu_1(E_1 + E_2)}{E_2} \dot{\varepsilon}_{\underline{ji}} + E_1 \varepsilon_{\underline{ji}} - \frac{\mu_1}{E_2} \dot{\sigma}_{\underline{ji}} + \\ &\quad \frac{\mu_2(E_3 + E_4)}{E_4} \dot{\varepsilon}_{\langle ji \rangle} + E_3 \varepsilon_{\langle ji \rangle} - \frac{\mu_2}{E_4} \dot{\sigma}_{\langle ij \rangle} \end{aligned} \quad (3.20)$$

### 3.4 Geometrie, Randbedingungen, Kraft und Kraftanbringungsfläche

Im Rahmen dieser Arbeit wurden mehrere Simulationen für verschiedene Materialproben mit unterschiedlichen Geometrien und Materialwerten durchgeführt. Die Materialproben sind würfelförmig mit folgenden Abmessungen und Materialwerten:

Probe	Abmessungen (bxhxl) [ $\mu\text{m}$ ]	E1 [GPa]	E2 [GPa]	E3 [GPa]	E4 [GPa]	$\mu_1$ [ $\frac{\text{mN}\cdot\text{s}}{\mu\text{m}^2}$ ]	$\mu_2$ [ $\frac{\text{mN}\cdot\text{s}}{\mu\text{m}^2}$ ]
1	5x5x5	500	350	500	350	$2 \cdot 10^2$	$2 \cdot 10^2$

<b>2</b>	20x20x20	500	350	500	350	$2 \cdot 10^2$	$2 \cdot 10^2$
<b>3</b>	20x20x20	50	350	50	350	$2 \cdot 10^2$	$2 \cdot 10^2$
<b>4</b>	20x20x20	50	350	50	350	$2 \cdot 10^{-1}$	$2 \cdot 10^{-1}$
<b>5</b>	20x20x20	50	3500	50	3500	$2 \cdot 10^{-1}$	$2 \cdot 10^{-1}$
<b>6</b>	20x20x20	0	0	50	3500	$2 \cdot 10^{-1}$	$2 \cdot 10^{-1}$

**Tabelle 3.1:** Probenabmessungen mit entsprechenden Materialwerten.

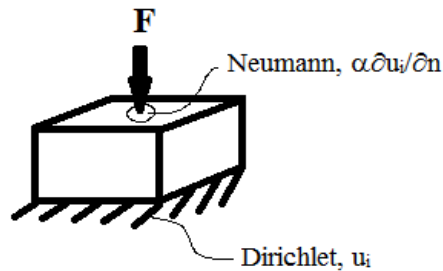
Es wird mit einer Probe mit Kantenlängen  $5 \mu\text{m}$  angefangen, weil diese Länge ungefähr dem Durchmesser des aus maximaler Eindringtiefe  $h=800 \text{ nm}$  ergebenden maximalen Kontaktkreises entspricht:

Bei  $h=800 \text{ nm}$  sind die Kontaktfläche (s. Gleichung 3.22)  $A = 24,5 \cdot 0,8^2 \mu\text{m} = 15,68 \mu\text{m}$  und der daraus resultierende Durchmesser  $d = \sqrt{\frac{4A}{\pi}} = 4,5 \mu\text{m}$ .

Zur Lösung der Bewegungsgleichung werden in dieser Arbeit zwei Randbedingungen berücksichtigt:

- Randbedingung an der unteren Seite der Materialprobe, die feststeht und somit keine Verschiebung aufweist: *Dirichlet-Randbedingung* (s. Abbildung 3.2). Die Dirichlet-Randbedingung entspricht der Lösung selbst, was hier die Verschiebung  $u_i$  ist.
- Randbedingung an der oberen Seite der Materialprobe, wo der Indenter eindringt: *Neumann-Randbedingung* (s. Abbildung 3.2). Die Neumann-Randbedingung entspricht der Kraftnormale, die von oben auf das Material drückt.





**Abbildung 3.2:** Randbedingungen der Materialproben.

Bei der Indentation drückt der Indenter mit einer Belastungsrate von 2 mN/s in die Materialprobe ein. Der Prüfkörper ist hier ein Berkovich-Indenter, welcher eine dreiseitige Diamantpyramide mit einem Winkel von  $65,3^\circ$  ist. Die genaue Größe des Wirkungsbereiches ist im Laufe des Eindringvorganges auf der Kontaktfläche zwischen Indenter und Materialprobe für die Berechnung zu ermitteln. Diese Fläche ist aufgrund der Indentergeometrie nur schwer exakt zu fassen und ändert sich in der Zeit, d.h. vergrößert sich mit steigender Eindringtiefe. Aus diesem Grund wird die Kontaktfläche in dieser Arbeit als ein Kreis betrachtet, was mathematisch einfach zu berechnen ist. Eine Besonderheit besteht darin, dass anstelle der tatsächlichen Kontaktfläche (Eindringtiefe =  $h_c$ ) des Indenters mit dem Material die projizierte Fläche  $A$  (Eindringtiefe =  $h$ ) in die Berechnung eingeht, auf die der mittlere Kontaktdruck wirkt:

$$A = 24,5h^2 \quad , \quad (3.22)$$

wobei  $A$  die projizierte Fläche der Kontaktfläche und  $h$  die Eindringtiefe sind. Die Eindringtiefe  $h$  (s. Abbildung 3.1) ist größer als in die in Wirklichkeit zwischen Material und Indenter berührende Tiefe  $h_c$  und deswegen ist die projizierte Fläche  $A$  größer als die reale Kontaktfläche, welche in der Arbeit nicht beachtet ist.

Für jeden Zeitschritt wird die Eindringtiefe  $h$  ermittelt und damit berechnet sich die projizierte Fläche  $A$ , die ein Kreis mit Radius  $r = \sqrt{\frac{A}{\pi}}$  beschreibt.



## 4 Implementierung

### 4.1 FEniCS Project

Das FEniCS Project<sup>1</sup> ist ein kollaboriertes Projekt für die Entwicklung von innovativen Konzepten und Werkzeugen für die technische rechnerunterstützte Berechnung, das sich mehr an der Lösung von Differentialgleichungen bei finite-Elemente-Methode orientiert. Es ist ein frei verfügbares Programm (Open Source Software), d.h. ein Software mit einer Lizenz, deren Quelltext öffentlich zugänglich ist und durch die Lizenz Weiterentwicklungen fördert.

Von daher sind in dieser Arbeit die Parameter der durchzuführenden Simulationen, d.h. Bewegungsgleichung, Materialgeometrie, -eigenschaften und -gleichung, Vernetzung, Randbedingungen, zeitlich veränderliche Belastungen, etc., selbst zu definieren und ins Programm zu implementieren.

FEniCS Project besteht aus einer Sammlung von unabhängigen interoperierten Komponenten:

- **Dolfin** ist das Problemlösungsumfeld für ordinäre und partielle Differentialgleichungen
- **FFC** (FEniCS Form Compiler)
- **FIAT** (FInite element Automatic Tabulator)
- **Instant** ist ein Projekt, um C Code in Python zu kompilieren
- **UFC** (Unified Form-assembly Code)
- **UFL** (Unified Form Language)

---

<sup>1</sup> <http://fenicsproject.org>

Dazu existieren auch zusätzliche Komponenten.

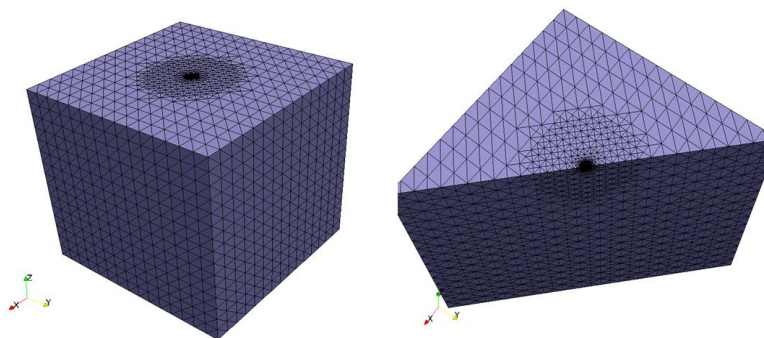
Das FEniCS Projekt wurde von einer Vielzahl Forschungsinstitute von ganzer Welt entwickelt. Die folgenden Institute haben signifikant dazu beigetragen:

- Simula Research Laboratory
- University of Cambridge
- University of Chicago
- Texas Tech University
- KTH Royal Institute of Technology

## 4.2 Vernetzung

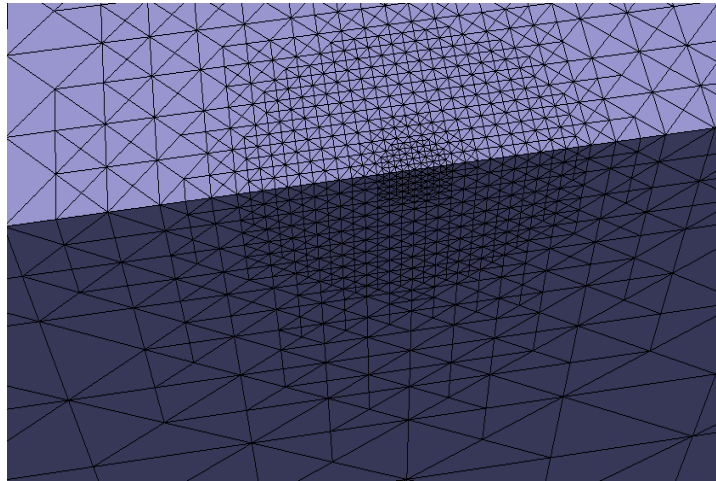
Zum Simulieren des erzeugten Modells wird dieses in ein Netz aus Elementen zerlegt. Die Genauigkeit der Berechnung hängt von der Elementgröße ab, welche die Rechenzeit erhöht und in Bezug darauf die wichtige Rolle der schnellen Lösungsverfahren deutlich macht.

Der Mittelpunkt der oberen Seite des Materials, d.h. der Punkt, wo es zwischen Indenter und Material zum Kontakt kommt, ist hier besonders wichtig und der wirkende Bereich (maximale Kontaktfläche  $A(h_{\max})$ ) um diesen Punkt soll deswegen etwas feiner vernetzt werden.



**Abbildung 4.1:** Vernetztes Modell (Mesh) für die Probe 1 aus Tabelle 3.1.

Um Rechenzeit einzusparen und gleichzeitig möglichst präzise Ergebnisse zu bekommen empfiehlt es sich, die weniger interessierenden Bereiche des Modells eher grob zu vernetzen und die interessanten Bereiche sehr fein. Weisen zwei angrenzende Bereiche eine sehr unterschiedliche Anzahl an Elementen auf, werden an den Übergangsstellen beim Vernetzen sehr ungünstige, langgezogene Elementformen erzeugt. Eine einfache Möglichkeit, um dies etwas einzuschränken, besteht darin, den Übergangsbereichen eine gemittelte Anzahl an Elementen zuzuweisen. Das Netz sollte nicht abrupt feiner werden, sondern eher gestaffelt (s. Abbildung 4.1). Die Abbildung 4.2 stellt eine nähere Ansicht des Meshes beim Schnitt dar.



**Abbildung 4.2:** Nähere Schnittansicht des Meshes

### 4.3 Code

Hier sind die wichtigsten Teile des Codes oder des implementierten Programms vorgestellt, das für die gezielten Simulationen ausgeführt wird. Die ersten Zeilen dieses Programms beinhaltet Befehle, die die benötigten Komponenten, Bibliotheken und Funktionen aufrufen:

*Dolfin* (Zeile 1) beinhaltet alle zur Lösung der Form benötigten Elemente. In *Pylab* (Zeile 2) sind zum Plotten, d.h. graphisch darstellen, notwendigen Funktionen enthalten. *Numpy* (Zeile 3) ist eine Bibliothek, die besondere Funktionen und ein leistungsstarkes N-Array Objekt hat.

```

1 from dolfin import *
2 import pylab
3 from numpy import array
4 parameters["form_compiler"]["log_level"]=CRITICAL #DEBUG, INFO, ERROR, CRITICAL
5 parameters["form_compiler"]["cpp_optimize"] = True
...
8 class iterate(NonlinearProblem):
9     def __init__(self, a, L, bc, exter_B):
10         NonlinearProblem.__init__(self)
11         self.L = L
12         self.a = a
13         self.bc = bc
14         self.exter = exter_B
15     def F(self, b, x):
16         assemble(self.L, tensor=b, exterior_facet_domains=self.exter)
17         for condition in self.bc: condition.apply(b, x)
18     def J(self, A, x):
19         assemble(self.a, tensor=A, exterior_facet_domains=self.exter)
20         for condition in self.bc: condition.apply(A)
...
22 class init_values(Expression):
23     def eval(self, vec, x):
24         vec[0] = 0.0
25         vec[1] = 0.0
26         vec[2] = 0.0
27     def value_shape(self):
28         return (3,)
...

```

Die Zeilen 1 bis 29 können als „Präprozessor“ betrachtet werden, da sie Eingabedaten vorbereiten und konvertieren und das Ergebnis weiter im eigentlichen Programm verarbeiten. Im Hauptteil des Programms werden die wichtigen Anweisungen der Simulation ausgeführt. Hier sind zum Beispiel die Materialgeometrie, die Randbedingungen, die Kraft und – anbringungsfläche, die Materialwerten, die variationale Form der Bewegungsgleichung, die Materialgleichung und die unterschiedlichen Rechenphasen definiert.

Die Zeilen 31 bis 34 beschreiben die Geometrie des Modells (Hier das Modell 1): *xlength*, *ylength* und *zlength* entsprechen der Breite, der Höhe und der Länge. Die Zeile 34 definiert den Koordinatenursprung, der Punkt mit den Koordinaten (0.0, 0.0, 0.0) und die Anzahl der Elemente des Modells in den drei Koordinaten (x, y, z). Der Koordinatenursprung ist hier der Mittelpunkt der oberen Seite des Modells, wo der Indenter drückt. Die Zeilen 37 bis 62 dienen der Vernetzung des Modells.

```

...
31 xlength=5.0 #mikrometer
32 ylength=5.0
33 zlength=5.0
34 mesh = Box(-xlength/2, -ylength/2, -zlength, xlength/2, ylength/2, 0, 15, 15, 15)
35 D = mesh.topology().dim()

37 center=Point(0,0,0)
38 def refine_interval(radius,mesh):
39     markers = MeshFunction("bool", mesh, D)
40     markers.set_all(False)
41     # Mark cells for refinement
42     for cell in cells(mesh):
43         if cell.midpoint().distance(center) < radius:
44             markers[cell.index()] = True
45     # Refine mesh
46     mesh = refine(mesh, markers)
47     return mesh

49 num_refinements = 5
50 refine_radius1 = 1.0
51 refine_radius2 = 0.1
52 refine_radius3 = 0.05
53 refine_radius4 = 0.01
54 for i in range(num_refinements):
55     mesh=refine_interval(refine_radius1,mesh)
56     mesh=refine_interval(refine_radius2,mesh)
57     mesh=refine_interval(refine_radius3,mesh)

59 for i in range(num_refinements):
60     mesh=refine_interval(refine_radius2,mesh)
61     mesh=refine_interval(refine_radius3,mesh)
62     mesh=refine_interval(refine_radius4,mesh)

...

```

In der Zeile 38 ist eine Funktion `refine_interval` mit den Argumenten `Radius` und `Mesh` definiert. `Markers` (Zeile 39) ist eine Liste von Elementen mit der Dimension `D`, hier `D=3`, deshalb eine Liste der Zellen mit den Werten `False` (Zeile 40). Die *If*-Schleife (Zeilen 43 und 44) besagt: falls der Abstand der Mitte der Zelle zum Ursprung weniger als `Radius` ist, werden sie als „*True*“ statt „*False*“ in der Liste eingetragen. Die Zeile 46 gibt das Befehl: Verfeinere alle Zellen, die in der Liste den Wert `True` haben (`mesh = refine(mesh, markers)`). Die Verfeinerung erfolgt mit verschiedenen Radien, dass es von oben gesehen 4 Kreise bildet. Jedes Mal werden alle Elemente vom äußersten Kreis nach innen für jeden Kreis markiert und verfeinert, sogar 5 Mal (Zeile 49).

```

...
143 devSigma0 = as_tensor(sigma0[j,i]-sigma0[k,k]*1.0/3.0*delta[j,i], [j,i])

144 devSigma = as_tensor(mu2*(E3+E4)*dt/(E4*dt+mu2)*devEpsdot[j,i] + E3*E4*dt/(E4*dt+mu2)*devEps[j,i] +
mu2/(E4*dt+mu2)*devSigma0[j,i], [j,i])

146 volSigma0 = as_tensor(sigma0[k,k]*1.0/3.0*delta[j,i],[j,i])
147 volSigma = as_tensor(mu1*(E1+E2)*dt/(E2*dt+mu1)*volEpsdot[j,i] + E1*E2*dt/(E2*dt+mu1)*volEps[j,i] +
mu1/(E2*dt+mu1)*volSigma0[j,i], [j,i])

149 sigma = as_tensor(volSigma[j,i] + devSigma[j,i], [j,i])
150 sigma0 = as_tensor(volSigma0[j,i] + devSigma0[j,i], [j,i])

152 Pki = as_tensor(sigma[j,i]*inv(DefGrad)[k,j]*det(DefGrad), [k,i])

153 n = FacetNormal(mesh)

155 Form = 1/dt**2*w[i]*rho*u0[i]*dx - 2/dt**2.0*w[i]*rho*u0[i]*dx + 1/dt**2.0*w[i]*rho*u[i]*dx +
Pki[k,i]*w[i].dx(k)*dx - w[i]*nanoident[i]*ds(1)

157 nz = as_tensor([0.0,0.0,1.0])
158 forceZ = as_tensor(Pki[k,i]*nz[k],[i,])
...

```

Die Zeilen 143 bis 158 beschreiben unter anderem die Gleichung des erstens Piola-Kirchhoff Spannungstensors (Zeile 152, s. Gleichung 3.15), die Materialgleichung des Materialmodells (Zeile 149, s. Gleichung 3.24) und die variationale Form der Bewegungsgleichung (Zeile 155, s. Gleichung 3.20). Die Differentialgleichung ist höchst nichtlinear. Dazu wird zuerst die Richtungsableitung der „Form“ symbolisch erstellt („Gain“ in der Zeile 161) und dann inkrementell unter Nutzung der abstrakten Newton-Raphson Linearisierung (Klasse „iterate(..)“ zwischen Zeile 8-20) in jedem Zeitschritt (Zeile 183-184) linearisiert und gelöst.

Zur Realisierung der unterschiedlichen Rechenphasen, d.h. eine Belastungs-, Halte- und Entlastungsphase, wurden drei Zeitschleifen im Programm beschreiben. Die erste Schleife (Zeile 169) inkrementiert die Zeit  $t$  (+ 0,05 Sekunde) für jeden Rechenschritt und berechnet die Eindringtiefe, solange diese kleiner als die maximale, vorgegebene Eindringtiefe  $h_{\max} = 0,8 \mu\text{m}$  ist. Beim Erreichen dieser Tiefe wird die entsprechende Zeit in eine Variable  $t_{\text{hold}}$  gespeichert und die Endzeit der Haltephase  $t_{\text{end\_hold}}$  gerechnet (s. Zeilen 207 und 209).



In der zweiten Schleife (Zeile 211) wird die Kraft während 40 Sekunden konstant gehalten und für jede Inkrementierung die Eindringtiefe gerechnet. In der letzten Phase (Zeile 240) sollte das Modell mit gleicher Krafrate vollständig wieder entlastet werden.

```

...
161 Gain = derivative(Form, u, du)
162 file_u = File('nanoindent4.pvd')

164 u_max = 0.1
165 time_values=[0.0]
166 u_max_values=[0.0]
167 forceZ_values=[0.0]
...

176 while u_max < 0.8:          # Erster Rechenschritt (Belastungsphase)

177     t = t + float(dt)
178     nanoindent.time = t
179     A = 24.5*u_max**2
180     radius = sqrt(A/pi)
181     top.r =radius
182     top.mark(neumann_domains, 1)
183     problem = iterate(Gain, Form, bc, neumann_domains)
184     solver.solve(problem, u.vector())
185     file_u << (u,t)
186     time_values.append(t)
187     u_max = abs(u((0,0,0))[2])
188     u_max_values.append(u_max)
189     fZ = project(forceZ,V)
190     fZvalue = abs(fZ((0,0,0))[2])
191     forceZ_values.append(fZvalue)
192     #print time_values,u_max_values,forceZ_values
193     u0 = u
194     u = u
195     sigma0=sigma
    ...

207 t_hold=t

209 t_end_hold=t_hold+t_stop

211 while t<t_end_hold:        # Zweiter Rechenschritt (Haltephase)

212     t = t + float(dt)
213     nanoindent.time = t_hold
    ...

219     problem = iterate(Gain, Form, bc, neumann_domains)
220     solver.solve(problem, u.vector())
221     file_u << (u,t)

    ....

238 t_end=t_end_hold+t_hold

240 while t<t_end:            # Dritter Rechenschritt (Entlastungsphase)

241     t = t + float(dt)
242     nanoindent.time = 2*t_hold+t_stop-t
    ...

```

```
248 problem = iterate(Gain, Form, bc, neumann_domains)
249 solver.solve(problem, u.vector())
250 file_u << (u,t)
    ...
267 file_list.close()
```

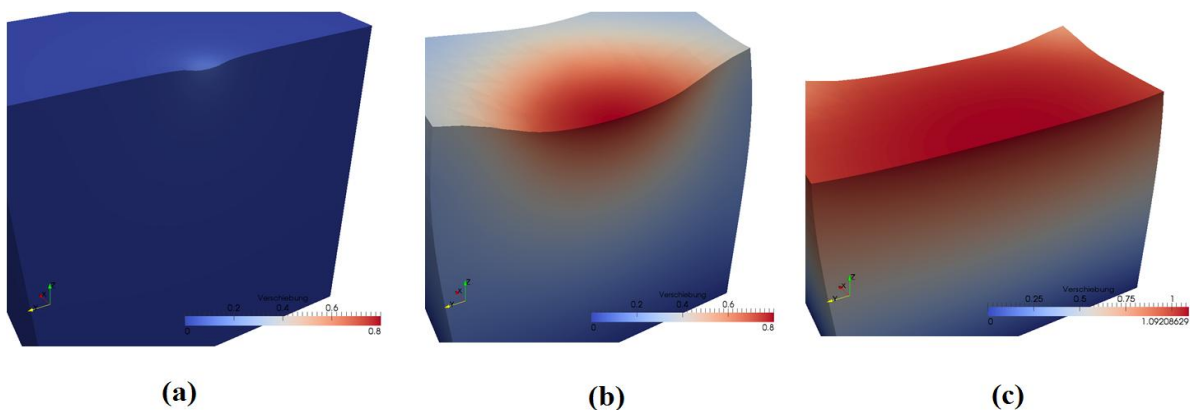
## 5 Ergebnisse

In diesem Abschnitt werden die aus der Simulationen gewonnenen Ergebnisse vorgestellt und dokumentiert. Die Ergebnisse werden auf Plausibilität geprüft, verschiedene Lösungen zur Fehlerscheinungen und Schlussfolgerungen gebracht. Testergebnisse gehören zur Probe 1-6 (cf. Tabelle 3.1).

### 5.1 Testergebnis 1

Die Probe ist ein Würfel mit Kantenlängen von  $5 \mu\text{m}$ ,  $E_1 = E_3 = 500 \text{ GPa}$ ,

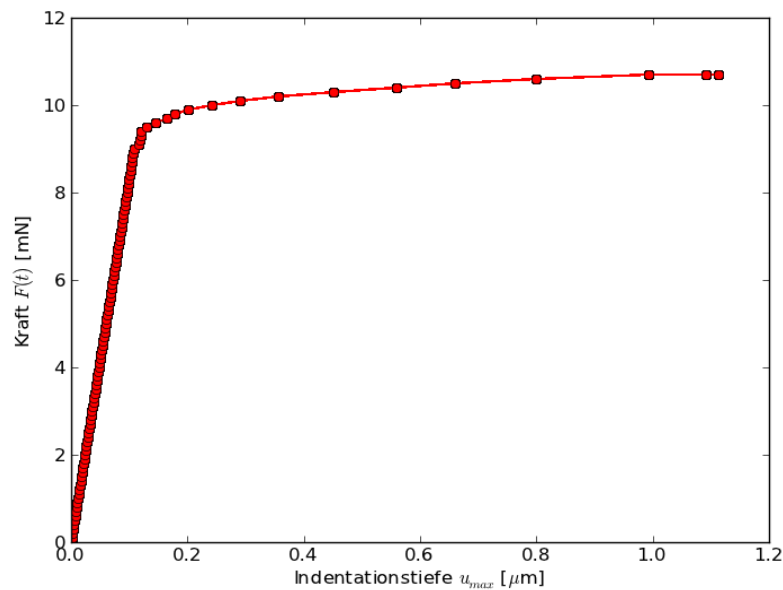
$$E_2 = E_4 = 350 \text{ GPa}, \mu_1 = \mu_2 = 2 \cdot 10^2 \frac{\text{mN} \cdot \text{s}}{\mu\text{m}^2}.$$



**Abbildung 5.1:** Probe 1 am Beginn der Belastungsphase(a), am Beginn der Haltephase(b) und am Ende der Simulation(c).

Die Abbildung 5.1 stellt die Deformation der Materialprobe 1 im Laufe der Simulation dar. Hier ist deutlich zu sehen, dass die Probe am Beginn der Haltephase (s. Abbildung.5.1(b)) an linken und rechten Rändern gebeugt ist, obwohl es in Wirklichkeit dort noch genug Material gibt. Dies bedeutet, dass das Material weicher als in der Realität sich verhält. In der

Abbildung 5.2 ist die aus der Simulation resultierende Krafteindringkurve zu sehen. Es ist auch hier zu merken, dass die Probe vor Anfang der Haltephase (Haltephase beginnt bei  $h=u_{\max} = 800 \mu\text{m}$ ) schon angefangen hat, viskos zu wirken, d.h. zu kriechen, was in dem Experiment (cf. Abbildung 1.2) nicht vorkommt.



**Abbildung 5.2:** Krafteindringkurve für die Probe 1.

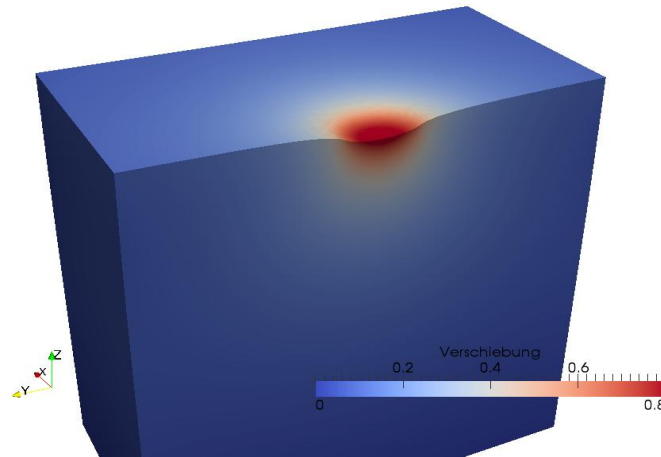
Um diese Erscheinungen zu vermeiden, kann man:

- Die Seiten des Modells festhalten, obwohl es nicht realistisch ist.
- Symmetriebedingungen einführen, was aber auch schwierig zu motivieren ist.
- Das Simulationsmodell größer aufstellen, welche als die beste Lösung erscheint, obwohl die Rechenzeit sich verlängert.

## 5.2 Testergebnis 2

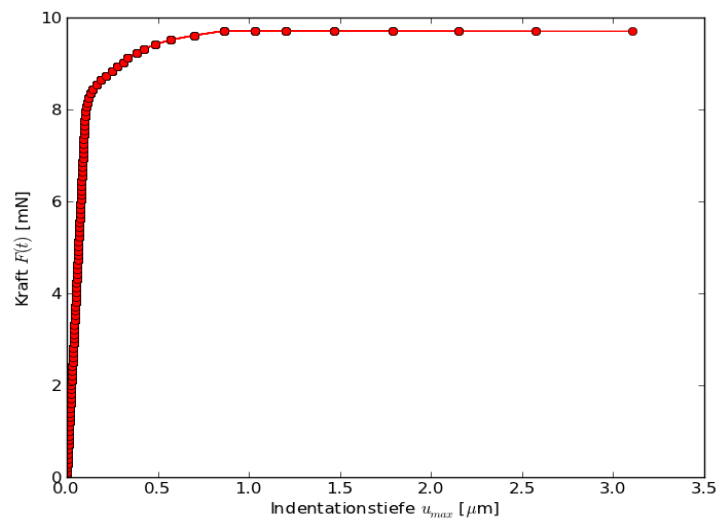
Das zweite Modell ist ein Würfel mit Kantenlängen von  $20 \mu\text{m}$ ,  $E_1 = E_3 = 500 \text{ GPa}$ ,

$$E_2 = E_4 = 350 \text{ GPa}, \mu_1 = \mu_2 = 2 \cdot 10^2 \frac{\text{mN} \cdot \text{s}}{\mu\text{m}^2}.$$



**Abbildung 5.3:** Probe 2 am Anfang der Haltephase

In der Abbildung 5.3 ist die zweite Probe am Anfang der Haltephase zu sehen. Die ist von Geometrie aus viel größer als die erste und mit gleichen Materialparametern. Man merkt, dass die Ränder der Probe bei maximaler Kraft nicht verformt sind, was der Realität entspricht und nicht der Fall bei der ersten Probe war. Es ist in der Abbildung 5.4 immer noch ein Kriechverhalten des Modells vor Erreichen der maximalen Eindringtiefe wie in der ersten Simulation zu beachten. Dies kann durch Änderung der Materialwerte aufgehoben werden.



**Abbildung 5.4:** Krafteindringkurve für die Probe 2

### 5.3 Testergebnis 3

Das dritte Modell ist ein Würfel mit Kantenlängen von  $20 \mu\text{m}$ ,  $E_1 = E_3 = 50 \text{ GPa}$ ,  $E_2 = E_4 = 350 \text{ GPa}$ ,  $\mu_1 = \mu_2 = 2 \cdot 10^2 \frac{\text{mN}\cdot\text{s}}{\mu\text{m}^2}$ .

Im Vergleich mit dem vorherigen Modell sind die Geometrie und die Parameter dieses Modells identisch nur die E-Moduli  $E_1$  und  $E_3$  (s. Abbildung 3.1) reduzieren sich auf  $50 \text{ GPa}$  (zehnfach kleiner).

$E_1$  und  $E_3$  sind die reinen elastischen Anteile der volumetrischen und deviatorischen Anteile des Spannungstensors. Das bedeutet, dass das Material sich viel weicher verhalten und weniger Kraft benötigen wird (s. Abbildung 5.5). Quantitativ betrachtet, sind keine Unterschiede zwischen den Kraftverläufen vom Modell 2 und 3 zu merken. Nur die Werte in y Skala (Kraft) des zeitlichen Kraftverlaufes für das Modell 3 sind etwas kleiner. Das Problem des früheren Erscheinens des Kriechverhaltens ist hier auch nicht beseitigt. Es wird in weiteren Versuchen durch Spielen mit den Materialwerten versucht, dem Experiment ähnelnde Kraftverläufe zu erzielen.

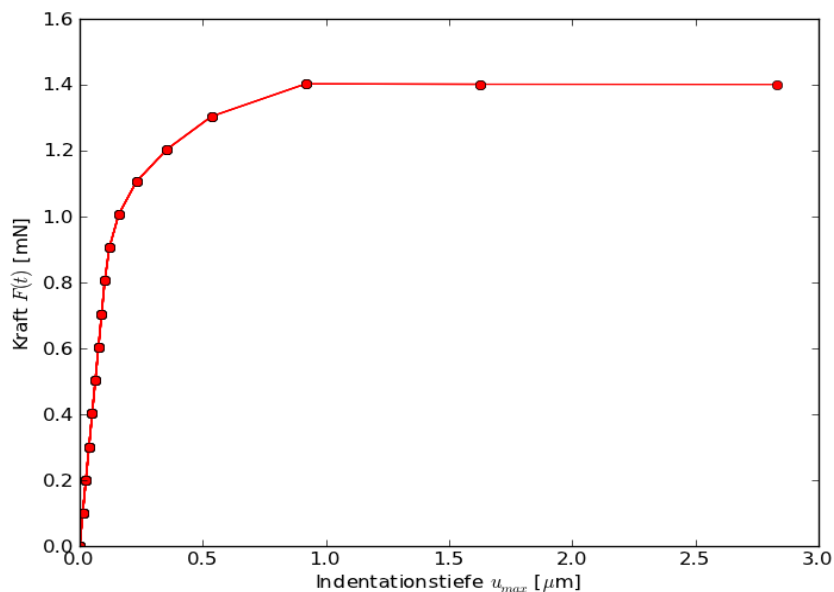
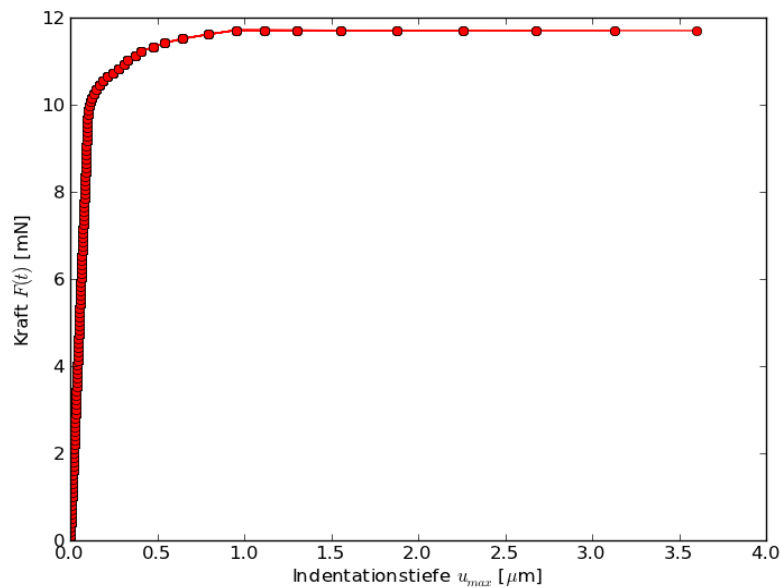


Abbildung 5.5: Krafteindringkurve für die Probe 3.

#### 5.4 Testergebnis 4

Das vierte Modell ist ein Würfel mit Kantenlängen von  $20 \mu\text{m}$ ,  $E_1 = E_3 = 50 \text{ GPa}$ ,  
 $E_2 = E_4 = 350 \text{ GPa}$ ,  $\mu_1 = \mu_2 = 2 \cdot 10^{-1} \frac{\text{mN}\cdot\text{s}}{\mu\text{m}^2}$ .

Im Vergleich mit dem vorherigen Modell, bis auf die Viskositätsparameter bleiben alle anderen Parameter und die Geometrie unverändert.  $\mu_1$  und  $\mu_2$  sind von  $2 \cdot 10^2$  auf  $2 \cdot 10^{-1} \frac{\text{mN}\cdot\text{s}}{\mu\text{m}^2}$  (tausendfach kleiner) reduziert worden. Damit wird die Viskosität des Materials verringert und bezogen auf das Verhalten bedeutet es, dass das Material wenig fließfähig und somit etwas härter wird (s. Abbildung 5.6). Dieses Modell kriecht immer noch vor Erreichen der vorgegebenen, maximalen Eindringtiefe.

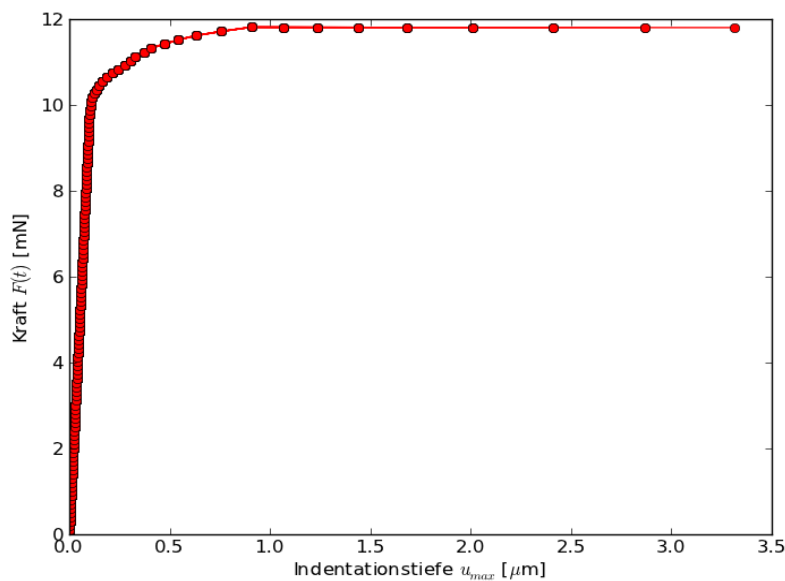


**Abbildung 5.6:** Krafteindringkurve für die Probe 4.

## 5.5 Testergebnis 5

Das fünfte Modell ist ein Würfel mit Kantenlängen von  $20 \mu\text{m}$ ,  $E_1 = E_3 = 50 \text{ GPa}$ ,  
 $E_2 = E_4 = 3500 \text{ GPa}$ ,  $\mu_1 = \mu_2 = 2.10^{-1} \frac{\text{mN}\cdot\text{s}}{\mu\text{m}^2}$ .

Im Vergleich mit dem vorherigen Modell, bis auf  $E_2$  und  $E_4$  (s. Abbildung 3.1) bleiben alle anderen Parameter und die Geometrie unverändert.  $E_2$  und  $E_4$  sind die elastischen Anteile der volumetrischen und deviatorischen Anteile des Spannungstensors. Sie sind für das fünfte Modell zehnmal größer als für das Modell 4. Die Erhöhung dieser Werte bewirkt eine Erhöhung des Viskoelastischen Effekts, d.h. das Material verhält sich etwas härter und benötigt mehr Kräfte. Das Material kriecht ebenfalls hier vor der maximalen Eindringtiefe.



**Abbildung 5.7:** Krafteindringkurve für die Probe 5.



## 5.6 Testergebnis 6

Das letzte Modell ist ein Würfel mit Kantenlängen von  $20 \mu\text{m}$ ,  $E_1 = E_2 = 0 \text{ GPa}$ ,  $E_3 = 50 \text{ GPa}$ ,  $E_4 = 3500 \text{ GPa}$ ,  $\mu_1 = \mu_2 = 2 \cdot 10^{-1} \frac{\text{mN}\cdot\text{s}}{\mu\text{m}^2}$ .

Dieses Modell hat lediglich eine ähnliche Geometrie mit den anderen Modellen (außer Modell 1). Hier wurde für Einmal unterschiedliche Werte den E-Moduli zugewiesen. Bis dahin sind immer gleiche Werte für  $E_1$  und  $E_3$  und für  $E_2$  und  $E_4$  gewählt worden. Die in der Abbildung 5.8 resultierende Kurve entspricht immer noch nicht dem experimentellen Kraft-weg-Diagramm, da es ein Kriechverhalten vor der maximalen Eindringtiefe gibt.

Solche Tests mit unterschiedlichen Materialwerten sollen mehrmals durchgeführt werden, um eine dem Experiment ähnelnde Krafteindringkurve zu bekommen.

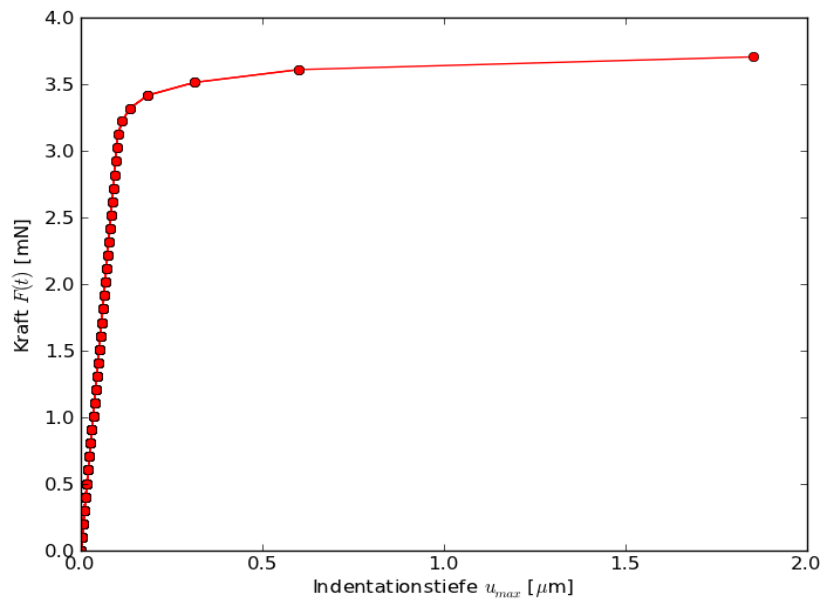


Abbildung 5.8: Krafteindringkurve für die Probe 6.

## **5.7 Schlussfolgerung und Aussicht**

Zur Erfüllung des Ziels dieser Arbeit, d.h. ein experimentelles Kraft-Weg-Diagramm zu simulieren, wurden die Materialparameter für jeden Versuch zufällig variiert und die resultierenden Eindringkurven interpretiert. Bei den Ergebnissen sind zwei Hauptprobleme aufgetreten: Der Simulationsabbruch vor Beginn der Entlastungsphase und das Kriechverhalten der Proben vor Beginn der Haltephase. Falls die Wahl des Zener-Modells zur Simulation der Nanoindentation gut ist, dann liegt der Unterschied zwischen dem experimentellen und den simulierten Diagrammen an den Materialparametern. Zur Bestimmung der richtigen Materialparameter, kann ein inverses Problem gelöst werden:

Das bedeutet ein Programm zu implementieren, das die Materialparameter für jede Simulation inkrementiert, die Simulation durchführt, die Ergebnisse mit den experimentellen Werten vergleicht und dieses Zyklus solange wiederholt, bis die berechneten und experimentellen Werte übereinstimmen. Und davon können die Materialparameter abgelesen werden.

## Literaturverzeichnis

[Cheng and Al, 2000] L. Cheng, H. Xia, W. Yu, L. E. Scriven, and W. W. Gerberich, Flat-punch indentation of viscoelastic materials, *J. Polym. Sci. B Polym. Phys.* 38:1 (2000), 10–22.

[DIN 14577, 2002] Deutsches Institut für Normung: DIN EN ISO 14577, Instrumentierte Eindringprüfung zur Bestimmung der Härte und anderer Werkstoffparameter, Teil 1 bis 4 . 2002.

[Justine, 2008] C. Justine, Zum Materialverhalten von Mineralvlies: Experimente, Modellbildung und Berechnung, Berichte des Institut für Mechanik, *Kassel University Press*, 2008

[Kurnatowski, 2010] B. Kurnatowski, Zweiskalensimulation von mikroheterogenen Strukturen aus spröden Faserverbundwerkstoffen, *Kassel University Press*, 2010

[Müller, 2008] Wolfgang. H. Müller, Technische Mechanik für Ingenieure, Carl Hanser, 2008, Kap. 4

[Oliver and Pharr, 1992] W.C. Oliver and G.M. Pharr, An Improved Technique for Determining Hardness and Elastic Moduli using Load and Displacement Sensing Indentation Experiments, *Journal of Materials Research*, 7, 1564-1583.

[Shahsavari and Ulm, 2009] R. Shahsavari and F. J. Ulm, Indentation Analysis of fractional viscoelastic solids, *Journal of mechanics of materials and structures*, vol.4, No.3, 2009

[Sneddon, 1965] I. N. Sneddon, The relation between load and penetration in the axisymmetric Boussinesq problem for a punch of arbitrary profile, *Int. J. Eng. Sci.* 3:1 (1965), 47–57.

[Sterthaus, 2008] J. Sterthaus, Parameteridentifikation an metallischen Werkstoffen basierend auf numerischen Simulationen und instrumentierter Eindringprüfung, Dissertation, TU-Berlin, 2008

[Ullner] C. Ullner, Die Reihe DIN EN ISO 14577 – Erste weltweit akzeptierte Normen für die instrumentierte Eindringprüfung, BAM, Berlin

[Willner, 2003] K. Willner, Kontinuums- und Kontaktmechanik: synthetische und analytische Darstellung, Springer, 2003, Kap.3