

Numerische Untersuchung von mechanischen und thermischen Eigenschaften von Gusseisen mit Lamellengraphit

Zur Erlangung des akademischen Grades eines

DOKTORS DER INGENIEURWISSENSCHAFTEN (Dr.-Ing.)

von der KIT-Fakultät für Maschinenbau des
des Karlsruher Instituts für Technologie (KIT)

genehmigte

DISSERTATION

von

M.Sc. Christoph Johannes Herrmann

Tag der mündlichen Prüfung:

30.04.2021

Hauptreferent:
Korreferent:

Prof. Dr. rer. nat. Britta Nestler
Prof. Dr.-Ing. habil. Markus Kästner

Eidesstattliche Erklärung

Ich erkläre an Eides statt, dass ich die vorliegende Dissertationsschrift mit dem Titel “Numerische Untersuchung von mechanischen und thermischen Eigenschaften von Gusseisen mit Lamellengraphit” selbständig und ohne unzulässige fremde Hilfe verfasst habe. Ich habe keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt sowie wörtliche und sinngemäße Zitate kenntlich gemacht. Die Arbeit wurde in gleicher oder ähnlicher Form keiner anderen Prüfungsbehörde zur Erlangung eines akademischen Grades vorgelegt.

Karlsruhe, 5. November 2021

Christoph Johannes Herrmann

Kurzfassung

Gusseisen ist ein Werkstoff, der seit langem und in großem Umfang eingesetzt wird. In Deutschland liegt sein jährliches Produktionsvolumen bei mehreren Millionen Tonnen. Das Mikrogefüge von Gusseisen besteht aus einer metallischen Matrix mit Graphiteinschlüssen. In dieser Arbeit wird Gusseisen mit Lamellengraphit untersucht. Gusseisen mit Lamellengraphit wird in sehr sicherheitskritischen Bereichen wie beispielsweise Bremscheiben oder thermo-mechanisch hochbelasteten Anwendungen wie Zylinderköpfen eingesetzt. Seine makroskopischen Werkstoffeigenschaften sind stark von der vorhandenen Mikrostruktur abhängig. Der quantitative Zusammenhang zwischen den Werkstoffeigenschaften und dem Gefüge ist oft nicht bekannt. Um in Zukunft bessere numerische Vorhersagen zu ermöglichen, werden makroskopische mikrostrukturbasierte thermische und mechanische Materialeigenschaften für einen großen Temperaturbereich berechnet. Die spezifischen mechanischen Eigenschaften von Gusseisen mit Lamellengraphit in Zug und Druck werden berücksichtigt. Die notwendigen Simulationsgebiete werden algorithmisch auf Basis von Wahrscheinlichkeitsverteilungen nach *DIN EN ISO 945-1* [40] generiert. Weiterführend wird ein Phasenfeldrissmodell eingeführt, das die Simulation von Rissentstehung und -ausbreitung in Verbundwerkstoffen mit spröde-anisotropen und duktilen Komponenten in Anlehnung an Gusseisen mit Lamellengraphit ermöglicht. Als Vorarbeit für das Rissmodell wird ein Homogenisierungsansatz für den Mehrphasenfeldkontext eingeführt, der es erlaubt, die elastoplastischen Verzerrungen in mehrphasigen Übergangsbereichen, unter Beachtung der mechanischen Sprungbedingungen, zu berechnen. Ein solches Modell ist für Gusseisen wichtig, um das Auftreten von plastischen Verformungen in Graphitpartikeln zu vermeiden.

Abstract

Cast iron is a material that has been used for a long time and on a large scale. In Germany, its annual production capacity is several million tonnes. The microstructure of cast iron consists of a metallic matrix with graphite inclusions. In this work, cast iron with lamellar graphite is investigated. Cast iron with lamellar graphite is used in very safety-critical areas such as brake discs or thermomechanically highly stressed applications such as cylinder heads. Its macroscopic characteristics are strongly dependent on the existing microstructure. The quantitative correlation between the material properties and the microstructure is often not known. To enable better numerical predictions in the future, macroscopic microstructure-based thermal and mechanical material properties are calculated for a wide temperature range. The specific mechanical properties of cast iron with lamellar graphite in tension and compression are taken into account. The required simulation domains are generated algorithmically on the basis of probability distributions according to *DIN EN ISO 945-1* [40]. Further, a phase-field crack model is introduced that allows the simulation of crack initiation and propagation in composites with brittle-anisotropic and ductile components, following cast iron with lamellar graphite. As a preliminary work for the crack model, a homogenisation approach for the multiphase field context is introduced, which allows to calculate elastoplastic strains in multiphase regions, considering the mechanical jump conditions. Such a mo-

It is important for cast iron to avoid the occurrence of plastic deformation in graphite particles.

“Isn’t it funny how day by day nothing changes, but when you look back everything is different?”

– C.S. Lewis

Danksagung

Die vorliegende Arbeit entstand im Rahmen einer kooperativen Promotion zwischen der Daimler AG und der Hochschule Karlsruhe – Technik und Wirtschaft. Mein besonderer Dank gilt Frau Prof. Dr. rer. nat. Britta Nestler für die Betreuung meiner Promotion und die Möglichkeit der Arbeit in Ihrer überaus familiären und zugleich zielorientierten Arbeitsgruppe. Ebenso bedanke ich mich bei Herr Prof. Dr.-Ing. habil. Markus Kästner für die Bereitschaft zur Übernahme des Korreferats. Auch der Daimler AG will ich in gleichem Maße für die Förderung meiner Tätigkeit danken. Besonders hervorheben möchte ich hierbei die Arbeitsgespräche mit Herr Wilke, Herr Reiner, Herr Dr. Rein, Herr Dr. Hilgers und Herr Dr. Niethammer. Vielen Dank für die produktive Zusammenarbeit und das Wegweisen der Forschungsrichtung.

Bei meinen Kollegen bzw. ehemaligen Kollegen muss ich mich für die vielen fachlichen und sachlichen Diskussionen und Impulse bedanken. Die Arbeitsatmosphäre war stets sehr kollegial und fruchtbar, man konnte immer auf ein offenes Ohr der Kollegen zählen und gute Ratschläge und Antworten erwarten, ohne jemals Neid oder Missgunst erfahren zu müssen. Hervorheben möchte ich dabei Dr. E. Schoof, Dr. F. Schwab, C. Ratz, L. Schöller, Dr. A. Reiter, Dr. M. Selzer, Dr. P. G. Kubendran Amos, T. Mitternacht. Ganz besonders bedanke ich mich bei meinem Gruppenleiter Dr. D. Schneider für seine wissenschaftliche Begeisterung und fachlichen Visionen, während all der Jahre. Außerdem geht großer Dank an meinen Vorgänger, der mich während der Anfangsphase meiner Promotion entscheidend unterstützt hat - Dr. S. Schmid. Für die Hilfe beim Korrekturlesen meiner Dissertation bin ich L. Geisen sehr dankbar.

Last but no least bedanke ich mich von ganzem Herzen bei meiner Frau und meinen Eltern, für ihre wahnsinnige Geduld, ihre kleinen Schubse um mich auf Kurs zu halten, ihren Zuspruch und ihr Verständnis. Meine Tochter bitte ich um Entschuldigung für die vielen Wochenenden vor dem PC, die ich hätte ihr widmen können.

Inhaltsverzeichnis

Kurzfassung	iii
Danksagung	vii
Abkürzungen und Symbole	xiii
1 Einleitung	1
2 Mathematische Notation	5
3 Übersicht zur Werkstoffgruppe der Gusseisen	7
4 Ausgewählte Grundlagen der Kontinuumsmechanik	13
4.1 Kinematische Größen und Beziehungen	13
4.1.1 Verschiebungs- und Verzerrungszustand	15
4.1.2 Kinematische Kompatibilitätsbedingung - Lemma von Hadamard	16
4.2 Kinetische Größen	17
4.2.1 Cauchy-Spannungen	17
4.3 Bilanzgleichungen	18
4.3.1 Massenbilanz	20
4.3.2 Impulsbilanz	20
4.3.3 Drehimpulsbilanz	21
4.3.4 Energiebilanz	22
4.3.5 Entropiebilanz	23
4.4 Konstitutive Beziehungen	23
4.4.1 Lineare Elastizitätstheorie - Hyperelastizität	24
4.4.2 Plastizitätstheorie - Elastoplastisches Materialverhalten	25
4.5 Homogenisierung mechanischer Größen	30
5 Ausgewählte Grundlagen der Risstheorie	31
5.1 Allgemeines	32
5.2 Lineare Bruchmechanik - Energetische Betrachtungsweise	33
5.3 Duktiles Risswachstum	33
6 Ausgewählte Grundlagen der Wärmeübertragung	35
7 Mechanische und thermische Eigenschaften von Gusseisen mit Lamellengraphit	37
7.1 Erstellung der Mikrostruktur von Gusseisen mit Lamellengraphit	41
7.2 Modellformulierung	48
7.2.1 Mechanisches und thermisches Modell für Perlit	49
7.2.2 Mechanisches und thermisches Modell für die Graphitlamellen	52

7.3	Mechanische Simulationen	55
7.3.1	Kapitelspezifische Kernpunkte der Numerik und des Simulationsaufbaus	55
7.3.2	Analyse des mechanischen Modells	56
7.3.3	Mechanische Simulationsstudie	58
7.4	Thermische Simulationen	73
8	Mehrphasenfeldmodell für phasenabhängige Plastizität	75
8.1	Modellformulierung	77
8.1.1	Mehrphasenfeldmodell	77
8.1.2	Elastisches Mehrphasenfeldmodell	80
8.1.3	Plastische Mehrphasenfeldmodelle	82
8.2	Kapitelspezifische Kernpunkte der Numerik und des Simulationsaufbaus	85
8.3	Verifizierung des Modells zur Berechnung der phaseninhärenten plastischen Dehnungen	86
8.3.1	Vergleich der Plastizitätsmodelle anhand eines 1D-Simulationsgebietes	86
8.3.2	Vergleich des Homogenisierungsansatzes mit einer kontaktunsteitigen Grenzflächenlösung	88
8.4	Auswirkungen der neuen Formulierung des elastoplastischen Modells, hinsichtlich der mechanischen treibenden Kräfte	91
8.4.1	Simulationsbeispiel mit Eigendehnung in einer Dimension	91
8.4.2	Simulationsbeispiel mit Eigendehnungen in zwei Dimensionen	93
8.5	Anwendung: Martensitische Transformation mit Plastizität	96
9	Phasenfeldmodell für spröd-anisotropes und duktiler Risswachstum	101
9.1	Modellformulierung	103
9.2	Kapitelspezifische Kernpunkte der Numerik	110
9.3	Verifizierung und Validierung des Modells zur Simulation von spröd-anisotropem und duktiler Risswachstum	110
9.3.1	Planarer diffuser Phasenübergang zwischen spröd-anisotroper und duktiler Festphase	113
9.3.2	Einzelner elliptischer, transversal isotroper, spröder Partikel in duktiler Matrix	119
9.3.3	Mehrphasensimulation in einem idealisierten Graugussgefüge	121
10	Zusammenfassung und Ausblick	129
A	Anhang A - Thermo-mechanische Eigenschaften von Gusseisen mit Lamellengraphit - Spannungs-Dehnungs-Diagramme	133
A.1	Zugbelastung - 10 v.-%	133
A.2	Zugbelastung - 11 v.-%	137
A.3	Zugbelastung - 12 v.-%	140
A.4	Druckbelastung - 12 v.-%	143
B	Anhang B - Herleitung der Gleichgewichtsbedingung der Phasenfeld-evolutionsgleichung für Abschnitt 8.4.1	147

Literaturverzeichnis	149
Eigene Veröffentlichungen	161

Abkürzungen und Symbole

Abkürzungen

AT-1 Modellansatz nach Ambrosio und Tortorelli

GG15 Bezeichnung für Gusseisen mit Lamellengraphit

KIT Karlsruher Institut für Technologie

RVE Repräsentatives Volumenelement

SVE Statistisches Volumenelement

Operatoren und mathematische Symbole

δ_{ij}	Kronecker Delta
\mathbf{I}	Einheitstensor
\mathbf{a}^\top	Transponierte des Vektor \mathbf{a}
$ \mathbf{a} $	Euklidische Norm des Vektor \mathbf{a}
$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$	Skalarprodukt des Vektor \mathbf{a} und Vektor \mathbf{b}
$\mathbf{A} : \mathbf{B}$	Frobenius Skalarprodukt der Tensoren 2. Stufe \mathbf{A} und \mathbf{B}
$\mathcal{C}[\mathbf{B}]$	Lineare Abbildung eines Tensors 4. Stufe \mathcal{C} (dargestellt in kalligraphischer Schrift) auf Tensor 2. Stufe \mathbf{B}
$\mathbf{a} \otimes \mathbf{b}$	Dyadisches Produkt des Vektor \mathbf{a} und Vektor \mathbf{b}
∇	Nabla Operator
ε_{ijk}	Levi-Civita-Tensor
Q_{ij}	Rotationsmatrix
$\frac{\partial \psi}{\partial t}$ oder $\dot{\psi}$	Zeitliche Änderung
\mathbb{N}	Ganze Zahlen
\mathbb{R}	Reelle Zahlen
$\mathbb{R}_{\geq 0}$	Reelle Zahlen größer-gleich Null
\mathbb{R}^n	n-dimensionaler Raum der reellen Zahlen
∞	Unendlich
r, s, t	Halbachsen Ellipsoid

<i>amp</i>	Amplitude der Wellung eines Ellipsoid
<i>freq</i>	Frequenz der Wellung eines Ellipsoid
<i>offset</i>	Nullphasenwinkel der Wellung eines Ellipsoid
μ	Erwartungswert der Gauß'schen Normalverteilung
<i>var</i>	Varianz der Gauß'schen Normalverteilung
<i>err</i>	Prozentualer Fehler

Symbole

%	Prozent
m. – %	Masseprozent
v. – %	Volumenprozent
ψ^+	Positiver Grenzwert eines physikalischen Feldes auf einer Diskontinuitätsfläche
ψ^-	Negative Grenzwert eines physikalischen Feldes auf einer Diskontinuitätsfläche

Lateinische Symbole und Variablen

Kleinbuchstaben

a_i	Beschleunigung (immer in Indexnotation)
\mathbf{a}_i oder \mathbf{a}	Sprung des Deformationsgradienten
ϵa	Gradientenenergiedichte
b_u	Spezifische Wärmequelle
b_i	Quellbeitrag einer physikalischen Größe
c_{\min}	Minimalwert der phänomenologischen Degradierungsfunktion der Steifigkeitstensoren
c	Spezifische Wärmekapazität
d	Phänomenologische Degradierungsfunktion des Steifigkeitstensors
f_i	Kraftvektor
f_{chem}	Chemischer Beitrag der freien Energie
f_f	Plastische Fließfunktion
f_e^{eff}	Effektive Formänderungsenergie
f_p	Plastischer Energiebeitrag
$f(\dots)$	Weitere Beiträge der freien Energie

g	Gramm
h_c^α	Rissdegradierungsfunktion
h_f^α	Festphaseninterpolationsfunktion
k_{visko}	Plastischer viskoser Relaxationskoeffizienten
k_E	Temperaturabhängiger Abminderungsfaktor des E-Moduls
k_f	Temperaturabhängiger Abminderungsfaktor der Fließgrenze
l	Länge
m	Meter
n_i oder \mathbf{n}	Normalenvektor
p_i	Flussanteil einer physikalischen Größe
\dot{q}	Wärmestromdichte
$q^{\alpha\beta}$	Generalisierter α - β -Gradient
s	Spezifische Entropie
s_{ij} oder \mathbf{s}	Deviatorischer Spannungstensor
t	Zeit
t_i	Spannungsvektor
u	Spezifische innere Energie
u_i	Verschiebung eines materiellen Punktes
v_i	Geschwindigkeit
x_i oder \mathbf{x}	Ortsvektor eines materiellen Punktes in Momentankonfiguration

Großbuchstaben

A	Fläche
$^\circ\text{C}$	Grad Celsius
C_{ijkl} oder \mathbf{C}	Materialsteifigkeitstensor
E	Elastizitätsmodul
E_{kin}	Kinetische Energie
E_{px}	Sekanten-Modul bei x-Prozent Dehnung
E_{ij}	Green'scher Verzerrungstensor
\mathcal{F}	Freies Energiefunktional
F_{aniso}	Anisotropiefaktor der kritischen Energiefreisetzungsrates
F_e	Elastische potentielle Energie
F_{ij}	Deformationsgradient

G	Energiefreisetzungsrage
G_c	Kritische Energiefreisetzungsrage
H	Plastischer linearer Verfestigungsfaktor
H_{ij} oder \mathbf{H}	Verschiebungsgradient
J	Joule
K	Grad Kelvin
K_{Ic}	Kritischer Modus I Spannungintensitätsfaktor
L_i	Drehimpuls
\mathcal{M}	Masse
$M^{\alpha\beta}$	Mobilität eines Grenzbereichs zwischen den Phasen α und β
M_i	Äußerer Moment
N	Anzahl an im Körper vorhandenen Phasen
N_i	Plastischer Fließvektor
Pa	Pascal
P_i	Impuls
P_{mech}	Mechanische Leistung
P_{therm}	Thermische Leistung
Q	Wärme
R_{px}	Technische Dehngrenze bei x-Prozent Dehnung
S	Diskontinuitätsfläche
S_b	Entropieerzeugung
S_p	Entropieströmung
∂S	Berandung einer Diskontinuitätsfläche
S_{ijkl} oder \mathcal{S}	Materialnachgiebigkeitstensor
U	Innere Energie
V	Volumen
W	Watt
X_i oder \mathbf{X}	Ortsvektor eines materiellen Punktes in Referenzkonfiguration

Griechische Symbole und Variablen

γ	Spezifische Oberflächenenergie
$\gamma^{\alpha\beta\delta}$	Penaltyterm von Drittphasen

ϵ	Längenparameter für die diffuse Interfacebreite
ε	Dehnung
ε_{akk}	Akkumulierte plastische Verzerrung
$\varepsilon_{\text{akk,krit}}$	Kritischer Wert der akkumulierten plastischen Verzerrung
ε_{vol}	Volumenänderung
$\varepsilon_{\text{vol}}^{\text{krit}}$	Schwellwert der Volumenänderung
ε_{ij} oder $\boldsymbol{\varepsilon}$	Linearisierter Verzerrungstensor
ζ	Rauschterm der Phasenfelder
ζ_i	Inverse der Bewegungsfunktion
η	Sättigungsrate der nicht linearen plastischen Verfestigung
ϑ	Thermodynamische Temperatur
θ	Temperatur
θ_0	Referenztemperatur
θ_u	Unterkühlungstemperatur
λ_{lame}	Erste Lamé Konstante
λ	Wärmeleitfähigkeit
$\dot{\lambda}$	Plastischer Konsistenzparameter
μ_{lame}	Zweite Lamé Konstante oder Schubmodul
ν	Querkontraktionszahl oder Poisson'sche Zahl
ν_{px}	Querkontraktion bei x-Prozent Dehnung
ρ	Massendichte
σ	Normalspannung
σ_f	Streckgrenze
σ_m	Mittlere Normalspannung
σ_y	Fließspannung
$\sigma_{y,0}$	Fließgrenze
σ_∞	Sättigungsspannung der nicht linearen plastischen Verfestigung
σ_v	Vergleichsspannung
$\sigma_{v.M.}$	Von-Mises-Vergleichsspannung
σ_z	Zugfestigkeit
σ_{ij} oder $\boldsymbol{\sigma}$	Cauchy'scher Spannungstensor
τ	Schubspannung
ϕ^α	Phasenfeld der Phase- α

ϕ^β	Phasenfeld der Phase- β
ϕ_c	Rissphasenfeld
$\hat{\phi}$	Phasenfeld- N -Tuple
χ_i	Bewegungsfunktion
ψ	Dichte einer physikalischen Größe
Ψ	Extensive physikalische Größe
Ω	Körper
$\partial\Omega$	Oberfläche eines Körpers

Subskripte und Superskripte

$\square_{\text{hex-a}}$	Subskript für a-Richtung des hexagonalen Kristallgitters
$\square_{\text{hex-c}}$	Subskript für c-Richtung des hexagonalen Kristallgitters
\square_{max}	Subskript für Maximal
\square_{min}	Subskript für Minimalwert
\square^{RT}	Superskript für Raumtemperatur
\square^{S}	Superskript zur Identifikation einer flächenspezifischen Größe
\square^0	Superskript für Referenzkonfiguration
\square^t	Superskript für Momentankonfiguration
\square_e	Subskript für elastischen Anteil
\square_p	Subskript für plastischen Anteil
\square_{eig}	Subskript für Eigendehnung
\square^α	Superskript für Phase α
\square^β	Superskript für Phase β
\square^δ	Superskript für Phase δ
$\square^{\alpha\beta}$	Superskript für zwischen zwei Phasen α und β
\square^{g}	Superskript für Graphit
\square^{m}	Superskript für Matrix
\square^{aust}	Superskript für Austenit
\square^{mart}	Superskript für Martensit
\square^{mart2}	Superskript für martensitische Variante Zwei
\square_c	Subskript für Rissphase
\square_f	Subskript für Festphasen

\square^s	Subskript einer spröden Phase
\square^d	Subskript einer duktilen Phase
$\hat{\square}$	Tuple aller phaseneigenen Größen
\square^{mak}	Makroskopischer Wert einer Größe nach Hill [63]
\square^{eff}	Effektiver Werte einer Größe
$\bar{\square}$	Effektiver Werte einer Größe des Interpolationsansatzes
$\tilde{\square}$	Effektiver Werte einer Größe des Homogenisierungsansatzes

Abbildungsverzeichnis

3.1	Schliffbilder und Raumbilder der Gusseisenvarianten	8
3.2	Spannungs-Dehnungs-Kennlinie von Gusseisen mit Lamellengraphit und Stahl	9
3.3	Atomarer Aufbau von Lamellengraphit	10
4.1	Deformierbarer Körper: Bewegung im euklidischen Raum	14
4.2	Lineare und sättigende Werkstoffverfestigung in Abhängigkeit der akkumulierten plastischen Verzerrung	28
7.1	Idealisierte Graphitlamelle	43
7.2	“Schliffbild” eines synthetisch erstellten <i>GG-15</i> -Werkstoffs	46
7.3	Schliffbild einer LKW-Bremsscheibe aus <i>GG-15</i>	46
7.4	Raumbilder Gusseisen SVE	47
7.5	Temperaturabhängige Fließkurven der perlitischen Matrix	51
7.6	Temperaturabhängige Wärmeleitfähigkeiten	52
7.7	Temperaturabhängige Wärmekapazitäten	53
7.8	Degradierungsfunktion der Graphitsteifigkeiten	54
7.9	Einfluss der Graphitausprägung auf Anisotropie	56
7.10	Einfluss des Minimalwertes der Degradierungsfunktion	57
7.11	Einfluss des Schwellwertes der Volumenänderung	58
7.12	Spannungs-Dehnungs-Diagramm eines IA2-SVE: eindimensionale, momentenfreie für Zug- und Druckbelastung	60
7.13	Konturplots bei Zug- und Druckbelastung eines IA2-SVE	61
7.14	Konturplots bei Zugbelastung unterschiedlicher SVE	62
7.15	Spannungs-Dehnungs-Diagramme bei Zug- und Druckbelastung aller Graphitausprägungen mit 12 v. – % Graphit und $\theta = 20^\circ\text{C}$	63
7.16	Spannungs-Dehnungs-Diagramme bei Zug- und Druckbelastung aller Graphitausprägungen mit 12 v. – % Graphit und $\theta = 750^\circ\text{C}$	64
7.17	Spannungs-Dehnungs-Diagramme bei Zugbelastung einer GG-15-Graphitausprägung mit 12 v. – % Graphit und variabler Temperatur	65
7.18	Spannungs-Dehnungs-Diagramme bei Druckbelastung einer GG-15-Graphitausprägung mit 12 v. – % Graphit und variabler Temperatur	66
7.19	Spannungs-Dehnungs-Diagramme bei Zug- und Druckbelastung einer GG-15-Graphitausprägung mit variablem Graphitvolumenanteil und Raumtemperatur	66
7.20	Schematische Auswertung des Sekantenmoduls und der Dehngrenze	68
7.21	Sekantenmoduli bei einer Zugdehnung von 0,1 %	69
7.22	Sekantenmoduli bei einer Zugdehnung von 0,2 %	70
7.23	Querkontraktionen bei einer Zugdehnung von 0,1 %	70
7.24	Querkontraktionen bei einer Zugdehnung von 0,2 %	71
7.25	Dehngrenzen bei einer Zugdehnung von 0,1 %	71

7.26	Dehngrenzen bei einer Zugdehnung von 0,2 %	72
7.27	Sekantenmoduli, Querkontraktionen und Dehngrenzen bei einer Druckdehnung von 0,1 %	72
7.28	Sekantenmoduli, Querkontraktionen und Dehngrenzen bei einer Druckdehnung von 0,2 %	73
7.29	Wärmeleitfähigkeiten aller SVE	74
8.1	Vergleich von Pseudo-1D-Simulationsergebnissen des Homogenisierungs- und Interpolationsansatzes	88
8.2	Validierung des Plastizitätsmodells gegenüber unstetigem Phasenübergang eines Pseudo-2D-Simulations-Setups.	90
8.3	Pseudo-1D-Wachstum eines Nukleationskeims mit Eigendehnung in eine Raumrichtung unter Berücksichtigung plastischer Deformationen	92
8.4	Vergleich der Ergebnisse des Homogenisierungs- und des Interpolationsansatzes für das 1D-Wachstum eines Nukleationskeims mit zwei Eigendehnungen	95
8.5	Wachstum von martensitischen Varianten in einem austenitischen Korn	98
9.1	Simulationsaufbau: Initialer Riss in Gebiet mit planarem diffusem Festphasenübergang	114
9.2	Konturplots für Simulationsgebiet mit initialem Riss in Gebiet mit planarem diffusem Festphasenübergang	116
9.3	Initialer Riss in Gebiet mit planarem diffusem Festphasenübergang: Variation ϵ und ψ_{aniso}^s	117
9.4	Initialer Riss in Gebiet mit planarem diffusem Festphasenübergang: Variation F_{aniso}^s und $\epsilon_{\text{akk,krit}}^d$	118
9.5	Simulationsaufbau: Einzelner elliptischer, transversal isotroper, spröder Partikel in duktiler Matrix	119
9.6	Konturplots für Simulationsgebiet mit einzelner elliptischer, transversal isotropem, sprödem Partikel in duktiler Matrix	122
9.7	Einzelner elliptischer, transversal isotroper, spröder Partikel in duktiler Matrix: Variation ϵ und ψ_{aniso}^s	123
9.8	Einzelner elliptischer, transversal isotroper, spröder Partikel in duktiler Matrix: Variation F_{aniso}^s und $\epsilon_{\text{akk,krit}}^d$	124
9.9	Simulationsgebiet mit drei unterschiedlich orientierten elliptischen, transversal isotropen, spröden Partikeln in einer duktilen Matrix, zusammen mit den mechanischen Randbedingungen.	125
9.10	Entwicklung des Rissphasenfeldes, der resultierenden von-Mises-Vergleichsspannungen und der akkumulierten plastischen Verzerrungen eines idealisierten Graugussgefüges.	126
9.11	Spannungs-Dehnungs-Verhalten einer Simulationsdomäne, inspiriert durch die Mikrostruktur eines Gusseisens mit Lamellengraphit unter Zug- und Druckbelastung.	127

Einleitung

Gusseisen ist ein Werkstoff, der seit langem und in großem Umfang verwendet wird. In Deutschland umfasst seine jährliche Produktionsmenge mehrere Millionen Tonnen. Zum Einsatz kommt er in den verschiedensten technischen Anwendungen, wie zum Beispiel in der Automobilindustrie. Die *Gusseisenvariante mit Lamellengraphit* hat unter den *grauen Gusseisen* einen Produktionsanteil von über 50%¹, und somit eine Jahresproduktion, die größer ist als die aller anderer Gusswerkstoffe zusammen. Dies macht Gusseisen mit Lamellengraphit zu einem Werkstoff mit herausragender technologischer und wirtschaftlicher Bedeutung.

Gusseisen mit Lamellengraphit wird bevorzugt bei thermo-mechanisch hoch belasteten Bauteilen wie Zylinderköpfen oder Bremscheiben verwendet. Es besitzt wegen der starken dreidimensionalen Vernetzung der Graphitlamellen die höchste Wärmeleitfähigkeit unter den Gusseisenvarianten [65, 107] und wird deshalb bei bestimmten Anwendungen, trotz der schlechteren mechanischen Eigenschaften, den anderen Gusseisenvarianten vorgezogen. Hierbei kommt zum Tragen, dass sich die an ein thermisch belastetes Bauteil gestellten Anforderungen grundlegend von den an ein mechanisch belastetes Bauteil gestellten Anforderungen unterscheiden. Bei erhöhten Temperaturen führen inhomogene Temperaturfelder zu lokal unterschiedlichen Wärmedehnungen und folglich zu Wärmespannungen [65], die zu vermeiden sind. Maßnahmen gegen inhomogene Temperaturfelder sind möglichst dünne Wandstärken der Bauteile oder eine gute Wärmeleitfähigkeit. Eine hohe mechanische Belastbarkeit hingegen verlangt einen großen Widerstand gegen Verformungen und deshalb dickere Wandstärken oder eine hohe Festigkeit. Bei der Herstellung eines thermo-mechanisch beanspruchten Bauteils ist also ein Material mit einem guten Kompromiss zwischen Festigkeit und Wärmeleitfähigkeit notwendig, der beispielsweise von Gusseisen mit Lamellengraphit geboten wird. Durch die vergleichsweise gute Wärmeleitfähigkeit wird das Auftreten von hohen Temperaturgradienten verringert, wodurch auch thermische Dehnungen unterdrückt werden. Verglichen mit vielen anderen Stählen führt dies trotz der an sich schlechteren mechanischen Eigenschaften, bei homogener Temperatur, zu einer guten Haltbarkeit, bei der Verwendung als Werkstoff für thermo-mechanisch belastete Bauteile. Bei der Herstellung von geometrisch komplexen Strukturen bietet es zusätzlich, neben dem vergleichsweise günstigen Preis, ein robustes Verhalten im Gießprozess [98]. Die hohe wirtschaftliche und technologische Relevanz von Gusseisen mit Lamellengraphit stellt einen entscheidenden Grund der Entstehung dieser Arbeit dar.

Bei der konstruktiven Auslegung von Bauteilen ist eine genaue Kenntnis der thermo-mechanischen Eigenschaften des verwendeten Werkstoffes unerlässlich. Gusseisen mit Lamellengraphit besitzt ein außergewöhnlich komplexes mechanisches Verhalten, das aus dem Zusammenspiel der metallischen Matrix und der Graphitinklusiven resultiert. Zu den besonderen Charakteristiken zählt neben dem Nichtvorhandensein eines linear

¹ Quelle: <http://www.bdguss.de/branche/die-branche-in-zahlen/>

elastischen Materialverhaltens die auftretende Zug-Druck-Spannungsasymmetrie [98]. Zusätzlich sind die makroskopischen Materialeigenschaften signifikant von der Morphologie der Graphitmikrostruktur abhängig. Diese wird bei nominal gleicher chemischer Zusammensetzung beispielsweise von der Abkühlgeschwindigkeit aus der Schmelze und den Wandstärken von Bauteilen beeinflusst.

Um zukünftig bessere Prognosen über das mechanische Verhalten von Bauteilen aus Gusseisen mit Lamellengraphit zu ermöglichen, werden im Rahmen der vorliegenden Dissertation kontinuumsmechanische Modelle entwickelt und unter der Zuhilfenahme numerischer Methoden angewendet, um die Sensitivität der makroskopischen mechanischen Eigenschaften von Gusseisen mit Lamellengraphit in Abhängigkeit von der Graphitmikrostruktur in einem großen Temperaturbereich zu analysieren. Des Weiteren wird ein Phasenfeld-Rissmodell vorgestellt, das es ermöglicht, die Mikrorissentstehung und -ausbreitung in Verbundwerkstoffen, bestehend aus spröde-anisotropen Inklusionen und einer duktilen Matrix, zu simulieren. Dies geschieht in Analogie zu Gusseisen mit Lamellengraphit. Als Vorarbeit für die Entwicklung des Phasenfeld-Rissmodells ist im Mehrphasenfeldkontext die Einführung eines Homogenisierungsansatzes zur Berechnung elastoplastischer Verzerrungen notwendig. Es wird ein elastoplastisches Mehrphasenfeldmodell für kleine Dehnungen vorgestellt, das die mechanischen Sprungbedingungen einhält. Anhand der bearbeiteten Themenkomplexe ergibt sich der Titel der vorliegenden Dissertation: *Untersuchungen von mechanischen Eigenschaften in Gusseisen mit Lamellengraphit*.

Einfachheitshalber wird im Folgenden häufig der Terminus *Gusseisen* verwendet, wenn eigentlich von *Gusseisen mit Lamellengraphit* die Rede ist. Falls dennoch eine andere Gusseisenvariante gemeint ist, wird dies explizit erwähnt.

Gliederung der Arbeit

Die vorliegende Arbeit gliedert sich wie folgt: Im Einleitungskapitel sind neben der Motivation die Kernpunkte der Dissertation aufgeführt. Die mathematische Notation wird in Kapitel 2 erläutert. Kapitel 3 befasst sich mit den werkstoffkundlichen sowie den relevanten physikalischen Eigenschaften von Gusseisen und seiner Komponenten. In Kapitel 4 werden die notwendigen Grundlagen der Kontinuumsmechanik eingeführt, gefolgt von ausgewählten Grundlagen der Risstheorie in Kapitel 5. Als abschließendes Grundlagenkapitel wird die Wärmeleitfähigkeit in Kapitel 6 behandelt. Aufbauend auf den einleitenden Grundlagen wird in Kapitel 7 ein Modell vorgestellt, das die Berechnung der makroskopischen mechanischen Werkstoffeigenschaften von Gusseisen in Abhängigkeit von der Mikrostruktur ermöglicht. Anschließend wird das vorgestellte Modell in einer ausführlichen Simulationsstudie in einem großen Temperaturbereich angewendet und die resultierenden Sensitivitäten diskutiert. In Kapitel 8 wird ein Homogenisierungsansatz für den Mehrphasenfeldkontext eingeführt, der es ermöglicht, die elastoplastischen Verzerrungen in mehrphasigen Übergangsbereichen, unter Einhaltung der mechanischen Sprungbedingungen, zu berechnen. Mehrere Verifikationsfälle werden diskutiert. Die Anwendbarkeit des vorgeschlagenen Modells wird durch Simulationen der martensitischen Transformation mit quantitativen Parametern demonstriert. Der Homogenisierungsansatz ist für das folgende Kapitel 9 notwendig und wird dort mit einem Phasenfeldrissmodell kombiniert, sodass die Abbildung von Rissnukleations- und -propagationsprozessen in Verbundwerkstoffen mit spröde-anisotropen und duktilen Bestandteilen möglich wird. Die Einflüsse der relevanten Modellparameter auf die Rissnu-

kleation und -propagation werden anhand idealisierter Probleme - planarer Phasenübergangsbereich und einzelne, in eine duktile Matrix eingebettete spröde-anisotrope Phase - analysiert. Als realistischeres Anwendungsbeispiel dienen einachsiger Zug- und Druckversuch, der an einem idealisierten Graugussgefüge durchgeführt wird. Abschließend werden die erarbeiteten Ergebnisse in Kapitel 10 zusammengefasst, diskutiert und mögliche weiterführende Arbeiten skizziert.

Mathematische Notation

Bei der Einführung der Grundlagen wird, um mögliche Unklarheiten hinsichtlich der Rechenoperationen zu vermeiden, ausschließlich die Indexnotation für tensorielle Ausdrücke verwendet. Als Laufindizes werden hierbei tiefgestellte kursive lateinische Kleinbuchstaben - i, j, k, l - genutzt. Es gilt die Einstein'sche Summenkonvention, d.h. es wird über doppelt vorkommenden Indizes summiert. Anschließend werden Vektoren, Tensoren und Tuple stets in Tensornotation - fett - geschrieben, bei Unklarheiten von mathematischen Operationen in Tensornotation sind deshalb immer die Grundlagenkapitel zu berücksichtigen.

Im Phasenfeldkontext ist es oft notwendig die Zugehörigkeit von Termen zu einer bestimmten Phase darzustellen, dies geschieht mittels hochgestellter kursiver griechischer Buchstaben - $\alpha, \beta, \gamma, \delta$.

Die Argumente von mathematischen Ausdrücken werden nur bei der Einführung des mathematischen Ausdrucks oder bei Ableitungen notiert. Dies dient der Lesbarkeit.

Übersicht zur Werkstoffgruppe der Gusseisen

Nachfolgend werden die relevanten metallkundlichen und physikalischen Grundlagen von Gusseisen zusammengefasst. Auf den Einfluss von Abkühlverläufen und Legierungskomponenten auf die Mikrostrukturausbildung von erstarrten Gussteilen aus Gusseisen wird an dieser Stelle explizit nicht eingegangen, da es sich hierbei um ein komplexes und weites Feld handelt, das für die vorliegende Arbeit nicht von Wichtigkeit ist. Stattdessen sei auf einschlägige Fachliteratur verwiesen.

Eisen-Kohlenstoff-Werkstoffe mit einem Kohlenstoffanteil von weniger als 2,06 m. – % zählen zu den *Stählen*. Als *Gusseisen* werden Eisen-Kohlenstoff-Werkstoffe mit einem Kohlenstoffgehalt von mehr als 2,06 m. – % [60] bezeichnet. Die Erstarrung von Gusseisen findet entweder entsprechend des stabilen *Fe-C*- oder des metastabilen *Fe-Fe₃C*-Systems statt [49]. Ob eine Erstarrung nach dem stabilen *Fe-C*- oder dem metastabilen *Fe-Fe₃C*-System stattfindet, wird im Wesentlichen von der Zusammensetzung der Schmelze und dem Abkühlverlauf beeinflusst. Bei Erstarrungsprozessen nach dem metastabilen *Fe-Fe₃C*-System treten in den Gussteilen keine Graphitkristalle auf, da ein großer Teil des Kohlenstoffs in *Eisenkarbid* (*Zementit*) gebunden ist. Die Bruchflächen dieser Gusseisensorten sind weiß, was ihnen die Bezeichnung *weißes Gusseisen* gebracht hat. Zu den weißen Gusseisen zählen *Temperguss* - *GJMW* oder auch *Hartguss* (*Karbidisches Gusseisen*). Der mit Abstand größte Anteil des produzierten Gusseisens erstarrt nach dem stabilen *Fe-C*-System und enthält Graphitpartikel. Diese Gusseisensorten zählen aufgrund der grauen Bruchflächen zur Gruppe der *grauen Gusseisen*. Dazu gehören *Gusseisen mit Lamellengraphit* - *GJL* (*Grauguss*), *Gusseisen mit Kugelgraphit* - *GJS* (*duktiles Gusseisen*) und *Gusseisen mit Vermikulargraphit* - *GJV*. In Abb. 3.1 sind in der oberen Bildreihe von links nach rechts Schliffbilder für GJL, GJV und GJS abgebildet. Darunter sind die Raumbilder von *Lamellen-*, *Vermikular-* und *Kugelgraphit* zu sehen. Die Aufnahmen stammen aus M. Lampic und Walz [76].

Graphitlamellen besitzen eine sehr dünne, blätterähnliche Form und sind stark vernetzt. Der lamellenartige Graphit ist für die typischen Eigenschaften von Grauguss verantwortlich und macht 3,0 – 4,0 m. – % des Gusseisens aus. Aufgrund des Dichteunterschieds von Graphit und Eisen entsprechen 3,5 m. – % Graphit einem Anteil bis zu 11,0 v. – % [37]. *Kugelgraphit* besitzt eine kompakte, sphärolitische Form und weist keine Vernetzungen auf. *Vermikulargraphit* ist eine Zwischenform der beiden vorher genannten Graphitformen, die wurmförmig und korallenartig verzweigt ist.

Die Gusseisenmatrix kann als Ferrit, Perlit oder Ferrit-Perlit-Gemisch vorliegen [60]. *Ferrit* ist ein kubisch-raumzentrierter α -Mischkristall im *Fe-C*-System, mit einer relativ niedrigen Härte [49]. *Perlitischer Stahl* entsteht während einer eutektoiden Umwandlung [31]. Er besteht aus zahlreichen Perlitkolonien mit zufällig verteilten Orientierungen. Jede Kolonie besteht aus vielen abwechselnd angeordneten, parallelen, dünnen

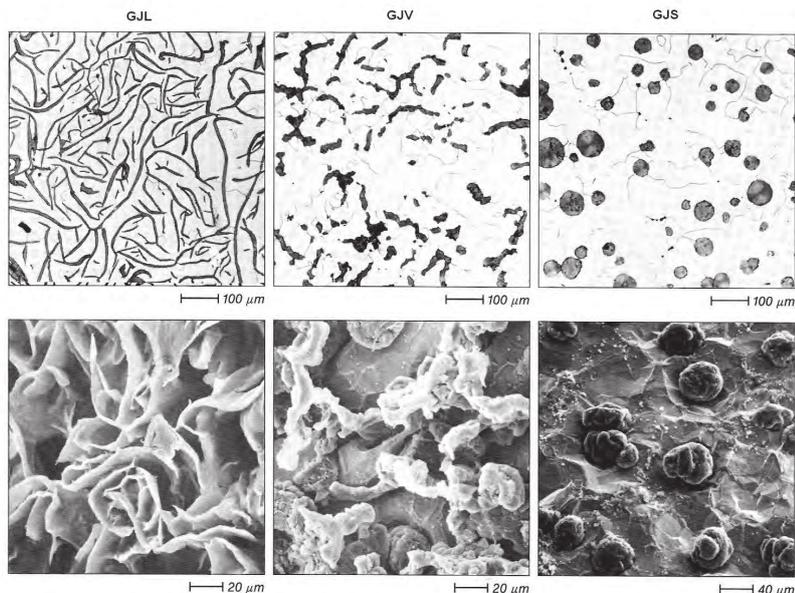


Abbildung 3.1: Schlichtbilder in der oberen Reihe von GJL, GJV und GJS und Raumbilder von Lamellengraphit, Vermikulargraphit und Kugelgraphit in der unteren Reihe, von links nach rechts. Die Aufnahmen sind M. Lampic und Walz [76] entnommen.

Ebenen aus Ferrit und Zementit. Bei Zementit handelt es sich um eine intermetallische $Fe-C$ -Verbindung, die wesentlich härter und spröder ist als Ferrit. Die mechanischen Eigenschaften von Perlit korrelieren stark mit dessen Feinstreifigkeit und somit mit dem Volumenanteil des Zementits, der etwa 15,0 v. - % [103] beträgt. Ein feinerer interlamellarer Abstand bedeutet eine höhere Festigkeit und Fließspannung [69, 54, 31]. Der interlamellare Abstand wird mit zunehmender Abkühlgeschwindigkeit geringer [69, 54, 31] und kann sich selbst innerhalb eines Bauteils lokal, abhängig von unterschiedlichen Abkühlgeschwindigkeit und Wandstärken, unterscheiden. Hinsichtlich der Festigkeit besitzt Perlit eine höhere Festigkeit als Ferrit [113]. Deshalb wird der Gießprozess von Bremsscheiben so vollzogen, dass sich eine möglichst vollständig perlitischer Matrix ausbildet. In dieser Arbeit wird eine rein perlitischer Matrix angenommen.

Graues Gusseisen kann als eine Art natürlicher *Verbundwerkstoff*, bestehend aus einer stahlartigen Matrix mit eingebetteten Graphitpartikeln, betrachtet werden [20, 60, 142, 108]. Als *Graphitausprägung* oder *-mikrostruktur* wird in diesem Zusammenhang die Form, Größe und Anordnung der Graphitpartikel bezeichnet. Sowohl die mechanischen als auch die thermischen Eigenschaften von grauem Gusseisen sind in großem Maße von der Graphitausprägung abhängig [113]. Selbst bei einem konstanten Volumenanteil der Graphitpartikel treten hier große Unterschiede in Abhängigkeit von der Form, den Größen und den Anordnungen der Graphitpartikel auf [11, 37, 77]. Die mechanischen Kenngrößen von grauem Gusseisen nehmen mit feineren Graphitstrukturen zu. Deshalb besitzen Gusseisen mit Kugelgraphit und Gusseisen mit Vermikulargraphit deutlich höhere Festigkeiten und Bruchdehnungen als Gusseisen mit Lamellengraphit. Auf der anderen Seite hat Grauguss, aufgrund des besser vernetzten Graphits, eine wesentlich bessere Wärmeleitfähigkeit als Gusseisen mit Kugelgraphit [107, 108]. Die schlechteren Festigkeits- und Bruchdehnungswerte von Gusseisen mit Lamellengraphit werden bei thermo-mechanischer Beanspruchung teilweise durch geringere thermische Spannungen kompensiert. Gusseisen mit Vermikulargraphit besitzt im Verhältnis zu

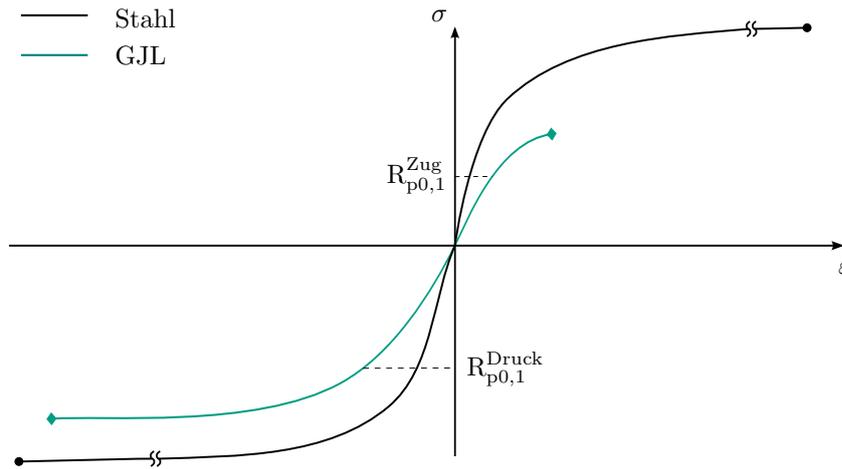


Abbildung 3.2: Qualitativer Verlauf der Spannungs-Dehnungs-Kennlinie von Gusseisen mit Lamellengraphit und Stahl bei einachsigem Zug und Druck.

Grauguss eine nur geringfügig schlechtere Wärmeleitfähigkeit und lässt aufgrund der relativ kleinen Wärmespannungen, bei thermo-mechanischer Beanspruchung, eine fast vollständige Nutzung der Festigkeits- und Zähigkeitswerte der Matrix zu. Die mechanischen und thermischen Eigenschaften von GJV liegen zwischen denen von GJL und GJS [67, 131, 142]. Zur Einordnung der Graphitausprägung, anhand von Schlifffildern, existiert die Norm *DIN EN ISO 945-1* [40], die ein Vorgehen zur optischen Klassifizierung der Graphiteinschlüsse nach Form, Anordnung und Größe enthält.

Der Themenschwerpunkt dieser Arbeit liegt auf den mechanischen und thermischen Eigenschaften von Gusseisen mit Lamellengraphit, weshalb diese Gusseisengruppe nachfolgend detailliert betrachtet wird. Bezüglich der mechanischen Eigenschaften besitzt Gusseisen mit Lamellengraphit ein kompliziertes konstitutives Verhalten. Grauguss ist zug-druck-spannungsasymmetrisch, d.h., unter einachsigem Zug zeigt es ein nicht linear elastisches Verhalten und versagt quasi-spröde, ohne ausgeprägte makroskopische plastische Deformation. Unter einachsigem Druck versagt es wiederum duktil, bei wesentlich höheren Bruchdehnungen [13, 98]. Ausdruck findet die Asymmetrie außerdem in zug-druck-abhängigen E-Moduli und Fließgrenzen [13, 98]. Um die Besonderheiten der mechanischen Eigenschaften von Grauguss zu illustrieren, ist in Abb. 3.2 ein qualitatives Spannungs-Dehnungs-Diagramm [144] für einachsigen Zug und Druck gezeigt. Als Referenz ist außerdem das qualitative Materialverhalten von Stahl gegeben. Man erkennt deutlich, dass Grauguss im Zug- bzw. Druckbereich unterschiedliche E-Moduli besitzt. Im Zugbereich existiert quasi kein linear elastischer Bereich, im Druckbereich wiederum schon. Diese Eigenschaft wird *Bimodularität* genannt. Stahl dagegen hat im Zug- und Druckbereich dieselben E-Moduli. Beträgsmäßig gleichgroße Zug- und Druckkräfte verursachen bei Stahl Dehnungen, die sich nur im Vorzeichen unterscheiden. Wesentlich deutlicher tritt das unterschiedliche Verhalten von Grauguss aufgrund der unterschiedlichen Zug- und Druckfestigkeiten bzw. Zug- und Druckbruchdehnungen zutage. Die Bruchdehnung von Grauguss entspricht bei Zugbeanspruchung $\sim 1,0\%$ und ist bei Druckbelastung deutlich höher, nämlich bis zu $10,0\%$.

Um die Ursachen der Besonderheiten von Gusseisen mit Lamellengraphit zu verstehen, müssen die Graphitpartikel genauer analysiert werden. Die Graphitpartikel bestehen aus Kohlenstoffschichten, den sogenannten Basalebene oder Graphenschicht-

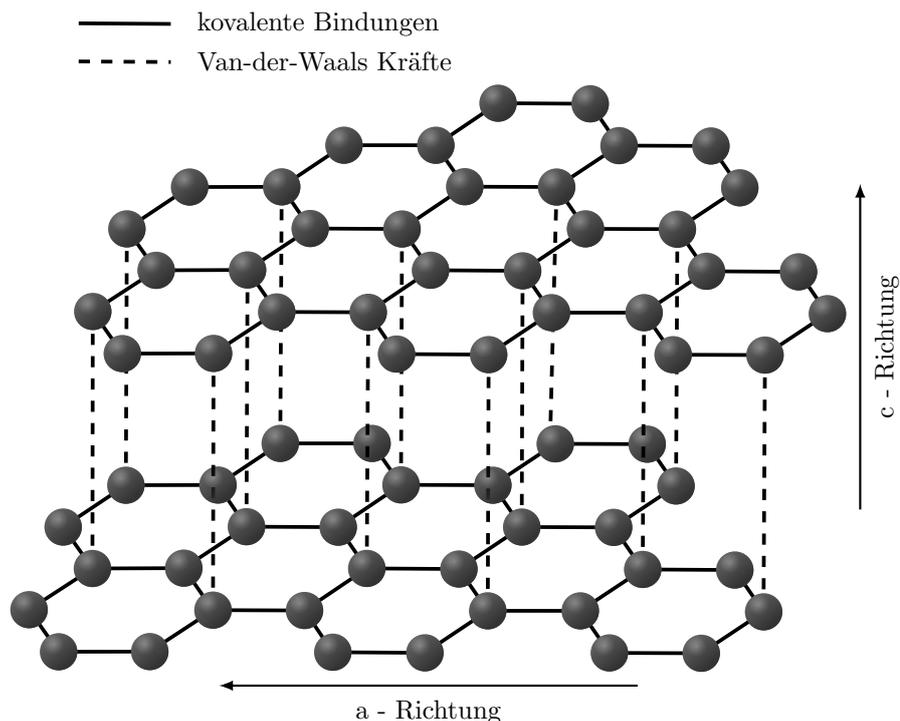


Abbildung 3.3: Atomarer Aufbau von Lamellengraphit, vereinfacht illustriert. Der Graphitausschnitt besteht aus zwei Basalebenen mit jeweils zehn Benzolringen. Die kovalente Bindungen innerhalb der Basalebenen und die Van-der-Waals Kräfte sind angedeutet.

ten, die in einer AB-Sequenz parallel übereinander angeordnet sind [30]. In Abb. 3.3 ist der Aufbau eines Mono-Graphitkristalls schematisch dargestellt. Einzelne Basalebenen bestehen aus einer Vielzahl von Benzolringen, die durch starke kovalente Bindungen in *a-Richtung des hexagonalen Kristallsystems* verbunden sind. Zwischen den verschiedenen Ebenen besteht eine bedeutend geringere molekulare Wechselwirkung, die durch Van-der-Waals-Kräfte in *c-Richtung des hexagonalen Kristallsystems* verursacht wird [70, 54, 107, 108]. Wegen der Hauptwachstumsrichtung von Graphitlamellen, entlang der Basalebenen [66], besitzen sie eine wesentlich größere räumliche Ausdehnung innerhalb der Basalebene, verglichen mit ihrer Ausdehnung orthogonal zu den Basalebenen [128, 34, 55]. Durch den großen Unterschied der Bindungsenergien entsteht eine Richtungsabhängigkeit der thermischen, elektrischen und mechanischen Graphiteigenschaften, die *transversale Isotropie* genannt wird [70, 107]. Diese spezielle Richtungsabhängigkeit ist dadurch charakterisiert, dass sich die Eigenschaften parallel zu einer bestimmten Ebene von denen orthogonal zur Ebene unterscheiden. Bei den mechanischen Eigenschaften äußert sich diese Richtungsabhängigkeit durch eine viel höhere Festigkeit, bei einer Belastung der kovalenten Bindungen, also entlang der *a-Richtung* des hexagonalen Kristallsystems, verglichen mit der Festigkeit, bei einer Belastung orthogonal zu den Basalebenen [102, 21, 16]. Entlang ihrer Längsrichtung besitzen die stark anisotropen Graphitlamellen eine deutlich höhere Wärmeleitfähigkeit als orthogonal dazu und auch eine wesentlich höhere Wärmeleitfähigkeit als die umgebenden Matrix [58, 65]. Die gute Wärmeleitfähigkeit von GJL, verglichen mit GJS, ist dem größeren Anteil an vernetzten Basalebenen, als Ausdruck der Graphitlamellen, geschuldet [57, 65, 142].

In der Literatur herrscht weitestgehend Konsens, dass das zug-druck-spannungsasymmetrische Verhalten eine Konsequenz der Graphitlamellen und der daraus resultierenden Interaktionen mit der duktilen Matrix ist [54, 144, 87, 98]. Das makroskopische Phänomen wird dabei durch zwei mögliche mesoskopische Prozesse erklärt. Zum einen als Folge von Mikrorissbildung innerhalb der Graphitpartikel und / oder durch Ablösung des Graphit-Matrix-Übergangsbereichs. Wegen der überwiegend beanspruchten Van-der-Waals-Bindungen kann eine Graphitlamelle senkrecht zur Längsrichtung nur sehr schwach auf Zug belastet werden [54, 30]. Deshalb wirken Graphitlamellen unter Zugbelastung ab einer geringen Dehnung als *Mikrorisse* und übertragen nahezu keine Kräfte [54, 31]. Im Zusammenhang mit Gusseisen versteht man das Auftrennen einer bestehenden Verbindung zwischen Matrix und Graphitpartikeln als Grenzflächenablösung. Als Konsequenz dieses Verhaltens, unabhängig davon, ob durch Mikrorissbildung oder Grenzflächenablösung verursacht, entsteht in Gusseisen bei Zugbelastung eine inhomogene Spannungsverteilung [54, 13]. Spannungsspitzen treten dabei überwiegend an den scharfen Enden von Graphitlamellen auf. Bei makroskopischen Belastungen, weit unterhalb der Streckgrenze des reinen Matrixmaterials, kommt es aufgrund der hohen Spannungskonzentrationen zu mikroplastischen Verzerrungen der Matrix [54]. Unter Druck werden die Lamellen zusammengehalten und können somit Kräfte übertragen [54, 31]. Das mechanische Verhalten ähnelt dann dem von Stahl. Dadurch ergibt sich ein homogeneres Spannungsfeld [76, 87]. Bei beiden mesoskopischen Rissentstehungsprozessen, der Mikrorissbildung und der Grenzflächenablösung, existiert unter Druckbelastung ein größeres kräfteübertragendes Volumen, woraus höhere makroskopische mechanische Eigenschaften resultieren als unter Zugbeanspruchung. Die Folge ist eine Spannungs-Dehnungsasymmetrie und eine Bimodularität. In Haenny und Zambelli [54] wird außerdem angenommen, dass aufgrund der starken Differenz der thermischen Ausdehnungen zwischen dem Graphit und der Matrix hohe Eigendehnungen während der Erstarrung entstehen und die daraus resultierenden Spannungen bereits während der Erstarrung zu Grenzflächenablösungsvorgängen führen. Diese Ansicht wird von Bonora und Ruggiero [20] unterstützt, da die Matrix einen Wärme Ausdehnungskoeffizienten hat, der um mindestens eine Größenordnung höher ist, als der des Graphits.

Ausgewählte Grundlagen der Kontinuumsmechanik

Die *Kontinuumsmechanik* beschäftigt sich mit der mathematischen Beschreibung von Verformungen und Kräften in ruhenden oder sich bewegenden festen Körpern bzw. Fluiden. Dabei wird Materie als ein zusammenhängendes und den Raum ausfüllendes *Kontinuum* betrachtet, wobei das auf der atomaren Längenskala diskrete räumliche Auftreten von physikalischen Größen durch kontinuierliche physikalische Felder angenähert wird. Auf physikalische und chemische Ursachen von Phänomenen wird nicht detailliert eingegangen, sie werden stattdessen durch phänomenologische Modelle beschrieben. Die Annahme eines Kontinuums ist dann gültig, wenn die untersuchte Längenskala im Vergleich zu den charakteristischen Längen auf der atomaren Skala groß ist.

Im Sinne der *Kontinuumsmechanik* behandelt das folgende Kapitel die für diese Dissertation relevanten Konzepte und mathematischen Ausdrücke der *Elastizitäts*- und *Plastizitätstheorie*. Es wird darauf hingewiesen, dass nur die relevanten Aspekte der Theorien eingeführt werden und nicht jedes Detail bis zur Erschöpfung erläutert ist. Als Standardwerke können bei Detailfragen zum Beispiel Silhavy [129], Mang und Hofstetter [85], de Souza Neto et al. [36] oder Bertram [14] herangezogen werden.

Die nachfolgend eingeführten Theorien bedienen sich des *euklidischen Vektorraums* mit einem *kartesischen Koordinatensystem*, womit die Indizes $i = 1, 2, 3$ gelten. Alle Erläuterungen erfolgen unter dem Vorbehalt sehr kleiner Deformationen. Es wird nicht zwischen *Euler'scher* und *Lagrange'scher* Betrachtungsweise unterschieden, weil der konvektive Anteil der *Euler'schen* Sichtweise bei sehr kleinen Deformationen vernachlässigbar ist.

Zunächst werden die geltenden *kinematischen* (4.1) und *kinetischen* (4.2) Beziehungen, danach die notwendigen *Bilanzgleichungen* (4.3) und anschließend die relevanten *konstitutiven Beziehungen* (4.4) eingeführt.

4.1 Kinematische Größen und Beziehungen

Die *Kinematik* beschreibt werkstoffunabhängig die *Bewegung* eines Körpers aus einer rein geometrischen Sichtweise. Unter *Verformung* bzw. *Verzerrung* eines Körpers versteht man die Bewegung eines Körpers ohne die Starrkörpertranslation und -rotation. *Verformungen* bzw. *Verzerrungen* beinhalten sowohl Volumen- als auch Gestaltänderungen. Ein Körper wird hierbei als eine unendliche Menge an zu jedem Zeitpunkt räumlich eindeutig unterscheidbaren *Massepunkten infinitesimaler Größe* bzw. *materiellen Punkten* verstanden. Durch Betrachtung der Bewegungen der materiellen Punkte eines

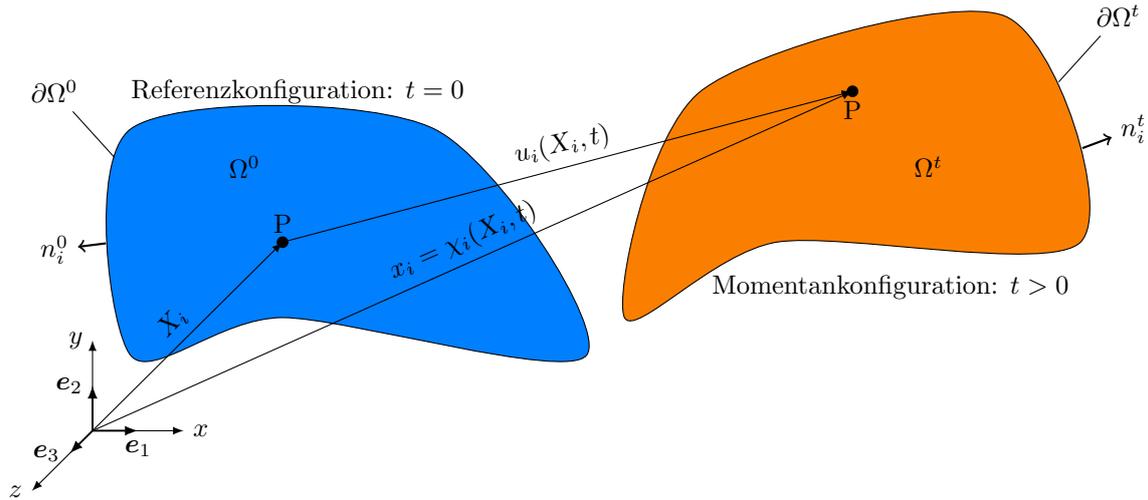


Abbildung 4.1: Deformierbarer Körper: Bewegung im euklidischen Raum.

Körpers ist somit die Kinematik des Körpers als Ganzes festgelegt. In der vorliegenden Arbeit wird angenommen, dass jeder Massepunkt drei translatorische Freiheitsgrade besitzt, sodass ein *Boltzmann-Kontinuum* vorliegt.

Im unbelasteten Zustand, zum Zeitpunkt $t = 0$, belegt ein *deformierbarer Körper* einen bestimmten Bereich des dreidimensionalen euklidischen Raumes, Ω^0 . Die Oberfläche des Körpers, $\partial\Omega^0$, verfügt dabei über den nach außen gerichteten Normalenvektor n_i^0 und umschließt das Volumen V^0 . Nachfolgend wird die Lage im unbelasteten Zustand *Referenzkonfiguration* genannt. Ändern die materiellen Punkte ihre Position, nehmen sie die *Momentankonfiguration*, Ω^t , zum Zeitpunkt t ein. Das Volumen und die Flächennormale des Körpers in der Momentankonfiguration sind durch V^t und n_i^t definiert. Alle eingeführten Zusammenhänge sind in Abb. 4.1 verdeutlicht.

Die Lage eines materiellen Punktes ist in der Referenzkonfiguration durch den Ortsvektor X_i bestimmt. Derselbe materielle Punkt wird in der Momentankonfiguration mittels des Ortsvektors x_i identifiziert. Die stetige und stetig differenzierbare vektorielle *Bewegungsfunktion* $\chi_i(X_i, t)$ beschreibt die Abbildung von X_i auf x_i , wodurch der Zusammenhang

$$x_i = \chi_i(X_i, t) \quad (4.1)$$

gilt. Mit der Bewegungsfunktion der Referenzkonfiguration, Gl. (4.1), ist die Definition der *Geschwindigkeit*, $v_i(x_i, t)$, und der *Beschleunigung*, $a_i(x_i, t)$, eines materiellen Punktes der Momentankonfiguration bzgl. der festen Referenzkonfiguration möglich:

$$v_i = \frac{dx_i}{dt}, \quad (4.2)$$

$$a_i = \frac{\partial v_i}{\partial t} + \frac{\partial v_i}{\partial x_i} \frac{\partial x_i}{\partial t}. \quad (4.3)$$

Für den verbleibenden Teil dieser Arbeit wird angenommen, dass sich *alle Körper im mechanischen Gleichgewicht* befinden und keine Beschleunigung erfahren, $a_i = 0$. Neben der zeitlichen Ableitung ist als räumliche Ableitung der *Deformationsgradient*

$$F_{ij}(X_i, t) = \frac{\partial \chi_i}{\partial X_j} \quad (4.4)$$

von Bedeutung. Unter Verwendung der Inversen der Bewegungsfunktion des Referenzzustandes, $\chi_i^{-1}(x_i, t) = \zeta_i(x_i, t)$, lässt sich ein Punkt Massepunkt der Momentankonfiguration dem entsprechenden Punkt des Anfangszustandes zuweisen,

$$X_i = \zeta_i(x_i, t). \quad (4.5)$$

Der *Verschiebungsvektor* $u_i(X_i, t)$ gibt die Differenz zwischen dem Ortsvektor X_i eines Partikels der Referenzkonfiguration und dem Ortsvektor x_i desselben Partikels in der Momentankonfiguration wider:

$$u_i(X_i, t) = \chi_i(X_i, t) - X_i = x_i - X_i. \quad (4.6)$$

4.1.1 Verschiebungs- und Verzerrungszustand

Die Änderung der infinitesimalen Abstände zweier materieller Punkte eines Körpers beschreibt seine Volumen- und Gestaltänderung, wobei entstehende Verkrümmungen der Strecke zwischen den infinitesimal entfernten materiellen Punkten vernachlässigt werden, da sie sehr klein sind. Eine Änderung des Abstandes ist somit allein durch eine Längenänderung der Strecke zwischen den Punkten festgelegt. Die Ortsvektoren zwischen zwei materiellen Punkten mit infinitesimalen Abstand sind in der Referenzkonfiguration durch das infinitesimale Linienelement dX_i und in der Momentankonfiguration, nach Einsetzen von $x_i = X_i + u_i(X_i, t)$ in $x_i + dx_i = (X_i + dX_i) + u_i(X_i + dX_i, t)$, durch $dx_i = dX_i + u_i(X_i + dX_i, t) - u_i(X_i, t)$ gegeben. In der Referenzkonfiguration ist das Quadrat des Abstandes zweier Punkte mit

$$dS^2 = dX_i dX_i \quad (4.7)$$

und in der Momentankonfiguration mit

$$ds^2 = \left(\delta_{ij} + \frac{\partial u_i}{\partial X_j} + \frac{\partial u_j}{\partial X_i} + \frac{\partial u_k}{\partial X_i} \frac{\partial u_k}{\partial X_j} \right) dX_i dX_j \quad (4.8)$$

definiert. Bei der Herleitung von Gl. (4.8) wurde die um X_i entwickelte Taylorreihe von $u_i(X_i + dX_i, t)$ mit ausschließlich linearen Reihengliedern verwendet. Ein Maß der Verformung eines deformierbaren Körpers beschreibt die Differenz

$$ds^2 - dS^2 = \left(\frac{\partial u_i}{\partial X_j} + \frac{\partial u_j}{\partial X_i} + \frac{\partial u_k}{\partial X_i} \frac{\partial u_k}{\partial X_j} \right) dX_i dX_j = 2E_{ij} dX_i dX_j. \quad (4.9)$$

Der Tensor 2. Stufe, $E_{ij}(X_i, t)$, ist ein Verzerrungstensor in der Lagrange'schen Darstellung und wird *Green'scher Verzerrungstensor* genannt. Er ist symmetrisch und wird in einem kartesischen Koordinaten wie folgt

$$E_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial X_j} + \frac{\partial u_j}{\partial X_i} + \frac{\partial u_k}{\partial X_i} \frac{\partial u_k}{\partial X_j} \right) \quad (4.10)$$

geschrieben. Der Green'sche Verzerrungstensor ist bei Anwendung von

$$\frac{\partial u_i}{\partial X_j} = \frac{\partial \chi_i - X_i}{\partial X_j} = F_{ij} - \delta_{ij} \quad (4.11)$$

ebenfalls mittels des Deformationsgradienten, Gl. (4.4), darstellbar.

4.1.1.1 Geometrisch linearisierter Verzerrungstensor

Treten nur *kleine Deformationen* auf, sind die *Verschiebungsableitungen* wesentlich kleiner als Eins, $\partial u_i / \partial X_j \ll 1$, und die quadratischen Glieder in Gl. (4.10) sind gegenüber den linearen Gliedern vernachlässigbar. Zusätzlich ist der Unterschied zwischen den Ableitungen des Verschiebungsvektors, Gl. (4.6), nach dem Ortsvektor in der Referenzkonfiguration und der Momentankonfiguration nicht signifikant und es gilt

$$\frac{\partial u_i}{\partial X_j} \approx \frac{\partial u_i}{\partial x_j}. \quad (4.12)$$

Der eingeführte Ausdruck wird in der Ingenieurspraxis oft als *Verschiebungsgradient* bezeichnet und mit $H_{ij}(x_i, t) = \partial u_i / \partial x_j$ abgekürzt. Bei kleinen Deformationen ist keine Unterscheidung zwischen den Ortsvektoren in der Referenz- und Momentankonfiguration notwendig, weshalb sie auch nicht durchgeführt wird. Durch Einsetzen von Gl. (4.12) in Gl. (4.10) und der Tatsache, dass die quadratischen Glieder in Gl. (4.10) vernachlässigbar sind, folgt:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) = \frac{1}{2} (H_{ij} + H_{ji}). \quad (4.13)$$

Bei $\varepsilon_{ij}(x_i, t)$ handelt es sich um die Komponenten des symmetrischen, *linearisierten Verzerrungstensors*, $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}$. Mit der Voraussetzung, dass die Verschiebungsgradienten bei einer *geometrischen Linearisierung* klein gegen Eins sind, gilt für die Frobenius-Norm des linearisierten Verzerrungstensors unmittelbar $\sqrt{\varepsilon_{ij}\varepsilon_{ij}} \ll 1$. Man bezeichnet die Komponenten ε_{ii} als *Normalverzerrungen* und die restlichen Komponenten als *Schubverzerrungen*. Mittels der Normalverzerrungen ist die Volumenänderung durch

$$\varepsilon_{\text{vol}} = \frac{\varepsilon_{ii}}{3} = \frac{\text{Spur}(\varepsilon_{ij})}{3} \quad (4.14)$$

gegeben.

4.1.2 Kinematische Kompatibilitätsbedingung - Lemma von Hadamard

Betrachtet man die Bewegung eines Körpers, der ein unstetige Fläche enthält, besagt das *Lemma von Hadamard*, dass sich die Grenzwerte des Deformationsgradienten auf

der unstetigen Fläche einer kontinuierlichen kohärenten Bewegung um einen Rang 1-Tensor unterscheiden [129]

$$[[F_{ij}]] = \mathbf{a}_i n_j. \quad (4.15)$$

Der Rang 1-Tensor, \mathbf{a}_i , repräsentiert die Amplitude des Sprunges des Deformationsgradienten in Richtung des Oberflächennormalenvektors n_i .

4.2 Kinetische Größen

Die kinetischen Größen beschreiben die Ursachen für die Deformation eines Körpers.

Da die vorliegende Arbeit strikt von kleinen Deformationen ausgeht, wird die Darstellung von kinetischen Größen in der Referenzkonfiguration, die sog. *Piola-Kirchhoff-Spannungen*, nicht eingeführt.

4.2.1 Cauchy-Spannungen

Schneidet man einen Körper, auf den *äußere Kräfte* wirken, gedanklich auseinander, dann wirken auf die beiden Schnittflächen, aufgrund der Stetigkeit der *inneren Kräfte* (*Lemma von Cauchy*), gleichgroße, aber entgegengesetzte, *innere Oberflächenkräfte*. Der Quotient aus dem *Kraftvektor*, df_i , der auf eine infinitesimale Schnittfläche dA wirkt, ergibt den *Spannungsvektor* $t_i = df_i/dA$ am betreffenden Schnittpunkt. Der Spannungsvektor in einem Punkt variiert mit der Orientierung der Schnittfläche, wobei jede mögliche Orientierung der Schnittfläche durch den dazugehörigen *Normalenvektor* n_i gegeben ist. Mittels des Normalenvektors kann der Spannungsvektor in den Teil, der normal zum infinitesimalen Flächenelement dA wirkt, die sog. *Normalspannung* $\sigma = t_i n_i$, und den Teil des Kraftvektors, der parallel zu dA wirkt und *Schubspannung* τ genannt wird, zerlegt werden. Um den Spannungszustand in einem materiellen Punkt eindeutig zu definieren, wird der *Cauchy'sche Spannungstensor* σ_{ij} eingeführt. Er ist ein symmetrischer Tensor 2. Stufe, $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$, und beschreibt die Gesamtheit aller möglichen Spannungsvektoren in einem Punkt des Körpers durch das *Fundamentaltheorem von Cauchy*, in Abhängigkeit von allen möglichen Normalenvektoren:

$$t_i = \sigma_{ij} n_j. \quad (4.16)$$

Für den Cauchy'schen Spannungstensor wird der in der Momentankonfiguration befindliche Körper durch infinitesimale quaderförmige Volumenelemente, dV , deren Kanten parallel zu einem kartesischen Koordinatensystem verlaufen, abstrahiert. Auf die Seitenflächen eines jeden Volumenelements wirken eine Normal- und eine Schubspannung. Die Schubspannungen werden im Kontext des Cauchy'schen Spannungstensors in die zwei Komponenten entlang der Koordinatenachsen zerlegt, die parallel zu den betreffenden Kanten der betrachteten Seitenfläche verlaufen. Die Diagonalkomponenten σ_{11} , σ_{22} und σ_{33} des Cauchy'schen Spannungstensors sind die Normalspannungen auf den drei zueinander orthogonalen Seitenflächen eines solchen Volumenelements und die Nebendiagonalkomponenten sind die entsprechenden Schubspannungen die aus den Schubspannungen, τ , der Seitenflächen resultieren.

Der Cauchy'sche Spannungstensor kann wie folgt in einen *volumenändernden* und einen *gestaltändernden* Teil zerlegt werden:

$$\sigma_{ij} = \sigma_m \delta_{ij} + s_{ij}. \quad (4.17)$$

Hierbei bezeichnet $\sigma_m = 1/3 \text{Spur}(\sigma_{ij})$ die *mittlere Normalspannung* und s_{ij} bezeichnet den *deviatorischen Spannungstensor*, der nur Gestaltänderungen beinhaltet. Der erste Term, $\sigma_m \delta_{ij}$, repräsentiert einen *schubspannungsfreien Spannungszustand*. Für $s_{ij} = 0$ spricht man von einem *hydrostatischen Spannungszustand*. Bei festen Körpern ist die eingeführte Zerlegung des Spannungstensors vor allem in der Plastizitätstheorie von Bedeutung, da der hydrostatische Anteil von σ_{ij} praktisch keinen Einfluss auf das Eintreten von plastischen Verzerrungen hat, sondern nur eine rein elastische Volumenänderung verursacht.

4.3 Bilanzgleichungen

Bei Bilanzgleichungen handelt es sich um universelle, allgemeingültige Prinzipien [145], die die zuvor eingeführten kinematischen und kinetischen Größen in Beziehung bringen. Für die Kontinuumsmechanik sind die *Massenbilanz* (Abschnitt 4.3.1), die *Impuls-* und *Drehimpulsbilanz*, (Abschnitt 4.3.2 und 4.3.3) sowie die *Energie-* und *Entropiebilanz* (Abschnitt 4.3.5 und 4.3.4) von Bedeutung.

Wie schon zuvor, wird ein beliebiger Körper, Ω , zum Zeitpunkt t betrachtet. Eine *extensive physikalische Größe* des Körpers, $\Psi(\Omega, t)$, ist bei einem in Zeit und Raum glatten *Dichtefeld der physikalischen Größe*, $\psi(x_i, t)$, mittels

$$\Psi = \int_{\Omega} \psi dV \quad (4.18)$$

gegeben. Für die nachfolgenden Erläuterungen ist die spezifische Größe ψ ein Skalar; sie steht jedoch sinngemäß auch für beliebige tensorielle Größen. Eine zeitliche Änderung der extensiven Größe, $d/dt\Psi$, wird durch äußere Einflüsse, meist in Form eines *Quellbeitrags* innerhalb des Körpers, $b(x_i, t)$, und einen *Flussanteil*, $p_i(x_i, t)$, über dessen Oberfläche, $\partial\Omega$, verursacht. Da die extensive Größe unmittelbar aus dem Dichtefeld der physikalischen Größe resultiert, müssen die äußeren Einflüsse mit der Änderung des durch ψ definierten Zustandes des Körpers im Gleichgewicht sein. Erfasst wird die Änderung des Dichtefeldes durch das *Reynold'sche Transporttheorem*, wobei $\partial\psi/\partial t$ die *lokale zeitliche Änderung der spezifischen physikalischen Größe* ist und ψv_i den *Fluss der spezifischen Größe* über den Rand des Körpers, $\partial\Omega$, in nach außen zeigende Normalenrichtung, $n_i(x_i, t)$, beschreibt, was in Abb. 4.1 dargestellt ist. Als *allgemeine Bilanzgleichung* ergibt sich damit:

$$\frac{d}{dt}\Psi = \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \psi dV = \int_{\Omega} \frac{\partial\psi}{\partial t} dV + \int_{\partial\Omega} \psi v_i n_i dA = \underbrace{\int_{\Omega} b dV - \int_{\partial\Omega} p_i n_i dA}_{\text{äußere Einflüsse}}. \quad (4.19)$$

Mit Hilfe des *Satzes von Gauß*,

$$\int_{\partial\Omega} \psi v_i n_i dA = \int_{\Omega} \psi \frac{\partial v_i}{\partial x_i} dV, \quad (4.20)$$

kann das Transporttheorem vereinfacht notiert werden:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \psi dV = \int_{\Omega} \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial v_i}{\partial x_i} dV. \quad (4.21)$$

Mit der Forderung der Beliebigkeit des Körpers führt dies zur *lokalen Darstellung der Bilanzgleichung*:

$$\frac{d}{dt} \psi = \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial v_i}{\partial x_i}. \quad (4.22)$$

Ist das Feld einer physikalischen Größe innerhalb eines Körpers lokal unstetig, existieren, insofern Punkte vernachlässigt werden, in denen sich mehrere Diskontinuitätsflächen in einem Punkt treffen, *unstetige Flächen*, $S(t)$, die den Sprung einer Feldgröße,

$$[[\psi]] = \psi^+ - \psi^-, \quad (4.23)$$

mit $\psi^+(x_i, t)$ und $\psi^-(x_i, t)$ als beidseitige Grenzwerte der Größe auf der Diskontinuitätsfläche, repräsentieren. Nun wird ein Körper, Ω , betrachtet, der eine sich bewegendes Diskontinuitätsfläche, S , enthält, die den Körper in zwei Teilkörper, Ω^+ und Ω^- , unterteilt und die Oberfläche $\partial\Omega = \partial\Omega^+ \cup \partial\Omega^- \cup \partial S$ besitzt. Des Weiteren gilt der Zusammenhang $\Omega^+ \cup \Omega^- \cup S = \Omega$. Die Berandung der unstetigen Fläche wird durch ∂S ausgedrückt. Der Normalenvektor der Diskontinuitätsfläche ist durch $n_i^S(x_i, t)$ und die Geschwindigkeit der Diskontinuitätsfläche ist durch v_i^S gegeben. Ausgehend von Gl. (4.18) ergibt sich für diesen Fall eine extensive Größe des Körpers, durch

$$\Psi = \int_{\Omega^+ \cup \Omega^-} \psi dV + \underbrace{\int_S \psi^S dA}_{=0 \text{ für } \rho^S=0}, \quad (4.24)$$

mit $\psi^S(x_i, t)$ als *flächenspezifische Dichte der physikalischen Größen*. Als Vereinfachung werden Flüsse über die Berandung der Diskontinuitätsfläche, ∂S , vernachlässigt. Um die Komplexität der Bilanzierungen auf einem für diese Arbeit ausreichend hohen Level zu halten, wird die unstetige Fläche nachfolgend als sog. *Kontaktunstetigkeit* [145] betrachtet, dies entspricht einer materiellen Fläche, die keine Masse besitzt. Da für die flächenspezifische Massendichte $\rho^S(x_i, t) = 0$ gilt, folgt wiederum $\psi^S = 0$, weil die weiteren relevanten Dichten (Impuls-, Energie- und Entropiedichte) linear von der Massendichte abhängen, siehe hierzu die folgenden Abschnitte, in denen stets $\psi^S = 0$ vorausgesetzt ist. Materielle Flächen sind unendlich dünn, was impliziert, dass die Einflussgeschwindigkeit der Fläche ihrer Ausflussgeschwindigkeit entspricht, $v_i^+ = v_i^- = v_i^S$. Verfährt man mit den definierten Einschränkungen analog zur Herleitung der Bilanzgleichung (4.19), führt dies für den Beitrag der unstetigen Oberfläche in Gl. (4.24) zu

$$\underbrace{\frac{d}{dt} \int_S \psi^S dA}_{=0 \text{ für } \rho^S=0} = \int_S \underbrace{\frac{\partial \psi^S}{\partial t}}_{\text{Quellbeitrag}} dA + \int_S \underbrace{[[\psi v_i]] n_i^S}_{\text{Flussbeitrag}} dA. \quad (4.25)$$

Mit der Beliebigkeit des Integrationsgebietes ist die *lokale Darstellung der Bilanzgleichung auf einer Kontaktunstetigkeit* gegeben durch

$$0 = \frac{\partial \psi^S}{\partial t} + \llbracket \psi v_i \rrbracket n_i^S. \quad (4.26)$$

Die lokale Bilanzgleichung der Kontaktunstetigkeit sagt lapidar ausgedrückt aus, dass der Quellbeitrag mit dem Sprung der Feldgröße in Normalenrichtung der Diskontinuitätsfläche im Gleichgewicht ist. Weiterführend wird *unstetige Fläche als Synonym für Kontaktunstetigkeit* verwendet. Bei tiefgreifenderem Interesse an dieser Thematik empfehle ich Willner [145].

4.3.1 Massenbilanz

Jedem Körper kann eine *Masse*,

$$\mathcal{M}(\Omega, t) = \int_{\Omega^+ \cup \Omega^-} \rho dV, \quad (4.27)$$

unter Verwendung der *Massendichte*, $\rho(x_i, t)$, zugewiesen werden. Die Masse eines materiellen Körpers ist unabhängig von dessen Deformation,

$$\mathcal{M}(\Omega^0) = \mathcal{M}(\Omega^t), \quad (4.28)$$

und sie unterliegt der *Massenerhaltung*,

$$\frac{d}{dt} \mathcal{M} = 0. \quad (4.29)$$

Setzt man dies in die lokalen Bilanzgleichungen, Gl. (4.22) und Gl. (4.26), ein, ergibt dies für das Volumen eines Körpers

$$0 = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \frac{\partial v_i}{\partial x_i} \quad (4.30)$$

und für eine unstetige Fläche

$$0 = \llbracket \rho v_i \rrbracket n_i^S, \quad (4.31)$$

da aus $\rho^S(x_i, t) = 0$, $d\rho^S/dt = 0$ folgt.

4.3.2 Impulsbilanz

Der translatorische Bewegungszustand eines Körpers wird durch dessen *Impuls*,

$$P_i(\Omega, t) = \int_{\Omega^+ \cup \Omega^-} \rho v_i dV, \quad (4.32)$$

beschrieben, wobei sich die extensive Größe des Körpers aus dem Integral seiner Geschwindigkeit, v_i , gewichtet mit dessen Massendichte, ρ , ergibt. Die Grundlage der

Impulsbilanz ist das *zweite Newton'sche Axiom*. Es besagt, dass die zeitliche Änderung des Impulses der Summe der äußeren Kräfte, $F_i(t)$, entspricht:

$$\frac{d}{dt}P_i = F_i. \quad (4.33)$$

Wird nun angenommen, dass die äußeren Kräfte durch *Volumenbeiträge*, $b_i(x_i, t)$, wie z.B. der Gravitation, und durch auf die *Oberfläche wirkende Spannungen*, $p_i(x_i, t) = \sigma_{ij}$, verursacht werden, folgt für den Sonderfall der Statik, also im Gleichgewichtszustand, $a_i = 0$, die lokale Darstellung,

$$\rho \underbrace{\frac{dv_i}{dt}}_{=a_i=0} = \rho b_i + \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j}, \quad (4.34)$$

für das Volumen und Gl. (4.26) ergibt auf einer Kontaktunstetigkeit

$$0 = [[\sigma_{ij}]]n_j^S, \quad (4.35)$$

mit $\sigma_{ij}n_j$ als Spannungsvektor, nach dem Fundamentaltheorem von Cauchy (4.16). Ist der durch Oberflächenspannungen verursachte Beitrag wesentlich höher als die Volumenbeiträge, wie beispielsweise bei Zugversuchen, können die Volumenbeiträge vernachlässigt werden und es gilt $b_i = 0$ in Gl. (4.34).

4.3.3 Drehimpulsbilanz

Zur besseren Darstellung wird in diesem Abschnitt stellenweise auf die Tensornotation gewechselt. Der rotatorische Bewegungszustand eines Körpers um einen raumfesten Punkt O ist durch dessen *Drehimpuls*,

$$L_i^O(\Omega, t) = \int_{\Omega} \epsilon_{ijk} r_j \rho v_k dV, \quad (4.36)$$

gegeben. Der Vektor $r_i(x_i, t)$ repräsentiert den Ortsvektor zwischen O und einem materiellen Punkt, x_i . Das Kreuzprodukt zwischen dem Ortsvektor, r_j , und dem Impulsbeitrag, ρv_i , ist in Indexnotation durch den *Levi-Civita-Tensor*, ϵ_{ijk} , definiert und lautet in Tensornotation $\epsilon_{ijk} r_j \rho v_k = (\mathbf{r} \times \rho \mathbf{v})_i$. Bei der eingeführten Drehimpulsdefinition wird der Spin eines materiellen Teilchens nicht berücksichtigt. Nach der *Euler'schen Drehimpulsbilanz* ist die zeitliche Änderung des Drehimpulses, bzgl. eines raumfesten Punktes, gleich dem äußeren Momenten, bzgl. desselben Punktes, $M_i^O(t)$,

$$\frac{d}{dt}L_i^O = M_i^O. \quad (4.37)$$

Daraus folgt bei Berücksichtigung von Volumen- und Flächenkräften, analog zum vorherigen Abschnitt,

$$\frac{d}{dt}L_i^O = \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \epsilon_{ijk} r_j \rho v_k dV = \int_{\Omega} \epsilon_{ijk} r_j \rho b_k dV + \int_{\partial\Omega} \epsilon_{ijk} r_j \sigma_{kl} n_l dA. \quad (4.38)$$

Wendet man den Satz von Gauß auf das Oberflächenintegral an, ergibt sich folgende Reduzierung:

$$\int_{\partial\Omega} \epsilon_{ijk} r_j \sigma_{kl} n_l dA = \int_{\partial\Omega} \mathbf{r} \times \boldsymbol{\sigma} n dA = \int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{r} \times \boldsymbol{\sigma} dV = \int_{\Omega} \frac{\partial \epsilon_{ijk} r_j \sigma_{kl}}{\partial x_l} dV. \quad (4.39)$$

Nach Willner [145] lässt sich der Integrand nochmals vereinfachen:

$$\frac{\partial \epsilon_{ijk} r_j \sigma_{kl}}{\partial x_l} = \nabla \cdot (\mathbf{r} \times \boldsymbol{\sigma}) = \mathbf{r} \times \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{I} \times \boldsymbol{\sigma}, \quad (4.40)$$

wobei $\mathbf{I} = \delta_{ij}$ der Einheitstensor ist. Bei Beliebigkeit des Integrationsgebietes folgt, für den Fall der Statik und mit dem Zusammenhang

$$\epsilon_{ijk} r_j \rho \underbrace{\frac{dv_k}{dt}}_{=a_i=0} = 0, \quad (4.41)$$

für die linke Seite der Gl. (4.36), schließlich die lokale Form der Drehimpulsbilanz:

$$0 = \mathbf{r} \times \underbrace{(\rho \mathbf{b} + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma})}_{=0, \text{ bei Einhaltung der Impulsbilanz}} + \mathbf{I} \times \boldsymbol{\sigma}. \quad (4.42)$$

Wird des Weiteren streng von der Einhaltung der Impulsbilanz (4.34) ausgegangen, gilt:

$$\mathbf{I} \times \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0} \rightarrow \sigma_{ij} = \sigma_{ji}, \quad (4.43)$$

was zur *Symmetrie des Cauchy'schen Spannungstensors* führt.

4.3.4 Energiebilanz

Neben den mechanischen Bilanzgrößen gilt es noch, die *Energie* als Zustandsgröße zu definieren:

$$E(\Omega, t) = \int_{\Omega^+ \cup \Omega^-} \frac{1}{2} \rho v_i v_i + \rho u dV. \quad (4.44)$$

Die Energie eines Körpers besteht aus der Summe der *kinetischen Energie*, $E_{kin}(\Omega, t) = \int 1/2 \rho v_i v_i dV$, und der *inneren Energie*, $U(\Omega, t)$, die sich aus dem Integral über die *spezifische innere Energie*, $u(x_i, t)$, ergibt. Mittels der inneren Energie werden alle Energieformen, abgesehen von der kinetischen Energie, erfasst. Aus dem *ersten Hauptsatz der Thermodynamik* folgt die Energiebilanz. Der erste Hauptsatz sagt aus, dass die zeitliche Änderung der Energie der Leistung der verallgemeinerten Kräfte entspricht. Bei der vorliegenden Arbeit fließen die *mechanische Leistung* P_{mech} und die *thermische Leistung* P_{therm} als verallgemeinerte Kräfte mit ein, weshalb Folgendes gilt:

$$\frac{d}{dt} E = \frac{d}{dt} E_{kin} + \frac{d}{dt} U = P_{mech} + P_{therm}. \quad (4.45)$$

Wie zuvor werden bei der mechanischen Leistung die Volumenkräftdichte b_i und die Spannungen auf der Oberfläche, $p_i = \sigma_{ij}$, berücksichtigt. Die thermische Leistung ist die

Summe aus einer *spezifischen Wärmequelle*, $b^u(x_i, t)$, und einem *Wärmestrom*, $q_i(x_i, t)$. Schreibt man nun die lokale Form der Energiebilanzen, unter Verwendung von Gl. (4.22) und Gl. (4.26), für den Gleichgewichtsfall auf, führt dies im Volumen eines Körpers zu

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} \rho v_i v_i + \rho u \right) = \rho (b_i v_i + b^u) + \frac{\partial \sigma_{ij} v_i}{\partial x_j} - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} \quad (4.46)$$

und auf Kontaktunstetigkeiten zu

$$0 = \llbracket \sigma_{ij} v_i \rrbracket n_j^S - \llbracket q_i \rrbracket n_j^S. \quad (4.47)$$

4.3.5 Entropiebilanz

Zuletzt führt der *zweite Hauptsatz der Thermodynamik* auf die extensive Zustandsgröße *Entropie*,

$$S(\Omega, t) = \int_{\Omega^+ \cup \Omega^-} \rho s dV, \quad (4.48)$$

mit $s(x_i, t)$ als *spezifische Entropie*. Der zweite Hauptsatz besagt, dass die zeitliche Änderung der Entropie, dS/dt , durch eine *Entropieerzeugung*, S^b , und eine *Entropieströmung*, S^p , erfolgt:

$$\frac{d}{dt} S = S^b + S^p. \quad (4.49)$$

Die Entropieerzeugung ist stets nicht negativ, $S^b \geq 0$, wobei $S^b = 0$ einen *reversiblen Prozess* kennzeichnet. In der Kontinuumsmechanik wird die Entropiebilanz oft in Form der äquivalenten Ungleichung,

$$\frac{d}{dt} S \geq S^p. \quad (4.50)$$

verwendet. Zur Interpretation der Entropie wird angenommen, dass der Entropiestrom mit der *thermodynamischen Temperatur*, $\vartheta(x_i, t)$, als Proportionalitätsfaktor proportional zur thermischen Leistung, P_{therm} , ist. Unter Ausnutzung der Massenbilanz und der Bedingung, dass auch die spezifische Entropieerzeugung nicht negativ sein kann, resultiert die lokale Entropiebilanz in der *Clausius-Duhem-Ungleichung*:

$$\rho \frac{ds}{dt} \geq \rho \frac{b^u}{\vartheta} - \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{q_i}{\vartheta}. \quad (4.51)$$

Durch Anwendung der Ungleichung lassen sich Stabilitätskriterien für Materialgesetze festlegen. Für Kontaktunstetigkeiten folgt:

$$0 \geq -\llbracket \frac{q_i}{\vartheta} \rrbracket n_i^S. \quad (4.52)$$

4.4 Konstitutive Beziehungen

Die kinematischen Beziehungen (4.1), kinetischen Beziehungen (4.1) und Bilanzgleichungen (4.3) wurden materialunabhängig eingeführt, d.h. sie gelten gleichermaßen für

Festkörper wie für Fluide. Um alle unbekanntten Feldgrößen eindeutig zu definieren, muss zusätzlich noch das materialspezifische Verhalten berücksichtigt werden, was in Form von *konstitutiven Beziehungen* geschieht.

4.4.1 Lineare Elastizitätstheorie - Hyperelastizität

Als Elastizität versteht man die Eigenschaft eines Körpers, wieder in seine ursprüngliche Form zurückzukehren, wenn äußere Kräfte entfernt werden. Die Folge daraus ist, dass die Verzerrung eines Körpers - die kinematische Größe - von dem durch von äußeren Kräften verursachten Spannungszustand - der kinetischen Größe - abhängt. Beschränkt man sich auf ein isothermes Problem, kann mit der Entropiebilanz gezeigt werden [145], dass ein thermodynamisches Potential, genannt *spezifische Formänderungsenergie*,

$$f_e(x_i, t) = \frac{1}{2} \varepsilon_{ij} C_{ijkl} \varepsilon_{kl}, \quad (4.53)$$

existiert, das in einer linearen Beziehung zwischen Spannung und Verzerrung, genannt *allgemeine Hooke'sche Gesetz* [130], resultiert:

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl} = \mathbf{C}[\boldsymbol{\varepsilon}] = \frac{\partial f_e}{\partial \varepsilon_{ij}}. \quad (4.54)$$

Die Spannungen besitzen keine Zeitabhängigkeit oder eine Abhängigkeit von der Verzerrungsgeschichte. Materialien mit einem solchen Verhalten sind *hyperelastisch*. Bei tiefgreifenderem Interesse an der Herleitung solcher Materialgesetze empfehle ich Willner [145]. Der *Materialsteifigkeitstensor* C_{ijkl} ist ein Tensor 4. Stufe. Durch die Symmetrieeigenschaften von $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$ und $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}$ und der Identität

$$C_{ijkl} = \frac{\partial^2 f_e}{\partial \varepsilon_{ij} \partial \varepsilon_{kl}}, \quad (4.55)$$

wobei die Vertauschbarkeit der Reihenfolge der partiellen Ableitungen gilt, reduzieren sich die Einträge des Materialsteifigkeitstensors auf 21 unabhängige Komponenten. Als Konsequenz der Symmetrien lässt sich das Hooke'sche Gesetz in eine reduzierte Darstellung, die *Voigt'sche Notation*,

$$\begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{13} \\ \sigma_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{1111} & C_{1122} & C_{1133} & C_{1123} & C_{1113} & C_{1112} \\ & C_{2222} & C_{2233} & C_{2223} & C_{2213} & C_{2212} \\ & & C_{3333} & C_{3323} & C_{3313} & C_{3312} \\ & \text{sym.} & & C_{2323} & C_{2313} & C_{2312} \\ & & & & C_{1313} & C_{1312} \\ & & & & & C_{1212} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ 2\varepsilon_{23} \\ 2\varepsilon_{13} \\ 2\varepsilon_{12} \end{pmatrix} \quad (4.56)$$

überführen [56]. Eine Drehung des Materialsteifigkeitstensors erfolgt entsprechend den Transformationsregeln für Komponenten eines Tensors 4. Stufe:

$$C'_{rstu} = n_{ri} n_{sj} n_{tk} n_{ul} C_{ijkl}. \quad (4.57)$$

Bei einer Invarianz des Materialsteifigkeitstensors gegenüber Drehungen spricht man von einem *isotropen bzw. richtungsunabhängigen Materialverhalten* und die unabhän-

gigen Komponenten des Materialsteifigkeitstensors reduzieren sich auf zwei. Das Hooke'sche Gesetz für isotropes Materialverhalten kann beispielsweise mit dem *Elastizitätsmodul*, E , und der *Querkontraktionszahl/ Poisson'schen Zahl*, ν , folgendermaßen ausgedrückt werden:

$$\sigma_{ij} = \frac{E}{1+\nu} \left(\varepsilon_{ij} + \frac{\nu}{1-2\nu} \varepsilon_{kk} \delta_{ij} \right). \quad (4.58)$$

Alternativ können als unabhängige Materialparameter auch die erste *Lamé Konstante* λ_{lame} und die zweite Lamé Konstante (*Schubmodul*) μ_{lame} anstelle des Elastizitätsmoduls und der Querkontraktionszahl verwendet werden:

$$\sigma_{ij} = 2\mu_{\text{lame}}\varepsilon_{ij} + \lambda_{\text{lame}}\text{Spur}(\varepsilon_{ij})\delta_{ij}. \quad (4.59)$$

Besitzt ein Werkstoff eine Invarianz des Materialsteifigkeitstensors bei der Rotationen um eine bestimmte Achse, wird dieses Material *transversal isotrop* genannt und das Hooke'sche Gesetz hat in der Voigt'schen Notation folgende Form:

$$\begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{13} \\ \sigma_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{1111} & C_{1122} & C_{1133} & 0 & 0 & 0 \\ & C_{1111} & C_{1133} & 0 & 0 & 0 \\ & & C_{3333} & 0 & 0 & 0 \\ & \text{sym.} & & C_{2323} & 0 & 0 \\ & & & & C_{2323} & 0 \\ & & & & & \frac{C_{1111}-C_{1122}}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ 2\varepsilon_{23} \\ 2\varepsilon_{13} \\ 2\varepsilon_{12} \end{pmatrix}, \quad (4.60)$$

mit fünf unabhängigen Komponenten der Materialsteifigkeit.

Es besteht ein umkehrbar eindeutiger Zusammenhang zwischen Spannungen und Verzerrungen. Der umgekehrte Zusammenhang ist durch den Materialnachgiebigkeitstensor $S_{ijkl} = C_{ijkl}^{-1}$ als

$$\varepsilon_{ij} = S_{ijkl}\sigma_{kl} \quad (4.61)$$

definiert. Um die Gültigkeit der linearen Elastizitätstheorie zu gewährleisten, gilt neben den Voraussetzungen der Linearität der konstitutiven Gleichungen zusätzlich die Voraussetzung der Kleinheit der Verschiebungsableitungen gegen Eins.

4.4.2 Plastizitätstheorie - Elastoplastisches Materialverhalten

Der eindeutige Zusammenhang zwischen Spannungen und Verzerrungen, im Sinne der linearen Elastizitätstheorie, der durch das verallgemeinerte Hooke'sche Gesetz (4.54) gegeben ist, gilt, insbesondere bei Metallen, nur bis zu einem bestimmten kritischen Spannungszustand eines materiellen Punktes. Nachdem dieser kritische Spannungszustand innerhalb eines festen Körpers überschritten wurde, kehrt dieser nach einer Entlastung nicht mehr in seine Ausgangsform zurück. Geschieht dies bei zyklischer Belastung ausnahmsweise doch, werden dadurch dauerhafte Änderungen im Werkstoffgefüge verursacht. Dieser irreversible Prozess wird auf der atomaren Skala in metallischen Werkstoffen durch das Gleiten von Gitterebenen verursacht und *plastische Verformung* genannt. Im Rahmen der Plastizitätstheorie werden solche Prozesse auf phänomenologischer Ebene beschrieben. Im folgenden Abschnitt wird ein für Metalle typisches

J_2 -Plastizitätsmodell eingeführt. Bei der Betrachtung beschränke ich mich auf kleine Deformationen und *Ratenunabhängigkeit*.

Bei kleinen Verformungen ist die Haupthypothese der Plastizitätstheorie, dass es zulässig ist, den *totalen Verzerrungstensor*, ε_{ij} , additiv in einen *elastischen Anteil*, $\varepsilon_{e,ij}(x_i, t)$, und einen *plastischen Anteil*, $\varepsilon_{p,ij}(x_i, t)$, zu zerlegen:

$$\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{e,ij} + \varepsilon_{p,ij}. \quad (4.62)$$

Die kursiven tiefgestellten Indizes stellen die Laufvariablen dar und die Indizes e und p stehen für elastisch und plastisch. Betrachtet man Materialien mit linearem Verhalten, dann hängt die innere Spannung nur vom elastischen Anteil, $\varepsilon_{e,ij}$, der Verzerrung ab und aus dem allgemeinen Hooke'schen Gesetz (4.54) folgt:

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \underbrace{(\varepsilon_{kl} - \varepsilon_{p,ij})}_{=\varepsilon_{e,ij}}. \quad (4.63)$$

Zur Abbildung der grundlegenden phänomenologischen Eigenschaften von plastischen Verformungen sind eine Fließfunktion, eine Fließregel und ein Verfestigungsgesetz notwendig. Durch die *Fließfunktion*,

$$f_f(\sigma_{ij}, \varepsilon_{akk}) = \sigma_v - \sigma_y \leq 0 \quad (4.64)$$

ist festgelegt, ob ein Werkstoff bei einem bestimmten Spannungszustand nur elastische oder auch plastische Verzerrungen erfährt. Lapidar ausgedrückt vergleicht die Fließfunktion eine *skalare Vergleichsspannung*, $\sigma_v(\sigma_{ij})$, des momentanen Spannungszustandes, σ_{ij} , mit einer *kritischen Spannung*, $\sigma_y(\varepsilon_{akk})$, der so genannten *Fließspannung*. Die Vergleichs- und Fließspannung unterscheiden sich je nach modelliertem Materialverhalten. Im Allgemeinen ist die Fließfunktion anisotrop und zug-druckabhängig. Für $f_f < 0$ ist die Änderung der Verzerrung eines materiellen Punktes rein elastisch und für $f_f = 0$ elastoplastisch, oder es findet ein neutraler Prozess statt. Spannungszustände für $f_f > 0$ sind, da eine Ratenunabhängigkeit angenommen wird, nicht möglich. Der Zustand $f_f = 0$ ist die *Fließbedingung*.

Bei der vorliegenden Arbeit wird als Vergleichsspannung die von-Mises-Vergleichsspannung, $\sigma_v = \sigma_{v.M.}$, genutzt. Die *von-Mises-Vergleichsspannung* ist durch die zweite Invariante, $J_2(s_{ij}) = 1/2 s_{ij} s_{ij}$, des deviatorischen Anteils des Spannungstensors, vgl. Gl. (4.17), wie folgt definiert:

$$\sigma_{v.M.}(s_{ij}) = \sqrt{3J_2}. \quad (4.65)$$

Da der deviatorische Anteil des Spannungstensors nur Schubspannungen beinhaltet, bewirkt die Verwendung der von-Mises-Vergleichsspannung, dass plastische Verzerrungen nur infolge einer kritischen Gestaltänderung hervorgerufen werden und somit plastische Verzerrungen volumenerhaltend sind. Materialien können daher nicht plastisch komprimiert werden, ein hydrostatischer Spannungszustand führt also nie zu plastischen Verzerrungen.

Die Fließspannung kann eine Werkstoffverfestigung erfahren. Unter einer *Werkstoffverfestigung* versteht man die Erhöhung der Fließspannung in Abhängigkeit von einer inneren Variablen. In der Regel wird hierfür die akkumulierte plastische Verzerrung,

$\varepsilon_{\text{akk}}(x_i, t)$, herangezogen. Bei Anwendung der von-Mises-Vergleichsspannung ist die *akkumulierte plastische Verzerrung* durch

$$\varepsilon_{\text{akk}} = \sqrt{\frac{2}{3}} \int_0^t \sqrt{\varepsilon_{\text{p},ij} \dot{\varepsilon}_{\text{p},ij}} dt \quad (4.66)$$

gegeben. Hierbei beschreibt $\varepsilon_{\text{p},ij}$ die *zeitliche Änderung der plastischen Verzerrungen*. Bei metallischen Werkstoffen kann die akkumulierte plastische Verzerrung als ein Maß der Versetzungsdichte verstanden werden.

Nachfolgend werden die in dieser Arbeit verwendeten Verfestigungsgesetze eingeführt. Es werden ausschließlich isotrope und zug-druckunabhängige Verfestigungen betrachtet, d.h. die Fließspannung vergrößert sich in gleichem Maß, unabhängig von der Belastungsrichtung. Eine *lineare Werkstoffverfestigung* hat folgende Form:

$$\sigma_y = \sigma_{y,0} + H\varepsilon_{\text{akk}}. \quad (4.67)$$

Hierbei ist $\sigma_{y,0}$ die *Fließgrenze*, bei der plastische Verzerrungen auftreten, und H der *lineare Verfestigungsfaktor*. Gilt für den linearen Verfestigungsfaktor $H = 0$, so spricht man von *idealer Plastizität*. Bei linearer Werkstoffverfestigung ergibt sich der plastische Energiebeitrag infolge von Verfestigung nach Simo und Hughes [130] zu

$$f_{\text{p}} = \frac{1}{2} H \varepsilon_{\text{akk}}^2. \quad (4.68)$$

Ein *sättigendes Materialverhalten* kann durch das Verfestigungsgesetz nach Voce,

$$\sigma_y = \sigma_{y,0} + (\sigma_{\infty} - \sigma_{y,0})(1 - \exp(-\eta\varepsilon_{\text{akk}})), \quad (4.69)$$

realisiert werden. Die Fließgrenze ist durch $\sigma_{y,0}$ gegeben. η ist ein Verfestigungsparameter, der die *Sättigungsrate* bestimmt, und σ_{∞} ist die *Sättigungsspannung*, bei der die Steigung der Fließkurve zu Null wird. Als Fließgrenze $\sigma_{y,0}$ wird in der Regel die *Streckgrenze* σ_{f} verwendet. Die Streckgrenze bezeichnet die Spannung, bei der sich ein Material bei einachsigen Zug plastisch zu verformen beginnt. In Abb. 4.2 ist der schematische Verlauf einer linearen und einer sättigenden Werkstoffverfestigung mit der Illustration der verschiedenen Parameter gegeben. Kinematische Verfestigungen werden nicht modelliert, da sich während der numerischen Experimente die initiale Belastungsrichtung nicht ändert. Die Verwendung der eingeführten Vergleichsspannung und Fließfunktionen führt zu einem isotropen und zug-druckunabhängigen Materialverhalten.

Ist die Fließbedingung erfüllt, tritt nicht zwangsläufig plastisches Fließen ein. Damit ein Material plastisch fließt, muss zusätzlich die *plastische Belastungsbedingung*

$$\dot{f}_{\text{f}}|_{\sigma_v = \text{konst.}} > 0 \quad (4.70)$$

erfüllt sein. Anhand der Belastungsbedingung wird zwischen Entlastung, Belastung und neutralen Prozessen unterschieden. Bei der Auswertung der plastischen Belastungsbedingung wird der Materialzustand eingefroren, d.h. eine eventuelle Verfestigung des Materials wird nicht berücksichtigt, $\sigma_v = \text{konst.}$, und die Fließspannung bleibt konstant. Sind die Fließbedingung und die plastische Belastungsbedingung erfüllt, treten plastische Verzerrungen ein.

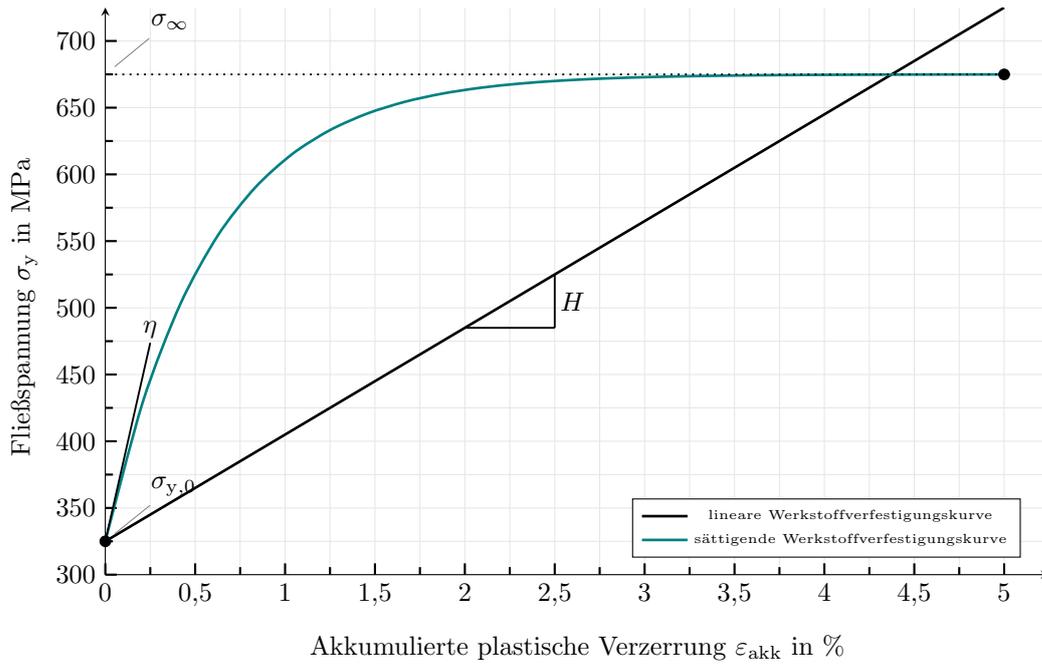


Abbildung 4.2: Lineare und sättigende Werkstoffverfestigung in Abhängigkeit der akkumulierten plastischen Verzerrung.

Für die vollständige Charakterisierung des Plastizitätsmodells ist die Definition eines *Evolutionsgesetzes der plastischen Verzerrungen*, unter Einhaltung der Clausius-Duhem-Ungleichung (4.51), notwendig. Zu diesem Zweck wird eine *plastische Fließregel* der Form

$$\varepsilon_{p,ij} \dot{=} \dot{\lambda} N_i \quad (4.71)$$

postuliert. Hierbei gibt N_i , der sog. *Fließvektor*, die Richtung der Evolution der plastischen Verzerrungen wider und $\dot{\lambda} \geq 0$ ist der *skalare plastische Konsistenzparameter*. Mit dem plastische Konsistenzparameter ist die *plastische Komplementaritätsbedingung*

$$f_{\text{f}} \dot{\lambda} = 0 \quad (4.72)$$

definiert. Zur Bestimmung der Richtung der plastischen Evolution, N_i , wird die Existenz eines stetig differenzierbaren *Fließpotentials* der allgemeinen Form

$$\psi = \psi(\sigma_{ij}, \varepsilon_{\text{akk}}) \quad (4.73)$$

postuliert, woraus der *Fließvektor*, N_i , durch

$$N_i = \frac{\partial \psi}{\partial \sigma_{ij}} \quad (4.74)$$

erhalten wird. Der Fließvektor, N_i , kann als Normalenvektor der Oberfläche des Fließpotentials im Spannungsraum interpretiert werden. Im Falle einer *assozierten Fließ-*

regel wird als Fließpotential die Fließfunktion, $\psi(\sigma_{ij}, \varepsilon_{\text{akk}}) = f_f(\sigma_{ij}, \varepsilon_{\text{akk}})$, verwendet. Somit folgt, falls $\sigma_v = \sigma_{v.M.}$ gültig ist,

$$N_i = \frac{\partial f_f}{\partial s_{ij}} = \frac{s_{ij}}{|s_{ij}|}. \quad (4.75)$$

Als letzter noch zu bestimmender Parameter verbleibt der plastische Konsistenzparameter $\dot{\lambda}$. Da nachfolgend als weiterer Zusatz der diskrete Zeitschritt notiert ist, wird von der Indexnotation auf die Tensornotation gewechselt. Es wird ein implizites Euler-Verfahren zur Diskretisierung des Evolutionsgesetzes für die plastischen Verzerrungen (4.71) im diskreten Zeitintervall $[t_n, t_{n+1}]$ verwendet:

$$\varepsilon_p^{t=n+1} = \varepsilon_p^{t=n} + \underbrace{\Delta t \dot{\lambda}}_{=\Delta\lambda} N_i \quad \varepsilon_{\text{akk}}^{t=n+1} = \varepsilon_{\text{akk}}^{t=n} + \sqrt{\frac{2}{3}} \Delta\lambda. \quad (4.76)$$

Der Konsistenzparameter wird durch das *Return-Mapping-Algorithmus* genannte diskrete *Prädiktion-Korrektor-Verfahren* bestimmt. Während der Berechnung der möglicherweise auftretenden elastischen und plastischen Verzerrungsänderungen zum Zeitpunkt $t = n + 1$ werden die plastischen Verzerrungen, $\varepsilon_p^{t=n}$, und die akkumulierte plastische Verzerrung, $\varepsilon_{\text{akk}}^{t=n}$, des vorherigen diskreten Zeitpunktes, $t = n$, konstant gehalten. Zum diskreten Zeitschritt $t = n + 1$ ergibt sich unter Verwendung der plastischen Verzerrungen des vorherigen Zeitschrittes die Testspannung

$$\boldsymbol{\sigma}_{\text{test}}^{t=n+1}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{C}[\boldsymbol{\varepsilon}^{t=n+1} - \boldsymbol{\varepsilon}_p^{t=n}]. \quad (4.77)$$

Mit der Testspannung wird überprüft, ob eine Verletzung der Fließfunktion (4.64) vorliegt. Gilt $f_f(\boldsymbol{\sigma}_{\text{test}}^{t=n+1}, \varepsilon_{\text{akk}}^{t=n}) \leq 0$, ist die Verzerrungsänderung rein elastisch und es wird $\boldsymbol{\sigma}^{t=n+1} = \boldsymbol{\sigma}_{\text{test}}^{t=n+1}$ gesetzt. Bei einer Verletzung der Fließfunktion, $f_f(\boldsymbol{\sigma}_{\text{test}}^{t=n+1}, \varepsilon_{\text{akk}}^{t=n}) > 0$, hat eine elastoplastische Verzerrungsänderung stattgefunden, da die Belastungsbedingung, $\dot{f}_f > 0$, unmittelbar erfüllt ist und $\Delta\lambda$ wird so bestimmt, dass für die Fließbedingung $f_f(\boldsymbol{\sigma}_{\text{test}}^{t=n+1}, \varepsilon_{\text{akk}}^{t=n}) \stackrel{!}{=} 0$, im Sinne der Komplementaritätsbedingung (4.72), gilt. Bei einem linearen Verfestigungsgesetz ergibt sich

$$\Delta\lambda = \frac{f_f(\boldsymbol{\sigma}_{\text{test}}^{t=n+1}, \varepsilon_{\text{akk}}^{t=n})}{2\mu_{\text{lame}} + H}, \quad (4.78)$$

mit H als linearem Verfestigungsfaktor und μ_{lame} als *Schubmodul*. Weißt ein Material ein sättigendes Verfestigungsverhalten auf, kann $\Delta\lambda$ zum Beispiel durch ein *Newton-Verfahren* für nicht lineare Gleichungen ermittelt werden. Zusammengefasst folgt für die Evolution der plastischen Verzerrungen und der akkumulierten plastischen Verzerrung, bei einem impliziten Euler-Verfahren, einer von-Mises-Vergleichsspannung und dem vorgestellten Lösungsansatz:

$$\varepsilon_p^{t=n+1} = \varepsilon_p^{t=n} + \Delta\lambda \frac{s_{ij}}{|s_{ij}|}, \quad \varepsilon_{\text{akk}}^{t=n+1} = \varepsilon_{\text{akk}}^{t=n} + \sqrt{\frac{2}{3}} \Delta\lambda. \quad (4.79)$$

4.5 Homogenisierung mechanischer Größen

Die makroskopischen mechanischen Größen Ψ eines Körpers, Ω , des Volumens V , sind nach Hill [63] durch das Volumenmittel einer sich lokal ändernden Größe, $\psi(x_i, t)$, gegeben:

$$\Psi^{\text{mak}} = \frac{1}{V} \int_{\Omega} \psi dV. \quad (4.80)$$

Ausgewählte Grundlagen der Risstheorie

In technischen Anwendungen kann es durch das Auftreten von Brüchen zum Totalversagen von Bauteilen kommen, also dem teilweisen oder kompletten Abtrennen von Volumina einer Komponente. Ein derartiges Versagen muss unbedingt vermieden werden, insbesondere in Bereichen, in denen daraus schwerwiegende oder katastrophale Folgen resultieren. Brüche resultieren aus der Entstehung, dem Wachstum und der Vereinigung von in Bauteilen vorhandenen Fehlstellen, sog. *Rissen*. Die *Bruchmechanik* befasst sich mit dem Auftreten von Rissen, um ein schwerwiegendes Totalversagen von Bauteilen vermeiden und verstehen zu können. Da keine einheitliche Rissdefinition in der Literatur existiert, wird für die Belange dieser Dissertation Folgendes als Riss definiert: “Ein *Riss* bezeichnet die Auftrennung des Werkstoffzusammenhalts eines Körpers, durch die Zerstörung von zwischatomaren Bindungen”.

Im vorliegenden Kapitel werden die für diese Dissertation wichtigen Phänomene und mathematischen Formulierungen der Risstheorie vorgestellt. Als Referenz kann die Arbeit von Gross und Seelig [51] herangezogen werden. Ich beschränke mich bei der Vorstellung der mikroskopischen Rissmechanismen auf *spröde polykristalline Werkstoffe*, *duktile polykristalline Werkstoffe und Komposite*, da unter diese Kategorien die Matrix von Gusseisen fällt. Die Versagensmechanismen von Graphit sind in Kapitel 3 erläutert.

Bei *spröden polykristallinen Werkstoffen* tritt eine Mikrorissbildung und -ausbreitung faktisch nie ohne mehr oder weniger ausgeprägte mikroplastische Vorgänge auf. Plastische Verzerrungen treten dabei nur innerhalb eines kleinen Bereichs vor der Rissspitze auf und verursachen wenig bis keine makroskopischen plastischen Verformungen. Die im Zusammenhang mit den mikroplastischen Vorgängen auftretenden Versetzungsbebewegungen führen zu erhöhten Versetzungsdichten an Hindernissen innerhalb des Kristallgitters oder Korngrenzen. Infolge der Versetzungsstaus entstehen lokale Spannungskonzentrationen, die entlang bestimmter Gitterebenen zur Auflösung von atomaren Bindungen und damit zu Mikrorissen führen können. Wenn ein Riss mehrere Körner des polykristallinen Gefüges durchläuft, bezeichnet man ihn als *transkristallinen Riss*. Findet die Auflösung der Atombindungen entlang von Korngrenzen statt, spricht man von *interkristallinen Rissen*. Korngrenzen wirken dabei als Hindernisse von Versetzungsbebewegungen.

Vor Eintreten eines Bruchs zeigen *duktile polykristalline Werkstoffe* auf der makroskopischen Längenskala ein stark ausgeprägtes inelastisches Verhalten. Vor der Werkstoffseparation stauen sich in duktilen Materialien Versetzungen an Störpartikeln des Kristallgitters, was zunächst zu plastischen Verzerrungen führt. Der Versetzungsstau verursacht ein Ablösen der Partikel von der umgebenden Matrix und somit das Entstehen von Poren. Von mikroplastischen Prozessen ausgelöst, vergrößern sich die Poren bei steigender Belastung. Ein Bauteilversagen erfolgt durch den Zusammenschluss unterschiedlicher Poren zu Makrorissen. Duktile Materialien besitzen wesentlich größere

Bruchdehnungen und plastische Dehnungen als spröde Materialien und können deutlich mehr Energie aufnehmen bevor sie brechen.

In mehrphasigen Werkstoffen, wie Kompositen oder auch Gusseisen, existieren weitere mikroskopische Schadensmechanismen. Meist tritt dann eine Rissbildung innerhalb der oft spröden Verstärkungspartikel ein oder es findet eine *Ablösung von Grenzflächen* zwischen der Matrix und den Verstärkungspartikeln statt. Die vorliegenden mesoskopischen Defekte vereinen sich bei eintretendem Bruch zu einem makroskopischen Riss.

5.1 Allgemeines

Stellt man sich Risse als Schnitte in einem Körper vor, besitzen sie sich gegenüberliegende *Rissflanken*, die sich in *Rissfronten* oder auch *Risspitzen* treffen. In dreidimensionalen Körpern existieren drei verschiedene *Grundarten der Rissöffnung*, die sich darin unterscheiden, wie sich die Rissflanken zueinander bewegen, siehe Abb. 5.1. *Modus I* beschreibt eine Rissöffnung, bei der sich die Rissflanken in Richtung ihrer Oberflächennormalen voneinander wegbewegen. Bei *Modus II* und *Modus III* bewegen sich die Rissflanken relativ zueinander, und zwar normal bzw. tangential zur Rissfront. Durch die Superposition der Grundarten der Rissöffnung lässt sich jede mögliche Mischform der Rissöffnung realisieren.

Breitet sich ein Riss aus, kann dies auf zwei verschiedene Arten geschehen. Ist für eine Rissvergrößerung ab einem bestimmten Punkt keine zusätzliche äußere Last erforderlich, spricht man von *instabilem Risswachstum*. Wird eine Erhöhung der äußeren Last benötigt, damit sich ein Riss weiter ausbreitet, nennt man dies *stabiles Risswachstum*. Dies ist oft bei duktilen Materialien der Fall, da Energie durch plastische Verformungen dissipiert.

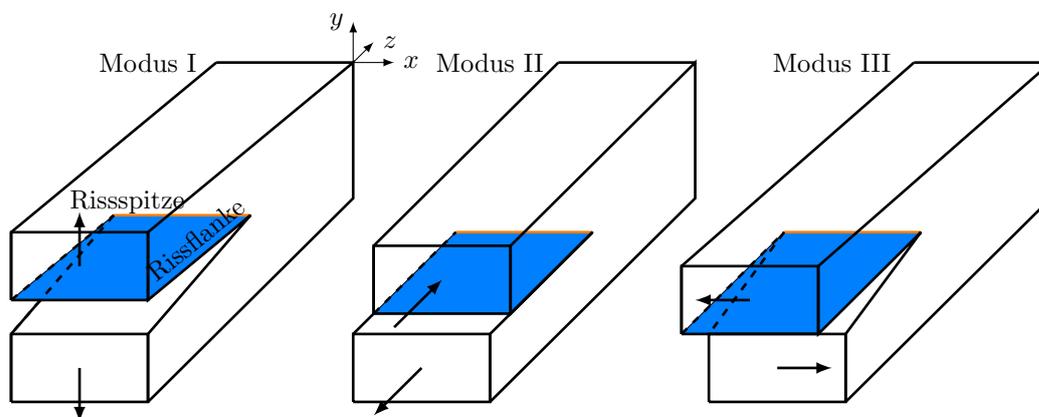


Abbildung 5.1: Illustration der verschiedenen Rissmoden.

5.2 Lineare Bruchmechanik - Energetische Betrachtungsweise

Im Rahmen der linearen Bruchmechanik wird idealisiert angenommen, dass Spannungen an Risspitzen unendlich groß werden. Diese Annahme entspricht nur bedingt der Wirklichkeit, da auch in spröden Materialien plastische Verzerrungen beim Überschreiten der Fließspannung auftreten, die an den Rissflanken zu einer Beschränkung der Spannungsspitzen führen. Sind diese plastischen Zonen im Verhältnis zum Bauteil klein, liefert die lineare Bruchmechanik jedoch realitätsnahe Ergebnisse.

Unter energetischen Gesichtspunkten findet beim Wachstum eines Risses eine Reduzierung der *elastische potentiellen Energie* eines Körpers, F_e , statt. Die potentielle Energie, die mit jeder Einheit der entstehenden Rissoberfläche, dA , frei wird,

$$G = -\frac{dF_e}{dA}, \quad (5.1)$$

trägt die Bezeichnung *Energiefreisetzungsrates*. Nach Griffith [50] findet quasi-statisches Risswachstum statt, wenn die Energiefreisetzungsrates eine *kritische Energiefreisetzungsrates*, G_c , übersteigt:

$$G \leq G_c. \quad (5.2)$$

Bei den idealisierten Annahmen der *linearen Bruchmechanik* und sprödem Werkstoffverhalten entspricht die *Formänderungsenergie* (siehe Gl. (4.53)) der Energiefreisetzungsrates und die kritische Energiefreisetzungsrates kann mittels der *spezifischen Oberflächenenergie*, γ , durch $G_c = 2\gamma$ ausgedrückt werden. Es kann gezeigt werden, dass das Griffith'sche Kriterium im Fall der linearen Bruchmechanik das *K-Konzept* genau abbildet, wobei die Zusammenhänge für isotrope Materialien,

$$G_c = \frac{K_{Ic}^2}{E}; \quad G_c = \frac{K_{Ic}^2(1-\nu^2)}{E}, \quad (5.3)$$

im Fall eines ebenen Spannungs- bzw. Verzerrungszustandes bestehen, mit K_{Ic} als *kritischem Spannungsintensitätsfaktor*, E als Elastizitätsmodul und ν als Querkontraktionszahl.

5.3 Duktiles Risswachstum

Die folgenden Ausführungen beruhen auf Ambati et al. [3] und Duda et al. [41].

Im Sinne der linearen Bruchmechanik erfolgt Risswachstum nur an der singulären Spitze eines Risses, wo lokal unendlich große Spannungen existieren. Das Problem der Ermittlung der Energiefreisetzungsrates an der singulären Risspitze auf einem Finite-Elemente-Gitter wird durch Anwendung des *J-Integrals* [110] gelöst. Bei linear elastischen und nicht linear elastischen Materialien entspricht das Integral, das die Risspitze umschließt, der Energiefreisetzungsrates an der Risspitze und ist in der Lage, die Stabilität bereits bestehender Risse zu beschreiben. Bei elastoplastischen Werkstoffen ist das J-Integral jedoch nur für einen limitierten Bereich von Anwendungen einsetzbar. Es kann vorkommen, dass das J-Integral um eine Risspitze verschwindet [111] und somit nie Risswachstum auftritt, da keine treibende Kraft vorhanden ist. Darüber hinaus ist es nicht auf beliebig komplexe Bauteile anwendbar, und es kann die Rissinitiierung

an Spannungskonzentratoren, z.B. Kerben, nicht vorhersagen. Durch die Berücksichtigung von Entfestigungsvorgängen in einer finiten Prozesszone vor der Risspitze wird die Schwierigkeit des möglicherweise verschwindenden J-Integrals umgangen. Eine solche Materialerweichung wird im Falle von Materialien mit sprödem Bruchverhalten durch Mikrorisse und bei duktilen Materialien durch Mikroporen verursacht [51]. Für die Untersuchung solcher Prozesszonen gibt es im Wesentlichen zwei verschiedene Ansätze: die diskreten Modellansätze mit dem Kohäsivzonenmodell als prominentestem Vertreter und die Kontinuumsschädigungsmodelle [24, 15]. Beide Ansätze werden in der Regel mit der Finite-Elemente-Methode (FEM) umgesetzt. Dennoch bleibt die Schwierigkeit bestehen: um diskrete Risse in einem Finite-Elemente-Schema genau abbilden zu können, sind Netzverfeinerungstechniken erforderlich, damit das FE-Gitter an die Risstopologie angepasst werden kann [136]. In diesem Zusammenhang stellt die Übertragung von Zustandsvariablen auf das verfeinerte Netz eine besondere Schwierigkeit dar, insbesondere wenn plastische Dehnungen auftreten [100].

Kohäsivzonenmodelle [42] beschreiben das Wachstum von Rissen auf der Basis der Separation von Oberflächen, wobei Kohäsionskräfte als Widerstand gegen die Separation dienen. Diese Vorgehensweise liefert vor allem gute Ergebnisse für bereits bekannte Rissverläufe, bei denen die FEM-Elemente entlang des Rissverlaufs durch kohäsive Kontaktelemente modelliert werden. Die Vorhersage unbekannter Risspfade ist jedoch eine Herausforderung, da die Verwendung von kohäsiven Elementen im gesamten FE-Gitter zu einer starken Gitterabhängigkeit führt [114].

Kontinuummodelle beschreiben die Schädigungsentwicklung aufgrund der Entstehung, des Wachstums und der Vereinigung von Mikrodefekten sowie eines daraus resultierenden Verlusts der Tragfähigkeit von materiellen Punkten [36]. Die Evolution der Schädigung ist durch konstitutive Gleichungen gegeben, die mit plastischen Dehnungen gekoppelt sind [53, 137, 79]. Bei starker Entfestigung verlieren die konstitutiven Gleichungen ihre Konvexität [51], wodurch sie schwierig zu lösen sein können. Um das Auftrennen von Materialpunkten zu modellieren, sind zusätzliche Kriterien und Annahmen erforderlich, die die Rissinitiierung und -ausbreitung abdecken.

Ausgewählte Grundlagen der Wärmeübertragung

Dieses Kapitel enthält die für diese Arbeit wichtigen mathematischen Ausdrücke zur Beschreibung der *Wärmeleitung* (oder auch *Wärmediffusion*, *Konduktion*), als einzige relevante Art der Wärmeübertragung. Als Standardliteratur kann bspw. Böckh und Wetzl [18] herangezogen werden.

Die Wärmeleitung beschreibt einen von Temperaturunterschieden verursachten *Wärmestrom* in oder zwischen Festkörpern und Fluiden, der nicht, wie im Falle der *Konvektion*, an einen makroskopischen Materiestrom oder an *elektromagnetische Strahlung* gebunden ist. Unter Einhaltung des zweiten Hauptsatzes der Thermodynamik fließt die Wärme immer in Richtung der geringeren Temperatur. Wir betrachten einen dreidimensionalen Körper, Ω , der eine Temperatur $\theta(x_i, t)$, in der räumlichen Position x_i zum Zeitpunkt t , besitzt. Ein durch Wärmediffusion entstehender *Wärmestrom*, $q_i(x_i, t)$, ist durch das *Gesetz von Fourier* folgendermaßen definiert:

$$q_i = -\lambda_{ij} \frac{\partial \theta}{\partial x_j}. \quad (6.1)$$

Die *tensorielle Wärmeleitfähigkeit* $\lambda_{ij}(x_i, \theta)$ ist eine materialspezifische Eigenschaft, die angibt, welcher Wärmestrom durch einen *Temperaturgradienten*, $\partial\theta/\partial x_i$, verursacht wird. Sie ist im Allgemeinen von der Temperatur und dem Druck abhängig und anisotrop. Ist die Wärmeleitfähigkeit in einem kristallgitterfesten $\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}$ -Koordinatensystem gegeben, $\tilde{\lambda}_{ij}$, lässt sie sich mit Hilfe der Rotationsmatrix Q_{ij} in ein x, y, z -Referenzkoordinatensystem transformieren:

$$\lambda_{ij} = Q_{im} Q_{jn} \tilde{\lambda}_{mn}. \quad (6.2)$$

Bei isotropen Materialien kann die tensorielle Form der Wärmeleitfähigkeit vereinfacht als skalar $\lambda(x_i, \theta)$ geschrieben werden.

Die zeitliche Änderung der Temperatur eines materiellen Punkts ist proportional zu der zeitlichen Änderung seiner inneren Energie. Wird die Änderung der inneren Energie nur von Wärmediffusion verursacht, lässt sich die *zeitliche Temperaturänderung* wie folgt ausdrücken

$$\rho c \frac{\partial \theta}{\partial t} = -\frac{\partial q_i}{\partial x_i}. \quad (6.3)$$

Hierbei repräsentieren ρ die *Massendichte* und $c(x_i)$ die *spezifische Wärmekapazität*.

Mechanische und thermische Eigenschaften von Gusseisen mit Lamellengraphit

Teile der in diesem Kapitel vorgestellten Methodiken sind im Journal-Artikel [116] veröffentlicht.

Prinzipiell gibt es zwei mögliche Wege, die Haltbarkeit eines thermo-mechanisch belasteten Bauteils bei einer gegebenen Belastung zu verlängern. Zum einen durch die Anpassung der Geometrie des Bauteils und zum anderen durch die Verwendung eines geeigneteren Werkstoffs. Nachfolgend wird das oft zur Herstellung von *LKW-Bremsscheiben* verwendete *Gusseisen mit Lamellengraphit* als repräsentativer Werkstoff herangezogen, um ein numerisches Verfahren zur Bestimmung der mikrostrukturabhängigen thermo-mechanischen Eigenschaften zu motivieren, sodass infolge eines verbesserten Werkstoffs eine Steigerung der Bauteilhaltbarkeit erreicht werden kann. Dabei ist zunächst einmal wichtig zu wissen, dass sich die Gusseisenmikrostruktur von Bremsscheiben aus Grauguss, bei nominell gleicher Zusammensetzung der Schmelze, von Gießerei zu Gießerei unterscheidet [31]. Verursacht wird dieser Unterschied durch individuelle Gießpraktiken der Gießereien. Zudem ist wichtig, dass die makroskopischen Gusseiseneigenschaften stark mikrostrukturabhängig sind. Um also den Gießprozess einer LKW-Bremsscheibe so beeinflussen zu können, dass deren thermo-mechanische Eigenschaften optimal sind, ist die Kenntnis der Korrelation zwischen der Mikrostruktur und den makroskopischen Eigenschaften notwendig. Zur Bestimmung dieser Korrelation wird unter Variation der Graphitmikrostruktur von Grauguss eine umfangreiche Studie durchgeführt.

Es existieren bereits einige Arbeiten, die sich mit Gusseisen im Rahmen einer ähnlichen Problemstellung befassen. Hierbei wurden die Simulationsgebiete mittels realer Materialproben oder periodischer Einheitszellenansätze modelliert. Der offensichtliche Vorteil von Simulationsgebieten, die anhand von realen Materialproben erstellt werden, ist, dass sie die Wirklichkeit exakt abbilden und einen möglichst geringen Unsicherheitsfaktor verursachen. Neben der technologisch aufwändigen Erzeugung von Simulationsgebieten, anhand realer Materialproben, ist eine gezielte Beeinflussung der vorkommenden Längenverteilung der Graphitlamellen und des -volumenanteils nicht möglich. Somit ist die Untersuchung des Einflusses dieser Kenngrößen auf die makroskopischen Materialeigenschaften bei Verwendung von Simulationsgebieten, die anhand von Materialproben erzeugt wurden, nur mit extrem hohem Aufwand durchführbar. Bei den stark idealisierten Einheitszellenansätzen ist wiederum die Übertragbarkeit der Simulationsergebnisse auf die Wirklichkeit schwierig, da wichtige Charakteristiken der Graphitmikrostruktur, wie die Vernetzung der Graphitlamellen, nicht quantitativ abgebildet werden.

Als Übersicht der wichtigsten Literatur, die sich mit einer ähnlichen Problemstellung beschäftigt, sind folgende Publikationen zu nennen: Bonora und Ruggiero [20], Velichko et al. [142], Metzger und Seifert [87], Pina et al. [107, 108], Norman und Calmunger [98]. Bonora und Ruggiero [20] befasst sich mit dem mikromechanischen Verhalten von ferritischem Gusseisen mit Kugelgraphit. Besonderes Augenmerk wurde dabei auf während der Abkühlung von der Schmelz- zur Raumtemperatur entstehende Eigenspannungen gelegt. Solche Eigenspannungen resultieren infolge unterschiedlicher Wärmeausdehnungskoeffizienten zwischen der Matrix des Gusseisenwerkstoffes und dem Kugelgraphit. Als Simulationsgebiete dienten periodische achsensymmetrische 2D-Einheitszellensimulationsgebiete. Das konstitutive mikromechanische Modell der Matrix entsprach dem elastoplastischen von-Mises-Verhalten und das des Kugelgraphit linear-elastischem Materialverhalten. Beruhend auf einer vom Spannungszustand abhängigen Weibull-Wahrscheinlichkeitsverteilung wurde eine Methode zur Beschreibung des Rissverhaltens des Kugelgraphits angewendet. Weiter wurde die Matrix-Kugelgraphit-Grenzflächenablösung imitiert und das duktile Versagen der Matrix durch ein Kontinuumsschädigungsmodell umgesetzt.

Gusseisen mit lamellarem Graphit besitzt die beste thermische und schlechteste elektrische Leitfähigkeit aller Gusseisenvarianten, Gusseisen mit Kugelgraphit ähnliche Werte wie Stahl und Gusseisen mit vermikularem Graphit Werte zwischen den beiden vorher genannten Gusseisensorten. Vor diesem Hintergrund haben Velichko et al. [142] versucht eine Korrelation dieser Eigenschaften mit quantitativen Mikrostrukturcharakteristiken zu erarbeiten. Dabei wurden unter anderem FIB-Tomographiebilder zur Gebietserstellung im Rahmen einer FEM-Analyse verwendet, um die elektrische Leitfähigkeit von Gusseisen mit verschiedenen Graphitformen zu bestimmen. Die tomographiebasierten Simulationsgebiete stellten geometrisch genaue Replikat eines kleinen Teils einer realen Gusseisenmikrostruktur dar. Experimentelle Ergebnisse konnten damit reproduziert werden. Es wurde geschlossen, dass man mit computergestützter Modellierung in der Lage sein sollte, Mikrostrukturen so zu optimieren, sodass maßgeschneiderte Verbundwerkstoffe entstehen, die maximierte spezifische physikalische oder mechanische Eigenschaften besitzen. Es hat sich zudem gezeigt, dass die Graphitvernetzung ein bestimmender Faktor der makroskopischen Materialeigenschaften von Gusseisen ist.

Gusseisen mit Lamellen-, Vermikular- und Kugelgraphit, unter zyklischer mechanischer Belastung, wurden von Norman und Calmunger [98] untersucht. Das makroskopische Materialverhalten wurde dabei anhand einer Menge identischer Einheitszellenmodelle, mit unterschiedlichen Orientierungen der Graphitpartikel, berechnet. Die Graphitlamellen besaßen die Form eines einzelnen pennyförmigen Ellipsoids und zeigten ein rein elastisches, transversal isotropes Materialverhalten. Um die zyklische Belastung zweckdienlich zu modellieren, verhielt sich die Matrix wie ein plastisch-isotropes Medium mit einem von-Mises-Fließverhalten und kinematischer Verfestigung.

In Pina et al. [107] wurde ein periodisches Einheitszellenmodell, das die Vernetzung des Graphits berücksichtigte, zur Untersuchung der thermischen und mechanischen Eigenschaften von Gusseisen mit Lamellengraphit verwendet. Der Graphitpartikel einer Einheitszelle hatte dabei eine komplexe dreidimensionale "Sternenform", die auf idealisierte Weise die wichtigsten morphologischen Merkmale einer realen Mikrostruktur erfasste. Die Matrix wurde hierbei als homogenes, isotrop-elastoplastisches Material betrachtet und das Graphit als linear-elastisch mit einer transversalen Isotropie.

Statistische Volumenelemente von realistischen Gusseisen mit Lamellengraphit-Mikrostrukturen, die mittels der *Serial-Sectioning-Methode* erzeugt wurden, dienten Metzger und Seifert [87] als Simulationsgebiet. Der isotrope Graphit hatte dabei einen vom

Dehnungszustand abhängigen Elastizitätsmodul. Die Matrix besaß ein plastisches von-Mises-Verhalten, wobei die Parameter des plastischen Modells so angepasst wurden, dass die numerischen Spannungs-Dehnungs-Kurven der mikrostrukturbasierten Gebietsmodelle gut zu experimentellen Druckversuchen passten.

Im Unterschied zu den bereits veröffentlichten Vorgehensweisen werden in der vorliegenden Arbeit "synthetische Methoden" zur Erzeugung von komplexen Mikrostrukturen verwendet. Hierbei werden die Form, die räumliche Ausdehnung und die Anordnung der Graphitlamellen, inklusive deren Vernetzung, realitätsnah wiedergegeben, wobei die Ausprägung dieser Charakteristiken beliebig beeinflusst werden kann und sich der Volumenanteil der Graphitpartikel zusätzlich frei definieren lässt. In einem großen Temperaturbereich erlaubt es dieses Vorgehen, quantitative Aussagen über den Einfluss einer unterschiedlichen räumlichen Morphologie der Graphitlamellen und unterschiedlicher Graphitvolumenanteile auf makroskopische mechanische und thermische Materialeigenschaften zu machen. Alle möglichen Ausprägungen der Graphitmikrostruktur werden anhand *statistischer Volumenelemente (SVE)* nachgebildet. Mit den erhaltenen Daten können, wie bereits von Velichko et al. [142] prognostiziert, maßgeschneiderte Mikrostrukturen mit maximierten physikalischen Eigenschaften entworfen werden und der Gießprozess und/ oder die Legierungskomponenten eines Werkstoffs so angepasst werden, dass ein erstarrtes Bauteil eine entsprechende Mikrostruktur besitzt.

Die Erstellung einer Datenbank, die den Zusammenhang zwischen der Graphitausprägung und den makroskopischen mechanischen und thermischen Eigenschaften von Guss-eisen mit Lamellengraphit abbildet, kann auch mittels einer Vielzahl von Experimenten, also ganz ohne numerische Methoden, erfolgen. Bei einem solchen Vorgehen wäre eine zerstörungsfreie Erkennung der Mikrostruktur, beispielsweise vor der Durchführung von Zugversuchen, mittels der *Focused Ion Beam Methode* [141] oder der *Mikrotomographie* [82] notwendig. Da im Vorfeld der zerstörungsfreien Erkennung der Mikrostruktur einer Materialprobe keine Aussage bezüglich der tatsächlich vorliegenden Graphitausprägung getroffen werden kann, ist es sehr wahrscheinlich, dass eine weitaus größere Anzahl an Materialproben, verglichen mit der Anzahl an möglichen unterschiedlichen Varianten der Mikrostruktur, untersucht werden muss, um die komplette Bandbreite an verschiedenen Mikrostrukturen, an denen Interesse besteht, zu erfassen. Verbunden mit dem großen Temperaturbereich, für den die makroskopischen mechanischen und thermischen Eigenschaften erfasst werden sollen, wäre somit eine enorme Menge an teuren und aufwändigen Experimenten zur Erstellung der gewünschten Datenbank notwendig. Außerdem sind bei einer rein digitalen Herangehensweise auch hypothetische Mikrostrukturen realisierbar. In der vorliegenden Arbeit werden daher numerische Methoden etwaiger experimenteller Ansätze zur Datenerfassung vorgezogen. Sobald das numerische Framework für eine digitale Bestimmung von mikrostrukturabhängigen, makroskopischen mechanischen und thermischen Eigenschaften erarbeitet ist, lässt sich die Methodik mit vergleichsweise geringem Aufwand und geringen Kosten auf andere Materialien übertragen, was wiederum für die Entwicklung eines solchen Frameworks spricht.

Als Eingrenzung der möglichen Varianten der Graphitausprägungen, dient die Materialspezifikation einer Lieferantenvorschrift, für den bei LKW-Bremsscheiben verwendeten sog. *GG-15 Cr Cu Nb HC* Werkstoff, der *Daimler AG*. Die Eingrenzung gemäß der Lieferantenvorschrift wird angewendet, da die vorliegende Arbeit in Kooperation mit der *Daimler AG* entstanden ist und die *Daimler AG* speziell an diesen Daten Interesse hat. *GG-15 Cr Cu Nb HC* bezeichnet einen Gusseisenwerkstoff mit einem Grundgefü-

ge, bestehend aus gleichmäßigem, feinem und dichtstreifigem Perlit; mit eingelagerten Niob-Karbid; frei von Ledeburit und einem Ferritgehalt von maximal 5 v. – % [86]. Innerhalb der Lieferantenvorschrift werden die möglichen Graphitmikrostrukturen durch den Klassifizierungsschlüssel der *DIN EN ISO 945-1* [40] festgelegt. Mit der Norm *DIN EN ISO 945-1* lässt sich die Graphitmikrostruktur in einem Gussstück aus Gusseisen durch eine visuelle Auswertung anhand der Form, der Anordnung und der Größe des Graphits klassifizieren. Für *GG-15 Cr Cu Nb HC* ist ein groblamellarer Graphit der Form I, der Anordnung A und den Größen 2 bis 5 festgelegt. Graphit der Form I, mit der Anordnung B sowie den Größen 2 bis 5, darf einen Volumenanteil von 25 v. – % nicht überschreiten. Bei der vorliegenden Studie wird Graphit vom Typ IB2 bis IB5 vernachlässigt und es wird eine rein perlitisches Matrix angenommen. Somit werden Graphitmikrostrukturen der Form und Anordnung IA bei einer räumlichen Ausdehnung der Graphitpartikel von 0,06 mm bis 1,0 mm betrachtet. In Tabelle 7.1 sind die räumlichen Ausdehnungen der verschiedenen Klassen 2 bis 5 nach *DIN EN ISO 945-1* aufgeführt. Die Vernachlässigung von Graphit des Typs IB2 bis IB5 und die Annahme

Tabelle 7.1: Richtzahlen von Größenbereichen nach *DIN EN ISO 945-1*

Richtzahl	Wert	Einheit
IA2	0,5 bis <1,0	mm
IA3	0,25 bis <0,5	mm
IA4	0,12 bis <0,25	mm
IA5	0,06 bis <0,12	mm

einer rein perlitischen Matrix dient der Reduzierung des Umfangs der Simulationsstudie und stellt keine Einschränkung der Methodik dar. Das heißt, obwohl die Studie auf eine bestimmte Graphitform beschränkt ist, kann das beschriebene Vorgehen auch auf Gusseisenvarianten mit anderen Graphitformen, beispielsweise Vermikulargraphit, oder ferritischem Matrixmaterial angewendet werden.

Die mittels der Simulationsstudie erstellte Datenbank umfasste die folgenden makroskopischen mechanischen und thermischen Eigenschaften: das *E-Modul*, die *Querkontraktionszahl*, die jeweilige *Dehngrenze* bei Zug- und Druckbelastung sowie die *Wärmeleitfähigkeit*, in Abhängigkeit von der festgelegten Form und der Anordnung der Graphitpartikel, unter Variation der Größenverteilung der Graphitlamellen und des Volumenanteils der Graphiteinschlüsse, für den Temperaturbereich von 20 °C bis 750 °C. Hierbei sind die Materialparameter der mikroskopischen Modelle von der Temperatur θ abhängig.

Im folgenden Abschnitt 7.1 wird die verwendete Methodik zur Erstellung der Simulationsgebiete erläutert. Anschließend werden die verwendeten mikroskopischen Materialmodelle, samt der benötigten Materialparameter, eingeführt (Abschnitt 7.2), wobei zwischen den Modellen für die perlitisches Matrix (Abschnitt 7.2.1) und das Lamellengraphit (Abschnitt 7.2.2) unterschieden wird. Danach folgt eine Modellanalyse des mechanischen Modells (Abschnitt 7.3.2) und abschließend werden die Ergebnisse der Simulationsstudie präsentiert (Abschnitt 7.3.3 und Abschnitt 7.4).

7.1 Erstellung der Mikrostruktur von Gusseisen mit Lamellengraphit

Bei der vorliegenden Arbeit wird das makroskopische mechanische Materialverhalten und die Wärmeleitfähigkeit von Gusseisen mit Lamellengraphit, infolge einer sich ändernden Graphitmikrostruktur, untersucht. Hierfür sind 3D-Simulationsgebiete notwendig, die die Bandbreite aller möglichen Mikrostrukturen im Sinne der werkstoffspezifischen Lieferantenvorschrift *DBL 4407* [86] hinreichend genau abbilden. Die Herausforderung bei der Vorhersage der Gusseiseneigenschaften auf der Grundlage der Graphitmorphologie ist mit der Vielfalt der Größe, Form und räumlichen Anordnung der Graphiteinschlüsse verbunden [142]. Insbesondere hinsichtlich der numerischen Bestimmung der Wärmeleitfähigkeit von Gusseisen liefern 2D-Simulationsgebiete keine akkuraten Ergebnisse, da die Vernetzung von Graphitpartikeln in 2D-Domänen nicht mitberücksichtigt wird [142], weshalb 3D-Simulationsgebiete verwendet werden.

Zur Generierung von Simulationsgebieten gibt es grundsätzlich zwei unterschiedliche Methoden [142]. Zum einen können die Simulationsgebiete direkt anhand von real existierenden Materialproben, mittels unterschiedlicher Verfahren, erstellt werden. Siehe hierfür beispielsweise Chawla et al. [27] oder Metzger und Seifert [87]. In diesen Arbeiten wurde die 3D-Mikrostruktur von realen Materialproben, bestehend aus einem durch Siliziumkarbid verstärkten Aluminium-Verbundwerkstoff bzw. Grauguss, mit der *Serial-Sectioning-Methode* rekonstruiert. Bei der Serial-Sectioning-Methode werden eine Vielzahl von Schliffbildern einer Materialprobe erzeugt, wobei nur sehr wenig Material zwischen den einzelnen Schliffbildern durch Polieren abgetragen wird, die dann zu einem 3D-Simulationsgebiet zusammengefügt werden. Als weitere Methoden der 3D-Mikrostrukturierung, die die Materialproben nicht zerstören, eignen sich die *Focused-Ion-Beam-Methode (FIB)* und die *3D-Mikrotomographie*. Velichko et al. [141] haben mit der Focused-Ion-Beam-Methode die Topologie von Lamellen-, Kugel- und Vermikulargraphit in grauem Gusseisen analysiert. Die 3D-Mikrostruktur bei dendritischer Erstarrung wurde von Limodin et al. [82] mittels Mikrotomographie untersucht. Die erwähnten Methoden erlauben die Nachbildung adäquater 3D-Mikrostrukturen. Dafür werden jedoch spezielle experimentelle Vorrichtungen benötigt. Zusätzlich ist die praktische Durchführung eine große Herausforderung. Die entstehenden Kosten einer solchen Gebietserstellung würden die Kosten einer rein experimentellen Identifikation von mechanischen und thermischen Materialeigenschaften vermutlich übersteigen. Außerdem wäre die quantitative Verbesserung der ermittelten Materialeigenschaften gegenüber der zweiten Möglichkeit zur Erstellung von Simulationsgebieten durch den enormen experimentellen Mehraufwand voraussichtlich nicht zu rechtfertigen.

Neben der Generierung anhand von real existierenden Materialproben können Gusseisen-Simulationsgebiete auch "synthetisch" erzeugt werden. Die Idee bei synthetischen Simulationsgebieten ist, dass das aus der Mikrostruktur resultierende komplexe Materialverhalten wiedergegeben wird, obwohl die geometrische Darstellung der Mikrostruktur nicht exakt der des realen Materials entspricht. Erreicht wird dies im Fall von Gusseisen durch Simulationsgebiete, die ein ähnliches statistisches Auftreten von Inklusionen besitzen wie reale Werkstoffe [142]. Synthetische Methoden liefern also vereinfachte und idealisierte Mikrostrukturen, dennoch müssen sie die Hauptmerkmale einer realen Mikrostruktur erfassen. Es ist also wichtig, alle relevanten Eigenschaften der Mikrostruktur, die einen signifikanten Einfluss auf das mechanische und thermische Verhalten des Materials haben, zu identifizieren und zu berücksichtigen.

Verglichen mit einem experimentellen Ansatz zur Erstellung von Simulationsgebieten sind einige Vorteile eines synthetischen Ansatzes für eine Simulationsstudie unbedingt notwendig. Da die Bandbreite der notwendigen Mikrostrukturen durch die Lieferantenvorschrift *DBL 4407* der *Daimler AG* festgelegt ist, werden Simulationsgebiete benötigt, die den Graphitklassen für IA2 bis IA5 nach *DIN EN ISO 945-1* [40] entsprechen. Die Generierung von Mikrostrukturen, entsprechend IA2 bis IA5, ist nur auf synthetische Art möglich, da die dadurch definierte Größenverteilung der Graphitlamellen in realen Gussteilen nicht vorkommt, weil dort stets ein Gemisch der verschiedenen Graphitausprägungen vorliegt. Merkmale wie die Größenverteilung der Lamellen und der Volumenanteil des Graphits sind *nur* bei einer synthetischen Gebietserstellung gezielt beeinflussbar. Die Orientierungen der anisotropen Graphiteinschlüsse werden beim synthetischen Erstellen der Simulationsgebiete gespeichert. Somit kann die transversale Isotropie der Graphitlamellen berücksichtigt werden, was bei realen Mikrostrukturen eine Herausforderung ist. Generell kann man sagen, dass die Erzeugung der synthetischen Mikrostrukturen mit wesentlich weniger Aufwand verbunden ist, verglichen mit einer experimentellen Erstellung, und flexibel durchführbar werden kann.

Der Ansatz, der die größte Idealisierung der synthetischen Gebietsgenerierung darstellt, ist der *Einheitszellenansatz*. Hierbei wird die Mikrostruktur von Gusseisen durch einfache identische und periodische Einheitszellen nachgebaut. Eine Einheitszelle enthält einen einzelnen in Matrixmaterial eingebetteten Graphitpartikel. Im Falle von Gusseisen mit Kugelgraphit werden durch dieses Vorgehen die wichtigsten Eigenschaften einer realen Graphitausprägung abgebildet. Bei komplexeren Mikrostrukturen, wie zum Beispiel bei Gusseisen mit Lamellengraphit, werden wichtige Merkmale, wie die Vernetzung des Graphits, nicht erfasst oder eine Analogiebildung zu realen Werkstoffen ist schwierig.

Im Vorfeld zur Beschreibung der entwickelten Methode zur synthetischen Gebietserzeugung müssen zunächst noch einige Begrifflichkeiten geklärt werden. Wie in Kapitel 3 beschrieben, besitzen Graphitlamellen wegen ihrer Hauptwachstumsrichtung entlang der *a*-Richtung des hexagonalen Kristallgitters [66] eine wesentlich größere räumliche Ausdehnung innerhalb der Basalebene, verglichen mit ihrer Ausdehnung orthogonal zu den Basalebene [128]. Nachfolgend werden die Richtungen der größeren räumlichen Ausdehnungen (*a*-Richtung) einer Graphitlamelle als *Längsrichtung* bezeichnet.

Die Verwendung von komplexen Mikrostrukturen bietet gegenüber den Einheitszellenansätzen den Vorteil, dass die Vernetzung der Graphitlamellen quantitativ abgebildet werden kann und eine bessere Übertragbarkeit der Graphitabmessungen zu realen Mikrostrukturen möglich ist. Bei der entwickelten Methodik zur Mikrostrukturgenerierung handelt es sich, anders als bei Pina et al. [107] und Norman und Calmunger [98], nicht um ein Einheitszellenmodell. Stattdessen werden bestimmte idealisierende und vereinfachende Annahmen hinsichtlich der Form, Größe, Anordnung und Verteilung der Graphitlamellen getroffen und dahingehen komplexe Mikrostrukturen generiert. Die Form der Inklusionen von Gusseisen mit Lamellengraphit wird häufig als lamellen- oder flockenartig beschrieben [107], weshalb die Graphitlamellen als *flache, gewellte Ellipsoide* modelliert werden. In einem partikeleigenen $\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}$ -Koordinatensystem ist eine einzelne Lamelle mathematisch durch

$$\frac{\tilde{x}^2}{r^2} + \frac{\tilde{y}^2}{s^2} + \frac{(\tilde{z} + amp * \sin(freq * \tilde{x} + offset))^2}{t^2} \leq 1 \quad (7.1)$$

beschrieben. Hierbei sind r, s, t die Halbachsen des Ellipsoids und $amp, freq, offset$ die Amplitude, die Frequenz und der Nullphasenwinkel einer Wellung des Ellipsoids entlang

der \tilde{x} -Achse. Die Längsachsen (a-Richtung) liegen in der \tilde{x} - \tilde{y} -Ebene und die \tilde{z} -Achse verläuft parallel zur c-Richtung des hexagonalen Kristallgitters, woraus $t \ll r, s$ folgt. In Abb. 7.1 ist die schematische Darstellung einer einzelnen Graphitlamelle gegeben.

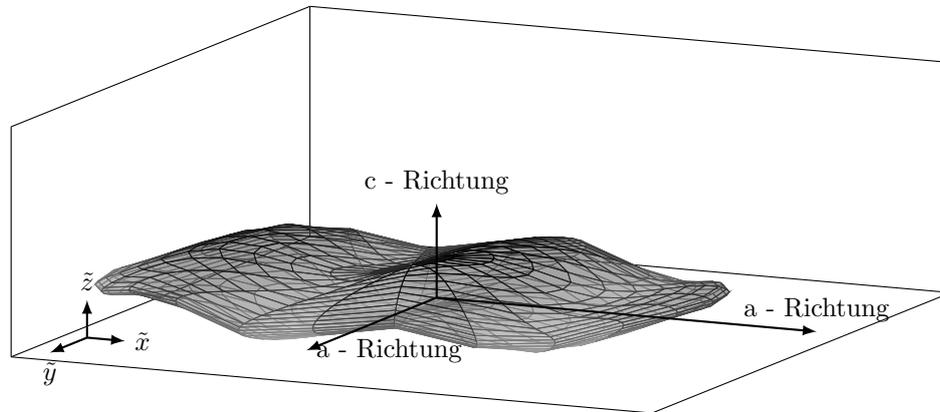


Abbildung 7.1: Schematische Darstellung einer idealisierten Graphitlamelle in Form eines flachen gewellten Ellipsoids. Das Ellipsoid ist im partikeleigenen $\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}$ -Koordinatensystem dargestellt und die Achsen des hexagonalen Kristallgitters sind gegeben.

Mit Kenntnis der Orientierung des $\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}$ -Koordinatensystems kann die Kristallorientierung der transversal isotropen Materialeigenschaften in einem x, y, z -Referenzkoordinatensystem berücksichtigt werden. Die idealisierte Form der Graphitlamellen ist ähnlich der des Einheitszellenmodells nach Norman und Calmunger [98], mit der Erweiterung, dass jeder Lamelle eine Wellung aufgeprägt ist. In Norman und Calmunger [98] besteht eine Einheitszelle aus einem isolierten, pennyförmigen, ellipsoiden Graphitteilchen, das in eine homogene Stahlmatrix eingebettet ist. Dabei besteht keine Vernetzung zwischen Graphitinkclusionen der einzelnen Einheitszellen.

Neben der Grundform der Graphitpartikel müssen statistische Verteilungsfunktionen, die ähnlich denen von realen Materialproben sind, für folgende Merkmale festgelegt werden, um die Mikrostrukturen definieren zu können:

Die *Positionierung*, die *Orientierung* (Ausrichtung der c-Achse eines Ellipsoids im x, y, z -Referenzkoordinatensystem), die *Länge* (Parameter r), die *Breite* (Parameter s) und *Dicke* (Parameter t) sowie die *Amplitude* (Parameter amp), die *Frequenz* (Parameter $freq$) und der *Nullphasenwinkel* (Parameter $offset$) der Wellungen der Graphitlamellen.

Die Wahl der Position und Rotation der Partikel im Simulationsgebiet, sowie die der Nullphasenwinkel, erfolgt zufällig *gleichverteilt*. Durch die Anwendung einer Gleichverteilung der Positionierung und Rotation tritt eine Abweichung der synthetische Mikrostrukturen gegenüber einer realen Mikrostruktur auf. In realen Grauguss-Werkstoffen sind die Graphitlamellen in eutektische Zellen angeordnet [97], was bei der beschriebenen Methode nicht der Fall ist. Bei der Längen- und Breitenverteilung der Partikel, also den Maßen der Längsachsen, wird angenommen, dass diese einer Normalverteilung unterliegen. Die Parameter der Normalverteilung der Längsachsen eines bestimmten Mikrostrukturtyps werden entsprechend der Norm *DIN EN ISO 945-1* [40] ausgewählt. Als Beispiel zur Erläuterung der Parameterwahl wird eine IA2-Mikrostruktur herangezogen. Bei einer IA2-Mikrostruktur treten Graphitlamellen der Längen bzw. Breiten,

l^{IA2} , von 0,5 bis 1,0 mm auf. In diesem Fall wird ein Erwartungswert der Normalverteilung von $\mu^{IA2} = 0,75$ mm gewählt. Dies entspricht dem arithmetischen Mittel der minimalen, l_{\min} , und maximalen Länge bzw. Breite, l_{\max} , der Partikel einer Graphit-*ausprägung*:

$$\mu = \frac{l_{\min} + l_{\max}}{2}. \quad (7.2)$$

Die Varianz *var* wird so gewählt, dass die minimale bzw. maximale räumliche Ausdehnung der doppelten Standardabweichung entspricht:

$$var = \frac{l_{\min} + l_{\max}}{8}. \quad (7.3)$$

Dass die Annahme einer Normalverteilung der Längen und Breiten von Graphitlamellen der Realität entspricht, kann an dieser Stelle nicht belegt werden, da diesbezüglich keine experimentellen Untersuchungsergebnisse von realen 3D-Mikrostrukturen vorliegen. Bei der Normalverteilung handelt sich jedoch, nach meiner Einschätzung, um die plausibelste Wahrscheinlichkeitsverteilung. Die Art der Verteilungsfunktionen und die benötigten Funktionsparameter der Dicke, Amplitude und Frequenz der Wellung werden mittels einer Weiterentwicklung des in Schmid et al. [116] vorgestellten Analyse-Tools anhand von Schliffbildern ermittelt, die von der *Daimler AG* zur Verfügung gestellt wurden. Für die Dicke und die Frequenz ergibt sich eine Normalverteilung und die die Amplitude eine *Chi-Quadrat-Verteilung*. Hierbei wird angenommen, dass die anhand von 2D-Schliffbildern ermittelten Verteilungsfunktionen auf 3D-Mikrostrukturen übertragbar sind, was jedoch bei nicht konvexen Geometrien nur bedingt der Fall ist.

Der Algorithmus zur synthetischen Erstellung von 3D-Volumenelementen, die die Mikrostruktur von Gusseisen mit Lamellengraphit imitieren, lässt sich verbal folgendermaßen zusammenfassen: Bei der Erstellung der Simulationsgebiete werden einzelne Graphitpartikel nach und nach, in vielen Iterationsschritten, in ein Simulationsgebiet mit vordefinierter Größe eingefügt, bis der gewünschte Graphitvolumenanteil vorliegt. Während eines Iterationsschrittes werden zunächst die Orientierung, Länge, Breite, Dicke sowie die Amplitude und Frequenz der Wellung einer neuen Graphitlamelle mittels der Wahrscheinlichkeitsverteilungen bestimmt. Anschließend wird eine Position im Simulationsgebiet ermittelt, sodass keine Überschneidung sondern nur eine Berührung der neuen Graphitlamelle mit bereits im Simulationsgebiet vorhandenen Graphitpartikeln entsteht. Der Algorithmus terminiert, sobald der gewünschte Graphitvolumenanteil im Simulationsgebiet vorhanden ist.

Die Matrix des Gusseisens wird als rein perlitisch angenommen. Wie in Kapitel 3 beschrieben, ist Perlit ein heterogenes Material, das aus einer Vielzahl von Perlitkolonien besteht. Jede Kolonie setzt sich aus vielen abwechselnd angeordneten parallelen, dünnen Ebenen aus Ferrit und Zementit zusammen. In Langford [78] wurde gezeigt, dass die elastischen Eigenschaften von Ferrit und Zementit annähernd identisch sind. Hinsichtlich der plastischen Eigenschaften und der Festigkeit existieren jedoch enorme Unterschiede. Der lamellare Aufbau einer einzelnen Perlitkolonie, in Kombination mit den unterschiedlichen plastischen Eigenschaften und Festigkeiten von Ferrit und Zementit, resultiert in einem allgemein richtungsabhängigen Materialverhalten einer Kolonie. Für den Fall einer einachsigen mechanischen Belastung wurde in Peng et al. [103] nachgewiesen, dass das Verhalten einer einzelnen Perlitkolonie unabhängig davon ist, ob diese parallel oder senkrecht zu den Lamellenebenen beansprucht wird. Das bedeutet, dass

sich eine einzelne Perlitkolonie unter einachsiger mechanischer Belastung isotrop verhält. Da im Rahmen dieser Arbeit nur mechanische Simulationen mit makroskopisch einachsiger Belastung durchgeführt werden, wird die perlitische Matrix, auf Grundlage der Erkenntnisse von Peng et al. [103], idealisiert als homogen und isotrop modelliert, wie auch in [87, 107, 108, 98]. Die Simulationsstudie erfasst also ausschließlich den Einfluss einer sich ändernden Graphitausprägung auf die makroskopischen Eigenschaften und nicht den Einfluss einer sich ändernden Mikrostruktur des Perlits. Des Weiteren wird somit auch die Anisotropie der Wärmeleitfähigkeit von Perlitkolonien vernachlässigt. Gerechtfertigt wird dies dadurch, dass Perlit, verglichen mit Lamellengraphit, nur eine vernachlässigbar geringe Anisotropie der Wärmeleitfähigkeit aufweist.

Idealerweise sollten die verwendeten Simulationsgebiete sogenannten *repräsentativen Volumenelementen (RVE)* entsprechen. Unter RVE wird nach Hill [62] “*das kleinste Volumen, über das eine Messung durchgeführt werden kann, die einen für das Ganze (heterogene Material) repräsentativen Wert ergibt*” (freie Übersetzung) verstanden. Bei experimentellen makroskopischen Versuchen verhält sich Gusseisen mit Lamellengraphit isotrop. In einem Grauguss-RVE müsste also eine ausreichend große Anzahl an transversal isotropen Graphitpartikeln enthalten sein, sodass sich deren Anisotropie, makroskopisch betrachtet, statistisch eliminiert. Aufgrund der notwendigen hohen Anzahl an Graphitlamellen, um makroskopisch-isotropes Materialverhalten zu erhalten, kann die Simulationsstudie nicht auf repräsentativen Volumenelementen durchgeführt werden. Stattdessen werden, wie auch in Metzger und Seifert [87], statistische Volumenelemente (SVE) verwendet. Simulationsgebiete verhalten sich deshalb bei konstanter Gebietsgröße mit durchschnittlich größer werdenden Partikeln zunehmend makroskopisch anisotrop, da sich die Anisotropien bei sinkender Partikelanzahl weniger eliminieren.

Bei Graphitlamellen der Klasse IA2 können Aspektverhältnisse von Dicke zu Länge von bis zu $1/200$ auftreten [87]. Das entspricht bei einer Lamellendicke von $5\ \mu\text{m}$ einer Länge von $1000\ \mu\text{m}$. Jede Graphitlamelle muss aus numerischen Gründen eine Mindesthöhe von drei Voxeln besitzen, damit die Krümmung, infolge der Partikelwellung, hinreichend genau abgebildet wird. Aus dem Aspektverhältnis von $1/200$ einer Graphitlamelle und einer Mindesthöhe von drei Voxeln folgt somit im Extremfall eine Länge von 600 Voxeln eines einzigen Partikels. Es wären also Simulationsgebiete von mindestens $600\Delta x \times 600\Delta y \times 600\Delta z$ Voxeln notwendig, um dies darzustellen. Hinsichtlich des Rechenaufwandes ist dies nicht realisierbar. Das maximale Aspektverhältnis der Graphitpartikel in den erzeugten Simulationsgebieten wird daher auf $3/200$ begrenzt.

In Abb. 7.3 ist exemplarisch der 2D-Schnitt durch einen synthetisch erstellten *GG-15*-Werkstoff mit einem Graphitvolumenanteil von 10 v. – % gezeigt. Daneben, Abb. 7.3, ist das Schlibbild einer LKW-Bremsscheibe aus *GG-15 Cr Cu Nb HC* [115] abgebildet. Die beiden “Schlibbilder” stellen Ausschnitte der gleichen physikalischen Größe dar, $2730\ \mu\text{m} \times 2040\ \mu\text{m}$. Man erkennt, dass sich das synthetisch erstellte und experimentelle Schlibbild optisch sehr ähneln. Die charakteristischen Merkmale der Graphitpartikel, wie Längen, Dicken sowie die Amplituden und Frequenzen der Wellungen, werden durch das beschriebene Verfahren offenbar gut wiedergegeben. Einzig hinsichtlich der Anordnung der Graphitpartikel erkennt man einen signifikanten Unterschied. Dieser Unterschied ist jedoch, zumindest teilweise, dadurch zu erklären, dass der bis zu maximal 25 v. – % erlaubte Anteil an Typ IB2- bis IB5-Graphit in *GG-15 Cr Cu Nb HC* nicht durch den beschriebenen Algorithmus berücksichtigt wird. Es sei angemerkt, dass aus einer Ähnlichkeit der “Schlibbilder” nicht zwingend eine Ähnlichkeit der dahinter-



Abbildung 7.2: “Schliffbild” eines synthetisch erstellten *GG-15*-Werkstoffs mit einem Graphitvolumenanteil von 10 v. - %.

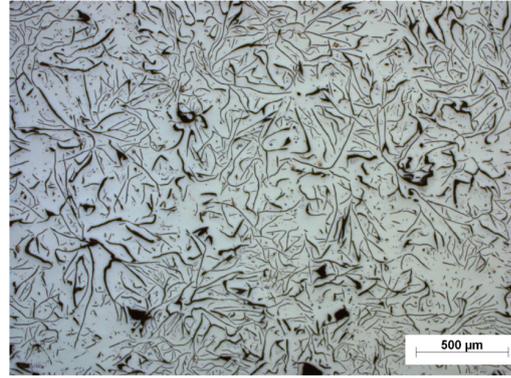


Abbildung 7.3: Schliffbild einer LKW-Bremsscheibe aus einem *GG-15*-Werkstoff [115].

steckenden 3D-Mikrostruktur folgt. Sobald die Form der Graphitpartikel nicht konvex ist, ist die Rekonstruktion ihrer 3D-Form mit Hilfe eines Schliffbildes für unregelmäßige und unsymmetrische Partikel nämlich nahezu unmöglich [141].

In Abb. 7.4 sind von *links* nach *rechts* künstlich erzeugte, exemplarische Raumbilder von statistischen Volumenelementen der Graphitausprägungen *GG-15* und IA2 bis IA5, mit jeweils einem Graphitvolumenanteil von 10 v. - %, dargestellt. Es ist deutlich zu erkennen, dass die Anzahl an Graphitlamellen in den Simulationsgebieten von IA2 nach IA5 bei gleicher Graphitvolumenfraktion zunimmt, da die durchschnittliche Größe der Graphitpartikel abnimmt. Alle gezeigten Volumenelemente besitzen die gleiche physikalische Größe von $1,25\text{ mm} \times 1,25\text{ mm} \times 1,25\text{ mm}$. Für die Simulationsstudie werden statistische Volumenelemente dieser Größe genutzt. Ein Simulationsgebiet besteht aus $250\Delta x \times 250\Delta y \times 250\Delta z$ Voxeln, wobei ein Voxel die physikalische Größe von $5\text{ }\mu\text{m} \times 5\text{ }\mu\text{m} \times 5\text{ }\mu\text{m}$ besitzt. Zur räumlichen Diskretisierung der Simulationsgebiete wird ein äquidistantes, orthogonales Gitter verwendet. Für die Variation der Graphitausprägungen, entsprechend der *DIN EN ISO 945-1*-Klassifizierung, wird ausschließlich die Normalverteilung der Längen und Breiten angepasst. Die Parameter der Wahrscheinlichkeitsverteilungsfunktionen für die Graphitlamellendicke, -amplitude und -frequenz sind für alle Graphitausprägungen konstant. Sie wurden mittels einer Weiterentwicklung des in [116] beschriebenen Analyse-Tools anhand eines Schliffbildes des *GG-15 Cr Cu Nb HC*-Werkstoffes ermittelt. Somit existiert keine echte Selbstähnlichkeit zwischen den Simulationsgebieten, da sich z.B. das Aspektverhältnis von Dicke zu Länge ändert. Dies ist wichtig, da die unterschiedlichen mechanischen Simulationsergebnisse rein auf unterschiedlichen Mikrostrukturen und nicht auf Skaleneffekten basieren. Bei Simulationsgebieten der gleichen Graphitausprägung, also z.B. IA2, jedoch mit unterschiedlichem Graphitvolumenanteil, wird folgendermaßen verfahren: Jedes Simulationsgebiet einer Graphitausprägung enthält exakt die gleichen Graphitpartikel, wie ein SVE der gleichen Graphitausprägung mit einem geringeren Volumenanteil. Ein höherer Volumenanteil wird dadurch erzielt, dass auf Basis der Mikrostruktur eines Volumenelements mit geringerem Graphitvolumenanteil so lange zusätzliche Graphitlamellen hinzugefügt werden, bis der größere zu erzielende Graphitvolumenanteil erreicht ist. Dieses Vorgehen ist notwendig, da keine repräsentativen Volumenelemente verwendet werden. Bei der Untersuchung des Einflusses eines wachsenden Graphitvolumenanteils ist somit garantiert, dass die Änderungen der makroskopischen Materialeigenschaften

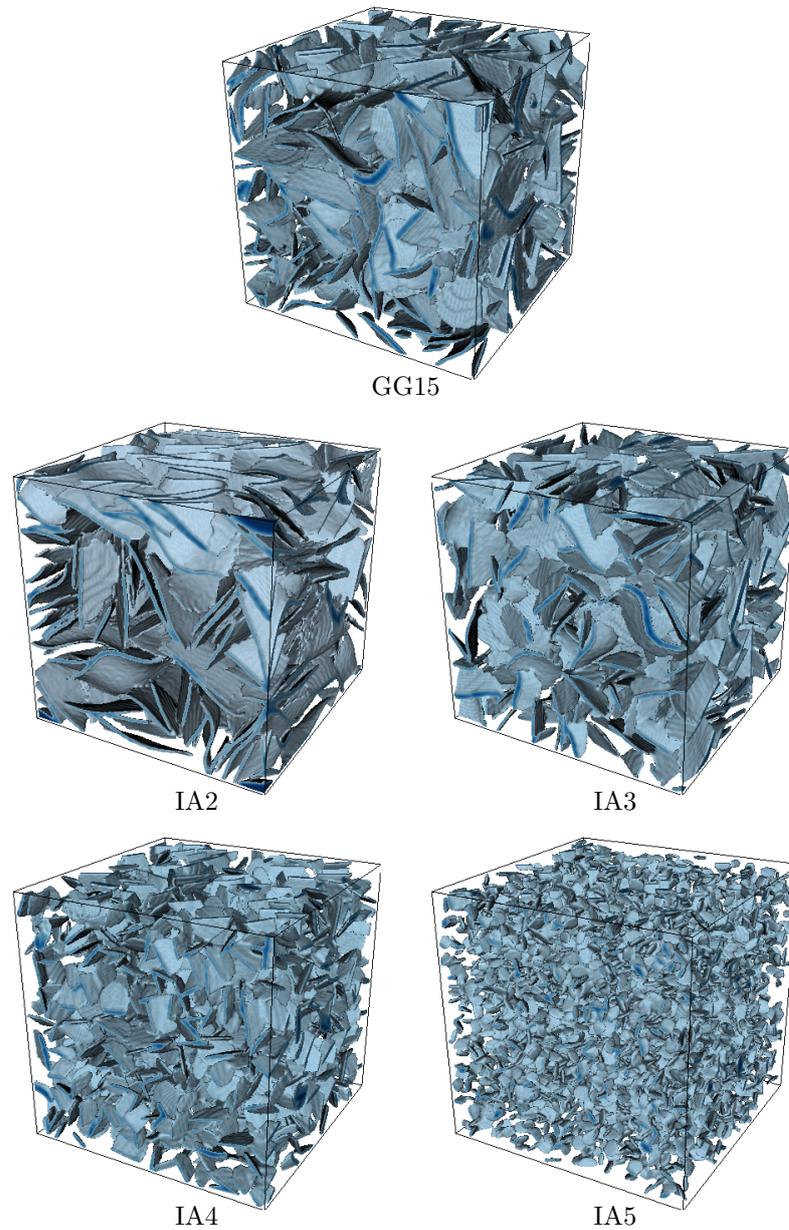


Abbildung 7.4: Raumbilder der Graphitmorphologie von statistischen Volumenelementen unterschiedlichen Graphitausprägungen. Die Simulationsgebiete besitzen eine räumliche Ausdehnung von $1,25\text{ mm} \times 1,25\text{ mm} \times 1,25\text{ mm}$, bei einer räumlichen Diskretisierung mittels Voxel der Größe $5\text{ }\mu\text{m} \times 5\text{ }\mu\text{m} \times 5\text{ }\mu\text{m}$, und beinhalten einen Graphitvolumenanteil von 10 v. - %.

nur aus den unterschiedlichen Graphitvolumenanteilen resultierten und nicht aus einer Differenz der Basismikrostruktur.

Neben dem erwähnten “phänomenologischen” Vorgehen zur synthetischen Erstellung der Graphitmikrostruktur, anhand von Verteilungsfunktionen, ist auch eine Generierung der Werkstoffmikrostruktur, mittels Erstarrungssimulationen, beispielsweise unter Anwendung der Phasenfeldmethode, denkbar.

7.2 Modellformulierung

Im folgenden Abschnitt werden die angewendeten mikroskopischen konstitutiven mechanischen und thermischen Kontinuumsmodelle eingeführt und die verwendeten Materialparameter vorgestellt. Es wird zwischen den Modellen für die perlitische Matrix und die der Graphitlamellen unterschieden. Die getroffenen Annahmen basieren auf der Philosophie Ockhams, “Die einfachste Lösung ist die beste Lösung”. Konkret bedeutet dies, dass mehrere vereinfachende Annahmen getroffen werden, um die Komplexität der physikalischen Realität handhabbar zu machen und einen vertretbaren Rechenaufwand zu ermöglichen. Jede Annahme ist durch plausible Gründe gerechtfertigt. Bei der mechanischen Modellbeschreibung dieses Kapitels werden nur die zusätzlichen Modellaspekte hinsichtlich der bereits in Kapitel 4 eingeführten kontinuumsmechanischen Grundlagen vorgestellt. Alle nachfolgend nicht mehr explizit eingeführten kinematischen, kinetischen und konstitutiven Beziehungen sind in Kapitel 4 enthalten. In Kapitel 6 sind die relevanten Modelle der Wärmeleitung, zur Berechnung der makroskopischen Wärmeleitfähigkeiten aufgeführt.

Es werden kleine Deformationen angenommen. Das heißt, dass nur makroskopische Dehnungen bis 2% bei einachsigen Zug- und Druckversuchen betrachtet werden sollten, um signifikante kinematische Fehler zu vermeiden. Dieser Grenzwert der makroskopischen Dehnung wird bei allen durchgeführten Simulationen eingehalten. Dennoch können in den verwendeten Grauguss-SVE lokale Bereiche mit höheren Verformungen auftreten, welche die mathematischen Voraussetzungen zur Anwendung des geometrisch linearisierten Verzerrungstensors nicht erfüllen. Dies geschieht, da unter Zugbelastung, bereits bei makroskopischen Dehnungen $< 2\%$, einige Graphitlamellen als Mikrorisse fungieren und daraus eine Störung des Kraftflusses resultiert, dieses Phänomen ist in Kapitel 3 näher erläutert. An den scharfen Flanken der Graphitlamellen entstehen aufgrund von Kerbwirkungen Spannungskonzentrationen [54] mit Verzerrungen, die nicht mehr in den Bereich der kleinen Deformationen fallen. Die Vernachlässigung der auftretenden geometrischen Nichtlinearitäten ist einer Minimierung der Rechenkosten geschuldet und vertretbar, da große Verzerrungen nur in einem kleinen Bereich der Simulationsgebiete auftreten.

Die Durchführung der Simulationsstudie zur Berechnung der makroskopischen mechanischen Eigenschaften und der Wärmeleitfähigkeit erfordert adäquate Materialparameter der mikroskopischen Modelle der perlitischen Matrix und der Graphitlamellen. Um die exakten Materialparameter zu erhalten, wären Materialtests der einzelnen Materialkomponenten, wie z.B. mikro- und nanoskalige Zugprüfungen, notwendig, was aber aufgrund der dafür notwendigen, aber nicht vorhandenen, experimentellen Vorrichtungen nicht möglich ist. Eine weitere Möglichkeit, genaue Materialparameter zu erhalten, besteht darin, die Parameter der konstitutiven Gleichungen an experimentelle makroskopische Untersuchungen zu fitten. So wurde beispielsweise in Norman und

Calmunger [98] verfahren. Hierbei wurden die Modellparameter der plastischen Matrix an experimentell ermittelte Hystereseschleifen angepasst und die elastischen Materialparameter der Graphitpartikel der Literatur entnommen. In Metzger und Seifert [87] wurden die plastischen Parameter der Modelle so angepasst, dass die numerisch erzeugten Spannungs-Dehnungs-Kennlinien mit experimentellen Kennlinien bei Druckbelastung übereinstimmen. Ein solches Vorgehen, bei dem die Materialparameter der mikroskopischen Modelle direkt an makroskopische Experimente gefittet werden, ist nur aussagekräftig, wenn die verwendeten Simulationsgebiete die realen Mikrostrukturen der experimentellen Probekörper exakt widerspiegeln und zudem repräsentative Volumenelemente sind. Ist dies nicht der Fall, kann ein abweichendes Materialverhalten zwischen experimentellen und numerischen Ergebnissen nicht eindeutig auf falsche Materialparameter oder eine abweichende Mikrostruktur zwischen einem realen Werkstoffes und einem Simulationsgebiet zurückgeführt werden. Als Materialparameter werden daher ausschließlich Literaturwerte verwendet.

Als Simulationsergebnisse in Diagrammen werden nachfolgend nur makroskopische Größen der SVE, berechnet nach Gl. (4.80), präsentiert. Zur Berechnung der effektiven Wärmeleitfähigkeit wird gleich verfahren wie in August et al. [10], jedoch mit einem heterogenen Wärmestrom, der die anisotrope Wärmeleitfähigkeit des Graphits berücksichtigt.

7.2.1 Mechanisches und thermisches Modell für Perlit

In der werkstoffspezifischen Lieferantenvorschrift *DBL 4407* ist die Matrixstruktur des Gusseisenwerkstoffes *GG-15 Cr Cu Nb GC* als gleichmäßiger, feiner, dichtstreifiger Perlit mit eingelagerten Nb-Karbiden, frei von Ledeburit und einem maximalen Ferritgehalt von 5 v. – % festgelegt. Der Volumenanteil an Niob-Karbiden und Ferrit wird nachfolgend nicht berücksichtigt. Die Matrix des Gusseisenwerkstoffes wird idealisiert als homogenes perlitisches Material mit isotropen Materialeigenschaften modelliert. Siehe Abschnitt 7.1 zur Rechtfertigung dieser Vereinfachungen. Das mechanische Verhalten der perlitischen Matrix ist durch das in Kapitel 4.4.2 eingeführte ratenunabhängige J_2 -Plastizitätsmodell mit nicht linearer Verfestigung gegeben. Die kinematische Verfestigung wird nicht berücksichtigt, da sich die initiale Belastungsrichtung während der numerischen Experimente nicht ändert.

Bei Raumtemperatur, $\theta = 20^\circ\text{C}$, gilt ein Standardwert für Stähle von $E^{\text{m,RT}} = 210\text{ GPa}$ als E-Modul. Die Querkontraktionszahl $\nu^{\text{m}} = 0,3$ ist temperaturunabhängig [32]. Von der *Daimler AG* wurden bei Raumtemperatur mehrere vertrauliche Druckexperimente zur Bestimmung der Fließgrenze des *GG-15-Cr-Cu-Nb-GC*-Werkstoffes durchgeführt. Dabei hat sich gezeigt, dass sich die durchgeführten Druckexperimente unter linear elastischer Belastung stark ähneln und annähernd gleiche Fließgrenzen besitzen. Alle Materialproben wurden aus Bremsscheiben des Werkstoffes *GG-15 Cr Cu Nb GC* gefertigt. Dabei traten bei einem annähernd konstanten Graphitvolumenanteil verschiedene Graphitausprägungen der Materialproben auf, abhängig davon, von welcher Position des Bremsscheibenquerschnitts (Reibfläche, Bremsscheibenhals oder Flansch) sie entnommen wurden. Hierbei ist die Variation der Graphitmikrostrukturen unter anderem auf verschiedenen Abkühlraten zurückzuführen. Unter plastischer Beanspruchung wichen die Fließkurven der Druckexperimente stark voneinander ab, was eine Bestimmung der Verfestigungsparameter und der Druckgrenze, anhand der Druckexperimente, schwierig macht. Die Tatsache, dass die Spannungs-Dehnungs-Kurven bei linear elastischer Belas-

tung nahezu unabhängig von der Graphitausprägung sind, führt zu dem Schluss, dass das mechanische Materialverhalten von Gusseisen mit Lamellengraphit bei linear elastischer Beanspruchung maßgeblich von der perlitischen Matrix definiert ist. Als Folge der Zug-Druck-Spannungssymmetrie von reinem perlitischem Stahl wird die Druckgrenze deshalb bei Raumtemperatur als Fließgrenze der perlitischen Matrix verwendet, $\sigma_{y,0}^{m,RT} = 230 \text{ MPa}$. Zur Definition der Modellparameter für die sättigende nicht lineare plastische Verfestigung (4.69) wird die Veröffentlichung von Allain und Bouaziz [2] herangezogen. Darin ist ein empirisches Gesetz zur Beschreibung der plastischen Verfestigung von reinem Perlit in Abhängigkeit vom interlamellaren Abstand zwischen Ferrit und Zementit enthalten, das eine große Übereinstimmung mit experimentellen Ergebnissen aufweist. Eine Erkenntnis von Allain und Bouaziz [2] ist, dass der interlamellare Abstand keinen Einfluss auf die Sättigungsrate hat, sondern lediglich die Fließkurven translatorisch bzgl. der Fließgrenze verschiebt. Die in Allain und Bouaziz [2] aufgeführte Zugfestigkeit und der Verfestigungsparameter dienen der Matrix bei Raumtemperatur als Sättigungsspannung, $\sigma_{\infty}^{m,RT} = 772 \text{ MPa}$, und Sättigungsrate, $\eta^{m,RT} = 19 \text{ GPa}$. Da die Festigkeit und Zähigkeit von perlitischem Stahl stark von dessen Feinstreifigkeit abhängt, ist es wichtig zu betonen, dass die Wahl der Matrixparameter mit einer Ungewissheit behaftet ist.

Alle bisher eingeführten mechanischen Materialparameter der perlitischen Matrix gelten bei Raumtemperatur. Durch die Simulationsstudie wird ein Temperaturbereich von $20 \text{ }^{\circ}\text{C}$ bis $750 \text{ }^{\circ}\text{C}$ abgedeckt. Die Ermittlung der Materialparameter bei höheren Temperaturen ist nachfolgend beschrieben.

Stahlkonstruktionen haben im Bauwesen bezüglich ihrer Tragfähigkeit eine hohe Sicherheitsrelevanz. Dies trifft insbesondere auf deren Auslegung gegen Versagen bei Temperaturen oberhalb der Raumtemperatur zu, um fatale Zwischenfälle bei Bränden zu verhindern. Aus diesem Grund gibt es verlässliche Normen und Leitfäden, die Änderung der mechanischen Parameter von Baustahl in Abhängigkeit von der Temperatur, bezogen auf die Raumtemperatur, beschreiben. Gängige Normen sind in Europa der Eurocode [43] und in den USA - on Fire Protection [99]. Temperaturabhängige Änderungen der unterschiedlichen Materialparameter sind dabei durch Abminderungsfaktoren gegeben. Die Faktoren beschreiben das Verhältnis einer bestimmten Größe bei erhöhter Temperatur, in Bezug auf deren Wert bei Raumtemperatur. Zwischen den aufgeführten Quellen bestehen große Unterschiede bezüglich der Abminderungsfaktoren. Untersuchungen von Kodur et al. [73] haben gezeigt, dass die Abminderungsfaktoren für das E-Modul und die Fließgrenze von Baustahl nach dem Eurocode [43] besser die Realität abbilden als die äquivalenten Faktoren in on Fire Protection [99]. Für die Simulationsstudie werden die in Tabelle 7.2 enthaltenen Werte, entsprechend Eurocode [43], als Abminderungsfaktoren verwendet. Falls im Eurocode [43] für eine bestimmte Temperatur, bei der Simulationen durchgeführt werden, kein expliziter Abminderungsfaktor angegeben ist, werden hinsichtlich der Temperatur θ linear interpolierte Abminderungsfaktoren verwendet. Der Abminderungsfaktor der E-Moduli, $k_E(\theta)$, wird auf das E-Modul der perlitischen Matrix bei Raumtemperatur angewendet, $E^m(\theta) = k_E(\theta)E^{m,RT}$, und der Abminderungsfaktor der Fließgrenze, $k_f(\theta)$, auf die Fließgrenze bei Raumtemperatur, $\sigma_{y,0}^m(\theta) = k_f(\theta)\sigma_{y,0}^{m,RT}$. Die Temperaturabhängigkeit der Sättigungsspannung, $\sigma_{\infty}^m(\theta)$, und Sättigungsrate, $\eta^m(\theta)$, folgt dem in Bonora und Ruggiero [20] beschriebenen Vorgehen. Darin wird von der Annahme der Selbstähnlichkeit jeder Fließkurve, bezogen auf das Materialverhalten bei Raumtemperatur, ausgegangen, wobei die Fließspannung, $\sigma_y^{m,RT}$, bezüglich der temperaturabhängigen

Tabelle 7.2: Temperaturabhängige mechanische Materialparameter der perlitischen Matrix. Temperatur θ ; Abminderungsfaktor der E-Moduli k_E ; E-Modul E^m ; Abminderungsfaktor der Fließgrenze k_f ; Fließgrenze $\sigma_{y,0}^m$; Sättigungsspannung σ_∞^m ; Sättigungsrate η^m .

θ [°C]	k_E	E^m [GPa]	k_f	$\sigma_{y,0}^m$ [MPa]	σ_∞^m [MPa]	η^m [GPa]
20	1,0	210,0	1,0	230,0	772,0	19,0
150	0,95	199,5	1,0	230,0	772,0	19,0
300	0,8	168,0	1,0	230,0	772,0	19,0
450	0,65	136,5	0,89	204,7	687,1	19,0
600	0,31	65,1	0,47	108,1	362,8	19,0
750	0,11	23,1	0,17	39,1	131,2	19,0

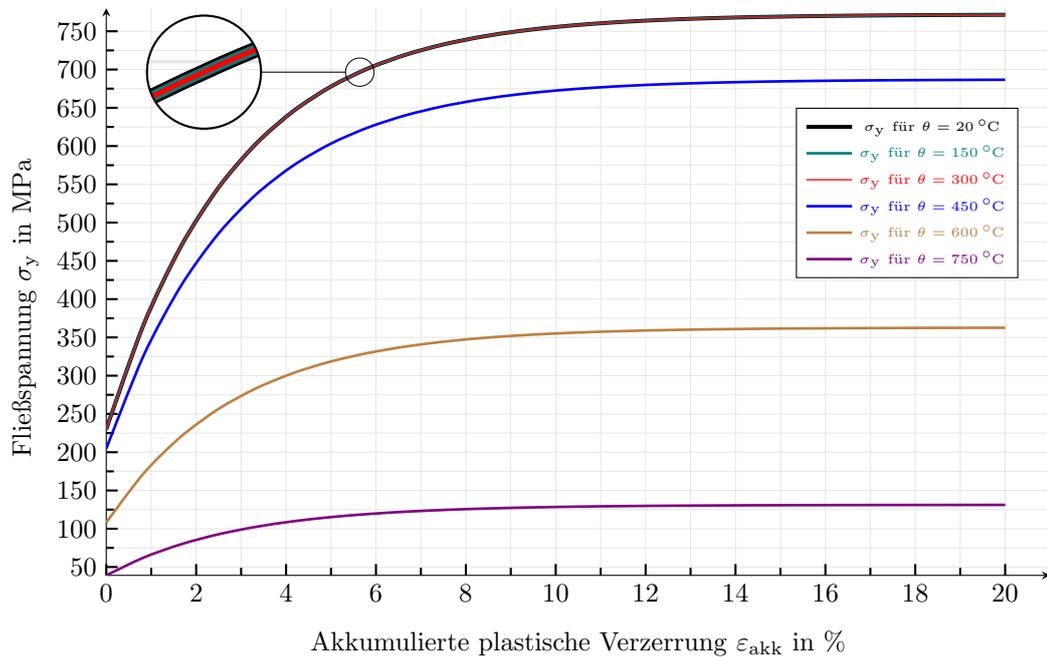


Abbildung 7.5: Temperaturabhängige Fließkurven der perlitischen Matrix. Ausgehend von Eurocode [43] sinken die E-Moduli und die Fließgrenzen bei höheren Temperaturen. Alle Fließkurven sind entsprechend Bonora und Ruggiero [20] dem Materialverhalten bei Raumtemperatur selbstähnlich.

Fließgrenze skaliert ist. In Abb. 7.5 sind die Fließkurven bei unterschiedlichen Temperaturen dargestellt.

Die Wärmeleitfähigkeit von Perlit besitzt eine schwache transversale Isotropie bzgl. der Orientierung der Ferrit- und Zementitlamellen einer einzelnen perlitischen Kolonie. Verglichen mit der Anisotropie von Graphit ist diese Richtungsabhängigkeit jedoch vernachlässigbar klein und wird deshalb nicht modelliert. In Abb. 7.6 ist die *temperaturabhängige isotrope Wärmeleitfähigkeit der perlitischen Matrix*, λ^m , dargestellt. Die Parameter entsprechen typischen Werten eines eutektoiden Fe-C-Systems, mit einem Kohlenstoffmassanteil von 0,8 m. – %, entnommen aus Helsing und Grimvall [58]. Als *temperaturabhängige spezifische Wärmekapazität der perlitischen Matrix*, c^m , werden

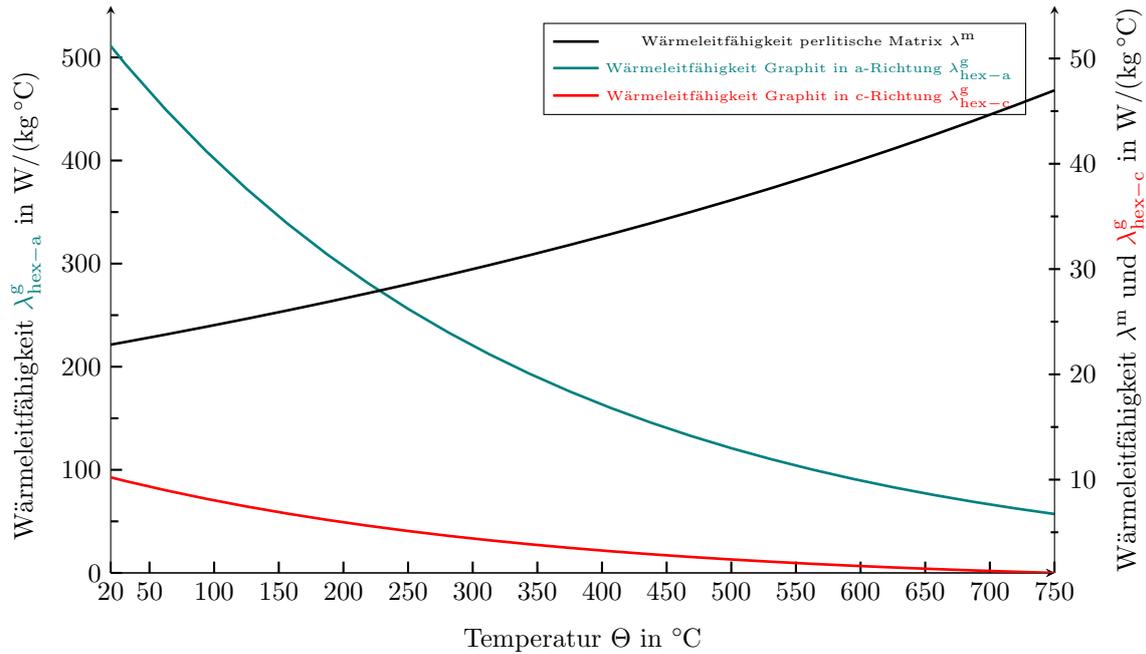


Abbildung 7.6: Temperaturabhängige Wärmeleitfähigkeiten. Idealisierte isotrope Wärmeleitfähigkeit der perlitischen Matrix, λ^m , nach Helsing und Grimvall [58]. Komponenten der transversal isotropen Wärmeleitfähigkeit der Graphitlamellen, $\lambda_{\text{hex-a}}^g$ und $\lambda_{\text{hex-c}}^g$, nach Helsing und Grimvall [58].

Werte aus Eurocode [43] für Stahl verwendet, siehe Abb. 7.7. Es sei angemerkt, dass die Bandbreite an spezifischen Wärmekapazitäten für metallische Werkstoffe in der Literatur sehr groß ist. Für einen Überblick, siehe zum Beispiel Umino [140]. Die *Masendichte der perlitischen Matrix* hat den Wert $\rho^m = 7838 \text{ kg}/\text{m}^3$ [58] und ist temperaturunabhängig.

7.2.2 Mechanisches und thermisches Modell für die Graphitlamellen

Die in Kapitel 3 beschriebene Kristallstruktur von Graphitlamellen führt zu einer ausgeprägten Anisotropie derer mechanischer Eigenschaften und der Wärmeleitfähigkeit [30, 65, 107]. Werden die kovalenten Verbindungen innerhalb der Basalebene belastet, weisen die Lamellen wesentlich höhere mechanische Eigenschaften auf, verglichen mit einer Belastung der schwachen Van-der-Waals-Bindungen zwischen den Ebenen [30]. Auch die thermische Leitfähigkeit ist innerhalb der Basalebene deutlich größer als orthogonal dazu. Oft wird Lamellengraphit vereinfacht als isotrop angenommen; siehe zum Beispiel Metzger und Seifert [87]. Pina et al. [108] haben jedoch anhand von *In-situ*-Mikrozugprüfungen und numerischen Studien gezeigt, dass die Graphitanisotropie einen großen Einfluss auf das elastisch-plastische Verhalten von Grauguss hat. Es wurde zudem geschlossen, dass ein numerisches Modell mit anisotrop modelliertem Graphit das Verhalten von Gusseisen quantitativ besser wiedergibt als ein Modell mit isotropem Graphit. Auf Grundlage dieser Tatsache und unter Berücksichtigung seines atomaren Aufbaus wird Lamellengraphit als transversal isotropes Material modelliert, das sich linear-elastisch verhält, wie auch in den Arbeiten [107, 108, 116, 98]. Die Spannungen sind durch das Hooke'sche Gesetz gegeben, wobei die Kristallorientierungen

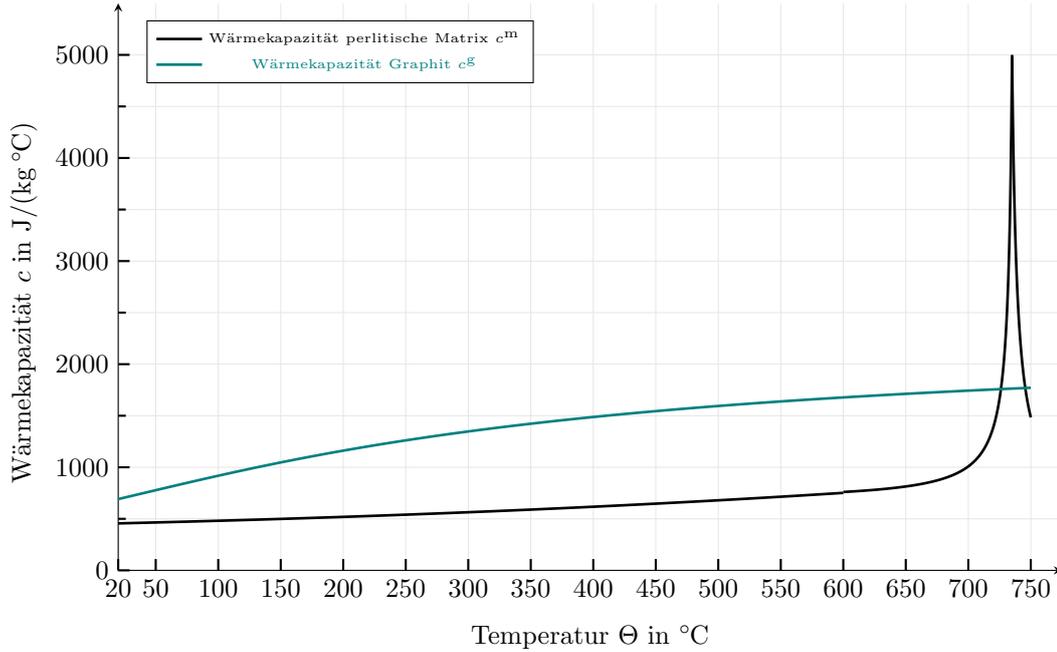


Abbildung 7.7: Temperaturabhängige Wärmekapazitäten der perlitischen Matrix [43] und der Graphitlamellen [58].

der Graphitlamellen durch im x, y, z -Referenzkoordinatensystem rotierte transversal isotrope Steifigkeitstensoren berücksichtigt werden. Die Orientierungen der Graphitlamellen werden bei der Erstellung der Simulationsgebiete gespeichert und zur Rotation der Steifigkeitstensoren jeder einzelnen Graphitlamelle verwendet, siehe hierzu 7.1.

In der Literatur herrscht weitestgehend Konsens, dass die Zug-Druck-Spannungsasymmetrie von Grauguss eine Konsequenz des Lamellengraphits ist [54, 144, 87, 98]. Wobei in Bonora und Ruggiero [20] darauf hingewiesen, dass es zu kurz gegriffen ist, Graphit als permanenten Mikroriss zu betrachten. Das makroskopische Phänomen wird dabei durch zwei mögliche mesoskopische Prozesse erklärt. Zum einen als Folge von Mikrorissbildung innerhalb der Graphitpartikel und/ oder durch Ablösung des Graphit-Matrix-Übergangsbereichs. Für die beiden mesoskopischen Prozesse gibt es unterschiedliche Modellierungsansätze. In [98] wird die Zug-Druckabhängigkeit überwiegend auf Ablösevorgänge zurückgeführt und es wird ein einfaches in ABAQUS verfügbares Schädigungskriterium verwendet, um das sukzessive Ablösen zu beschreiben. Durch die Mikrorissbildung, die im Wesentlichen innerhalb der Graphitlamellen auftritt, wird die Zug-Druckabhängigkeit in der experimentellen Arbeit von [54] erklärt.

Um die Zug-Druckabhängigkeit des Graphits zu modellieren, wird an dieser Stelle ein *phänomenologischer Ansatz* angewendet, bei dem ein Gebiet, Ω , mit $N \in \mathbb{N}$ Graphitlamellen betrachtet wird. Der Ansatz besteht darin, den transversal isotropen Steifigkeitstensor eines Graphitpartikels \mathbf{C}^α , mit $\alpha \in \{1, \dots, N\}$, durch skalare Multiplikation mit einer stetigen Funktion, $d^\alpha(\varepsilon_{\text{vol}}^\alpha) : \mathbb{R} \rightarrow (d_{\text{min}}, 1)$ mit $d_{\text{min}} \in (0, 1]$, der Form

$$d^\alpha(\varepsilon_{\text{vol}}^\alpha)(t) = \frac{1 - d_{\text{min}}}{2} \left(1 + \tanh \left(\frac{-4\varepsilon_{\text{vol}}^\alpha(t)}{\varepsilon_{\text{vol}}^{\text{krit}}} \right) \right) + d_{\text{min}} \quad (7.4)$$

zu degradieren. Der obere Index α dient der Zuordnung der *Degradierungsfunktion* zu einer bestimmten Graphitlamelle, die im Teilgebiet $\mathfrak{B}^\alpha \subset \Omega$ existiert. Jede Degradierungsfunktion hat einen kontinuierlichen Übergang zwischen dem *Minimalwert* d_{\min} und *Eins* und ist von der *effektiven Volumenänderung eines Graphitpartikels*,

$$\varepsilon_{\text{vol}}^\alpha(t) = \frac{1}{V^{\mathfrak{B}^\alpha}} \int_{\mathfrak{B}^\alpha} \frac{\text{Spur}(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}))}{3} dV, \quad (7.5)$$

abhängig, siehe Gl. (4.14). Ihren Maximalwert nimmt die Degradierungsfunktion für $\varepsilon_{\text{vol}}^\alpha = -\varepsilon_{\text{vol}}^{\text{krit}} \rightarrow d^\alpha(-\varepsilon_{\text{vol}}^{\text{krit}}) \approx 1$ und ihren Minimalwert d_{\min} für $\varepsilon_{\text{vol}}^\alpha = \varepsilon_{\text{vol}}^{\text{krit}} \rightarrow d^\alpha(\varepsilon_{\text{vol}}^{\text{krit}}) \approx d_{\min}$ an. Der Schwellwert der Volumenänderung $\varepsilon_{\text{vol}}^{\text{krit}}$ definiert die Übergangsbreite zwischen dem Minimal- und Maximalwert der Degradierungsfunktion. Aufgrund der Tatsache, dass Zugbeanspruchungen durch positive Volumenänderungen gekennzeichnet sind, gilt für den *Schwellwert der Volumenänderung* $\varepsilon_{\text{vol}}^{\text{krit}} \in \mathbb{R}_{>0}$. Eine beispielhafte Darstellung des Verlaufs der Degradierungsfunktion ist in Abb. 7.8 gezeigt. Die Bedeutungen der verschiedenen Funktionsparameter sind darin ersichtlich.

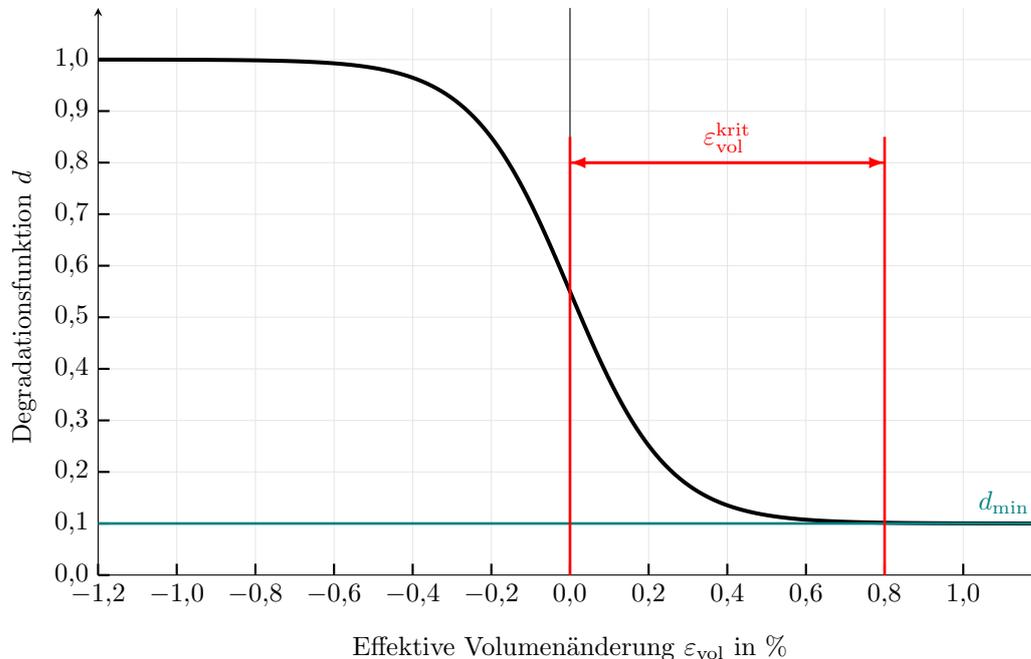


Abbildung 7.8: Degradierungsfunktion der Graphitsteifigkeiten. Schwellwert der Volumenänderung $\varepsilon_{\text{vol}}^{\text{krit}}$, Minimalwert der Degradierungsfunktion d_{\min} .

Bei der Deformation eines Graphitpartikels spielen verschiedene Einflussfaktoren eine Rolle: zum einen die Form des Partikels und zum anderen seine Orientierung, in Bezug auf die Belastungsrichtung [108]. Mittels des eingeführten Modells werden alle diese Einflussfaktoren berücksichtigt. Mit diesem Ansatz ist es nicht notwendig, zwischen den möglichen mesoskopischen Versagensmechanismen der Graphitlamellen, nämlich der Mikrorissbildung und der Grenzflächenablösung, zu unterscheiden. Außerdem ist es überflüssig, Riss-schließungsprozesse zu modellieren, da diese im vorgestellten Verfahren intrinsisch enthalten sind [87]. Die Degradierung der Graphitsteifigkeit, in Abhängigkeit von der effektiven Volumenänderung eines Graphitpartikels, ähnelt dem in Metzger und Seifert [87] beschriebenen Modell.

Tabelle 7.3: Mechanische Materialparameter der Graphitlamellen

	Pascal et al. [102]	Bosak et al. [21]	Blakslee et al. [16]
C_{11}^g in MPa	1126,0	1109,0	1060,0
C_{12}^g in MPa	200,0	139,0	180,0
C_{13}^g in MPa	39,5	0,0	15,0
C_{33}^g in MPa	40,7	38,7	36,5
C_{44}^g in MPa	4,51	5,0	0,18
C_{66}^g in MPa		485,0	

Es existiert eine Vielzahl an Publikationen, die sich mit der Bestimmung der linear-elastischen Parameter von Graphit auseinandersetzen. Obwohl die Materialparameter dabei voneinander abweichen, liegen sie doch nahe beieinander, siehe zum Beispiel Blakslee et al. [16], Kelly [70], Bosak et al. [21] und Pascal et al. [102] in Tabelle 7.3. In dieser Arbeit besitzen die Graphitlamellen die mechanischen Eigenschaften von monokristallinem Graphit, wie von Bosak et al. [21] ermittelt. Untersuchungen von Kelly [70] haben gezeigt, dass die Temperaturabhängigkeit der Komponente C_{33} des transversal isotropen Steifigkeitstensors von Graphit im betrachteten Temperaturbereich von 20 °C bis 750 °C vernachlässigbar gering ist. Deshalb werden die elastischen Materialparameter von Graphit nachfolgend, wie auch in Pina et al. [107], als temperaturunabhängig angenommen. Der transversal isotrope Steifigkeitstensor einer spezifischen Graphitlamelle ist im partikeleigenen $\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}$ -Koordinatensystem so aufgebaut, dass die dritte Hauptmaterialrichtung orthogonal zu den Längsachsen (c -Richtung des hexagonalen Kristallgitters) der Graphitlamelle verläuft.

Aus der Vielzahl an publizierten Wärmeleitfähigkeiten für Graphit, siehe Holmgren [65] für einen Überblick, wurden die temperaturabhängigen Parameter nach Helsing und Grimvall [58] für die Simulationsstudie ausgewählt, siehe Abb. 7.6. Die Komponente in a -Richtung des hexagonalen Kristallgitters der transversal isotropen Wärmeleitfähigkeit von Graphit, $\lambda_{\text{hex-a}}^g$, ist, verglichen mit der Wärmeleitfähigkeit in c -Richtung, $\lambda_{\text{hex-c}}^g$, bis zu einer Größenordnung höher [65]. Zur Berücksichtigung der Kristallorientierung einer Graphitlamelle wird deren transversal isotrope Wärmeleitfähigkeit in das x, y, z -Referenzkoordinatensystem transformiert, wie es in Kapitel 6 erläutert ist. Die Massendichte der Graphitpartikel ist temperaturunabhängig, $\rho^g = 2200 \text{ kg/m}^3$ [58].

7.3 Mechanische Simulationen

7.3.1 Kapitelspezifische Kernpunkte der Numerik und des Simulationsaufbaus

Zur räumlichen Diskretisierung der Simulationsgebiete wird ein äquidistantes, orthogonales Gitter verwendet.

Bei allen mechanischen Experimenten handelt es sich um einachsige Zug- bzw. Druckversuche an statistischen Volumenelementen. In Belastungsrichtung, die stets parallel zu einer Achse des x, y, z -Referenzkoordinatensystems verläuft, wird als mechanische Randbedingung auf beiden Seiten des Simulationsgebietes eine orthogonale Verschiebung aufgeprägt, die tangentialen Verschiebungen frei zulässt. In die zwei anderen Raum-

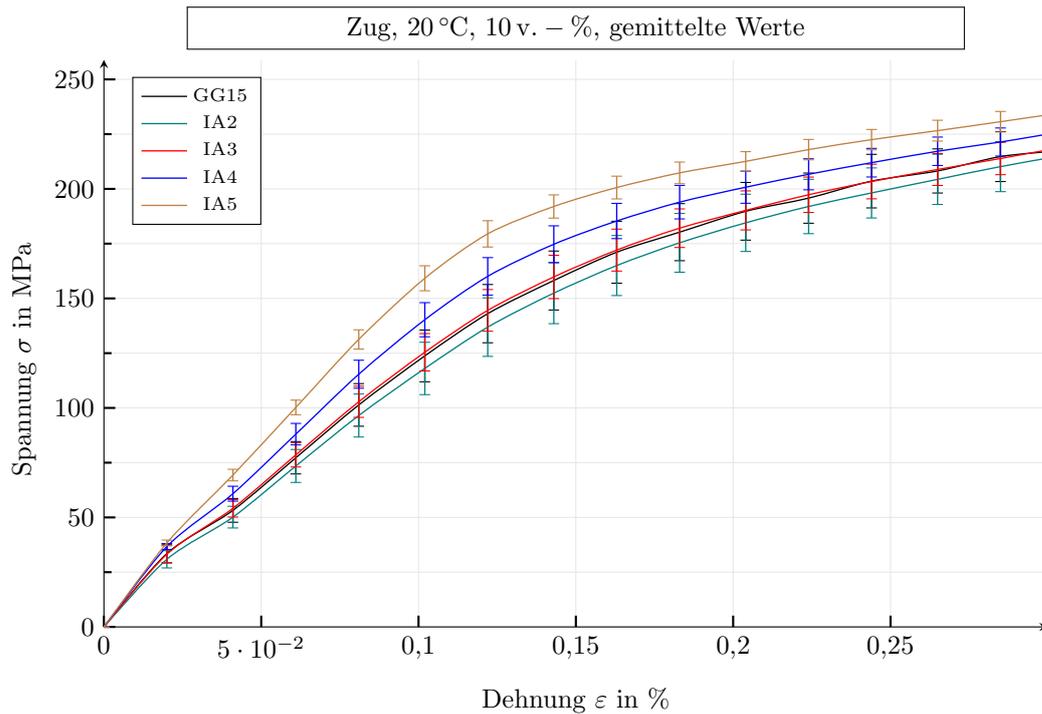


Abbildung 7.9: Einfluss der Graphitausprägung auf Anisotropie bei konstanter Gebietsgröße und gleichem Graphitvolumenanteil. Gezeigt sind die über jeweiliges drei Varianten einer Graphitausprägung gemittelten, makroskopischen Spannungs-Dehnungs-Kennlinien. Die entsprechenden Standardabweichungen der verschiedenen Graphitausprägung sind als Fehlerbalken gegeben.

richtungen ist jeweils eine Seite des Simulationsgebietes spannungsfrei und die gegenüberliegende Seite besitzt eine orthogonale Verschiebung gleich Null, wobei tangentielle Verschiebungen möglich sind. Durch die beschriebene Randbedingung sind Querkontraktionen ohne Spannungsbeitrag möglich, und es liegt bei elastischer Beanspruchung ein einachsiger Spannungszustand vor.

7.3.2 Analyse des mechanischen Modells

In Abschnitt 7.1 wurde erläutert, dass sich Gusseisen mit Lamellengraphit bei experimentellen makroskopischen Versuchen isotrop verhält. Dies ist bei den verwendeten SVE nicht der Fall, da in den Simulationsgebieten nicht ausreichend viele transversal isotrope Graphitpartikel enthalten sind, damit sich deren Anisotropie statistisch eliminiert. Zur Untersuchung, wie stark Anisotrop sich die verwendeten SVE verhalten, werden bei einem Graphitvolumenanteil von 10 v. – % und Raumtemperatur $\theta = 20^\circ\text{C}$ Zugversuche an jeweils drei unterschiedlichen SVE der Graphitausprägungen IA2, IA3, IA4 und IA5 durchgeführt. In Abb. 7.9 sind die resultierenden Spannungs-Dehnungs-Diagramme bei einachsiger Zugbelastung der jeweils drei Varianten einer Graphitausprägung entsprechend Gl. (4.80) gezeigt. Die entsprechenden Standardabweichungen der verschiedenen Graphitausprägungen sind als ein Maß der Anisotropie, in Form von Fehlerbalken, gegeben. Man erkennt, dass die Kennlinie einer bestimmten Graphitausprägung mit kleiner werdender durchschnittlicher Partikelgröße geringere Standardabweichungen aufweist. Das bedeutet, dass die Anisotropie bei konstanter Gebietsgröße

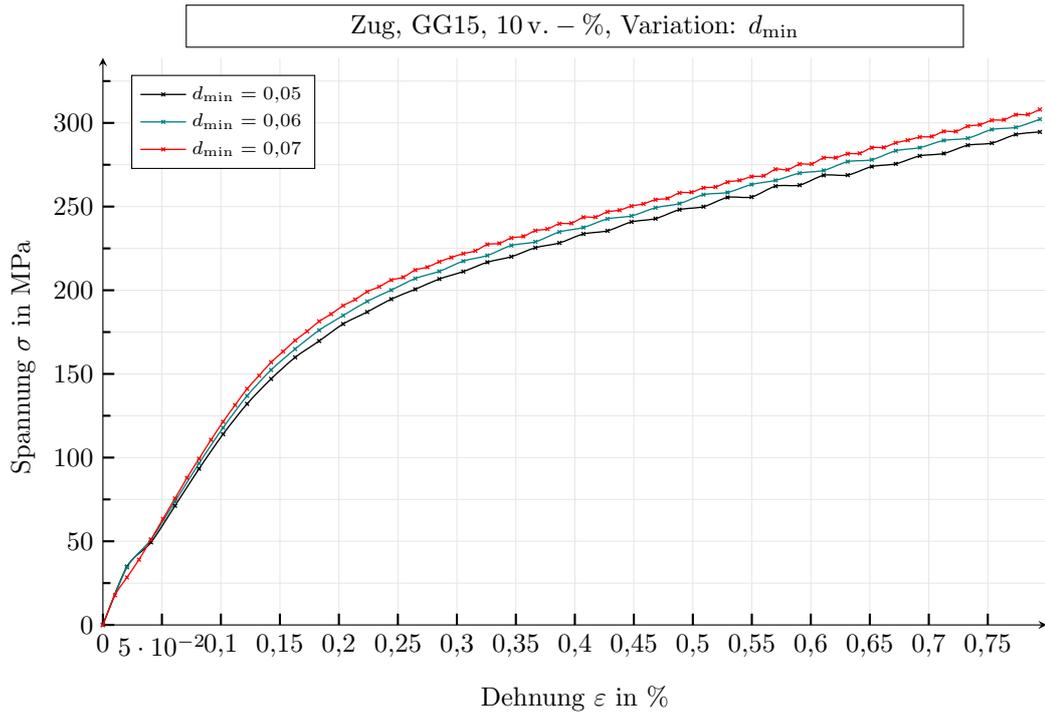


Abbildung 7.10: Einfluss des Minimalwertes der Degradierungsfunktion auf makroskopisches Spannungs-Dehnungs-Verhalten. Simulationen an GG-15 SVE mit einem Graphitvolumenanteil von 10 v. – % bei Raumtemperatur. Der Minimalwert der Degradierungsfunktion variiert für die Werte $d_{\min} = \{0,05; 0,06; 0,07\}$, bei konstanten Schwellwert der Volumenänderung von $\varepsilon_{\text{vol}}^{\text{krit}} = 0,001$.

und gleichem Graphitvolumenanteil mit durchschnittlich kleiner werdenden Partikeln sinkt. Dies liegt daran, da die Anzahl der Graphitpartikel in einem SVE mit sinkender Partikelgröße wächst und somit der transversal isotrope Einfluss der Lamellen zunehmend eliminiert wird. Zum Vergleich sind in den statistischen Volumenelementen der Graphitausprägung IA2 zwischen 250 und 300 Partikel enthalten, im Gegensatz zu 5500 bis 5800 Partikel in den IA5-Simulationengebieten. Um die gleiche Anzahl an Partikeln eines SVE der Graphitausprägung IA5 in einem SVE des Typs IA2 zu erhalten, müsste die Gebietsgröße des IA2-SVE ca. 20-mal größer sein als die des IA5-SVE, was den Rechenaufwand um den entsprechenden Faktor erhöhen würde.

Nachfolgend wird die Auswirkung der Modellparameter *Minimalwert der Degradierungsfunktion*, d_{\min} , und *Schwellwert der Volumenänderung*, $\varepsilon_{\text{vol}}^{\text{krit}}$, auf das makroskopische Spannungs-Dehnungs-Verhalten von einachsigen Zugversuchen untersucht. Die Simulationen werden bei Raumtemperatur, $\theta = 20\text{ °C}$, an GG-15-SVE mit einem Graphitvolumenanteil von 10 v. – % durchgeführt.

Der Minimalwert der Degradierungsfunktion wird für die Werte $d_{\min} = \{0,05; 0,06; 0,07\}$, bei konstanten Schwellwert der Volumenänderung, $\varepsilon_{\text{vol}}^{\text{krit}} = 0,001$, variiert. Die resultierenden Spannungs-Dehnungs-Kennlinien bei einachsiger Zugbelastung sind in Abb. 7.10 gezeigt. Die resultierende makroskopische Steifigkeit des SVE nimmt mit steigendem d_{\min} zu. Der Grund hierfür ist, dass degradierte Graphitpartikel bei einem wachsenden Minimalwert der Degradierungsfunktion höhere Steifigkeiten besitzen und somit auch die makroskopische Steifigkeit eines Volumenelements steigt.

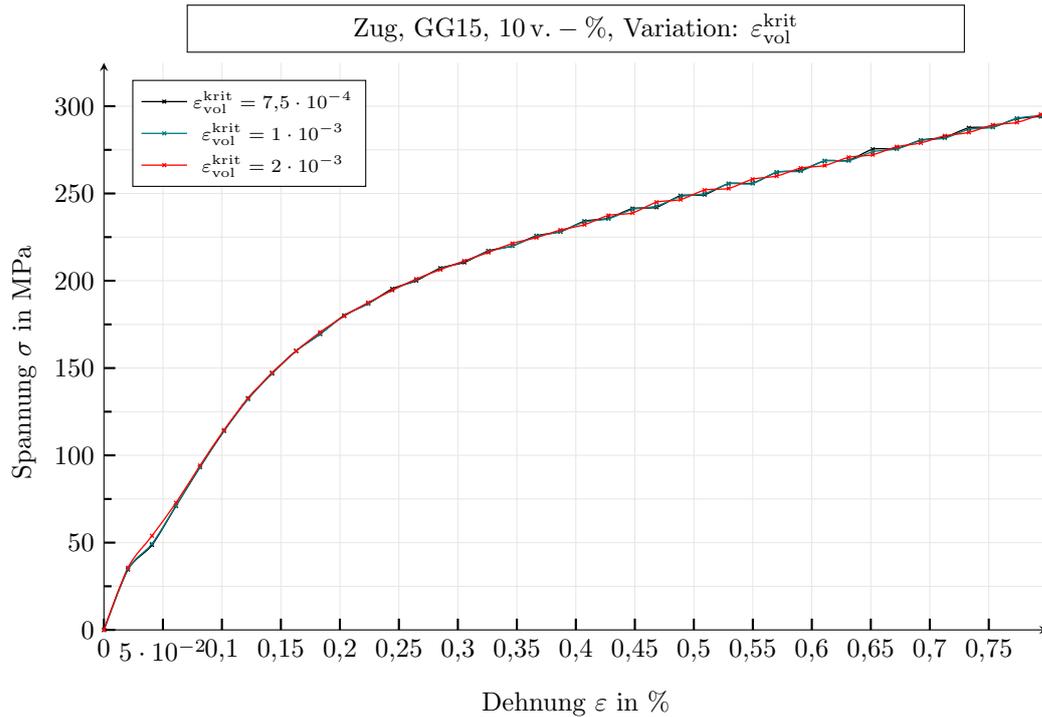


Abbildung 7.11: Einfluss des Schwellwertes der Volumenänderung auf makroskopisches Spannungs-Dehnungs-Verhalten. Simulationen an GG-15 SVE mit einem Graphitvolumenanteil von 10 v. – % bei Raumtemperatur. Der Schwellwert der Volumenänderung variiert für die Werte $\varepsilon_{\text{vol}}^{\text{krit}} = \{0,00075; 0,001; 0,002\}$, bei konstanten Minimalwert der Degradierungsfunktion von $d_{\text{min}} = 0,05$.

Für einen konstanten Minimalwert der Degradierungsfunktion von $d_{\text{min}} = 0,05$ wird der Schwellwert der Volumenänderung für die Werte $\varepsilon_{\text{vol}}^{\text{krit}} = \{0,00075; 0,001; 0,002\}$ variiert. Die entsprechenden Spannungs-Dehnungs-Verläufe bei einachsiger Zugbelastung sind in Abb. 7.11 abgebildet. Man erkennt, dass sich das Materialverhalten im untersuchten Wertebereich des Schwellwertes der Volumenänderung nicht signifikant ändert.

Für die Simulationsstudie wird als *Minimalwert der Degradierungsfunktion* $d_{\text{min}} = 0,05$ und für den *Schwellwert der Volumenänderung* $\varepsilon_{\text{vol}}^{\text{krit}} = 0,1\%$ gewählt. Diese Werte sind äquivalent zu den bedeutungsgleichen Parametern in Metzger und Seifert [87].

7.3.3 Mechanische Simulationsstudie

Alle Materialparameter der folgenden Simulationen wurden in Abschnitt 7.2 eingeführt. Die mechanischen Modellparameter sind identisch mit den bedeutungsgleichen Parametern in Metzger und Seifert [87]: Minimalwert der Degradierungsfunktion $d_{\text{min}} = 0,05$; Schwellwert der Volumenänderung $\varepsilon_{\text{vol}}^{\text{krit}} = 0,001$.

Anhand von Abb. 7.12 und 7.13 werden einige typische Merkmale des spannungsasymmetrischen Materialverhaltens von Grauguss bei verschiedenen Belastungen aufgezeigt.

Abbildung 7.12 zeigt die Spannungs-Dehnungs-Kurven eines IA2 SVE mit 12 v. – % Graphit, bei Raumtemperatur, für einachsige Zug- und Druckbelastung. Als Inlay sind Konturplots der *Degradierungsfunktion*, d , enthalten. Die perlitische Matrix nimmt die

grauen Bereiche innerhalb der Konturplots ein.

Das unterschiedliche Materialverhalten von Grauguss, auf der Ebene der mikromechanischen Felder, ist in Abb. 7.13 anhand der Simulationsergebnisse eines SVE der Graphitausprägung IA2, mit einem Graphitvolumenanteil von 12 v. – %, bei einer Temperatur von $\theta = 20\text{ °C}$, gezeigt. Zu sehen sind Konturplots der *von-Mises-Vergleichsspannung*, $\sigma_{v.M.}$, und der *akkumulierten plastischen Verzerrung*, ε_{akk} , siehe Kapitel 4, bei betragsmäßig gleich großen makroskopischen Zug- und Druckdehnungen von $\varepsilon = 0,0035$, in x -Richtung.

Unter *Zugbelastung* existiert nahezu kein linearer Bereich der Kennlinie 7.12. Bereits ab einer Dehnung von $\varepsilon \sim 0,0002$, *Punkt (A)* in Abb. 7.12, verursacht die effektive Volumenänderung der Graphitpartikel, ε_{vol}^α , eine signifikante Degradierung der Steifigkeiten des Lamellengraphits. Der Bereich zwischen *Punkt (A)* und *(B)* ist durch die kontinuierliche Degradierung der Graphitsteifigkeiten nach Gl. (7.4) gekennzeichnet. Infolge der Nachahmung der Mikrorissbildung und/ oder Grenzflächenablösung entsteht eine Störung des Kraftflusses. Durch die auftretenden Spannungskonzentrationen an den Flanken der Graphitlamellen werden zunehmend mikroplastische Verzerrungen hervorgerufen, Abb. 7.13 (Abbildungen *Zug*), was bei makroskopisch kleinen Dehnungen zu einem weiterführend nicht linearen Verlauf der Spannungs-Dehnungs-Kurve führt. Die beschriebenen Beobachtungen sind bei Zugbelastung charakteristisch für Gusseisen mit Lamellengraphit [54]. Laut Noguchi und Shimizu [97] zeigt Grauguss unter Zugbelastung keine ausgeprägte Streckgrenze und bricht bei einer Dehnung zwischen $\varepsilon = 0,005$ und $\varepsilon = 0,01$, ohne sichtbare Einschnürung bei maximaler Spannung.

Das Materialverhalten unter *Druckbelastung* unterscheidet sich gänzlich von dem bei Zugbelastung. Bis zu einer Dehnung von $\varepsilon \sim 0,001$, *Punkt (C)* in Abb. 7.12, liegt ein deutlich erkennbarer linearer Abschnitt der Spannungs-Dehnungs-Kurve vor. An den eingefügten Konturplots der Graphitdegradierung erkennt man, dass unter Druckbelastung nur vereinzelt eine Degradierung von Graphitpartikeln auftritt, da überwiegend negative Werte der effektiven Volumenänderungen, ε_{vol}^α , vorliegen. Dadurch wird der Kraftfluss durch die Graphitpartikel nur geringfügig gestört und es kommen kaum Spannungskonzentrationen an deren Flanken vor, siehe Abb. 7.13 (Abbildungen *Druck*). Bei betragsmäßig gleich großen makroskopischen Dehnungen treten unter Druckbelastung wesentlich homogenere Spannungen auf und es kommt in größeren Bereichen der Matrix zu plastischen Verzerrungen, vgl. Abb. 7.13. Man erkennt dass die Zug-Druck-Spannungsasymmetrie bei Druckbelastung zu einem höheren E-Modul und einer höheren Streckgrenze führt.

Die beschriebenen Merkmale sind bei allen Graphitausprägungen, Graphitvolumenanteilen und Temperaturen vorhanden, jedoch mehr oder weniger stark ausgeprägt.

Abbildung 7.14 zeigt *Konturplots der von-Mises-Vergleichsspannung*, $\sigma_{v.M.}$, und der *akkumulierten plastischen Verzerrung*, ε_{akk} , von SVE der Graphitausprägungen GG-15, IA2, IA3, IA4 und IA5, bei einem Graphitvolumenanteil von 10 v. – % und einer Temperatur von $\theta = 20\text{ °C}$. Die dargestellten Konturplots resultieren aus einer makroskopischen Zugdehnung in x -Richtung von $\varepsilon = 0,0035$. Bei allen Graphitauprägungen verlieren die Graphitlamellen bereits bei einer kleinen makroskopischen Dehnung ihre Fähigkeit, Kräfte zu übertragen. Zu beobachten ist, dass mit durchschnittlich kleiner werdenden Graphitpartikeln sowohl die Konturplots der von-Mises-Vergleichsspannung als auch die der akkumulierten plastischen Verzerrung homogener werden. Feinere

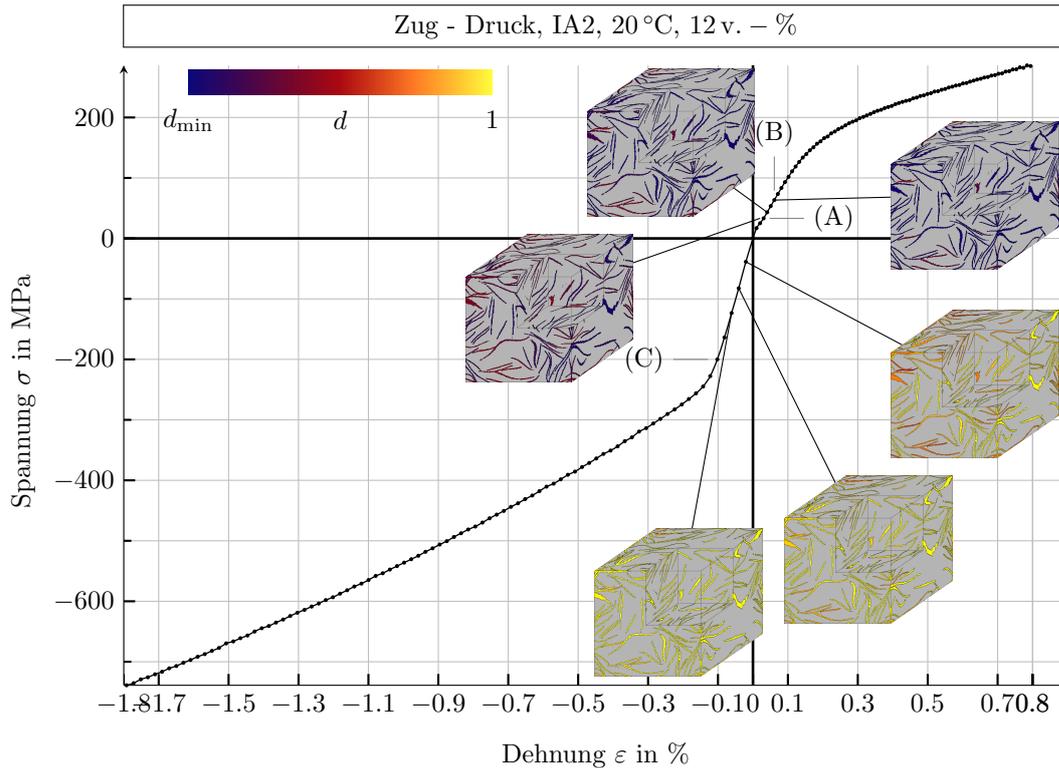


Abbildung 7.12: Spannungs-Dehnungs-Diagramm eines IA2 SVE eindimensionale, momentenfreie für Zug- und Druckbelastung. Als Inlay sind die Konturplots der Degradierungsfunktion der Graphitlamellen, d_{grad} , für einige Dehnungszustände gegeben. Die perlitische Matrix ist in grau dargestellt. Man erkennt deutlich die Zug-Druck-Spannungsasymmetrie von Grauguss.

Graphitstrukturen führen zu homogeneren Spannungsfeldern und somit zu niedrigeren Rissraten [54].

Zur Untersuchung des Einflusses der Graphitausprägung und des Graphitvolumenanteils auf die makroskopischen mechanischen Eigenschaften von Gusseisen mit Lamellengraphit wird eine ausführliche Simulationsstudie durchgeführt. Die Studie umfasst Simulationen von SVE jeder möglichen Permutation der Graphitausprägungen GG-15, IA2, IA3, IA4 und IA5 [40], mit Graphitvolumenanteilen von 10, 11 und 12 v. - %. In der werkstoffspezifischen Lieferantenvorschrift der *Daimler AG*, *DBL 4407*, wird ein Kohlenstoffmassenanteil von 3,7 m. - % bis 3,9 m. - % vorgeschrieben. Bei einer Masendichte von $\rho^m = 7838 \text{ kg/m}^3$ [58], für die perlitische Matrix, und respektive $\rho^g = 2200 \text{ kg/m}^3$ [58], für das Graphit, ergibt sich unter Vernachlässigung der restlichen Legierungskomponenten ein Volumenanteil der Graphitlamellen im Bereich von 10 v. - % bis 12 v. - %, vgl. zum Beispiel Pina et al. [107]. Für jede mögliche Variante der SVE werden einachsige Zugversuche, entsprechend der beschriebenen mechanischen Randbedingungen, für die Temperaturen $\theta = \{20 \text{ °C}; 150 \text{ °C}; 300 \text{ °C}; 450 \text{ °C}; 600 \text{ °C}; 750 \text{ °C}\}$ durchgeführt. Bei denselben Temperaturen werden für alle SVE mit einem Graphitvolumenanteil von 12 v. - % Druckversuche simuliert. Nachfolgend werden die signifikantesten Erkenntnisse der Simulationsstudie erläutert. Falls ähnliche Trends bei unterschiedlichen Graphitausprägungen, Graphitvolumenanteilen oder Temperaturen auftreten, wird darauf hingewiesen und der Trend nur anhand eines Beispiels analysiert. Der

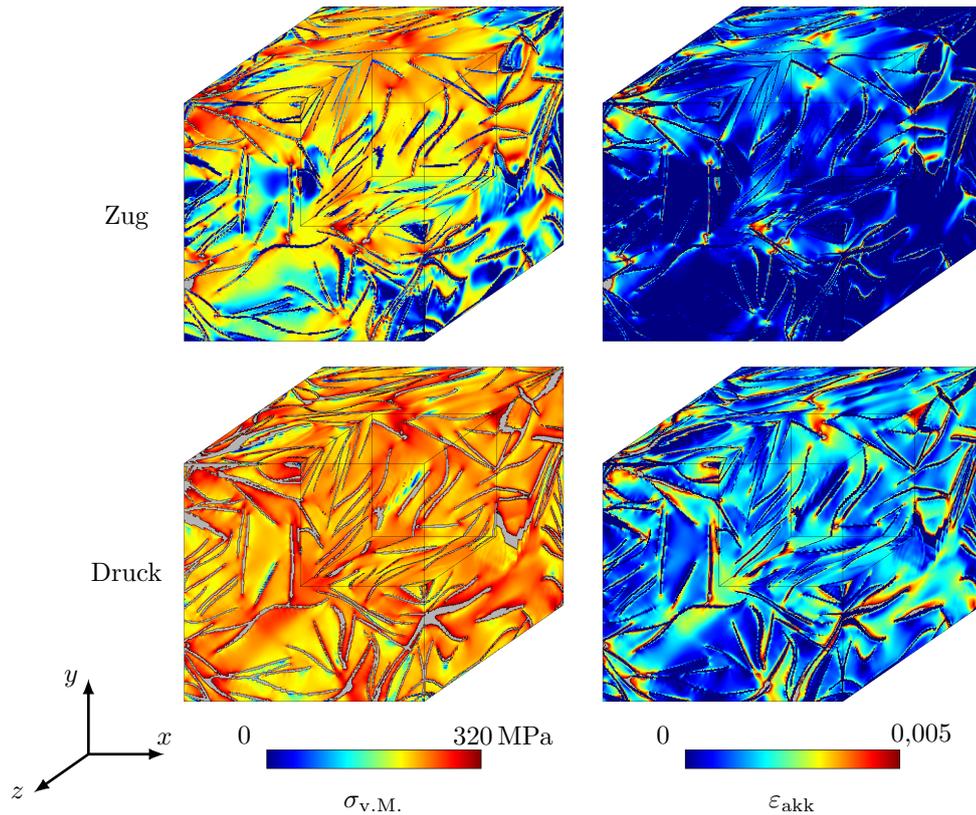


Abbildung 7.13: Konturplots bei Zug- und Druckbelastung eines IA2 Statistischen Volumenelements mit einem Graphitvolumenanteil von 12 v.-%. Zu sehend sind die von-Mises-Vergleichsspannung, $\sigma_{v.M.}$, und die akkumulierten plastischen Verzerrung, ϵ_{akk} , bei einer betragsmäßig gleich großen makroskopischen Dehnung in x -Richtung von $\epsilon = 0,0035$.

vollständige Satz an berechneten Spannungs-Dehnungs-Kennlinien ist im Anhang A aufgeführt. Für eine ersichtlichere Darstellung sind die Spannungs-Dehnungs-Verläufe der Drucksimulationen durch positive Werte gegeben.

Ein Vergleich des Materialverhaltens aller Graphitausprägungen mit 12 v.-% Graphit, bei Zug- sowie Druckbelastung und Raumtemperatur, ist in Abb. 7.15 gegeben. Die Spannungs-Dehnungs-Kurven der verschiedenen SVE unterscheiden sich bei Zugbelastung bis zu einer Dehnung von $\epsilon \sim 0,0002$, *Punkt (A)* in Abb. 7.15, nur geringfügig. Dieser Effekt tritt auf, da die effektive Volumenänderung der Graphitpartikel, ϵ_{vol}^α , bei kleineren Dehnungen keine signifikante Degradierung der Steifigkeiten des Lamellengraphits verursacht und somit der Einfluss der Graphitausprägung auf das mechanische Materialverhalten gering ist. Mit zunehmender Dehnung wächst der Unterschied zwischen den Kennlinien. Bei Zugbelastung steigen die mechanischen Eigenschaften mit sinkender durchschnittlicher Partikelgröße. Den größten E-Modul und die größte Streckgrenze besitzt die Graphitausprägung IA5, den kleinsten E-Modul und die kleinste Streckgrenze die Ausprägung IA2. Quantitative Werte dieser Kenngrößen folgen später. Es existiert also ein klarer Einfluss der durchschnittlichen Partikelgröße eines SVE auf die Spannungs-Dehnungs-Verläufe. Das nicht idealisierte GG-15-SVE resultiert in einer Spannungs-Dehnungs-Kurve, die zwischen denen von IA2 und IA3 liegt. Betrachtet man die Abweichung der verschiedenen Zugkennlinien zueinander, dann fällt auf, dass beginnend mit dem SVE der größten durchschnittlichen Partikelgröße, IA2, die

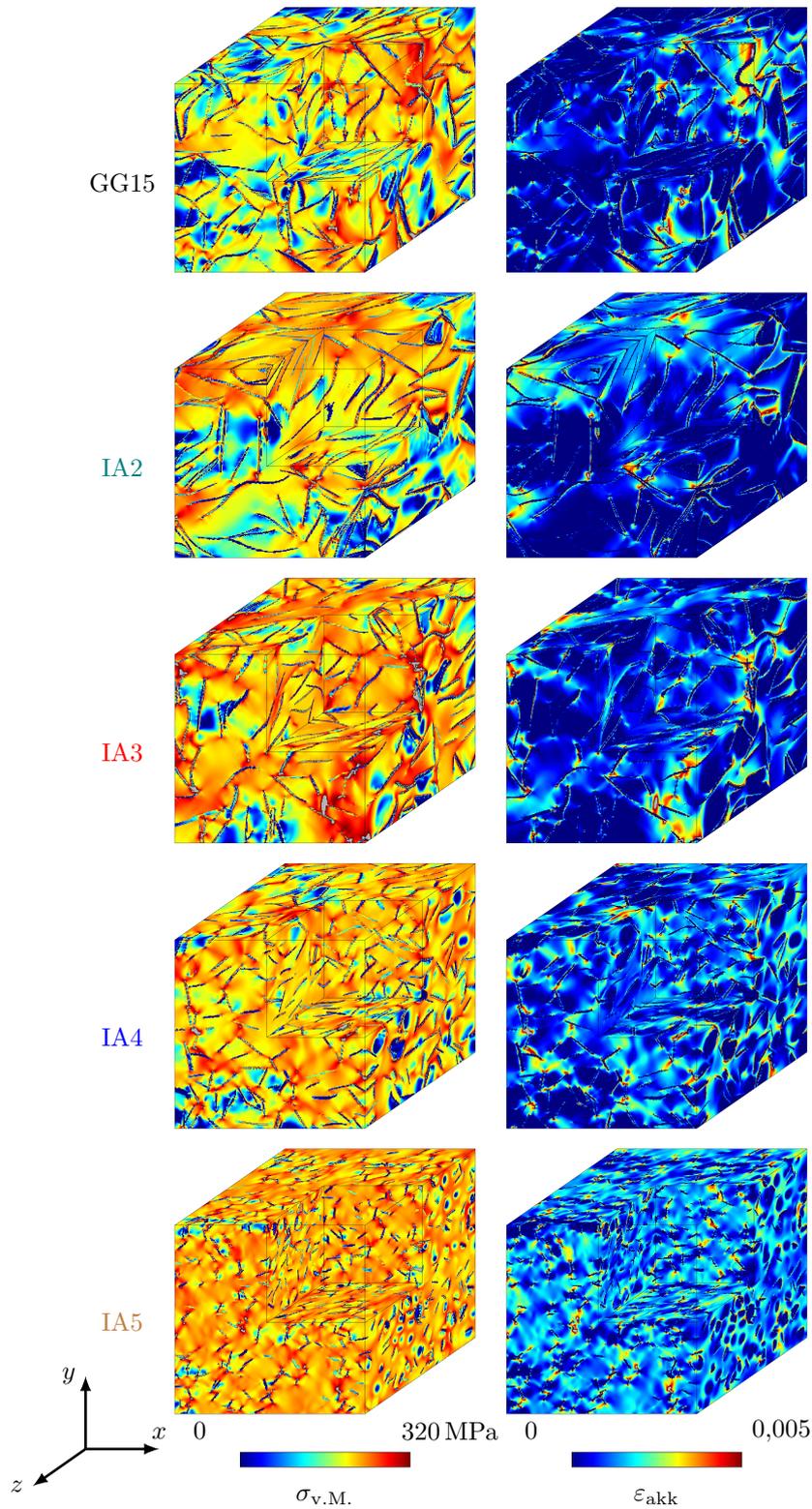


Abbildung 7.14: Konturplots bei Zugbelastung unterschiedlicher statistischer Volumenelemente mit einem Graphitvolumenanteil von 10 v. - %. Zu sehend sind die von-Mises-Vergleichsspannung, $\sigma_{v.M.}$, und die akkumulierten plastischen Verzerrung, ϵ_{akk} , bei einer makroskopischen Zugdehnung in x -Richtung von $\epsilon = 0,0035$.

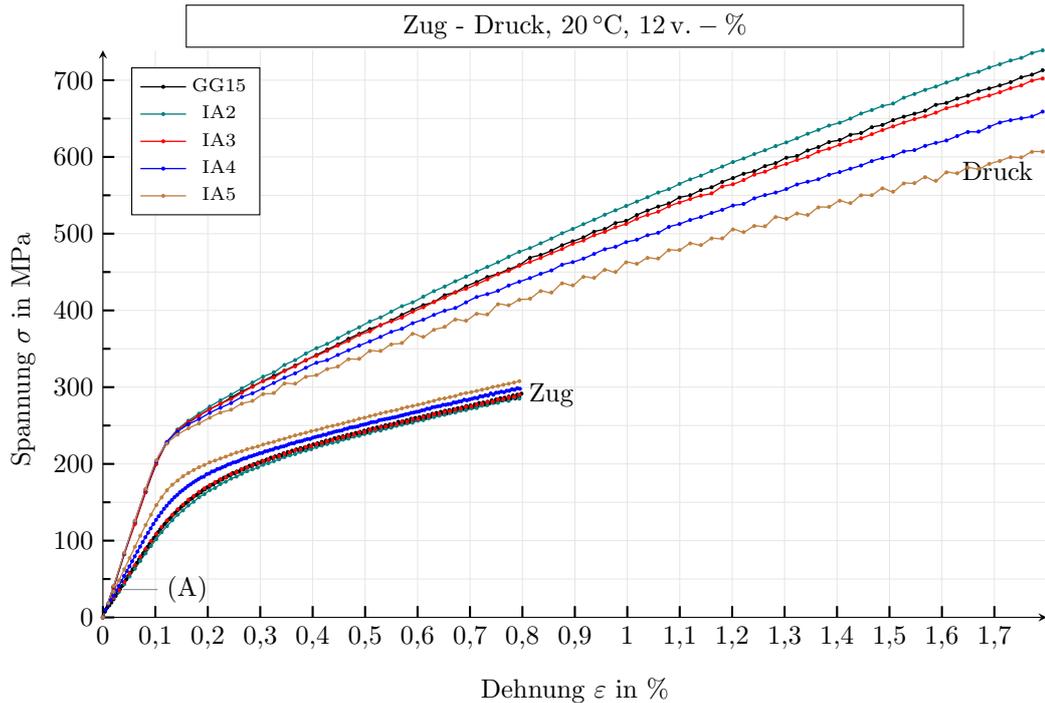


Abbildung 7.15: Spannungs-Dehnungs-Diagramme bei Zug- und Druckbelastung aller Graphitausprägungen mit 12 v.-% Graphit und $\theta = 20^\circ\text{C}$. Für eine ersichtlichere Darstellung, sind die Spannungs-Dehnungs-Verläufe der Drucksimulationen durch positive Werte gegeben.

Abweichung zum Simulationsergebnis der nächst kleineren Partikelverteilung stetig zunimmt. Die Differenz zwischen den Kennlinien IA2 und IA3 ist deutlich kleiner als die zwischen IA4 und IA5. Dies liegt daran, weil die Änderungen zwischen den räumlichen Ausdehnungen von IA2 nach IA5, siehe Tabelle 7.1, kubisch in das mittlere Volumen der Graphitpartikel einfließt und sich dementsprechend auch die Anzahl an Partikeln im Simulationsgebiet nicht linear ändert.

Die Kennlinien bei Druckbelastung besitzen einen klar ausgeprägten linearen Abschnitt. Im linearen Bereich sind sich die Kurvenverläufe aller SVE sehr ähnlich, und auch die Streckgrenzen sind vergleichbar. Die Graphitausprägung beeinflusst also erst ab Spannungen oberhalb der Streckgrenze das makroskopische Materialverhalten des Gusseisenwerkstoffes deutlich. Der Grund hierfür ist, dass unter Druckbelastung kaum positive effektive Volumenänderungen der Graphitpartikel, $\varepsilon_{\text{vol}}^\alpha$, auftreten und dadurch nur eine geringe Degradierung der Graphitpartikel vorliegt. Deshalb wird das makroskopische Materialverhalten überwiegend durch das Matrixmaterial dominiert. Auch bei den experimentellen Ergebnissen der *Daimler AG* ist dieses Phänomen zu beobachten. Obwohl sich die Mikrostruktur jedes einzelnen untersuchten experimentellen Prüfkörpers von den anderen unterscheidet, sind die anfänglichen Kurvenverläufe und die Streckgrenzen fast deckungsgleich. Wie bereits erwähnt, wurden auf Grundlage dieser Tatsache der E-Modul und die Fließgrenze der perlitischen Matrix anhand der Experimente ausgewählt. Ein klarer Einfluss der Graphitausprägung ist erst bei makroskopisch plastischer Beanspruchung zu erkennen. Sobald ein nicht lineares Materialverhalten eintritt, unterscheiden sich die Spannungs-Dehnungs-Verläufe der unterschiedlichen SVE erkennbar. Im Gegensatz zur Zugbelastung hat die Graphitausprägung IA2 die höchste

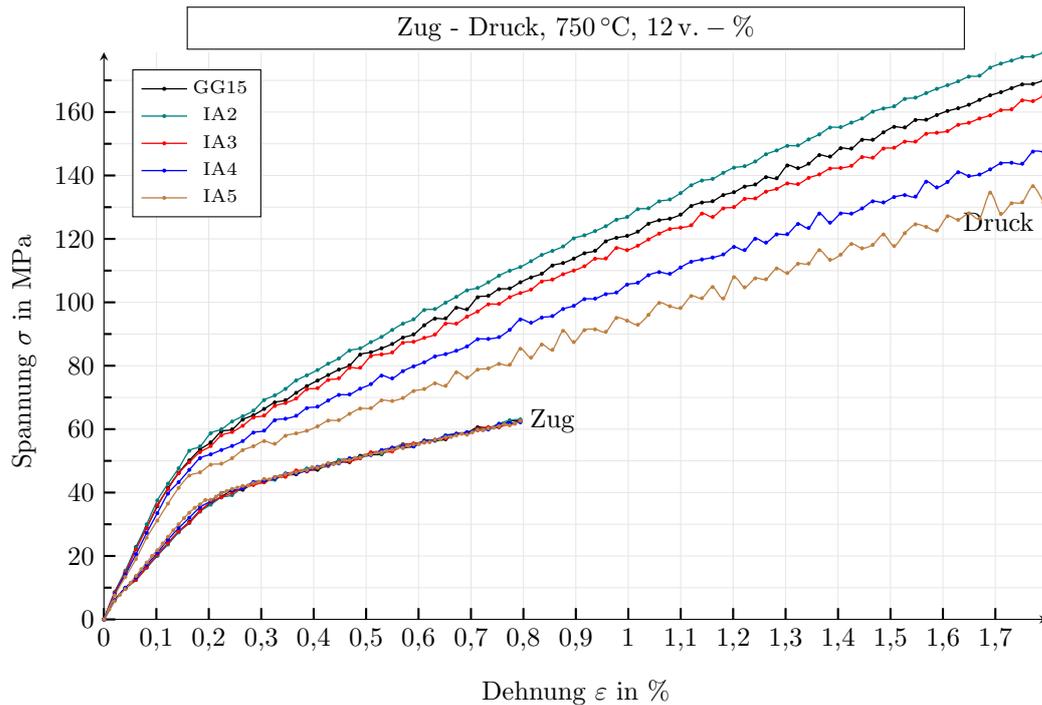


Abbildung 7.16: Spannungs-Dehnungs-Diagramme bei Zug- und Druckbelastung aller Graphitausprägungen mit 12 v. - % Graphit und $\theta = 750\text{ °C}$. Für eine ersichtlichere Darstellung, sind die Spannungs-Dehnungs-Verläufe der Drucksimulationen durch positive Werte gegeben.

Spannungs-Dehnungs-Kurve und die Graphitausprägung **IA5** die niedrigste. Auch bei Druckbelastung verläuft die Kennlinie des GG-15-SVE zwischen denen der Graphitausprägungen **IA2** und **IA3**.

Abbildung 7.16 zeigt die Simulationsergebnisse für die Zug- und Druckbelastung derselben SVE wie zuvor, jedoch bei der Temperatur $\theta = 750\text{ °C}$. Verglichen mit der Raumtemperatur verändert sich der Verlauf der einzelnen Spannungs-Dehnungs-Kurven bei erhöhten Temperaturen nicht qualitativ. Auf die quantitativen Änderungen wird später eingegangen. Generell wird unter Zugbelastung der Unterschied zwischen den Kennlinien der verschiedenen Graphitausprägungen mit steigender Temperatur geringer. Liegt die Temperatur bei 750 °C , ist kaum noch ein Unterschied zwischen den Kennlinien erkennbar. Ursächlich hierfür ist, dass mit steigender Temperatur die Steifigkeit der perlischen Matrix sinkt und sich somit der des degradierten Graphits angleicht. Der Einfluss des Graphits auf das makroskopische Materialverhalten verschwindet. Die mechanischen Felder sind bei höheren Temperaturen homogener.

Bei Druckbelastung ist ein solches Phänomen nicht vorhanden. Im Gegensatz zu den Zugsimulationen gleichen sich die Kurvenverläufe der unterschiedlichen Volumenelemente nicht mit zunehmender Temperatur aneinander an, da nur wenige Graphitpartikel bei Druckbelastung degradiert sind und somit keine Angleichung der Materialeigenschaften durch sinkende Materialsteifigkeiten der Matrix stattfindet.

In Diagramm 7.17 sind die Spannungs-Dehnungs-Kurven eines GG-15-SVE, mit 12 v. - % Graphit unter Zugbelastung für die Temperaturen $\theta = \{20\text{ °C}; 150\text{ °C}; 300\text{ °C}; 450\text{ °C}; 600\text{ °C}; 750\text{ °C}\}$ gezeigt. Der quantitative Verlauf der Kurven ist für alle Temperatur-

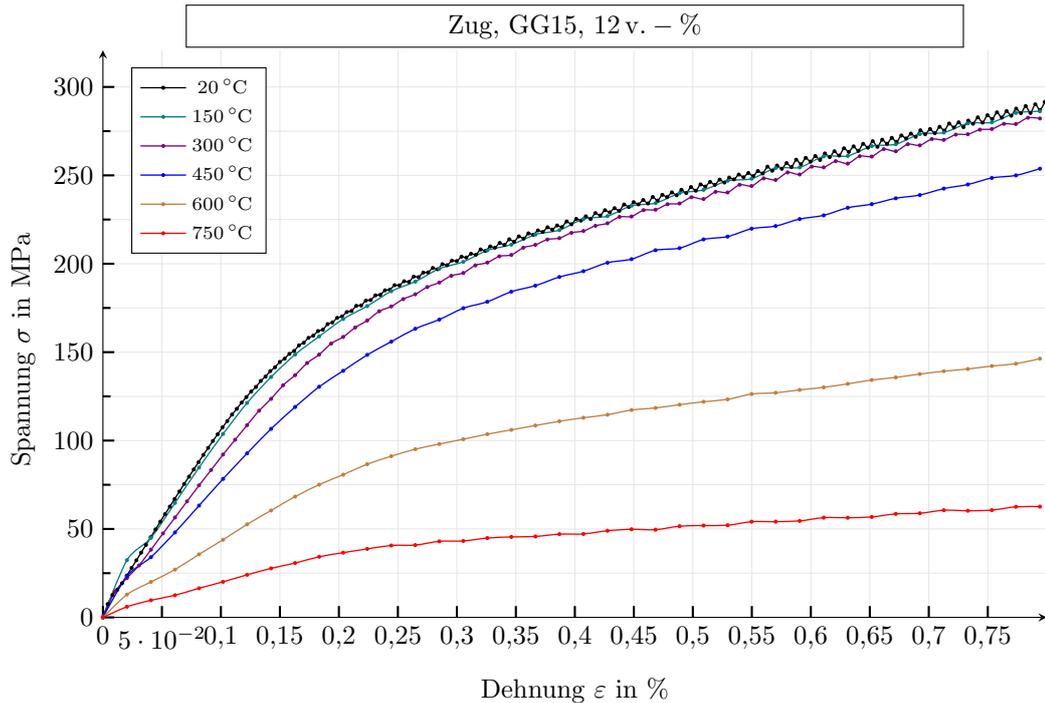


Abbildung 7.17: Spannungs-Dehnungs-Diagramme bei Zugbelastung einer GG-15-Graphitausprägung mit 12 v.-% Graphit und variabler Temperatur.

ren gleich, jedoch unterschiedlich stark ausgebildet. Wie bereits zuvor beschrieben, folgt nach einem sehr kleinen linearen Abschnitt ein Bereich mit nicht streng monotoner Steigung. Anschließend tritt ein ausgeprägtes nicht lineares Materialverhalten auf. Verursacht durch die temperaturabhängigen Materialparameter der perlitischen Matrix, Tabelle 7.2, nimmt der Spannungs-Dehnungs-Verlauf mit zunehmender Temperatur ab. Bis zu einer Temperatur von $\theta = 450\text{ °C}$ ist die Absenkung der Kennlinien jedoch nicht signifikant, da sich für die Temperaturen $\theta = \{20\text{ °C}; 150\text{ °C}; 300\text{ °C}\}$ nur der E-Modul und nicht die Fließgrenze und Verfestigungsparameter der Matrix ändern.

Der Einfluss der Temperatur auf das makroskopische Verhalten desselben SVE ist bei Druckbelastung ähnlich wie zuvor bei Zugbelastung, siehe Abb. 7.18. Mit zunehmender Temperatur werden die absoluten Spannungswerte der Kennlinien geringer, wobei zwischen $\theta = \{20\text{ °C}; 150\text{ °C}; 300\text{ °C}\}$ der Unterschied nur gering ist. Generell ähnelt der Kurvenverlauf bei Druckbelastung dem eines typischen duktilen Stahls, da ein eindeutig identifizierbarer linearer Bereich vorliegt, dem sich ein nicht linearer plastischer Abschnitt anschließt.

Abschließend wird noch der Einfluss des Graphitvolumenanteils auf die mechanischen Materialeigenschaften betrachtet. In Diagramm 7.19 sind die Spannungs-Dehnungs-Kennlinien für Zug- und Druckbelastung bei Raumtemperatur der GG-15-Graphitausprägung für Graphitvolumenanteile von $\{10\text{ v.-%}; 11\text{ v.-%}; 12\text{ v.-%}\}$ abgebildet. Man sieht, dass die Verläufe der Kennlinien bei Zugbelastung mit steigendem Graphitvolumenanteil geringere Spannungswerte besitzen. Sowohl der E-Modul als auch die Streckgrenze sinkt mit zunehmendem Graphitanteil. Diese Tatsache steht im Einklang mit Ergebnissen und Daten aus Veröffentlichungen von beispielsweise Collini et al. [31], Haenny und Zambelli [54] und Noguchi und Shimizu [97]. Erklären lässt sich die-

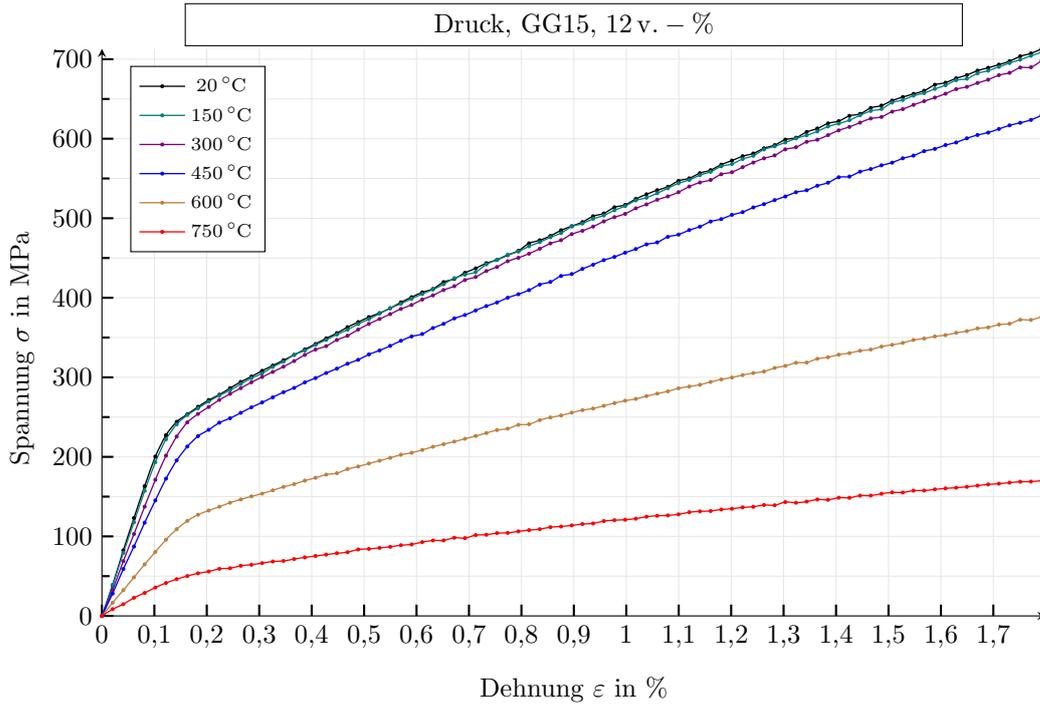


Abbildung 7.18: Spannungs-Dehnungs-Diagramme bei Druckbelastung einer GG-15-Graphitausprägung mit 12 v. - % Graphit und variabler Temperatur. Die Spannungs-Dehnungs-Verläufe sind durch positive Werte gegeben.

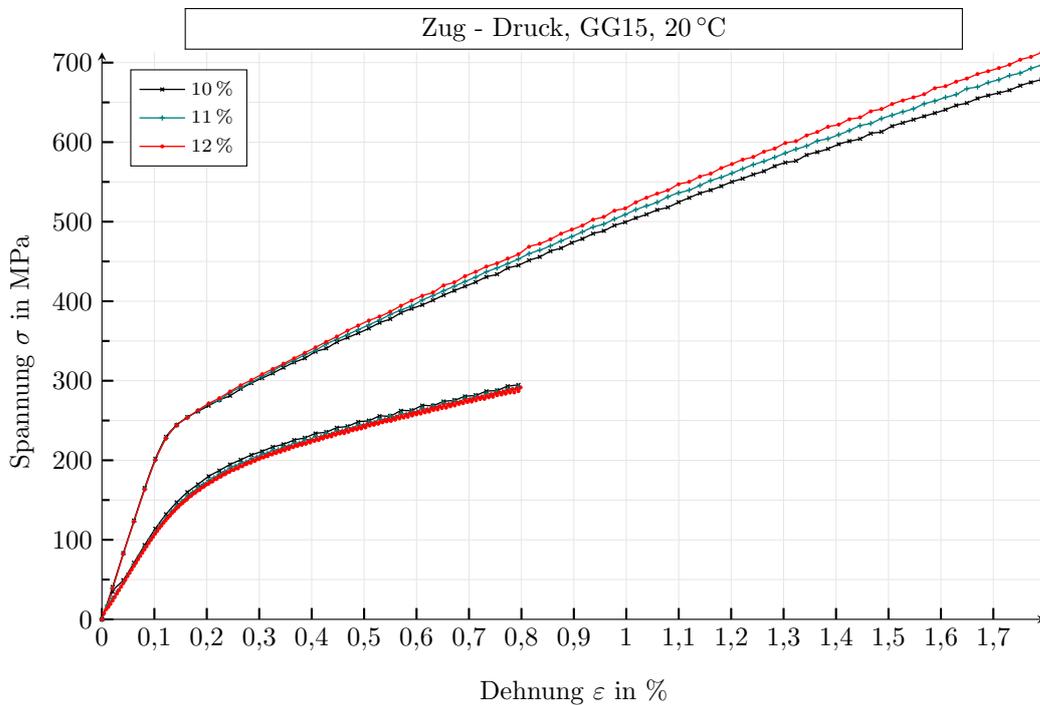


Abbildung 7.19: Spannungs-Dehnungs-Diagramme bei Zug- und Druckbelastung einer GG-15-Graphitausprägung mit variablem Graphitvolumenanteil und Raumtemperatur Für eine ersichtlichere Darstellung, sind die Spannungs-Dehnungs-Verläufe der Drucksimulationen durch positive Werte gegeben.

ses Phänomen mit der Zunahme des im degradierten Zustand die Matrix schwächenden Graphits, innerhalb eines SVE, bei steigendem Graphitvolumenanteil.

Bei Druckbelastung ist das Verhalten gerade umgekehrt, ein höherer Graphitvolumenanteil führt zu höheren mechanischen Eigenschaften. Bei diesem Belastungsfall werden nur wenige Graphitsteifigkeiten degradiert und wirken sich positiv auf das makroskopische Materialverhalten der SVE aus, da sie im nicht degradierten Zustand eine höhere Steifigkeit als die perlitische Matrix besitzen.

7.3.3.1 Mechanische Kennzahlen

Mit den Simulationsergebnissen werden E-Moduli, Querkontraktionszahlen und Dehngrenzen bestimmt, wobei bei der Auswertung angenommen wird, dass sich die SVE isotrop verhalten, womit Gl. (4.58) gilt, und stets ein einachsiger Spannungszustand vorliegt.

Grundsätzlich ist der E-Modul eines Materials durch die Steigung des linearen Bereichs einer Spannungs-Dehnungs-Kurve bei einsetzender einachsiger, momentenfreier Zugbelastung gegeben. Die Fließgrenze kennzeichnet das Ende des linearen Bereichs und somit den Übergang eines Werkstoffs von elastischem zu plastischem Verhalten. Bei Gusseisenwerkstoffen ist ein solcher linearer Bereich jedoch nicht eindeutig ausgeprägt, wodurch die Bestimmung der E-Moduli und Fließgrenzen erschwert wird [44]. Nach ASTM E111 [9] ist bei Werkstoffen mit nicht linearen Spannungs-Dehnungs-Kennlinien die Berechnung der E-Moduli im Sinne des Tangenten- oder Sekantenmoduls zulässig. Diese Verfahren zur Identifikation der E-Moduli führen, abhängig davon, bei welcher Dehnung die E-Moduli ausgewertet werden, zu unterschiedlichen Ergebnissen. Die Auswertung der E-Moduli erfolgt in dieser Arbeit im Sinne des Sekantenmoduls, bei Dehnungen von $\varepsilon = 0,1\%$, $E_{p0,1}$, und $\varepsilon = 0,2\%$, $E_{p0,2}$. Auch die Querkontraktionszahlen werden bei denselben Dehnungswerten ermittelt, $\nu_{p0,1}$ und $\nu_{p0,2}$. Um Schwierigkeiten bei der Ermittlung der Fließgrenzen zu umgehen, werden bei den gleichen Dehnungen technische Dehngrenzen, $R_{p0,1}$ und $R_{p0,2}$, definiert [39]. Zusätzlich wird aufgrund der Zug-Druck-Spannungsasymmetrie zwischen E-Moduli, Querkontraktionszahlen und Dehngrenzen unter Zug- und Druckbelastung unterschieden. In Abb. 7.20 ist das Vorgehen zur Ermittlung von Sekantenmoduli und Dehngrenzen skizziert.

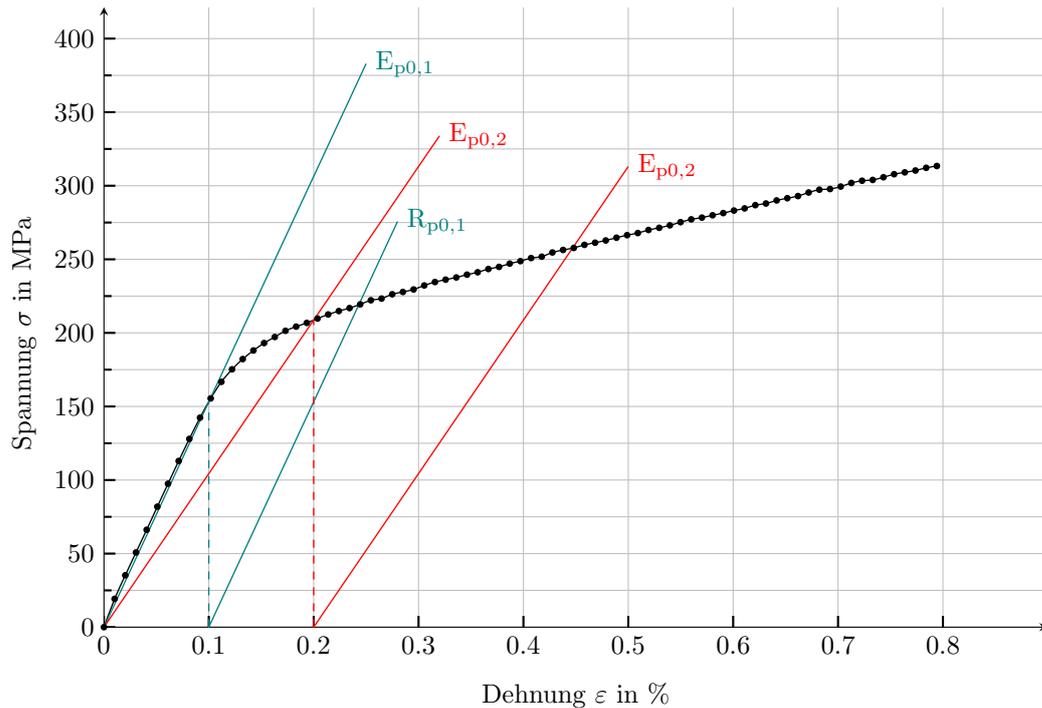


Abbildung 7.20: Schematische Auswertung des Sekanten-Moduls und der Dehngrenze. Die Sekanten-Moduli werden bei Dehnungen von 0,1% und 0,2% ausgewertet. Die Geraden zur Auswertung der Dehngrenzen, R_p , verlaufen parallel zu den E-Moduli.

Die resultierenden E-Moduli, Querkontraktionszahlen und Dehngrenzen unter Zugbelastung sind in Abb. 7.21 bis 7.26 aufgelistet. Alle entsprechenden Kennwerte bei Druckbelastung sind in Abb. 7.27 und 7.28 gegeben. Man erkennt, dass bei Zugbelastung alle Kennzahlen mit zunehmendem Graphitvolumenanteil sinken. Das Gleiche trifft auf eine steigende durchschnittliche Graphitpartikelgröße für die E-Moduli und die Dehngrenzen zu, für die Querkontraktionszahlen gilt hier das Gegenteil. Mit zunehmender Temperatur wird die Differenz der Kennwerte zwischen den verschiedenen Graphitausprägungen bei Zugbelastung geringer. Der Grund hierfür wurde bereits genannt. Ursächlich hierfür ist, dass sich die Steifigkeit der perlitischen Matrix mit steigender Temperatur reduziert und sich somit dem degradierten Graphit angleicht.

Bei Druckbelastung tritt dieses Phänomen quasi nicht auf, da deutlich weniger Graphitpartikel degradiert werden und somit deren Einfluss auf das makroskopische Materialverhalten wesentlich kleiner ist. Zudem wirkt sich bei Druckbelastung ein steigender Graphitvolumenanteil positiv auf die E-Moduli und die Dehngrenzen aus, da die überwiegend nicht degradierten Graphitlamellen eine höhere Steifigkeit als die perlitische Matrix besitzen. Die unterschiedlichen Kennwerte bei Zug- und Druckbelastung sind eine Charakteristik zug-druck-spannungsasymmetrischer Werkstoffe. Die Kennwerte des idealisierten IA3 SVE sind der GG-15-Ausprägung am ähnlichsten.

Als E-Moduli der GG-15-SVE ergeben sich bei Raumtemperatur unter Zugbelastung folgende Werte: $E_{p0,1}^{10\text{v.}\%} = 112 \text{ GPa}$, $E_{p0,2}^{11\text{v.}\%} = 108 \text{ GPa}$, $E_{p0,2}^{12\text{v.}\%} = 106 \text{ GPa}$. Dies ist in gutem Einklang mit der Literatur, dort werden für einen GG-15-Werkstoff bspw. Werte von $E = 78 \text{ GPa}$ bis 103 GPa angegeben [45]. Eine gute Übereinstimmung besteht auch zwischen der Querkontraktionszahl der Simulationsergebnisse des GG-15-Werkstoffs bei Druckbelastung, $\nu_{p0,1}^{12\text{v.}\%} = 0,246$, und der Literatur, $\nu = 0,26$ [45]. Für

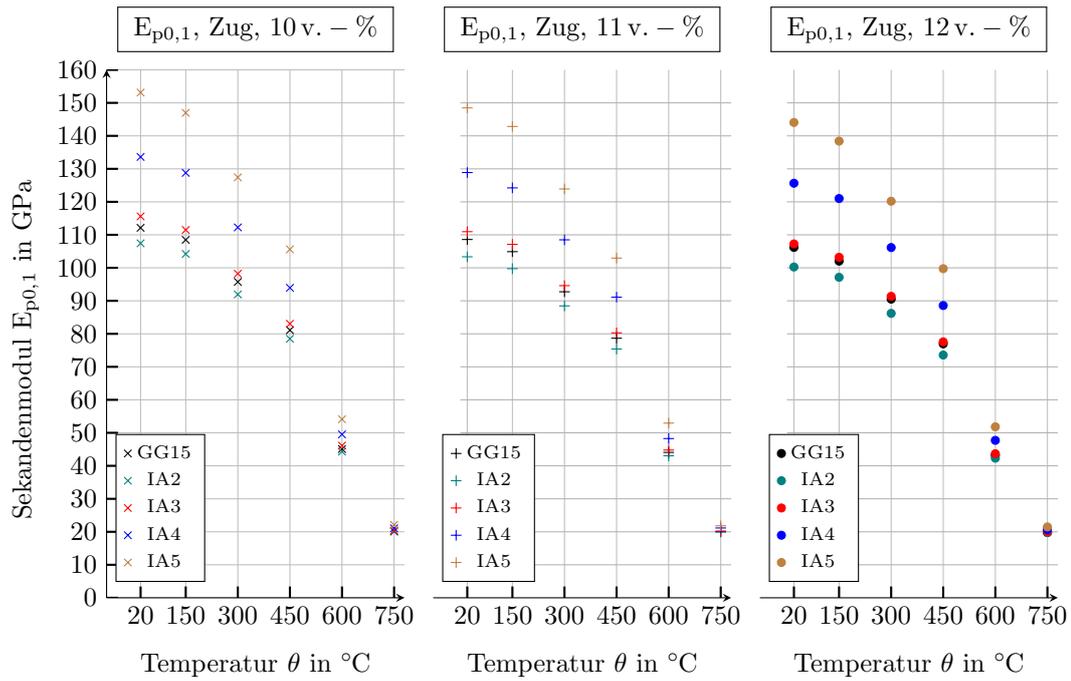


Abbildung 7.21: Sekantenmoduli, ausgewertet bei einer Zugdehnung von 0,1 %, aller Graphitausprägungen mit Graphitvolumenanteilen von 10, 11 und 12 v. - %, für die Temperaturen 20, 150, 300, 450, 600 und 750 °C.

die Dehngrenzen ergeben sich die Werte $R_{p0,1}^{10\text{ v. - \%}} = 206 \text{ MPa}$, $R_{p0,1}^{11\text{ v. - \%}} = 202 \text{ MPa}$ und $R_{p0,1}^{12\text{ v. - \%}} = 199 \text{ MPa}$, denen Literaturwerten von $R_{p0,1} = 98 \text{ MPa}$ bis 165 MPa gegenüberstehen [45].

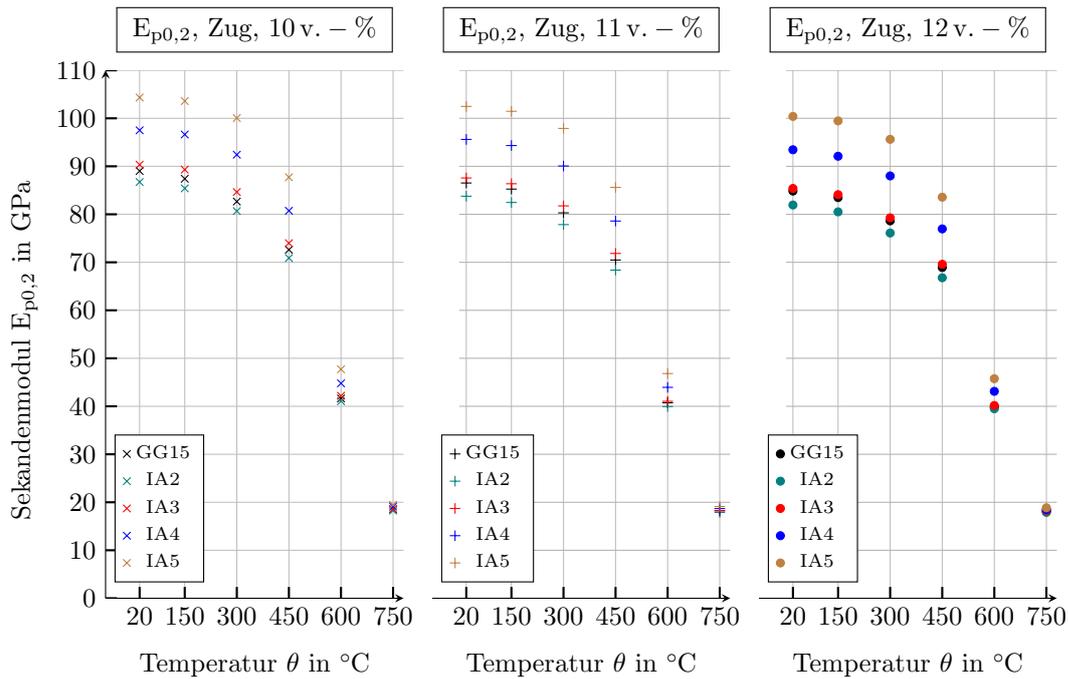


Abbildung 7.22: Sekantenmoduli, ausgewertet bei einer Zugdehnung von 0,2%, aller Graphitausprägungen mit Graphitvolumenanteilen von 10, 11 und 12 v.-%, für die Temperaturen 20, 150, 300, 450, 600 und 750 $^{\circ}\text{C}$.

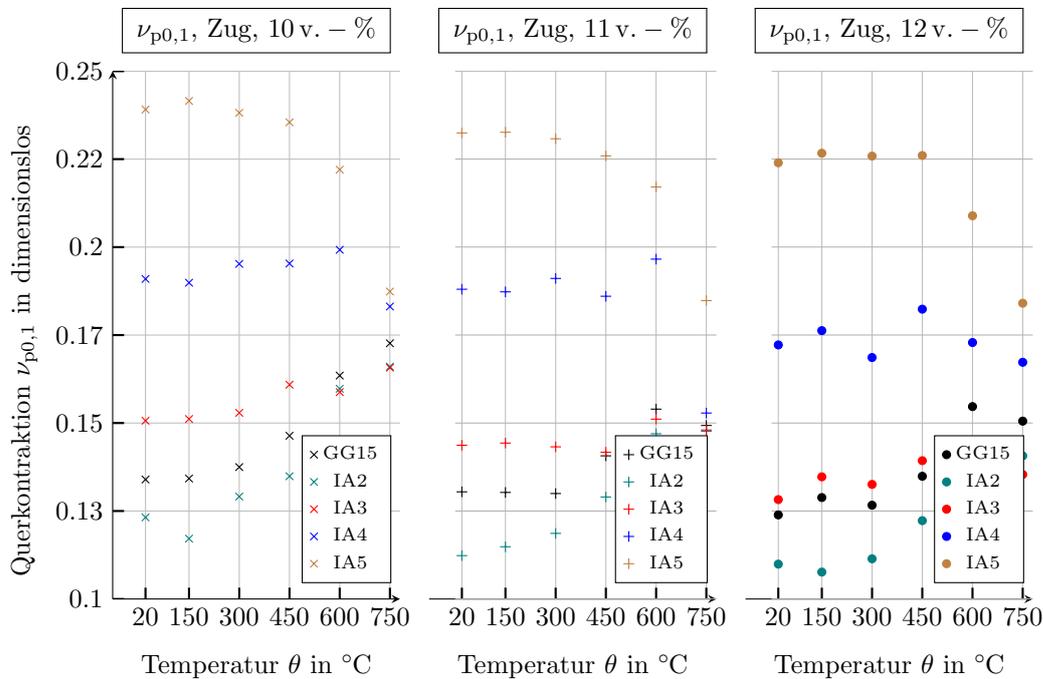


Abbildung 7.23: Querkontraktionen, ausgewertet bei einer Zugdehnung von 0,1%, aller Graphitausprägungen mit Graphitvolumenanteilen von 10, 11 und 12 v.-%, für die Temperaturen 20, 150, 300, 450, 600 und 750 $^{\circ}\text{C}$.

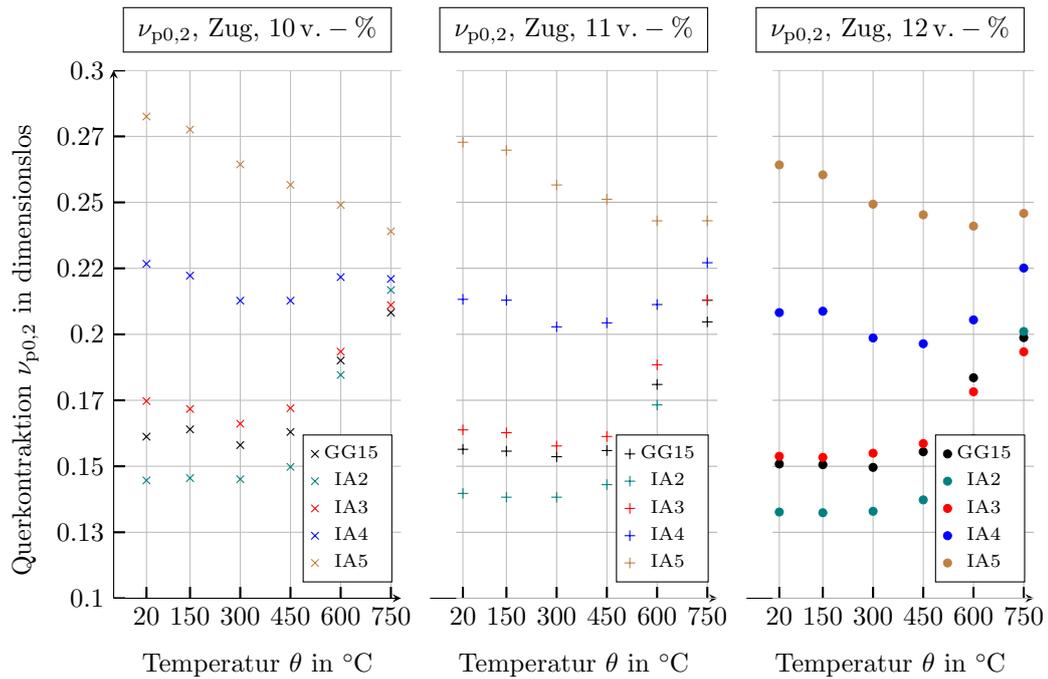


Abbildung 7.24: Querkontraktionen, ausgewertet bei einer Zugdehnung von 0,2%, aller Graphitausprägungen mit Graphitvolumenanteilen von 10, 11 und 12 v.-%, für die Temperaturen 20, 150, 300, 450, 600 und 750 °C.

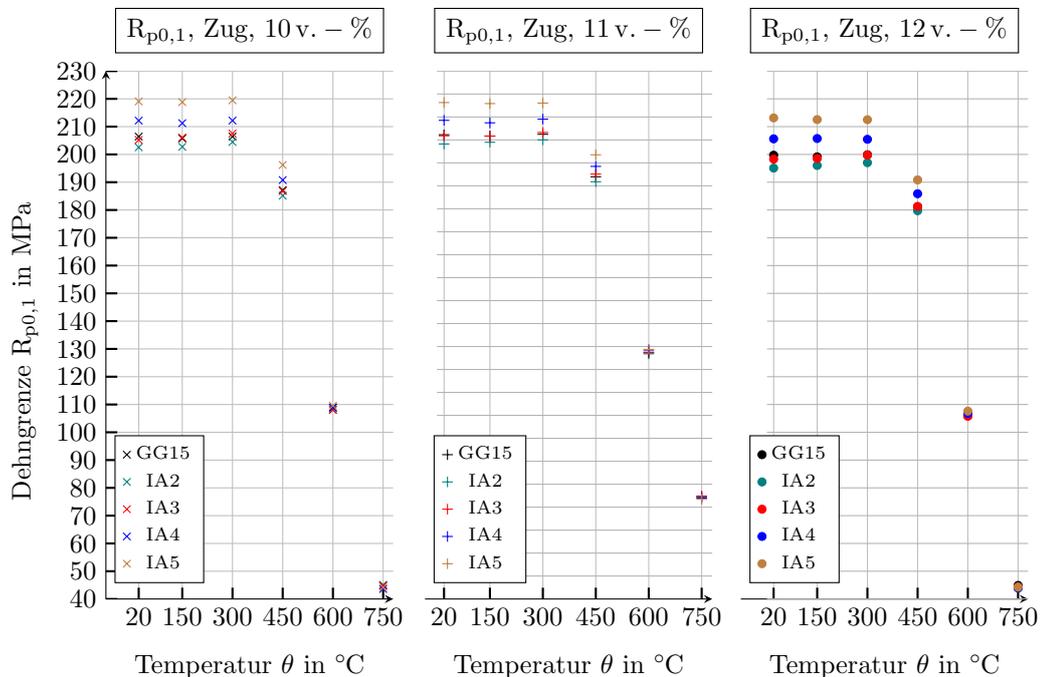


Abbildung 7.25: Dehngrenzen, ausgewertet bei einer Dehnung von $\varepsilon = 0,1\%$, aller Graphitausprägungen mit Graphitvolumenanteilen von 10, 11 und 12 v.-%, für die Temperaturen 20, 150, 300, 450, 600 und 750 °C.

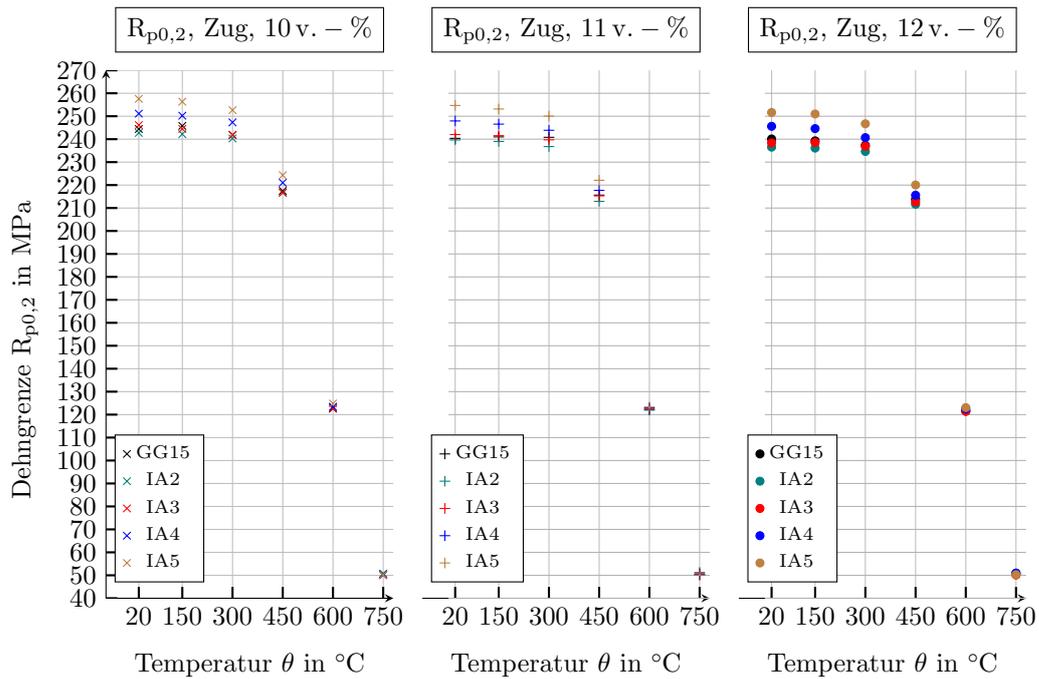


Abbildung 7.26: Dehngrenzen, ausgewertet bei einer Dehnung von 0,2%, aller Graphitausprägungen mit Graphitvolumenanteilen von 10, 11 und 12 v.-%, für die Temperaturen 20, 150, 300, 450, 600 und 750 $^{\circ}\text{C}$.

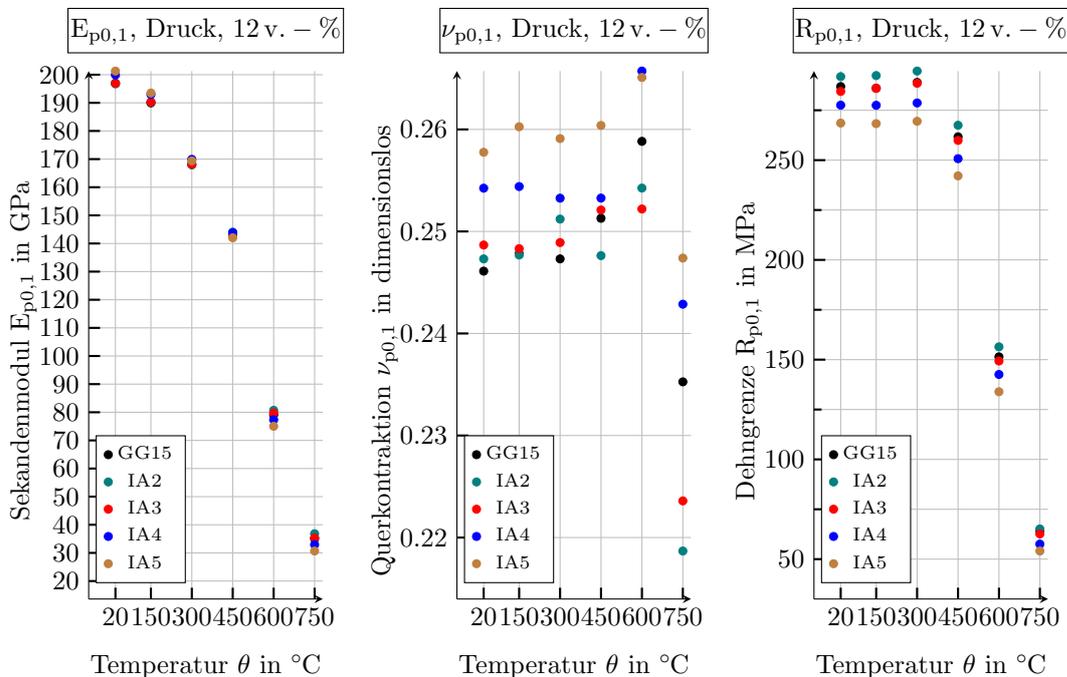


Abbildung 7.27: Sekantenmoduli, Querkontraktionen und Dehngrenzen, ausgewertet bei einer Druckdehnung von 0,1%, aller Graphitausprägungen mit Graphitvolumenanteilen von 12 v.-%, für die Temperaturen 20, 150, 300, 450, 600 und 750 $^{\circ}\text{C}$.

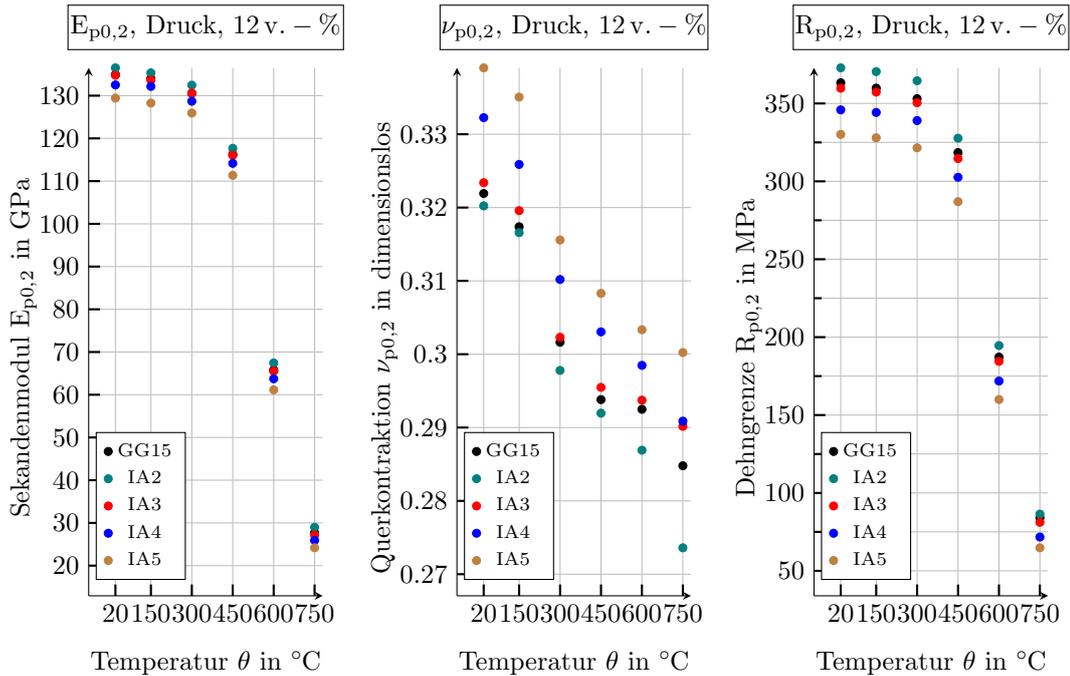


Abbildung 7.28: Sekantenmoduli, Querkontraktionen und Dehngrenzen, ausgewertet bei einer Druckdehnung von 0,2%, aller Graphitausprägungen mit Graphitvolumenanteilen von 12 v. – %, für die Temperaturen 20, 150, 300, 450, 600 und 750 °C.

7.4 Thermische Simulationen

Zur Untersuchung des Einflusses der Graphitausprägung und des Graphitvolumenanteils auf die thermischen Eigenschaften von Gusseisen mit Lamellengraphit wird eine Simulationsstudie durchgeführt. Die Studie umfasst Simulationen von SVE jeder möglichen Permutation der Graphitausprägungen GG-15, IA2, IA3, IA4 und IA5 [40], mit Graphitvolumenanteilen von 10, 11 und 12 v. – %, für die Temperaturen $\theta = \{20\text{ °C}; 150\text{ °C}; 300\text{ °C}; 450\text{ °C}; 600\text{ °C}; 750\text{ °C}\}$.

Das nachfolgend beschriebene Simulations-Setup umfasst die Berechnung von thermischen Gleichgewichtszuständen, unter dem Einfluss der Wärmeleitung, als einzige Art der Wärmeübertragung, siehe Kapitel 6. Bei den durchgeführten Simulationen ist die lokale Änderung der Temperatur eines materiellen Punktes nur gering. Daher werden die lokale Wärmeleitfähigkeit und die Wärmekapazität als konstant betrachtet. Auf die Verifikation des Modells der Wärmeleitfähigkeit wird verzichtet, da es sich hierbei um ein gut etabliertes und oft verwendetes “Standardmodell” handelt. Als Randbedingungen werden die Temperaturen auf zwei sich gegenüberliegenden Seiten eines SVE als konstant, aber unterschiedlich und die Randbedingungen der restlichen Seiten als adiabatisch festgelegt. Besitzt die Oberseite eines SVE beispielsweise die konstante Temperatur θ_O und die Unterseite θ_U , und es gilt $\theta_O \neq \theta_U$, dann stellt sich im Gleichgewicht eine konstante Wärmestromdichte zwischen der Ober- und Unterseite ein. Auf Grundlage dessen lässt sich mit Hilfe des in August et al. [10] vorgestellten Verfahrens die effektive Wärmeleitfähigkeit eines heterogenen Materials berechnen, wobei die Berechnung der Wärmestromdichte unter Einbeziehung der tensoriellen Wärmeleitfähigkeit des Graphits erfolgt. Die berechneten Wärmeleitfähigkeiten sind in Abb. 7.29 gezeigt.

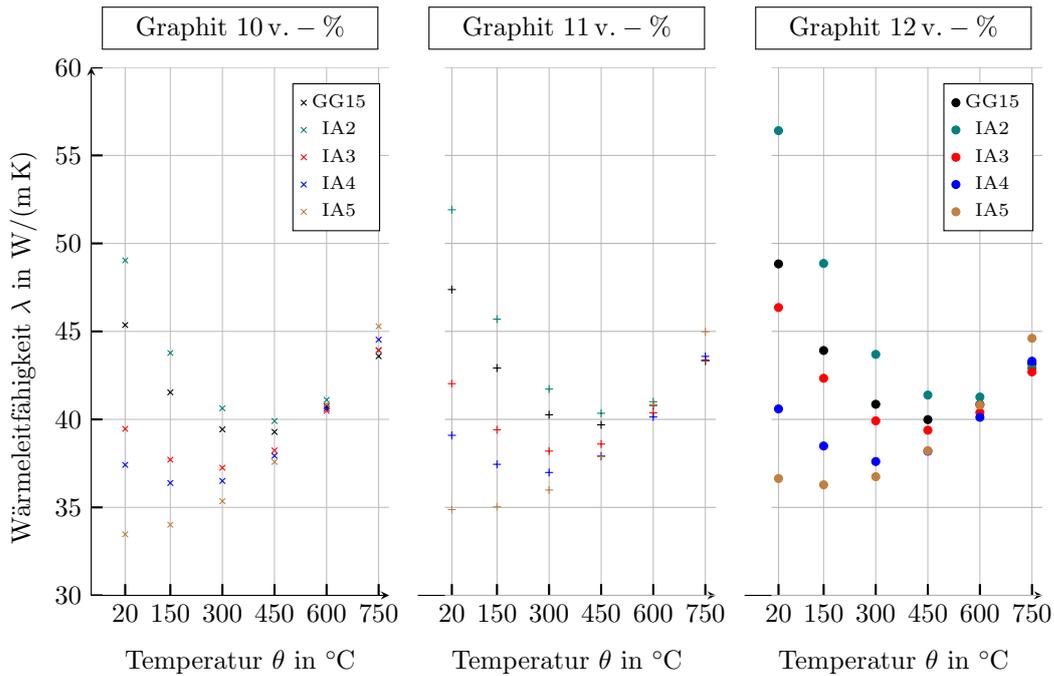


Abbildung 7.29: Wärmeleitfähigkeiten aller Graphitausprägungen mit Graphitvolumenanteilen von 10, 11 und 12 v. - %, für die Temperaturen 20, 150, 300, 450, 600 und 750 °C.

Laut Hecht et al. [57] ist eine höhere Wärmeleitfähigkeit in Strukturen mit längeren Graphitlamellen die Folge eines größeren, für die Wärmeleitung verfügbaren, Anteils an Basalebene. Mit der gleichen Argumentation folgt auch eine zunehmende effektive Wärmeleitfähigkeit in SVE mit steigendem Quotienten zwischen der Lämellenhöhe und den Lamellenlängsachsen [65, 142]. Diese Aussagen spiegeln auch die Simulationsergebnisse wider. In Abb. 7.29 erkennt man, dass die Wärmeleitfähigkeit der SVE mit steigender durchschnittlicher Größe der Graphitpartikel von IA5 nach IA2 zunimmt. Wie bereits in Holmgren [65] beobachtet, erkennt man, dass die thermische Leitfähigkeit von Grauguss mit steigender Temperatur sinkt.

Als Wärmeleitfähigkeit der GG-15-SVE ergeben sich für $\theta = 150\text{ °C}$ folgende Werte: $\lambda^{10\text{ v. - \%}} = 41,53\text{ W/(mK)}$, $\lambda^{11\text{ v. - \%}} = 42,91\text{ W/(mK)}$ und $\lambda^{12\text{ v. - \%}} = 43,91\text{ W/(mK)}$. In DIN 1691 [38] ist bei einer Temperatur von $\theta = 100\text{ °C}$ ein Wert von $\lambda = 42,5\text{ W/(mK)}$ für Gusseisen mit Lamellengraphit aufgeführt, d.h. die berechneten Wärmeleitfähigkeiten sind durchaus plausibel.

Mehrphasenfeldmodell für phasenabhängige Plastizität

Teile dieses Kapitels wurden bereits in der Publikation Herrmann et al. [61] veröffentlicht.

In numerischen Simulationen von metallischen Bauteilen unter mechanischer Belastung werden Werkstoffe allgemein als homogen angesehen. Diese Annahme ist für Simulationen auf der makroskopischen Längenskala sinnvoll. Betrachtet man metallische Materialien auf der mesoskopischen Skala, so bestehen die scheinbar homogenen Materialien aus einer Vielzahl von unterschiedlichen Kristallen, Poren und Einschlüssen mit unterschiedlichen physikalischen Eigenschaften und Kristallorientierungen. Diese physikalisch unterscheidbaren Regionen werden im Sinne der Mehrphasenfeldmethode nachfolgend als *Phasen* bezeichnet. Besonders wichtig in der Materialwissenschaft ist die Beobachtung von Materialien auf der mesoskopischen Ebene. Dies liegt daran, dass die morphologische Entwicklung bei Fest-Fest-Phasentransformationsprozessen, unter dem Einfluss verschiedener thermodynamischer Größen, und die daraus entstehende Mikrostruktur ausschlaggebend für die makroskopischen Materialeigenschaften sind. Um die Entstehung und Umwandlung von Phasen mit klassischen Ansätzen zu simulieren, ist eine rechnerisch aufwändige Identifikation der Phasengrenzen notwendig. Hier bietet die Phasenfeldmethode eine effiziente Alternative, da alle Informationen der Phasengrenzen implizit durch die diffusen Übergänge der Phasenfelder gegeben sind. Dies ermöglicht es, die Entwicklung von Phasengrenzen bei komplexen dreidimensionalen Mehrphasensystemen mit vertretbarem Rechenaufwand numerisch zu imitieren.

Selbst bei kleinen globalen Verformungen kann es auf der mesoskopischen Skala lokal zu plastischen Deformationen kommen. Die plastischen Bereiche resultieren zum Beispiel aus Spannungsspitzen an den Phasengrenzen, die durch unterschiedliche mechanische Eigenschaften und/ oder Orientierungen der Phasen verursacht werden können. Gitterverzerrungen, die unter anderem durch die martensitische Transformation oder unterschiedliche Wärmeausdehnungskoeffizienten hervorgerufen werden, können ebenfalls zu Spannungen führen, die plastische Verzerrungen hervorrufen. Für eine exakte Berechnung der für Umwandlungsprozesse verantwortlichen mechanischen treibenden Kräfte können die nicht linearen Auswirkungen der plastischen Verzerrungen nicht vernachlässigt werden.

Obwohl die aufgeführten Ursachen für plastische Verzerrungen eine große Relevanz besitzen und von wissenschaftlichem Interesse sind, sollen sie im Mehrphasenfeldkontext schlicht die allgemeine Notwendigkeit eines validen Modells zur Beschreibung elastoplastischer Verformungen verdeutlichen. Das eigentliche Anliegen für die Entwicklung eines elastoplastischen Modells gliedert sich in diese Arbeit jedoch dadurch ein, dass die Rissentstehung und -ausbreitung in Gusseisen mit Lamellengraphit, bestehend aus

spröd-anisotropen Graphiteinschlüssen und einer duktilen Matrix, untersucht werden soll. In Kapitel 9 wird deshalb ein Phasenfeldrissmodell entwickelt, das die Betrachtung solcher Prozesse in Verbundwerkstoffen, bestehend aus spröd-anisotropen Inklusionen und einer duktilen Matrix, ermöglicht. Das vorliegende Kapitel dient dabei als mechanische Grundlage. Das nachfolgend vorgestellte Phasenfeldmodell zur Berechnung elastoplastischer Verzerrungen erfüllt die mechanischen Sprungbedingungen und erlaubt die unabhängige Betrachtung von linear elastischem und nicht linear elastischem Materialverhalten innerhalb einer Mikrostruktur. Dabei besitzt jede Phase ihre eigenen, von allen anderen Phasen unabhängigen, plastischen Felder. Als Grundlage des Modells wird auf das Phasenfeldelastizitätsmodell für finite Deformationen von Schneider et al. [124] zurückgegriffen.

Es existieren viele Ansätze, um mechanische Nichtlinearitäten in den Phasenfeldkontext zu integrieren. Im Rahmen der kleinen Verformung reichen die Modelle über ratenunabhängige (Uehara et al. [139], Schmitt et al. [117], Schneider et al. [121]) bis hin zu ratenabhängigen Plastizitätsmodellen (Ubachs et al. [138], Yamanaka et al. [148], Gaubert et al. [48], de Rancourt et al. [35]). Für große Verformungen wurden Kristallplastizitätsansätze (Yamanaka et al. [149], Schmitt et al. [118, 119]) vorgestellt. Außerdem wurde die Evolution von Versetzungen vergleichsweise früh berücksichtigt (Leonard und Desai [80], Hu und Chen [68], Wang et al. [143], Rodney et al. [112], Zhou et al. [155]). Ammar et al. [7] veröffentlichten einen allgemeinen Rahmen, um nicht lineare mechanische Gleichungen in Phasenfeldmodelle zu inkludieren. Alle zuvor genannten Ansätze erfüllen nicht die mechanischen Sprungbedingungen.

Unter Bezugnahme auf Ammar et al. [7] gibt es zwei Grundprinzipien, um nicht lineare mechanische, konstitutive Gleichungen im Phasenfeldkontext zu etablieren. Das erste Prinzip umfasst Modelle, bei denen jede Phase eines Mehrphasensystems den gleichen Satz an konstitutiven Gleichungen besitzt. Als Konsequenz daraus müssen Materialparameter in Mehrphasenbereichen interpoliert werden. Jeder *interpolierte Materialparameter* liegt im Wertebereich der reinen Phasen, abhängig von den vorherrschenden Konzentrationen oder den Phasenfeldvariablen der einzelnen Phasen. Für jeden materiellen Punkt existiert nur ein Spannungstensor und jeweils ein totaler, elastischer und plastischer Verzerrungstensor der für alle Phasen, auch in mehrphasigen materiellen Punkten, gültig ist. Im Gegensatz dazu besitzt unter Anwendung von Prinzip zwei jede bestehende Phase α ihren *eigenen* Spannungstensor, $\boldsymbol{\sigma}^\alpha$, und *eigene* totale, elastische und plastische Verzerrungstensoren, $\boldsymbol{\varepsilon}^\alpha$, $\boldsymbol{\varepsilon}_e^\alpha$, $\boldsymbol{\varepsilon}_p^\alpha$, die durch Homogenisierungsmethoden in allen mehrphasigen materiellen Punkten berechnet werden. Der zweite Ansatz bietet die Möglichkeit, verschiedene konstitutive Modelle für jede Phase anzuwenden und macht die Interpolation von Materialparametern obsolet. Mit den phasenspezifischen mechanischen Feldgrößen werden *homogenisierte Feldgrößen* durch eine volumenanteilige Interpolation der phasenabhängigen Feldgrößen gewonnen.

Das vorgestellte Modell gehört zum zweiten Typ der beschriebenen Prinzipien. Wie bereits erwähnt, ist ein wichtiger Vorteil der Typ-2-Modelle, dass jede Phase, unabhängig von anderen Phasen, durch einen eigenen Satz an konstitutiven Gleichungen geprägt ist. Infolgedessen ist in mehrphasigen Bereichen keine Interpolation von Materialparametern erforderlich und die Position der scharfen Kontaktunstetigkeit wird reproduziert. Das Modell ist dazu in der Lage, da es die phasenhärenten Spannungen und Verzerrungen unter Verwendung der mechanischen Sprungbedingungen (Abschnitt 4) berechnet. Obwohl der Ansatz für jedes beliebige nicht lineare mechanische, konstitutive Modell anwendbar ist, wird exemplarisch ein ratenunabhängiges J_2 -Plastizitätsmodell

mit isotroper linearer Verfestigung, wie in Abschnitt 4.4.2 beschrieben, verwendet, um die plastischen Verzerrungen zu berechnen. Außerdem beschränke ich mich auf die Betrachtung kleiner Verformungen. Nach meinem Wissen wurde bisher kein elasto-plastisches Mehrphasenfeldmodell realisiert, das vollständig auf die Interpolation von Materialparametern verzichtet.

Das vorliegende Kapitel gliedert sich folgendermaßen: Zunächst werden die verwendeten Modelle in Abschnitt 8.1 vorgestellt. In Abschnitt 8.1.1 wird bei der Modellvorstellung einführend ein kurzer Überblick über das verwendete Phasenfeldframework gegeben. In Abschnitt 8.1.2 wird ein vereinfachtes Elastizitätsmodell mit der Beschränkung auf kleine Verformungen vorgestellt, das auf dem Phasenfeldelastizitätsmodell für finite Verformungen in Mehrphasensystemen von Schneider et al. [124] basiert. Für die Berechnung der plastischen Verformungen werden anschließend zwei verschiedene Ansätze eingeführt. Mit dem *Homogenisierungsansatz* (Abschnitt 8.1.3.1) wird ein Modell vorgeschlagen, das es ermöglicht, phaseninhärente, plastische Verzerrungen zu berechnen. Der zweite Modellansatz verwendet interpolierte Materialparameter, entsprechend der Arbeit von Schneider et al. [121], um plastische Verzerrungen auf für jede Phase gleichermaßen geltenden plastischen Feldern zu berechnen. Der Interpolationsansatz wird in Abschnitt 8.1.3.2 vorgestellt und dient dazu, einige Vorteile und Merkmale des neuen Homogenisierungsansatzes zu verdeutlichen. Ist nachfolgend eine allgemeine effektive Größe gemeint, die nicht durch einen bestimmten Modellansatz spezifiziert ist, besitzt diese Feldgröße das Superskript: \square^{eff} . Bei der Verwendung des Interpolationsansatzes werden die interpolierte Feldgrößen durch die Notation $\bar{\square}$ und für den Homogenisierungsansatz durch die Notation $\tilde{\square}$ ausgedrückt. Alle kapitelspezifischen Kernpunkte der Numerik sowie alle spezifischen Punkte des Simulationsaufbaus werden in Abschnitt 8.2 behandelt. Anschließend wird das vorgestellte Modell in Abschnitt 8.3 verifiziert und validiert. Pseudo-1D-Simulationen der beiden verschiedenen Plastizitätsmodelle (Abschnitt 8.3.1) und ein Pseudo-2D-Vergleich zwischen der Lösung eines Problems mit diffusem Grenzbereich und dem äquivalenten Problem mit scharfen Grenzflächen (Abschnitt 8.3.2) dienen der Verifikation des mechanischen Modells. In Abschnitt 8.4 wird der Einfluss der neuen Modellformulierung auf die zeitliche Entwicklung von Phasenfeldern, hinsichtlich der Vererbung der plastischen Verzerrungen, für zwei Pseudo-1D-Beispiele untersucht. Der Abschnitt 8.5 enthält eine exemplarische Anwendung, die die martensitische Transformation in einem Mehrphasensystem unter Berücksichtigung plastischer Verzerrungen zeigt.

8.1 Modellformulierung

8.1.1 Mehrphasenfeldmodell

Die Phasenfeldmethode bietet einen hervorragenden Ansatz zur Simulation von mikrostrukturellen Entwicklungsprozessen wie Erstarrung [19], Fest-Fest-Phasentransformationen [28, 93], martensitische Transformation [84] und Rissausbreitung [3, 123]. Dabei besitzt sie bei der Lösung des mathematisch anspruchsvollen Problems der Anwendung von Randbedingungen auf Flächen, deren unbekannt Position Teil der Lösung des Problems ist, einen entscheidenden intrinsischen Vorteil gegenüber klassischen Methoden [19]. In heterogenen Materialien äußert sich der Übergang von einer Phase zu einer anderen durch abrupte Änderungen von Materialeigenschaften. Die “scharfen” Übergänge zwischen verschiedenen Phasen werden im Rahmen der Phasenfeldme-

thode regularisiert dargestellt. Regularisiert bedeutet in diesem Zusammenhang, dass sich Phasenübergänge über nicht infinitesimale Bereiche erstrecken. Für die Identifizierung von Phasen und ihren Übergangsregionen werden Phasenfelder eingeführt. Im Multiphasenfeldkontext besitzt jede Phase ein eigenes *Phasenfeld*, das sich im Übergangsbereich von einer Region in der eine bestimmte Phase existiert, zu Regionen in denen die Phase nicht existiert, kontinuierlich ändert. Alle unstetigen Flächen, die verschiedene Phasen voneinander abgrenzen, können durch die diffusen Übergangsbereiche identifiziert werden, was eine explizite Grenzflächenverfolgung, wie bei klassischen Verfahren erforderlich, überflüssig macht [29]. Eine etwaige morphologische Entwicklung der Mikrostruktur ist durch die Veränderung der Phasenfelder gegeben und wird durch treibende Kräfte kontrolliert.

Von Nestler et al. [95] wurde ein Mehrphasenfeldmodell formuliert, das die Beschreibung der Entwicklung von Mikrostrukturen in Mehrphasen- und Mehrkomponentensystemen auf der mesoskopischen Längenskala ermöglicht. Die Parametrisierung der Phasen innerhalb eines Körpers, Ω , an der Position \mathbf{x} , zum Zeitpunkt t , erfolgt unter Verwendung der Phasenfelder $\phi^\alpha(\mathbf{x}, t) : \Omega \times \mathbb{R}_{\geq 0} \rightarrow [0, 1]$. Die verschiedenen Phasen werden durch $\alpha \in \{1, \dots, N\}$ differenziert, wobei $N \in \mathbb{N}$ die Anzahl an im Körper vorhandenen Phasen angibt. Zur Vereinfachung der Notation werden alle Phasenfelder im Phasenfeld- N -Tuple $\hat{\phi}(\mathbf{x}, t) = (\phi^\alpha, \phi^\beta, \dots, \phi^N)$ gesammelt und deren Gradienten sind durch $\nabla \hat{\phi} = (\nabla \phi^\alpha, \nabla \phi^\alpha, \dots, \nabla \phi^N)$ gegeben. Wie bereits erwähnt, ist bei Phasenfeldmodellen der Übergang zwischen unterschiedlichen Domänen diffus. Der Wert eines Phasenfeldes ändert sich in einem Phasenübergangsbereich kontinuierlich: $0 < \phi^\alpha < 1$. Wenn nur eine einzige Phase α in einem materiellen Punkt vorhanden ist gilt, $\phi^\alpha = 1$.

In Mehrphasenfeldmodellen werden die jeweiligen Ordnungsparameter als die Volumenanteile der unterschiedlichen Phasen betrachtet. Darum muss die Zwangsbedingung

$$\sum_{\alpha=1}^N \phi^\alpha = 1 \quad (8.1)$$

stets eingehalten werden. Außerdem wird eine normalisierte kontinuierliche Interpolationsfunktion [92],

$$h^\alpha(\hat{\phi}) = \frac{(\phi^\alpha)^2(3 - 2\phi^\alpha)}{\sum_{\beta=1}^N (\phi^\beta)^2(3 - 2\phi^\beta)}, \quad (8.2)$$

zur Berechnung von effektiven physikalischen Werten eingeführt. Die Interpolationsfunktion erfüllt die Bedingung $\sum_{\alpha=1}^N h^\alpha = 1$ in Bereichen mit mehreren Phasen, wobei der Übergang zwischen verschiedenen Phasen schmaler ist, als wenn der Phasenfeldwert ϕ^α als Gewichtungsfaktor der Interpolationsfunktion verwendet wird.

Um die *gesamte freie Energie eines Körpers* Ω zu berechnen, wird ein *freie Energiefunktional* der Form

$$\mathcal{F}(\hat{\phi}, \nabla \hat{\phi}, \hat{\varepsilon}_e, \hat{\varepsilon}_{\text{akk}}) = \int_{\Omega} \underbrace{\epsilon a(\hat{\phi}, \nabla \hat{\phi}) + \frac{1}{\epsilon} \omega(\hat{\phi}) + f_e^{\text{eff}}(\hat{\phi}, \hat{\varepsilon}_e) + f_p^{\text{eff}}(\hat{\phi}, \hat{\varepsilon}_{\text{akk}}) + f_x(\dots)}_{f(\hat{\phi}, \nabla \hat{\phi}, \hat{\varepsilon}_e, \hat{\varepsilon}_{\text{akk}})} dV. \quad (8.3)$$

angewendet. Dabei ist

$$\epsilon a(\hat{\phi}, \nabla \hat{\phi}) = \epsilon \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\beta=\alpha+1}^N \gamma^{\alpha\beta} |\mathbf{q}^{\alpha\beta}|^2 \quad (8.4)$$

die *Gradientenenergiedichte*, mit $\mathbf{q}^{\alpha\beta}(\hat{\phi}, \nabla \hat{\phi}) = \phi^\alpha \nabla \phi^\beta - \phi^\beta \nabla \phi^\alpha$ als generalisierten α - β -Gradienten [95]. Durch die Verwendung des verallgemeinerten *antisymmetrischen Gradientenvektors*, $\mathbf{q}^{\alpha\beta}$, werden dem Modell genügend Freiheitsgrade hinzugefügt, um zwischen der Physik der unterschiedlichen Phasen zu unterscheiden. Der Parameter ϵ steht im Zusammenhang mit der *Länge des Übergangsbereichs* l . Das *Hindernispotential*,

$$\frac{\omega(\hat{\phi})}{\epsilon} = \frac{16}{\epsilon \pi^2} \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\beta=\alpha+1}^N \gamma^{\alpha\beta} \phi^\alpha \phi^\beta + \frac{1}{\epsilon} \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\beta=\alpha+1}^N \sum_{\delta=\beta+1}^N \gamma^{\alpha\beta} \phi^\alpha \phi^\beta \phi^\delta, \quad (8.5)$$

beinhaltet die *Oberflächenenergie* $\gamma^{\alpha\beta}$ zwischen zwei Phasen α und β . Um die Entstehung nicht physikalischer Drittphasen in Zwei-Phasen-Regionen zu unterdrücken, wird ein Strafterm höherer Ordnung, $\propto \phi^\alpha \phi^\beta \phi^\delta$, verwendet [95]. Wie in Nestler et al. [95] vorgestellt, wird bei Verwendung des Hindernispotentials $\omega = \infty$ gesetzt, wenn das Phasenfeld- N -Tupel $\hat{\phi}$ nicht innerhalb des *Gibbs-Simplexes*

$$Gibb = \left\{ \hat{\phi} \in \mathbb{R}^N : \sum_{\alpha=1}^N \phi^\alpha = 1, \phi^\alpha \geq 0 \right\} \quad (8.6)$$

liegt. Beide Terme, die Gradientenenergiedichte ϵa und das Hindernispotential ω/ϵ , repräsentieren gemeinsam die Energie der Phasengrenzen. Mit der *effektiven Formänderungsenergie*, $f_e^{\text{eff}}(\hat{\phi}, \hat{\epsilon}_e)$, und der *effektiven internen plastischen Energie*, $f_p^{\text{eff}}(\hat{\phi}, \hat{\epsilon}_{\text{akk}})$, ergibt sich die gesamte freie Energie des Körpers Ω aus dem Energiefunktional (8.3), in Abhängigkeit vom Phasenfeld- N -Tupel $\hat{\phi}$ und seiner *Gradienten* $\nabla \hat{\phi}$, von den gesammelten *phasenabhängigen elastischen Verzerrungen* $\hat{\epsilon}_e$ sowie von den gesammelten *akkumulierten plastischen Verzerrungen* $\hat{\epsilon}_{\text{akk}}$. Die modellansatzabhängige Formänderungsenergie und die modellansatzabhängige plastische Energie werden in den folgenden Abschnitten 8.1.2 und 8.1.3 definiert. *Zusätzliche Energiebeiträge*, $f_x(\dots)$, können dem Energiefunktional hinzugefügt werden.

Mit einem von Steinbach und Pezzolla [133] vorgeschlagenen Ansatz ist die zeitliche und räumliche Entwicklung der Phasenfelder durch

$$\frac{\partial \phi^\alpha(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -\frac{1}{\epsilon N_{\text{lok}}} \sum_{\beta \neq \alpha}^{N_{\text{lok}}} M^{\alpha\beta} \left(\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \phi^\alpha} - \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \phi^\beta} \right) \quad (8.7)$$

gegeben. Hierbei ist

$$\frac{\delta \mathcal{F}(\hat{\phi}, \nabla \hat{\phi}, \hat{\epsilon}_e, \hat{\epsilon}_{\text{akk}})}{\delta \phi^\alpha} = \frac{\partial f(\hat{\phi}, \nabla \hat{\phi}, \hat{\epsilon}_e, \hat{\epsilon}_{\text{akk}})}{\partial \phi^\alpha} - \nabla \cdot \frac{\partial f(\hat{\phi}, \nabla \hat{\phi}, \hat{\epsilon}_e, \hat{\epsilon}_{\text{akk}})}{\partial \nabla \phi^\alpha} \quad (8.8)$$

die *Variationsableitung des freie Energiefunktionals* bzgl. des Phasenfeldes der Phase α , $M^{\alpha\beta}$ die *Mobilität eines Grenzbereichs zwischen den Phasen* α und β und N_{lok} die *Anzahl an lokal vorliegenden Phasen*. Mathematisch gesehen ist die Mobilität ein Relaxationsparameter des Minimierungsproblems für das Funktional der freien Energie. Befindet sich ein System nicht in einem thermodynamischen Gleichgewichtszustand, erfahren die Phasenfelder eine Entwicklung, die durch Gleichung (8.7) gegeben

ist. Die Formulierung der Evolutionsgleichung garantiert, dass die Konfigurationskräfte der Grenzflächenenergien reproduziert werden.

Da sich dieses Kapitel mit der Entwicklung eines elastoplastischen Modells im Mehrphasenfeldkontext beschäftigt, wird auf die Ableitung der Gradientenenergiedichte und des Hindernispotentials nicht näher eingegangen und stattdessen auf Nestler et al. [95] verwiesen. Die Ableitung des Terms $\delta f_e^{\text{eff}}/\delta\phi^\alpha$ wird in Abschnitt 8.1.2 eingeführt. Unter der Annahme kleiner Verformungen und aufgrund der Tatsache, dass die plastische Werkstoffverfestigung wesentlich kleiner als das E-Modul ist, wird angenommen, dass der Beitrag $\delta f_p^{\text{eff}}/\delta\phi^\alpha$ vernachlässigt werden kann.

8.1.2 Elastisches Mehrphasenfeldmodell

In der Arbeit von Schneider et al. [124] wurde ein Phasenfeldelastizitätsmodell für finite Deformationen in Mehrphasensystemen vorgestellt und validiert. Eine vereinfachte Version des Modells, mit der Einschränkung auf kleine Verformungen, wird in diesem Abschnitt vorgestellt. Da kleine Verformungen angenommen werden, sind die totalen Verzerrungen durch Gleichung (4.13) gegeben, und es gilt das Hooke'sche Gesetz (4.54).

Das Modell erfüllt die mechanischen Sprungbedingungen, nämlich die statische Impulsbilanz auf Kontaktunstetigkeiten (4.35) und die Hadamard'sche Kompatibilitätsbedingung (4.15). Die beiden Sprungbedingungen dienen als physikalische Unterkonstruktion des folgenden elastischen Mehrphasenfeldmodells. Überträgt man die mechanischen Sprungbedingungen auf die diffuse Grenzbertheorie, dann müssten in einem mehrphasigen materiellen Punkt mit N_{lok} koexistierenden Phasen die Hadamard'sche Kompatibilitätsbedingung zwischen jeder möglichen Kombination von zwei existierenden Phasen erfüllt sein. Da dies in einem unbestimmten Problem resultiert, werden nachfolgend die mechanischen Sprungbedingungen hinsichtlich der *Phase mit dem größten Volumenanteil* eines materiellen Punktes erfüllt. Diese Phase wird als 1 bezeichnet. Wie in Schneider et al. [124] gezeigt, führt dies in einem mehrphasigen materiellen Punkt, unter Betrachtung aller möglichen Phasenkombinationen zwischen der Phase 1 und allen anderen Phasen α , mit den Normalenvektoren $\mathbf{n}^{1\alpha}$, zu einem Problem mit $N_{\text{lok}} - 1$ unbekanntem Sprüngen der phaseninhärenten Verschiebungsgradienten $[[\mathbf{H}]]^{1\alpha} = \mathbf{H}^1 - \mathbf{H}^\alpha = \mathbf{a}^{1\alpha} \otimes \mathbf{n}^{1\alpha}$. Es wird daher ein Satz an $N_{\text{lok}} - 1$ unbekanntem Rang-1 Sprüngen der Verschiebungsgradienten $\mathbf{a}^{12}, \mathbf{a}^{13}, \dots, \mathbf{a}^{1N_{\text{lok}}}$ definiert und im Tuple

$$\hat{\mathbf{a}} = (\mathbf{a}^{12}, \mathbf{a}^{13}, \dots, \mathbf{a}^{1N_{\text{lok}}})^T, \quad (8.9)$$

gesammelt. Die Berechnung von Oberflächennormalvektoren innerhalb von Phasenfeldanwendungen ist einfach. Laut Beckermann et al. [12] beschreibt

$$\mathbf{n}^{\alpha\beta}(\nabla\hat{\phi}) = \frac{\nabla\phi^\alpha}{|\nabla\phi^\alpha|} = -\frac{\nabla\phi^\beta}{|\nabla\phi^\beta|} \quad (8.10)$$

den Einheitsnormalenvektor in Regionen, in denen nur zwei Phasen koexistieren. In mehrphasigen Regionen lautet der Normalenvektor zwischen zwei Phasen

$$\mathbf{n}^{\alpha\beta}(\nabla\hat{\phi}) = \frac{\nabla\phi^\alpha - \nabla\phi^\beta}{|\nabla\phi^\alpha - \nabla\phi^\beta|}, \quad (8.11)$$

was in Moelans et al. [94] nachzulesen ist. Es gilt die Annahme, dass der *effektive Verschiebungsgradient* durch einen volumetrischen Mittelwert der phasenabhängigen Verschiebungsgradienten $\hat{\mathbf{H}} = (\mathbf{H}^1, \mathbf{H}^2, \dots, \mathbf{H}^N)$ gegeben ist, $\mathbf{H}^{\text{eff}}(\hat{\phi}, \hat{\mathbf{H}}) = \sum_{\alpha=1}^N h^\alpha \mathbf{H}^\alpha$. Für den Verschiebungsgradienten der Phase 1 ergibt sich daraus

$$\mathbf{H}^1 = \mathbf{H}^{\text{eff}} + \sum_{\alpha=2}^{N_{\text{lok}}} \mathbf{a}^{1\alpha} \otimes \mathbf{n}^{1\alpha} h^\alpha, \quad (8.12)$$

indem man $[[\mathbf{H}]]^{1\alpha}$ und \mathbf{H}^{eff} kombiniert. Die übrigen Verschiebungsgradienten folgen als

$$\mathbf{H}^\alpha = \mathbf{H}^1 - \mathbf{a}^{1\alpha} \otimes \mathbf{n}^{1\alpha}, \quad (8.13)$$

wenn sie in Bezug auf \mathbf{H}^1 festgelegt werden.

Um die unbekannt Sprünge der Verschiebungsgradienten (8.9) zu bestimmen, wird die statische Impulsbilanz auf Kontaktunstetigkeiten (4.35) für jede mögliche Wechselwirkung zwischen einer Phase α gegenüber der Phase mit dem größten Volumenanteil, Phase 1, angewendet, dies führt zu folgendem Gleichungssystem:

$$\hat{\mathbf{g}}(\hat{\mathbf{a}}) = \begin{pmatrix} [[\boldsymbol{\sigma}]]^{12} \cdot \mathbf{n}^{12} \\ [[\boldsymbol{\sigma}]]^{13} \cdot \mathbf{n}^{13} \\ \vdots \\ [[\boldsymbol{\sigma}]]^{1N_{\text{lok}}} \cdot \mathbf{n}^{1N_{\text{lok}}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\mathcal{C}^1[\boldsymbol{\varepsilon}_e^1(\hat{\mathbf{a}})] - \mathcal{C}^2[\boldsymbol{\varepsilon}_e^2(\hat{\mathbf{a}})]) \cdot \mathbf{n}^{12} \\ (\mathcal{C}^1[\boldsymbol{\varepsilon}_e^1(\hat{\mathbf{a}})] - \mathcal{C}^3[\boldsymbol{\varepsilon}_e^3(\hat{\mathbf{a}})]) \cdot \mathbf{n}^{13} \\ \vdots \\ (\mathcal{C}^1[\boldsymbol{\varepsilon}_e^1(\hat{\mathbf{a}})] - \mathcal{C}^{N_{\text{lok}}}[\boldsymbol{\varepsilon}_e^{N_{\text{lok}}}(\hat{\mathbf{a}})]) \cdot \mathbf{n}^{1N_{\text{lok}}} \end{pmatrix} = \mathbf{0} \quad (8.14)$$

Die Lösung des Gleichungssystems, die zusätzlich dem Fall der geringsten elastischen Energie entspricht, erfüllt die mechanischen Sprungbedingungen, wie in Schneider et al. [124] gezeigt. Das Gleichungssystem kann mit der Newton-Raphson-Methode und dem folgenden Newton-Schritt der Iteration n gelöst werden:

$$\hat{\mathbf{a}}^{n+1} = \hat{\mathbf{a}}^n - \left(\frac{\partial \hat{\mathbf{g}}(\hat{\mathbf{a}}^n)}{\partial \hat{\mathbf{a}}^n} \right)^{-1} \cdot \hat{\mathbf{g}}(\hat{\mathbf{a}}^n). \quad (8.15)$$

Bei nicht linearen Fällen empfiehlt sich die Anwendung einer numerischen Tangente,

$$\frac{\partial \hat{\mathbf{g}}(\hat{\mathbf{a}}^n)}{\partial \hat{\mathbf{a}}^n} \approx \frac{\hat{\mathbf{g}}(\hat{\mathbf{a}}^n + \delta \hat{\mathbf{a}}) - \hat{\mathbf{g}}(\hat{\mathbf{a}}^n - \delta \hat{\mathbf{a}})}{2\delta \hat{\mathbf{a}}^n}. \quad (8.16)$$

Durch die Verwendung einer numerischen Tangente kann das Gleichungssystem für jedes beliebige nicht lineare konstitutive Materialgesetz gelöst werden. Anders als in Schneider et al. [122], wird an dieser Stelle die Newton-Raphson-Methode zur iterativen Bestimmung einer Lösung des Gleichungssystems verwendet, da das Gleichungssystem im Falle eines nicht linearen Materialverhaltens nicht linear ist. Mit der Lösung des linearen Gleichungssystems und den berechneten Sprüngen der Verschiebungsgradienten, $\hat{\mathbf{a}}$, lassen sich die phaseninhärenten Spannungen, $\boldsymbol{\sigma}^\alpha$, durch das Hooke'sche Gesetz,

$$\boldsymbol{\sigma}^\alpha = \mathcal{C}^\alpha[\boldsymbol{\varepsilon}_e^\alpha], \quad (8.17)$$

berechnen, wobei $\boldsymbol{\varepsilon}^\alpha(\mathbf{a}^\alpha) = \frac{1}{2}(\mathbf{H}^\alpha(\mathbf{a}^\alpha) + (\mathbf{H}^\alpha(\mathbf{a}^\alpha))^\top)$ kombiniert mit Gleichung (8.13) die phasenabhängigen totalen Verzerrungen ergibt. Im nachfolgenden Abschnitt 8.1.3 wird die Berechnung der elastischen Verzerrungen, $\boldsymbol{\varepsilon}_e^\alpha$, eingeführt.

Die *Entwicklung des Verschiebungsfeldes* \mathbf{u} ist durch die statische Impulsbilanz, $\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}^{\text{eff}} = \mathbf{0}$, siehe Gleichung (4.34), gegeben. Dabei ist

$$\boldsymbol{\sigma}^{\text{eff}}(\hat{\boldsymbol{\phi}}, \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_e) = \sum_{\alpha=1}^N h^\alpha \boldsymbol{\sigma}^\alpha \quad (8.18)$$

der *effektive Spannungstensor*. Die *phaseneigene elastische Formänderungsenergie* ergibt sich zu

$$f_e^\alpha(\boldsymbol{\varepsilon}_e^\alpha) = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon}_e^\alpha : \boldsymbol{\sigma}^\alpha, \quad (8.19)$$

siehe Gleichung (4.53), womit die *effektive elastische Formänderungsenergie*,

$$f_e^{\text{eff}}(\hat{\boldsymbol{\phi}}, \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_e) = \sum_{\alpha=1}^N h^\alpha f_e^\alpha, \quad (8.20)$$

durch eine volumenanteilige Interpolation folgt. Schneider et al. [124] haben gezeigt, dass die Ableitung von f_e^{eff} nach ϕ^α

$$\frac{\partial f_e^{\text{eff}}(\hat{\boldsymbol{\phi}}, \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_e)}{\partial \phi^\alpha} = \sum_{\beta=1}^N \left(f_e^\beta \frac{\partial h^\beta}{\partial \phi^\alpha} + h^\beta \sum_{\delta \in N \setminus \{\beta\}} \frac{\partial h^\delta(\hat{\boldsymbol{\phi}})}{\partial \phi^\alpha} \boldsymbol{\sigma}^\beta \cdot \mathbf{n}^{\beta\delta} \cdot \llbracket \mathbf{H} \rrbracket^{\beta\delta} \cdot \mathbf{n}^{\beta\delta} \right) \quad (8.21)$$

ergibt. Die Auswirkung der sogenannten *mechanischen Mikrospannungen* auf die Phasenumwandlung, die durch den Term $\partial f_e^{\text{eff}}(\hat{\boldsymbol{\phi}}, \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_e) / \partial \nabla \phi^\alpha$ der Phasenfeldevolutionsgleichung (8.7) gegeben sind, wird vernachlässigt.

8.1.3 Plastische Mehrphasenfeldmodelle

Nachfolgend werden zwei Ansätze eingeführt, um elastoplastische Verzerrungen im Multiphasenfeldkontext zu berechnen. Im Abschnitt *Homogenisierungsansatz - Phasenhärente Plastizität*, 8.1.3.1, wird ein Modell hergeleitet, das die Beschreibung von phasenhärenten plastischen Verzerrungen ermöglicht. Der Abschnitt *Interpolationsansatz - Geteiltes Plastizitätsfeld*, 8.1.3.2, enthält einen Modellansatz, der plastische Verzerrungen unter Verwendung volumengemittelter Spannungen und volumetrisch interpolierter Materialparameter berechnet. Die beiden Ansätze werden später verglichen, Abschnitt 8.3.

Da kleine Deformationen angenommen werden, gilt die additive Zerlegung der totalen Verzerrung in elastische, plastische Anteile und Eigendehnungsbeiträge:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}_e + \boldsymbol{\varepsilon}_p + \boldsymbol{\varepsilon}_{\text{eig}}, \quad (8.22)$$

vgl. Gleichung (4.62). Wenn Phasenfeldmodelle mit Plastizität gekoppelt werden, stellt sich die grundlegende Frage, was mit den plastischen Verzerrungen einer elastoplastischen Phase passiert, wenn sie in eine andere Phase umgewandelt wird. Im Folgenden wird angenommen, dass plastische Verzerrungen innerhalb des Homogenisierungsan-

satzes nicht vererbbar sind, da jede Phase ihre eigenen plastischen Felder besitzt. Das bedeutet, dass die plastischen Verzerrungen der Phase α in einem materiellen Punkt vollständig verschwinden, nachdem sie in eine andere Phase β umgewandelt wurde. Die plastischen Deformationen einer elterlichen Phase α hinterlassen keine Eigendehnungen und haben keinen Einfluss auf die Verfestigung der Kindphase β . Falls es notwendig sein sollte, ist eine Vererbung von plastischen Verzerrungen in das Homogenisierungsmodell integrierbar. Innerhalb des Interpolationsansatzes teilen sich alle Phasen die gleichen plastischen Felder, sodass die plastischen Verzerrungen während eines Phasenübergangs vollständig an die nachfolgende Phase übertragen werden. Detaillierte Untersuchungen zur Vererbung der plastischen Deformationen wurden beispielsweise von Ammar et al. [8] und Ostwald et al. [101] durchgeführt.

8.1.3.1 Homogenisierungsansatz - Phasenhärente Plastizität

An dieser Stelle wird ein *Homogenisierungsplastizitätsmodell* für den Multiphasenfeldkontext hergeleitet, das die Berechnung *phasenhärenter plastischer Verzerrungen und phasenhärenter akkumulierter plastischer Verzerrungen*, $\boldsymbol{\varepsilon}_p^\alpha$ und $\boldsymbol{\varepsilon}_{\text{akk}}^\alpha$, in mehrphasigen Bereichen ermöglicht. Zur Berechnung der plastischen Verzerrungen wird davon ausgegangen, dass jede Phase in einem diffusen Phasenübergang unabhängig von anderen bestehenden Phasen plastisch fließen kann. Das bedeutet, dass plastische Verzerrungen in der Regel zuerst in der Phase mit der niedrigsten Fließspannung auftreten und sich eine weitere Phase erst dann plastisch zu verformen beginnt, wenn die plastische Verfestigung der bereits plastifizierten Phase hoch genug ist.

Das Vorgehen zur Bestimmung der phasenhärenten plastischen Verzerrungen wird exemplarisch durch ein J_2 -Plastizitätsmodell mit isotroper linearer Verfestigung demonstriert und erfolgt unter Einhaltung der mechanischen Sprungbedingungen. Die phaseneigenen Spannungen $\boldsymbol{\sigma}^\alpha$, wie in Abschnitt 8.1.2 eingeführt, werden zur Berechnung der phasenspezifischen plastischen Verzerrungen verwendet. Im Allgemeinen ist jedes nicht lineare konstitutive, mechanische Modell mit dem nachfolgenden Verfahren kompatibel. Es ist sogar denkbar, dass jede Phase ihrem individuellen nicht linearen mechanischen Verhalten folgt.

Basierend auf Abschnitt 4.4.2 erhält jede Phase α im Rahmen des Homogenisierungsansatzes eine eigene Fließfunktion zur Berechnung der phasenhärenten plastischen Verzerrungen,

$$f_f^\alpha(\boldsymbol{s}^\alpha, \boldsymbol{\varepsilon}_{\text{akk}}^\alpha) = \sigma_{\text{v.M.}}^\alpha(\boldsymbol{s}^\alpha) - \sigma_y^\alpha(\boldsymbol{\varepsilon}_{\text{akk}}^\alpha) \leq 0. \quad (8.23)$$

Hierbei ist \boldsymbol{s}^α der deviatorische Spannungstensor der Phase α , siehe Gleichung (4.17), und $\sigma_{\text{v.M.}}^\alpha(\boldsymbol{s}^\alpha)$ die dazugehörige von-Mises-Vergleichsspannung, entsprechend der Gleichung (4.65). Die *Fließspannung der Phase α* ist durch $\sigma_y^\alpha(\boldsymbol{\varepsilon}_{\text{akk}}^\alpha) = \sigma_{y,0}^\alpha + H^\alpha \boldsymbol{\varepsilon}_{\text{akk}}^\alpha$, vgl. Gleichung (4.67), gegeben. In dieser Gleichung ist $\sigma_{y,0}^\alpha$ die *phasenabhängige Fließspannungsgrenze*, H^α der *phasenabhängige lineare Verfestigungsfaktor* und $\boldsymbol{\varepsilon}_{\text{akk}}^\alpha = \sqrt{2/3} \int_0^t \sqrt{\boldsymbol{\varepsilon}_p^\alpha : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_p^\alpha} dt$ die entsprechende *phasenabhängige akkumulierte plastische Verzerrung* nach Gleichung (4.66). Wird die Ungleichung (8.23) zu Null und ist zusätzlich die phaseneigene plastische Belastungsbedingung, Gleichung (4.70), erfüllt, verformt sich Phase α

plastisch. Zur Beschreibung der zeitlichen Entwicklung der plastischen Verzerrungen besitzt jede Phase α eine assoziative Fließregel,

$$\dot{\varepsilon}_p^\alpha = \dot{\lambda}^\alpha \frac{\mathbf{s}^\alpha}{|\mathbf{s}^\alpha|}, \quad (8.24)$$

vgl. Abschnitt 4.4.2. Die Bestimmung des *phaseneigenen plastischen Konsistenzparameters* $\dot{\lambda}^\alpha$ wird mittels des eingeführten Return-Mapping-Algorithmus, Abschnitt 4.4.2, durchgeführt. Der *plastische Energiebeitrag* der Phase α lautet:

$$f_p^\alpha(\varepsilon_{\text{akk}}^\alpha) = \frac{1}{2} H^\alpha (\varepsilon_{\text{akk}}^\alpha)^2, \quad (8.25)$$

vgl. Gleichung (4.68). Daraus folgt die *homogenisierte interne plastische Energie des Homogenisierungsansatzes*, durch eine volumenanteilige Interpolation:

$$\tilde{f}_p(\hat{\phi}, \varepsilon_{\text{akk}}) = \sum_{\alpha=1}^N h^\alpha f_p^\alpha. \quad (8.26)$$

Die phaseneigenen elastischen Verzerrungen berechnen sich im Falle des Homogenisierungsansatzes bei additiver Zerlegung der Verzerrung folgendermaßen:

$$\tilde{\varepsilon}_e^\alpha = \frac{1}{2} \left(\mathbf{H}^\alpha + (\mathbf{H}^\alpha)^\top \right) - \varepsilon_p^\alpha - \varepsilon_{\text{eig}}^\alpha, \quad (8.27)$$

womit sich die phaseneigenen Spannungen entsprechend Gl. (8.17) berechnen lässt,

$$\tilde{\sigma}^\alpha = \mathcal{C}^\alpha [\tilde{\varepsilon}_e^\alpha]. \quad (8.28)$$

8.1.3.2 Interpolationsansatz - Geteiltes Plastizitätsfeld

Im Rahmen des *Interpolationsansatzes* werden die volumengemittelten Spannungen σ^{eff} , Gleichung (8.18), zur Berechnung der plastischen Verzerrungen verwendet. Jede Phase teilt sich sowohl den gleichen Satz an nicht linearen mechanischen, konstitutiven Gleichungen als auch die gleichen plastischen Felder. Mit diesem Modell ist es nicht möglich, verschiedene nicht lineare Verhaltensweisen für verschiedene Phasen zu definieren.

Ähnlich wie im vorherigen Abschnitt 8.1.3.1, wird, entsprechend der J_2 -Plastizitätstheorie mit isotroper linearer Verfestigung, eine Fließfunktion der Form

$$\bar{f}_f(\hat{\phi}, \mathbf{s}^{\text{eff}}, \varepsilon_{\text{akk}}) = \sigma_{\text{v.M.}}(\mathbf{s}^{\text{eff}}) - \bar{\sigma}_y(\hat{\phi}, \varepsilon_{\text{akk}}) \leq 0 \quad (8.29)$$

verwendet. Die *interpolierte Fließspannung* ist unter Verwendung einer volumetrischen Interpolation durch $\bar{\sigma}_y(\hat{\phi}, \varepsilon_{\text{akk}}) = \sum_{\alpha=1}^N h^\alpha (\sigma_{y,0}^\alpha + H^\alpha \varepsilon_{\text{akk}})$ gegeben. Hierbei ist $\sigma_{y,0}^\alpha$ und H^α die phasenabhängige Fließgrenze und der phasenabhängige, lineare Verfestigungsfaktor. Mit der *interpolierten, akkumulierten plastischen Verzerrung*

$$\varepsilon_{\text{akk}} = \sqrt{\frac{2}{3}} \int_0^t \sqrt{\dot{\varepsilon}_p^\alpha : \dot{\varepsilon}_p^\alpha} dt \quad (8.30)$$

sind alle Terme der interpolierten Fließfunktion eingeführt. Wenn die interpolierte Fließfunktion zu Null wird, beginnt sich jede Phase eines mehrphasigen Bereichs bei

Erfüllung der Belastungsbedingung in gleichem Ausmaß plastisch zu verformen. Die Fließregel nimmt in Rahmen des Interpolationsansatzes folgende Form an:

$$\dot{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}}_p = \dot{\bar{\lambda}} \frac{\mathbf{s}^{\text{eff}}}{|\mathbf{s}^{\text{eff}}|}. \quad (8.31)$$

Der plastische Konsistenzparameter $\dot{\bar{\lambda}}$ wird durch den eingeführten Return-Mapping-Algorithmus berechnet. Die *interpolierte, internen plastischen Energie* beträgt

$$\bar{f}_p(\hat{\phi}, \varepsilon_{\text{akk}}) = \frac{1}{2} \left(\sum_{\alpha=1}^N h^\alpha H^\alpha \right) (\varepsilon_{\text{akk}})^2. \quad (8.32)$$

Bei der Berechnung der phaseneigenen elastischen Verzerrungen wird wie folgt verfahren:

$$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_e^\alpha = \frac{1}{2} \left(\mathbf{H}^\alpha + (\mathbf{H}^\alpha)^\top \right) - \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_p - \boldsymbol{\varepsilon}_{\text{eig}}^\alpha. \quad (8.33)$$

Die phaseneigenen Spannungen lassen sich mit Gl. (8.17) berechnen,

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}}^\alpha = \mathbf{C}^\alpha [\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_e^\alpha]. \quad (8.34)$$

Der deviatorische Spannungstensor \mathbf{s}^{eff} ergibt sich mit diesem Spannungsmaß unter Verwendung von Gl. (8.18).

8.2 Kapitelspezifische Kernpunkte der Numerik und des Simulationsaufbaus

Das Ziel dieses Kapitels ist die Einführung eines neuen physikalischen Modells zur Berechnung von plastischen Verzerrungen im Mehrphasenfeldkontext, und ausdrücklich nicht dass der Erarbeitung spezieller numerischer Lösungsverfahren. Daher wird nachfolgend nur ein grober Überblick über die kapitelspezifische numerische Umsetzung und den generellen Simulationsaufbau gegeben.

Die hier beschriebenen Parameter und Einstellungen gelten für alle Simulationen dieses Kapitels, es sei denn, sie werden für einzelne Simulationen neu spezifiziert. Alle Simulationen wurden mit dem institutseigenen Softwarepaket PACE3D (Parallel Algorithms for Crystal Evolution in 3D) durchgeführt. Als räumliches Diskretisierungsgitter wurde ein äquidistantes orthogonales Gitter verwendet. Da räumlich gekrümmte Strukturen mit Hilfe der diffusen Grenzbereichtheorie auch unter Anwendung eines äquidistanten orthogonalen Gitters gut approximiert werden können, war kein komplexeres Diskretisierungsgitter erforderlich. Die Phasenfeldgleichungen (8.7) und der Satz mechanischer Gleichungen (siehe Abschnitt 8.1.2 und Abschnitt 8.1.3) wurden gestaffelt ausgewertet, was bedeutet, dass keine monolithische Lösung berechnet wurde.

Die Phasenfeldevolutionsgleichung (8.7) wurde im Zentrum der numerischen Zellen berechnet. Hierbei wurde ein explizites Euler-Schema für die Zeitableitung und die *Finite-Differenzen-Methode* (FDM) für die räumlichen Ableitungen angewendet. Im Falle der finiten Differenzen wurde auf zentrale Differenzen zweiter Ordnung zurückgegriffen. Während der Initialisierung der Simulationen wurde ein diffuser Übergangsbereich zwischen allen im Gebiet vorliegen Phasen erzeugt.

Die Positionen der Spannungen und Dehnungen auf dem Diskretisierungsgitter entsprechen einem Finite-Elemente-Gitter mit linearen Elementen und voller Integration. Unter Verwendung eines zweistufigen Prädiktor-Korrektor-Return-Mapping-Algorithmus (siehe Abschnitt 4.4.2) wurden die plastischen Verzerrungen unter Einhaltung der mechanischen Sprungbedingungen berechnet. Zur Berechnung des globalen statischen mechanischen Gleichgewichts wurde folgendermaßen vorgegangen: Zunächst wurden Prädiktorverschiebungsfelder unter Berücksichtigung der plastischen Verformungen des vorherigen Zeitschritts oder der initialen Werte durch einen iterativen Löser bestimmt, sodass das statische Kräftegleichgewicht $\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}^{\text{eff}} = \mathbf{0}$ erfüllt war. Auf Basis der Prädiktorfelder wurden die unbekanntenen plastischen Verzerrungen und akkumulierten plastischen Verzerrungen berechnet. Die globale Anpassung der Prädiktorverschiebungsfelder wurde mittels eines globalen Newton-Raphson-Verfahrens vorgenommen. Die Korrektur der Verschiebungsfelder berechnete sich aus der Verletzung der mechanischen Gleichgewichtsbedingung der letzten Iteration aufgrund der neuen plastischen Verzerrungen. Das Newton-Raphson-Verfahren wurde so lange wiederholt, bis die mechanische Gleichgewichtsbedingung für die neuen plastischen Dehnungen erfüllt waren.

Die Phasenfelder und mechanischen Felder dienten sich gegenseitig als Input und wurden zu diesem Zweck an die entsprechenden Positionen auf dem Diskretisierungsgitter interpoliert.

Die Implementierung wurde für allgemeine 3D-Probleme vorgenommen. Nachfolgend beschränke ich mich auf Pseudo-1D- (eine Zelle in y - und z -Richtung) oder Pseudo-2D-Simulationen (eine Zelle in z -Richtung). Dies vereinfacht die Analyse der Simulationsergebnisse. In Abschnitt 8.3 wird die Evolution der Phasenfelder unterdrückt.

8.3 Verifizierung des Modells zur Berechnung der phasenhärenten plastischen Dehnungen

Im folgenden Abschnitt werden anhand ausgewählter Beispiele einige Vorteile und Merkmale des neuen Modells aufgezeigt. Zuerst wird der neu entwickelte Homogenisierungsansatz 8.1.3.1 mit dem Interpolationsansatz 8.1.3.2 verglichen. Anschließend wird anhand eines 2D-Problems ein Vergleich gegenüber dem kommerziellen FEM-Programm ABAQUS [33] vorgenommen. Da die Betrachtungen in diesem Abschnitt nur Verifikationsfälle behandeln, spielt die quantitative Wahl der Materialparameter eine untergeordnete Rolle. Daher wird nur das Verhältnis der phasenspezifischen Materialparameter zueinander angegeben.

8.3.1 Vergleich der Plastizitätsmodelle anhand eines 1D-Simulationsgebietes

Zuerst wird das Modellverhalten der beiden vorgestellten Plastizitätsmodelle anhand einer Pseudo-1D-Materialkette, bestehend aus zwei unterschiedlichen Phasen, untersucht. Das Pseudo-1D-Simulationsgebiet (eine Zelle in y - und z -Richtung) der Länge L , dargestellt in Abb. 8.1, ist mit zwei Phasen, α und β , gefüllt, wobei der diffuse Phasenübergang genau in der Mitte der Domäne liegt, $\phi^\alpha(x = L/2) = \phi^\beta(x = L/2) = 0,5$. Der normale Vektor des diffusen Phasenübergangs zeigt genau in x -Richtung. Bei verschwindender diffuser Phasenübergangsbreite wird der Punkt $\phi^\alpha(x = L/2) = \phi^\beta(x = L/2) = 0,5$ zur kontaktunstetigen Grenzfläche des äquivalenten Problems mit sprunghaftem Pha-

senübergang. Damit sich das Phasenfeldmodell analog zum entsprechenden Problem mit sprunghaftem Phasenübergang verhält, muss der “kontinuierliche” Sprung der mechanischen Felder mit dem Phasenfeldprofil bei $\phi^\alpha(x = L/2) = \phi^\beta(x = L/2) = 0,5$ übereinstimmen, um sich auf der kontaktunstetigen Grenzfläche zu befinden.

Der Vergleich der beiden Modelle wird im Rahmen des Homogenisierungsansatzes, Abschnitt 8.1.3.1, mit der *homogenisierten von-Mises-Vergleichsspannung* $\sigma_{\tilde{v.M.}}(\hat{\phi}, \hat{\epsilon}_e) = \sum_{\alpha=1}^N \tilde{\sigma}_{\tilde{v.M.}}^\alpha h^\alpha$ und der *homogenisierten, akkumulierten plastischen Verzerrung* $\epsilon_{\tilde{\text{akk}}}(\hat{\phi}, \hat{\epsilon}_{\text{akk}}) = \sum_{\alpha=1}^N \epsilon_{\text{akk}}^\alpha h^\alpha$ sowie dem Äquivalent des Interpolationsansatzes, Abschnitt 8.1.3.2, $\sigma_{\tilde{v.M.}}(\hat{\phi}, \hat{\epsilon}_e) = \sum_{\alpha=1}^N \bar{\sigma}_{\tilde{v.M.}}^\alpha h^\alpha$ und $\epsilon_{\tilde{\text{akk}}}$, durchgeführt.

Als mechanische Randbedingung wurde auf allen freien Oberflächen eine orthogonale Verschiebung aufgeprägt und die tangentialen Verschiebungen frei zugelassen. Für die Oberflächen mit einem Normalenvektor in x -Richtung gilt dabei eine positive Verschiebung bzgl. des Normalenvektors von $u_x = u_0$. Auf den restlichen Rändern wird die orthogonale Verschiebung auf Null gesetzt: $u_y = u_z = 0$. Beide Phasen verhalten sich ideal plastisch, mit $H^\alpha = H^\beta = 0$, und sie besitzen die gleichen Steifigkeitstensoren $\mathbf{C}^\alpha = \mathbf{C}^\beta$. Um den Hauptvorteil des neuen Modells zu demonstrieren, wird die Fließgrenze der Phase α , $\sigma_{y,0}^\alpha$, konstant gehalten und die Fließgrenze der Phase β , $\sigma_{y,0}^\beta$, variiert. Es findet keine Phasenumwandlung statt.

Abbildung 8.1 zeigt die resultierenden dimensionslosen und skalierten von-Mises-Vergleichsspannungen (Diagramme *links*) und die akkumulierten plastischen Verzerrungen (Diagramme *rechts*) des Homogenisierungs- und Interpolationsansatzes für verschiedene Verhältnisse der phaseneigenen Fließgrenzen. Der Skalierungsfaktor ist hierbei der maximale Wert der von-Mises-Vergleichsspannung und der akkumulierten plastischen Verzerrung des Homogenisierungs- ($\sigma_{\tilde{v.M.},\text{max}}$ und $\epsilon_{\text{akk},\tilde{\text{max}}}$) und Interpolationsansatzes ($\sigma_{\tilde{v.M.},\text{max}}$ und $\epsilon_{\text{akk},\tilde{\text{max}}}$) aller Simulationsergebnisse, unter Variation von $\sigma_{y,0}^\beta$.

Werden die Fließspannungen beider Phasen erreicht bzw. überschritten, wie im Falle von $\sigma_{y,0}^\beta = 1,2\sigma_{y,0}^\alpha$, sind die Simulationsergebnisse beider Modelle identisch und erfüllen die geforderte Bedingung, dass sich die von-Mises-Vergleichsspannung $\sigma_{\tilde{v.M.}}$ und die akkumulierte plastische Verzerrung ϵ_{akk} mit dem Phasenfeldprofil bei $\phi^\alpha(x = L/2) = \phi^\beta(x = L/2) = 0,5$ schneiden. Treten wiederum nur in einer Phase plastische Verzerrungen auf, gibt es signifikante Abweichungen zwischen den beiden Modellen. Deutlich wird dies dadurch, dass im Falle des Modells mit phaseninhärenten plastischen Verzerrungen alle Plots der skalierten Werte im gleichen Ergebnis, unabhängig von der Wahl der Fließgrenze $\sigma_{y,0}^\beta$, resultieren. Die notwendige Bedingung, dass sich die mechanischen Felder mit dem Phasenfeldprofil bei $\phi^\alpha(x = L/2) = \phi^\beta(x = L/2) = 0,5$ schneiden, ist somit stets erfüllt. Auf die Ergebnisse des Interpolationsansatzes trifft dies nicht zu. Der Schnittpunkt zwischen den mechanischen Feldern und dem Phasenfeldprofil variiert mit sich änderndem $\sigma_{y,0}^\beta$. Dies ist ein enormer Vorteil des vorgestellten Homogenisierungsansatzes gegenüber dem Interpolationsansatz, da das Ergebnis des Modells mit interpolierten Materialparametern abhängig von der gewählten Fließgrenze ist. Der Grund für die variierenden Simulationsergebnisse ist in der interpolierten Fließspannung, $\bar{\sigma}_y$, zu finden. Mit zunehmender Fließspannung der Phase β , σ_y^β , wird die interpolierte Fließspannung nur in materiellen Punkten mit einem sehr geringen Volumenanteil der Phase β überschritten. Bei sehr hohen Werten von σ_y^β treten innerhalb des diffusen Phasenübergangs überhaupt keine plastischen Deformationen auf. Dieses Modellverhalten hat eine direkte Auswirkung auf die Phasenfeldevolution. Der “kontinuierliche” Sprung der mechanischen Felder wird mit zunehmendem σ_y^β zusammengestaucht, wodurch die

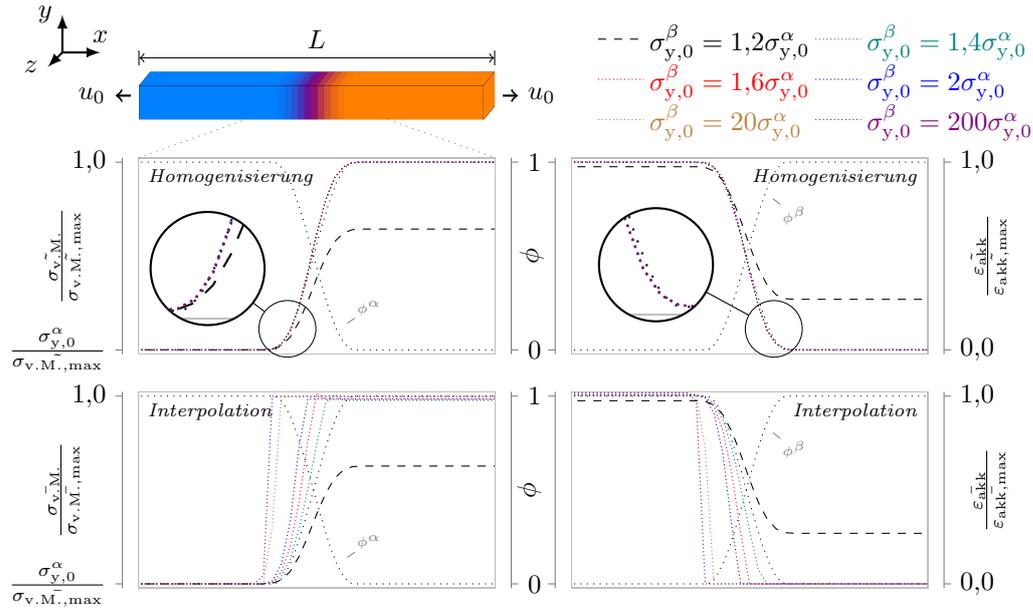


Abbildung 8.1: Vergleich von Pseudo-1D-Simulationsergebnissen des Homogenisierungs- und Interpolationsansatzes für unterschiedliche Fließgrenzverhältnisse der beiden vorliegenden Phasen α und β . In der Mitte des Simulationsgebietes befindet sich ein diffuser Übergangsbereich der beiden Phasen. Für jedes Verhältnis der phasenhärenten Fließgrenzen $\sigma_{y,0}^\alpha$ und $\sigma_{y,0}^\beta$, schneidet die dimensionslose und skalierte homogenisierte von-Mises-Vergleichsspannung $\sigma_{v.M.}$ und die homogenisierte akkumulierte plastische Verzerrung ε_{akk} des Homogenisierungsansatzes das Phasenfeldprofil bei $\phi^\alpha(x = L/2) = \phi^\beta(x = L/2) = 0,5$. Diese Bedingung ist erforderlich, um die kontaktunstetige Grenzflächenlösung abzubilden, und sie wird von den äquivalenten Werten des Interpolationsansatzes, $\sigma_{v.M.}$ und ε_{akk} , nicht erfüllt.

elastischen und plastischen treibenden Kräfte der Phasenumwandlung nicht symmetrisch zur “kontaktunstetigen Grenzfläche” aufgebracht werden. Infolgedessen kommt es zu einer unerwünschten Verzerrung des Phasenfeldgleichgewichtsprofils.

8.3.2 Vergleich des Homogenisierungsansatzes mit einer kontaktunstetigen Grenzflächenlösung

Dieser Abschnitt vergleicht Pseudo-2D-Simulationsergebnisse (eine Zelle in z -Richtung) des Homogenisierungsansatzes mit einer kontaktunstetigen Grenzflächenlösung (Abq.) des kommerziellen FEM-Lösers ABAQUS [33]. Ein quadratisches Simulationsgebiet mit drei Subdomänen, wie in Abb. 8.2 (Bild *oben links*) dargestellt, wird als Pseudo-2D-Simulationsaufbau verwendet. Das Simulationsgebiet besteht aus 400 Zellen in x - und y -Richtung. Es existieren drei verschiedene Phasen, α , β und γ , deren diffuse Phasenübergänge einen Tripelpunkt im Zentrum des Simulationsgebietes bilden. Die Zuteilung der entsprechenden Subdomänen zu den verschiedenen Phasen ist anhand Abb. 8.2 und der Farbcodierung: **orange** - Phase α ; **violett** - Phase β ; **blau** - Phase γ gegeben. Der Simulationsaufbau wurde gewählt, um Fehlerquellen zwischen den Simulationsergebnissen mit diffusen und scharfen Phasenübergängen, aufgrund von gekrümmten Geometrien, zu reduzieren. Die beiden Simulationen mit diffusen Phasenübergängen unterscheiden sich hinsichtlich der Länge des Übergangsbereichs l . Hierbei hat eine Si-

mulation eine diffuse Phasenübergangsbreite, die proportional zu $\epsilon = 3\Delta x$ ist, und die andere Phasenübergangsbreite ist proportional zu $\epsilon = 5\Delta x$, mit Δx als Gitterabstand in x -Richtung.

An allen freien Oberflächen wurden orthogonale Verschiebungen unterdrückt und tangentielle Verschiebungen frei zugelassen, was zu einem ebenen Verzerrungszustand führt. Alle Phasen besitzen die gleichen Steifigkeitstensoren, $\mathbf{C}^\alpha = \mathbf{C}^\beta = \mathbf{C}^\gamma$. Die phaseninhärenten Fließgrenzen sind $\sigma_{y,0}^\beta = 1,2\sigma_{y,0}^\alpha$ und $\sigma_{y,0}^\gamma = 2\sigma_{y,0}^\alpha$. Für die linearen Verfestigungsfaktoren gilt $H^\alpha = H^\beta = H^\gamma = \sigma_{y,0}^\alpha$. Phase β und γ besitzen die Eigenverzerrungen $\epsilon_{\text{eig},xx} = 0,01$ als Normaldehnung in x -Richtung und $\epsilon_{\text{eig},yy} = -5 \cdot 10^{-3}$ als Normaldehnung in y -Richtung. Das Simulations-Setup wird durch die Eigendehnungen mechanisch belastet. Es findet keine Phasenumwandlung statt.

In Abb. 8.2, sind die homogenisierten von-Mises-Vergleichsspannungen $\sigma_{v.M.}^{\sim}$ und die homogenisierten akkumulierten plastischen Verzerrungen $\epsilon_{\text{akk}}^{\sim}$ des Homogenisierungsansatzes, siehe Abschnitt 8.3.1, für die verschiedenen diffusen Phasenübergangsbreiten sowie die mit ABAQUS ermittelte von-Mises-Vergleichsspannung und die akkumulierte plastische Verzerrung entlang drei verschiedener Geraden durch das Simulationsgebiet dargestellt. Alle Diagramme sind dimensionslos dargestellt und wurden mit den maximalen Absolutwerten der spezifischen Feldgröße entlang der verschiedenen Geraden skaliert. Anhand der Diagramme erkennt man, dass eine gute Übereinstimmung zwischen den Ergebnissen des Phasenfeldmodells und ABAQUS in einphasigen Bereichen vorliegt. Abgesehen von den Phasenübergangsbereichen besteht keine signifikante Abweichung zwischen den Plots. Die Ergebnisse für unterschiedliche Phasenübergangsbreiten unterscheiden sich nur innerhalb der diffusen Übergangsbereiche. Dies zeigt, dass die Phasenübergangsbreite keinen wesentlichen Einfluss auf Feldgrößen in einphasigen Bereichen des Simulationsgebietes hat. Die Formänderungsenergie wird durch das neue Modell, verglichen mit der Lösung des Problems mit unstetigem Phasenübergang, in einphasigen Bereichen genau abgebildet. Da alle Spannungen und plastischen Verzerrungen für unterschiedliche Breiten des diffusen Phasenübergangs in einphasigen materiellen Punkten gut übereinstimmen, werden die mechanischen Sprungbedingungen durch das Homogenisierungsmodell erfüllt.

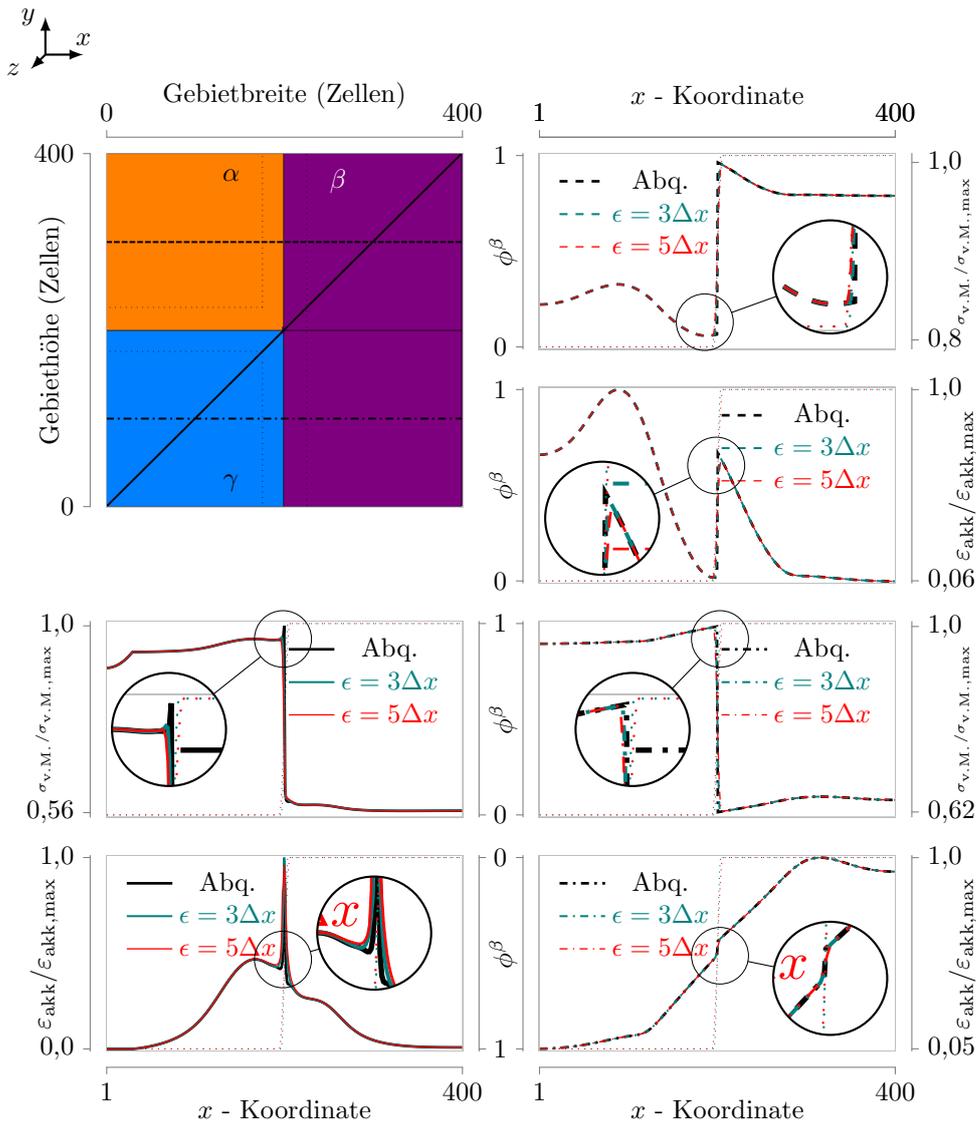


Abbildung 8.2: Vergleich der Simulationsergebnisse mit unstetigem und diffusem Phasenübergang eines Pseudo-2D-Simulations-Setups. Die Simulationen wurden mit ABAQUS[33] (Abq.) und PACE3D durchgeführt. Die kontaktunstetige Grenzflächenlösung wird durch die schwarzen Linien dargestellt und die Lösungen des Problems mit diffusen Phasenübergängen, für Übergangsbreiten proportional zu $\epsilon = 3\Delta x$ und $\epsilon = 5\Delta x$, werden durch die türkis und roten Linien dargestellt. Im linken oberen Bild ist das Simulationsgebiet mit drei verschiedenen Phasen, orange - Phase α ; violett - Phase β ; blau - Phase γ , gezeigt. Die dünnen gepunkteten Linien deuten die diffusen Phasenübergänge an. Die von-Mises-Vergleichsspannung $\sigma_{v.M.}$ und akkumulierte plastische Verzerrung ϵ_{akk} sind exemplarisch entlang dreier Geraden durch das Simulationsgebietes dargestellt. Die Zuordnung der verschiedenen Gerade zu den Diagrammen ist durch die Linientypen (durchgezogen, gestrichelt und gestrichelt-gepunktet) gegeben. Jede Größe ist dimensionslos und bezüglich des maximalen absoluten Wertes entlang der verschiedenen Schnittlinien skaliert dargestellt. Eine gute Übereinstimmung der drei Simulationsergebnisse, mit Ausnahme der Werte im diffusen Phasenübergangsbereich, ist zu beobachten.

8.4 Auswirkungen der neuen Formulierung des elastoplastischen Modells, hinsichtlich der mechanischen treibenden Kräfte

Nachfolgend wird der Einfluss der vorgestellten Plastizitätsansätze auf die elastische treibende Kraft der Phasenfeldevolution, siehe Gleichung (8.21), diskutiert. Die Modellanalyse wird an Pseudo-1D-Simulationen (eine Zelle in y - und z -Richtung) mit einer Eigendehnung in einer Dimension, Abschnitt 8.4.1, und in zwei Dimensionen, Abschnitt 8.4.2, vorgenommen.

8.4.1 Simulationsbeispiel mit Eigendehnung in einer Dimension

Die anfängliche Konfiguration des Systems ist in Abb. 8.3 (Bild *oben*) dargestellt. Ein *eigendehnungsbehafteter Nukleationskeim* α befindet sich in der linken Ecke der Domäne, die sonst vollständig mit einer *elterlichen Phase* β befüllt ist. Das Simulationsgebiet hat eine Länge von 100 nm in x -Richtung und einen Gitterabstand von $\Delta x = 1$ nm.

Als mechanische Randbedingung werden orthogonale Verschiebungen auf allen freien Oberflächen unterdrückt und tangentiale Verschiebungen frei zugelassen. Beide Phasen, α und β , verhalten sich ideal plastisch, $H^\alpha = H^\beta = 0$, und haben die gleichen isotropen Steifigkeiten, $\mathbf{C}^\alpha = \mathbf{C}^\beta$, die sich aus dem E-Modul $E^\alpha = E^\beta = 77$ GPa und der Poisson'schen Zahl $\nu^\alpha = \nu^\beta = 0,375$ nach einer kubischen Kristallsymmetrie, entsprechend Gleichung (4.58), ergeben. Die Fließgrenzen sind $\sigma_{y,0}^\alpha = 800$ MPa und $\sigma_{y,0}^\beta = 500$ MPa. Phase α besitzt eine Eigendehnung von $\varepsilon_{\text{eig},xx}^\alpha = -0,02$ in x -Richtung.

Das freie Energie-Funktional (8.3) wird um einen chemischen Energiebeitrag

$$f_{\text{chem}}^{\text{eff}}(\hat{\phi}, \hat{f}_{\text{chem}}) = \sum_{\alpha=1}^N f_{\text{chem}}^\alpha h^\alpha \quad (8.35)$$

erweitert, was zu einer Differenz der chemischen Energiebeiträge der Phasen α und β führt: $\Delta f_{\text{chem}}^{\alpha\beta} = -4 \cdot 10^{-7}$ J/m³. Die Grenzflächenenergie beträgt $\gamma^{\alpha\beta} = 1 \cdot 10^{-2}$ J/m² und die Phasenübergangsbreite ist proportional zu $\epsilon = 5\Delta x$.

Aufgrund der konstanten chemischen treibenden Kraft $\Delta f_{\text{chem}}^{\alpha\beta}$ wächst Phase α . Dies führt zu einer Erhöhung der Eigendehnung des Systems und zu einer daraus resultierenden Zunahme der von-Mises-Vergleichsspannung, was in Abb. 8.3 dargestellt ist. Sobald die Fließgrenze der Phase β , $\sigma_{y,0}^\beta$, erreicht ist, beginnt diese sich plastisch zu verformen, was in Abb. 8.3 (Diagramm *unten rechts*) anhand der homogenisierten akkumulierten plastischen Verzerrung, ε_{akk} , vgl. Abschnitt 8.3.1, und des Äquivalents des Interpolationsansatzes, ε_{akk} , zu sehen ist. Mit wachsendem Volumenanteil der Phase α steigen die mechanischen treibenden Kräfte bis zu dem Punkt, an dem sich beide Phasen in einem energetischen Gleichgewichtszustand befinden. Im Gleichgewichtszustand des Zweiphasensystems summieren sich die chemische und mechanische treibende Kraft bei Vernachlässigung der Oberflächenenergiebeiträge zu Null auf:

$$\underbrace{(f_e^\alpha - f_e^\beta) - (h^\beta \boldsymbol{\sigma}^\beta - h^\alpha \boldsymbol{\sigma}^\alpha) \mathbf{n}^{\alpha\beta} \cdot [\mathbf{H}]^{\alpha\beta} \mathbf{n}^{\alpha\beta}}_{\Delta f_e^{\alpha\beta}} + (f_{\text{chem}}^\alpha - f_{\text{chem}}^\beta) = 0. \quad (8.36)$$

Bezüglich der Volumenanteile der beiden Phasen führen die zwei Plastizitätsmodelle zu unterschiedlichen Gleichgewichtszuständen, dargestellt in Abb. 8.3 (Diagramm

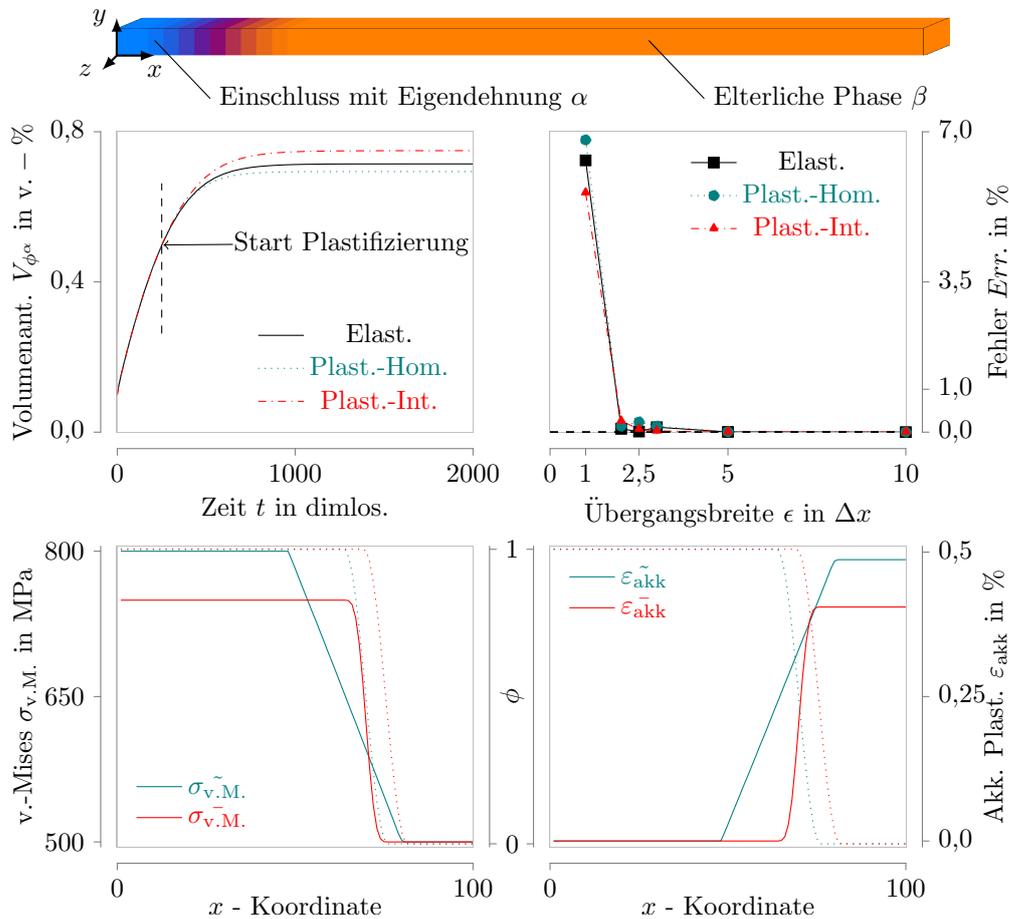


Abbildung 8.3: Pseudo-1D-Wachstum eines Nukleationskeims mit Eigendehnung in eine Raumrichtung. Die schwarzen Plots resultieren aus rein elastischen Simulationen, die türkisenen aus dem Homogenisierungs- und die roten aus dem Interpolationsansatz.

Bild oben: Ausgangszustand des Simulations-Setups mit diffusem Phasenübergangsbereich für $\epsilon = 5\Delta x$. In der linken Ecke befindet sich ein Nukleationskeim der sich über zehn Zellen erstreckt. Gradienten im Phasenfeld sind durch den Farbwechsel gekennzeichnet.

Diagramm Mitte links: Zeitliche Entwicklung des Nukleationskeims ausgedrückt durch den prozentualen Volumenanteil der Phase α am Gesamtvolumen des Simulationsgebietes.

Diagramm Mitte rechts: Prozentualer Fehler $Err.$ der Simulationsergebnisse bzgl. des analytischen Gleichgewichtszustands als Funktion der diffusen Übergangsbreite ϵ .

Diagramme unten links und rechts: Homogenisierte von-Mises-Vergleichsspannung und akkumulierte plastische Verzerrung, $\sigma_{v.M.}$ und ϵ_{akk} , siehe Abschnitt 8.3.1, sowie Äquivalent des Interpolationsansatzes, $\sigma_{v.M.}$ und ϵ_{akk} , Abschnitt 8.1.3.2, zum Zeitpunkt $t = 2000\Delta t$. Zusätzlich sind die Phasenfeldprofile gepunktet dargestellt.

Mitte links). Im Vergleich zu dem Simulationsergebnis mit rein elastischen Materialien hat die Phase α einen höheren Volumenanteil für den Interpolationsansatz und einen kleineren Volumenanteil für das Homogenisierungsmodell. Die unterschiedlichen Gleichgewichtszustände der beiden betrachteten elastoplastischen Simulationen sind die Folge der zwei Modellformulierungen sowie der Vererbung der plastischen Verzerrungen. Verwendet man die gültigen Zusammenhänge zur Vereinfachung von Gleichung (8.36), wird der Unterschied klar ersichtlich. Für den Homogenisierungsansatz folgt dann:

$$\underbrace{(\sigma_{yy}^{\alpha} \varepsilon_{e,yy}^{\alpha} - \sigma_{yy}^{\beta} \varepsilon_{e,yy}^{\beta}) - (h^{\beta} \sigma_{xx}^{\beta} - h^{\alpha} \sigma_{xx}^{\alpha}) (\varepsilon_{\text{eig},xx}^{\alpha} - \varepsilon_{\text{p},yy}^{\beta})}_{\Delta f_e^{\alpha\beta}} + \Delta f_{\text{chem}}^{\alpha\beta} = 0 \quad (8.37)$$

und für den Interpolationsansatz:

$$\underbrace{(\sigma_{yy}^{\alpha} \varepsilon_{e,yy}^{\alpha} - \sigma_{yy}^{\beta} \varepsilon_{e,yy}^{\beta}) - (h^{\beta} \sigma_{xx}^{\beta} - h^{\alpha} \sigma_{xx}^{\alpha}) \varepsilon_{\text{eig},xx}^{\alpha}}_{\Delta f_e^{\alpha\beta}} + \Delta f_{\text{chem}}^{\alpha\beta} = 0, \quad (8.38)$$

da die Phasen α und β die gleichen plastischen Verzerrungen besitzen, die sich gegenseitig eliminieren. Bei Interesse an der Herleitung von Gleichung (8.36) und Gleichung (8.37) sei auf Anhang B verwiesen. Mit der analytischen Gleichgewichtsbedingung wird ein prozentualer Fehler definiert:

$$Err. = \frac{\Delta f_{\text{chem}}^{\alpha\beta} + \Delta f_e^{\alpha\beta}}{\Delta f_{\text{chem}}^{\alpha\beta}} \cdot 100 \%. \quad (8.39)$$

Abbildung 8.3 (Diagramm *Mitte rechts*) zeigt den Fehler der Simulationgleichgewichtszustände für verschiedene Phasenübergangsbreiten. Mit zunehmender Übergangsbreite verschwindet der Fehler.

Der Einfluss der verschiedenen Annahmen, hinsichtlich der Vererbung der plastischen Verzerrungen, ist in Abb. 8.3 (Diagramm *unten links*) und Abb. 8.3 (Diagramm *unten rechts*) dargestellt. Während die Phase α die plastischen Verzerrungen bei der Verwendung des Interpolationsansatzes erbt, tritt für den Homogenisierungsansatz nach einer Phasenumwandlung keine Vererbung der plastischen Verzerrungen auf. Was die Vererbung von plastischen Verzerrungen betrifft, beeinflusst dieses unterschiedliche Verhalten die von-Mises-Vergleichsspannungen innerhalb der transformierten elastischen Phase. Mit dem Homogenisierungsansatz liegt die "kontinuierliche" von-Mises-Vergleichsspannung im diffusen Übergangsbereich, Abb. 8.3 (Diagramm *unten links*). In Abb. 8.3 (Diagramm *unten rechts*) erkennt man, dass im Falle des Interpolationsmodells plastische Verzerrungen im gesamten, bereits transformierten Gebiet auftreten.

8.4.2 Simulationsbeispiel mit Eigendehnungen in zwei Dimensionen

An dieser Stelle wird ein Simulations-Setup analysiert, das mit dem des vorherigen Abschnitts vergleichbar ist, wobei die Phase α eine zusätzliche Eigendehnung von $\varepsilon_{\text{eig},zz}^{\alpha} = -0,02$ in z -Richtung aufweist. Die konstante chemische treibende Kraft $\Delta f_{\text{chem}}^{\alpha\beta}$ ist so kalibriert, dass die Phase α , unabhängig davon, ob der Homogenisierungs- ($\Delta f_{\text{chem}}^{\alpha\beta} = -5,0 \cdot 10^{-6} \text{ J/m}^3$) oder Interpolationsansatz ($\Delta f_{\text{chem}}^{\alpha\beta} = -1,36 \cdot 10^{-7} \text{ J/m}^3$) angewendet wird, mit ähnlichen Geschwindigkeiten zu wachsen beginnt. Die Fließgrenze der Phase β , $\sigma_{y,0}^{\beta}$, ist so gewählt, dass sich nur die Phase α elastoplastische verformt. Da

innerhalb der Phase β keine Plastizität auftritt, hat die Vererbung der plastischen Verzerrungen keinen Einfluss auf die Phasenfeldevolution.

In Abb. 8.4 (Diagramm *oben links*) ist die zeitliche Entwicklung des Volumenanteils der Phase α am Gesamtvolumen des Simulationsgebietes dargestellt. Man erkennt, dass das System bei Verwendung des Interpolationsansatzes einen Gleichgewichtszustand einnimmt, was bedeutet, dass die Phasenumwandlung stagniert. Für den Homogenisierungsansatz tritt dies nicht ein, und das gesamte System wandelt sich in die Phase α um. Daraus wird ersichtlich, dass sich die Modelle nicht nur hinsichtlich der Vererbung der plastischen Verzerrungen unterscheiden.

Abbildung 8.4 (Diagramm *Mitte links*) verdeutlicht, dass sich der Abfall der plastischen Verzerrungen bei Gebrauch des Interpolationsmodells nicht über den gesamten diffusen Phasenübergangsbereich erstreckt. Der Grund hierfür ist, dass die interpolierte Fließspannung, $\bar{\sigma}_y$, ab einem bestimmten Volumenanteil der Phase β innerhalb des Phasenübergangs nicht mehr erreicht wird. Daraus folgt, dass die in Abb. 8.4 (Diagramm *unten links*) dargestellte treibende Kraft einen Vorzeichenwechsel im diffusen Übergangsbereich besitzt. Dadurch wird der Übergangsbereich verzerrt und die Oberflächenenergie wird nicht korrekt wiedergegeben. Dies führt zu einem Gleichgewichtszustand der Phasenevolution.

Bei Verwendung des Homogenisierungsansatzes wird dieses Verhalten nicht beobachtet. Wie in Abb. 8.4 (Diagramm *Mitte rechts*) zu sehen ist, erfolgt der Abfall der elastoplastischen Verzerrungen über den gesamten diffusen Phasenübergangsbereich. Innerhalb des gesamten diffusen Phasenübergangs führt dies zu einer gleichmäßig aufgebracht treibenden Kraft, Abb. 8.4 (Diagramm *unten rechts*), und das Gleichgewichtsprofil des Phasenübergangs bleibt erhalten. Die Oberflächenenergie wird korrekt abgebildet, siehe Abb. 8.4 (Diagramm *oben rechts*). Bei $\phi^\alpha = 0,5$ fallen die plastischen Verzerrungen mit dem Phasenfeld zusammen, was der kontaktunstetigen Grenzflächenlösung entspricht, vgl. Abschnitt 8.3.1.

Abbildung 8.4 (Diagramm *oben rechts*) vergleicht die resultierenden Grenzflächenenergien beider Ansätze die, wie in Schneider [120] definiert, entsprechend mit

$$f_{\text{grenz}}^{\alpha\beta} = 2 \int_{\Omega} \epsilon \, dV \quad (8.40)$$

berechnet wurden. Nur der Homogenisierungsansatz bildet die Grenzflächenenergie von $\gamma^{\alpha\beta} = 0,01 \text{ J/m}^2$ korrekt ab.

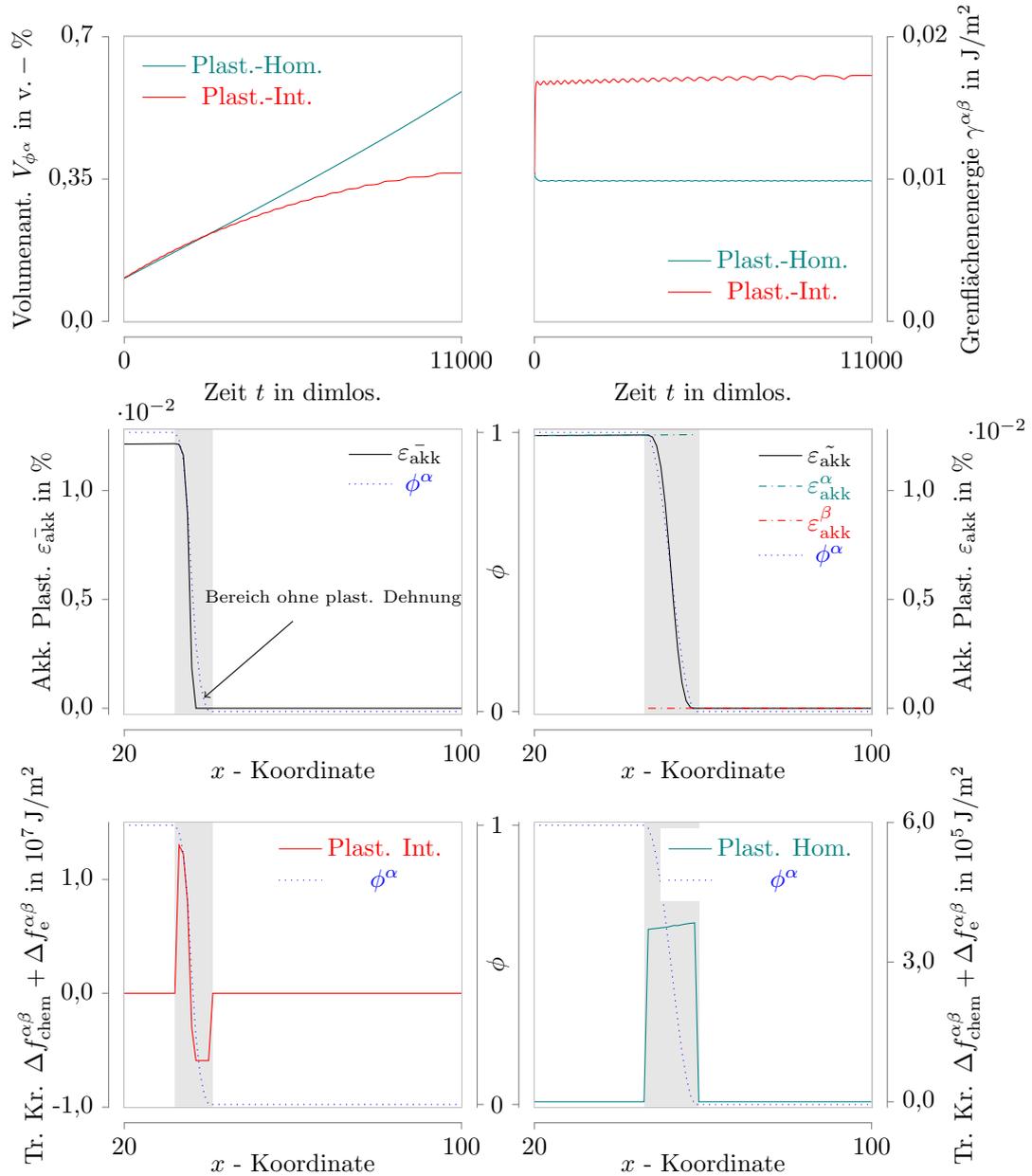


Abbildung 8.4: Vergleich der Ergebnisse des Homogenisierungs- und des Interpolationsansatzes für das 1D-Wachstum eines Nukleationskeims mit zwei Eigendehnungen in x - und z -Richtung.

Diagramm oben links: Zeitliche Entwicklung des Nukleationskeims ausgedrückt durch den prozentualen Volumenanteil der Phase α am Gesamtvolumen des Simulationsgebietes.

Diagramm oben rechts: Zeitliche Entwicklung der Grenzflächenenergie berechnet nach Gleichung (8.40).

Alle weiteren Diagramme zeigen Werte zum Zeitpunkt $t = 10000\Delta t$:

Diagramme Mitte: Homogenisierte akkumulierte plastische Verzerrung, $\bar{\epsilon}_{\text{akk}}$, siehe Abschnitt 8.3.1, und Äquivalent des Interpolationsansatzes, $\tilde{\epsilon}_{\text{akk}}$, vgl. Abschnitt 8.1.3.2.

Diagramme unten: Treibende Kräfte.

8.5 Anwendung: Martensitische Transformation mit Plastizität

Im folgenden Beispiel wird vor dem Hintergrund der Arbeit von Schoof [126] die Anwendbarkeit des vorgeschlagenen Modells bei der Simulation der martensitischen Phasenumwandlung, einschließlich des Effekts der Plastizität, demonstriert. Die martensitische Transformation repräsentiert neben der Anwendung des Homogenisierungsansatzes bei Rissimulationen in Gusseisenwerkstoffen einen weiteren Anwendungsbereich des neu entwickelten Modells.

Bei der martensitischen Transformation handelt es sich um einen diffusionslosen Umwandlungsprozess, der durch die kooperative Scherbewegung eines Ausgangsgefüges zu Martensit charakterisiert ist. Das dabei entstehende Martensit ist ein metastabiles Gefüge, das sowohl in Metallen als auch in Nichtmetallen auftritt. Da Martensit überwiegend mit Stahl in Zusammenhang gebracht wird, werde auch ich mich auf die martensitische Transformation in Stahl konzentrieren. Martensit entsteht in Folge einer großen und raschen Abkühlung von Austenit (γ -Phase) zu Ferrit (α -Phase). Die kooperative Scherbewegung wird im Stahl-Kristallgitter durch das Umklappen des kubisch-flächenzentrierten Austenitgitters in das kubisch-raumzentrierte Martensitgitter verursacht, wobei kein Platzwechsel von einzelnen Atomen stattfindet und die relative Lage der Eisen- und Kohlenstoffatome zueinander erhalten bleibt [126].

Die Phasenfeldmethode hat sich insbesondere bei der simulativen Untersuchung der martensitischen Phasenumwandlung bewährt, siehe Yeddu et al. [152], Heo und Chen [59] sowie Xu et al. [147]. Die meisten Phasenfeld-Martensit-Modelle basieren auf Khachaturyans mikroelastischer Theorie (Khachaturyan [71]) und wurden dahingehend erweitert, dass plastische Effekte mitberücksichtigt werden können (Yamanaka et al. [148, 150]). Der Interpolationsansatz zeigte in Abschnitt 8.4.1 signifikante Abweichungen hinsichtlich der Phasenfeldevolution, die im Vergleich zur Homogenisierungsmethode als negativ zu betrachten sind. Daher wurde die Simulation der martensitischen Transformation nur mit dem Homogenisierungsansatz, Abschnitt 8.1.3.1 durchgeführt.

Um die autokatalytische Keimbildung der martensitischen Transformation zu imitieren, wird der Phasenfeldevolutionsgleichung (8.7) ein *Rauschterm*, ζ [126], hinzugefügt:

$$\frac{\partial \phi^\alpha(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -\frac{1}{\epsilon N_{\text{lok}}} \sum_{\beta \neq \alpha}^{N_{\text{lok}}} \left(M^{\alpha\beta} \left(\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \phi^\alpha} - \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \phi^\beta} \right) \right) + \zeta. \quad (8.41)$$

Da die martensitische Transformation in Schallgeschwindigkeit abläuft, wird die Evolution der plastischen Verzerrungen zeitabhängig als pseudo-viskoplastisches Materialverhalten modelliert. Dies ist notwendig, damit bei der Phasenfeld- und Plastizitätsevolution ähnliche Zeitskalen abgebildet werden können. Ähnlich wie in Guo et al. [52] wird hierzu die Fließregel (8.24) um einen *plastischen Relaxationskoeffizienten*, $0 < k_{\text{visko}} \leq 1$, erweitert:

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{p}}^\alpha = k_{\text{visko}} \dot{\lambda}^\alpha \frac{\mathbf{s}^\alpha}{|\mathbf{s}^\alpha|}. \quad (8.42)$$

Eine Parameterstudie über das physikalische Konzept des plastischen Relaxationskoeffizienten k_{visko} wurde in Yeddu et al. [151] durchgeführt. Zur Abbildung der großen

und raschen Abkühlung aus der γ -Phase wird eine konstante chemische treibende Kraft zwischen Austenit ϕ^{aust} und Martensit ϕ^{mart}

$$\Delta f_{\text{chem}}^{\text{austmart}} = \frac{Q(\theta_0 - \theta)}{\theta_0}, \quad (8.43)$$

als Funktion der *latenten Wärme* Q , der *spannungsfreien Gleichgewichtstemperatur* θ_0 und der *Unterkühlungstemperatur* θ , verwendet.

Das Anwendungsbeispiel wird auf einem Pseudo-2D-Simulations-Setup (eine Zelle in z -Richtung) durchgeführt. Abbildung 8.5 (Bild *oben links*) zeigt den anfänglichen Simulationsaufbau zum Zeitpunkt $t = 0$. Ein elliptischer Keim einer initialen martensitischen Variante, *mart1*, befindet sich im Zentrum des Simulationsgebietes mit den Maßen $200\Delta x \times 200\Delta y$. Als Prädiktionierungsschritt wurde ein diffuser Phasenübergangsbereich erzeugt und das mechanische Gleichgewicht wurde berechnet. Aus diesem Grund erfolgte bereits zum Zeitpunkt $t = 0$ eine Plastifizierung mit einem Maximalwert von $\varepsilon_{\text{akk}} = 0,02\%$. Nach dem Bain-Modell, siehe Yamanaka et al. [148], können sich im Zweidimensionalen zwei martensitische Varianten, *mart1* und *mart2*, bilden. Die martensitischen Varianten unterscheiden sich hinsichtlich der Eigendehnungstensoren

$$\varepsilon_{\text{eig}}^{\text{mart1}} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{\text{eig,a}} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{\text{eig,b}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \varepsilon_{\text{eig}}^{\text{mart2}} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{\text{eig,b}} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{\text{eig,a}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (8.44)$$

Periodische Randbedingungen wurden für alle physikalischen Felder in x - und y -Richtung verwendet. In z -Richtung liegt ein ebener Verzerrungszustand vor und für die Phasenfelder wurde eine Neumann-Randbedingung angewendet. Alle Phasen sind ideal plastisch, $H = 0$. Da für die physikalische Umwandlungsgeschwindigkeit der martensitischen Transformation keine zuverlässigen Daten vorliegen, wird die numerische Zeitschrittweite auf $\Delta t = 1$ gesetzt und die Phasenfeldmobilität zwischen Austenit und Martensit M^{austmart} , siehe Gleichung (8.7), so angepasst, dass die Simulation numerisch stabil läuft. Phasenumwandlungen zwischen den martensitischen Varianten werden unterdrückt, $M^{\text{mart1mart2}} = 0$. Alle außerdem notwendigen Materialparameter orientieren sich an der Fe-31at.%Ni-Legierung, siehe Yamanaka et al. [148], Heo und Chen [59], und sind Tabelle 8.1 aufgeführt.

Die Entwicklung der martensitischen Varianten in einem austenitischen Korn ist in Abb. 8.5 (Bilder *oben*) zu den Zeitpunkten $t = 0$, $t = 550\Delta t$ und $t = 1500\Delta t$ dargestellt. Außerdem sind darin die Isolinien der resultierenden dimensionslosen und skalierten, homogenisierten von-Mises-Vergleichsspannungen, $\sigma_{\text{v.M.}}$, gezeigt. Im Gegensatz zu einem Simulations-Setup mit rein elastischen Materialien, bei dem der initiale martensitische Keim aufgrund von zu hohen mechanischen treibenden Kräften schrumpfen würde, ändert die initiale martensitische Variante, *mart1*, ihre Form, sodass die gesamte freie Energie des Systems minimiert wird und zu wachsen beginnt, Abb. 8.5 (Bilder *oben links*). Gemäß den Ergebnissen von Yamanaka et al. [148] nukleiert später die zweite martensitische Variante, *mart2*, an den Flanken der ersten Variante, um die transformationsbedingten mechanischen Spannungen zu minimieren, wie in Abb. 8.5 (Bilder *oben Mitte*) verdeutlicht. Im Laufe der weiteren Phasenevolution bildet sich eine latenteartige martensitische Mikrostruktur. Die untere Bildreihe von Abb. 8.5 zeigt die mit der martensitischen Transformation verbundenen dimensionslosen und skalierten, homogenisierten akkumulierten plastischen Verzerrungen.

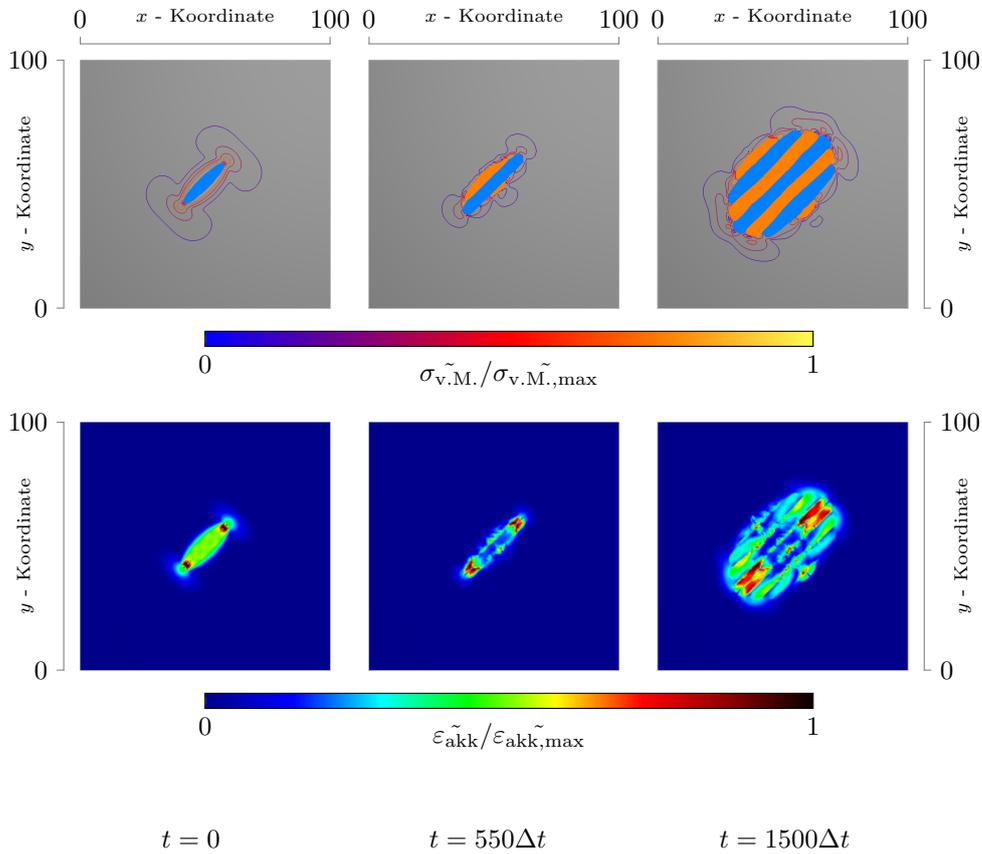


Abbildung 8.5: Wachstum von martensitischen Varianten in einem austenitischen Korn.

Bilder oben: Zeitliche Entwicklung der Varianten, die orange und blau eingefärbt sind. Die austenitische Phase ist grau dargestellt. Isolinien der homogenisierten von-Mises-Vergleichsspannungen, $\sigma_{v.M.}/\sigma_{v.M.,max}$, werden im austenitischen Bereich aufgeprägt.

Bilder unten: Entwicklung der homogenisierten akkumulierten plastischen Verzerrungen ε_{akk} .

Die von-Mises-Vergleichsspannungen und akkumulierten plastischen Verzerrungen wurden zur besseren Visualisierung mit dem Maximalwert des jeweiligen Simulationszeitpunkts skaliert. Der Vollständigkeit halber sind die jeweiligen Maximalwerte angegeben: $\sigma_{v.M.,max}(t = 0) = 2,4 \text{ GPa}$; $\sigma_{v.M.,max}(t = 550 \Delta t) = 3,2 \text{ GPa}$; $\sigma_{v.M.,max}(t = 1500 \Delta t) = 2,8 \text{ GPa}$; $\varepsilon_{akk,max}(t = 0) = 0,02 \%$; $\varepsilon_{akk,max}(t = 550 \Delta t) = 6,02 \%$ und $\varepsilon_{akk,max}(t = 1500 \Delta t) = 7,73 \%$.

Tabelle 8.1: Material- und Simulationsparameter für die martensitische Transformation

Parameter	Wert	Einheit
Grenzflächenenergie γ^{austmart}	0,1	J/m ²
Energiebeitrag von Drittphasen $\gamma^{\alpha\beta\delta}$	1	J/m ²
Latenten Wärme Q	$3,5 \cdot 10^8$	J/m ³
E-Modul $E^{\text{aust}} = E^{\text{mart}}$	77	GPa
Poisson'sche Zahl $\nu^{\text{aust}} = \nu^{\text{mart}}$	0,375	-
Gleichgewichtstemperatur θ_0	405	K
Unterkühlungstemperatur θ	254	K
Eigendehnung $\varepsilon_{\text{eig,a}}$	0,1	-
Eigendehnung $\varepsilon_{\text{eig,b}}$	-0,1	-
Fließgrenze Austenit $\sigma_{y,0}^{\text{aust}}$	500	MPa
Fließgrenze Martensit $\sigma_{y,0}^{\text{mart}}$	800	MPa
Plastischer Relaxationskoeffizienten k_{visko}	$5 \cdot 10^{-3}$	-
Parameter der Phasenübergangsbreite ϵ	2,5	Δx
Physikalischer Gitterabstand $\Delta x = \Delta y$	1	nm

Phasenfeldmodell für spröd-anisotropes und duktiler Risswachstum

Zur numerischen Vorhersage oder Analyse von Brüchen und dem damit einhergehenden Versagen von Bauteilen, ist die Untersuchung der Entstehung und des Wachstums von Rissen notwendig. Vor diesem Hintergrund wird ein Phasenfeldmodell vorgestellt, das die Simulation von Rissentwicklungsprozessen in Verbundwerkstoffen, bestehend aus spröd-anisotropen und duktilen Komponenten, ermöglicht. Dies geschieht in Anlehnung an Gusseisen mit Lamellengraphit, wobei sich das Matrixmaterial des Verbundwerkstoffs duktil verhält und die Inklusionen spröd-anisotrop. Ich verwende absichtlich die Ausdrucksweise “in Anlehnung”, weil das neue Modell nicht auf der realen Längenskala der Mikrostruktur von Gusseisen mit Lamellengraphit, nämlich im Mikrometerbereich, angewendet werden kann. Der Schritt hin zu einem Modell, das auf der mikroskopischen Längenskala anwendbar ist, ist mit dem vorgestellten Modell allerdings nicht mehr weit. Als Anpassung ist nur eine Erweiterung notwendig, so dass die Modellformulierung unabhängig von der Wahl des Parameters ist, der die Breite des diffusen Übergangs zwischen Festphasen und Riss definiert. Hierbei könnte ähnlich wie in Wu und Nguyen [146] vorgegangen werden, allerdings mit der zusätzlichen Schwierigkeit, dass anstelle einer spröd-isotropen Modellformulierung, eine spröd-anisotrope kombiniert mit einer duktilen Modellformulierung berücksichtigt werden müsste.

Bei Phasenfeldmodellen für Rissentwicklung wird der Grad der Schädigung durch ein skalares kontinuierliches Phasenfeld beschrieben, wobei das Phasenfeld als Regularisierungsparameter des Problems mit scharfen Übergängen zwischen Riss und Festphasen dient. Bei verschwindender diffuser Breite des Übergangsbereichs zwischen Festphasen und Riss wird das nicht regularisierte Problem wieder hergestellt [47]. Im Gegensatz zu den zuvor eingeführten Rissmodellierungsmethoden ohne Phasenfeldhintergrund, Abschnitt 5.3, werden Phänomene wie Rissverzweigung und -vereinigung sowie Rissentstehungsprozesse in beliebig komplexen Systemen durch die Phasenfeldansätze intrinsisch abgedeckt. Das vorgeschlagene Modell ist das erste mir bekannte Phasenfeld-Rissmodell für mehrphasige Materialien, das die spröd-anisotrope und duktile Rissausbreitung vereint. Zu diesem Zweck werden zwei bereits existierende Phasenfeldmodelle für Rissentwicklung, eines für die spröd-anisotrope Rissentwicklung und eines für die duktile Rissentwicklung, kombiniert und in den Mehrphasenkontext gebracht.

Als Modell zur Beschreibung der spröd-anisotropen Rissentwicklung dient die Formulierung der Vorgängerpublikation Prajapati et al. [109], hierbei ist die kritische Energiefreisetzungsrates richtungsabhängig. Alternative Ansätze für anisotropes Risswachstum basieren meist darauf, dass der Divergenzterm der Evolutionsgleichung des Rissphasenfeldes mit einem Anisotropietensor multipliziert wird und somit eine Richtungsabhängigkeit entsteht, siehe z.B. [135, 96, 17]. Was ein solcher Anisotropietensor im

Zusammenhang mit der Gradientenenergie physikalisch repräsentiert, ist bis jetzt noch unklar [17].

Bei der Wahl eines möglichen duktilen Rissmodells stehen verschiedene Ansätze zur Verfügung, die nachfolgend kurz zusammengefasst sind. Das Modell von Duda et al. [41] war eines der ersten Modelle, das Plastizität in ein Phasensfeld-Rissmodell integriert hat, um einen spröden Bruch in plastischen Materialien zu simulieren. Einige wichtige phänomenologische Merkmale des duktilen Bruchs, die in experimenteller Literatur berichtet werden, konnten von Ambati et al. [3] durch eine Kopplung zwischen der Degradierungsfunktion mit dem plastischen Verzerrungszustand reproduziert werden. Das Modell wurde in Ambati et al. [5] auf große Verformungen erweitert. In Verbindung mit Thermoplastizität, bei großen Verformungen, wird in Miehe et al. [89] ein thermodynamisch konsistentes Phasensfeld-Rissmodell für spröde bis duktile Brüche eingeführt. Als Erweiterung von Miehe et al. [89] wurde Miehe et al. [91] mit dem Zusatz von porös-isotroper Plastizität veröffentlicht. In Kuhn et al. [75] wird ein plastisches Phasensfeld-Rissmodell vorgeschlagen, bei dem eine monolithische Lösung möglich ist. Gradienten-Plastizität bei großen Verformungen wird in Miehe et al. [90] verwendet, um duktile Brüche im Phasensfeldkontext zu modellieren. In einem unlängst veröffentlichten Buchartikel, Alessi et al. [1], werden prominente Phasensfeldmodelle für duktilen Risswachstum verglichen und eine Studie über ihre Prognosefähigkeiten durchgeführt.

Die folgenden Gründe führten zur Wahl des von Ambati et al. [3] vorgestellten Modells als Modell für die duktile Rissausbreitung aus den zahlreichen bereits veröffentlichten duktilen Rissmodellen: In Ambati et al. [3] wird gezeigt, dass wichtige charakteristische Merkmale, die duktile Rissentstehung/-ausbreitung betreffend, durch das Modell abgebildet werden können. Ermöglicht wird dies durch eine modifizierte Degradierungsfunktion die die akkumulierte plastische Verzerrung beinhaltet. Die Modifikation führt zu Rissentstehungsprozessen, die trotz der Annahme von kleinen Deformationen mit experimentellen Beobachtungen übereinstimmen. Viele wichtige Merkmale des duktilen Bruchs, wie zum Beispiel die Dehnungslokalisierung in der Mitte einer I-förmigen Probe unter Zugbelastung, können von der Mehrheit der anderen veröffentlichten duktilen Phasensfeld-Rissmodelle nicht abgedeckt werden. Im Vergleich zu „klassischen“ spröden Phasensfeld-Rissmodellen besteht der Hauptunterschied der meisten duktilen Modelle vor allem darin, dass ein plastischer Energiebeitrag in das freie Energiefunktional eingeführt wird und dass die Spannungsberechnung die plastischen Verzerrungen berücksichtigt. Diese Änderungen führen zwar zu einer Spannungs-Dehnungs-Kurve, die einem duktilen Material entspricht, aber der plastische Beitrag im Energiefunktional ist, insbesondere bei kleinen Verformungen, wesentlich kleiner als die elastische Formänderungsenergie und hat somit nur einen geringen Einfluss auf die Rissentstehung und -ausbreitung. Darüber hinaus stellt die Formulierung der duktilen Rissdegradierungsfunktion in Ambati et al. [3] sicher, dass die experimentell ermittelten Fließgrenzen genau abgebildet werden.

Basierend auf den Untersuchungen von Prajapati et al. [109], liegt der Schwerpunkt dieses Kapitels auf der Kopplung des spröd-anisotropen Rissmodells mit dem duktilen Rissmodell nach Ambati et al. [3].

Nachfolgend wird die Matrix des fiktiven Verbundwerkstoffs als rein perlitisch betrachtet und als homogene, duktile-isotrope Phase, gemäß der J_2 -Plastizitätstheorie mit linearer Verfestigung, modelliert. Die Partikel des Verbundwerkstoffs sind mit Lamellengraphit assoziiert. Sie sind hinsichtlich der Form selbstähnlich zu Graphitlamellen,

aber größer und besitzen die gleichen mechanischen Eigenschaften. Aufgrund der atomaren Struktur von Lamellengraphit besitzen die Partikel eine transversale Isotropie hinsichtlich der elastischen Steifigkeit und der kritischen Energiefreisetzungsrate.

Im folgenden Abschnitt 9.1 wird das neu entwickelte Phasenfeld-Rissmodell zur Simulation der Entstehung und Ausbreitung von Rissen in spröde-anisotrop und duktilen Materialien vorgestellt. Alle kapitelspezifischen Kernpunkte der Numerik und des Simulationsaufbaus werden in Abschnitt 9.2 behandelt. Abschnitt 9.3 beinhaltet Verifizierungsbeispiele und numerische Studien. Da die beiden ungekoppelten Modelle für spröde-anisotropes [109] und duktilen [3] Risswachstum bereits ausgiebig für einphasige Probleme analysiert wurden, liegt der Fokus auf dem gekoppelten Phasenfeld-Rissmodell. In Abschnitt 9.3.1 ist eine detaillierte Untersuchung eines Risses, der einen planaren diffusen Phasenübergang zwischen einer spröde-anisotropen und einer duktilen Phase passiert, gegeben. In Abschnitt 9.3.2 wird die Rissentwicklung in einem Simulationsgebiet mit einem einzelnen elliptischen, transversal isotropen, spröden Partikel, der in eine duktile Matrix eingebettet ist untersucht. In Abschnitt 9.3.3 wird das entwickelte Modell auf ein realistischeres Anwendungsbeispiel angewendet, wobei das Simulationsgebiet ein idealisiertes Graugussgefüge darstellt.

9.1 Modellformulierung

Nach Griffith [50] findet Risswachstum statt, wenn die Energiefreisetzungsrate, G , eines materiellen Punktes die erforderliche Energie einer entstehenden freien Oberfläche, gegeben durch die kritische Energiefreisetzungsrate, G_c , überschreitet, siehe Kapitel 5. In Phasenfeld-Rissmodellen wird die kritische Energiefreisetzungsrate durch einen diffusen Übergang zwischen Festphasen und Riss regularisiert modelliert, wobei zu den Phasenfeldern, die die Festphasen repräsentieren, ein zusätzliches Rissphasenfeld, $\phi_c(\mathbf{x}, t) : \Omega \times \mathbb{R}_{\geq 0} \rightarrow [0, 1]$, im räumlichen Punkt \mathbf{x} des Körpers Ω und der Zeit t , eingeführt wird. Die Rissphase besitzt einen monotonen und sanften diffusen Übergang zwischen intakten, $\phi_c = 0$, und gebrochenen, $\phi_c = 1$, materiellen Punkten. Wie bereits im letzten Kapitel enthält $\hat{\phi} = (\phi^\alpha, \phi^\beta, \dots, \phi^N)$ alle *Festphasenfelder* und deren Gradienten sind in $\nabla \hat{\phi} = (\nabla \phi^\alpha, \nabla \phi^\alpha, \dots, \nabla \phi^N)$, mit $\alpha \in \{1, 2, \dots, N\}$ und $N \in \mathbb{N}$ als Anzahl der existierenden Festphasen, zusammengefasst.

Jedes Phasenfeld, dies gilt sowohl für die Festphasen als auch für die Rissphase, stellt den Volumenanteil der Phase in einem materiellen Punkt dar, so dass die Bedingung

$$\phi_c + \sum_{\alpha=1}^N \phi^\alpha = 1 \quad (9.1)$$

stets erfüllt werden muss. Das Verständnis, dass jedes Phasenfeld den Volumenanteil einer bestimmten Phase in einem materiellen Punkt widerspiegelt, führt dazu, dass während des Wachstums der Rissphase, also der Zunahme des Volumenanteils an Rissphase, der entsprechende Volumenanteil der Festphasen dissipiert, was mit Kontinuumsschädigungsmodellen vergleichbar ist. Im Sinne der Massenerhaltung ist dies nur akzeptabel, solange ein vernachlässigbarer Anteil der Gesamtmasse eines Systems dissipiert. Werden Festphasen in die Rissphase umgewandelt, bleibt die relative Zusammensetzung

der Festphasen in Bezug auf den absoluten Volumenanteil der Festphasen bei dem vorliegenden Modell erhalten. Die *zeitliche Entwicklung der Festphasen* ist somit durch

$$\frac{\partial \phi^\alpha(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -h_f^\alpha \frac{\partial \phi_c(\mathbf{x}, t)}{\partial t} \quad (9.2)$$

Es genügt also, nur die Phasenfeldevolutionsgleichung der Rissphase explizit zu lösen, in die die mechanischen Einflüsse eines mehrphasigen Problems einfließen. Um den relativen Volumenanteil einer Festphase zu identifizieren, ist die Formulierung einer *Interpolationsfunktion für die Festphasen*,

$$h_f^\alpha(\hat{\phi}) = \frac{\phi^\alpha}{\sum_{\alpha=1}^N \phi^\beta}, \quad (9.3)$$

erforderlich, die die Bedingung $\sum_{\alpha=1}^N h_f^\alpha = 1$ erfüllt. Durch die Festphaseninterpolationsfunktion wird garantiert, dass das relative Volumenverhältnis der Festphasen bei zunehmender Schädigung konstant bleibt. Eine gekoppelte Simulation von Fest-Fest-Phasentransformationen und einer Rissausbreitung kann auf gestaffelte Weise, im Sinne von nicht monolithisch, leicht realisiert werden.

Im Fall der linearen Bruchmechanik entspricht die *Formänderungsenergie* (4.53) der Energiefreisetzungsrates, die nach dem Griffithkriterium mit der kritischen Energiefreisetzungsrates konkurriert. Das Griffithkriterium kann nach Alessi et al. [1] in einem freien Energiefunktional der Form

$$\mathcal{F}(\hat{\phi}, \phi_c, \nabla \phi_c, \hat{\epsilon}_e, \hat{\epsilon}_{\text{akk}}) = \int_{\Omega} \underbrace{\frac{1}{c_\omega} \bar{G}_c(\hat{\phi}, \nabla \phi_c) \left(\frac{\omega_c(\phi_c)}{\bar{l}(\hat{\phi})} + \bar{l}(\hat{\phi}) |\nabla \phi_c|^2 \right)}_{=f(\hat{\phi}, \phi_c, \nabla \phi_c, \hat{\epsilon}_e, \hat{\epsilon}_{\text{akk}})} + \tilde{f}_e(\hat{\phi}, \hat{\epsilon}_e) + \tilde{f}_p(\hat{\phi}, \hat{\epsilon}_{\text{akk}}) dV, \quad (9.4)$$

auf regularisierte Weise für einen beliebigen Körper Ω erfasst werden. Die *geometrische Rissfunktion*, $\omega_c(\phi_c) \in [0, 1]$, beschreibt die Geometrie des diffusen Übergangs zwischen Festphasen und Riss und definiert den Vorfaktor:

$$c_\omega = 4 \int_0^1 \sqrt{\omega_c(\phi_c)} d\phi_c. \quad (9.5)$$

Allgemein muss jede geometrische Rissfunktion die Bedingungen $\omega_c(\phi_c = 0) = 0$ und $\omega_c(\phi_c = 1) = 1$ erfüllen, kann aber in diesem Rahmen variieren. In dieser Arbeit wird nach Ambrosio und Tortorelli [6] die sogenannte *AT-1*-Darstellung der geometrischen Rissfunktion verwendet, $\omega_c(\phi_c) = \phi_c$, womit sich $c_\omega = \frac{8}{3}$ ergibt. Im Gegensatz zu *AT-2*-Modellen [22], für die $\omega_c(\phi_c) = \phi_c^2$ gilt, besitzen *AT-1*-Ansätze ein elastisches Stadium, bevor eine Schädigung auftritt [134, 146, 1]. Die *diffuse Übergangsbreite zwischen Festphasen und Riss* wird durch den Längenparameter

$$\bar{l}(\hat{\phi}) = \sum_{\alpha=1}^N h_f^\alpha l^\alpha \quad (9.6)$$

eingestellt. Der Längenparameter wird wie in Tanné et al. [134] vorgeschlagen, als Materialeigenschaft betrachtet und dem entsprechend gewählt. Die Wahl des Längenparameters nach Tanné et al. gewährleistet, dass eine Rissentstehung erst dann erfolgt,

wenn die Spannungen in einem isotrop-spröden Material die Zugfestigkeit erreichen. Das in Tanné et al. gezeigte Berechnungsverfahren zur Bestimmung des Längenparameters ist auf das in dieser Arbeit verwendete Modell mit anisotropem und duktilem Materialverhalten nicht ohne Weiteres anwendbar. Dennoch werden die Korrelationen aus Tanné et al. für die Berechnung der Längenparameter jeder Phase l^α verwendet, um den bestmöglichen Kompromiss zu nutzen. Insbesondere ist es wichtig zu erwähnen, dass die Längenparameter der transversal isotropen Phasen mit der kritischen Energiefreisetzungsrate und dem Elastizitätsmodul der schwächsten mechanischen Materialrichtung korrelieren.

Anschließend wird die *interpolierte kritische Energiefreisetzungsrate*, $\bar{G}_c(\hat{\phi}, \nabla\phi_c)$, im Detail behandelt. Auf die notwendigen Anpassungen der Formulierung der *effektiven homogenisierten Formänderungsenergie*, \tilde{f}_e , und der *effektiven homogenisierten plastischen Energie*, \tilde{f}_p , verglichen mit Gl. (8.20) und Gl. (8.26), wird später eingegangen. Unter Verwendung einer volumenanteiligen Interpolation der *phasenabhängigen kritischen Energiefreisetzungsraten*, $G_c^\alpha(\nabla\phi_c)$, wird die *interpolierte kritische Energiefreisetzungsrate* definiert als

$$\bar{G}_c(\hat{\phi}, \nabla\phi_c) = \sum_{\alpha=1}^N h_f^\alpha G_c^\alpha(\nabla\phi_c). \quad (9.7)$$

Hierdurch wird der Übergang zwischen Phasen mit unterschiedlichem Bruchverhalten und unterschiedlichen Anisotropieorientierungen ermöglicht. Wie bereits beschrieben, besitzt Lamellengraphit aufgrund seiner atomaren Struktur einen transversal isotropen Risswiderstand, der mit einer elliptisch-anisotropen mathematischen Formulierung der kritischen Energiefreisetzungsrate erfasst werden kann:

$$G_c^\alpha(\nabla\phi_c) = G_{c,0}^\alpha \left((\tilde{n}_x^\alpha)^2 + F_{\text{aniso}}^\alpha \left((\tilde{n}_y^\alpha)^2 + (\tilde{n}_z^\alpha)^2 \right) \right). \quad (9.8)$$

Die *kritische Referenzenergiefreisetzungsrate*, $G_{c,0}^\alpha$, wird durch den *phasenabhängigen Anisotropiefaktor*, $F_{\text{aniso}}^\alpha \in \mathbb{R}_{>=1}$, zu einem Ellipsoid verformt. Wenn $F_{\text{aniso}}^\alpha = 1$ gewählt wird, wie im Fall der duktilen Matrix des Verbundwerkstoffs, ist die kritische Energiefreisetzungsrate richtungsunabhängig. Die Orientierungen der phasenabhängigen Anisotropien werden durch phaseninhärente Euler-Winkel beschrieben und durch die Rotationsmatrizen $\mathbf{Q}_{\text{aniso}}^\alpha(\varphi_{\text{aniso}}^\alpha, \theta_{\text{aniso}}^\alpha, \psi_{\text{aniso}}^\alpha)$ berücksichtigt. Die Rotationsmatrizen dienen der Transformation des nach außen weisenden Normalenvektors des Rissphasenfeldes aus dem x, y, z -Referenzkoordinatensystem in das $\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}$ -Koordinatensystem des hexagonale Kristallgitters des Lamellengraphit,

$$\tilde{\mathbf{n}}^\alpha(\nabla\phi_c) = \begin{pmatrix} \tilde{n}_x^\alpha(\nabla\phi_c) \\ \tilde{n}_y^\alpha(\nabla\phi_c) \\ \tilde{n}_z^\alpha(\nabla\phi_c) \end{pmatrix} = -\mathbf{Q}_{\text{aniso}}^\alpha \mathbf{n}_c = -\mathbf{Q}_{\text{aniso}}^\alpha \frac{\nabla\phi_c}{|\nabla\phi_c|}, \quad (9.9)$$

wie in Abb. 9.5 veranschaulicht. Lamellengraphit zeigt eine bevorzugte Wachstumsrichtung entlang der Graphenebenen [66], daher ist seine räumliche Ausdehnung innerhalb der Basalebenen viel größer als orthogonal dazu [128]. Die Geometrie einer Graphitlamelle definiert somit die Ausrichtung der Basalebenen. In Richtung der Längsachsen einer Graphitlamelle besitzt diese die stärksten elastischen Eigenschaften und den schwächsten Risswiderstand. Die Längsachsen werden zur Definition der Rotationsmatrizen verwendet. Per Definition weist die anisotrope Risswiderstandsformulierung in

\tilde{x} -Richtung den geringsten Wert auf.

Ein Vorteil der verwendeten Anisotropieformulierung, gegenüber Phasensfeldmodellen, die eine anisotrope Rissausbreitung durch eine Modifikation des Gradiententerms der regularisierten kritischen Energiefreisetzungsrates realisieren, besteht darin, dass die diffuse Übergangsbreite zwischen den Festphasen und dem Riss nicht richtungsabhängig ist [109]. Komplexere Anisotropien können bei dem vorgestellten Modell durch eine Änderung der Anisotropieformulierung umgesetzt werden. Eine starke Anisotropie ist beispielsweise durch eine kubische Anisotropieformulierung realisierbar, ähnlich wie in Li und Maurini [81] demonstriert.

Die zeitliche Entwicklung des Rissphasensfeldes ist nach Cahn und Allen [26] gegeben durch

$$\frac{\partial \phi_c(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -M \frac{\delta \mathcal{F}(\hat{\phi}, \phi_c, \nabla \phi_c, \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_e, \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{akk}})}{\delta \phi_c}, \quad (9.10)$$

wobei

$$\frac{\delta \mathcal{F}(\hat{\phi}, \phi_c, \nabla \phi_c, \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_e, \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{akk}})}{\delta \phi_c} = \frac{\partial f(\hat{\phi}, \phi_c, \nabla \phi_c, \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_e, \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{akk}})}{\partial \phi_c} - \nabla \cdot \frac{\partial f(\hat{\phi}, \phi_c, \nabla \phi_c, \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_e, \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{akk}})}{\partial \nabla \phi_c} \quad (9.11)$$

die Variationsableitung der freien Energie des Systems (9.4) ist und $M \in \mathbb{R}_{>=1}$ als Relaxationsparameter fungiert. Um die korrekte Kinetik der Rissentwicklung vorherzusagen, muss der Relaxationsparameter anhand von experimentellen Ergebnissen gewählt werden. In dieser Arbeit wird das explizite Euler-Schema für die Zeitableitung verwendet, um einen Gleichgewichtszustand des Rissphasensfeldes für jedes mechanische Belastungsincrement zu berechnen, $\dot{\phi}_c \approx 0$. Somit besteht nur eine fiktive Zeitabhängigkeit und der Relaxationsparameter kann so gewählt werden, die Simulationen numerisch stabil sind. Die durchgeführte Variationsableitung von Gl. (9.4) führt zu folgendem Ergebnis:

$$\frac{\partial \phi_c}{\partial t} = -M \underbrace{\left[\frac{3}{8} \left(\bar{G}_c \left(\frac{1}{\bar{l}} - 2 \nabla \cdot \bar{l} \nabla \phi_c \right) - \nabla \cdot \frac{\partial \bar{G}_c}{\partial \nabla \phi_c} \left(\frac{\phi_c}{\bar{l}} + \bar{l} |\nabla \phi_c|^2 \right) \right) + \frac{\partial \tilde{f}_e}{\partial \phi_c} + \underbrace{\frac{\partial \tilde{f}_p}{\partial \phi_c}}_{=0} \right]}_{f_c(\hat{\phi}, \phi_c, \nabla \phi_c, \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_e, \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{akk}}) \leq 0}, \quad (9.12)$$

wobei für die Ableitung des Normalenvektors des Rissphasensfeldes

$$\frac{\partial \mathbf{n}_c(\nabla \phi_c)}{\partial \nabla \phi_c} = \frac{\mathbf{I} - \mathbf{n}_c \otimes \mathbf{n}_c}{|\nabla \phi_c|} \quad (9.13)$$

gilt [124]. Es wurde der Zusammenhang $\partial \bar{G}_c(\hat{\phi}, \nabla \phi_c) / \partial \phi_c = 0$ berücksichtigt. Dieser ist gültig, weil die interpolierte kritische Energiefreisetzungsrates unabhängig von ϕ_c ist. Dasselbe trifft auf den letzten Term der Gleichung, $\partial \tilde{f}_p(\hat{\phi}, \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{akk}}) / \partial \phi_c = 0$ zu, da für die effektive homogenisierte plastische Energie nach Gl. (8.26)

$$\tilde{f}_p(\hat{\phi}, \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{akk}}) = \sum_{\alpha=1}^N h_f^\alpha f_p^\alpha(\boldsymbol{\varepsilon}_{\text{akk}}^\alpha), \quad (9.14)$$

gilt und somit keine Abhängigkeit zu ϕ_c besteht. Um eine Rissheilung zu verhindern wird die Bedingung $\dot{\phi}_c \geq 0$ erzwungen, dies geschieht indem für den Fall $\dot{\phi}_c < 0 \rightarrow$

$\dot{\phi}_c \stackrel{!}{=} 0$ gesetzt wird. Da die Entwicklung des Rissphasenfeldes irreversibel ist, ist das vorgestellte Modell als Schädigungsmodell einzustufen.

Mit wenigen notwendigen Anpassungen zur Kopplung mit dem Rissphasenfeld, erfolgt die Berechnung der mechanischen Größen nach dem elastischen Mehrphasenfeldmodell aus Abschnitt 8.1.2 und dem Homogenisierungsansatz für plastische Verformungen, Abschnitt 8.1.3.1. Alle *phasenabhängigen elastischen und akkumulierten plastischen Verzerrungen* sind durch $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_e = (\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_e^\alpha, \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_e^\beta, \dots, \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_e^N)$ und $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{akk}} = (\varepsilon_{\text{akk}}^\alpha, \varepsilon_{\text{akk}}^\beta, \dots, \varepsilon_{\text{akk}}^N)$ gegeben. Der Homogenisierungsansatz erlaubt die Berechnung von phaseninhärenten Spannungen und plastischen Verzerrungen und ermöglicht somit, das Auftreten von plastischen Verzerrungen innerhalb von spröden Phasen zu vermeiden. Um die Modelle des vorherigen Kapitels für die Anwendung auf Rissprobleme anzupassen, ist es wichtig zu beachten, dass anstelle der Interpolationsfunktion, h^α , Gl. (8.2), die Festphaseninterpolationsfunktion, h_f^α , Gl. (9.3), verwendet wird.

Eine Aufspaltung der Formänderungsenergie in ihren positiven und negativen Anteil, $f_e = [f_e]^+ + [f_e]^-$, ist für die Abbildung der Zug-Druck-Spannungsasymmetrie [83] von Gusseisen mit Lamellengraphit unbedingt notwendig, da damit ein Risswachstum unter Druckbelastung verhindert wird. Berücksichtigt man die Aufspaltung, lässt sich die *effektive homogenisierte Formänderungsenergie* mittels einer volumenanteiligen Interpolation hinsichtlich der Festphasen definieren:

$$\tilde{f}_e(\hat{\phi}, \phi_c, \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_e, \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{akk}}) = \sum_{\alpha=1}^N h_f^\alpha(\hat{\phi}) \left(h_c^\alpha(\phi_c, \varepsilon_{\text{akk}}^\alpha) \left[\tilde{f}_e^\alpha(\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_e^\alpha) \right]^+ + \left[\tilde{f}_e^\alpha(\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_e^\alpha) \right]^- \right). \quad (9.15)$$

Die Aufspaltung der Formänderungsenergie erfolgt bei isotropen Materialien nach der spektralen Zerlegung von Miehe et al. [88] und bei transversal isotropem Verhalten nach Teichtmeister et al. [135] unter Verwendung des Verzerrungstensors (8.27). Die *Degradierungsfunktion*, h_c^α , degradiert die Formänderungsenergie der Festphasen bei wachsendem Volumenanteil der Rissphase. Da nur der positive Anteil der Formänderungsenergie durch die Degradierungsfunktion von ϕ_c abhängt, fließt nur dieser Anteil in die Evolutionsgleichung (9.10) mit ein, d.h. bei Druckbelastung, $\left[\tilde{f}_e^\alpha \right]^+ = 0$, findet kein Risswachstum statt. Um den Übergang von Rissen zwischen spröden und duktilen Phasen zu ermöglichen, werden zwei verschiedene Degradierungsfunktionen angewendet:

$$h_c^\alpha(\phi_c, \varepsilon_{\text{akk}}^\alpha) = \begin{cases} (1 - \phi_c)^2 & , \text{ spröde} \\ (1 - \phi_c)^{2 \frac{\varepsilon_{\text{akk}}^\alpha}{\varepsilon_{\text{akk,krit}}^\alpha}} & , \text{ duktil.} \end{cases} \quad (9.16)$$

Die spröde Degradierungsfunktion ist bei Phasenfeld-Rissmodellen für sprödes Bruchverhalten sehr verbreitet und die duktile Degradierungsfunktion wurde von Ambati et al. [3] eingeführt. Der Parameter $\varepsilon_{\text{akk,krit}}^\alpha$ wird nach Ambati et al. [3] dazu verwendet, die duktile Rissausbreitung hinsichtlich eines *kritischen Wertes der akkumulierten plastischen Verzerrung* zu steuern. Mittels der Kopplung der Degradierungsfunktion mit der akkumulierten plastischen Verzerrung, werden selbst bei kleinen Deformationen wichtige Charakteristiken von duktilen Risswachstum imitiert.

Die phaseninhärenten Spannungen ergeben sich zu

$$\tilde{\boldsymbol{\sigma}}^\alpha = h_c^\alpha \mathbf{C}^\alpha [\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_e^\alpha], \quad (9.17)$$

womit sie nicht im Sinne eines hyperelastischen Materialverhaltens nach Gl. (4.54) aus Gl. (9.15) herleitbar sind. Da der gesamte Spannungstensor und nicht nur sein Zuganteil degradiert wird, wie bei der Formänderungsenergie (9.15), handelt es sich, unter Verwendung der Terminologie von Ambati et al. [4], bei dem vorgestellten Modell um ein *Hybridmodell*. Der effektive homogenisierte Spannungstensor,

$$\tilde{\boldsymbol{\sigma}}(\hat{\boldsymbol{\phi}}, \hat{\boldsymbol{\sigma}}) = \sum_{\alpha=1}^N h_{\text{f}}^{\alpha} \tilde{\boldsymbol{\sigma}}^{\alpha}, \quad (9.18)$$

mit $\hat{\boldsymbol{\sigma}} = (\tilde{\boldsymbol{\sigma}}^{\alpha}, \tilde{\boldsymbol{\sigma}}^{\beta}, \dots, \tilde{\boldsymbol{\sigma}}^N)$, wird zur Berechnung des mechanischen Gleichgewichtszustandes verwendet. Es ist wichtig zu beachten, dass Rissschließungsprozesse und die damit verbundene Kraftübertragung durch dieses Modell nicht erfasst werden. Rissspitzen wirken lokal als Spannungskonzentratoren, deshalb treten selbst bei kleinen makroskopischen Deformationen lokale Verzerrungen von $> 2\%$ auf. Unter Druckbelastung versagen Graugussproben bei makroskopischen Dehnungen von $> 8\%$. Die geometrischen Nichtlinearitäten, die unter den beschriebenen Zuständen auftreten, werden unter der Annahme von kleinen Deformationen aus Gründen der Zweckmäßigkeit vernachlässigt.

Tabelle 9.1 fasst das Modell zusammen.

Tabelle 9.1: Geltende Gleichungen des Phasenfeld-Rissmodells

Mechanisches Gleichgewicht	
Statische Impulsbilanz	$\nabla \cdot \tilde{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbf{0}$
Impulsbilanz auf Kontaktunstetigkeiten	$(\tilde{\boldsymbol{\sigma}}^\alpha - \tilde{\boldsymbol{\sigma}}^\beta) \mathbf{n}^{\alpha\beta} = \mathbf{0}$
Kompatibilitätsbedingung	$(\mathbf{H}^\alpha - \mathbf{H}^\beta) = \mathbf{a}^{\alpha\beta} \otimes \mathbf{n}^{\alpha\beta}$
Plastizität	
KKT System	$\begin{cases} f_f^\alpha \leq 0 \\ \dot{\lambda}^\alpha \geq 0 \\ f_f^\alpha \dot{\lambda}^\alpha = 0 \end{cases}$
Fließregel	$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_p^\alpha = \dot{\lambda}^\alpha \frac{\partial f_f^\alpha}{\partial \tilde{\mathbf{s}}^\alpha}$
Fließfunktion	$f_f^\alpha = \sigma_{v.M.}^{\alpha} - \sigma_y^\alpha$
Evolution Rissphasenfeld	
KKT System	$\begin{cases} f_c \geq 0 \\ \dot{\phi}_c \geq 0 \\ f_c \dot{\phi}_c = 0 \end{cases}$
Fließregel	$\dot{\phi}_c = -M f_c$
Fließfunktion	$f_c = \frac{3}{8} \left(\bar{G}_c \left(\frac{1}{l} - 2 \nabla \cdot \bar{l} \nabla \phi_c \right) - \nabla \cdot \frac{\partial \bar{G}_c}{\partial \nabla \phi_c} \left(\frac{\phi_c}{l} + \bar{l} \nabla \phi_c ^2 \right) \right) + \frac{\partial f_e}{\partial \phi_c}$
Festphasenevolution	
Fließregel	$\dot{\phi}^\alpha = -h_f^\alpha \dot{\phi}_c$
Mehrphasenfeldmodell	
Mehrphasenfeldmodell Summenbedingung	$h_f^\alpha = \frac{\phi^\alpha}{\sum_{\alpha=1}^N \phi^\beta}$
Festphasen Summenbedingung	$\sum_{\alpha=1}^N h_f^\alpha = 1$

9.2 Kapitelspezifische Kernpunkte der Numerik

Aufbauend auf Abschnitt 8.2 werden die zusätzlich relevanten numerischen Punkte des Phasenfeld-Rissmodells nachfolgend erläutert. Die Phasenfeldgleichung (9.10) wird in der Mitte der numerischen Zellen gelöst, wobei das explizite Euler-Schema für die zeitliche Ableitung und die Finite-Differenzen-Methode (FDM) unter Verwendung von zentralen Differenzen zweiter Ordnung für die räumlichen Ableitungen angewendet wird. Treten aufgrund des expliziten Euler-Schemas Werte des Rissphasenfeldes auf, die größer als eins sind, werden alle Phasenfelder der Festphasen auf Null gesetzt und es gilt $\phi_c = 1$. In Punkten, in denen der Gradient des Rissphasenfeldes kleiner als ein bestimmter Wert ist, wird isotropes Materialverhalten der kritischen Energiefreisetzungsrate, $F_{\text{aniso}} = 1$, angenommen.

Die Berechnung der Phasenfelder und der mechanischen Felder wird gestaffelt durchgeführt, d.h. es gibt keine monolithische Lösung. Die Phasenfelder und die mechanischen Felder dienen sich gegenseitig als Input und werden zu diesem Zweck an die erforderlichen Positionen der diskreten Zellen interpoliert. Für jedes Belastungssinkrement der mechanischen Randbedingungen werden die Phasenfelder in einen stationären Zustand gebracht. Unter Verwendung von fixierten mechanischen Randbedingungen und konstanten mechanischen Feldern wird die Phasenfeldgleichung der Rissphase (9.10) explizit gelöst, bis das Kriterium $\dot{\phi}_c \approx 0$ erfüllt ist. Dies geschieht ohne Anpassung der Normalenvektoren des Rissphasenfeldes. Nach Erfüllung der Gleichgewichtsbedingung werden aktualisierte Normalenvektoren des Rissphasenfeldes berechnet. Sobald der stationäre Zustand der Phasenfelder für die aktualisierten Normalenvektoren gilt, wird die mechanische Belastung erhöht. Durch das beschriebene Verfahren haben das Zeitinkrement Δt und die Mobilität M der Phasenfeldevolutionsgleichung (9.10) nur einen vernachlässigbar geringen Einfluss auf die Simulationsergebnisse und werden so gewählt, dass keine numerischen Instabilitäten auftreten. Da die Simulationsergebnisse zeitunabhängig sind, können nur Aussagen über mögliche Risspfade, nicht aber über die Kinetik des Risswachstums gemacht werden.

9.3 Verifizierung und Validierung des Modells zur Simulation von spröd-anisotropem und duktilem Risswachstum

Im folgenden Kapitel wird das entwickelte Modell validiert und verifiziert. Da das spröd-anisotrope Rissmodell im Mehrphasenkontext bereits in der Veröffentlichung Prajapati et al. [109] und das duktile Rissmodell in Ambati et al. [3] validiert wurden, liegt das Hauptinteresse dieses Abschnitts auf der Untersuchung der Rissentstehung und -ausbreitung in mehrphasigen Bereichen mit spröd-anisotropen und duktilen Festphasen. In Abschnitt 9.3.1 wird ein initialer Riss betrachtet, der die planare diffuse Grenzfläche zwischen einer spröd-anisotropen und duktilen Festphase passiert. In Abschnitt 9.3.2 wird die Rissentstehung und -ausbreitung in einem Simulationsgebiet mit einem einzelnen spröden, transversal isotropen Ellipsoid, das eine Graphitlamelle darstellt, eingebettet in eine perlitische Matrix, analysiert. Schließlich werden Rissentwicklung und -wachstum in einem Simulationsgebiet simuliert, das aus drei unterschiedlich orientierten elliptischen Einschlüssen besteht, die in eine duktile Matrix eingebettet - Abschnitt 9.3.3. Das Simulationsgebiet wird dabei auf Zug und Druck beansprucht. Bei allen Simulationen wird eine physikalische Gebietsgröße von 80 mm × 80 mm ange-

nommen, um die korrekte Verwendung des Regularisierungsparameters zwischen den festen Phasen und dem Riss zu gewährleisten, wobei $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0,265$ mm als Gitterabstand gewählt wurde.

Das Modell erlaubt die Simulation kombinierter anisotroper und duktiler Eigenschaften einer einzelnen Phase, dies ist jedoch für die betrachteten fiktiven Materialien nicht notwendig ist, da die imitierten Graphitlamellen anisotrop spröde sind und die perlitische Matrix isotrop duktil ist. Eine Kombination von anisotrop-duktil wird in der vorliegenden Studie nicht betrachtet.

Aufgrund des Berechnungsaufwandes beschränken sich die Simulationen auf Pseudo-2D-Gebiete (eine Zelle in z -Richtung). Jede Simulation wurde mit den gleichen mechanischen Randbedingungen durchgeführt, siehe zur Veranschaulichung z.B. Abb. 9.1. Die Ränder in x -Richtung sind als spannungsfrei definiert. Am unteren und oberen Rand der Domäne wird inkrementell eine orthogonale Verschiebung u aufgebracht. Die orthogonale Verschiebungsrandbedingung erlaubt eine freie Kontraktion des Materials. Um einen Simulationsaufbau zu erhalten, der einem ebenen Verzerrungszustand entspricht, wird die orthogonale Verschiebungsrandbedingung in z -Richtung angewendet, wobei die orthogonalen Verschiebungen gleich Null sind. Die mechanischen Randbedingungen werden erhöht, nachdem die Bedingung $\phi_c < 10^{-4}$ für aktualisierte Normalenvektoren des Rissphasenfeldes gilt. Zwischen allen Festphasen wird ein diffuser Übergang während eines Preprocessingschritts erzeugt. Es findet keine Fest-Festphasenumwandlung statt.

Der E-Modul, die Poisson-Zahl und die Fließspannung des Perlits sind identisch zu den Werten für Perlit bei Raumtemperatur, aus Kapitel 7, Tabelle 7.2. Für den linearen Verfestigungsfaktor gilt $H^d = 0,01E^d$. Die kritische Energiefreisetzungsrate berechnet sich aus einem Standardwert des kritischen Spannungsintensitätsfaktors, $K_{Ic}^d = 50 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$. Die Zugfestigkeit für Perlit ist $\sigma_z^d = 738 \text{ MPa}$. Sie wurde dem Diagramm *CI.024 Pearlitic ductile iron bar* aus Boyer [23] entnommen.

Der Elastizitätsmodul und der kritische Spannungsintensitätsfaktor der Graphitlamellen sind aus Pickup et al. [106] entnommen und die Poisson-Zahl ist durch Fishlock et al. [46] gegeben, siehe Tabelle 9.2. Für die Berechnung der phasenabhängigen Regularisierungsparameter l^s nach Tanné et al. [134] wird für Graphit eine Zugfestigkeit aus Zhang et al. [154]. Transversal isotrope Materialsteifigkeiten werden mit Hilfe des Elastizitätsmoduls, der Poisson-Zahl und dem Anisotropiefaktor aus Gl. (9.8) ermittelt. Betrachtet man die atomare Struktur von Graphit, die aus vielen geschichteten Basalebene besteht, so erhält man einen transversalen isotropen Steifigkeitstensor der Form

$$\mathbf{C}_{\text{tran.}} = \begin{pmatrix} C_{22}(1 + F_{\text{aniso}}) & \lambda_{\text{lame}} & C_{12}(1 + F_{\text{aniso}}) & 0 & 0 & 0 \\ & \lambda_{\text{lame}} + 2\mu_{\text{lame}} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ & & C_{22}(1 + F_{\text{aniso}}) & 0 & 0 & 0 \\ & \text{sym.} & & \frac{C_{22}-C_{12}}{2} & 0 & 0 \\ & & & & \frac{C_{11}-C_{13}}{2} & 0 \\ & & & & & C_{44} \end{pmatrix}_{\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}}, \quad (9.19)$$

Tabelle 9.2: Verwendete mechanische Parameter für Perlit und Graphit

Eigenschaften	Perlit	Graphit
E-Modul E	210,0 GPa	12,40 GPa
Poisson'sche Zahl ν	0,3	0,1
Fließgrenze $\sigma_{y,0}$	230,0 MPa	
Linearer Verfestigungsfaktor H	2,1 GPa	
Kritischer Spannungsintensitätsfaktor K_{Ic}	50,0 MPa $\sqrt{\text{mm}}$	1,34 MPa $\sqrt{\text{mm}}$
Zugfestigkeit σ_m	738,0 MPa	27,6 MPa

innerhalb des $\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}$ -Koordinatensystems eines spröden Partikels. Dabei sind die Lamé Konstanten (4.59) gegeben durch

$$\lambda_{\text{lame}} = \frac{\nu E}{(1-2\nu)(1+\nu)}; \quad \mu_{\text{lame}} = \frac{E}{2(1+\nu)}. \quad (9.20)$$

Es wird wieder angenommen, dass die Basalebene, a-Richtung des hexagonalen Kristallsystems, parallel zur \tilde{x}, \tilde{z} -Ebene liegen, wie im Fall der anisotropen kritischen Energiefreisetzungsrate (9.8). Mit dem verwendeten Verfahren wird eine Korrelation der Anisotropiestärke zwischen der kritischen Energiefreisetzungsrate und der Materialsteifigkeit gewährleistet. Die kritischen Energiefreisetzungsrate G_c sind durch die eingeführten Materialparameter als $G_c = K_{Ic}^2(1-\nu^2)/E$ definiert, entsprechend einem ebenen Verzerrungszustand, siehe Gl. (5.3).

Bei Phasenfeld-Rissmodellen vom Typ AT-1 und AT-2 besteht eine Abhängigkeit der Simulationsergebnisse von der diffusen Übergangsbreite zwischen Festphasen und Riss [88, 74, 132]. Dies gilt insbesondere bei der Betrachtung von Rissentstehungsprozessen. Falls initiale Risse bestehen und die Übergangsbreite mit dem Diskretisierungsgitter und der Gebietsgröße kompatibel sind, ist dieses Phänomen nicht signifikant [72, 105, 153, 134]. In Pham und Marigo [104] wurde diese Schwierigkeit ausgiebig untersucht und geschlussfolgert, dass der Längenparameter als Materialeigenschaft betrachtet werden sollte, die von der *Zugfestigkeit*, σ_z , eines Werkstoffs abhängt. Tanné et al. [134] haben eine mögliche Lösung zur korrekten Bestimmung von l vorgestellt. Aus der Betrachtung des Längenparameters als Materialeigenschaft resultiert eine Einschränkung der Anwendbarkeit von Phasenfeld-Rissmodellen auf kompatible Diskretisierungsgitter und Gebietsgrößen. Diese Einschränkung schließt oft Simulationen auf kleinen Längenskalen aus. Für den hier verwendeten Ansatz folgt der richtige Längenparameter aus der Rissevolutionsgleichung (9.12), für den einfachen Fall eines 1D-Zugstabs, bestehend aus einem linear elastischen, spröd-isotropen Werkstoff, ohne das initiale Vorliegen der Rissphase, $\phi_c(\mathbf{x}) = 0$, und damit nicht existenter Gradienten, $\nabla\phi_c(\mathbf{x}) = 0$. Unter diesen Annahmen vereinfacht sich Gl. (9.12) zu:

$$\frac{\partial\phi_c}{\partial t} = -M \left(\frac{3}{8} \frac{G_c}{l} + \underbrace{\frac{\partial(1-\phi_c)^2}{\partial\phi_c}}_{=\frac{\partial h_c^a}{\partial\phi_c}} \underbrace{\frac{E\varepsilon^2}{2}}_{=f_e} \right) = -M \left(\frac{3}{8} \frac{G_c}{l} - (1-\phi_c)E\varepsilon^2 \right), \quad (9.21)$$

mit E als dem Elastizitätsmodul und ε als der Dehnung in die Belastungsrichtung. Unter Berücksichtigung der geforderten Bedingung $\dot{\phi}_c \geq 0$, muss für den Ausdruck in der Klammer gelten, das

$$\left(\frac{3 G_c}{8 l} - (1 - \phi_c) E \varepsilon^2 \right) \leq 0. \quad (9.22)$$

Soll ein Materialversagen erst eintreten, wenn die Zugfestigkeit, σ_z , erreicht ist, dies ist der Fall sobald eine kritische Dehnung ε_z vorliegt, lässt sich die diffuse Übergangsbreite dementsprechend wählen, und es folgt:

$$\frac{3 G_c}{8 l} = \underbrace{(1 - \phi_c)}_{=0} E \varepsilon_z^2, \quad (9.23)$$

was umgeformt nach $\sigma_z = E \varepsilon_z$ zu

$$\sigma_z = \sqrt{\frac{3 G_c}{8 l E}}, \quad (9.24)$$

führt. Hieraus kann der Längenparameter so formuliert, dass eine Rissentstehung eintritt, wenn die Zugfestigkeit erreicht ist:

$$l = \frac{3 G_c E}{8 \sigma_z^2}. \quad (9.25)$$

Dieser Zusammenhang wird für die Ermittlung des Längenparameters verwendet.

9.3.1 Planarer diffuser Phasenübergang zwischen spröd-anisotroper und duktiler Festphase

Das untersuchte Problem besteht aus dem Übergang einer spröd-anisotropen Festphase in eine duktile Phase mittels einer diffusen planaren Grenzfläche. In der linken Hälfte des Simulationsgebietes liegt die **spröd-anisotrope Phase** vor und in der rechten Hälfte die **duktiler Phase**. Auf der linken Seite des Gebietes befindet sich ein 20 mm langer Anfangsriß. In Abb. 9.1 sind der Simulationsaufbau sowie die mechanischen Randbedingungen dargestellt. Es wurden nur Zugversuche durchgeführt, deren mechanische Randbedingungen am Anfang dieses Abschnitts spezifiziert sind.

Als Materialparameter für die anisotrope spröde Phase werden der E-Modul, die Poisson-Zahl und die kritische Energiefreisetzungsrate von Perlit, Tabelle 9.2, verwendet. Die Materialparameter von Graphit aus Tabelle 9.2 werden nicht für die spröd-anisotrope Phase verwendet, um transkristallines Risswachstum des initialen Risses zu gewährleisten. Mit Gl. (9.19) ist der transversal isotrope Steifigkeitstensor für die spröde Phase definiert, es treten keine plastischen Verformungen der spröden Phase auf. Die entsprechenden Parameter von Perlit aus Tabelle 9.2 gelten auch für die duktil-isotrope Phase, die sich elastoplastisch verhält.

In den folgenden Studien wird der Einfluss jeweils nur eines Parameters untersucht. Hierfür wird ein Satz von Standardmodellparametern definiert, die konstant gehalten werden, wenn ein Parameter variiert wird: $\epsilon = 3 \Delta x$, $\varepsilon_{\text{akk,krit}}^d = 0,08$, $F_{\text{aniso}}^s = 2$ und $\psi_{\text{aniso}}^s = 30^\circ$. Es werden die Einflüsse der folgenden Parameter auf das Risswachstum

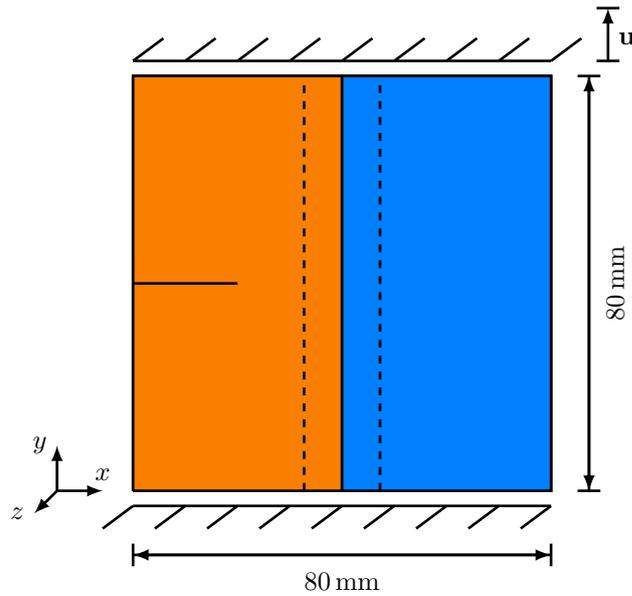


Abbildung 9.1: Simulationsgebiet für einen Riss, der einen vertikalen planaren diffusen Festphasenübergang passiert, zusammen mit den mechanischen Randbedingungen. Die spröd-anisotrope Phase ist in orange und die duktile Phase in blau dargestellt. Die gestrichelten Linien deuten den diffusen Übergang zwischen den beiden Festphasen an.

und das makroskopische Spannungs-Dehnungs-Verhalten untersucht: der Parameter, der die Breite des diffusen Übergangs zwischen den Festphasen definiert, ϵ , außerdem der Rotationswinkel der transversalen Isotropie um die z -Achse des Bezugskordinatensystems, ψ_{aniso}^s , der Anisotropiefaktor, F_{aniso}^s , sowie der Grenzwert der akkumulierten plastischen Verzerrung der duktilen Phase, $\epsilon_{\text{akk,krit}}^d$.

Zunächst wird der Einfluss des Parameters zur Definition der Breite des diffusen Übergangs zwischen den Festphasen für die Werte $\epsilon = \{3; 5; 7\}\Delta x$, in Bezug auf das Spannungs-Dehnungs-Verhalten und die Rissmorphologie, untersucht, siehe Abb. 9.3 (a). Die entsprechenden Konturplots der von-Mises-Vergleichsspannung nach Gl. (9.18), $\sigma_{v.M.}$, und der effektiven homogenisierten akkumulierten plastischen Verzerrung, ϵ_{akk} , für die in Abb. 9.3 (a) hervorgehobenen Punkte und die Standardparameter, sind in Abb. 9.2 dargestellt. Man erkennt, dass es in den Spannungs-Dehnungs-Diagrammen, bevor der Spannungswert nach seinem Maximum (t_2) nach typischem sprödem Materialverhalten, ohne makroskopische plastische Verformung, abrupt abfällt, einen linearen elastischen Bereich gibt ($t_0 - t_2$). Der steile Abstieg ($t_2 - t_3$) wird durch instabiles Risswachstum innerhalb der spröd-anisotropen Phase verursacht. Wie anhand der Polarplots ersichtlich ist, die die Risspfade in Abb. 9.3 (a) überlagern, beträgt der Winkel zwischen dem Riss in der anisotropen Phase und der x -Achse des Referenzkoordinatensystems $\psi = 19,2^\circ$. Die Diskrepanz zwischen der Neigung des Risses und der Orientierung der Anisotropie tritt auf, weil die Formänderungsenergie unter Mode-I-Belastung dazu neigt, einen perfekt horizontalen Riss anzustreben ($\psi = 0^\circ$), während die Formulierung der kritischen Energiefreisetzungsrates eine Steigung entsprechend ψ_{aniso}^s forciert. Diese beiden Gegenspieler bewirken eine tatsächliche Neigung des Risses zwischen $\psi = 0^\circ$ und ψ_{aniso}^s [109]. Sobald der Riss den diffusen Phasenübergang zwischen den Festphasen erreicht, ändert sich die Charakteristik der Spannungs-Dehnungs-Kurven und die Rissmorphologie. Der weitere Verlauf der Spannungs-Dehnungs-Reaktion ist stark nicht linear (t_4) und mit

plastischen Verformungen verbunden. Der Rissverlauf verliert seine Neigung und breitet sich in reiner Mode-I-Manier horizontal aus. Nach dem Bruch der Probe (t_5) sinkt die makroskopische Spannung auf Null, auf der Ebene der Konturplots liegen lokal Eigenspannungen vor, die durch die plastischen Verformungen verursacht werden.

In Abb. 9.3 (a) ist zu erkennen, dass die Breite des diffusen Übergangs zwischen den Festphasen keinen entscheidenden Einfluss auf die Spannungs-Dehnungs-Kurven und die Rissmorphologie hat.

Als nächstes wird die Anisotropieorientierung für die Werte $\psi_{\text{aniso}}^s = \{0; 15; 30; 45; -30\}^\circ$ variiert. Die entsprechenden Spannungs-Dehnungs-Kurven und die Rissverläufe sind in Abb. 9.3 (b) dargestellt. Aufgrund des anisotropen Steifigkeitstensors der spröden Phase steigt der Spannungsspitzenwert des Diagramms mit zunehmendem Anisotropiewinkel. In Analogie zu Graphit werden bei einem Rotationswinkel von $\psi_{\text{aniso}}^s = 0^\circ$ nur die Van-der-Waals-Kräfte beansprucht, während bei $\psi_{\text{aniso}}^s = 90^\circ$ nur die kovalenten Bindungen beansprucht werden, was zu höheren makroskopischen Spannungswerten führt. Mit zunehmendem Rotationswinkel der Anisotropie nimmt erwartungsgemäß auch die Ablenkung des resultierenden Risses zu, wobei wiederum zu beachten ist, dass die Formulierung der kritischen Energiefreisetzungsrate und die Formänderungsenergie als Gegenspieler wirken. Die resultierenden Spannungs-Dehnungs-Diagramme bei einem Vorzeichenwechsel des Rotationswinkels sind äquivalent, vergleiche $\psi_{\text{aniso}}^s = 30^\circ$ und $\psi_{\text{aniso}}^s = -30^\circ$ in Abb. 9.3 (b). Das Risswachstum in der duktilen Phase unterscheidet sich nicht signifikant für unterschiedliche Anisotropieorientierungen, alle Kurven, mit Ausnahme von $\psi_{\text{aniso}}^s = 45^\circ$, sind quasi identisch.

Der Einfluss des Anisotropiefaktors auf das mechanische Verhalten wird für die Werte $F_{\text{aniso}}^s = \{1; 1,5; 2; 2,5; 3\}$ untersucht, siehe Abb. 9.4 (c). Der Spannungs-Dehnungs-Verlauf zeigt höhere Spitzenwerte, wenn der Anisotropiefaktor zunimmt. Der Grund hierfür ist, dass der Anisotropiefaktor die Steifigkeit der spröden Phase erhöht und somit auch die effektive Steifigkeit des Simulationsgebietes. In Analogie zu Lamellengraphit erfolgt der Anstieg des Elastizitätsmoduls innerhalb der Basalebene, in a-Richtung des hexagonalen Kristallsystems. Wird der Anisotropiefaktor mit $F_{\text{aniso}}^s = 1$ gewählt, verhält sich die spröde Phase isotrop und das Rissprofil hat keine Steigung, $\psi \approx 0^\circ$. Die Ablenkung des Risses steigt mit wachsendem Anisotropiefaktor aufgrund der anisotropen kritischen Energiefreisetzungsrate.

Zuletzt wird der Einfluss des Grenzwertes der akkumulierten plastischen Verzerrung der duktilen Phase für die Werte $\varepsilon_{\text{akk,krit}}^d = \{0,8; 0,6; 0,4; 0,2\}$ untersucht. Die entsprechenden Ergebnisse sind in Abb. 9.4 (d) gezeigt. Solange sich der Riss innerhalb der spröden Phase ausbreitet, hat eine Änderung des Grenzwertes keinen Einfluss auf das Materialverhalten, weder im Hinblick auf das Spannungs-Dehnungs-Verhalten, noch auf die Rissmorphologie. Auch die Rissmorphologie in der duktilen Phase wird durch den Grenzwert nicht signifikant verändert. Es besteht jedoch erwartungsgemäß ein starker Einfluss auf den Verlauf der Spannungs-Dehnungs-Diagramme während der Riss durch die duktile Phase wandert. Mit steigendem Grenzwert nimmt die Bruchdehnung zu, da die duktile Degradierungsfunktionen von $\varepsilon_{\text{akk,krit}}$ abhängt, was bedeutet, dass mit steigendem $\varepsilon_{\text{akk,krit}}$ höhere plastische Verzerrungen erforderlich sind, um eine Rissausbildung in der duktilen Phase zu verursachen.

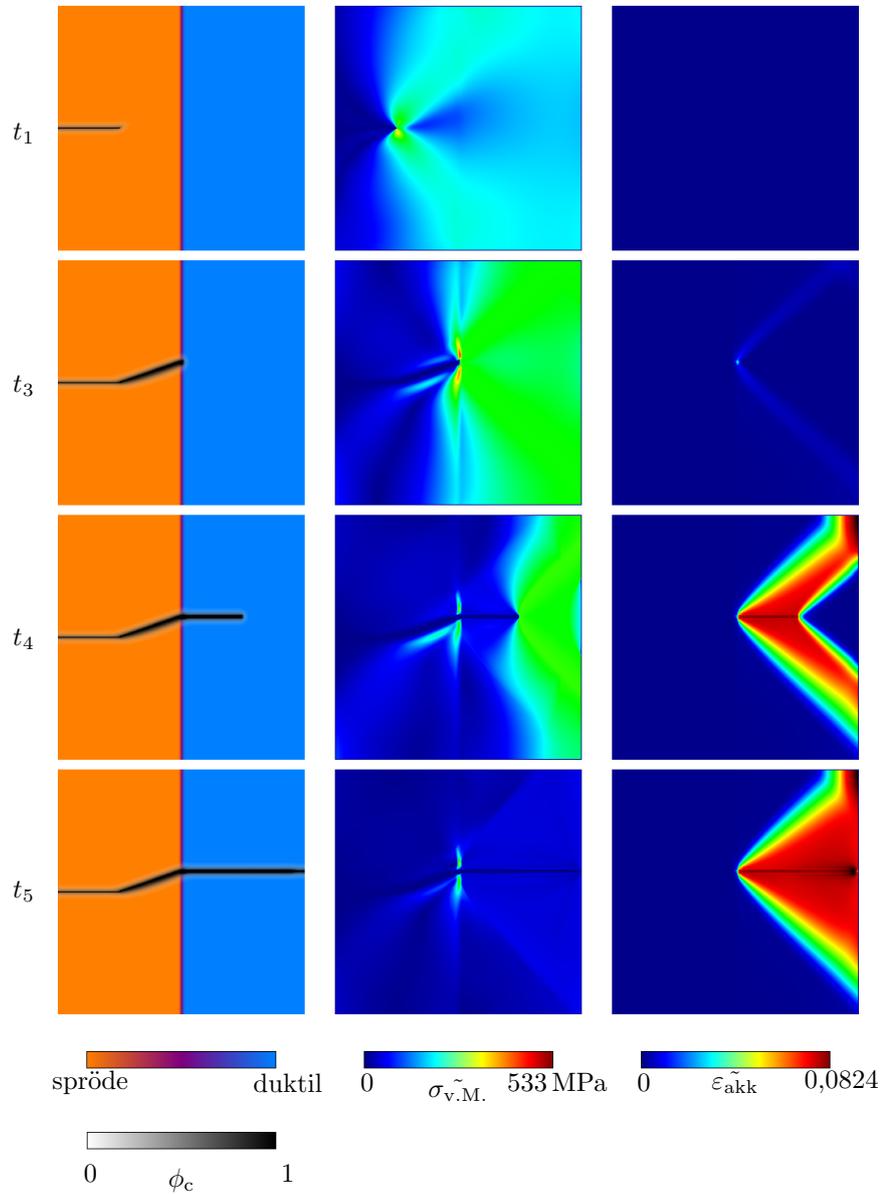


Abbildung 9.2: Entwicklung des Rissphasenfeldes, ϕ_c , und der resultierenden von-Mises-Vergleichsspannung, $\sigma_{v.M.}$, zusammen mit der effektiven homogenisierten akkumulierten plastischen Verzerrung, ε_{akk} , des Simulationsaufbaus mit einem planaren diffusen Phasenübergang zwischen zwei Festphasen und den Standardparametern.

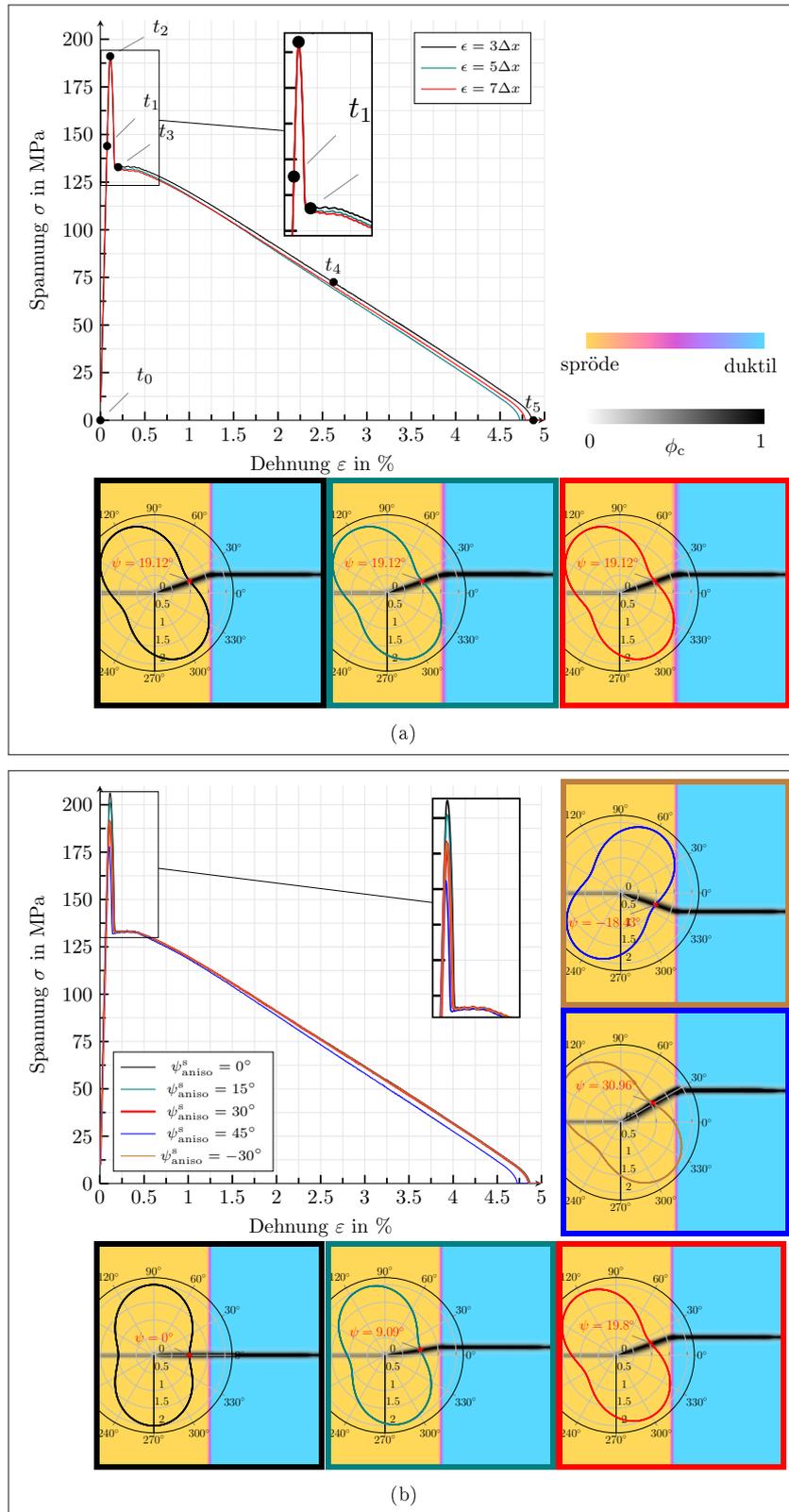


Abbildung 9.3: (a) Spannungs-Dehnungs-Verläufe für verschiedene Werte von $\epsilon = \{3; 5; 7\}\Delta x$, für den Simulationsaufbau mit einem planaren diffusen Phasenübergang zwischen zwei Festphasen. (b) Spannungs-Dehnungs-Verläufe für verschiedene Werte von $\psi_{\text{aniso}}^s = \{0; 15; 30; 45; -30\}^\circ$ für den Simulationsaufbau mit einem planaren diffusen Phasenübergang zwischen zwei Festphasen. Die Risspfade sind zusammen mit Polarplots der anisotropen kritischen Energiefreisetzungsrates und der Neigung der Risse dargestellt.

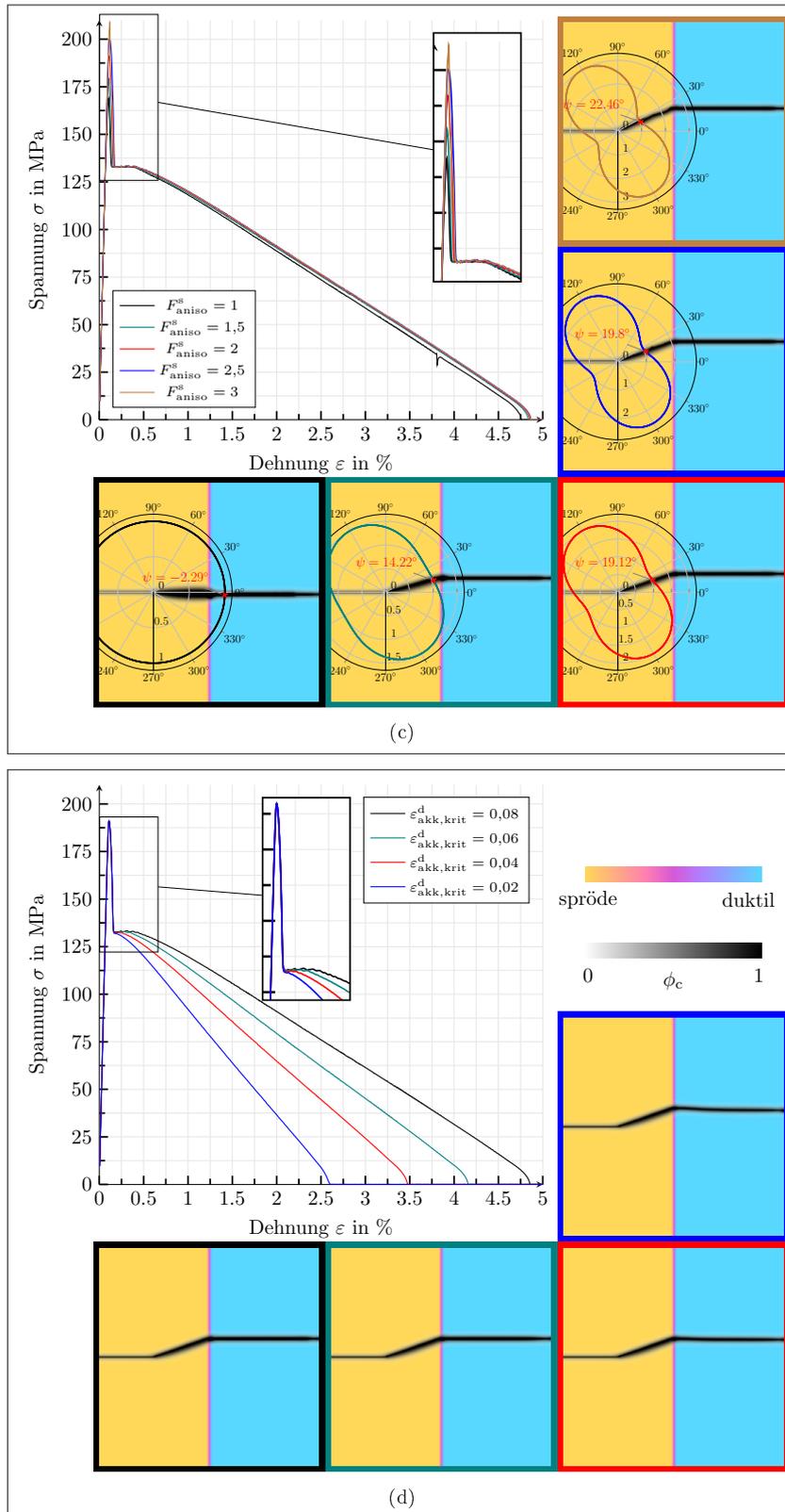


Abbildung 9.4: (c) Spannungs-Dehnungs-Verläufe für verschiedene Werte von $F_{\text{aniso}}^{\text{S}} = \{1; 1,5; 2; 2,5; 3\}$, für den Simulationsaufbau mit einem planaren diffusen Phasenübergang zwischen zwei Festphasen. (d) Spannungs-Dehnungs-Verläufe für verschiedene Werte von $\varepsilon_{\text{akk,krit}}^{\text{d}} = \{0,08; 0,06; 0,04; 0,02\}$ für den Simulationsaufbau mit einem planaren diffusen Phasenübergang zwischen zwei Festphasen. Die Risspfade sind zusammen mit Polarplots der anisotropen kritischen Energiefreisetzungsrates und der Neigung der Risse dargestellt.

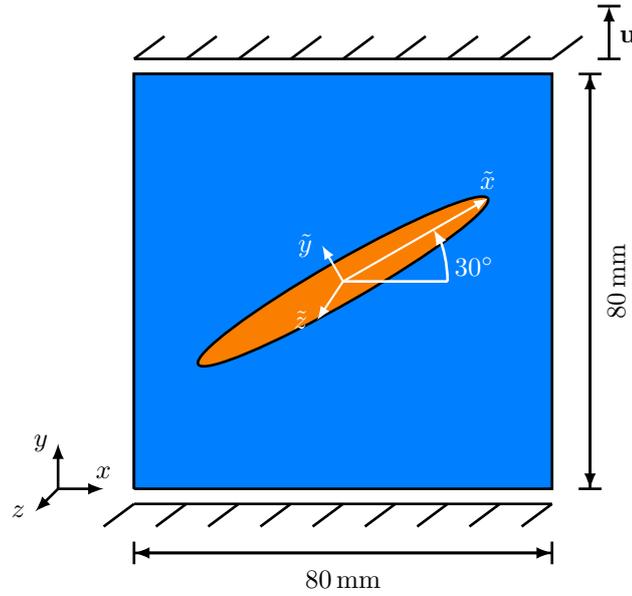


Abbildung 9.5: Aufbau der Rissentwicklungsuntersuchung in einem Gebiet, das aus einem elliptischen, transversal isotropen, spröden Partikel besteht, der in eine duktile Matrix eingebettet ist, zusammen mit den mechanischen Randbedingungen. Der spröde-anisotrope Partikel ist in orange und die duktile Matrix in blau dargestellt.

9.3.2 Einzelner elliptischer, transversal isotroper, spröder Partikel in duktiler Matrix

In diesem Abschnitt wird ein **einzelner elliptischer, transversal isotroper, spröder Partikel**, eingebettet in eine **duktiler Matrix**, als Simulationsaufbau verwendet. Die Längsachse des Ellipsoids, die der \tilde{x} -Richtung der anisotropen kritischen Energiefreisetzungsrates entspricht, wird um die z -Achse des Referenzkoordinatensystems rotiert. Die Länge des Ellipsoids beträgt 64 mm und die Höhe 4 mm. In Abb. 9.5 sind der Simulationsaufbau sowie die mechanischen Randbedingungen dargestellt. Die zu Beginn dieses Abschnitts eingeführten mechanischen Randbedingungen werden für die Zugversuche angewendet.

Als Materialparameter für die spröde-anisotrope Phase werden die Werte für Graphit aus Tabelle 9.2 verwendet und in Gl. (9.19) eingebaut. Die duktile Matrix besitzt die mechanischen Eigenschaften von Perlit in Tabelle 9.2. In den folgenden Untersuchungen wird, wie zuvor, jeweils nur der Einfluss eines Parameters untersucht. Daher wird ein Satz von Standardmodellparametern definiert, die konstant gehalten werden, wenn ein anderer Parameter variiert wird: $\epsilon = 3\Delta x$, $\epsilon_{\text{akk,krit}}^d = 0,08$, $F_{\text{aniso}}^s = 2$ und $\psi_{\text{aniso}}^s = 30^\circ$.

Zunächst wird der Einfluss des Längenparameters zur Definition der diffusen Breite der Festphasenübergänge für die Werte $\epsilon = \{3; 5; 7\}\Delta x$, in Bezug auf das Spannungs-Dehnungs-Verhalten und die Rissmorphologie, untersucht, siehe Abb. 9.7 (a). Die entsprechenden Konturplots der von-Mises-Vergleichsspannung nach Gl. (9.18), $\sigma_{v.M.}$, und der effektiven homogenisierten akkumulierten plastischen Verzerrung, ϵ_{akk} , für die in Abb. 9.7 (a) hervorgehobenen Punkte und die Standardparameter, sind in Abb. 9.6 dargestellt. Es ist zu erkennen, dass in den Spannungs-Dehnungs-Diagrammen ein linear elastischer Bereich bis zu einer Dehnung von $\epsilon \approx 0,075\%$ vorliegt ($t_0 - t_1$). Anhand der Entwicklung der Rissphase, sowie der Spannungs-Dehnungs-Diagramme, sieht man,

dass es drei Phasen des Risswachstums gibt. Zunächst breitet sich ein Riss innerhalb der spröden Phase aus. Dieses Risswachstum wird von einem Abfall des Spannungs-Dehnungs-Plots ($t_1 - t_2$) begleitet, der spröde abläuft. Nachdem die Spannung einen kritischen Wert (t_3) erreicht hat, beginnen die Rissspitzen, sich durch den diffusen Festphasenübergang auszubreiten. Während dieser Phase hat der Spannungs-Dehnungs-Plot einen nahezu konstanten Spannungswert ($t_3 - t_4$). Danach breitet sich der Riss vom oberen und unteren Ende des Ellipsoids aus und wächst horizontal bis zum vollständigen Versagen des Testgebietes, die Spannungs-Dehnungs-Kurven fallen dann zu Null ab ($t_4 - t_6$). Eigenspannungen entstehen durch plastische Verzerrungen nach dem Bruch. Bei der Rissausbreitung in der duktilen Phase tritt ein ausgeprägtes nicht lineares Verhalten auf.

Es ist eine leichte Abhängigkeit der Spannungs-Dehnungs-Kurven vom Längenparameter zur Definition der diffusen Breite der Festphasenübergänge zu erkennen, wobei eine Konvergenz des Materialverhaltens mit steigendem Längenparameter vermutet werden kann. Die Rissmorphologie beim Bruch ist unabhängig von der gewählten Festphasenübergangsbreite, wie aus den Abbildungen der Rissverläufe in Abb. 9.7 (a) ersichtlich ist.

Die Berechnung der mechanischen Felder ist in Bereichen der Simulationsdomäne mit mehreren koexistierenden Phasen deutlich aufwändiger, als in Bereichen mit nur einer Phase. Da der Längenparameter keinen starken Einfluss auf die Simulationsergebnisse hat, ist es zielführend, einen möglichst kleinen Längenparameterwert zu wählen, der aber einen guten Kompromiss zwischen Genauigkeit und Rechenzeit darstellt.

Der Name Grauguss leitet sich von den Bruchflächen gebrochener Graugussbauteile ab, die meist einen grauen Schimmer haben. Solche gräulichen Bruchflächen sind das Ergebnis eines bevorzugten Risswachstums entlang von Graphitlamellen, bedingt durch die deutlich geringere kritische Energiefreisetzungsrate von Graphitlamellen, verglichen mit der metallischen Matrix [83]. Unter Zugbelastung haben Graphitlamellen eine vernachlässigbare Belastbarkeit und wirken daher bereits bei sehr kleinen Dehnungen als Mikrorisse [54, 31]. Die Flanken der gebrochenen Graphitlamellen wirken als Spannungserhöher und induzieren lokale plastische Zonen [54]. Erst wenn die Graphitlamellen ihre Tragfähigkeit verloren haben, beginnt die duktile Matrix zu brechen. Die Simulationsergebnisse zeigen, dass das beschriebene Verhalten durch das vorgestellte Modell abgebildet werden kann. Die Rissentstehung erfolgt ausschließlich innerhalb der spröden Phase, die mit Graphitlamellen assoziiert ist, wobei die Richtung des Risswachstums entlang der spröden Phase durch die anisotrope Formulierung der kritischen Energiefreisetzungsrate begünstigt wird, bevor die Rissausbreitung innerhalb der duktilen Matrix erfolgt. Der sich innerhalb der duktilen Phase ausbreitende Riss wird von lokalen plastischen Verzerrungen vor den Rissspitzen begleitet, siehe Abb. 9.6 (t_3). Innerhalb der Matrix findet ein Risswachstum in horizontaler Richtung statt, was typisch für Modus I Belastung ist.

Als nächstes wird die Neigung des spröden Ellipsoids variiert. Die Rotationswinkel der Längsachse des Ellipsoids um die z -Achse des Bezugskoordinatensystems entsprechen der Rotation des $\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}$ -Koordinatensystems der Anisotropieformulierung für die Werte $\psi_{\text{aniso}}^s = \{0; 15; 30; 45; -30\}^\circ$. Die entsprechenden Spannungs-Dehnungs-Kurven und die Rissverläufe bei Bruch sind in Abb. 9.7 (b) dargestellt. Wie man sehen kann, sind die Spannungs-Dehnungs-Kurven stark von der Orientierung des Partikels abhängig. Die Simulation mit einem Rotationswinkel von $\psi_{\text{aniso}}^s = 0^\circ$ zeigt den kleinsten maximalen

Spannungswert. In Analogie zu Lamellengraphit erfolgt in diesem Fall die Belastung genau orthogonal zu den Basalebene, so dass der höchste Wert der Formänderungsenergie mit der Richtung des geringsten Risswiderstandes zusammenfällt. Die Abweichung zwischen der maximalen Formänderungsenergie und dem minimalen Risswiderstand wächst mit zunehmendem Rotationswinkel, so dass größere Spannungen erforderlich werden, um Risse zu verursachen. Aus diesem Grund hat die Simulation mit einem Rotationswinkel von $\psi_{\text{aniso}}^s = 45^\circ$ die höchste maximale Spannung. Unabhängig vom der Orientierung entwickelt sich der Riss immer entlang der Längsachsen der spröden Partikel. Die resultierenden Spannungs-Dehnungs-Diagramme beim einem Vorzeichenwechsel des Rotationswinkels sind äquivalent, vergleiche $\psi_{\text{aniso}}^s = 30^\circ$ und $\psi_{\text{aniso}}^s = -30^\circ$ in Abb. 9.7 (b).

Der Einfluss des Anisotropiefaktors auf das mechanische Verhalten ist in Abb. 9.8 (c) dargestellt, die Ergebnisse entsprechen den Werten $F_{\text{aniso}}^s = \{1; 1,5; 2; 2,5; 3\}$. Die Spannungs-Dehnungs-Kurven sind annähernd identisch. Der einzige auffällige Unterschied existiert zwischen den Maximalwerten der Spannungen. Eine Erhöhung der Steifigkeitskomponente der spröden Phase durch den Anisotropiefaktor hat jedoch keine so große Auswirkung auf das makroskopische Materialverhalten wie im vorherigen Beispiel, da sich bereits bei sehr kleinen Dehnungen ein Mikroriss im Inneren des Ellipsoids bildet. Im nicht linearen Bereich des Diagramms, der durch plastische Verformungen gekennzeichnet ist, sind die Diagramme identisch. Auf der Skala des Rissphasenfeldes fällt auf, dass der Riss mit zunehmendem Anisotropiefaktor schlanker wird, da die Stärke der Richtungsabhängigkeit zunimmt.

Zuletzt wird der Einfluss des Grenzwertes der akkumulierten plastischen Verzerrung der duktilen Phase für die Werte $\varepsilon_{\text{akk,krit}}^d = \{0,8; 0,6; 0,4; 0,2\}$ untersucht. Die entsprechenden Ergebnisse sind in Abb. 9.8 (d) gegeben. Solange sich der Riss innerhalb der spröden Phase ausbreitet hat auch hier eine Änderung des Schwellenwertes keinen Einfluss auf das Materialverhalten, weder in Bezug auf das Spannungs-Dehnungs-Verhalten noch in Bezug auf die Rissmorphologie. Auch die Rissmorphologie in der duktilen Phase wird durch den Grenzwert nicht signifikant beeinflusst. Mit zunehmendem Grenzwert steigt jedoch die Bruchdehnung, da die duktile Degradierungsfunktion von $\varepsilon_{\text{akk,krit}}^d$ abhängt, was bedeutet, dass mit zunehmendem $\varepsilon_{\text{akk,krit}}^d$ höhere plastische Verformungen erforderlich sind, um eine Rissausbreitung in der duktilen Phase zu verursachen.

9.3.3 Mehrphasensimulation in einem idealisierten Graugussgefüge

Als realistischeres Anwendungsbeispiel wird das entwickelte Modell auf ein idealisiertes Graugussgefüge angewendet. Der Simulationsbereich enthält **drei unterschiedlich orientierte, elliptische, transversal isotrope, spröde Partikel**, als vereinfachte Darstellungen von Graphitlamellen, in einer **duktilen Matrix**. Die Länge von 26,67 mm und die Höhe von 3,33 mm ist bei allen Partikeln gleich. Abbildung 9.9 zeigt den Simulationsaufbau und die angewandten mechanischen Randbedingungen, die identisch zu den vorherigen Validierungsfällen sind. Zwischen den Festphasen wird ein diffuser Phasenübergang entsprechend $\epsilon = 3\Delta x$ erzeugt. Während der Simulation findet keine Fest-Festphasenumwandlung statt. Da das Simulationsgebiet kein repräsentatives Volumenelement im Sinne einer realistischen Gusseisen mit Lamellengraphit Mikrostruktur ist, erstrecken sich die spröden Partikel fast über das gesamte Gebiet. Mittels diesem kleinen Simulationsbereich ist es also schwierig, eine belastbare Aussage über das Materialverhalten einer realen Graugussmikrostruktur zu treffen.

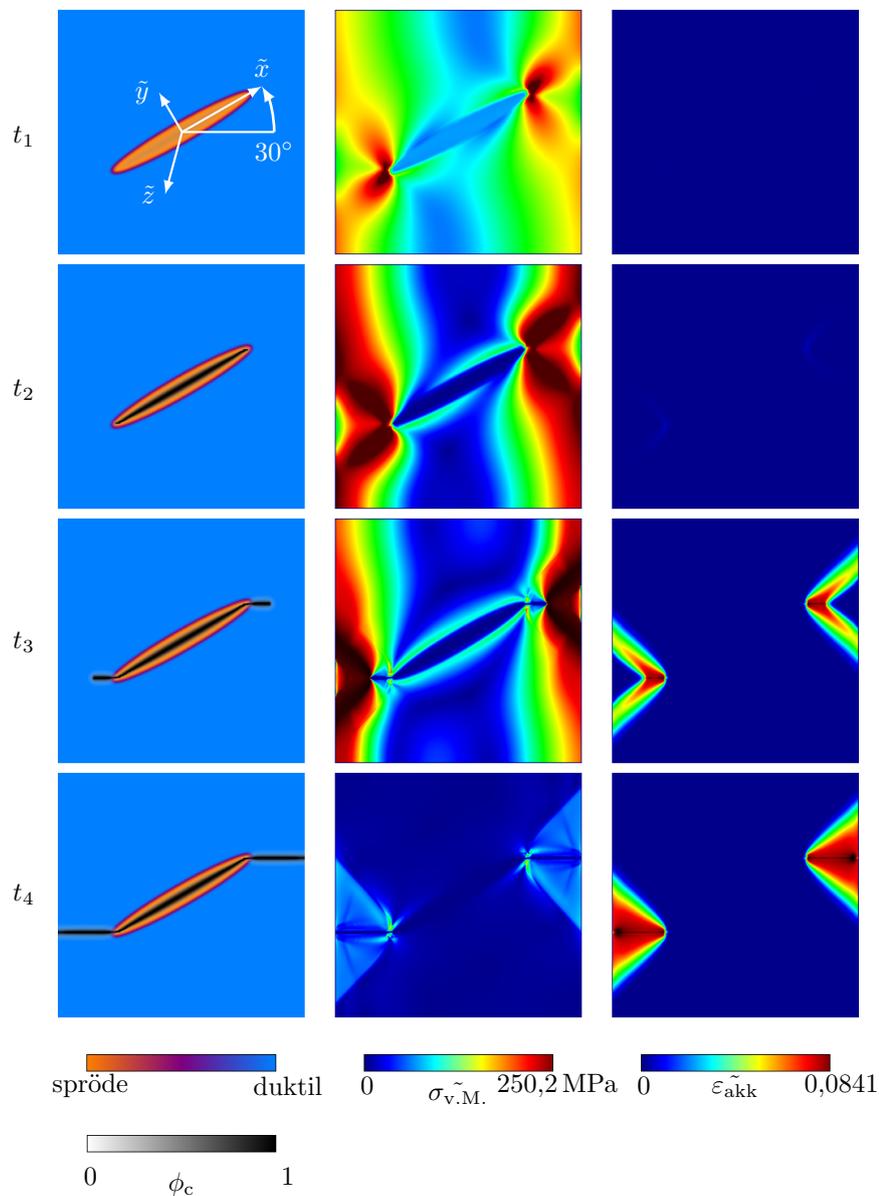


Abbildung 9.6: Entwicklung des Rissphasenfeldes, ϕ_c , und der resultierenden von-Mises-Vergleichsspannung, $\sigma_{v.M.}$, zusammen mit der effektiven homogenisierten akkumulierten plastischen Verzerrung, ε_{akk} , des Simulationsaufbaus mit einem elliptischen, transversal isotropen, spröden Partikel, der in eine duktile Matrix eingebettet ist und den Standardparametern.

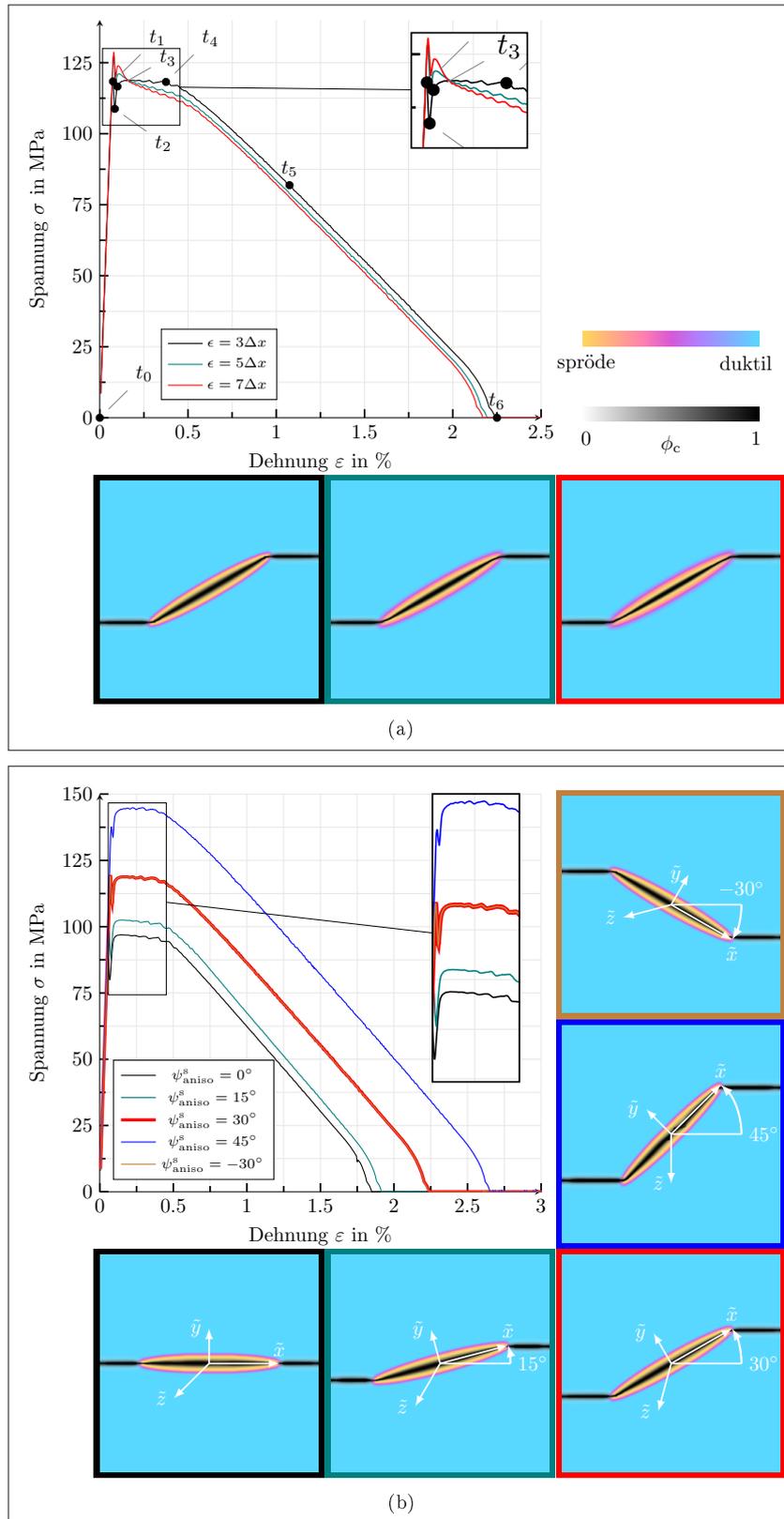


Abbildung 9.7: (a) Spannungs-Dehnungs-Verläufe für verschiedene Werte von $\epsilon = \{3; 5; 7\} \Delta x$, für den Simulationsaufbau mit einem elliptischen, transversal isotropen, spröden Partikel, der in eine duktile Matrix eingebettet ist. (b) Spannungs-Dehnungs-Verläufe für verschiedene Werte von $\psi_{\text{aniso}}^s = \{0; 15; 30; 45; -30\}^\circ$ für den Simulationsaufbau mit einem elliptischen, transversal isotropen, spröden Partikel, der in eine duktile Matrix eingebettet ist. Die Risspfade bei Bruch sind dargestellt.

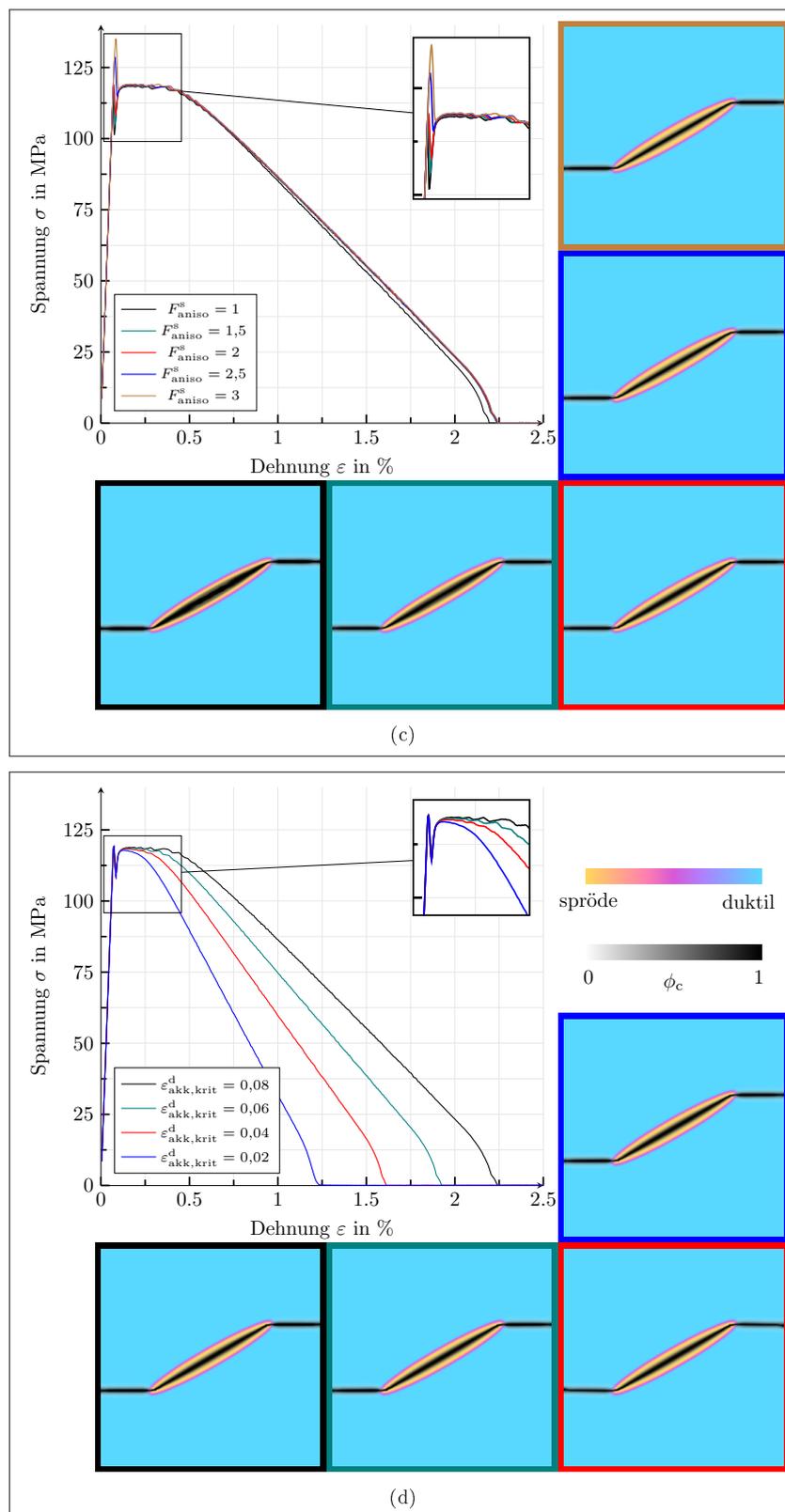


Abbildung 9.8: (c) Spannungs-Dehnungs-Verläufe für verschiedene Werte von $F_{\text{aniso}}^{\text{S}} = \{1; 1,5; 2; 2,5; 3\}$, für den Simulationsaufbau mit einem elliptischen, transversal isotropen, spröden Partikel, der in eine duktile Matrix eingebettet ist. (d) Spannungs-Dehnungs-Verläufe für verschiedene Werte von $\varepsilon_{\text{akk,krit}}^{\text{d}} = \{0,08; 0,06; 0,04; 0,02\}$ für den Simulationsaufbau mit einem elliptischen, transversal isotropen, spröden Partikel, der in eine duktile Matrix eingebettet ist. Die Risspfade bei Bruch sind dargestellt.

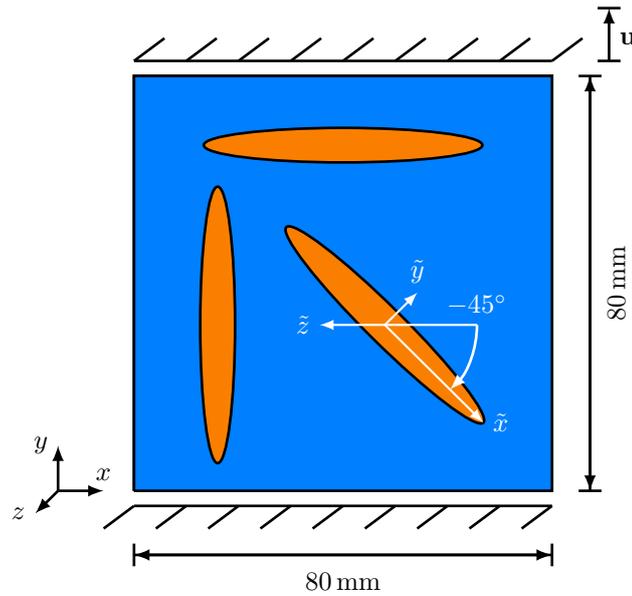


Abbildung 9.9: Simulationsgebiet mit drei unterschiedlich orientierten elliptischen, transversal isotropen, spröden Partikeln in einer duktilen Matrix, zusammen mit den mechanischen Randbedingungen. In blau ist die duktile Matrix dargestellt und in orange die spröden Partikel.

Die Materialparameter für die duktile Matrix und die spröden Partikel sind in Tabelle 9.2 gegeben. Als Modellparameter wurden der Anisotropiefaktor $F_{\text{aniso}}^s = 1,5$ und der Grenzwerte der akkumulierten plastischen Verzerrung $\varepsilon_{\text{akk,krit}}^d = 0,08$ gewählt. Mit dem Anisotropiefaktor erhält man den unrotierten transversalen isotropen Steifigkeitstensor der Partikel gemäß Gl. (9.19).

Es wurden ein Zugversuch und ein Drucktest durchgeführt. Abbildung 9.10 zeigt die Entwicklung des Rissphasenfeldes unter Zug- und Druckbelastung. Zusätzlich sind Konturplots der von-Mises-Vergleichsspannung, $\sigma_{v.M.}$, und der effektiven homogenisierten akkumulierten plastischen Verzerrung, ε_{akk} , gezeigt. Alle entsprechenden Zustände von Abb. 9.10 sind im Spannungs-Dehnungs-Diagramm 9.11 hervorgehoben. In beiden Belastungsfällen findet die Rissentstehung in dem Ellipsoid Graphitlamelle statt, dessen Längsachse orthogonal zur Belastungsrichtung orientiert ist. Die schwächste kritische Energiefreisetzungsrates fällt bei diesen Partikel genau mit dem Maximum der Formänderungsenergie zusammen, vergleiche in Abschnitt 9.3.2 das Beispiel $\psi_{\text{aniso}}^s = 0^\circ$. In Analogie zur physikalischen Realität werden dabei vor allem die schwachen Van-der-Waals-Bindungen dieser "Graphitlamelle" beansprucht, woraus das Wachstumsverhalten resultiert. Dem Risswachstum innerhalb der horizontalen Graphitlamelle folgen lokale Spannungsspitzen an den Graphitflanken und damit verbundene plastische Verformungen der perlitischen Matrix. Das beobachtete Verhalten stimmt mit experimentellen Untersuchungen überein [54] und wurde bereits in Abschnitt 9.3.2 festgestellt. Nachdem die erste Lamelle gebrochen ist, beginnt die Lamelle mit einer Rotation der Längsachse von $\psi = -45^\circ$ bezogen auf das Referenzkoordinatensystem zu brechen. Bei Druckbelastung entsteht auch innerhalb des vertikalen Ellipsoids ein Riss. Die Rissmorphologie innerhalb der duktilen Matrix ist unter Zugbelastung definierter als unter Druckbelastung. Darüber hinaus treten bei Druckeinwirkung erwartungsgemäß deutlich höhere plastische Verformungen auf. Nach dem Bruch der Proben bewirken die

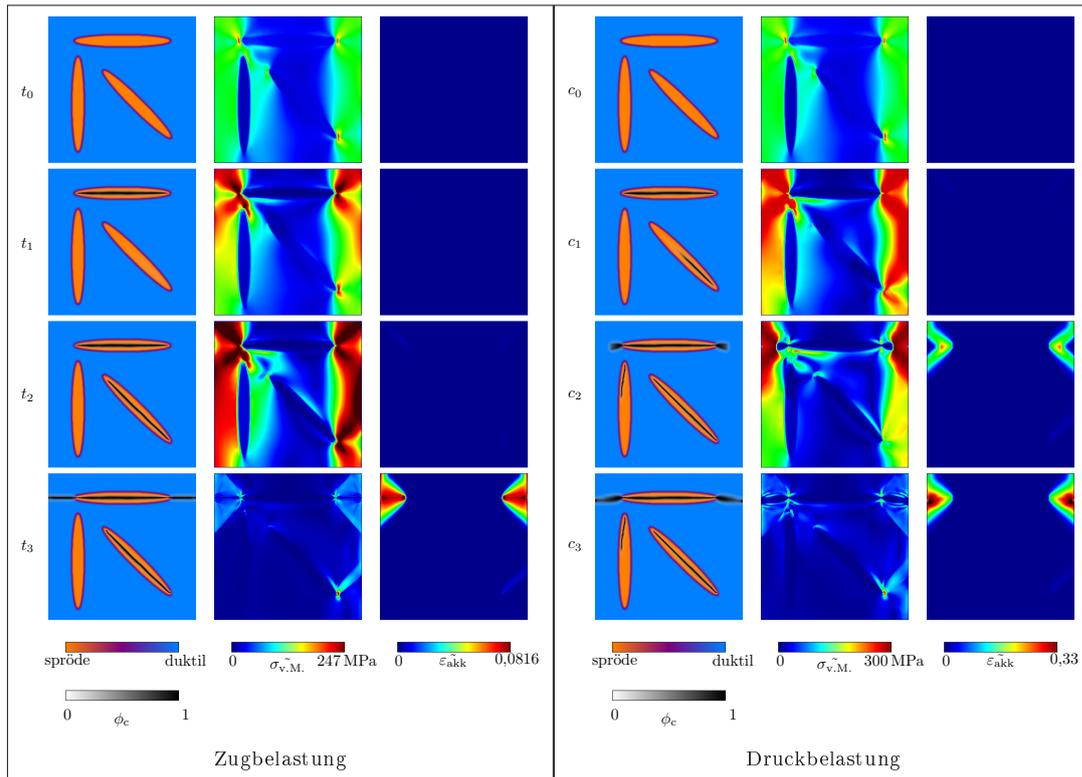


Abbildung 9.10: Entwicklung des Rissphasenfeldes, der resultierenden von-Mises-Vergleichsspannungen und der akkumulierten plastischen Verzerrungen eines idealisierten Graugussgefües. Es wurde Zug- und Druckbelastung aufgebracht.

plastisch verformten Zonen eine komplexe Verteilung der Eigenspannungen, die typisch für Grauguss ist [54].

Wichtige Merkmale des komplizierten konstitutiven Verhaltens von Grauguss in Bezug auf die Art der Belastung sind in den Simulationsergebnissen zu finden. Dies beinhaltet die Nichtexistenz eines linearen elastischen Bereichs unter Zugbelastung und die Zug-Druck-Spannungsasymmetrie [98]. Abbildung 9.11 zeigt deutlich das asymmetrische Verhalten unter Zug- und Druckbelastung, das typisch für Gusseisen mit Lamellengraphit auf der makroskopischen Ebene ist [64, 127]. Unter Zugbelastung weist das getestete Material ein sprödes Verhalten auf: bei einer Dehnung von $\varepsilon \approx 0,2\%$ und einer Maximalspannung von $\sigma \approx 95\text{ MPa}$ beginnt die Probe zu versagen. Das Risswachstum erfolgt ohne das Auftreten großer makroskopischer plastischer Verformungen und führt zum Bruch bei einer Dehnung von $\varepsilon \approx 1,63\%$. Unter Berücksichtigung der Größe des Simulationsgebietes sind diese Ergebnisse relativ gut vereinbar mit experimentellen Ergebnissen, die in der Literatur dokumentiert sind. Laut Noguchi und Shimizu [97] zeigt Grauguss unter Zugbelastung keine ausgeprägte Streckgrenze und bricht bei einer Dehnung zwischen $\varepsilon = 0,5 - 1,0\%$, ohne sichtbare Einschnürung. Zugfestigkeiten in Grauguss liegen im Bereich $\sigma = 100 - 500\text{ MPa}$ [113]. Unter Druckbelastung tritt ein Abfall im Spannungs-Dehnungs-Diagramm nach einer Dehnung von $\varepsilon \approx 0,1\%$ und einer Spannungsspitze von $\sigma \approx 134,5\text{ MPa}$ auf, davor ist der Kurvenverlauf linear. Danach liegt ein großer Abschnitt nicht linearen Materialverhaltens vor, der durch die plastische Verformung der duktilen Matrix verursacht wird. Die Bruchdehnung unter Druckbelastung ist $\varepsilon > 5\%$ und kann daher unter der Annahme von kleinen Deforma-

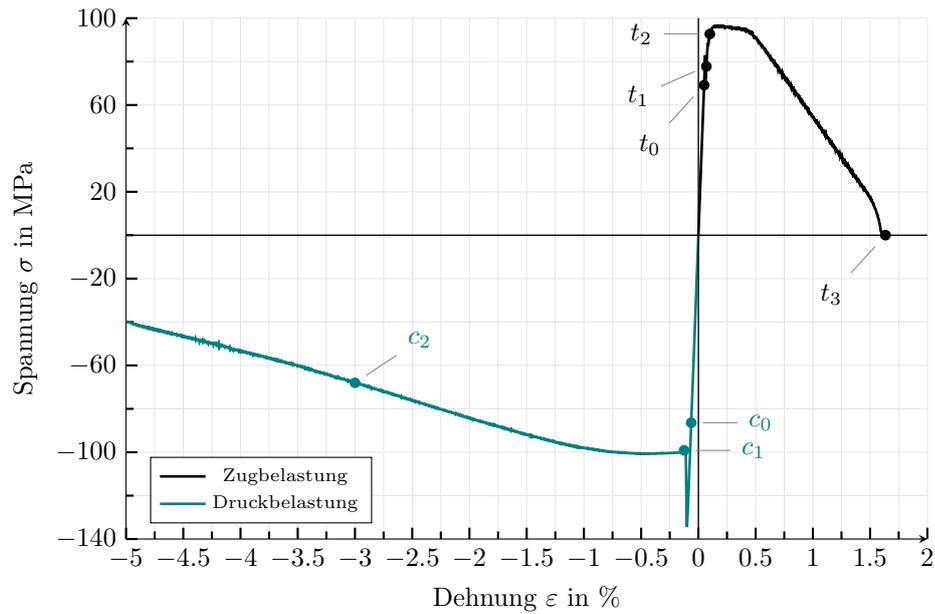


Abbildung 9.11: Spannungs-Dehnungs-Verhalten einer Simulationsdomäne, inspiriert durch die Mikrostruktur eines Gusseisens mit Lamellengraphit unter Zug- und Druckbelastung. Obwohl die Simulationsdomäne kein repräsentatives Volumenelement darstellt, kann eine deutliche Zug-Druck-Abhängigkeit des Spannungs-Dehnungs-Diagramms beobachtet werden, wenn man die Spitzenspannungen und die Bruchdehnungen betrachtet.

tionen nicht mehr sachgerecht dargestellt werden. Das unterschiedliche Verhalten unter Zug- und Druckbelastung wird in den Simulationen durch die Aufspaltung der Formänderungsenergie hervorgerufen. Der positive Anteil der Formänderungsenergie unter Druckbelastung ist im Vergleich zum Zugbeispiel deutlich kleiner, daher erfolgt das Versagen der duktilen Matrix bei deutlich höheren Dehnungen.

Zusammenfassung und Ausblick

Abschließend werden eine Zusammenfassung der im Rahmen dieser Arbeit erzielten Ergebnisse und mögliche weiterführende Ergänzungen gegeben. Das Ziel war es, mechanische und thermische Aspekte von Gusseisen mit Lamellengraphit auf numerischem Wege zu betrachten. Alle entwickelten Modelle wurden in das Softwarepaket Pace3D integriert.

Hinsichtlich der Graphitmorphologie wurde in Kapitel 7 die Sensitivität wichtiger makroskopischer, mechanischer und thermischer Eigenschaften von Grauguss in einem großen Temperaturbereich untersucht. Um die Bandbreite der möglichen Graphitausprägungen nach DIN EN ISO 945-1 [40] abzubilden, fand ein phänomenologischer Ansatz zur Simulationsgebietserstellung Anwendung. Hierbei wurde die Grundform eines Graphitpartikels als flaches gewelltes Ellipsoid angenommen, um die lamellen- bzw. flockenartige Form von Lamellengraphit [107] zu imitieren. Die den Mikrostrukturen zugrunde liegenden Verteilungsfunktionen der Graphiteinschlüsse folgen dabei der DIN EN ISO 945-1 [40] und Daten aus Schlibfbildern. Ein Vergleich zwischen den künstlich erstellten Mikrostrukturen mit Schlibfbildern zeigt eine augenscheinlich gute Übereinstimmung.

Bei der mikroskopischen Modellierung wurde die Matrix idealisiert als homogenes Perlit angenommen, das sich im Sinne der J_2 -Plastizitätstheorie isotrop mit nicht linearer Verfestigung verhält. Graphit besitzt sowohl hinsichtlich der Mechanik als auch hinsichtlich der Wärmeleitfähigkeit transversal-isotrope Materialeigenschaften. Zur Abbildung der geringen Beanspruchbarkeit von Graphit, bei Belastung der schwachen Van-der-Waals-Bindungen zwischen den Basalebene, wurde der Steifigkeitstensor von Graphit durch eine von Volumenänderungen abhängige Funktion degradiert. Hierdurch konnten die für Gusseisen mit Lamellengraphit typische Zug-Druck-Spannungsasymmetrie, sowie weitere wichtige Charakteristiken reproduziert werden. Eine Verbesserung der mechanischen Modelle wäre durch die Berücksichtigung von geometrischen Nichtlinearitäten möglich.

Das entwickelte Modell wurde in einer ausführlichen Simulationsstudie angewendet. Die Studie umfasste statistische Volumenelemente der Graphitausprägungen *GG-15* und *IA2* bis *IA5* mit jeweils 10 v. – %, 11 v. – % und 12 v. – %, in einem Temperaturbereich von 20 °C bis 750 °C. Statistische Volumenelemente wurden nur aufgrund der Rechenzeit verwendet. Idealerweise sollten jedoch repräsentative Volumenelemente verwendet werden. Als mechanische Belastung dienten momentenfreie Zug- und Druckversuche. Alle Materialparameter der mikroskopischen Modelle stammen aus der Literatur.

Das Resultat der Studie zeigt bei den berechneten E-Moduli, Querkontraktionszahlen, Dehngrenzen und Wärmeleitfähigkeiten eine gute Übereinstimmung mit Literaturwerten. Die Sensitivität des makroskopischen Materialverhaltens, hinsichtlich der Graphitmorphologie, ist plausibel. Jedoch liegt keine quantitative Validierung der Ergebnisse vor, da keine aussagekräftigen experimentellen Ergebnisse existieren. Zukünftig könnte versucht werden, die Resultate quantitativ zu beurteilen, was die Durchfüh-

rung von entsprechenden Experimenten erfordert.

Die entwickelte Methodik bietet Potential zur Untersuchung anderer Werkstoffe, wie beispielsweise Gusseisen mit vermikularem Graphit.

Kapitel 8 präsentiert ein Mehrphasenfeldmodell für phasenabhängige Plastizität, unter der Annahme kleiner Deformationen, das auf der J_2 -Plastizitätstheorie mit linearer Werkstoffverfestigung basiert. Der Grund für die Entwicklung eines elastoplastischen Modells gliedert sich in diese Arbeit dadurch ein, dass die Rissentstehung und -ausbreitung in Verbundwerkstoffen, bestehend aus spröd-anisotropen Partikeln und einer duktilen Matrix, untersucht wurde und hierfür ein entsprechendes mechanisches Modell notwendig war. Die statische Impulsbilanz auf Kontaktunstetigkeiten und die Hadamard-Sprungbedingung dienten als Homogenisierungsansätze, um phaseninhärente Spannungen und Verzerrungen zu berechnen. Im Gegensatz zu Modellen, die interpolierte Materialparameter verwenden, ist das vorgestellte Modell in der Lage, verschiedene nicht lineare mechanische, konstitutive Gleichungen für jede Phase separat anzuwenden. Es wurde gezeigt, dass der vorgeschlagene Ansatz in denselben Ergebnissen resultiert wie entsprechende Probleme mit scharfem Phasenübergang, obwohl eine diffuse Grenzflächenparametrisierung verwendet wurde. Als Anwendungsbeispiel folgte eine Simulation der martensitischen Transformation, unter Berücksichtigung des elastoplastischen Materialverhaltens.

In weiterführenden Arbeiten könnte die Vererbung von plastischen Verzerrungen bei Phasenumwandlungen untersucht werden. Außerdem könnte das vorgestellte Schema mit anderen nicht linearen mechanischen, konstitutiven Modellen, wie z.B. der Kristallplastizität, kombiniert werden.

Im letzten Kapitel 9 wurde ein Phasenfeldrissmodell vorgestellt, das in der Lage ist, die Rissausbreitung in Verbundwerkstoff mit spröd-anisotropen und duktilen Bestandteilen vorherzusagen. Dies geschah in Anlehnung an Gusseisen mit Lamellengraphit, wobei sich das Matrixmaterial des Verbundwerkstoffs duktil verhält und die Inklusionen spröd-anisotrop. "In Anlehnung" deshalb, weil das neue Modell nicht auf der realen Längenskala der Mikrostruktur von Gusseisen mit Lamellengraphit, nämlich im Mikrometerbereich, angewendet werden kann. Als Erweiterung einer vorherigen Publikation [109] diente dabei die duktile Degradierungsfunktion nach Ambati et al. [3] dazu, den Übergang zwischen spröd-anisotropen und duktilen Phasen zu ermöglichen. Mit wenigen notwendigen Anpassungen fand der Homogenisierungsansatz 8.1.3.1 als mechanisches Modell Anwendung.

Die Einflüsse der Modellparameter wurden mittels eines initialen Risses in einem Gebiet mit planaren diffusen Phasenübergängen zwischen einer spröd-anisotropen und einer duktilen Festphase, sowie eines einzelnen, in eine perlitische Matrix eingebetteten, spröd-anisotropen Ellipsoids untersucht. Momentenfreie Zug- und Druckversuche wurden an einem realistischeren Anwendungsbeispiel durchgeführt, wobei das Simulationsgebiet ein idealisiertes Graugussgefüge darstellte. Es hat sich gezeigt, dass wichtige mechanische Eigenschaften von Grauguss, wie z.B. das bevorzugte Risswachstum entlang der Längsrichtung von Graphitlamellen und die Zug-Druck-Spannungsasymmetrie, durch das Modell abgebildet werden können.

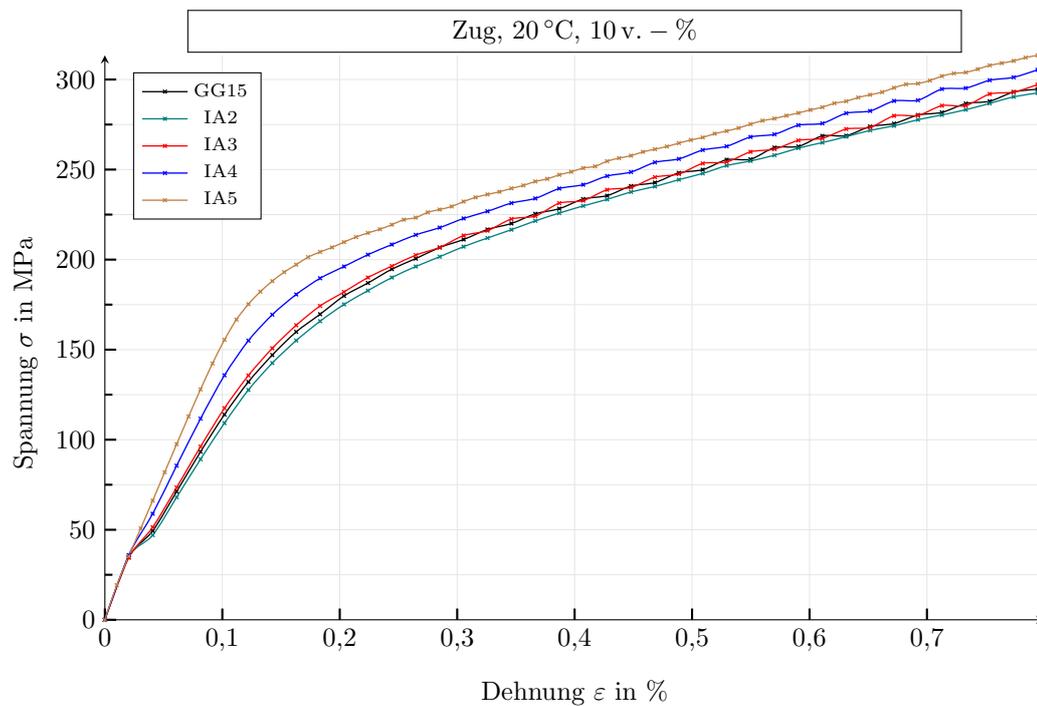
Das große Manko des Rissmodells ist seine Sensitivität hinsichtlich der diffusen Übergangsbreite zwischen Festphasen und Riss. Der Längenparameter zur Definition der Übergangsbreite wurde deshalb als Materialparameter betrachtet, was die Anwendbarkeit des Modells auf die makroskopische Längenskala einschränkt. Reale Graugussmikrostrukturen können daher nicht untersucht werden. Wu und Nguyen [146] haben einen

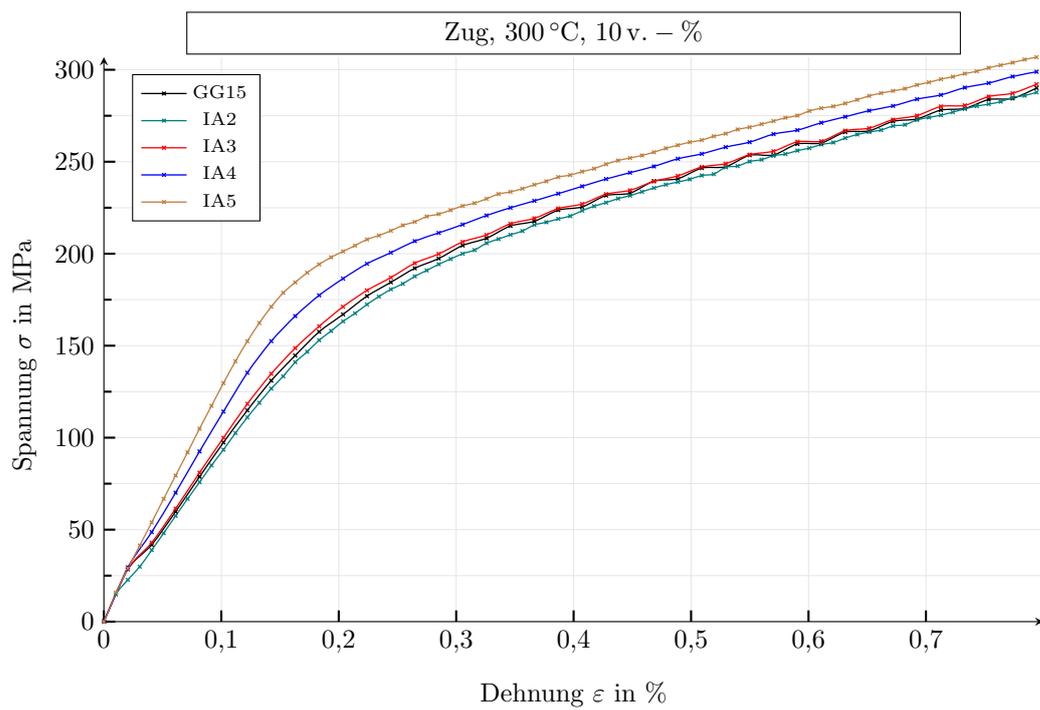
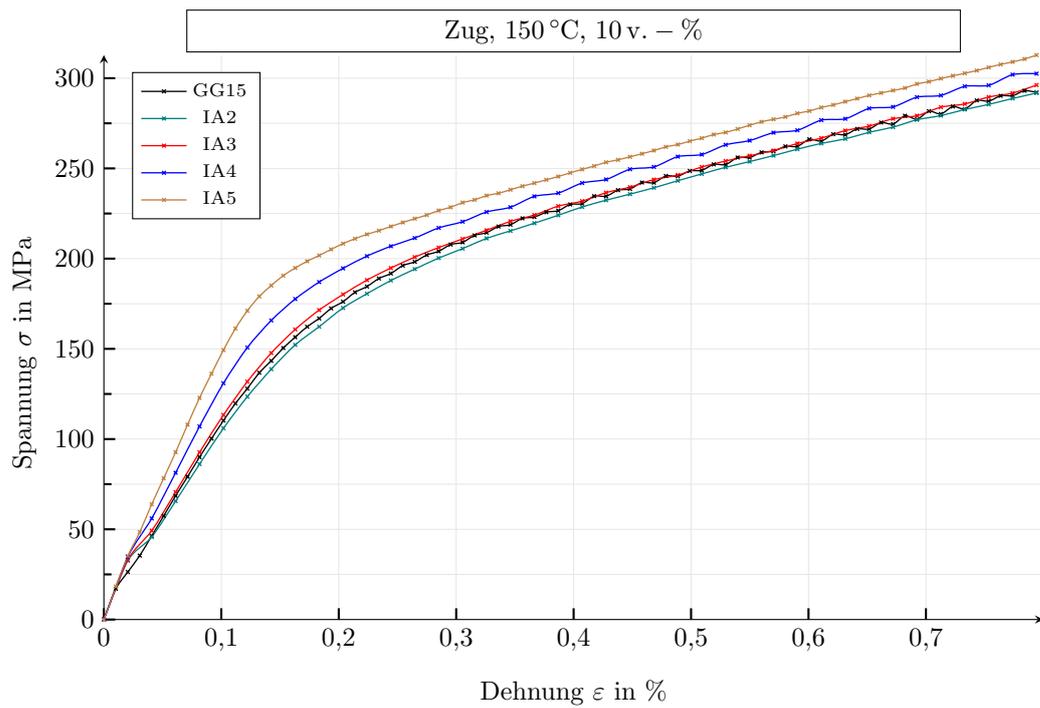
Ansatz für spröde Materialien vorgestellt, um diese Abhängigkeit zu eliminieren. Dabei wurde ein neues Potential eingeführt und die Degradierungsfunktion in Abhängigkeit zum Längenparameter gebracht. Ein analoges Vorgehen für die von der akkumulierten plastischen Dehnung abhängigen duktile Degradierungsfunktion ist womöglich umsetzbar, allerdings müsste dies dann ausgiebig argumentiert und analysiert werden.

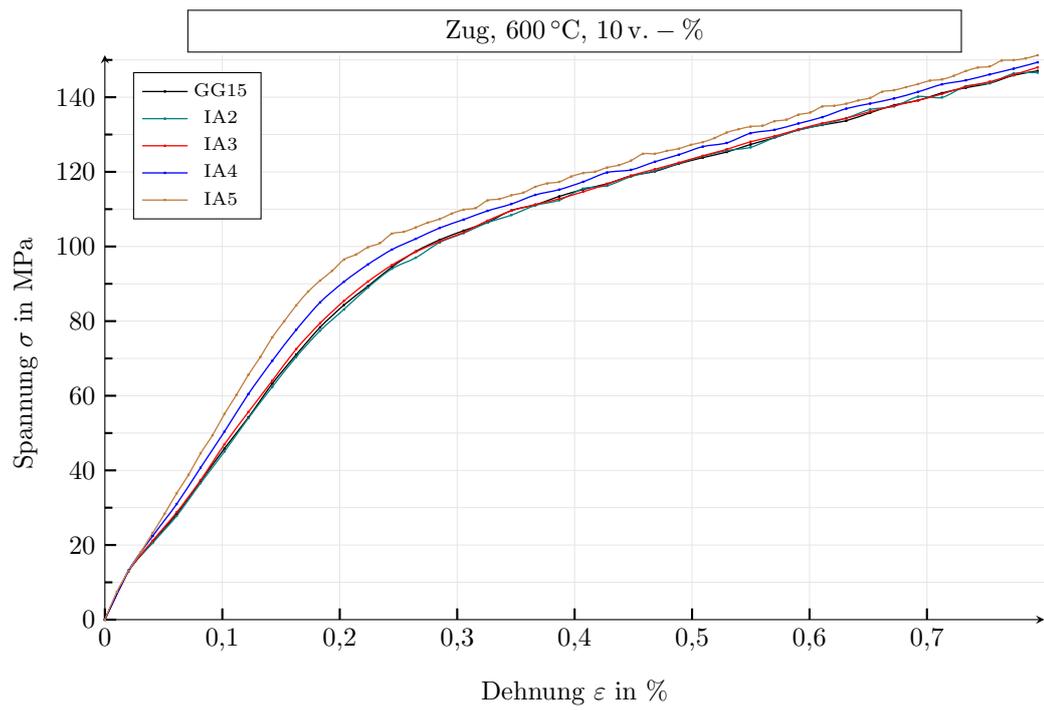
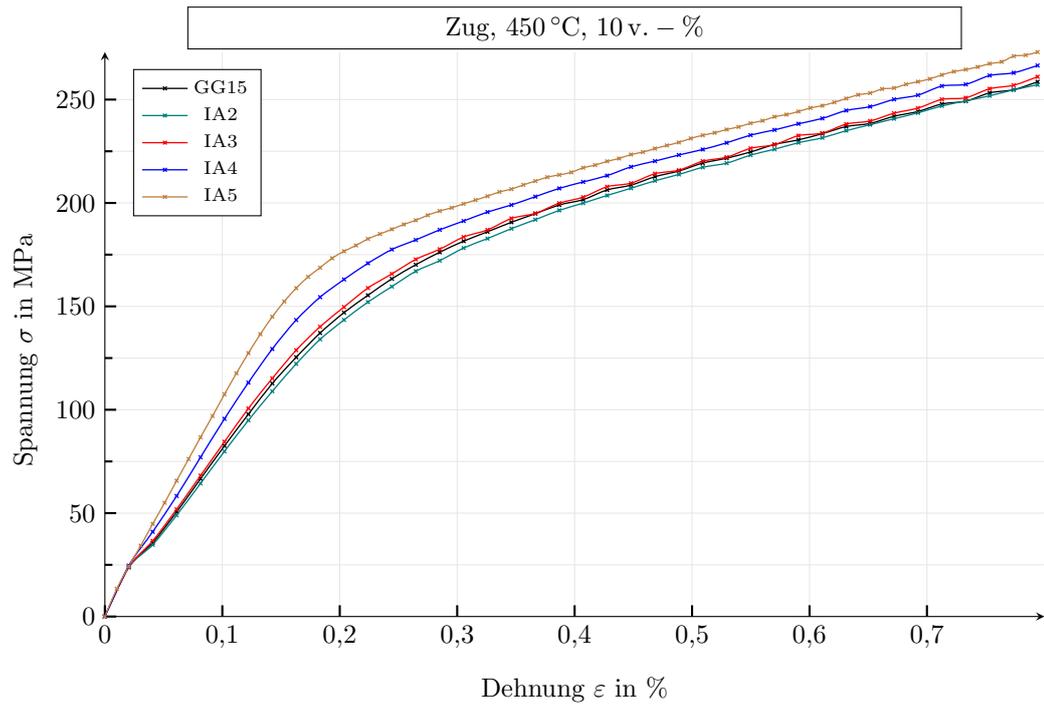
Falls die Unabhängigkeit der Simulationsergebnisse von der diffusen Übergangsbreite zwischen Festphasen und Riss bewerkstelligt werden kann, könnten zukünftig Rissbildungsprozesse in Graugusswerkstoffen unter realistischer thermo-mechanischer Belastung, z.B. anhand der Beanspruchung von Lkw-Bremsscheiben, infolge von Bremsvorgängen, untersucht werden. Des Weiteren wäre die Untersuchung der Rissbildung in Graugussstrukturen als Folge der martensitischen Transformation interessant.

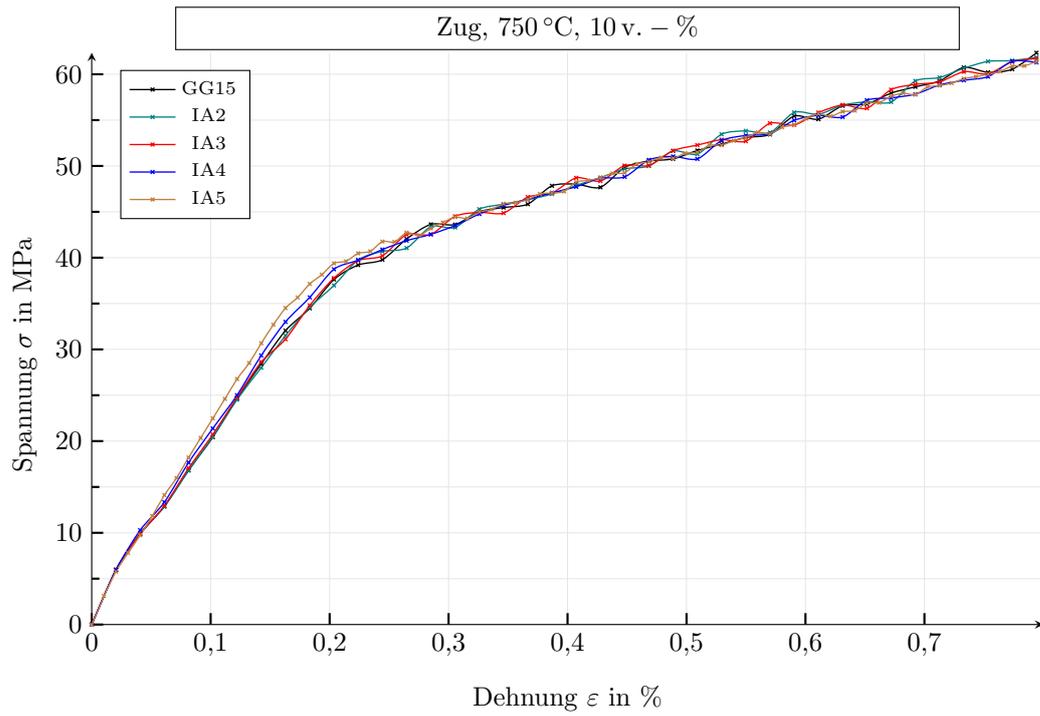
Anhang A - Thermo-mechanische Eigenschaften von Gusseisen mit Lamellengraphit - Spannungs-Dehnungs-Diagramme

A.1 Zugbelastung - 10 v.-%

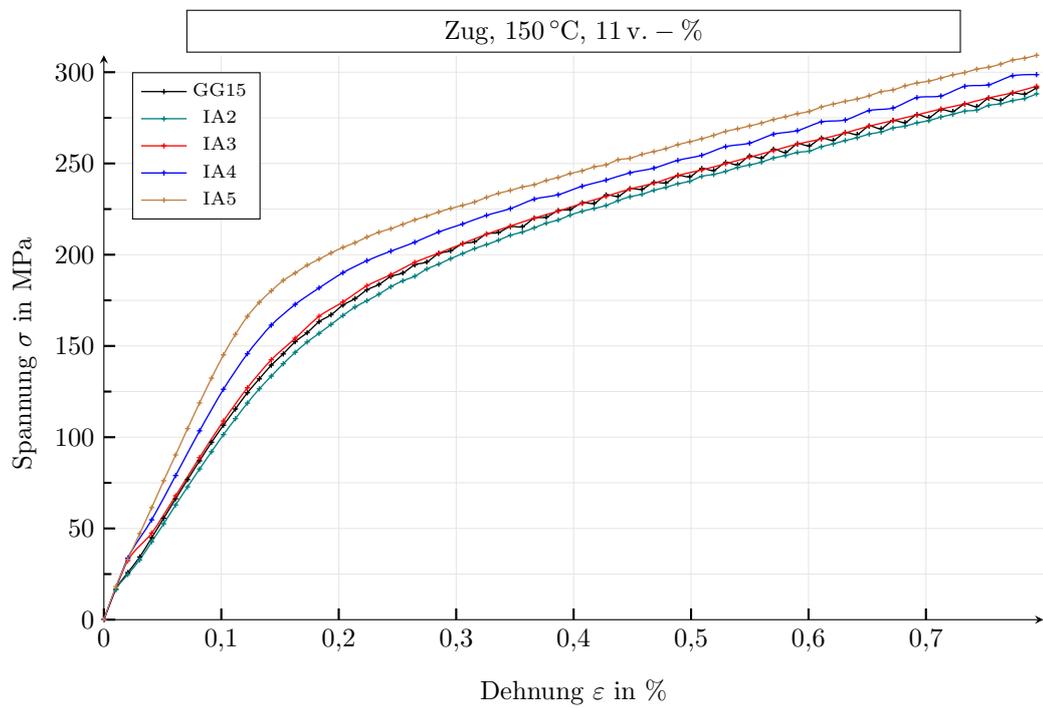
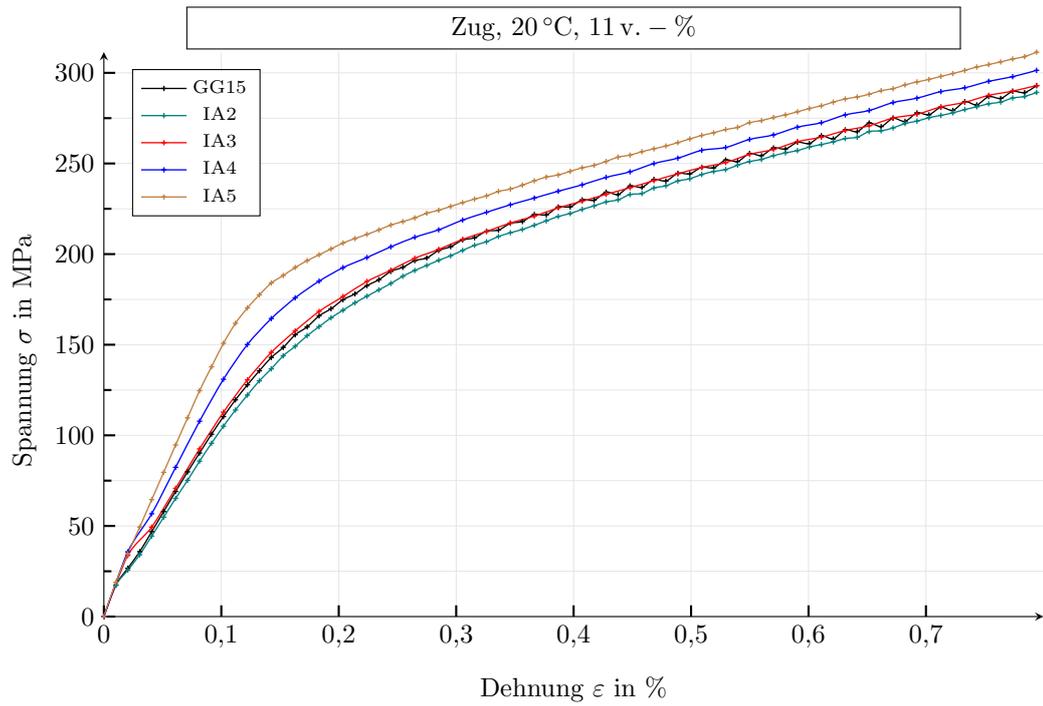


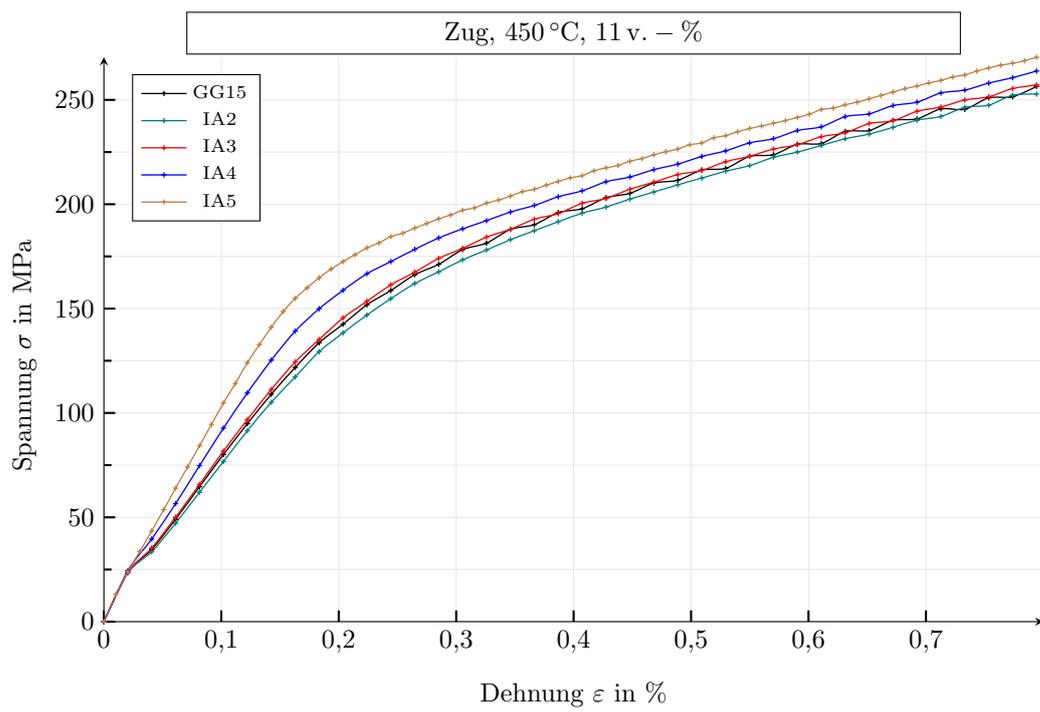
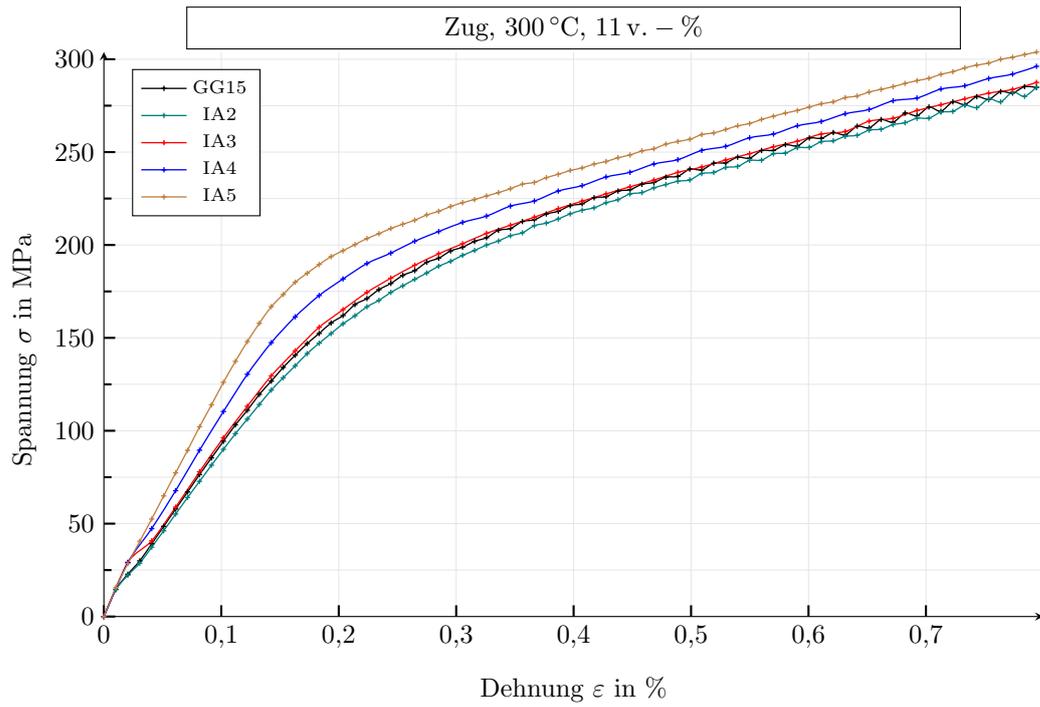


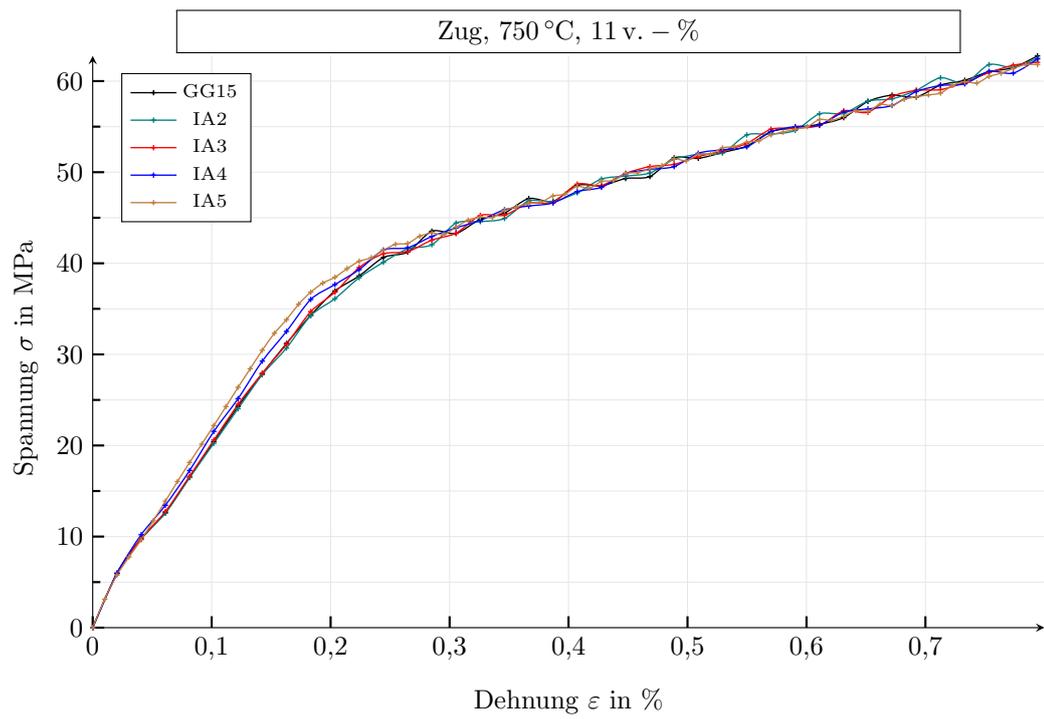
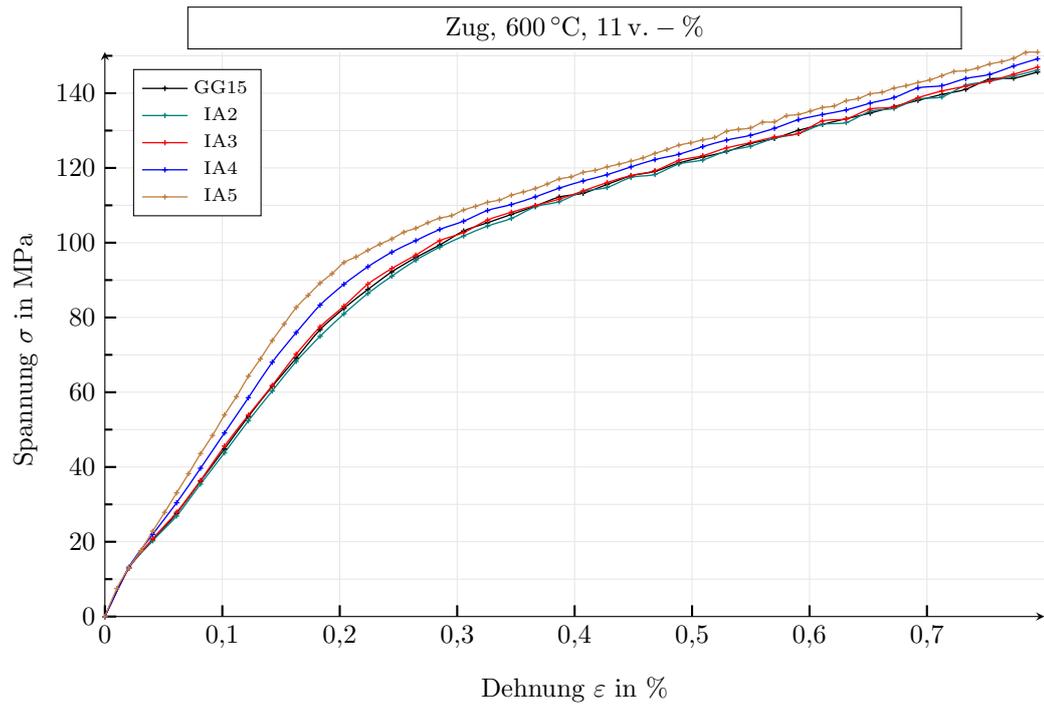




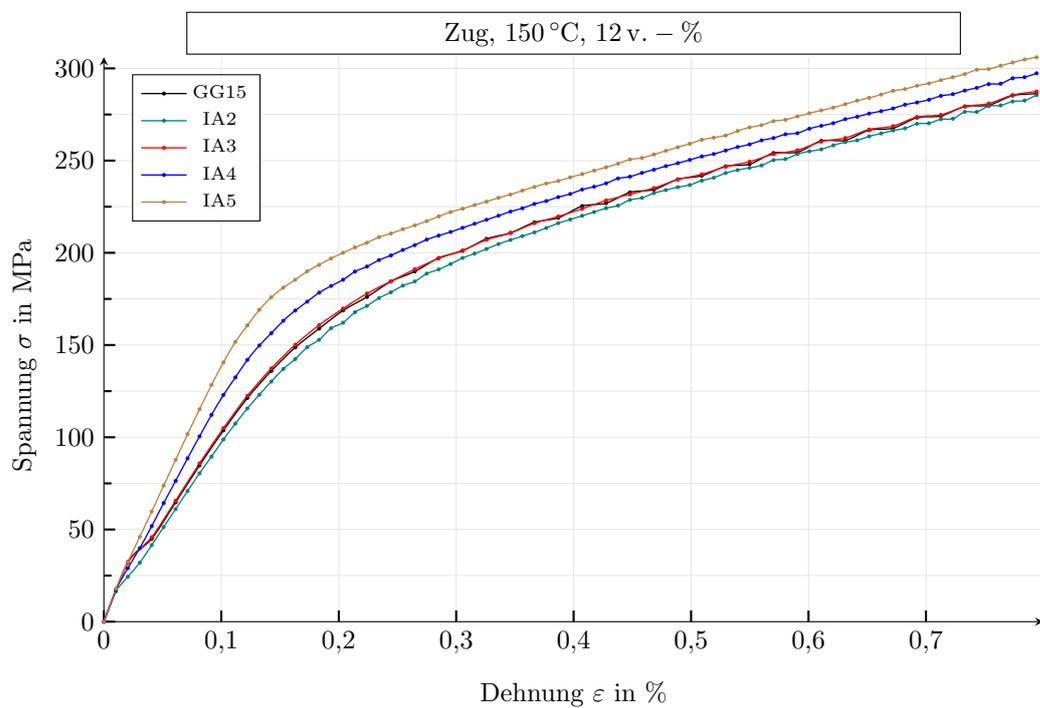
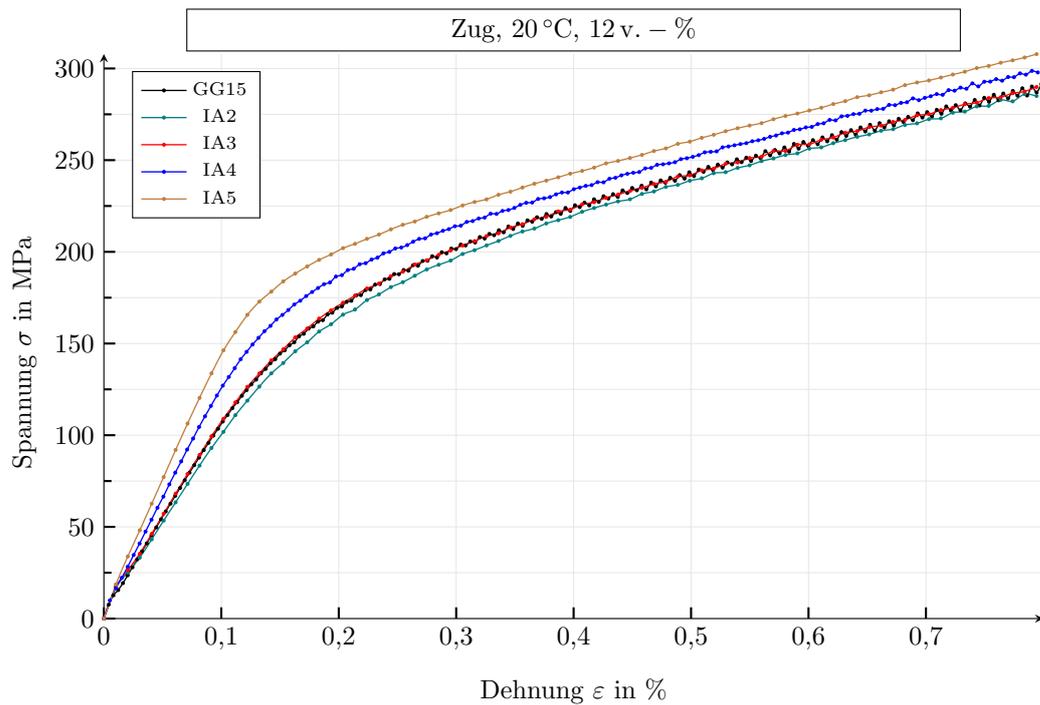
A.2 Zugbelastung - 11 v.-%

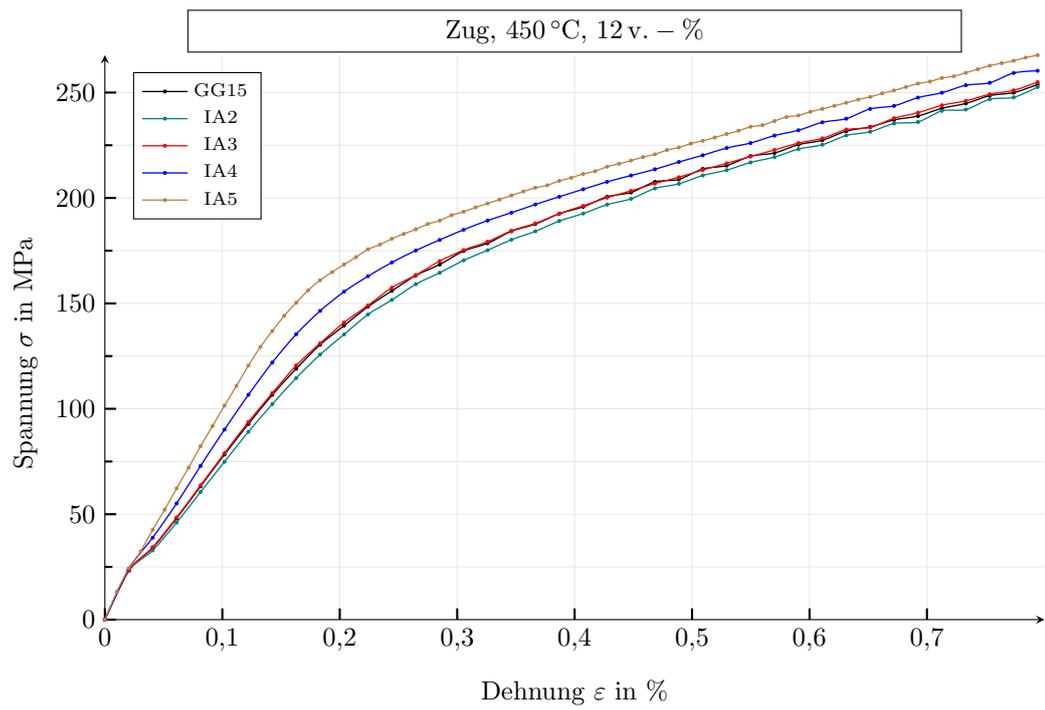
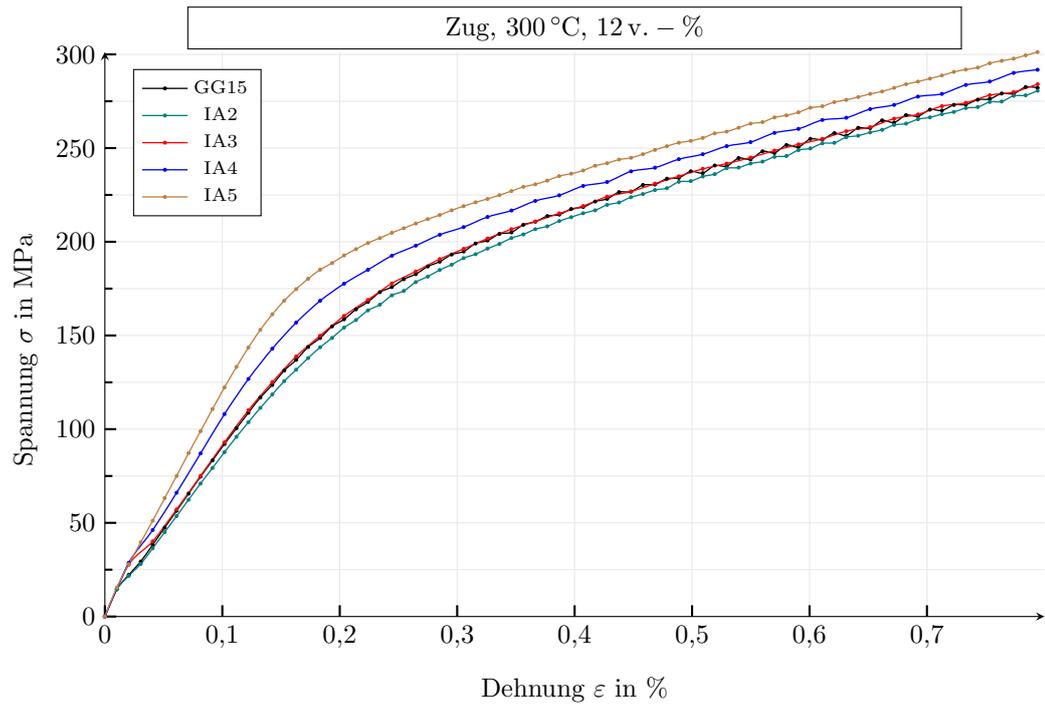


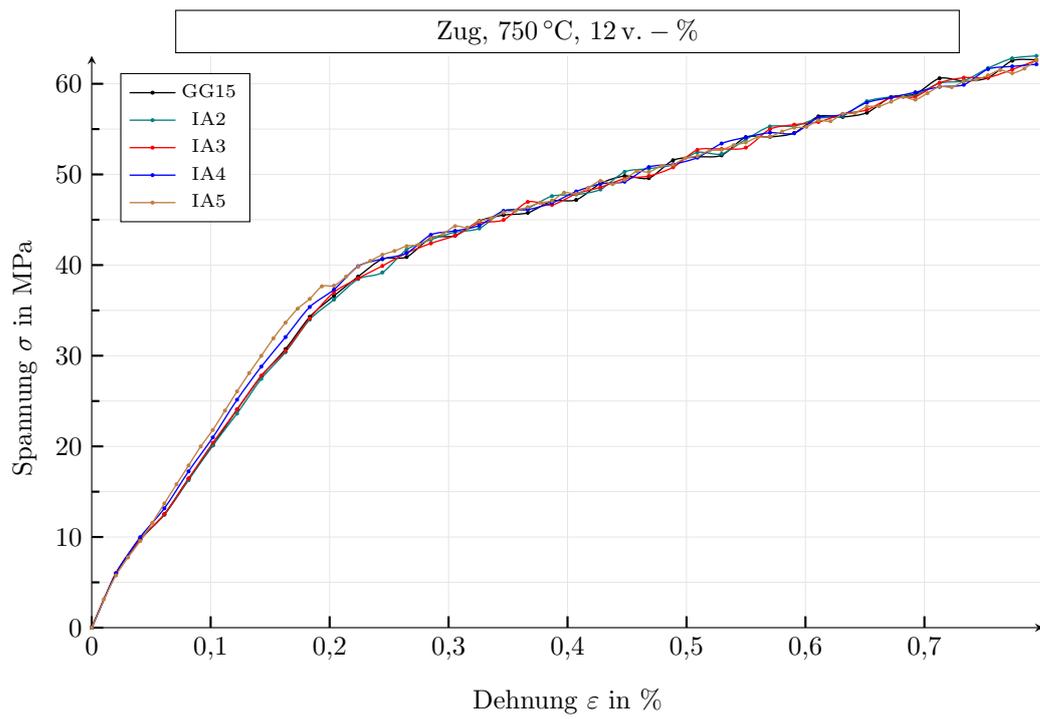
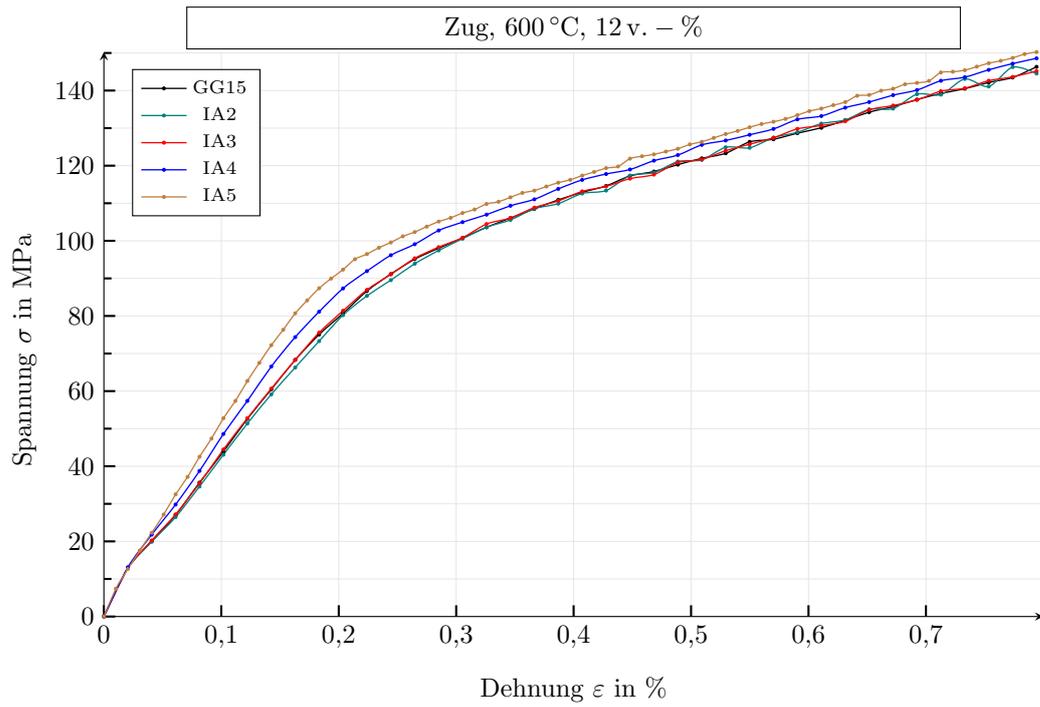




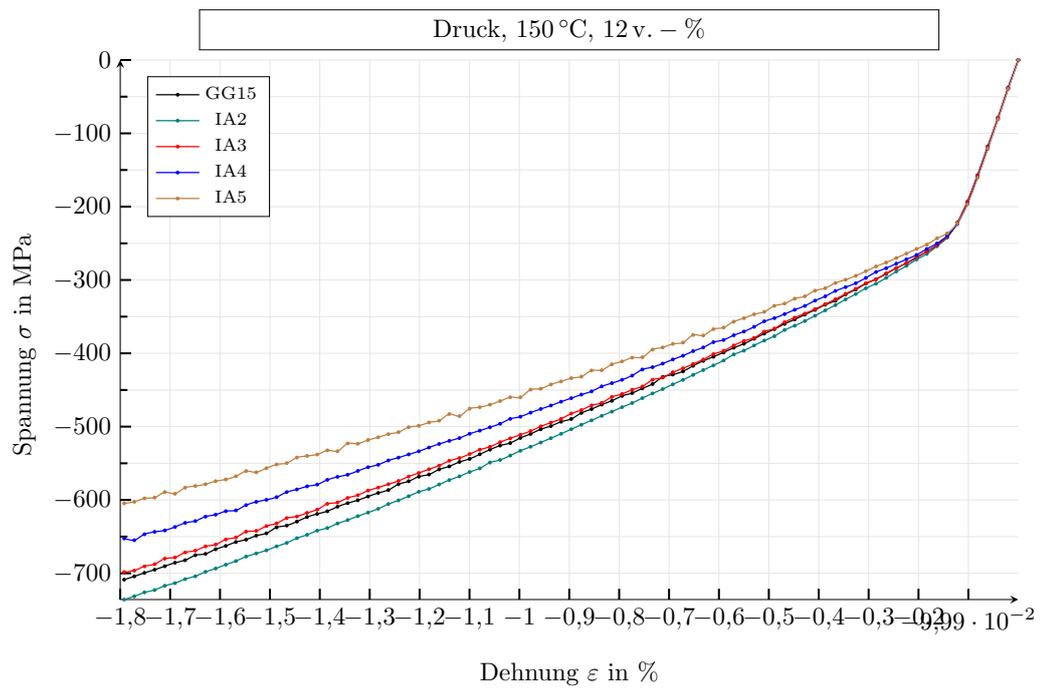
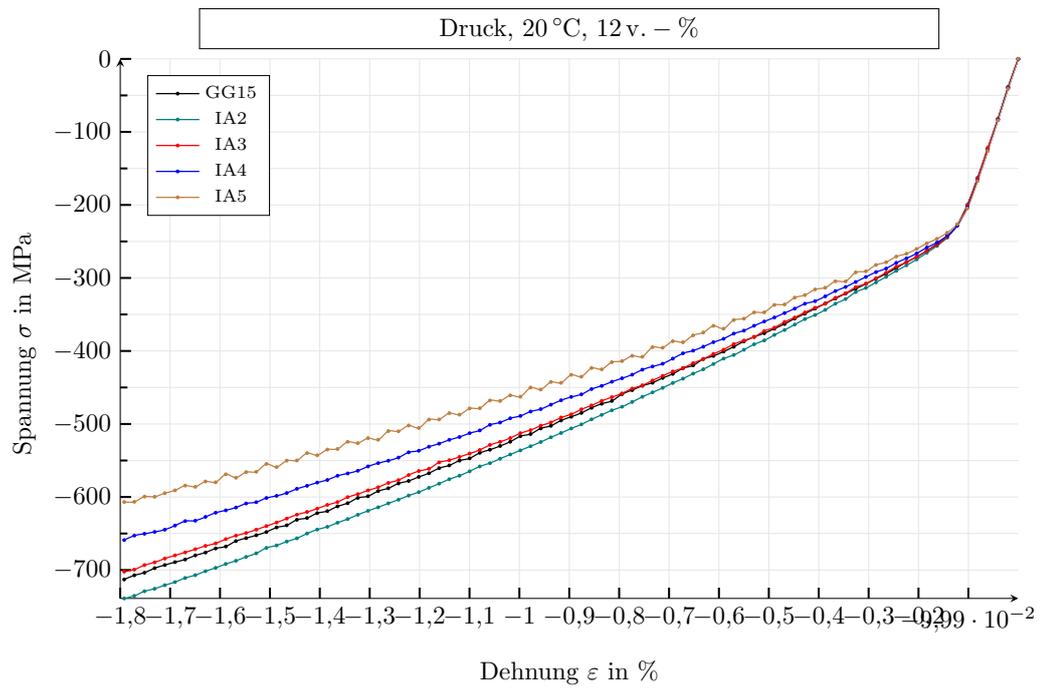
A.3 Zugbelastung - 12 v.-%

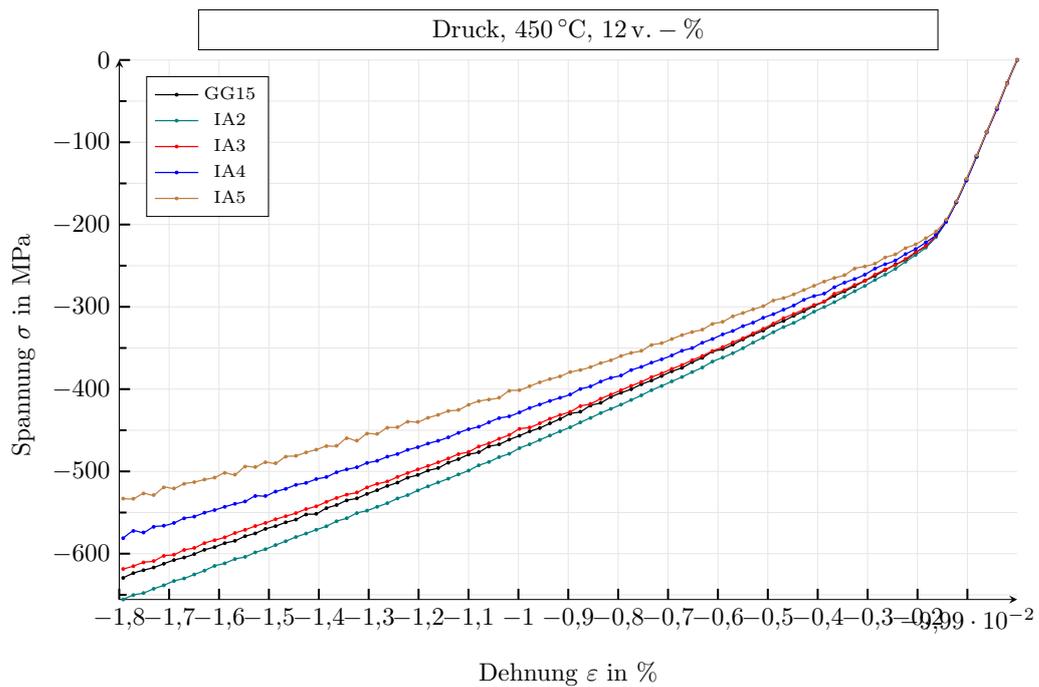
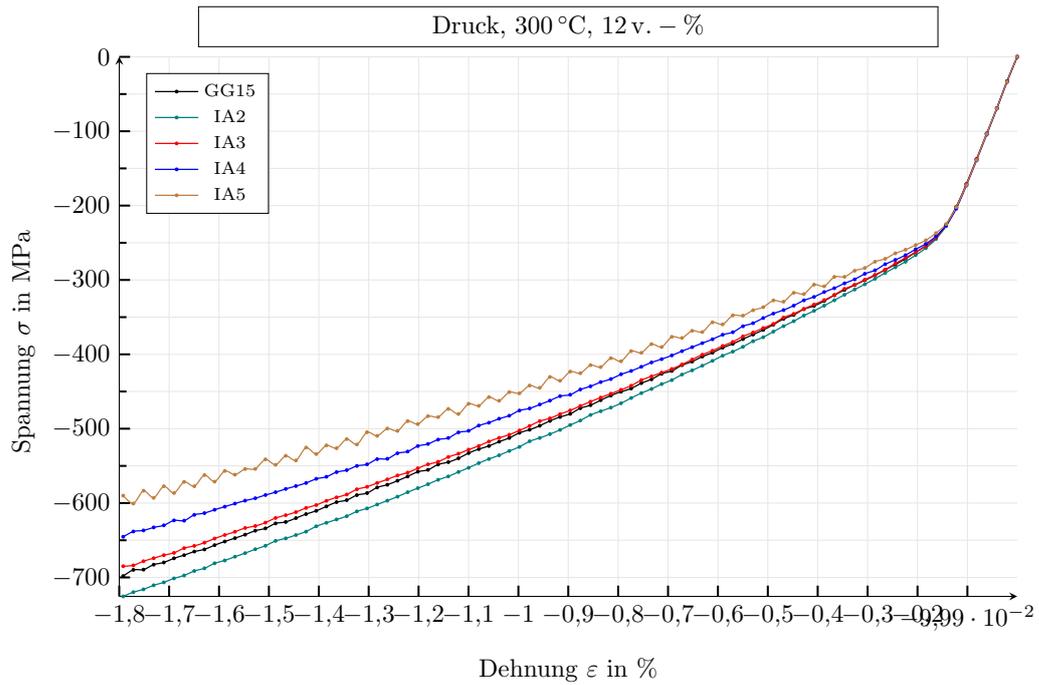


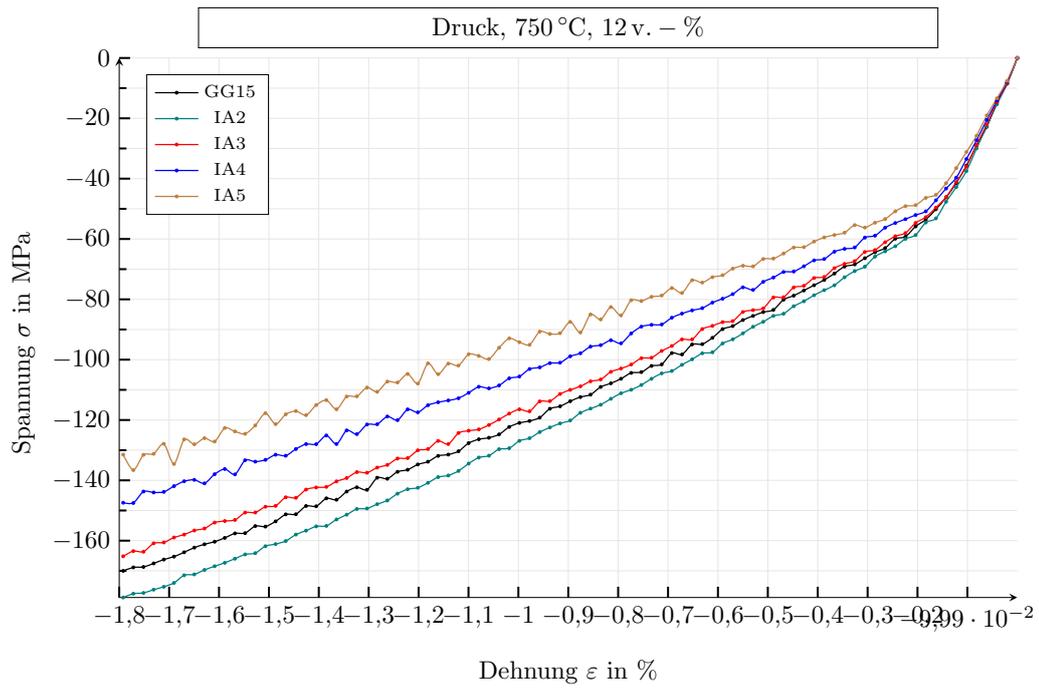
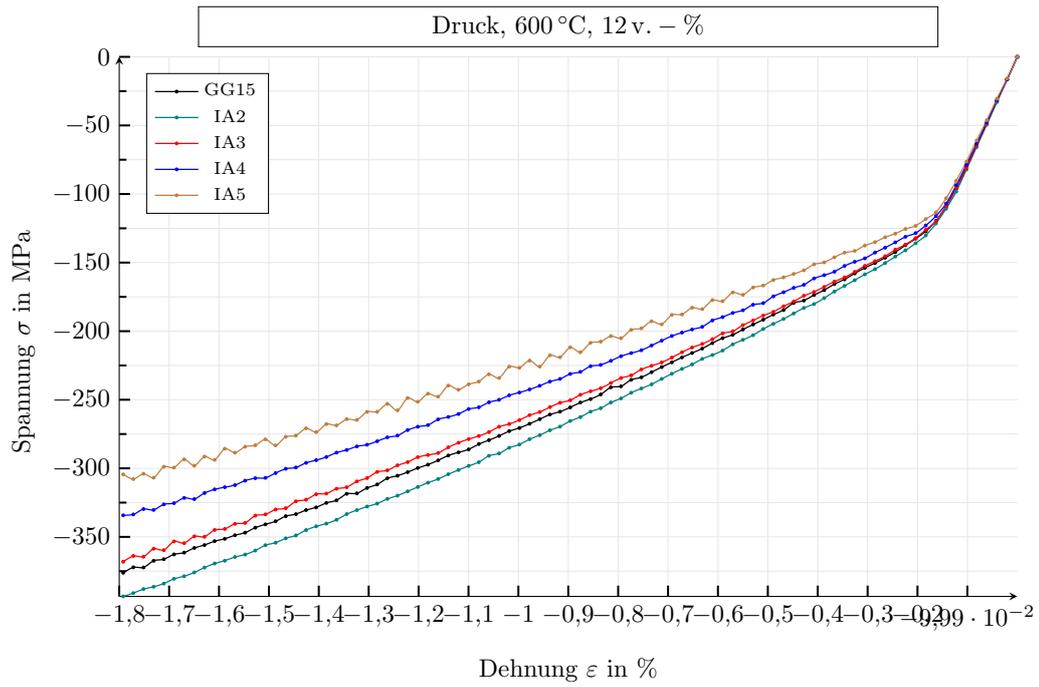




A.4 Druckbelastung - 12 v.-%







Anhang B - Herleitung der Gleichgewichtsbedingung der Phasenfeldevolutionsgleichung für Abschnitt 8.4.1

Im Gleichgewichtszustand der Phasenfelder wird deren zeitliche Änderung (8.7) zu Null,

$$\frac{\partial \phi^\alpha}{\partial t} = 0 = -\frac{1}{\epsilon N_{\text{lok}}} \sum_{\beta \neq \alpha}^{N_{\text{lok}}} M^{\alpha\beta} \left(\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \phi^\alpha} - \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \phi^\beta} \right). \quad (\text{B.1})$$

Der Term vor der Summe und die Mobilität, $M^{\alpha\beta}$, sind stets ungleich Null, daher tritt der Gleichgewichtszustand nur ein, wenn der in Klammern stehende Beitrag der Summe verschwindet. Weiterführend wird zur Vereinfachung nur der elastische Beitrag des Energiefunktionals (8.3), unter Vernachlässigung der mechanischen Mikrospannungen, betrachtet. Die anderen Beiträge wurden entweder bereits in anderen Veröffentlichungen ausführlich behandelt oder sind trivial. Mit Gl.(8.21) Variationsableitung folgt dann:

$$0 = \frac{\partial f_e^{\text{eff}}}{\partial \phi^\alpha} - \frac{\partial f_e^{\text{eff}}}{\partial \phi^\beta} \quad (\text{B.2})$$

$$= \left(f_e^\alpha \frac{\partial h^\alpha}{\partial \phi^\alpha} + h^\alpha \frac{\partial h^\beta}{\partial \phi^\alpha} \boldsymbol{\sigma}^\alpha \mathbf{n}^{\alpha\beta} \cdot [\mathbf{H}]^{\alpha\beta} \mathbf{n}^{\alpha\beta} + f_e^\beta \frac{\partial h^\beta}{\partial \phi^\alpha} + h^\beta \frac{\partial h^\alpha}{\partial \phi^\alpha} \boldsymbol{\sigma}^\beta \mathbf{n}^{\beta\alpha} \cdot [\mathbf{H}]^{\beta\alpha} \mathbf{n}^{\beta\alpha} \right) \quad (\text{B.3})$$

$$- \left(f_e^\alpha \frac{\partial h^\alpha}{\partial \phi^\beta} + h^\alpha \frac{\partial h^\beta}{\partial \phi^\beta} \boldsymbol{\sigma}^\alpha \mathbf{n}^{\alpha\beta} \cdot [\mathbf{H}]^{\alpha\beta} \mathbf{n}^{\alpha\beta} + f_e^\beta \frac{\partial h^\beta}{\partial \phi^\beta} + h^\beta \frac{\partial h^\alpha}{\partial \phi^\beta} \boldsymbol{\sigma}^\beta \mathbf{n}^{\beta\alpha} \cdot [\mathbf{H}]^{\beta\alpha} \mathbf{n}^{\beta\alpha} \right), \quad (\text{B.4})$$

Setzt man die geltenden Zusammenhänge eines Zweiphasensystems, $\frac{\partial h^\alpha}{\partial \phi^\alpha} = \frac{\partial h^\beta}{\partial \phi^\beta} = -\frac{\partial h^\alpha}{\partial \phi^\beta} = -\frac{\partial h^\beta}{\partial \phi^\alpha}$ und $\mathbf{n}^{\alpha\beta} = -\mathbf{n}^{\beta\alpha}$, ein, resultiert daraus die vereinfachte Darstellung:

$$0 = \left(f_e^\alpha \frac{\partial h^\alpha}{\partial \phi^\alpha} + h^\alpha \left(-\frac{\partial h^\alpha}{\partial \phi^\alpha} \right) \boldsymbol{\sigma}^\alpha \mathbf{n}^{\alpha\beta} \cdot [\mathbf{H}]^{\alpha\beta} \mathbf{n}^{\alpha\beta} + f_e^\beta \left(-\frac{\partial h^\alpha}{\partial \phi^\alpha} \right) + h^\beta \frac{\partial h^\alpha}{\partial \phi^\alpha} \boldsymbol{\sigma}^\beta (-\mathbf{n}^{\alpha\beta}) \cdot [\mathbf{H}]^{\beta\alpha} (-\mathbf{n}^{\alpha\beta}) \right) \quad (\text{B.5})$$

$$- \left(f_e^\alpha \left(-\frac{\partial h^\alpha}{\partial \phi^\alpha} \right) + h^\alpha \frac{\partial h^\alpha}{\partial \phi^\alpha} \boldsymbol{\sigma}^\alpha \mathbf{n}^{\alpha\beta} \cdot [\mathbf{H}]^{\alpha\beta} \mathbf{n}^{\alpha\beta} + f_e^\beta \frac{\partial h^\alpha}{\partial \phi^\alpha} + h^\beta \left(-\frac{\partial h^\alpha}{\partial \phi^\alpha} \right) \boldsymbol{\sigma}^\beta (-\mathbf{n}^{\alpha\beta}) \cdot [\mathbf{H}]^{\beta\alpha} (-\mathbf{n}^{\alpha\beta}) \right) \quad (\text{B.6})$$

$$= 2 \frac{\partial h^\alpha}{\partial \phi^\alpha} \left(\underbrace{(f_e^\alpha - f_e^\beta) + (h^\beta \boldsymbol{\sigma}^\beta \mathbf{n}^{\alpha\beta} \cdot [\mathbf{H}]^{\beta\alpha} \mathbf{n}^{\alpha\beta} - h^\alpha \boldsymbol{\sigma}^\alpha \mathbf{n}^{\alpha\beta} \cdot [\mathbf{H}]^{\alpha\beta} \mathbf{n}^{\alpha\beta})}_{=0} \right). \quad (\text{B.7})$$

Für das Pseudo-1D-Simulationsgebiet gilt unter momentenfreier Zugbelastung aus mechanischer Sicht, dass ausschließlich die Diagonalkomponenten des Spannungstensors und des Verschiebungsgradienten ungleich Null sind, $\sigma_{ij} = H_{ij} = 0 \quad \forall i \neq j$, dies führt zu $[\mathbf{H}]^{\alpha\beta} = [\mathbf{H}]^{\beta\alpha}$ und somit zu Gl. (8.36). Da ein Hauptdehnungszustand vorliegt ist

zudem $\mathbf{H} = \boldsymbol{\varepsilon}$ wahr. Außerdem trifft $\sigma_{yy}^\alpha = \sigma_{zz}^\alpha$ und $\sigma_{yy}^\beta = \sigma_{zz}^\beta$ zu. Durch die statische Impulsbilanz auf Kontaktunstetigkeiten, $[[\boldsymbol{\sigma}]]\mathbf{n} = 0$, und dem Übergangsbereichsnormalektor, $\mathbf{n}^{\alpha\beta} = (1, 0, 0)^\top$, folgt $\sigma_{xx}^\alpha = \sigma_{xx}^\beta$ woraus sich, mit $E^\alpha = E^\beta$, $\varepsilon_{e,xx}^\alpha = \varepsilon_{e,xx}^\beta$ ergibt. Mit der additiven Zerlegung der Dehnungen, $\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}_e + \boldsymbol{\varepsilon}_p + \boldsymbol{\varepsilon}_{\text{eig}}$, führt somit die vorherige Gleichung für die beiden Plastizitätsmodelle zu Gl. (8.37) und Gl. (8.38). Man beachte, dass nur die Phase α eine Eigenverzerrung besitzt und nur Phase β aufgrund $\sigma_y^\alpha < \sigma_y^\beta$ und $H^\alpha = H^\beta = 0$ plastische Verzerrungen im Falle des Homogenisierungsansatzes erfährt.

Literaturverzeichnis

- [1] R. Alessi, M. Ambati, T. Gerasimov, S. Vidoli, und L. De Lorenzis. *Comparison of phase-field models of fracture coupled with plasticity*, Seiten 1–21. Springer International Publishing, Cham, Schweiz, 2018. ISBN 978-3-319-60885-3.
- [2] S. Allain und O. Bouaziz. Microstructure based modeling for the mechanical behavior of ferrite-pearlite steels suitable to capture isotropic and kinematic hardening. *Materials Science and Engineering: A*, 496(1-2):329–336, 2008.
- [3] M. Ambati, T. Gerasimov, und L. De Lorenzis. Phase-field modeling of ductile fracture. *Computational Mechanics*, 55(5):1017–1040, 2015.
- [4] M. Ambati, T. Gerasimov, und L. De Lorenzis. A review on phase-field models of brittle fracture and a new fast hybrid formulation. *Computational Mechanics*, 55(2):383–405, 2015.
- [5] M. Ambati, R. Kruse, und L. De Lorenzis. A phase-field model for ductile fracture at finite strains and its experimental verification. *Computational Mechanics*, 57(1):149–167, 2016.
- [6] L. Ambrosio und V. M. Tortorelli. Approximation of functional depending on jumps by elliptic functional via γ -convergence. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 43(8):999–1036, 1990.
- [7] K. Ammar, B. Appolaire, G. Cailletaud, und S. Forest. Combining phase field approach and homogenization methods for modelling phase transformation in elastoplastic media. *European Journal of Computational Mechanics/Revue Européenne de Mécanique Numérique*, 18(5-6):485–523, 2009.
- [8] K. Ammar, B. Appolaire, S. Forest, M. Cottura, Y. L. Bouar, und A. Finel. Modelling inheritance of plastic deformation during migration of phase boundaries using a phase field method. *Meccanica*, 49(11):2699–2717, 2014.
- [9] ASTM. Standard test method for young’s modulus, tangent modulus, and chord modulus. Standard, ASTM International, West Conshohocken, Pennsylvania, Vereinigte Staaten, 2004.
- [10] A. August, J. Etrich, M. Rölle, S. Schmid, M. Berghoff, M. Selzer, und B. Nestler. Prediction of heat conduction in open-cell foams via the diffuse interface representation of the phase-field method. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 84:800–808, 2015.
- [11] C. Bartels, R. Gerhards, H. Hanselka, K. Herfurth, H. Kaufmann, W. Kleinkröger, M. Lampic, H. Löblich, W. Menk, G. Pusch, T. Schmidt, K.-H. Schütt, P. Tölke, und E. P. Warnke. Gusseisen mit Kugelgraphit. https://www.kug.bdguss.de/fileadmin/content/Publikationen-Normen-Richtlinien/buecher/Gusseisen_mit_Kugelgraphit_klein.pdf. letztes Abrufdatum 16.02.2021.

- [12] C. Beckermann, H.-J. Diepers, I. Steinbach, A. Karma, und X. Tong. Modeling melt convection in phase-field simulations of solidification. *Journal of Computational Physics*, 154(2):468–496, 1999.
- [13] G. Bertolino und J. E. Perez-Ipina. Geometrical effects on lamellar grey cast iron fracture toughness. *Journal of materials processing technology*, 179(1-3):202–206, 2006.
- [14] A. Bertram. *Elasticity and plasticity of large deformations*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, Heidelberg, Deutschland, 2012. ISBN 978-3-642-24615-9.
- [15] J. Besson. Continuum models of ductile fracture: A review. *International Journal of Damage Mechanics*, 19(1):3–52, 2010.
- [16] O. L. Blakslee, D. G. Proctor, E. J. Seldin, G. B. Spence, und T. Weng. Elastic constants of compression-annealed pyrolytic graphite. *Journal of applied physics*, 41(8):3373–3382, 1970.
- [17] J. Bleyer und R. Alessi. Phase-field modeling of anisotropic brittle fracture including several damage mechanisms. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 336:213–236, 2018.
- [18] P. Böckh und T. Wetzel. *Wärmeübertragung: Grundlagen und Praxis*. Springer Vieweg, Wiesbaden, Deutschland, 2018. ISBN 978-3-662-55479-1.
- [19] W. J. Boettinger, J. A. Warren, C. Beckermann, und A. Karma. Phase-field simulation of solidification. *Annual review of materials research*, 32(1):163–194, 2002.
- [20] N. Bonora und A. Ruggiero. Micromechanical modeling of ductile cast iron incorporating damage. Part I: Ferritic ductile cast iron. *International journal of solids and structures*, 42(5-6):1401–1424, 2005.
- [21] A. Bosak, M. Krisch, M. Mohr, J. Maultzsch, und C. Thomsen. Elasticity of single-crystalline graphite: Inelastic x-ray scattering study. *Physical Review B*, 75(15):153408, 2007.
- [22] B. Bourdin, G. A. Francfort, und J.-J. Marigo. Numerical experiments in revisited brittle fracture. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 48(4):797–826, 2000.
- [23] H. E. Boyer. *Atlas of stress-strain Curves*. ASM International, Novelt, Ohio, Vereinigte Staaten, 1987. ISBN 978-0-87170-739-0.
- [24] W. Brocks, A. Cornec, und I. Scheider. Computational aspects of nonlinear fracture mechanics. *GKSS Forschungszentrum Geesthacht GmbH – Publications*, 2003.
- [25] A. T. D. Butland und R. J. Maddison. The specific heat of graphite: An evaluation of measurements. *Journal of Nuclear Materials*, 49(1):45–56, 1973.
- [26] J. W. Cahn und S. M. Allen. A microscopic theory for domain wall motion and its experimental verification in Fe-Al alloy domain growth kinetics. *Le Journal de Physique Colloques*, 38(C7):C7–51, 1977.

- [27] N. Chawla, V. V. Ganesh, und B. Wunsch. Three-dimensional (3D) microstructure visualization and finite element modeling of the mechanical behavior of SiC particle reinforced aluminum composites. *Scripta materialia*, 51(2):161–165, 2004.
- [28] L.-Q. Chen. Phase-field models for microstructure evolution. *Annual review of materials research*, 32(1):113–140, 2002.
- [29] L.-Q. Chen und A. G. Khachaturyan. Computer simulation of structural transformations during precipitation of an ordered intermetallic phase. *Acta metallurgica et materialia*, 39(11):2533–2551, 1991.
- [30] D. D. L. Chung. Review graphite. *Journal of materials science*, 37(8):1475–1489, 2002.
- [31] L. Collini, G. Nicoletto, und R. Konečná. Microstructure and mechanical properties of pearlitic gray cast iron. *Materials Science and Engineering: A*, 488(1-2):529–539, 2008.
- [32] G. Cooke. An introduction to the mechanical properties of structural steel at elevated temperatures. *Fire safety journal*, 13(1):45–54, 1988.
- [33] Dassault Systemes. Abaqus, 2018. URL <https://www.3ds.com/products-services/simulia/products/abaqus/>. letztes Abrufdatum 16.02.2021.
- [34] J. R. Davis et al. *ASM specialty handbook: cast irons*. ASM International, Novelty, Ohio, Vereinigte Staaten, 1996. ISBN 978-0-87170-564-8.
- [35] V. de Rancourt, K. Ammar, B. Appolaire, und S. Forest. Homogenization of viscoplastic constitutive laws within a phase field approach. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 88:291–319, 2016.
- [36] E. A. de Souza Neto, D. Peric, und D. R. J. Owen. *Computational methods for plasticity: Theory and applications*. Wiley & Sons Ltd, Hoboken, New Jersey, Vereinigte Staaten, 2008. ISBN 978-0-470-69452-7.
- [37] R. Deike, A. Engels, F. Hauptvogel, P. Henke, K. Röhrig, W. Siefert, H. Werning, und D. Wolters. Gusseisen mit Lamellengraphit. https://www.kug.bdguss.de/fileadmin/content/Publikationen-Normen-Richtlinien/Gusseisen_mit_Lamellengraphit_klein.pdf. letztes Abrufdatum 16.02.2021.
- [38] DIN 1691:1964-08. Gußeisen mit Lamellengraphit (Grauguß). Beuth, Berlin, Deutschland.
- [39] DIN EN ISO 6892-1:2016. Metallische Werkstoffe-Zugversuch - Teil 1: Prüfverfahren bei Raumtemperatur. Beuth, Berlin, Deutschland.
- [40] DIN EN ISO 945-1:2010-09. Mikrostruktur von Gusseisen - Teil 1: Graphitklassifizierung durch visuelle Auswertung. Beuth, Berlin, Deutschland.
- [41] F. P. Duda, A. Ciarbonetti, P. J. Sánchez, und A. E. Huespe. A phase-field/gradient damage model for brittle fracture in elastic-plastic solids. *International Journal of Plasticity*, 65:269–296, 2015.

- [42] M. G. G. V. Elices, G. V. Guinea, J. Gomez, und J. Planas. The cohesive zone model: Advantages, limitations and challenges. *Engineering fracture mechanics*, 69(2):137–163, 2002.
- [43] EC Eurocode. Design of steel structures: Part 1.2, general rules-structural fire design. *Brussels: European Committee for Standardization. DD ENV*, 1(2), 1993.
- [44] L.-Y. Fang, K. Metzloff, R. Voigt, und C. Loper. Der Elastizitätsmodul von graphitischen Gusseisen. *Konstruieren und Gießen*, 23:8–13, 1998.
- [45] U. Fischer, R. Gomeringer, M. Heinzler, R. Kilgus, F. Näher, S. Österle, H. Pätzold, und A. Stephan. *Tabellenbuch Metall: mit Formelsammlung*. Verlag Europa-Lehrmittel, Haan, Deutschland, 2011. ISBN 978-3-8085-1725-3.
- [46] S. J. Fishlock, David Grech, J. W. McBride, H. M. H. Chong, und S. H. Pu. Mechanical characterisation of nanocrystalline graphite using micromechanical structures. *Microelectronic Engineering*, 159:184–189, 2016.
- [47] G. A. Francfort und J.-J. Marigo. Revisiting brittle fracture as an energy minimization problem. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 46(8):1319–1342, 1998.
- [48] A. Gaubert, Y. Le Bouar, und A. Finel. Coupling phase field and viscoplasticity to study rafting in Ni-based superalloys. *Philosophical Magazine*, 90(1-4):375–404, 2010.
- [49] giessereilexikon.com. Gießereilexikon. <https://www.giessereilexikon.com/giesserei-lexikon/Encyclopedia/show/gusseisen-187/?cHash=ee1ecd2808646a935f826e84dd2b0ee0>. letztes Abrufdatum 16.02.2021.
- [50] A. A. Griffith. VI. the phenomena of rupture and flow in solids. *Philosophical transactions of the royal society of london. Series A, containing papers of a mathematical or physical character*, 221(582-593):163–198, 1921.
- [51] D. Gross und T. Seelig. *Bruchmechanik: mit einer Einführung in die Mikromechanik*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, Heidelberg, Deutschland, 2016. ISBN 978-3-642-10195-3.
- [52] X. H. Guo, S.-Q. Shi, und X. Q. Ma. Elastoplastic phase field model for microstructure evolution. *Applied Physics Letters*, 87(22):221910, 2005.
- [53] A. L. Gurson. Continuum theory of ductile rupture by void nucleation and growth: Part I - yield criteria and flow rules for porous ductile media. *Journal of engineering materials and technology*, 99(1):2–15, 1977.
- [54] L. Haenny und G. Zambelli. Strain mechanisms in grey cast iron. *Engineering Fracture Mechanics*, 18(2):377–387, 1983.
- [55] A. Hatton, M. Engstler, P. Leibenguth, und F. Mücklich. Characterization of graphite crystal structure and growth mechanisms using FIB and 3D image analysis. *Advanced Engineering Materials*, 13(3):136–144, 2011.
- [56] P. Haupt. *Continuum mechanics and theory of materials*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, Heidelberg, Deutschland, 2000. ISBN 978-3-662-04775-0.

- [57] R. L. Hecht, R. B. Dinwiddie, und H. Wang. The effect of graphite flake morphology on the thermal diffusivity of gray cast irons used for automotive brake discs. *Journal of materials science*, 34(19):4775–4781, 1999.
- [58] J. Helsing und G. Grimvall. Thermal conductivity of cast iron: Models and analysis of experiments. *Journal of applied physics*, 70(3):1198–1206, 1991.
- [59] T. W. Heo und L.-Q. Chen. Phase-field modeling of displacive phase transformations in elastically anisotropic and inhomogeneous polycrystals. *Acta Materialia*, 76:68–81, 2014.
- [60] K. Herfurth. Gusseisen – kleine Werkstoffkunde eines viel genutzten Eisenwerkstoffs. *Konstruieren und Gießen*, 32(1):2, 2007.
- [61] C. Herrmann, E. Schoof, D. Schneider, F. Schwab, A. Reiter, M. Selzer, und B. Nestler. Multiphase-field model of small strain elasto-plasticity according to the mechanical jump conditions. *Computational Mechanics*, 62(6):1399–1412, 2018.
- [62] R. Hill. Elastic properties of reinforced solids: Some theoretical principles. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 11(5):357–372, 1963.
- [63] R. Hill. On constitutive macro-variables for heterogeneous solids at finite strain. *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences*, 326(1565):131–147, 1972.
- [64] H. E. Hjelm. Yield surface for grey cast iron under biaxial stress. *Journal of Engineering Materials and Technology*, 116(2):148–154, 1994.
- [65] D. Holmgren. Review of thermal conductivity of cast iron. *International Journal of Cast Metals Research*, 18(6):331–345, 2005.
- [66] D. Holmgren, R. Källbom, und I. L. Svensson. Influences of the graphite growth direction on the thermal conductivity of cast iron. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 38(2):268–275, 2007.
- [67] D. M. Holmgren, A. Diószegi, und I. L. Svensson. Effects of transition from lamellar to compacted graphite on thermal conductivity of cast iron. *International Journal of Cast Metals Research*, 19(6):303–313, 2006.
- [68] S. Y. Hu und L.-Q. Chen. A phase-field model for evolving microstructures with strong elastic inhomogeneity. *Acta materialia*, 49(11):1879–1890, 2001.
- [69] J. M. Hyzak und I. M. Bernstein. The role of microstructure on the strength and toughness of fully pearlitic steels. *Metallurgical Transactions A*, 7(8):1217–1224, 1976.
- [70] B. T. Kelly. *Physics of graphite*. Applied Science Publishers Ltd, London, England, 1981. ISBN 978-0-85334-960-0.
- [71] A. G. Khachaturyan. Theory of structural transformation in solids. *Acta Crystallographica Section A: Foundations of Crystallography*, 1983.
- [72] M. Klinsmann, D. Rosato, M. Kamlah, und R. M. McMeeking. An assessment of the phase field formulation for crack growth. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 294:313–330, 2015.

- [73] V. Kodur, M. Dwaiikat, und R. Fike. High-temperature properties of steel for fire resistance modeling of structures. *Journal of Materials in Civil Engineering*, 22(5):423–434, 2010.
- [74] C. Kuhn und R. Müller. A continuum phase field model for fracture. *Engineering Fracture Mechanics*, 77(18):3625–3634, 2010.
- [75] C. Kuhn, T. Noll, und R. Müller. On phase field modeling of ductile fracture. *GAMM-Mitteilungen*, 39(1):35–54, 2016.
- [76] M. Lampic und M. Walz. Gusseisen mit Vermiculargrafit. Teil 1: Definition, Geschichte, Herstellung, GJV als grüner Werkstoff. https://www.kug.bdguss.de/fileadmin/content/themen/Gusseisen_mit_Vermiculargrafit_T1._1/G-01-14-S214-227-PDF.pdf. letztes Abrufdatum 16.02.2021.
- [77] M. Lampic und M. Walz. Gusseisen mit Vermiculargrafit. https://www.kug.bdguss.de/fileadmin/content/themen/Gusseisen_mit_Vermiculargrafit_Teil_3/G-03-14-S60-71-PDF.pdf. letztes Abrufdatum 16.02.2021.
- [78] G. Langford. Deformation of pearlite. *Metallurgical Transactions A*, 8(6):861–875, 1977.
- [79] J. Lemaitre. A continuous damage mechanics model for ductile fracture. *Journal of engineering materials and technology*, 107(1):83–89, 1985.
- [80] F. Leonard und R. Desai. Spinodal decomposition and dislocation lines in thin films and bulk materials. *Physical Review B*, 58(13):8277, 1998.
- [81] B. Li und C. Maurini. Crack kinking in a variational phase-field model of brittle fracture with strongly anisotropic surface energy. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 125:502–522, 2019.
- [82] N. Limodin, L. Salvo, E. Boller, M. Suéry, M. Felberbaum, S. Gaillière, und K. Madi. In situ and real-time 3-D microtomography investigation of dendritic solidification in an Al–10 wt.% Cu alloy. *Acta Materialia*, 57(7):2300–2310, 2009.
- [83] E. Macherauch und H.-W. Zoch. Gusseisen unter Zug- und Druckbeanspruchung. In: *Praktikum in Werkstoffkunde: 91 ausführliche Versuche aus wichtigen Gebieten der Werkstofftechnik*. Vieweg+Teubner, Wiesbaden, 2011.
- [84] M. Mamivand, M. A. Zaeem, und H. El Kadiri. A review on phase field modeling of martensitic phase transformation. *Computational Materials Science*, 77:304–311, 2013.
- [85] H. A. Mang und G. Hofstetter. *Festigkeitslehre*. Springer Vieweg, Wiesbaden, Deutschland, 2013. ISBN 978-3-662-57564-2.
- [86] Mercedes-Benz. DBL 4407 - Liefervorschrift Bremsscheiben aus Grauguss, 2005.
- [87] M. Metzger und T. Seifert. Computational assessment of the microstructure-dependent plasticity of lamellar gray cast iron - Part I: Methods and microstructure-based models. *International Journal of Solids and Structures*, 66:184–193, 2015.

-
- [88] C. Miehe, F. Welschinger, und M. Hofacker. Thermodynamically consistent phase-field models of fracture: Variational principles and multi-field FE implementations. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 83(10):1273–1311, 2010.
- [89] C. Miehe, M. Hofacker, L.-M. Schänzel, und F. Aldakheel. Phase field modeling of fracture in multi-physics problems. Part II. Coupled brittle-to-ductile failure criteria and crack propagation in thermo-elastic–plastic solids. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 294:486–522, 2015.
- [90] C. Miehe, F. Aldakheel, und A. Raina. Phase field modeling of ductile fracture at finite strains: A variational gradient-extended plasticity-damage theory. *International Journal of Plasticity*, 84:1–32, 2016.
- [91] C. Miehe, D. Kienle, F. Aldakheel, und S. Teichtmeister. Phase field modeling of fracture in porous plasticity: A variational gradient-extended eulerian framework for the macroscopic analysis of ductile failure. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 312:3–50, 2016.
- [92] N. Moelans. A quantitative and thermodynamically consistent phase-field interpolation function for multi-phase systems. *Acta Materialia*, 59(3):1077–1086, 2011.
- [93] N. Moelans, B. Blanpain, und P. Wollants. An introduction to phase-field modeling of microstructure evolution. *Calphad*, 32(2):268–294, 2008.
- [94] N. Moelans, B. Blanpain, und P. Wollants. Quantitative analysis of grain boundary properties in a generalized phase field model for grain growth in anisotropic systems. *Physical Review B*, 78(2):024113, 2008.
- [95] B. Nestler, H. Garcke, und B. Stinner. Multicomponent alloy solidification: Phase-field modeling and simulations. *Physical Review E*, 71(4):041609, 2005.
- [96] T.-T. Nguyen, J. Réthoré, J. Yvonnet, und M.-C. Baietto. Multi-phase-field modeling of anisotropic crack propagation for polycrystalline materials. *Computational Mechanics*, 60(2):289–314, 2017.
- [97] T. Noguchi und K. Shimizu. Accurate evaluation of the mechanical properties of grey cast iron. *Cast Metals*, 6(3):146–152, 1993.
- [98] V. Norman und M. Calmunger. On the micro-and macroscopic elastoplastic deformation behaviour of cast iron when subjected to cyclic loading. *International Journal of Plasticity*, 115:200–215, 2019.
- [99] Committee on Fire Protection. Structural fire protection. Technical report, Reston, Virginia, Vereinigte Staaten, 1992.
- [100] M. Ortiz und A. Pandolfi. Finite-deformation irreversible cohesive elements for three-dimensional crack-propagation analysis. *International journal for numerical methods in engineering*, 44(9):1267–1282, 1999.
- [101] R. Ostwald, T. Bartel, und A. Menzel. A one-dimensional computational model for the interaction of phase-transformations and plasticity. *The International Journal of Structural Changes in Solids*, 3(1):63–82, 2011.

- [102] T. A. Pascal, N. Karasawa, and W. A. Goddard III. Quantum mechanics based force field for carbon (qmff-cx) validated to reproduce the mechanical and thermodynamics properties of graphite. *The Journal of chemical physics*, 133(13):134114, 2010.
- [103] X. Peng, J. Fan, and J. Zeng. Microstructure-based description for the mechanical behavior of single pearlitic colony. *International Journal of Solids and Structures*, 39(2):435–448, 2002.
- [104] K. Pham und J.-J. Marigo. Approche variationnelle de l’endommagement: II. Les modèles à gradient. *Comptes Rendus Mécanique*, 338(4):199–206, 2010.
- [105] K. H. Pham, K. Ravi-Chandar, und C. M. Landis. Experimental validation of a phase-field model for fracture. *International Journal of Fracture*, 205(1):83–101, 2017.
- [106] I. M. Pickup, B. McEnaney, und R. G. Cooke. Fracture processes in graphite and the effects of oxidation. *Carbon*, 24(5):535–543, 1986.
- [107] J. C. Pina, V. G. Kouznetsova, und M. G. D. Geers. Thermo-mechanical analyses of heterogeneous materials with a strongly anisotropic phase: The case of cast iron. *International Journal of Solids and Structures*, 63:153–166, 2015.
- [108] J. C. Pina, S. Shafqat, V. G. Kouznetsova, J. P. M. Hoefnagels, und M. G. D. Geers. Microstructural study of the mechanical response of compacted graphite iron: An experimental and numerical approach. *Materials Science and Engineering: A*, 658:439–449, 2016.
- [109] N. Prajapati, C. Herrmann, M. Späth, D. Schneider, M. Selzer, und B. Nestler. Brittle anisotropic fracture propagation in quartz sandstone: Insights from phase-field simulations. *Computational Geosciences*, Seiten 1–16, 2020.
- [110] J. R. Rice. A path independent integral and the approximate analysis of strain concentration by notches and cracks. *Journal of applied mechanics*, 35(2):379–386, 1968.
- [111] J. R. Rice. Mechanics of quasi-static crack growth. Technical report, Brown University, Providence, RI (USA). Division of Engineering, 1978.
- [112] D. Rodney, Y. Le Bouar, und A. Finel. Phase field methods and dislocations. *Acta materialia*, 51(1):17–30, 2003.
- [113] K. B. Rundman und F. Iacoviello. *Cast irons*, Seiten 1003–1010. Elsevier, Oxford, England, 2001. ISBN 978-0-080-43152-9.
- [114] I. Scheider und W. Brocks. Simulation of cup-cone fracture using the cohesive model. *Engineering Fracture Mechanics*, 70(14):1943–1961, 2003.
- [115] S. Schmid. *Mesoskopischer Ansatz zur Festigkeitsberechnung von Brems scheiben*. Dissertation, Karlsruher Institut für Technologie (KIT). doi: 10.5445/IR/1000062541, 2016.
- [116] S. Schmid, D. Schneider, C. Herrmann, M. Selzer, und B. Nestler. A multiscale approach for thermo-mechanical simulations of loading courses in cast iron brake discs. *International Journal for Multiscale Computational Engineering*, 14(1), 2016.

- [117] R. Schmitt, R. Müller, R. Skorupski, M. Smaga, und D. Eifer. A phase field approach for martensitic transformations in elastoplastic materials. *PAMM*, 13(1):213–214, 2013.
- [118] R. Schmitt, C. Kuhn, R. Müller, und K. Bhattacharya. Crystal plasticity and martensitic transformations – a phase field approach. *Technische Mechanik*, 34(1):23–38, 2014.
- [119] R. Schmitt, C. Kuhn, und R. Müller. On a phase field approach for martensitic transformations in a crystal plastic material at a loaded surface. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, 29(4):957–968, 2017.
- [120] D. Schneider. *Phasenfeldmodellierung mechanisch getriebener Grenzflächenbewegungen in mehrphasigen Systemen*. Dissertation, Karlsruher Institut für Technologie (KIT). doi: 10.5445/IR/1000066948, 2016.
- [121] D. Schneider, S. Schmid, M. Selzer, T. Böhlke, und B. Nestler. Small strain elastoplastic multiphase-field model. *Computational Mechanics*, 55(1):27–35, 2015.
- [122] D. Schneider, O. Tschukin, A. Choudhury, M. Selzer, T. Böhlke, und B. Nestler. Phase-field elasticity model based on mechanical jump conditions. *Computational Mechanics*, 55(5):887–901, 2015.
- [123] D. Schneider, E. Schoof, Y. Huang, M. Selzer, und B. Nestler. Phase-field modeling of crack propagation in multiphase systems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 312:186–195, 2016.
- [124] D. Schneider, F. Schwab, E. Schoof, A. Reiter, C. Herrmann, M. Selzer, T. Böhlke, und B. Nestler. On the stress calculation within phase-field approaches: A model for finite deformations. *Computational Mechanics*, 60(2):203–217, 2017.
- [125] D. Schneider, E. Schoof, O. Tschukin, A. Reiter, C. Herrmann, F. Schwab, M. Selzer, und B. Nestler. Small strain multiphase-field model accounting for configurational forces and mechanical jump conditions. *Computational Mechanics*, 61(3):277–295, 2018.
- [126] E. Schoof. *Chemomechanische Modellierung der Wärmebehandlung von Stählen mit der Phasenfeldmethode*. Dissertation, Karlsruher Institut für Technologie (KIT). doi: 10.5445/IR/1000117917, 2020.
- [127] T. Seifert und H. Riedel. Mechanism-based thermomechanical fatigue life prediction of cast iron. Part I: Models. *International Journal of Fatigue*, 32(8):1358–1367, 2010.
- [128] M. P. Shebatinov. A study of the fine structure of graphite inclusions in gray cast irons by means of the scanning electron microscope. *Metal Science and Heat Treatment*, 16(4):288–293, 1974.
- [129] M. Silhavy. *The mechanics and thermodynamics of continuous media*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, Heidelberg, Deutschland, 1997. ISBN 978-3-662-03389-0.
- [130] J. C. Simo und T. J. R. Hughes. *Computational inelasticity*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, Heidelberg, Deutschland, 2013. ISBN 978-1-4757-7169-5.

- [131] T. Sjögren. *Influences of the Graphite Phase on Elastic and Plastic Deformation Behaviour of Cast Irons*. Dissertation, Institutionen för ekonomisk och industriell utveckling. ISBN 978-91-85715-52-7, 2007.
- [132] M. Späth, C. Herrmann, N. Prajapati, D. Schneider, F. Schwab, M. Selzer, und B. Nestler. Multiphase-field modelling of crack propagation in geological materials and porous media with drucker-prager plasticity. *Computational Geosciences*, Seiten 1–19, 2020.
- [133] I. Steinbach und F. Pezzolla. A generalized field method for multiphase transformations using interface fields. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 134(4):385–393, 1999.
- [134] E. Tanné, T. Li, B. Bourdin, J.-J. Marigo, und C. Maurini. Crack nucleation in variational phase-field models of brittle fracture. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 110:80–99, 2018.
- [135] S. Teichtmeister, D. Kienle, F. Aldakheel, und M. A. Keip. Phase field modeling of fracture in anisotropic brittle solids. *International Journal of Non-Linear Mechanics*, 97:1–21, 2017.
- [136] A. Trädegaard, F. Nilsson, und S. Östlund. FEM-remeshing technique applied to crack growth problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 160(1-2):115–131, 1998.
- [137] V. Tvergaard und A. Needleman. Analysis of the cup-cone fracture in a round tensile bar. *Acta metallurgica*, 32(1):157–169, 1984.
- [138] R. L. J. M. Ubachs, P. J. G. Schreurs, und M. G. D. Geers. A nonlocal diffuse interface model for microstructure evolution of tin-lead solder. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 52(8):1763–1792, 2004.
- [139] T. Uehara, T. Tsujino, und N. Ohno. Elasto-plastic simulation of stress evolution during grain growth using a phase field model. *Journal of Crystal Growth*, 300(2):530–537, 2007.
- [140] S. Umino. On the specific heat of carbon steels. *Sei. Repts. Tōhōku Imp. Univ., ser*, 1:331, 1926.
- [141] A. Velichko, C. Holzapfel, und F. Mücklich. 3D characterization of graphite morphologies in cast iron. *Advanced Engineering Materials*, 9(1-2):39–45, 2007.
- [142] A. Velichko, A. Wiegmann, und F. Mücklich. Estimation of the effective conductivities of complex cast iron microstructures using FIB-tomographic analysis. *Acta Materialia*, 57(17):5023–5035, 2009.
- [143] Y. U. Wang, Y. M. Jin, A. M. Cuitino, und A. G. Khachaturyan. Nanoscale phase field microelasticity theory of dislocations: Model and 3D simulations. *Acta Materialia*, 49(10):1847–1857, 2001.
- [144] J. W. Wiese und J. A. Dantzig. Modeling stress development during the solidification of gray iron castings. *Metallurgical Transactions A*, 21(1):489–497, 1990.

-
- [145] K. Willner. *Kontinuums- und Kontaktmechanik: Synthetische und analytische Darstellung*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, Heidelberg, Deutschland, 2003. ISBN 978-3-642628252.
- [146] J.-Y. Wu und V. P. Nguyen. A length scale insensitive phase-field damage model for brittle fracture. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 119:20–42, 2018.
- [147] G. Xu, C. Wang, J. I. Beltrán, J. LLorca, und Y. Cui. Landau modeling of dynamical nucleation of martensite at grain boundaries under local stress. *Computational Materials Science*, 118:103–111, 2016.
- [148] A. Yamanaka, T. Takaki, und Y. Tomita. Elastoplastic phase-field simulation of self- and plastic accommodations in cubic - tetragonal martensitic transformation. *Materials Science and Engineering: A*, 491(1-2):378–384, 2008.
- [149] A. Yamanaka, T. Takaki, Y. Tomita, und M. Yoshino. Crystal plasticity phase-field simulation of deformation behavior and microstructure evolution in polycrystalline material. In: *Proceedings of X International Conference on Computational Plasticity. COMPLAS X, Barcelona, Spain*, Seiten 1–4, 2009.
- [150] A. Yamanaka, T. Takaki, und Y. Tomita. Elastoplastic phase-field simulation of martensitic transformation with plastic deformation in polycrystal. *International journal of mechanical sciences*, 52(2):245–250, 2010.
- [151] H. K. Yeddu, A. Borgenstam, P. Hedstrom, und J. Agren. A phase-field study of the physical concepts of martensitic transformations in steels. *Materials Science and Engineering: A*, 538:173–181, 2012.
- [152] H. K. Yeddu, T. Lookman, und A. Saxena. Strain-induced martensitic transformation in stainless steels: A three-dimensional phase-field study. *Acta materialia*, 61(18):6972–6982, 2013.
- [153] X. Zhang, C. Vignes, S. W. Sloan, und D. Sheng. Numerical evaluation of the phase-field model for brittle fracture with emphasis on the length scale. *Computational Mechanics*, 59(5):737–752, 2017.
- [154] X. Zhang, Y. Yi, H. Zhu, G. Liu, L. Sun, L. Shi, H. Jiang, und S. Ma. Measurement of tensile strength of nuclear graphite based on ring compression test. *Journal of Nuclear Materials*, 511:134–140, 2018.
- [155] N. Zhou, C. Shen, M. J. Mills, und Y. Wang. Phase field modeling of channel dislocation activity and gamma prime rafting in single crystal Ni-Al. *Acta Materialia*, 55(16):5369–5381, 2007.

Eigene Veröffentlichungen

Journalartikel

- [1] C. Herrmann, E. Schoof, D. Schneider, F. Schwab, A. Reiter, M. Selzer, und B. Nestler. Multiphase-field model of small strain elasto-plasticity according to the mechanical jump conditions. *Computational Mechanics*, 62(6):1399–1412, 2018.
- [2] N. Prajapati, C. Herrmann, M. Späth, Daniel S., M. Selzer, und B. Nestler. Brittle anisotropic fracture propagation in quartz sandstone: insights from phase-field simulations. *Computational Geosciences*, Seiten 1–16, 2020.
- [3] S. Schmid, D. Schneider, C. Herrmann, M. Selzer, und B. Nestler. A multiscale approach for thermo-mechanical simulations of loading courses in cast iron brake discs. *International Journal for Multiscale Computational Engineering*, 14(1), 2016.
- [4] D. Schneider, F. Schwab, E. Schoof, A. Reiter, C. Herrmann, M. Selzer, T. Böhlke, und B. Nestler. On the stress calculation within phase-field approaches: a model for finite deformations. *Computational Mechanics*, 60(2):203–217, 2017.
- [5] D. Schneider, E. Schoof, O. Tschukin, A. Reiter, C. Herrmann, F. Schwab, M. Selzer, und B. Nestler. Correction to: Small strain multiphase-field model accounting for configurational forces and mechanical jump conditions. *Computational Mechanics*, 61(3):297–297, 2018.
- [6] D. Schneider, E. Schoof, O. Tschukin, A. Reiter, C. Herrmann, F. Schwab, M. Selzer, und B. Nestler. Small strain multiphase-field model accounting for configurational forces and mechanical jump conditions. *Computational Mechanics*, 61(3):277–295, 2018.
- [7] E. Schoof, C. Herrmann, D. Schneider, J. Hötzer, und B. Nestler. Multiphase-field modeling and simulation of martensitic phase transformation in heterogeneous materials. In *High Performance Computing in Science and Engineering'18*, Seiten 475–488. 2019.
- [8] E. Schoof, C. Herrmann, N. Streichhan, M. Selzer, D. Schneider, und B. Nestler. On the multiphase-field modeling of martensitic phase transformation in dual-phase steel using j 2-viscoplasticity. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 27(2):025010, 2019.
- [9] F. Schwab, A. Reiter, C. Herrmann, D. Schneider, und B. Nestler. Phase-inherent linear visco-elasticity model for infinitesimal deformations in the multiphase-field context. *Advanced Modeling and Simulation in Engineering Sciences*, 7(1):1–32, 2020.
- [10] M. Späth, C. Herrmann, N. Prajapati, D. Schneider, F. Schwab, M. Selzer, und B. Nestler. Multiphase-field modelling of crack propagation in geological materials

and porous media with drucker-prager plasticity. *Computational Geosciences*,
Seiten 1–19, 2020.